

Unsicherheitsbetrachtungen und Fehlerfortpflanzung in quantitativen Risikoanalysen

Habilitationsschrift

von Dr. rer. nat. Ronald Zinke

geb. am 09.01.1977 in Staßfurt

zur Verleihung des akademischen Grades

Doctor rerum naturalium habitatus (Dr. rer. nat. habil.)

genehmigt von der Fakultät Verfahrens- und Systemtechnik

der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg am 05.07.2022
(Datum des Fakultätsratsbeschlusses)

Gutachterinnen/Gutachter:

Prof. Dr. Ulrich Krause
Prof. Dr. Stefan Bracke
Prof. Dr. Bernd Leitl

Kurzfassung

Eine zentrale Größe dieser Habilitation ist das Risiko, welches jedoch eingegrenzt wird auf den Kontext der Prozess- und Anlagensicherheit. Risiken sind hierbei bewertete Zustände oder auch bewertete Ereignisse wie Betriebsstörungen, Systemausfälle bis hin zu Unfällen mit Personenschaden oder Katastrophen, bevor diese eingetreten sind. Die Ermittlung von Risiken innerhalb der Prozess- und Anlagensicherheit erfordert geeignete Verfahren der Risikoanalyse. Zur Motivation soll zunächst angegeben werden, dass es in Deutschland bei der Durchführung von überwiegend qualitativen Risikoanalysen ungenutztes Potential gibt, welches durch eine stärkere Verwendung von quantitativen Risikoanalysen nutzbar gemacht werden könnte.

In quantitativen Risikoanalysen wird versucht, das (maximal) verfügbare Wissen mit Bezug zu den genannten Ereignissen zu verwenden, in dem kausale Abhängigkeiten untersucht und kalkulierbar gemacht werden.

Ein Hauptgrund für das Verharren auf dem Niveau qualitativer Risikoanalysen ist nicht mangelnder Wille von Seiten potentieller Nutzer, sondern die Tatsache, dass quantitative Risikoanalysen deutlich aufwändiger sind und es zunächst nötig ist, das Potential möglicher Verbesserung der Aussagequalität mit dem Mehraufwand abzuwiegen. Dieser Mehraufwand liegt auf zwei Ebenen, der Datenebene und der Verfahrensebene.

Soll vermieden werden, dass errechnete Zahlenwerte für Risiken eine höhere Genauigkeit gegenüber qualitativen Analysen nur vortäuschen, so sind hochwertige und vollständige Eingangsdaten nötig. Für häufig verwendete Einzelkomponenten bestimmter Industriezweige gibt es Datenbanken, welche jedoch längst nicht die enorme Vielfalt möglicher Systemkombinationen und Versagensmöglichkeiten abdecken. Die Unvollständigkeit in den Datenbanken kann durch Einbezug von Expertenwissen reduziert werden. Eine Sonderstellung nehmen Daten aus der Verarbeitung von Expertenwissen dennoch ein, weil diese erfahrungsabhängig und subjektiv sind. Mit dem Verlust an Hochwertigkeit oder an Vollständigkeit wächst zudem die Unkenntnis und der Vertrauensbereich der Daten. Deswegen ist es in quantitativen Risikoanalysen erforderlich, diese Unsicherheiten auf der Datenebene mitzuquantifizieren und in dem Bewertungsprozess zu berücksichtigen.

Auf Verfahrensebene ist festzuhalten, dass Risikoanalysen intrinsisch ein Verfahren darstellen, aber darüber hinaus selbst oftmals zahlreiche Verfahren in Untermodellen benötigen. Hier können Ausbreitungsanalysen zu Störfallfreisetzungen oder Branduntersuchungen aufgelistet werden, welche ihrerseits von unsicherheitsbehafteten Variablen abhängig sind. Solche Untermodelle sind mitunter sehr aufwändig. Die zuvor genannten Beispiele werden nach dem Stand der Wissenschaft mit Realversuchen oder mit CFD-Simulationen untersucht. Hinzu kommen Verfahrens- und methodische Limitierungen, Limitierungen in den Modellen aus der Abstraktion natürlicher Prozesse, Modellgrenzen aus der mathematischen Modellierung bis hin zum Informationsmangel, welche nicht ignoriert werden dürfen.

Datenunsicherheiten bestehen daher in jeder Verfahrensstufe: vom Eingang über den Prozess bis zum Ausgang. In dieser Habilitation soll auf aktuellem Stand der Forschung zusammengetragen werden, wie alle zuvor genannten Arten von Unsicherheiten optimal einbezogen und verarbeitet werden könnten. Es kann lohnenswert sein, den Stand der Technik in Deutschland etwas weiter in Richtung der Verwendung von quantitativen Risikoanalysen zu heben. Die aufgeführten Methoden werden hierzu an einem von der Industrie herangetragenen Problem, der Abschätzung explosionsgefährdeter Bereiche an Schwimmdachtanks, angewendet.

Abstract

A central quantity of this habilitation is the risk, which is limited to the context of process and plant safety here. Risks are assessed conditions or events such as operational disruptions, system failures and even accidents with personal injury or catastrophes before they have occurred. The determination of risks within process and plant safety requires suitable risk analysis methods. As a motivation it should first be stated that in Germany there is unused potential when carrying out predominantly qualitative risk analyzes. With the use of quantitative risk assessments this potential could be harnessed.

In quantitative risk assessments, an attempt is made to use the available knowledge with reference to the events mentioned by examining causal dependencies in detail and making them calculable. A main reason for remaining on the level of qualitative assessments is not a lack of will on the part of potential users but the fact that quantitative assessments are significantly more complex. It is first necessary to estimate possible improvements in the quality of the information to weigh the extra effort. This additional effort is on two levels, the data level and the procedural level.

It has to be avoided that calculated numerical values for risks only simulate a higher accuracy compared to qualitative investigations. High-quality and complete input data are required. Although there are databases for frequently used individual components of certain branches of industry, they are far from covering the enormous variety of possible system combinations and failure possibilities. The incompleteness in the databases can be reduced by including expert knowledge. However, data from the processing of expert knowledge need additional care because they are experience-dependent and subjective. With the loss of quality or completeness, the lack of knowledge and the confidence level of the data also increase. It is therefore necessary in quantitative risk assessments to quantify these uncertainties at the data level and to take them into account in the evaluation process.

At the procedural level, it should be noted that risk assessments are procedures itself, but also often require numerous procedures in sub-models. Dispersion analyzes for accidental releases or fire investigations can be listed here, which in turn depend on uncertain variables. Such sub-models are sometimes very complex. The examples above are usually examined with real scale tests or with CFD simulations. In addition, there are procedural and methodological limitations, limitations in the models from the abstraction of natural processes, model limits from mathematical modeling up to a lack of information, which must not be ignored.

Data uncertainties therefore exist at every stage of the process: from input through the process up to the output. In this habilitation, the current state of research is used, such that all of the aforementioned types of uncertainties can be optimally included and processed. It can be worthwhile to take the state of the art in Germany a little further in the direction of the use of quantitative risk assessments. The demonstrated methods are applied to a problem recently brought up by industry: the assessment of potentially explosive areas on external floating roof tanks.

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis	iv
Symbolverzeichnis	vi
1. Einordnung, Ziele und Gliederung der Habilitationsschrift	1
1.1. Einordnung der Habilitationsschrift	1
1.1.1. Stand der Technik bei Risikoanalysen	2
1.1.2. Stand der Technik bei Risikodatenbanken und Expertensystemen	4
1.1.3. Stand der Technik bei störfallbedingten Freisetzungen	5
1.1.4. Beschreibung eines industrierelevanten Anwendungsbeispiels	6
1.2. Ziele der Habilitationsschrift	8
1.3. Gliederung der Habilitationsschrift	9
2. Risiko und Risikoanalysen	11
2.1. Gefährdungen, Risiken und Gefahren	11
2.1.1. Risiko und Grenzkrisiko	12
2.1.2. Besondere Risiken	14
2.1.3. Skalenniveau von Risiken	14
2.1.4. Illustrationen von Risiken	15
2.1.5. Beispiele für Gefährdungen in der Anlagensicherheit	17
2.2. Risikoanalysen	19
2.2.1. Erläuterungen zum Ablauf einer Risikoanalyse	20
2.2.2. Übersicht über häufig verwendete Verfahren der Risikoanalyse	21
2.3. Kurzbeschreibung ausgewählter Verfahren der Risikoanalyse	22
2.3.1. PAAG (HAZOP)	23
2.3.2. Layer of Protection Analysis (LOPA)	24
2.3.3. Failure Mode Effects Criticality Analysis (FMECA)	25
2.3.4. Ereignisbaumanalyse (ETA)	25
2.3.5. Fehlerbaumanalyse (FTA)	26
2.3.6. Bayessche Netze (BN)	26
2.4. Zusammenfassung und Diskussion der Vorteile quantitativer Risikoanalysen	26
3. Bayessche Netze und deren Anwendung als Verfahren der Risikoanalyse	29
3.1. Kurzer Überblick zur Herkunft Bayesscher Netze	29
3.2. Kurzübersicht zur Anwendung Bayesscher Netze	30
3.3. Verfahrensgrundlagen und analytische Anwendung	31
3.3.1. Mathematische Grundlagen	31
3.3.2. Absolute und relative Häufigkeit	33
3.3.3. Analytische Verfahrensdurchführung	35
3.3.4. Initialisierung Bayesscher Netze	37
3.3.5. Propagieren von Wahrscheinlichkeiten in Bayesschen Netzen	41
3.3.6. Analytische Beispielrechnungen	43
3.4. Unsicherheitsbetrachtungen in Bayesschen Netzen: Fuzzy Bayessche Netze	51
3.4.1. Allgemeine Bemerkungen	51
3.4.2. Fuzzy-Logik und Zugehörigkeitsfunktionen	52
3.4.3. Verwendung von Fuzzy-Intervallen zur Abbildung linguistischer Variablen	61

3.5.	Software zur Anwendung Bayesscher Netze	64
3.6.	Vergleich von Bayesschen Netzen mit Ereignis- und Fehlerbäumen	64
3.6.1.	Fehlerbaumanalyse	64
3.6.2.	Ereignisbaumanalyse	67
3.6.3.	Vergleich mit Bayesschen Netzen	68
3.7.	Kurzbeschreibung von Anwendungsbeispielen	71
3.7.1.	Kühlsystemversagen einer Offshore-Konverterplattform	71
3.7.2.	Kürzere Hilfsfristen: Smartphonebasierte Ersthelferalarmierung	71
3.7.3.	Gefährliche explosionsfähige Atmosphären an Schwimmdachtanks	72
4.	Modellierung von Unsicherheiten, Response-Surface-Methoden (RSM)	73
4.1.	Herkunft und Klassifikation von Unsicherheiten in Ingenieurmethoden	74
4.1.1.	Unsicherheiten und Fehler aus der Modellbildung	74
4.1.2.	Unsicherheiten und Fehler in den Modelleingangsdaten	75
4.1.3.	Klassifikation von Unsicherheiten und Fehlern	76
4.1.4.	Notwendigkeit für Unsicherheitsbetrachtungen in CFD-Simulationen	77
4.2.	Unsicherheitsbetrachtungen in CFD-Simulationen	80
4.2.1.	Monte-Carlo-Sampling, Monte-Carlo-Verfahren	82
4.2.2.	Latin-Hypercube-Sampling, Varianzreduktion	83
4.2.3.	Response-Surface-Monte-Carlo	85
4.3.	Response-Surface-Methoden (RSM)	85
4.3.1.	Allgemeiner Überblick über RSM	85
4.3.2.	Mathematische Bestimmung von Response-Surfaces	89
4.3.3.	Praktische Umsetzung der RSM	102
5.	Beispiele für Ausbreitungsanalysen mit Response-Surface-Methoden	105
5.1.	Schwergasausbreitungen	105
5.1.1.	Schwergasausbreitung nach Britter-McQuaid	105
5.1.2.	CFD-Simulation einer Schwergasausbreitung im Baugebiet XIX nach VDI 3783	110
5.2.	Leichtgasausbreitungen	113
5.2.1.	Gaußsche Schadstoffausbreitung	113
5.2.2.	CFD-Simulation von VOC-Emissionen aus Schwimmdachtanks	118
5.3.	Abschließende Bemerkungen	124
6.	Anwendungsbeispiel: Explosionsgefährdete Bereiche an Schwimmdachtanks	127
6.1.	Kurzüberblick über wesentliche Projektziele, Bestandteile und Teilergebnisse	127
6.1.1.	Ausgangsproblemstellung	127
6.1.2.	Langzeitmessungen an einem Schwimmdachtank für Ottokraftstoffe	129
6.1.3.	Datenerhebung zu Tankschäden mit Einfluss auf das Emissionsverhalten	131
6.1.4.	Durchführung von Emissionsabschätzungen	134
6.1.5.	Messungen im Windkanal und Ausbreitungssimulationen	134
6.1.6.	Quantitative Risikoanalyse	137
6.2.	Emissionsabschätzungen im bestimmungsgemäßen Betrieb und im Schadensfall	137
6.2.1.	Emissionsabschätzungen für den Normalbetrieb	137
6.2.2.	Emissionsabschätzungen zu Überziehdichtungen und Tertiärdichtungen	141
6.2.3.	Emissionsabschätzungen für Tankrevisionen	147
6.2.4.	Standverluste bei offener Atmungsarmatur	148
6.2.5.	Emissionsabschätzungen ausgewählter Schadensfälle	149
6.2.6.	Experimente zur Lachenverdunstung	154
6.2.7.	Partieller oder vollständiger Dachuntergang	155
6.2.8.	Tanküberfüllung oder Leckagen mit Lachenbildung im Auffangraum	155

Inhaltsverzeichnis

6.2.9. Gesamtübersicht über Szenarien und Emissionsmassenströme	156
6.3. Ausbreitungsuntersuchungen im Windkanal und CFD-Simulationen	156
6.3.1. Visualisierung der Tankumströmung und der Freisetzung im Windkanal	156
6.3.2. Konzentrationsmessungen im Windkanal nach Ethanfreisetzungen . . .	158
6.3.3. CFD-Simulation zu Emissionen im Normalbetrieb	159
6.3.4. CFD-Simulation zu Emissionen bei einer Revision	161
6.3.5. CFD-Simulation zu Emissionen im Schadenfall	163
6.4. Quantitative Risikoanalyse mit Bayesschen Netzen	165
6.4.1. Konstruktion des Bayesschen Netzes für Schwimmdachtanks	166
6.4.2. Zielknoten und Zielhypothesen	166
6.4.3. Einfluss der Lachenbildung auf die Zielknoten	167
6.4.4. Einfluss von Schäden an Ringspaltichtung und von Betriebsparametern	168
6.4.5. Auswertung des Bayesschen Netzes für Schwimmdachtanks	168
7. Zusammenfassung	174
Literaturverzeichnis	176
A. Begründung des Modells von Britter-McQuaid mittels Dimensionsanalyse	192
A.1. Vorbetrachtung: Dimensionsanalyse	192
A.2. Grundgrößen des Modells	193
A.3. Britter-McQuaid-Modell, kontinuierlicher Fall	194
B. Herleitung und Lösung der Advektions-Diffusionsgleichung für das Gaußsche Ausbreitungsmodell	198
B.1. Herleitung und Lösung der Ausbreitungsgleichung	200
B.1.1. Herleitung der Ausbreitungsgleichung	200
B.1.2. Lösung der Ausbreitungsgleichung	202
B.2. Anwendungsgrenzen zum Gauß-Fahnenmodell	208
C. Lachenverdunstungsmodelle nach Sutton-Pasquill, Deutsch und Brighton	210
C.1. Modell von Sutton und Pasquill	210
C.2. Modell von Deutsch	212
C.3. Modell von Brighton (ALOHA)	213

Abkürzungsverzeichnis

AEGL Acute Exposure Guideline Levels 18

AGW Arbeitsplatzgrenzwert 19

ALARP As Low As Reasonably Practicable (so niedrig, wie vernünftigerweise praktikabel) 2

ALOHA Area Location of Hazardous Atmospheres 212

BN Bayessche Netze 2

CFD Computational Fluid Dynamics 6

DNS Direkte Numerische Simulation 124

EPA Enviromental Protection Agency 209

ERPG Emergency Response Planning Guidelines 19

ETA Ereignisbaumanalyse (Event Tree Analysis) 2

FBN Fuzzy Bayesian Networks 5

FMEA Fehlermöglichkeits- und -einflussanalyse (Failure Mode and Effects Analysis) 2

FRAM Functional Resonance Analysis Method 68

FTA Fehlerbaumanalyse (Fault Tree Analysis) 2

GMS gleitschuhmontierte Sekundärdichtung 146

HAZOP Hazard and Operability 2

IAOPG International Association of Oil and Gas Producers 133

IRD Infrarotdetektor 129

LCP Life-Cycle-Performance 3

LDA LASER-Doppler-Anemometer 135

LES Large Eddy Simulation 83

LHS Latin-Hypercube-Sampling 6

LOPA Layer Of Protection Analysis 2

LS Quadratminimierungsmethoden (Least Square) 6

MCMC Markov-Chain-Monte-Carlo-Verfahren 83

MCS Monte-Carlo-Simulationen 6

MGD mechanische Gleitschuhdichtung xii, 142

ORT Odor Recognition Threshold xii, 122

Abkürzungsverzeichnis

- PAAG** Prognose, Auffinden der Ursache, Abschätzen der Auswirkungen, Gegenmaßnahmen 2
- PCE** Polynomielle Chaonentwicklung (Polynomial Chaos Expansion) 6
- PID** Photoionisationsdetektor 129
- PL** Performance Level 4
- PLT** Prozessleittechnik 24
- RA** Risikoanalyse (Risk Analysis) 2
- RANS** Reynolds-Averaged Navier-Stokes 83
- RBI** Risikobasierte Wartung (Risk-Based Inspection) 3
- RMS** randmontierte Sekundärdichtung 146
- RMT** randmontierte Tertiärdichtung 146
- ROGA** Risikoorientierte Gefahrenanalyse 13
- RS** Response Surface 6
- RSM** Response-Surface-Methoden 8
- SDT** Schwimmdachtanks 128
- SIL** Sicherheitsintegritätslevel (Safety Intergity Level) 4
- SIS** Safety Instrumented Systems 4
- SRSM** Stochastische Response-Surface-Modelle 74
- TRGS** Technische Regeln für Gefahrstoffe 6
- UEG** Untere Explosionsgrenze (Lower Explosive Limit, LEL) 106
- VOC** Flüchtige Organische Kohlenwasserstoffe (Volatile Organic Compound) 118
- ZEMA** Zentrale Melde- und Auswertestelle für Störfälle und Störungen in verfahrenstechnischen Anlagen 5

Symbolverzeichnis

Symbol	Einheit, Dimension	Beschreibung	Seite
a_i	–, –	i-ter Koeffizient, Entwicklungskoeffizient	95
a	–, –	Fitparameter, funktionsabhängige Dimension	139
A	m^2, L^2	Fläche	32
A	–, –	Ereignis oder Teilmenge	77
A	m^2, L^2	Freisetzungsfläche	89
A	–, –	symmetrische Matrix	96
A_o	m^2, L^2	Schmierfilmoberfläche, Produktoberfläche	137
b	–, –	Fitparameter	139
B_{obj}	m, L	Objektbreite	119
BEL	–, –	BEL-Werte	38
C	m, L	Schmierfilmdicke, allgemein	137
c	–, –	Fitparameter	139
c	$kg\ m^{-3}, ML^{-3}$	Konzentration	89
C_m	–, 1	Stoffkonzentration, gemessen	158
C_s	–, 1	Stoffkonzentration, simuliert	158
C^*	–, 1	dimensionslose Vergleichskonzentration	158
D	m, L	Tankdurchmesser	138
D	$m^2\ s^{-1}, L^2\ T^{-1}$	Diffusionskonstante	210
d	–, 1	Symbol für Anzahl oder Ordnung	99
F	–, –	Fischer-Verteilung	102
F	h^{-1}, T^{-1}	Häufigkeit (Frequency)	15
g_0	$m\ s^{-2}, L\ T^{-2}$	Auftriebsbeschleunigung	193
H_H	m, L	Hindernishöhe	119
Δh	m, L	Auftriebshöhe	204
h_i	m, L	Höhe der Inversionsschicht	205
h_j	a^{-1}, T^{-1}	Schadenrate	131
H_{obj}	m, L	Objekthöhe	119
h	m, L	effektive Ausbreitungshöhe	204
h_S	m, L	Freisetzungshöhe	204
\vec{j}	$kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1},$ $ML^{-2}T^{-1}$	Diffusionsstromdichte	201
K	var, var	Konsequenz	12
K_c	–, 1	Produktverlustfaktor	138
K_R	$mol\ m^{-1}\ a^{-1}, NL^{-1}T^{-1}$	Dichtungsverlustfaktor	138

Symbolverzeichnis

K_{F_i}	$\text{kmol a}^{-1}, \text{NT}^{-1}$	Dacharmaturverlustfaktor	138
k	–, 1	von-Karman Konstante, $k = 0.4$	213
k	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}, \text{L}^2 \text{T}^{-1}$	turbulenter Diffusionskoeffizient	197
L_{obj}	m, L	Objektlänge	119
L_T	$\text{kg a}^{-1}, \text{MT}^{-1}$	Gesamtverlustmassenstrom	137
L_S	$\text{kg a}^{-1}, \text{MT}^{-1}$	Standverlustmassenstrom	137
L_W	$\text{kg a}^{-1}, \text{MT}^{-1}$	Befahrverlustmassenstrom	137
L_R	$\text{kg a}^{-1}, \text{MT}^{-1}$	Verlustmassenstrom Randabdichtung	138
L_F	$\text{kg a}^{-1}, \text{MT}^{-1}$	Verlustmassenstrom Dacharmatur	138
L_p	$\text{kg a}^{-1}, \text{MT}^{-1}$	Verlustmassenstrom Tankdach	138
L_B	$\text{kg a}^{-1}, \text{MT}^{-1}$	Verlustmassenstrom	149
L_{ref}	m, L	Referenzhöhe für Referenzwindgeschwindigkeit	158
\dot{m}	$\text{kg s}^{-1}, \text{M T}^{-1}$	Verdunstungsmassenstrom, Massenstrom	152
M	$\text{kg mol}^{-1}, \text{MN}^{-1}$	molare Masse	210
M	var, var	Merkmal	15
m	–, 1	Symbol für Anzahl oder Ordnung	83
M	var, var	$n \times m$ -Matrix	96
n	–, 1	Symbol für Anzahl oder Ordnung	82
n	–, 1	stabilitätsklassenabhängiger Windprofilexponent	213
n	–, 1	Anzahl Tankumschläge (je Jahr), Anzahl	138
N_{F_i}	–, 1	Häufigkeit einer Armatur/Komponente	138
N	–, 1	Häufigkeit einer Komponente, Anzahl	131
$n_{i,j}$	–, 1	Anzahl von Objekten (Klasse i, Merkmal j)	131
p_d	Pa, $\text{ML}^{-1}\text{T}^{-2}$	Dampfdruck (Index a: Umgebungsdruck)	210
p^*	–, 1	dimensionslose Dampfdruckfunktion	138
p	–, 1	Wahrscheinlichkeit (ggf. auch P)	77
p	–, 1	Symbol für Anzahl oder Ordnung	86
q_0	$\text{m}^3 \text{s}^{-1}, \text{L}^3 \text{T}^{-1}$	Ausströmrage	192
\dot{q}	$\text{kg s}^{-1}, \text{M T}^{-1}$	Emissionsmassenstrom	121
Q	m^3, L^3	Volumen des Jahrestankumschlages	138
Q_{ref}	$\text{m}^3 \text{s}^{-1}, \text{L}^3 \text{T}^{-1}$	Quellvolumenstrom	158
\bar{q}	$\text{kg m}^{-3}, \text{ML}^{-3}$	Quelldichte	197
Q	$\text{kg s}^{-1}, \text{M T}^{-1}$	Quellterm	89
R	$\text{kg m}^2 \text{s}^{-2} \text{mol}^{-1} \text{K}^{-1}$ $\text{ML}^2 \text{T}^{-2} \text{N}^{-1} \Theta^{-1}$	allgemeine Gaskonstante, Zahlenwert: $R \approx 8.314$	210
R_d	s, T	Freisetzungszeit	193

Symbolverzeichnis

r	var, var	Zufallseinfluss, Residuum	86
R	var, var	Summe der Residuenquadrate	100
R	var var	Risiko	12
Re_0	–, 1	Rauhigkeitsreynoldzahl	213
Re	–, 1	Reynoldzahl	212
S	–, 1	Sättigungsfaktor	149
Sc_T	–, 1	turbulente Schmidtzahl	213
Sh	–, 1	Sherwoodzahl	212
t_i	a, T	Nutzungszeit	131
\bar{u}	m s^{-1} , L T^{-1}	mittlere Windgeschwindigkeit (Jahresmittel)	139
u^*	m s^{-1} , L T^{-1}	Schubspannungsgeschwindigkeit	213
u_{ref}	m s^{-1} , L T^{-1}	Referenzwindgeschwindigkeit auf Referenzhöhe	158
u	m s^{-1} , L T^{-1}	Windgeschwindigkeit	193
\dot{V}	$\text{m}^3 \text{s}^{-1}$, $\text{L}^3 \text{T}^{-1}$	Volumenstrom	149
V_0	m^3 , L^3	Ausströmvolumen, Anfangsvolumen	193
W_L	kg m^{-3} , ML^{-3}	Lagergutdichte	137
W	–, 1	Wichtungsmatrix	98
x	ppm, 1	Sättigungskonzentration	193
x_i	var, var	i-te Variable	81
X_i	var, var	i-te Zufallsgröße	90
y	var, var	Response (allgemein)	80
Y	var, var	Zufallsgröße	90
z_0	m, L	Rauhigkeitslänge, Bodenrauhigkeit	110
α	–, 1	Profilfaktor	154
α	–, 1	Normierungsfaktor	39
α	–, 1	Signifikanzniveau (Hypothesentest)	102
β	m s^{-1} , L T^{-1}	Stoffübergangskoeffizient	152
η	$\text{kg s}^{-1} \text{m}^{-1}$, $\text{ML}^{-1} \text{T}^{-1}$	dynamische Viskosität	153
E	–, –	Ereignis (anderer Großbuchstaben), Erwartungswert	37
Γ	–, –	multivariater Entwicklungskoeffizient	93
γ_e	–, –	Eulerkonstante, $\gamma \approx 0.577$	213
Λ	–, 1	Rauhigkeitslängenverhältnis	213
λ	–, –	λ -Werte	38
λ	h^{-1} , T^{-1}	Ausfallrate	133
ω	–, 1	Wichtungsfaktor	63

Symbolverzeichnis

ω	–, 1	Ergebnis	77
Ω	m^3, L^3	Materielles Volumen	199
Ω	–, 1	Ergebnisraum	77
(Ω, Σ, P)	–, 1	Wahrscheinlichkeitsraum	77
Π	–, 1	Dimensionslose Größe	194
π	–, 1	π -Werte	38
ρ_a	$\text{kg m}^{-3}, \text{ML}^{-3}$	Umgebungsluftdichte	193
ρ_g	$\text{kg m}^{-3}, \text{ML}^{-3}$	Gasedichte	193
$\sigma_y(x)$	m, L	entfernungsabhängiger Dispersionsparameter	206
$\sigma_z(x)$	m, L	entfernungsabhängiger Dispersionsparameter	206
Σ	var, var	Ereignisfeld, Ereignismenge	77

Abbildungsverzeichnis

2.1.	Links: Darstellung einer Risikomatrix gemäß DIN EN 62061 [64] mit bewerteten Matrixfeldern, rechts oben: Darstellung eines FN-Diagrammes, rechts unten: Risikodarstellung mittels Isokonturen um eine fiktive Anlage.	15
2.2.	Illustration zu häufig verwendeten Risikoarten: Restrisiko, tolerables Risiko, Grenfrisiko und Gefahr.	16
2.3.	Illustration von wesentlichen Arbeitsschritten in Risikoanalysen sowie Unterscheidung von qualitativen und quantitativen Verfahren der Risikoanalyse. . . .	20
3.1.	Übersicht zu Bezeichnungen und Strukturen in Bayesschen Netzen (mit Ausnahme der zyklischen Verbindung).	36
3.2.	Darstellung eines vereinfachten Ablaufschemas zur Netzkonstruktion und zur Initialisierung.	40
3.3.	Ablaufschema zur Aktualisierung des Netzes nach Einspeisen einer Beobachtung (Evidenz).	43
3.4.	Illustration des Netzes für die Bestimmung der Wahrscheinlichkeit zur Herausbildung einer gefährlichen explosionsfähigen Atmosphäre an einem Schwimmdachtank und den für weitere Betrachtungen ausgewählten Netzauszuges. . . .	44
3.5.	Illustration der Auswahl des Teilnetzes für die Beispielrechnungen (rechts). Die rot umrandeten Knoten (links) wurden hierfür ebenso ausgelassen. Der mittlere Teil zeigt die Auswahl von Knoten und Kanten in GeNIe.	45
3.6.	Illustration des Netzauszuges nach der Initialisierung. Ebenso wurde ein Eingabefenster für die Spezifikation einer Transfermatrix gezeigt.	48
3.7.	Illustration des Netzauszuges nach Einspeisen einer virtuellen Evidenz (siehe Eingabefenster).	51
3.8.	Darstellung verschiedener Zugehörigkeitsfunktionen.	53
3.9.	Darstellung eines Fehlerbaumes und Symbolerklärungen.	66
3.10.	Darstellung eines kleinen Fehlerbaumes und eines äquivalenten Bayesschen Netzes.	69
4.1.	Überblick über eine Einteilung von Fehlern in aleatorische und epistemische Fehler und Illustration der Fehlerqualität.	76
4.2.	Vergleich der Ausbreitungsmodelle; oben: statistische Abweichungen in der Vorhersagegüte. Im Idealfall sollten die Punkte auf der mittleren Geraden liegen. Die unteren drei Figuren veranschaulichen die Aussagequalität der Modellgruppen: Gaußmodelle (l), Partikeltrajektorienmodelle (m), CFD-Modelle (r).	79
4.3.	Illustration verschiedener Möglichkeiten für die Repräsentation von Unsicherheiten in Modelleingangsdaten in Abhängigkeit der vorliegenden Information [149] (modifizierte Abbildung).	81
4.4.	Illustration der Vorgehensweise vom Latin-Hypercube-Sampling am Beispiel einer Normal-, Gleich- und einer Log-Normalverteilung. Aus den fünf Stichproben jeder Verteilung werden fünf Parametersätze gebildet.	84
4.5.	Illustration von Unteranpassung und Überanpassung bei einem Regressionsproblem. R ist die Summe der Beträge der Residuen.	99
4.6.	Vereinfachtes Ablaufschema zum Programm (C++) zur Polynomenbestimmung und für Folgeuntersuchungen.	104

5.1.	Illustration verschiedener Abhängigkeiten im Britter-McQuaid Ausbreitungsmodell. Oben links: Konzentration in Abhängigkeit der Entfernung zur Quelle, oben rechts: Entfernung bis zur 5%-Konzentration in Abhängigkeit der Windgeschwindigkeit, unten links: Entfernung bis zur 5%-Konzentration in Abhängigkeit des Quellvolumenstromes und unten rechts: Entfernung bis zur 5%-Konzentration in Abhängigkeit der Dichte.	106
5.2.	Darstellung der Entfernungen $x_1 = x_1(q_0, u \rho_g)$ bzw. $x_5 = x_5(q_0, u \rho_g)$ für $\rho_g = 6,63 \text{ kg m}^{-3}$ in Abhängigkeit von u und q_0 . Die Punkte wurden mit dem Originalmodell bestimmt. Die gezeigten Flächen sind graphische Darstellungen der Regressionspolynome.	108
5.3.	Illustration der Anpassung der Polynome (gestrichelte Linien) an das Britter-McQuaid-Modell (durch die Gasdichten gekennzeichnet). Links: für unterschiedliche Gasdichten und Polynome 2. Ordnung, rechts: für $\rho_g = 1,76 \text{ kg m}^{-3}$ und Polynome 2., 3., und 4. Ordnung auf einem eingeschränkten Parameterbereich.	109
5.4.	Darstellung des Ausbreitungsgebietes XIX nach VDI 3783-2 [35] und des für die CFD-Simulation (OpenFOAM) verwendeten Gitters.	111
5.5.	Gegenüberstellung von räumlichen Visualisierungen und Schnittbildern zur Schwer gasausbreitung im Bebauungsgebiet XIX. Links: Response-Surface, rechts: CFD-Simulation (OpenFOAM) für die Werte $u = 4 \text{ m s}^{-1}$ und $z_0 = 0,5 \text{ m}$	112
5.6.	Gegenüberstellung von räumlichen Visualisierungen und Schnittbildern zur Schwer gasausbreitung im Bebauungsgebiet XIX. Links: Response-Surface, rechts: CFD-Simulation (OpenFOAM) für die Werte $u = 4 \text{ m s}^{-1}$ und $z_0 = 0,5 \text{ m}$ in den Höhen $z = 0,2 \text{ m}$, $z = 0,5 \text{ m}$, $z = 1,0 \text{ m}$ und $z = 2,0 \text{ m}$	112
5.7.	Darstellung der Konzentration in Abhängigkeit der Windgeschwindigkeit für eine ausgewählte Gitterzelle (siehe inset Figur). Es werden Polynome 2. (mit lokaler Wichtung) und 3. Ordnung gezeigt. Zu Vergleichszwecken wurden Daten für $z_0 = 0,1 \text{ m}$, $0,2 \text{ m}$, $0,4 \text{ m}$ und $0,5 \text{ m}$ (gepunktete Linien) hinzugenommen.	113
5.8.	Darstellung der Konzentrationsprofile für die Erwartungswerte (links) und für den Erwartungswert \pm einer Standardabweichung durch longitudinale, laterale und horizontale Schnitte (von oben nach unten).	114
5.9.	Illustration verschiedener Abhängigkeiten im Gaußmodell. Oben: Bodenkonzentrationsprofile in Abhängigkeit der Quellhöhen (links: $h = 100 \text{ m}$, rechts: $h = 200 \text{ m}$) für die Stabilitätsklassen A-F, unten: Abhängigkeit der Bodenkonzentrationsprofile von den Stabilitätsklassen (links: A, rechts: F) für verschiedene Quellhöhen.	115
5.10.	Darstellung eines Vergleiches zwischen RS und dem Gaußmodell für verschiedene Wertekombinationen aus u und Q . Links: Vergleich für ein Wertepaar innerhalb des Rasterbereiches (mittig (i)) und für zwei Wertepaare außerhalb des Rasterbereiches (oben (o), unten (u)), rechts: Vergleich für die Wertepaare außerhalb des Rasterbereiches, zusätzlicher lokaler Wichtung sowie Demonstration des Einflusses der Polynomordnung.	116
5.11.	Darstellung eines Vergleiches zwischen RS (links) und dem Gaußmodell (rechts) für $u = 2,5 \text{ m s}^{-1}$ und $Q = 2,5 \text{ kg s}^{-1}$. Von oben nach unten: 3d-Ansicht und Gitter (15 ppm), Lateralschnitt ($x = 100 \text{ m}$, $y \in [-100, 100] \text{ m}$, $z \in [50, 100] \text{ m}$), Longitudinalschnitt ($x \in [1, 1000] \text{ m}$, $y = 0 \text{ m}$, $z \in [0, 100] \text{ m}$), Vertikalschnitt ($x = 1 \text{ m}$, $y \in [-100, 100] \text{ m}$, $z = 100 \text{ m}$).	117
5.12.	Darstellung eines Schwimmdachtanks für Ottokraftstoffe innerhalb eines Auffangbereiches; links: bearbeitetes Foto, rechts: abgeleitetes Modell für die Ausbreitungssimulationen.	119

5.13.	Darstellung des Simulationsgebietes und des Simulationsgitters mittels para-View. Oben: Gesamtansicht des Simulationsgebietes und Angabe der Abmessungen im Vergleich zum Tank, links: Vernetzung des Simulationsgebietes und des Tanks, rechts: Detailansicht zur Tankvernetzung.	120
5.14.	Darstellung der Dachposition am oberen (links) bzw. am unteren (rechts) Umkehrpunkt.	121
5.15.	Vergleich des Originalmodells (links) mit der Response-Surface (rechts) mit longitudinalen, lateralen und horizontalen Schnitten (von oben nach unten) des räumlichen Konzentrationsprofils. Für die Farbeinteilung wurden die untere Explosionsgrenze (LEL (siehe UEG), 6000 ppm) und die Erkennungsschwelle des Geruches (Odor Recognition Threshold (ORT), 6 ppm) verwendet.	122
5.16.	Darstellung der Konzentration in Abhängigkeit der Windgeschwindigkeit für eine ausgewählte Zelle (inset Figur: rotes Kreuz). Hierfür wurden Polynome 2. (zusätzlich inklusive lokaler Wichtung) und 3. Ordnung verwendet.	123
5.17.	Illustration der Konzentrationsprofile für den Erwartungswert (links) und für den Einfluss der Schwankungen (rechts, \pm eine Standardabweichung) mittels longitudinaler, lateraler und horizontaler Schnitte (von oben nach unten).	123
5.18.	Darstellung der Berechnungszeit für MCS/LHS (10000 samples) von 100000 Polynomen in Abhängigkeit der Anzahl der verwendeten CPUs.	124
6.1.	Darstellung der aktuelle Zonenzuweisung gemäß der TRGS 509 und Abbildung eines repräsentativen Schwimmdachtanks.	128
6.2.	Illustration der Detektorpositionen für die Langzeitemissionsmessungen an einem repräsentativen Schwimmdachtank im Rahmen des DGMK Forschungsprojektes 793 [192].	130
6.3.	Darstellung des maßstabsgetreuen Modells (oben) für die Umströmungsuntersuchung im Windkanal (unten). Im Hintergrund erkennt man Rauigkeitselemente (rot) zur Erzeugung einer spezifischen Turbulenz in den anströmenden Luft.	135
6.4.	Darstellung der Verlustfaktoren K_R für verschiedene Typen der Randabdichtung in Abhängigkeit von der Windgeschwindigkeit \bar{u} und die zugehörigen Fitfunktionen. MGD nur primär: $K_R(\bar{u}) = 8.93 + (1,54\bar{u})^{2,09}$, MGD mit gleitschuhmontierter Sekundärdichtung: $K_R(\bar{u}) = 2.30 + (1,49\bar{u})^{1,52}$, MGD mit randmontierter Sekundärdichtung: $K_R(\bar{u}) = 0.91 + (1,34\bar{u})^{0,99}$, E nur primär: $K_R(\bar{u}) = 2.50 + (1,27\bar{u})^{1,52}$, E mit Wetterschild: $K_R(\bar{u}) = 1.00 + (1,23\bar{u})^{1,16}$, E mit randmontierter Sekundärdichtung: $K_R(\bar{u}) = 0.40 + (1,66\bar{u})^{0,30}$	139
6.5.	Darstellung der Verlustfaktoren K_{F_i} in Abhängigkeit von der Windgeschwindigkeit \bar{u} und die zugehörigen Fitfunktionen. Personeneinstiegsöffnung: $K_F(\bar{u}) = 0,70$, Peil- und Probenahmerohr: $K_F(\bar{u}) = 1,00$, Ringpontonsstütze: $K_F(\bar{u}) = 0,90 + (0,23\bar{u})^{0,78}$, Membranstütze: kein Fit (Geradenabschnitte, siehe Text), geschlitztes Führungsrohr ohne Abstreifer: $K_F(\bar{u}) = 21,50 + (50,30\bar{u})^{1,39}$, geschlitztes Führungsrohr mit Abstreifer: $K_F(\bar{u}) = 18,90 + (15,70\bar{u})^{1,36}$, Be- und Entlüftungsarmatur: $K_F(\bar{u}) = 3,50 + (0,40\bar{u})^{4,07}$, Flüssigkeitsstandanzeige: $K_F(\bar{u}) = 6,40 + (3,39\bar{u})^{1,11}$	140
6.6.	Prozentuale Reduktionen der Emissionen für den Übergang von einer Einzeldichtung auf eine Doppeldichtung in Abhängigkeit von der Windgeschwindigkeit \bar{u} . 1: durchschnittlich gut sitzende, 2: sehr gut sitzende mechanische Gleitschuhdichtung (MGD) und randmontierte Sekundärdichtung, 3: durchschnittlich gut sitzende MGD und gleitschuhmontierte Sekundärdichtung, 4: durchschnittlich gut sitzende E und randmontierte Sekundärdichtung.	142

6.7.	Darstellung der Verlustfaktoren in Abhängigkeit der Windgeschwindigkeit für eine reine MGD, für eine MGD mit randmontierter Sekundärdichtung und für eine MGD mit randmontierter Sekundär- und Tertiärdichtung in Abhängigkeit von der Windgeschwindigkeit \bar{u} . Links: durchschnittlich gut sitzende, rechts: sehr gut sitzende Variante.	144
6.8.	Darstellung der Maximalwerte der Verluste $L_{S_{max}}$ in Abhängigkeit von \bar{u} für die fünf Vergleichstanks. Als Lagerstoff wurde Naphtha angenommen.	147
6.9.	Darstellung des Massenverlustes durch Verdunstung in Abhängigkeit des Lachenradius ($u(z = 1 m) = 1,2 m s^{-1}$) berechnet mit den Modellen von Sutton-Pasquill, Deutsch und Brighton. Das Inset zeigt die Verdunstung in Abhängigkeit der Windgeschwindigkeit für eine Lache mit dem Radius von $r = 20 m$	155
6.10.	Darstellung von vertikalen Lichtschnitten unterschiedlicher Belichtungszeit bei Freisetzungen von Ethan aus einer Punktquelle in der Tankdachmitte (vereinfachte Nachbildung der Atmungsarmatur). Von oben nach unten nimmt die Belichtungszeit zu. Links: Tankdach am unteren Umkehrpunkt, rechts: Tankdach am oberen Umkehrpunkt.	157
6.11.	Vergleiche einer definierten Freisetzung im Windkanal mit einer CFD-Simulation an einem Modell. Dargestellt sind Longitudinalprofile (oben links), Lateralprofile (mittig) und Vertikalprofile (unten) für die dimensionslose Konzentration gemäß (6.29). Oben rechts: Darstellung der Achsen (und Benennungen) für die im Windkanal gemessenen und hier illustrierten Longitudinal-, Vertikal- und Lateralprofile.	160
6.12.	Illustrationen von Emissionsausbreitungen für unterschiedliche Dachpositionen und Windgeschwindigkeiten. Als Quellstärken wurden $10 kg h^{-1}$ und $100 kg h^{-1}$ aus dem Ringspalt angenommen. Im oberen Sammelbild sind die Ausdehnungen der Emissionswolken mit Erreichen der UEG und im unteren Sammelbild mit Erreichen von 50% der UEG angegeben ($u = 1 m s^{-1}$).	161
6.13.	Illustration der Ausbreitung von Emissionen mit Überschreiten der Geruchschwelle für unterschiedliche Dachpositionen und Windgeschwindigkeiten. Als Quellstärken wurden $10 kg h^{-1}$ und $100 kg h^{-1}$ aus dem Ringspalt angenommen.	162
6.14.	Illustrationen von Emissionsausbreitungen für Revisionsfreisetzungen. Als Quellstärken wurden $100 kg h^{-1}$ aus dem Ringspalt und simultan $100 kg h^{-1}$ aus der Atmungsarmatur angenommen. Im oberen Sammelbild sind die Ausdehnungen der Emissionswolken mit Erreichen der UEG und im unteren Sammelbild mit Erreichen von 50% der UEG angegeben.	162
6.15.	Illustration der Ausbreitung von Emissionen mit Überschreiten der Geruchschwelle für Emissionen bei einer Revision. Als Quellstärken wurden $100 kg h^{-1}$ aus dem Ringspalt und $100 kg h^{-1}$ aus der Atmungsarmatur angenommen. Windgeschwindigkeit oben: $u = 1 m s^{-1}$ unten: $u = 4 m s^{-1}$	163
6.16.	Illustration der Ausbreitung von Emissionen bei einem Dachuntergang bzw. bei einer vollständigen Flutung des Tankdaches. Als Quellmassenstrom wurde $1 kg s^{-1}$ angenommen (ANSYS CFX).	164
6.17.	Illustration der Ausbreitung von Emissionen bei einem Dachuntergang bzw. bei einer vollständigen Flutung des Tankdaches. Als Quellmassenstrom wurde $3 kg s^{-1}$ angenommen (ANSYS CFX).	164
6.18.	Illustration der Ausbreitung von Emissionen bei einem Dachuntergang bzw. bei einer vollständigen Flutung des Tankdaches. Als Quellmassenstrom wurde $10 kg s^{-1}$ angenommen (ANSYS CFX).	164

6.19. Illustration eines Netzauszuges mit vier verbundenen Knoten. Die Hypothesen und die angegebene Datengrundlage sollen das Grundprinzip illustrieren. Für die Berechnung der Ausfallwahrscheinlichkeiten $F(t)$ wurde eine Exponentialverteilung angenommen.	166
6.20. Darstellung der Zielknoten (<i>Erhöhte Emission</i> und <i>Kritische Emission</i>) sowie der unmittelbaren Vorgängerknoten.	167
6.21. Darstellung der Knoten und kausalen Abhängigkeiten für Lachenbildung auf dem Schwimmdach.	168
6.22. Illustration der Knoten und der kausalen Abhängigkeiten für erhöhte Emissionen als Folge von zu hohen Produkt- bzw. Umgebungstemperaturen oder durch Einleitung eines falschen Produktes.	169
6.23. Darstellung des Bayesschen Netzes für die Untersuchung von Emissionen ausgehend von Schwimmdachtanks nach der Initialisierung.	171
6.24. Darstellung des Bayesschen Netzes für die Untersuchung von Emissionen ausgehend von Schwimmdachtanks ohne Tertiärdichtung und der Berücksichtigung eines Sekundär- und Primärdichtungsschadens.	172
6.25. Darstellung des Bayesschen Netzes für die Untersuchung von Emissionen ausgehend von Schwimmdachtanks nach dem Setzen gleichzeitiger Evidenzen bei den Knoten <i>Erhöhte Emission</i> (ja) und <i>Erhöhte Emission im Auffangbereich</i> (nein).	173
A.1. Kennzahldiagramm nach dem Britter-McQuaid-Modell für eine kontinuierliche Freisetzung (modifiziert).	196
B.1. Illustration zur Gaußschen Schadstoffausbreitung; oben: Gauß-Fahnen-Modell, unten: Gauß-Wolken-Modell.	199
B.2. Illustration zum Einfluss der Länge des Mittelungsintervalls auf den Mittelwert einer fluktuierenden Größe $a(t)$	201
B.3. Illustration des zur Gaußschen Schadstoffausbreitung zugrundeliegenden Koordinatensystems und Darstellung relevanter Größen (a) sowie Illustration der Gaußschen Schadstofffahne (Seitenansicht und Draufsicht) (b).	205
B.4. Veranschaulichung der Freisetzungshöhe h_S und der effektiven Freisetzungshöhe h . Die tatsächliche (architektonische) Höhe einer Freisetzung ist nicht immer ein guter Repräsentant für die effektiven Freisetzungshöhe h im Ausbreitungsmodell.	206
B.5. Illustration der Reflexion der Schadstofffahne am Boden (modelliert durch Addition einer Spiegelquelle).	206
B.6. Darstellung der Schadstoffe zwischen Boden und Inversionsschicht. An der Regelmäßigkeit des Musters der benötigten Spiegelquellen erkennt man, dass vier Positionen unterschieden werden können: $2jh_i + h$ (z.B. 2), $-2jh_i - h$ (z. B. 3), $2jh_i - h$ (z. B. 1') und $-2jh_i + h$ (z. B. 2') jeweils für $j = 0, 1, 2, \dots$	207

Tabellenverzeichnis

3.1.	Zuordnungen zwischen linguistischen Variablen und fuzzy sets (a_1, a_2, a_3, a_4) nach [84, 96].	62
3.2.	Darstellung einer Auswahl von Softwarepaketen zu Bayesschen Netzen für einen Vergleich, (R) Registrierung erforderlich, (nk) nur nichtkommerzielle Verwendung, (T) Testversion verfügbar, (aL) akademische Lizenz (Tabelle modifiziert aus [99]).	65
3.3.	Wahrheitstabellen für verschiedene Repräsentationen der Black Box.	69
4.1.	F -Test für multivariates Polynom mit 10 Koeffizienten zum Signifikanzniveau $\alpha = 0,05$ für die gesamte Regression und für jeden einzelnen Term. Hellgrau bedeutet Ablehnung und dunkelgrau Nichtablehnung der Nullhypothese.	102
6.1.	Übersicht zu den Eintrittshäufigkeiten (Schadenraten) verschiedener Schadenergebnisse an Schwimmdachtanks. Es wurden Literaturdaten, Daten abgeleitet mit Hilfe der ZEMA-Datenbank sowie Daten aus der deutschlandweiten Umfrage eingetragen.	132
6.2.	Emissionsrelevante Ausstattungsmerkmale der zum Vergleich herangezogenen Tanks. Weitere Abkürzungen: geschlitzt (g), Abstreifer (A), integriertes Führungsrohr (I); die Pfeile geben an, welche Komponente in das Führungsrohr integriert wurde, Überziehdichtung (ÜD), nicht abgedichtet (n. a.), abgedichtet (a.).	146
6.3.	Übersicht zu den Grunddaten der für den Vergleich herangezogenen Schwimmdachtanks. Die Stoffdaten beziehen sich auf den Lagerstoff Naphtha (leicht), siehe Tabelle 3.2 aus dem Forschungsbericht [191].	147
6.4.	Übersicht über Emissionen an Schwimmdachtanks und die zugeordneten Freisetzungsmassenströme. Abkürzungen: Primärdichtung (PD), Sekundärdichtung (SD).	156
A.1.	Übersicht über die Koeffizienten α und β zur Approximation der Kurvenverläufe aus der Abbildung A.1, abhängig von der Konzentration c_m (die Konzentration des unverdünnten Gases sei $c_0 = 1$).	197
B.1.	Zuordnung der Stabilitätsklassen zur Windgeschwindigkeit und Sonneneinstrahlung	208
B.2.	Bestimmungsgleichungen für die Dispersionsparameter $\sigma_y(x)$ und $\sigma_z(x)$ angepasst an den ländlichen Raum.	208

1. Einordnung, Ziele und Gliederung der Habilitationsschrift

1.1. Einordnung der Habilitationsschrift

Gemäß Wikipedia wird unter einem Risiko eine Situation verstanden, „[...] welche die Möglichkeit des Eintritts künftiger Ereignisse, die nachteilige Auswirkungen wie Verlustgefahren in sich bergen [...], der Komplementärbegriff ist die Sicherheit“ [1]. In privaten Bereichen, in industriellen Anlagen und Prozessen, einschließlich für Operationsabläufe im Anlagenmanagement gilt es, Risiken im Sinne der einfachen Bedeutung des Zitates zu vermeiden oder zu reduzieren. Auch das Komplement *Sicherheit* ist allgemeinverständliches Ziel vieler Bestrebungen in den zuvor genannten Bereichen.

Absolute Sicherheit kann es jedoch nicht geben, weil auch Nichtanwendungen Risiken enthalten können und viele unerwünschte Ereignisse nicht deterministisch sind.

Ziel von Risikoanalysen ist es, Risiken zu identifizieren und die erkannten Risiken auf ein akzeptables Maß zu reduzieren. Im Folgenden sollen nur Risiken aus der Prozess- und Anlagensicherheit weiter betrachtet werden, obwohl viele Aussagen auch für allgemeine Risiken im Privaten und Alltäglichen korrekt bleiben würden. Für die Prozess- und Anlagensicherheit sind zweierlei Ausgangsaspekte hervorzuheben: Zum einen wird ein gesellschaftlich akzeptiertes und gesetzlich festgelegtes Maß benötigt, wann ein Risiko als akzeptabel anzusehen ist und zum anderen benötigt man geeignete Verfahren der Risikoanalyse, das Erreichen bzw. Unterschreiten dieses Maßes nachzuweisen.

In dieser Habilitation wird zunächst aufgezeigt, dass es in Deutschland bei der Durchführung von Risikoanalysen ungenutztes Potential gibt. Es wird ebenso kurz dargelegt, wie dieses Potential nutzbar gemacht werden könnte und unter welchen Bedingungen dies in sinnvollem Verhältnis zum Aufwand steht. Vorweggegriffen werden kann, dass in Deutschland quantitative Risikoanalysen nicht gefordert sind (mit Ausnahme der Kerntechnik). Daraus resultierend wird auf verfügbares Wissen und auf Genauigkeit verzichtet. Die korrekte Durchführung quantitativer Risikoanalysen verlangt jedoch in jeder Verfahrensstufe und in jedem Teilmodell die Mitbestimmung und Berücksichtigung von Vertrauensbereichen aus den Modellunsicherheiten. Hierfür sind zusätzliche Verfahrensweisen erforderlich, welche Gegenstand aktueller Forschung sind und daher in dieser Arbeit zunächst allgemein und anschließend an einem Beispiel vorgeführt werden sollen. Im Folgenden soll zunächst der Stand der Technik zu Risikoanalysen und -weil für das zentrale Anwendungsbeispiel relevant- zur Modellierung der Ausbreitung störfallbedingter Freisetzungen überblicksartig angegeben werden.

Nach den Angaben zum Stand der Technik wird ein industrierelevanter Anwendungsfall vorgestellt, bei dem eine quantitative Risikoanalyse, eine Freisetzungsanalyse und Unsicherheitsbetrachtungen oberhalb des Standes der Technik benötigt werden, um eine sicherheitsbezogene Problemstellung zu lösen. Die Einleitung beinhaltet anschließend eine Auflistung der konkreten Ziele der Habilitation und eine Angabe der Gliederung. Im Kern möchte diese Habilitation damit einen Beitrag leisten aufzuzeigen, weswegen und für welche Problemstellungen quantitative Risikoanalysen zweckmäßig sind. In Abgrenzung zu Vorarbeiten zu diesem Anliegen werden aktuelle Methoden aus der Fachliteratur, besonders zum Umgang mit Systemkenntnis, mit Expertenschätzungen und mit Parameterunsicherheiten vorgestellt und angewendet.

1.1.1. Stand der Technik bei Risikoanalysen

Eine Risikoanalyse (Risk Analysis) (RA) ist Teil des Risikomanagements eines Unternehmens, das sich aus der Risikobeurteilung, der Risikobewältigung und Risikokommunikation zusammensetzt [2]. Innerhalb der RA werden die durch Risikoidentifikation ermittelten Risiken, was neben Prozess- und technischen Risiken auch finanzielle unternehmerische Risiken einschließen kann, detailliert analysiert. Für Prozess- und Anlagensicherheitsrisiken müssen zudem geforderte Sicherheitsstandards erreicht werden.

Die Größe des Risikos wird üblicherweise eingeteilt in (i) Bereiche akzeptablen Risikos, für die risikomindernde Maßnahmen nicht erforderlich sind, (ii) Bereiche nicht-akzeptablen Risikos, welche durch zwingend durchzuführende Maßnahmen reduziert werden müssen und (iii) Übergangsbereiche (As Low As Reasonably Practicable (so niedrig, wie vernünftigerweise praktikabel) (ALARP)). Prozesse, die trotz intensiver Bemühungen zur Risikoreduktion im ALARP-Bereich liegen, können dennoch genehmigungsfähig sein, wenn ihre gesellschaftliche Bedeutung hinreichend ist [3].

Für die Einordnung identifizierter Risiken werden Verfahren der Risikoanalyse genutzt. Zu diesen Verfahren zählen beispielsweise Bayessche Netze (BN), Ereignisbaumanalyse (Event Tree Analysis) (ETA), Fehlerbaumanalyse (Fault Tree Analysis) (FTA), Prognose, Auffinden der Ursache, Abschätzen der Auswirkungen, Gegenmaßnahmen (PAAG), Hazard and Operability (HAZOP), Fehlermöglichkeits- und -einflussanalyse (Failure Mode and Effects Analysis) (FMEA) oder Layer Of Protection Analysis (LOPA) sowie Kombinationen aus diesen und weiteren Verfahren [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10].

Die Verfahren können in qualitative und quantitative Verfahren unterteilt werden. Mit einer qualitativen Risikoanalyse identifiziert man unerwünschte Ereignisse oder Zustände innerhalb eines Systems oder einer Anlage und beschreibt mögliche Auswirkungen. Allerdings werden für die identifizierten Ereignisse oder Zustände nur nominale oder ordinale Merkmalsausprägungen einbezogen (diskrete Merkmalabstufungen). Des Weiteren ist die detaillierte Auseinandersetzung mit vielfältigen negativen Folgeereignisketten nicht Bestandteil einer qualitativen Risikoanalyse, wohl aber eine Diskussion möglicher Auswirkungen. Vertreter dieser Gruppe sind Verfahren wie PAAG bzw. HAZOP¹.

Für betriebliche Gefährdungsbeurteilungen und für die Feststellung der Lage des Risikos werden zumeist Eintrittswahrscheinlichkeiten und Schweregrade mit linguistischen Abstufungen wie *hoch, mittel, gering, sehr gering* bzw. *leichte Verletzungen, ..., Tod bzw. Katastrophe* [11] ermittelt. Diese werden im Arbeitsschutz zumeist in Form von Risikomatrizen benutzt [12]. Qualitative Risikobewertungen bieten die Möglichkeit, Risiken zu sortieren, zu vergleichen und damit auch, diese für Risikominderungsmaßnahmen zu priorisieren. Praktische Anwendungen des PAAG-Verfahrens sind daher überwiegend kombiniert mit der Verwendung von Risikomatrizen, mit FMEA, mit LOPA oder weiteren Verfahren.

Bei einer quantitativen Risikoanalyse werden die in qualitativen Verfahren identifizierten und risikobehafteten Ereignisse oder Zustände weiter untersucht. Zusätzliches Ziel ist nun, die zugehörige Ereignisketten (Kausalstruktur) sowie mögliche Konsequenzen detailliert zu ermitteln und eine möglichst genaue Abschätzung der Eintrittswahrscheinlichkeit vorzunehmen. Verfahren der quantitativen Risikoanalyse können somit Kombinationsverfahren sein, die qualitative Verfahren wie die vorgenannten als eine erste Verfahrensstufe beinhalten oder sie können den qualitativen Anteil intrinsisch enthalten. Die erreichte Merkmalausprägung ist metrisch, so dass bei risikomindernden Maßnahmen auch die tatsächliche Veränderung des Risikomaßes angegeben werden kann. Insbesondere kann mit diesen Verfahren ein Nachweis erbracht werden, dass

¹PAAG ist hierbei eine Übertragung der Verfahrenskonzepte aus dem HAZOP, so dass es sich im Prinzip um inhalts-, durchführungs- und zielgleiche Verfahren handelt. Sie beruhen auf einer teamorientierten, schlüsselwortgesteuerten verbalen Analyse von Anlagenzuständen und Versagensmöglichkeiten (Gefahrenidentifikation). Die internationale Normung ist die DIN EN 61882: HAZOP-Verfahren (HAZOP-Studien)-Anwendungsleitfaden (IEC 618802:2016), deutsche Fassung EN 61882:2016 [9].

identifizierte Risiken tatsächlich das gesellschaftlich akzeptierte Risiko unterschreiten. Da es für Risiken keine naturgesetzlichen Grenzwerte gibt, sind diese von der Risikotoleranz der Gesellschaft abhängig. Es gibt viele Untersuchungen und Studien, die zeigen, dass gesellschaftlich akzeptable Risiken von vielen Faktoren abhängig [13, 14, 15] und auch stark beeinflussbar [16, 17, 18] sind. In den Niederlanden, Großbritannien oder in den USA haben sich z. B. verbindliche Risikogrenzwerte etabliert [19].

In Deutschland gibt es mit Ausnahme der Kernkraftwerksindustrie keine verbindlichen Risikogrenzwerte. In anderen Bereichen ist die Verwendung von quantitativen Risikoanalysen auch nicht gefordert. Dadurch wird in vielen Bereichen der Anlagensicherheit das Potential einer quantitativen Risikoanalyse nicht erreicht bzw. ausgeschöpft.

Wenn zusätzlich mit der Durchführung einer quantitativen Risikoanalyse auch auf verfügbares Wissen verzichtet wird, kann die Entscheidungsfindung anschließend suboptimal sein. Zudem kann nicht quantifiziert werden, wie stark durch eine Maßnahme ein Risiko reduziert wurde.

Ein Betreiber von Anlagen, welche gemäß der Störfall-Verordnung [20] bzw. Seveso-III-Richtlinie [21] genehmigungspflichtig sind, muss bei der sicherheitstechnischen Auslegung die Sicherheit seiner Anlage gewährleisten und gegenüber einer Genehmigungsbehörde nachweisen (Gefährdungsbeurteilung, Sicherheitsanalyse). Die Auslegung einer Anlage ist hierbei so vorzunehmen, dass ein Störfall (üblicherweise ein Auslegungsstörfall) verhindert wird. Neben der Tatsache, dass solche Nachweise nicht auf quantitativen Risikoanalysen basieren müssen, ist in vielen Fällen vom Gesetzgeber auch nicht gefordert, dass konkrete Anlagenausführungen für Sicherheitsbetrachtungen heranzuziehen sind. Ein Beispiel hierfür ist die Festlegung von Sicherheitsabständen nach KAS18 [22], welche nur nach dem Gefahrstoff und nicht zwingend nach dem Freisetzungsszenario erfolgt.

Daher ist es denkbar, dass es zu Unter- bzw. Überdimensionierung von Sicherheitsvorkehrungen, Sicherheitsabständen und Sicherheitsbereichen kommen kann, insbesondere weil keine Sicherheitstoleranzen quantifiziert oder andere denkbare Szenarien nicht hinreichend priorisiert und detaillierter analysiert wurden.

Zukünftig werden Entscheidungsfindungen, Systemauslegungen und Systemmanagement zunehmend risikobasiert ausgeführt bis hin zu Inspektions-, Wartungs- und Austauscharbeiten, weil dies mit Effizienzsteigerungen im Unternehmen verbunden sein kann. Beispiele sind Prognoseverfahren bei der Untersuchung von Life-Cycle-Performance (LCP)[23] oder Risikobasierte Wartung (Risk-Based Inspection) (RBI)[24]².

In diesem Sinne ist zu erwarten, dass auch in Deutschland zukünftig quantitative Risikoanalysen einen höheren Rang einnehmen werden.

Sehr wichtig in diesem Zusammenhang ist die Feststellung, dass Risikoanalysen selbst oftmals zahlreiche Untermodelle (Abschätzung von Quelltermen, Abschätzungen von Ausbreitungen, Abschätzungen zu Brandabläufen,...) beinhalten, welche ihrerseits von unsicherheitsbehafteten Variablen abhängig sind. Hinzu kommen Verfahrens- und methodische Limitierungen, Limitierungen aus der Abstraktion natürlicher Prozesse, Modellgrenzen aus der mathematischen Modellierung bis hin zum Informationsmangel. Datenunsicherheiten bestehen daher in jeder Verfahrensstufe: vom Eingang über den Prozess bis zum Ausgang. Eine quantitative Risikoanalyse kann daher nicht ohne eine Mitberücksichtigung dieser Fehler-, Toleranz- und Datenunsicherheitsbereiche auskommen. Andernfalls besteht die Gefahr, dass errechnete Zahlenwerte für Risiken eine höhere Genauigkeit gegenüber qualitativen Analysen nur vortäuschen³.

Eine Sonderstellung nimmt bei der Berücksichtigung von Unsicherheiten die Verarbeitung von

²Durch RBI kann z. B. vermieden werden, dass systemunkritische Komponenten zu oft inspiziert werden und damit Aufmerksamkeit für Systemkomponenten mit hohen Anforderungen fehlt. LCP im Maschinen- und Anlagenbau unterstützt betriebswirtschaftliche Entscheidungen und Effizienzsteigerungen [23].

³In Bereichen wie im Arbeitsschutz wird eine hoch differenzierte Risikoanalyse oft übertrieben sein, wenn diese zudem nicht auf entsprechend genauen Daten beruht und für die Erreichung der Zielstellungen nicht von adäquatem Aufwand ist.

Expertenwissen ein. Verfahren wie PAAG und HAZOP basieren darauf, dass Experten⁴ Zustandseinschätzungen und Konsequenzeinschätzungen auf Grund ihrer Erfahrung abgeben. Hier ist unbestritten, dass die Verwendung des Expertenwissens zur Risikosenkung beiträgt.

Verfahren der quantitativen Risikoanalyse benötigen vom mathematischem Standpunkt aus Eintrittswahrscheinlichkeiten für Hypothesen, welche stochastisch unabhängig voneinander sein können bis hin zu bedingten Wahrscheinlichkeiten. Betrachtet man eine Anlage über ihren Lebenszyklus, so kommt erschwerend hinzu, dass Ausfallraten zumeist (abgesehen von exponentialverteiltem Ausfallverhalten) explizit zeitabhängig sind⁵. Daher kann nicht erwartet werden, dass jegliche Eintrittswahrscheinlichkeit in einer Datenbank tabellierbar ist. Verfahren der quantitativen Risikoanalyse müssen demnach fähig sein, unsicherheitsbehaftete Daten zuzüglich heranzuziehenden Expertenwissens optimal verarbeiten zu können. Insbesondere zu diesen Fragestellungen wird aktuell intensiv geforscht. Unter den genannten Methoden erscheinen hierfür Bayessche Netze besonders geeignet und werden in dieser Habilitation verwendet.

1.1.2. Stand der Technik bei Risikodatenbanken und Expertensystemen

Für die Planung, den Bau und für den Betrieb sicherheitsgerichteter Systeme, sogenannter Safety Instrumented Systems (SIS) gibt es Standards, mit denen Anforderungsklassen Sicherheitsintegritätslevel (Safety Intergity Level) (SIL) spezifiziert werden und anhand derer die Auslegung der sicherheitsgerichteten Einrichtung erfolgen kann. Für elektrisch/elektronisch/programmierbar elektronische Geräte ist dies in der Normenreihe DIN EN 61508 [26] geregelt. Die Betreiber von Anlagen mit sicherheitsrelevanten Funktionen ermitteln im Rahmen einer Gefährdungsbeurteilung das Sicherheitsintegritätslevel für die jeweilige Sicherheitsfunktion. Entsprechend dieser Bestimmung werden die dafür geeigneten Geräte ausgewählt und zu einem System zusammgeführt. Die Gerätehersteller von SIS beurteilen ihre Geräte entsprechend der angegebenen Normenreihe. Bis zum SIL 2 kann der Hersteller die Zuordnung in eigener Verantwortung vornehmen. Für höhere SIL wird dies durch eine unabhängige Untersuchungsstelle vorgenommen. Das SIL ist ein quantitatives Maß für die Wahrscheinlichkeit, dass das SIS die angeforderte Sicherheitsfunktion über einen definierten Zeitraum korrekt erfüllen kann. Man unterscheidet Einstufungen in die SIL nach Werten für die maximale Nichtverfügbarkeit (Low Demand) bzw. die Einstufung in die SIL nach Werten für die maximale Ausfallwahrscheinlichkeit (High Demand), für die in der Normenreihe explizit Zahlenwerte angegeben sind. Ähnliches gilt für sicherheitsbezogene Teile von Steuerungen in Maschinen, wo Performance Level (PL) definiert werden [27].

Abseits solcher konkret definierten Systeme bzw. Funktionseinheiten gibt es keine Normenreihe, welche für Gewährleistung der Anlagensicherheit feste Abstufungen für Versagenswahrscheinlichkeiten oder Risikogrenzwerte vorgibt. In diesem Sinne kann Anlagensicherheit als gewährleistet angesehen werden, wenn die in normkonkretisierenden Verwaltungsvorschriften, wie in DIN-Normen, in VDI-Richtlinien oder anderen hierfür als geeignet angesehenen Abhandlungen beschriebenen Verfahrensweisen und Konstruktionen Anwendung finden. Diese sind dann als „Stand der Technik“ anzusehen.

Für die Durchführung von quantitativen Risikoanalysen in der Anlagensicherheit und den dort zu findenden kausalen Ereignisketten wird man überwiegend eine Kombination aus Zuverlässigkeitsdaten, entnommen aus Datenbanken und von Expertenschätzungen verwenden. Es gibt einige umfassende, industriezweigspezifische Datenbanken wie OREDA [28] (Über- und Unter-

⁴Die Expertise muss selbstverständlich in Bezug zur betrachteten Anlage oder in Bezug zum betrachteten Teilsystem stehen.

⁵Bei der Beschreibung technischer Zuverlässigkeit wird häufig die sogenannte *Badewannenkurve* bzw. der *Badewanneneffekt* beschrieben, welche letztendlich auf weibullverteilttem Ausfallverhalten beruht. Gemeint ist hierbei, dass Phasen abnehmender, konstanter und steigender Ausfallrate typisch für den Lebenszyklus zahlreicher technischer Komponenten sind und der graphische Verlauf der Summenfunktion an dem Schnitt durch eine Badewanne erinnert [25].

wasserausrüstung in der Offshore-Industrie), und die darauf basierende ISO 14224:2016 [29], EIReDA [30] (European Industry Reliability Data; beschränkt auf die Nuklearindustrie), T10-1 „Purple Book“ [28] (Guideline for Quantitative Risk Assessment in the Netherlands) und weitere, in welchen Zuverlässigkeitsdaten hinterlegt sind.

Im Allgemeinen sind dies empirisch beobachtete, experimentelle oder abgeschätzte Ausfallraten, Ausfallwahrscheinlichkeiten oder Nichtverfügbarkeiten. Hier sind größenordnungsmäßige Abschätzungen zum Teil mit Vertrauensbereichen zu finden. Bedingte Wahrscheinlichkeiten verketteter Ereignisse sind in der Regel nicht tabelliert. Erwähnenswert für das industrierelevante Anwendungsbeispiel in der Habilitation ist die Zentrale Melde- und Auswertestelle für Störfälle und Störungen in verfahrenstechnischen Anlagen (ZEMA)-Datenbank [31] zur Abschätzung von Häufigkeiten relevanter Störfallereignisse. Die ZEMA-Datenbank dient der Erfassung und Auswertung von nationalen Störfällen und Störungen in Anlagen, die der Störfall-Verordnung unterliegen und in denen nach der Störfall-Verordnung meldepflichtige Ereignisse stattfanden. Die Datenbank wurde 1993 im Umwelt-Bundesamt eingerichtet und beinhaltet detaillierte Berichte über den Ort und die Zeit des Ereignisses, über den Ereignisverlauf sowie über die Konsequenzen, Notfallmaßnahmen und Schlussfolgerungen, die sich daraus ergeben haben. Nicht selten, insbesondere bei fehlenden Literaturdaten, müssen auch Expertenansichten eingeholt und in die Risikoanalyse einbezogen werden. In praktischen Anwendungen bedeutet dies, dass zumeist linguistische Einschätzungen unter Verwendung von Begriffen wie *häufig*, *selten*, *praktisch nie* geeignet in Ereignis/Ausfallwahrscheinlichkeiten bzw. in Ereignis/Ausfallraten übertragen werden müssen. Letzteres beinhaltet die Notwendigkeit, voneinander abweichende Expertenmeinungen geeignet zu aggregieren und auch, mit den befragten Experten einen Konsens über die Größenordnung der Zuordnung linguistische Einschätzungen \leftrightarrow Wahrscheinlichkeit/Rate zu bekommen⁶. Sowohl für die Aggregation unterschiedlicher Expertenmeinungen unter Berücksichtigung verschiedener Einschätzungen zu deren Expertise bis hin zur Festlegung linguistischer Einschätzungen gibt es Ansätze in der Literatur. Hier wird insbesondere auf Arbeiten zurückgegriffen, in denen Expertenmeinungen mittels Fuzzy-Logik mit Bayesschen Netzen kombiniert werden [32]. Man bezeichnet diese Kombination auch als Fuzzy Bayesian Networks (FBN).

1.1.3. Stand der Technik bei störfallbedingten Freisetzungen

Grundsätzlich unterscheidet man bei der Störfallfreisetzung impulsbehaftete und impulsfreie Freisetzungen. Bei der impulsbehafteten Freisetzung von Gasen wird die Ausbreitung in der Anfangsphase vom Austrittsimpuls dominiert und nicht von den Strömungseigenschaften des Umgebungsmediums. Durch die Einmischung von Umgebungsluft erfolgt mit zunehmendem Abstand vom Freisetzungsort sowohl ein Abbau des Impulses als auch eine Konzentrationsänderung des freigesetzten Gases. Geeignete Modelle sind z. B. Freistrahlm Modelle. Diese sind für die Habilitation nicht relevant. Bei impulsfreien Freisetzungen liegt dagegen kein Austrittsimpuls vor oder dieser ist vernachlässigbar. Der Transport von Schadstoffen in der Umgebungsluft erfolgt passiv, wenn die Schadstoffe hinreichend verdünnt sind. Darunter versteht man einen Transport der Schadstoffe durch die strömende Umgebungsluft ohne merkliche Beeinflussung der Luftströmung. Eine vereinfachte Beschreibung des passiven Transports kann durch Beschreibung der Advektion mit dem mittleren Wind und durch Beschreibung der Dispersion durch den mittleren Einfluss turbulenter Fluktuationen im Rahmen einer Advektions-Diffusions-Gleichung erfolgen. Für einfache, stationäre Randbedingungen (Punktquelle, isotrope und homogene Turbulenz) können analytische Lösungen gefunden werden, aber überwiegend wird die Advektions-Diffusions-Gleichung numerisch gelöst. Diese liefern die Klasse der Gaußschen Schadstoffausbreitungsmodelle. Für die Ausbreitung dichteneutraler und leichter Gase

⁶Die individuelle Einschätzung, dass ein Ereignis mit einer bestimmten linguistisch beschriebenen Häufigkeit (z.B. *oft* oder *selten*) eintreten kann, muss passend in eine Rate übertragen werden. Unterschiedliche Experten innerhalb einer Befragung müssen zudem diese Zuordnung kennen.

kann hierbei das Gaußsche Schadstoffausbreitungsmodell nach VDI 3783 I [33] als Stand der Technik angesehen werden. Haben freigesetzte Gase eine höhere Dichte als die Umgebungsluft, so können diese in Abhängigkeit der Freisetzungsbedingungen ein gravitationsgetriebenes Absinken in der Anfangsphase der Ausbreitung zeigen. Mit einer Advektions-Diffusions-Gleichung kann diese Ausbreitungsphase nicht beschrieben werden. Der gravitative Einfluss hat in der Regel eine massive lokale Störung der turbulenten Luftströmung im Ausbreitungsgebiet zur Folge, was eine gesonderte Modellierung erfordert. Derzeitiger Stand der Technik ist die Verwendung von dimensionsanalytischen Modellen wie Britter-McQuaid [34] oder gemäß der VDI 3783 II [35]. Bisweilen wird auch versucht, das Absinken durch zusätzliche Annahmen bei der Konstruktion von Partikeltrajektorien in Partikeltrajektorienmodellen zu berücksichtigen [36]. Will man allerdings Gebäudeumströmungen mitberücksichtigen bis hin zur lokalen und zeitlichen Auflösung des Turbulenzverhaltens, so sind Computational Fluid Dynamics (CFD)-Simulationen oberhalb des Standes der Technik erforderlich.

CFD-Modelle stellen den Stand der Wissenschaft dar, werden aber bei Auswirkungsbetrachtungen auf Grund des Rechenaufwandes im Verhältnis zur geforderten Genauigkeit bisher nur wenig eingesetzt [28].

CFD-Simulation in der Literatur sind meistens Simulationen von Einzelszenarien, über dessen Eintrittswahrscheinlichkeit oftmals keine Aussage getroffen wird.

Eine generelle Auseinandersetzung mit der Bandbreite verschiedener Szenarien, insbesondere einer umfassenden Fehlerbetrachtung, Einfluss- und Toleranzanalyse ist praktisch nicht zu finden.

Vollständige Toleranz- und Fehlerbetrachtung wären im Prinzip durch eine Kopplung mit Monte-Carlo-Simulationen (MCS)[37, 38] bzw. mit Latin-Hypercube-Sampling (LHS) [39, 40] möglich. Hierbei zeigte sich, dass Parameterstudien auf der Basis von MCS häufig thematisiert werden [41, 42, 43] und üblicherweise sehr rechenintensiv sind [44, 45]. Mit LHS kann der involvierte Raum der Parameterkombinationen verkleinert bzw. effizienter erfasst werden, dennoch verbleibt die Notwendigkeit der Durchführung einer Vielzahl von Einzelsimulationen.

In der Habilitation soll gezeigt werden, dass eine Untermenge von CFD-Simulationen zu geeigneten gewählten Parameterkombinationen zur Definition eines Ersatzmodells benutzt werden kann. Im Parameterraum werden die Simulationsergebnisse als multivariates Polynom approximiert. In aktuelleren Publikationen werden hierfür Quadratminimierungsmethoden (Least Square) (LS) oder Polynomielle Chaosentwicklung (Polynomial Chaos Expansion) (PCE) verwendet [46, 47, 48]. Das erstellte multivariate Polynom nennt man auch Response Surface (RS), womit die Auswertung bzw. Unsicherheitsbetrachtung dann lediglich ein algebraisches Problem ist. Unsicherheitsbetrachtungen zu Störfallfreisetzungen wurden mit diesen Methoden bisher nicht in der Literatur angewendet, so dass dies in der vorliegenden Habilitation getestet wird.

1.1.4. Beschreibung eines industrierelevanten Anwendungsbeispiels

In Raffinerien und Tankläger werden Rohöle, Mineralöle oder daraus hergestellte petrochemische Produkte unter anderem in Schwimmdachtanks gelagert. Im Normalbetrieb und insbesondere im Schadenfall emittieren diese Tanks flüchtige organische Kohlenwasserstoffe in die Umwelt. Der Schwimmdachtank selbst und die angrenzenden Areale sind daher explosionsgefährdete Bereiche, denen durch die Technische Regeln für Gefahrstoffe (TRGS) 509 [49] Zonen unterschiedlicher Eintrittswahrscheinlichkeiten für gefährliche explosionsfähige Atmosphären zugeordnet werden. Obwohl die im Normalbetrieb der untersuchten Anlage zu erwartenden emittierten Konzentrationen klein sind, besteht auf Grund der hohen Gesamtmasse der gelagerten entzündbaren Stoffe ein erhebliches Gefahrenpotential. Die Wahrscheinlichkeit des gleichzeitigen Auftretens von zündfähigen Konzentrationen volatiler organischer Verbindungen und von Zündquellen ist hier zu minimieren, da als Folge von Tanklagerbränden enorme Sach- und Umweltschäden zu erwarten und Menschenleben gefährdet sind, wie es z.B. bei [50] der

Fall war. Zu den Zündquellen müssen auch Naturereignisse wie Blitze hinzugenommen werden. Die für die Sicherheitsanforderungen generell relevanten legislativen Vorgaben wurden in zahlreichen Richtlinien auf europäischer Ebene erlassen, die durch entsprechende Verordnungen in nationales Recht umgesetzt sind [51, 52]. In Bezug auf die in diesem Forschungsprojekt untersuchte Zoneneinteilung an Schwimmdachtanks und deren Umgebung, sind in Deutschland die Gefahrstoffverordnung (GefStoffV) [53] und die TRGS 509 [49] vorrangig zu beachten.

Allgemein werden die Zonen an Tanks und in deren Umfeld in Abhängigkeit von Häufigkeit und Dauer des Vorhandenseins einer gefährlichen explosionsfähigen Atmosphäre eingeteilt, wobei die TRGS 509 konkrete Angaben (Empfehlungen) für die räumliche Ausprägung der Zonen gibt. So ordnet die TRGS 509 diesen Bereichen über dem Tankdach und dem Auffangraum die Zone 1 zu. In Zone 1 liegt laut Definition der Gefahrstoffverordnung gelegentlich eine gefährliche explosionsfähige Atmosphäre vor, deren Entzündung verhindert werden muss. Dies wird zum einen mit der Nutzung geeigneter Ausrüstung sichergestellt. Zum anderen dürfen von außen keine Zündquellen, wie z.B. ein Blitz, in die Zone 1 hineinwirken können. Die Blitzschutzanforderungen in Abhängigkeit von der Zone werden näher in TRGS 723 [54] und der DIN-VDE 62305 [55] beschrieben.

Grundlegend geht aus den beiden zuvor genannten Vorschriften hervor, dass in die Zone 1 (i) kein Blitz einschlagen darf, aber (ii) die Blitzableitung durch die Zone möglich ist, wenn der Ableiter selbst keine Zündquelle darstellt.

Bei strenger Auslegung der TRGS 723 müssten an dem untersuchten Schwimmdachtank weitere Blitzschutzmaßnahmen ergriffen werden. Sollte allerdings die momentane Zoneneinteilung übermäßig konservativ sein, so könnte eine andere Zoneneinteilung erfolgen. Diese von der Pauschalzuordnung abweichende Zoneneinteilung ist im Rahmen der Gefährdungsbeurteilung nach § 6 Abs. 8 GefStoffV prinzipiell möglich und rechtlich abgesichert. Allerdings muss die Abweichung fundiert begründet werden.

Hierbei ist zu beachten, dass diese Begründung effektiv alle während der Verwendung dieser Tanks auftretenden Gegebenheiten wie Normalbetrieb, Revision und Schäden abdecken muss, ebenso die Vielfalt verschiedener Betriebsweisen, Konstruktionen, Tankausstattungen und Lagerstoffe.

Während man Emissionen im Normalbetrieb mittels der API 2517/19 [56] abschätzen kann, fehlen geeignete Abschätzungen für Revisionen und insbesondere für die Vielfalt möglicher Schadensszenarien. Selbst eine Zusammenfassung möglicher Schadensereignisse lag nicht vor, so dass dieses Problem von der Industrie als Forschungsproblem an die Universität herangetragen wurde. Eine Bearbeitung dieser Problemstellung erfordert die Durchführung von Langzeitemissionsmessungen, die Verwendung von Modellen zur Emissionsabschätzung und zur Beschreibung der lokalen Ausbreitung der Emissionen in Tanknähe. Wegen der Quellnähe und der Freisetzungsumstände genügen Ausbreitungsbetrachtungen auf der Basis des Standes der Technik nicht, weswegen CFD-Simulationen und Windkanaluntersuchungen durchgeführt wurden. Die hohe Vielfalt der Schäden und die zugehörigen Wahrscheinlichkeiten sind nicht in Datenbankdaten erfasst, so dass für die Erhebung umfassende Experten- und Betreiberbefragungen durchgeführt wurden. Wegen der Vielfalt der Ereignisse, der Toleranzspannen und Unsicherheiten in den Parametern und Abweichungen in den Experteneinschätzungen ist eine quantitative Risikoanalyse erforderlich, ebenso die Mitberücksichtigung der vielen Unsicherheiten. Ziel der Untersuchungen war die Ermittlung der Gesamtwahrscheinlichkeit für eine gefährliche explosionsfähige Atmosphäre und der zugeordneten Unsicherheitsbereiche. Daher ist dieses Anwendungsbeispiel ein Paradigma für Situationen, wo die hier gewählte Vorgehensweise gut begründet ist.

1.2. Ziele der Habilitationsschrift

In der vorliegenden Habilitation werden Verfahrenstechniken der Risiko- und der Stoffausbreitungsanalyse verwendet, die in der Fachliteratur intensiv untersucht wurden, insbesondere was die mathematischen bzw. physikalischen Eigenschaften betrifft. Jedoch ist festzuhalten, dass diese Verfahren innerhalb der Analyse von Störfallfreisetzungen und von quantitativen Risikoanalysen oberhalb des derzeitigen Standes der Technik liegen. Ziel der Habilitation ist daher zunächst die Präsentation der verwendeten Verfahren gemäß des aktuellen Erkenntnisstandes und der für die Zwecke der Anwendung innerhalb der Anlagensicherheit notwendigen methodischen Erweiterungen.

Für zahlreiche Ereignisse bzw. Ereignisketten im industrierelevanten Anwendungsbeispiel sind in der Literatur oder in Datenbanken keine Wahrscheinlichkeiten publiziert. In Ermangelung empirischer Daten wurde daher eine umfassende Betreiber- und Expertenbefragung durchgeführt. Auch wenn diese individuellen Meinungen von Experten abhängig von Lebenserfahrung und von der Erfahrung zumeist an Einzelanlagen sind, so sind diese Bestandteil verfügbaren Wissens und besser einzuschätzen als Unkenntnis. Die strategische Mitverwendung von Expertenwissen innerhalb von quantitativen Risikoanalysen ist daher Bestandteil dieser Habilitation. Auch, wie hierbei die Meinungen verschiedener Experten zu ein und demselben Ereignis aggregiert werden können. Dadurch war es möglich, die Hauptproblemstellung zu lösen und die Literaturdaten zu Schadensraten durch eigene Publikationen zu erweitern.

CFD-Ausbreitungsbetrachtungen sind zwar Stand der Wissenschaft, allerdings nicht Stand der Technik. Publierte Anwendungen in der Anlagensicherheit sind überwiegend Simulationen von Einzelszenarien, über deren Eintreffwahrscheinlichkeit oft keine Abschätzung angegeben wird.

Kopplungen von CFD-Ausbreitungsanalysen mit umfassenden Unsicherheitsbetrachtungen zu den Modelleingangsvariablen sind sehr aufwändig und selbst auf modernen Computersystemen schwierig zu bewältigen. Innerhalb der Habilitation wurden Monte-Carlo-, Latin-Hypercube und letztendlich Response-Surface-Methoden (RSM) verwendet, um CFD-Simulationen mit umfassenden Toleranzanalysen koppeln zu können. Ziel der Habilitation ist es zu zeigen, wie diese Verfahren bei der Analyse von Störfallfreisetzungen angewendet werden können. Insbesondere eine Verwendung von RSM für Parameterstudien wurden für die Analyse von Störfallfreisetzungen bisher nicht publiziert.

Weiteres Ziel der Habilitation ist die Demonstration der erarbeiteten Verfahren und Erweiterungen an einem industrierelevanten Beispiel. Hierfür wurde die Wahrscheinlichkeitseinschätzung für gefährliche explosionsfähige Atmosphären an oberirdischen, zylindrischen Schwimmdachtanks für Mineralölprodukte ausgewählt. Diese Problemstellung wurde als offenes Forschungsproblem an die Universität von Industrieverbänden herangetragen. Da es sich um die Untersuchung von Modifikationsnotwendigkeiten an bereits bestehenden, genehmigten Anlagen handelt, konnte diese Problemstellung nicht qualitativ oder nur durch Expertenentscheidung gelöst werden. Zur Bearbeitung mussten Freisetzungsmessungen und CFD-Ausbreitungssimulationen durchgeführt werden. Auf Grund der Vielzahl möglicher Tankausstattungen, Dichtungskonstruktionen, möglicher Lagerstoffe und Umgebungsbedingungen war es erforderlich, sowohl für Ausbreitungsanalysen als auch für die Risikoanalysen umfassende Unsicherheits- bzw. Toleranzbetrachtungen durchzuführen.

Die zu beurteilenden Risiken sollten auftragsbedingt auch Abweichungen vom bestimmungsgemäßen Betrieb einschließen, weswegen auch Schäden und Fehlbetriebszustände aufgenommen werden mussten. Daher ist das Demonstrationsbeispiel sehr gut geeignet zu zeigen, dass insbesondere für Sonderfragestellungen eine Quantifizierung der Risiken sowie eine Quantifizierung von Vertrauensbereichen unerlässlich und auch sehr sinnvoll sind.

Ziel dieser Habilitationsschrift ist somit auch die Empfehlung, den Weg vom Übergang der Verwendung rein qualitativer Verfahren in Richtung quantitativer Verfahren in der Anlagen-

sicherheit grundsätzlich etwas weiterzugehen und stärker in den Fokus zu stellen. Durch die Verarbeitung quantitativer Informationen wird zunächst erreicht, dass eine vollständigere Informationsverwendung und Datenerhebung vorliegt. Durch die zusätzliche Bestimmung von Fehler- und Vertrauensbereichen werden die inhärenten Unsicherheitsspannen risikobehafteter Verfahren bzw. Anlagen überhaupt erst sichtbar und der Entscheidungsfindung zugänglich. Die Verwendung von Bayesschen Netzen kann sich auf diesem Wege als besonders vorteilhaft erweisen, da mit dem Netz selbst eine echte Kausalstruktur mit Informationen über Ursache und Wirkung vorliegt und in den gespeicherten Initialisierungsdaten die volle quantitative Information gespeichert ist. Nicht nur weil sie zudem echte übergeordnete Strukturen zu Ereignis- oder Fehlerbäumen darstellen, sondern auch wegen ihrer Lernfähigkeit und der Möglichkeit zur Untersuchung von kausalen Inferenzen, beinhalten sie für die Zwecke der Anlagensicherheit hohes ungenutztes Potential. Die umfassenden Möglichkeiten, in Bayesschen Netzen Eingangsdaten hoher Unsicherheit wie z. B. Expertendaten und Expertenmeinungen, explizit zeitabhängige Daten und Daten aus Datenschätzungen optimal verarbeiten zu können, sind unter den Verfahren der quantitativen Risikoanalysen ein Alleinstellungsmerkmal.

1.3. Gliederung der Habilitationsschrift

Im Anschluss an die Einleitung wird in Kapitel 2 ein Überblick über den Stand von Risikoanalysen der Prozess- und Anlagensicherheit in Deutschland gegeben. Hierzu werden zunächst wichtige Begriffsdefinitionen genannt und unterschiedliche Merkmale von Risikoanalysen unterschieden. Anschließend folgt eine kurze Präsentation zum Ablauf häufig angewendeter Verfahren der Risikoanalyse. Zentrales Anliegen dieses Kapitels ist nicht nur die Angabe des aktuellen Standes der Verwendung von Verfahren zur Risikoanalyse, sondern auch die Erörterung, wo ungenutztes Potential in der Anwendung liegt und welche Vor- und Nachteile einzelne Verfahren bei der Erschließung dieses Potentials mit sich führen.

Im Kapitel 3 werden Bayessche Netze als ein mögliches Verfahren der quantitativen Risikoanalyse näher vorgestellt. Beginnend mit einem Überblick zur Herkunft und Verwendung Bayesscher Netze soll zunächst analytisch vorgeführt werden, wie Bayessche Netze aufgestellt und initialisiert werden und auch, wie nach dem Eintritt von Evidenzen Wahrscheinlichkeiten in Bayesschen Netzen propagieren und der Netzzustand aktualisiert werden kann. Zu allen Demonstrationen wird anschließend eine rezeptartige Durchführungsübersicht angegeben. Anschließend sollen Bayessche Netze detaillierter mit alternativen Verfahren, wie der Fehlerbaumanalyse verglichen werden, um insbesondere die Vorzüge von Bayesschen Netzen bei der Verarbeitung von Systemunkenntnis zu demonstrieren. Für die Verarbeitung von Expertenwissen werden in dieser Arbeit sogenannte Fuzzy-Bayessche Netze verwendet. Die Kopplung mit Fuzzy-Logik wird ebenso an einfachen Beispielen zunächst analytisch vorgeführt. Abschließend folgt eine Übersicht zu kommerziellen und nichtkommerziellen Softwarepaketen, welche für die Erstellung und Verwendung Bayesscher Netze benutzt werden könnten.

Kapitel 4 setzt sich detailliert mit Modell- und Datenunsicherheiten, insbesondere bei der Durchführung von CFD-Simulationen, auseinander. Es werden auf aktuellem Stand der Forschung mögliche Fehlereinteilungen angegeben und auch, wie alle Formen von Unsicherheiten in CFD-Simulationen durch Verteilungsdichtefunktionen oder Fuzzy-Intervalle berücksichtigt werden könnten.

Aufgeführt werden Sampling-Verfahren wie Monte-Carlo- bzw. Latin-Hypercube-Verfahren, Analysen mittels Möglichkeitstheorie bis hin zur Aufstellung und Untersuchung von Ersatzmodellen, sogenannter Response-Surface-Modelle.

Letztere bilden einen weiteren Schwerpunkt in dieser Arbeit, da mittels polynomieller Chaostwicklung von Zufallsgrößen gezeigt werden kann, dass viele Zufallsgrößen, welche selbst wiederum Funktionen anderer Zufallsgrößen sind, im Prinzip beliebig genau durch multivariante Polynome approximiert werden können.

1. Einordnung, Ziele und Gliederung der Habilitationsschrift

Wie diese Ersatzmodelle für Ausbreitungsbetrachtungen angewendet werden können, wird in Kapitel 5 demonstriert. Dort werden zunächst Response-Surface-Modelle für einfache Leicht- und Schwergasausbreitungen aufgestellt und Monte-Carlo-Analysen unterzogen. Für die einfache Schwergasausbreitungen wird das Modell von Britter-McQuaid und für die einfachen Leichtgasausbreitungen ein Gaußsches Schadstoffausbreitungsmodell zu Grunde gelegt. Letztere entsprechen in etwa dem aktuellen Stand der Technik in Deutschland. Ziel ist die praktische Demonstration der Vorgehensweise. Anschließend erfolgt die Demonstration an einer CFD-Simulationen zu Leicht- und Schwergasausbreitungen, wobei die Ausbreitungsanalysen das industrierelevante Anwendungsbeispiel einschließen. Kapitel 6 beinhaltet die detaillierte Darstellung des industrierelevanten Anwendungsproblems und die Übertragung der theoretischen Konzepte zur Lösung der aufgeworfenen Problemstellungen. Da die Ergebnisse ebenso in zwei sehr umfassenden deutschsprachigen Forschungsberichten veröffentlicht wurden, werden in dem Kapitel nicht für das unmittelbare Verständnis erforderliche Zwischenergebnisse mit entsprechendem Verweis verkürzt oder im Ergebnis übernommen. Das Kapitel 7 fasst die Ergebnisse der Habilitationsschrift zusammen.

2. Risiko und Risikoanalysen

Wie bereits in der Einleitung angegeben, erfolgt die Betrachtung von Gefährdungen von Anlagen, welche der Störfall-Verordnung [20] unterliegen, überwiegend mit Verfahren der qualitativen Risikoanalyse. Im Zuge dieser Betrachtungen ist ein Sicherheitsbericht (§§ 7, 10, 23, 48a, 58a BImSchG, konkretisiert in §9 Störfall-Verordnung - 12. BImSchV) anzufertigen, aus welchem die umfassende Ermittlung und Adäquatheit der ergriffenen Maßnahmen zur Begrenzung möglicher Auswirkungen auf Mensch und Umwelt ersichtlich werden. Die hierzu verwendeten Verfahren kommen innerhalb einer Gefährdungs- bzw. Risikoanalyse zur Anwendung. Hierbei werden systematisch Gefährdungen und denkbare Auswirkungen (Risiken) identifiziert und semiquantitativ bewertet. Eine quantitative Bestimmung von Risiken ist jedoch nicht vorgeschrieben.

Gefährdungsbeurteilungen mit großer Überlappung in den Zielstellungen sind gesetzlich auch in anderen Bereichen gefordert, beispielsweise gemäß § 5 ArbSchG oder § 19 ChemG. Hervorhebenswert ist, dass bei allen genannten Bereichen nicht im Detail festgelegt ist, wie der Nachweis zur Erfüllung der Anforderungen zu erfolgen hat. Ebenso wurde darauf verzichtet, Grenzkriterien zu definieren, ab wann ein Mindestmaß an Schutz als erreicht betrachtet werden kann.

In anderen Ländern, insbesondere auch in anderen Mitgliedsstaaten der Europäischen Union, werden ermittelte Risiken mit gesellschaftlich akzeptierten Beurteilungsmaßstäben verglichen, um die Sicherheit z. B. einer Anlage zu beurteilen. Auf die Vorteile dieser Vorgehensweise soll in diesem Kapitel näher eingegangen werden. Zunächst sollen hierzu Begriffe definiert werden, die im Kontext von Risikoanalysen benötigt aber in vielen Quellen oftmals unpräzise angegeben werden.

Risikoanalysen von Anlagen und Prozessen sind des Weiteren Bestandteil des Risikomanagements eines Unternehmens. Daher soll auch kurz angegeben werden, wie sich die Verfahren der Risikoanalyse in diesem Konstrukt einbetten. Dadurch soll veranschaulicht werden, was eine Risikoanalyse auf dem Stand der Technik ist und welche Vorteile von einer quantitativen Analyse zu erwarten sind. Häufig verwendete Verfahren der Risikoanalyse, ihre Vor- und Nachteile und auch ihre Limitierungen sollen kurz beschrieben werden. Ein Ziel hierbei ist die Begründung der Auswahl Bayesscher Netze als Verfahren der quantitativen Risikoanalyse für diese Arbeit. Ein weiteres Ziel ist die Diskussion, weshalb ein Verharren auf dem Stand rein qualitativer Verfahren zukünftig nicht zielführend ist.

Zusammenfassung: In diesem Kapitel sollen wichtige Begriffe im Kontext von Risikoanalysen definiert werden. Der Stand der Technik bei der Betrachtung von Gefährdungen von Anlagen, welche der Störfall-Verordnung unterliegen, wird angegeben. Ziel ist die Herausarbeitung von ungenutztem Potential bei der Durchführung von Risikoanalysen und die Diskussion, unter welchen Bedingungen sich der Mehraufwand einer quantitativen Bestimmung von Risiken als sinnvoll erweisen kann. Ebenso erfolgt eine Auseinandersetzung mit hierfür geeigneten Verfahren.

2.1. Gefährdungen, Risiken und Gefahren

Unter einer Gefährdung versteht der Autor dieser Arbeit eine Konstellation, bei der ein schützenswertes Gut durch ein Ereignis einen Schaden erlangen könnte. Gemäß [26, 57] werden darunter auch potentielle Schadensquellen verstanden. Zunächst bleiben hierbei sowohl die

Eintrittswahrscheinlichkeit des Ereignisses als auch die Wahrscheinlichkeit, dass dieses Ereignis tatsächlich einen Schaden auslöst, unbestimmt. Dies könnte auch als qualitatives Risiko bezeichnet werden. Innerhalb von Gefährdungsbeurteilungen, gleichgültig aus welchem Gesetz sich die Anfertigungsvorschrift ableitet, wird ein Prozess der systematischen Ermittlung und Bewertung (möglichst¹) aller relevanten Gefährdungen, die von einer Anlage oder einer Tätigkeit auf Mensch, Tiere, Sachwerten oder auf die Umwelt ausgehen können, verstanden. Im Zuge der Gefährdungsbeurteilung muss dargelegt werden, dass die getroffenen Sicherheitsmaßnahmen mögliche nachteilige Auswirkungen adäquat verhindern oder mildern. Auch wenn es keine Grenzkriterien für eine absolute Beurteilung des Erreichungsgrades gibt, so ist im Allgemeinen eine Gefährdungsbeurteilung juristisch nachvollziehbar darzulegen. Ebenso ist, je nach konkretisierender Verordnung zum Gesetz, katalogisiert, welche Gefährdungen mindestens einzubeziehen sind. Schwierig ist hierbei, dass eine Gefährdungsbeurteilung begrifflich nicht bei den Gefährdungen verweilen kann. Um eine Maßnahme zur Begegnung einer Gefährdung einleiten und den Nachweis der Beherrschung erbringen zu können, müssen praktisch immer sowohl die Eintrittswahrscheinlichkeit des Ereignisses als auch die Form des Schadens mindestens näherungsweise beschrieben werden. Dann fallen Gefährdung mit Risiken begrifflich zusammen, die sich mathematisch definieren lassen. Die eigentliche Gefährdungsanalyse wird dann zu einer Risikoanalyse. Zum Zwecke des besseren Verständnisses des folgenden Textes sollen daher einige Begriffe näher betrachtet bzw. definiert werden.

2.1.1. Risiko und Grenzkriterio

Risiko

Typische Risikodefinitionen, wie sie in vielen Abhandlungen angegeben werden, lauten: das Risiko ist das Produkt aus Eintrittswahrscheinlichkeit P und Konsequenz K . Bisweilen finden sich auch verkürzte Darstellungen, in denen über einen nicht näher spezifizierten Index summiert wird: $R = \sum_i P_i K_i$ [58]. Für praktische Zwecke sowie für Verständnisfragen sind diese Definitionen noch zu ungenau.

Es ist nicht deutlich, wovon eine Eintrittswahrscheinlichkeit erhoben wird und was als Konsequenz aufzufassen ist. Durch die Summation lässt sich zwar darstellen, dass Einzelrisiken zu einem Gesamtrisiko zusammengefasst werden, dennoch ist offen, ob die Summe für die betrachteten Einzelrisiken überhaupt sinnvoll erklärt werden kann. Andere Ansätze [59, 60] beschreiben das Risiko als eine Art vektorielle Größe $R = R(A, C, P)$ bzw. $R = R(A, C, U, P, K)$, wobei A ein mögliches Ereignis, C eine mögliche Konsequenz, U eine Unsicherheitsanalyse, P die Eintrittswahrscheinlichkeit und K eine Art Hintergrundinformation zu U und P darstellen sollen. Dadurch ist, außer ein Aufblähen der Begrifflichkeiten, wenig gewonnen.

In Risikoanalysen werden Ereignisse betrachtet, die im mathematischen Sinne als Elemente A_i eines Ereignisfeldes Σ (innerhalb eines wohldefinierten Wahrscheinlichkeitsraumes) aufgefasst werden können. Für diese soll es sowohl eine Bewertung bezüglich eines Merkmals, als auch eine Eintrittswahrscheinlichkeit geben:

$$\forall A_i \in \Sigma \exists P(A_i) \rightarrow [0, 1] \text{ und } \forall A_i \exists K_M(A_i). \quad (2.1)$$

Das Risiko R ist dann eine Zufallsvariable, welche bezogen auf die Merkmaleigenschaft M den folgenden Wert annimmt:

$$R(M) = P(A_i)K_M(A_i). \quad (2.2)$$

Typische Merkmaleigenschaften sind monetärer Verlust, Nicht-Verfügbarkeit oder Personenschaden. Das Risiko R trägt dann die Einheit der Merkmaleigenschaft, etwa Euro, Stunden oder

¹In üblichen Texten gibt es diese Relativierung nicht. Allerdings meint der Autor, dass es unbekannte Risiken geben kann, welche sich bei Kenntnis als relevant erweisen würden.

Anzahl Verletzte bzw. Tote. Sei A etwa das Versagen eines Sicherheitsventils, so gibt $P(A)$ die Wahrscheinlichkeit dafür an und $K_M(A)$ die Konsequenz. Es könnte sein, dass jemand verletzt wird oder daraus ein monetärer Schaden einer gewissen Höhe und/oder ein Produktionsausfall resultiert. In diesem Sinne kann es sein, dass ein Ereignis eine Serie relevanter Konsequenzen auslöst, welche verschiedene Einzelrisiken darstellen. Diese Einzelrisiken können jedoch nicht addiert werden, da sie unterschiedliche Einheiten besitzen.

Selbst bei gleichen Einheiten und stochastisch unabhängigen Ereignissen können Risiken nicht einfach addiert werden. Hierzu betrachte man die Freisetzung zweier toxischer Gase ($A_{1,2}$ = Freisetzung von Gas 1 oder 2) und die damit verbundene gesundheitliche Einschränkung als Konsequenz $K_G(A_{1,2})$. Beide Freisetzungen mögen zudem stochastisch unabhängige Ereignisse sein. Damit wären $R_1 = P(A_1)K_G(A_1)$ und $R_2 = P(A_2)K_G(A_2)$ die beiden mit der jeweiligen Freisetzung verbundenen Einzelrisiken. Das Gesamtrisiko bei der Nutzung beider Gase kann die Summe beider Risiken sein, muss es jedoch nicht. Toxizitäten können auch unter- oder überadditiv sein. Wird angenommen, dass beide Gase zusammen eine höhere Toxizität im Organismus auslösen, als jedes Gas einzeln bei der Konzentrationssumme (Überadditivität der Toxizität), so wäre die wahre Konsequenz $K_G(A_1 \cap A_2)$ von $K_G(A_1) + K_G(A_2)$ verschieden. Das wahre Risiko wäre dann $P(A_1)K_G(A_1) + P(A_2)K_G(A_2) + P(A_1)P(A_2)K_G(A_1 \cap A_2)$. Sind die Freisetzungen der Gase nicht stochastisch unabhängig, so müssten zusätzlich die Abhängigkeiten (und damit die Eintittswahrscheinlichkeiten) gemäß der Abhängigkeit spezifiziert werden. Wird beispielsweise angenommen, dass es ein Ereignis A_3 gäbe, was mit der Wahrscheinlichkeit $P(A_1|A_3)$ eine Freisetzung von Gas 1 und mit der Wahrscheinlichkeit $P(A_2|A_3)$ eine Freisetzung von Gas 2 zusätzlich auslösen kann, dann würde für das Risiko folgen:

$$\begin{aligned} R &= P(A_1)K_G(A_1) + P(A_2)K_G(A_2) + P(A_1)P(A_2)K_G(A_1 \cap A_2) \\ &+ P(A_1|A_3)K_G(A_1) + P(A_2|A_3)K_G(A_2) + P(A_1 \cap A_2|A_3)K_G(A_1 \cap A_2) \end{aligned} \quad (2.3)$$

Bereits hier ist erkennbar, dass für die Aggregation von Risiken Verfahren der Risikoanalyse benötigt werden, welche über einfache Summationen eventuell bekannter Einzelrisiken ($P(A_1)K_G(A_1) + P(A_2)K_G(A_2)$) hinausgehen². Es werden hierfür im Allgemeinen sowohl Ereignisketten als auch zusätzliche (bedingte) Wahrscheinlichkeiten benötigt. Die dadurch ermittelten Gesamtrisiken mit Blick auf eine Konsequenz können dann aber einer Bewertung unterzogen werden.

In einigen Mitgliedsstaaten der Europäischen Union, etwa in den Niederlanden oder Großbritannien (ehemaliges Mitglied) als auch beispielsweise in der Schweiz, werden gesellschaftlich akzeptierte Beurteilungsmaßstäbe zur Bewertung von Anlagen in Genehmigungsverfahren oder für die Flächennutzungsplanung festgeschrieben und angewandt. Unterschiede gibt es bisweilen in der Verbindlichkeit und in der Rechtswirkung [19]. In den Niederlanden und in England wurden hierzu Risikogrenzwerte sowohl für das Individual- als auch für das Gruppenrisiko

²In ROGA [61], einer Methode der risikoorientierten Gefahrenanalyse zur Erfüllung der Anforderungen der Störfall-Verordnung (entwickelt vom TÜV), werden ordinalskalierte Werte addiert. Störfallverhindernden Maßnahmen werden Zuverlässigkeitsklassen und Gefahrenquellen Risikoklassen zugeordnet. Die Summe der Risikoklassen muss dann kleiner als die oder gleich der Summe der Zuverlässigkeitsklassen sein. Man kann ordinalskalierte Größen zwar addieren (transfinite Arithmetik), dennoch kann die Summe in Bezug auf den Kontext sinnlos sein. Bezogen auf die risikoorientierte Gefahrenanalyse (ROGA) könnte man für eine Note 1 zwei Sicherheitspunkte und für eine Note 2 einen Sicherheitspunkt vergeben und die Entscheidung mit dem Notendurchschnitt bei einer alternativen ordinalen Bewertung vergleichen. Die schlechteren Noten bekommen Risikopunkte: die Note 3 bekommt einen und die Noten 4, 5, 6 zwei Risikopunkte. Würde bei dieser Kategorisierung eine 6 (2 Risikopunkte) vergeben, so wären mindestens 2 Sicherheitspunkte zur Kompensation nötig. Beispielsweise zwei Mal die Note 2. Der Durchschnitt ist aber nun $\frac{10}{3}$ und entspricht eigentlich immer noch einer Schadensklasse. Holt man sich die beiden Sicherheitspunkte durch eine Note 1, so würde sich trotz „höherer Sicherheitsklasse“ der Durchschnitt auf $\frac{7}{2}$ verschlechtern. Nur ist dies durch die willkürliche Intervalleinteilung verborgen. ROGA kann in diesem Sinne hinreichende Standards ermitteln, muss es aber nicht. Sinnvoller wäre es, die Risiken und Unsicherheiten kardinal zu erheben.

schützenswerter Objekte verbindlich festgelegt [19]. In der Schweiz werden gemäß Störfallverordnung [62] Einschätzungen der Wahrscheinlichkeit für Störfallbetriebe, Bahnanlagen und weitere gefordert. Hierzu finden sich oft sogenannte Wahrscheinlichkeits-Ausmaß-Diagramme (W/A-Diagramme), welche im Prinzip Risikomatrizen darstellen, jedoch mit einem höheren Detaillierungsgrad. Der Ursprung der Risikogrenzwerte sowie auch die Gründe für deren Verwendung liegt oftmals in breit angelegten gesellschaftlichen Diskursen.

2.1.2. Besondere Risiken

Gefahr

Unter einer Gefahr wird überwiegend eine Sachlage verstanden, die bei ungehindertem Fortlaufen zu einem Schaden führen kann. Viele „Definitionen“ sind inhaltlich ähnlich, zeigen hohe Verwandtschaft zum Risikobegriff, ohne diesen jedoch explizit zu verwenden. Etwas geeigneter erscheint die Aussage, dass eine Gefahr ein Risiko oberhalb des Grenzkrisikos ist. Wenn jedoch kein Grenzkrisiko definiert (festgelegt) ist, so bleibt es im Ermessensspielraum des Betrachters, ob nur ein Risiko oder eine Gefahr vorliegt³.

Restrisiko und unbekanntes Risiko

Der Begriff des Restrisikos wird in der Fachliteratur ebenso nicht einheitlich definiert. Sein Ursprung findet sich in der Kernkraftindustrie, bei der alle Risiken für schwere Atomunfälle mit einer Wahrscheinlichkeit von $< 10^{-4}$ pro Jahr als Restrisiko angesehen wurden [63]. Dies bedeutet ebenso, dass damit bei Weitem nicht alle Risiken dieser Technologie bekannt waren und sind, geschweige denn quantifiziert wurden. Oftmals wird dennoch angenommen, dass mit dem Begriff Restrisiko allgemein ein kleines Risiko gemeint sei. Es darf jedoch nicht außer Acht gelassen werden, dass es mit der Verwendung einer Anlage immer auch unbekanntes Risiken geben kann. Diese sind prinzipiell nicht quantifiziert und müssen daher insbesondere auch nicht klein sein. Inwieweit unbekanntes Risiken im Restrisiko enthalten sind, wird kontrovers diskutiert. Der Autor ist der Ansicht, dass das Restrisiko im obigen Sinne sinnvoll definierbar ist, aber nur eine untere Schranke für das Risiko einer Anlage (zu der es bestimmt wurde) darstellen kann.

2.1.3. Skalenniveau von Risiken

Häufig verwendete Verfahren der Risikoanalyse unterscheiden sich darin, auf welchem Skalenniveau Risiken erhoben werden. Im Sprachbereich der Gefährdung könnte auch von **qualitativen Risiken** gesprochen werden, bei denen Risiken nur auf einer Nominalskala erhoben werden. Dann sind mögliche Ereignisse (Sachlagen) und mögliche Konsequenzen in verbaler Form bekannt. Beides ist zunächst aber nicht näher quantifiziert, insbesondere auch nicht ordinal einteilbar (d.h. mit einer Ordnungsrelation versehen). Damit können qualitative Risiken nicht der Größe nach sortiert werden. **Semiquantitative Risikoanalysen** erheben Risiken auf sogenannter Ordinalskala, womit die Risiken der Größe nach sortiert werden können. Damit ist eine Risikopriorisierung möglich, ebenso eine Sortierung nach Maßnahme erforderlich bzw. nicht erforderlich. Hierbei werden zur Bewertung üblicherweise Risikomatrizen eingesetzt. Diese Einschätzungen sind oft sehr grob gerastert und unsicherheitsbehaftet. Viele Verfahren der qualitativen Risikoanalyse, welche in der Anlagensicherheit angewendet werden, erheben Risiken auf diesem Skalenniveau⁴. Anzumerken ist, dass damit nur Einzelrisiken oder ein bereits

³Psychologisch betrachtet kann man jedes Risiko durch geschickte Rhetorik auch gefährlich erscheinen lassen, was oft in politischen und öffentlichen Debatten oder Talkshows reichlich genutzt wird. Dies ist ein sehr deutlicher Nachteil fehlender Quantifizierung.

⁴Obwohl in vielen Verfahren Risiken semiquantitativ erhoben werden, bezeichnet man diese Verfahren (irreführend) als qualitative Verfahren.

ermitteltes Gesamtrisiko bewertet werden kann, da man ordinalskalierte Werte nicht einfach summieren kann. **Quantitative Risikoerhebungen** erheben Risiken auf einer Kardinalskala. Bei der Kardinalskala handelt es sich um eine metrische Skala, bei der sowohl eine Ordnungsrelation existiert, als auch der Abstand interpretierbar ist. Damit ist die Reihenfolge der Risiken festgelegt und die Größe des Abstandes zwischen zwei Risiken lässt sich sachlich begründen. Eine quantitative Risikoanalyse verarbeitet das maximal bereitstellbare Wissen zu den Risiken und gibt eine zur Genauigkeit der Eingangsdaten passende Bewertung. Unterschiede gibt es in der Güte und Eignung verschiedener quantitativer Risikoanalysen. Probleme bestehen dann, wenn eine schlechte quantitative Risikoanalyse eine höhere Genauigkeit gegenüber einer semiquantitativen Risikoerhebung nur vortäuscht.

2.1.4. Illustrationen von Risiken

Typische Visualisierungen von Risiken, die für die Anfertigung von Gefährdungsbeurteilungen häufig herangezogen werden, sind Risikomatrizen, FN-Diagramme sowie auch Darstellungen mit Risikokurven (Kurven gleichen spezifischen Risikos). Abbildung 2.1 stellt diese graphisch dar. Risikomatrizen stellen Risiken semi-quantitativ mit bewerteten Matrixfeldern dar. Zur

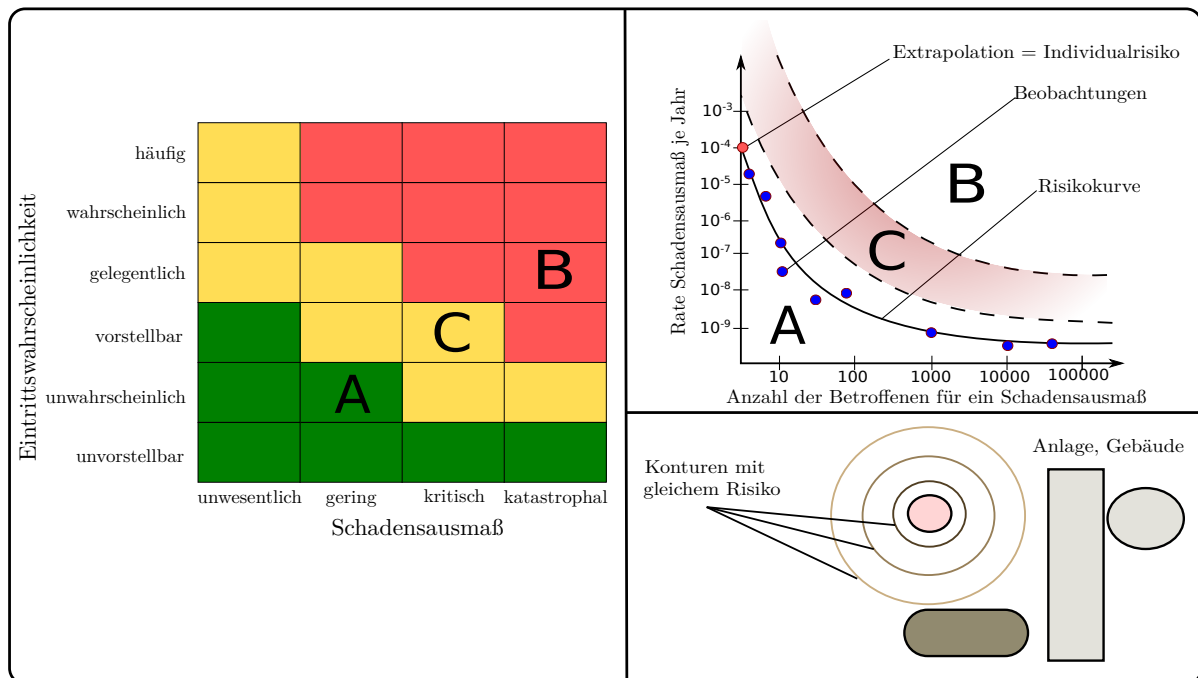


Abbildung 2.1: Links: Darstellung einer Risikomatrix gemäß DIN EN 62061 [64] mit bewerteten Matrixfeldern, rechts oben: Darstellung eines FN-Diagrammes, rechts unten: Risikodarstellung mittels Isokonturen um eine fiktive Anlage.

Verwendung dieser Matrizen muss das verwendete Verfahren zur Risikoanalyse es ermöglichen, eine Zuordnung innerhalb der Rasterung beider Achsen treffen zu können. Dies bedeutet, dass die beiden Parameter Eintrittswahrscheinlichkeit und Schadensausmaß (bezogen auf ein Merkmal) definiert sind. Die Ungenauigkeit bzw. die Auslegbarkeit der linguistischen Begriffe stellt hier auch die Größenordnung der Anwendungsunsicherheit dar. Für viele Gefährdungsbeurteilungen, insbesondere zur Sicherheit am Arbeitsplatz oder für viele andere Risikomanagementprozesse, ist die erreichte Genauigkeit und damit das Sicherheitsniveau oft ausreichend.

In FN-Diagrammen werden beobachtete Häufigkeiten F als Funktion der vom Merkmal M Betroffenen N graphisch dargestellt. Hierfür müssen hinreichend viele Realbeobachtungen (Datenpunkte) vorliegen, anhand derer durch geeignete Interpolation Risikographen ermittelt wer-

den. Hierfür werden oft Funktionen der Gestalt⁵ $R = FN^n$ mit $n > 1$ gefittet. Entlang der Risikographen kann das Individualrisiko und auch das Gruppenrisiko abgelesen werden. Das Individualrisiko gibt hierbei die Höhe des Risikos an, als Mitglied einer Population vom spezifizierten Schaden betroffen zu sein. Für die Bestimmung wird der Schnittpunkt zwischen Ordinate und der Risikokurve bestimmt. Es ist unerheblich, ob gleichzeitig weitere Personen betroffen sind. Es wird daher oftmals direkt als Häufigkeit angegeben, dass es bei einem Ereignis mindestens einen Betroffenen gibt. Das Gruppenrisiko oder auch Kollektivrisiko ist ein Risiko entlang der Risikokurve, dem eine größere Untermenge einer Population ausgesetzt ist. Beide bisher beschriebenen Darstellungsformen haben die Gemeinsamkeit, dass Teilbereiche *A* (grün) (akzeptables Risiko), *B* (rot) (nicht akzeptables Risiko) und *C* (gelb) (ALARP) unterschieden werden können. ALARP leitet sich von *as low as reasonably possible* ab. Eine risikobehaftete Situation mit der Bewertung ALARP kann noch toleriert werden, wenn der Zweck des Systems hinreichend wichtig für die Gesellschaft oder für das Unternehmen ist und alle sinnvollen Maßnahmen zur Risikoreduktion ausgeschöpft wurden. Dies kann z. B. eine Situation sein, bei der die Kosten für die weitere Verminderung des Risikos höher liegen als diejenigen, die bei Eintritt des auslösenden Ereignisses zu erwarten sind. So soll der höchste Grad an Sicherheit garantiert werden, der vernünftigerweise erreichbar ist. Je nach Merkmaleigenschaft des Schadensausmaßes kann es auch Sache des Unternehmers sein, Risiken im roten (inakzeptablen) Bereich einzugehen (z. B. finanzielle Risiken).

Für Störfallauswirkungsbetrachtungen werden bisweilen auch Linien gleichen Risikos (hier um eine fiktive Anlage) in eine Karte eingegeben. Solche Linien sind Niveaulinien für ein bestimmtes Maß eines spezifischen Risikos, beispielsweise einer bestimmten Wahrscheinlichkeit durch eine toxische Freisetzung einen irreversiblen Schaden zu erleiden oder einer bestimmten Wahrscheinlichkeit von einem Anlagenbruchstück nach einer Detonation getroffen und verletzt zu werden. Diese Visualisierungen bieten sich insbesondere für Abstands- und Flächennutzungsplanungen an.

In Abbildung 2.2 sollen die zuvor (im Abschnitt 2.1.2.) angegebenen Risikoarten illustriert werden. Der Abbildung kann entnommen werden, dass die Abgrenzung zwischen tolerablem Risiko

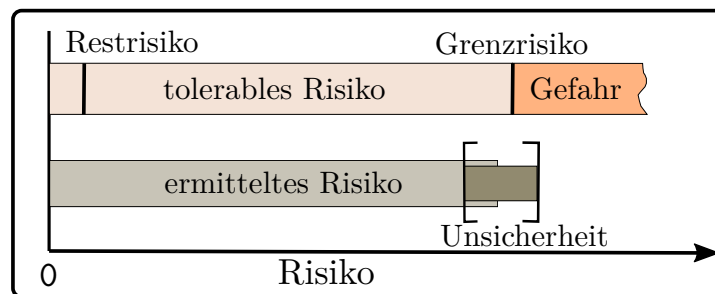


Abbildung 2.2: Illustration zu häufig verwendeten Risikoarten: Restrisiko, tolerables Risiko, Grenzrisiko und Gefahr.

und Gefahren ohne die Festlegung eines Grenzrisikos innerhalb der Auslegung der verwendeten linguistischen Begriffe verbleibt. Selbst wenn man auf den Begriff der Gefahr nicht zurückgreift, fehlt ein oberer Schwellenwert, bis zu dem ein Risiko als tolerabel angesehen werden kann. Bei fehlender Quantifizierung ist die Höhe des ermittelten bzw. geschätzten Risikos nur unsicher bekannt. Die Spannweite der unsicherheitsklassifizierenden rechteckigen Klammern ist unbekannt. Dies beschreibt die Ist-Situation qualitativer Risikoanalysen und den Stand der Technik. In Abbildung 2.2 wurde zudem angedeutet, dass bei fehlender Unsicherheitsquantifizierung Fehlschlüsse, selbst auf Basis der berücksichtigten Risiken, möglich sind. Das unbekannte Risiko wurde nicht eingezeichnet, weil die Ausdehnung entlang der Risikoachse nicht spezifiziert

⁵Der Exponent n wird auch Risikoaversionsfaktor [19] genannt. Für $n = 2$ muss die beobachtete Häufigkeit auf ein Hundertstel sinken, wenn die Anzahl der vom Schadensausmaß Betroffenen verzehnfacht wird.

werden kann.

Würde man eine quantitative Risikoanalyse durchführen, so wäre diese nur dann von Vorteil, wenn gleichzeitig ebenso der Bereich durch die unsicherheitsklassifizierenden rechteckigen Klammern mitbestimmt wird. Bei Festlegung eines Grenzkrisikos wäre somit eine gute Basis für eine objektive Beurteilung gegeben. Anzumerken ist, dass alle bestimmten Risiken (oder auch Risikosummen), unabhängig ob diese mit qualitativen Verfahren ordinal bewertet oder mit quantitativen Verfahren kardinal bestimmt wurden, nur die berücksichtigten Einzelrisiken abbilden. Die Vollständigkeit einer Risikoanalyse stellt ein hinzukommendes, eigenständiges Problem dar. In vielen Verfahren gibt es daher Strategien der Szenarienerkennung und Entwicklung. Aus Sicht des Autors ist daher die Durchführung einer quantitativen Risikoanalyse inklusive Unsicherheitsquantifizierung und der Darlegung aller einbezogenen Kausalzusammenhänge optimal. Durch Kenntnisverbesserung ließen sich dann möglicherweise Unsicherheitsspannen reduzieren oder Ereignisketten hinzunehmen. Ebenso stehen die gewonnenen Daten für Sicherheitsbetrachtungen an anderen Systemen mit anlagentechnischer oder verfahrenstechnischer Überlappung bereit. Weitere Vorteile einer quantitativen Risikoanalyse und der Verwendung von Risikogrenzwerten soll die folgende Aufzählung geben:

- Schaffung von Rechtssicherheit, ab wann ein Risiko als hinreichend reduziert angesehen werden kann,
- einheitlicher Umgang mit Risiken aus unterschiedlichen Gefährdungen und gesellschaftlichen Bereichen,
- Wirksamkeitsnachweis von risikoreduzierenden Maßnahmen,
- Schaffung einer Diskussionsgrundlage zu allen Modellen und Annahmen,
- Sichtbarmachung von Risikounterschieden.

2.1.5. Beispiele für Gefährdungen in der Anlagensicherheit

Aufgrund der Vielzahl möglicher Gefährdungen soll hier nur eine kleine Auswahl angegeben werden, welche jedoch wesentliche Gefährdungen und Auswirkungen umfassen sollte. Innerhalb von Anlagen, welche der Störfallverordnung unterliegen, gehen die größten Gefahren von Stoff- und Energiefreisetzung aus, welche die Gesundheit der Mitarbeiter und von Anwohnern aber auch Tiere, Sachwerte oder die Umwelt gefährden können. Hierzu zählen unter anderem Emissionen entzündlicher oder toxischer Gase, Brände und Explosionen. Im gewählten industrierelevanten Anwendungsbeispiel in Kapitel 6 sind diese Gefährdungen alle enthalten. Der Schwerpunkt der Betrachtungen liegt jedoch bei der Bestimmung explosionsgefährdeter Bereiche.

Für die Abschätzung von Druckwellen oder Wärmestrahlungen und deren Auswirkungen sowie für die Ausbreitung und Wirkung von gasförmigen Freisetzungen gibt es zahlreiche spezifische Modelle mit eigenen Unsicherheiten, zum Teil aber auch gemeinsame Beurteilungskonzepte. Eine Übersicht hierzu gibt [28].

Diese Beurteilungskonzepte erlauben eine Zuordnung zwischen physikalischen Modellen zur Abschätzung einer Schadensintensität wie Konzentrationsfelder, Wärmestrahlungen aus Bränden oder Impulse von umherfliegenden Bruchstücken und den dadurch verursachten Schadwirkungen.

Ein Beispiel für letztere sind Probit-Beziehungen, welche im Wesentlichen auf der Beobachtung beruhen, dass Reiz (Intensität) und Response (Schadwirkung) näherungsweise durch reiz- und artspezifische logarithmische Normalverteilungen beschrieben werden können [65].

Ausgangspunkt ist die Verteilungsfunktion der Lognormalverteilung ($\lambda > 0$):

$$P(X \leq \lambda_0) = \int_0^{\lambda_0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma\lambda} e^{-\frac{(\ln(\lambda)-\mu)^2}{2\sigma^2}} d\lambda, \quad (2.4)$$

mit der Transformation $x = \ln(\lambda) \Rightarrow dx = \frac{1}{\lambda}d\lambda$, $x \in (-\infty, \ln(\lambda_0)]$ folgt zunächst:

$$P(X \leq \ln(\lambda_0)) = \int_{-\infty}^{\ln(\lambda_0)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx. \quad (2.5)$$

Durch eine zweite Transformation $u = \frac{x-\mu}{\sigma} \Rightarrow du = \frac{1}{\sigma}dx$, $u \in (-\infty, \frac{\ln(\lambda_0)-\mu}{\sigma}]$ findet man nun:

$$P(X \leq \frac{\ln(\lambda_0) - \mu}{\sigma}) = \int_{-\infty}^{\frac{\ln(\lambda_0)-\mu}{\sigma}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{u^2}{2}} du \equiv \int_{-\infty}^{u_0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{u^2}{2}} du. \quad (2.6)$$

Das darin enthaltene Integral (2.6) ist für weite Bereiche der oberen Integrationsgrenze tabelliert. Mit $P = P(u_0)$ und bekanntem σ und μ hängt P nur von λ_0 ab:

$$u_0 = \frac{\ln(\lambda_0) - \mu}{\sigma}, \quad \text{z. B. } u_0 = 0 \Rightarrow P = \frac{1}{2}, \quad \text{bzw. } u_0 \geq 0 \Rightarrow P \geq \frac{1}{2}. \quad (2.7)$$

Für $P < \frac{1}{2}$ würde $u_0 < 0$ sein, weswegen üblicherweise in Probittabellen eine Verschiebung um 5 Einheiten $Y = u_0 + 5$ vorgenommen wird:

$$Y = \frac{1}{\sigma} \ln(\lambda_0) - \frac{\mu}{\sigma} + 5 = mx + n, \quad \text{mit: } \ln(\lambda_0) = x, \quad \frac{1}{\sigma} = m, \quad -\frac{\mu}{\sigma} + 5 = n \quad (2.8)$$

Die letzte Darstellung als Geradengleichung wird auch Probitrelation genannt. Aus der Darstellung $Y = Y(\ln(\lambda))$ können die wichtigen Verteilungsparameter σ und μ durch lineare Regression bestimmt werden. Hierzu stellt man die Wahrscheinlichkeit aus Realbeobachtungen in Abhängigkeit des Logarithmus der Intensität dar. Wenn der Zusammenhang näherungsweise logarithmisch normalverteilt ist, so sollten die Beobachtungen auch näherungsweise auf einer Geraden liegen.

Bemerkungen zu Probitrelationen

- Probit-Beziehungen sind zu zahlreichen Reiz-Response oder Dosis-Wirkungs-Beziehungen tabelliert. Beispiele sind Probit-Beziehungen zu Verletzungen durch umherfliegende Bruchstücke (abhängig vom Impuls), Tod, 1., 2., und 3. Verbrennungsgrad (abhängig von Expositionszeit/-Intensität), Tod durch Körpertranslation (abhängig vom Impuls), Trommelfellverletzung durch Überdruck (abhängig vom Überdruck) bis hin zu verschiedenen Schweregraden als Konsequenz der Inhalation toxischer Gase [19].
- Probit-Beziehungen werden unter anderem auch in den Niederlanden, Großbritannien, Schweiz und in den USA eingesetzt.
- Problematisch an diesem Konzept ist jedoch, dass zu ein und derselben Dosis-Wirkungs-Beziehung oftmals verschiedene Probit-Relationen publiziert sind, die zu extrem verschiedenen Bewertungsqualitäten führen können [19]. Dennoch stellen solche Relationen eine Schnittstelle zwischen intensitätsbestimmenden Modellen (beispielsweise Ausbreitungsmodellen, welche ein skalares Konzentrationsfeld ermitteln) und möglichen Konsequenzen dar.
- Die weiter oben angegebenen Risikoniveaukurven in Abbildung 2.1 können dadurch gewonnen werden, dass mit den intensitätsbestimmenden Modellen die ortsabhängige Intensität (Strahlungsintensität, Druck, Konzentration) und mit dem Bewertungsmodell, etwa Probit-Relationen, das zugeordnete Risiko berechnet wird.

Abseits des Probit-Konzeptes gibt es bei vielen gasförmigen Freisetzungen zulässige Beurteilungswerte. Hiervon haben gegenwärtig die Acute Exposure Guideline Levels (AEGL)-Werte

[66] zur Beschreibung einer Gefahrensituation den höchsten Stellenwert, da hinter der Bestimmung dieser Werte wissenschaftlich fundierte Ableitungskriterien vereinbart sind. AEGL-Werte sind Spitzenkonzentrationswerte von Schadstoffen, mit denen Auswirkungen einer Freisetzung auf die Allgemeinbevölkerung beschrieben werden soll. Daher sind insbesondere auch empfindliche Personengruppen explizit eingeschlossen. Die Werte werden als Referenzwerte für die Störfallplanung sowie für Präventionproblemstellungen genutzt. Innerhalb des AEGL-Konzeptes unterscheidet man 3 Schweregrade mit leichten, reversiblen oder irreversiblen Schadenserwartungen für die Gesundheit nach unterschiedlichen Expositionszeiträumen von 10 Minuten, 30 Minuten, 1 Stunde, 4 Stunden und 8 Stunden.

In Ermangelung von AEGL-Daten werden häufig Emergency Response Planning Guidelines (ERPG)-Werte [67] verwendet. Wie bei den AEGL-Werten werden drei Schweregrade mit ähnlicher Zuordnung unterschieden. Im Unterschied zu den AEGL-Werten beziehen sich diese jedoch nur auf eine Expositionszeit von einer Stunde.

Zuletzt sei noch der Arbeitsplatzgrenzwert (AGW) [68] genannt, welcher der Grenzwert für die zeitlich gewichtete durchschnittliche Konzentration eines Stoffes in der Luft am Arbeitsplatz in Bezug auf einen gegebenen Referenzzeitraum ist. Der Arbeitsplatzgrenzwert gibt an, bei welcher maximalen Konzentration eines Stoffes akute oder chronische Auswirkungen auf die Gesundheit nicht zu erwarten sind. Anzumerken ist, dass es zahlreiche weitere Grenzwerte und Beurteilungswerte gibt, welche sich im Anwendungsbereich, allerdings auch in der wissenschaftlichen Begründung unterscheiden können.

2.2. Risikoanalysen

Beispiele für Bereiche, in denen eine Risikoanalyse gesetzlich gefordert ist, wurden bereits weiter oben angegeben. Der Betreiber einer Anlage bzw. ein Arbeitgeber muss eine Gefährdungsbeurteilung auf Grundlage des Arbeitsschutzgesetzes (nach § 5 ArbSchG) anfertigen (lassen), was letztendlich eine Risikoanalyse für den Arbeitsplatz darstellt [52]. Betriebe oder Anlagen, welche der Störfall-Verordnung [20] unterliegen, müssen ebenso einen Sicherheitsbericht (§§ 7, 10, 23, 48a, 58a BImSchG, konkretisiert in § 9 Störfall-Verordnung - 12. BImSchV) anfertigen, aus welchem die umfassende Ermittlung und Adäquatheit der ergriffenen Maßnahmen zur Begrenzung möglicher Auswirkungen auf Mensch, Umwelt u. a. ersichtlich wird. Die Risikoanalyse ist gesetzlich auch geforderter Bestandteil bei der Konstruktion von Maschinen gemäß DIN EN ISO 12100 [57] (Erwerb des CE-Siegel innerhalb der EU). Für kerntechnische Anlagen ist sogar eine quantitative Risikoanalyse gefordert (geregelt durch § 19a AtG). Hierzu gibt es einen Leitfaden für die Durchführung einer probabilistischen Sicherheitsanalyse, herausgegeben vom Bundesamt für Strahlenschutz [69]. Aber auch in anderen Bereichen sind Risikoanalysen (wenn auch mit anderen Bezeichnungen) anzufertigen. Begrifflich übergeordnet ist das weitreichende Konstrukt des Risikomanagements innerhalb eines Unternehmens. Es umfasst die Erhebung, Risikobeurteilung, Risikobewältigung und Risikokommunikation innerhalb eines Unternehmens und auch nach außen. Ziel ist im Allgemeinen ein optimales Management arbeitssicherheitsbezogener Risiken, aber auch unternehmerischer Risiken. Dadurch sollen gesetzliche Forderungen eingehalten, aber auch ein langfristiger Erfolg eines Unternehmens am Markt gesichert werden. Es ist nicht das Anliegen dieser Arbeit, hier weitere Ausführungen anzugeben. Geeignete Fachliteratur ist beispielsweise [70, 71]. Eine Gemeinsamkeit der genannten gesetzlichen Regulierungen, wie auch vieler unternehmensinterner Vorgehensweisen liegt darin, dass nicht vorgeschrieben ist, auf welchem Niveau die Risiken zu erheben sind. Es gilt die jeweiligen (z.T. gesetzlich geforderten) Schutzziele zu erreichen und zu wahren. Die Abbildung 2.3 zeigt wesentliche Verfahrensschritte, welche die Mehrzahl aller Risikoanalysen widerspiegeln oder gemeinsam haben.

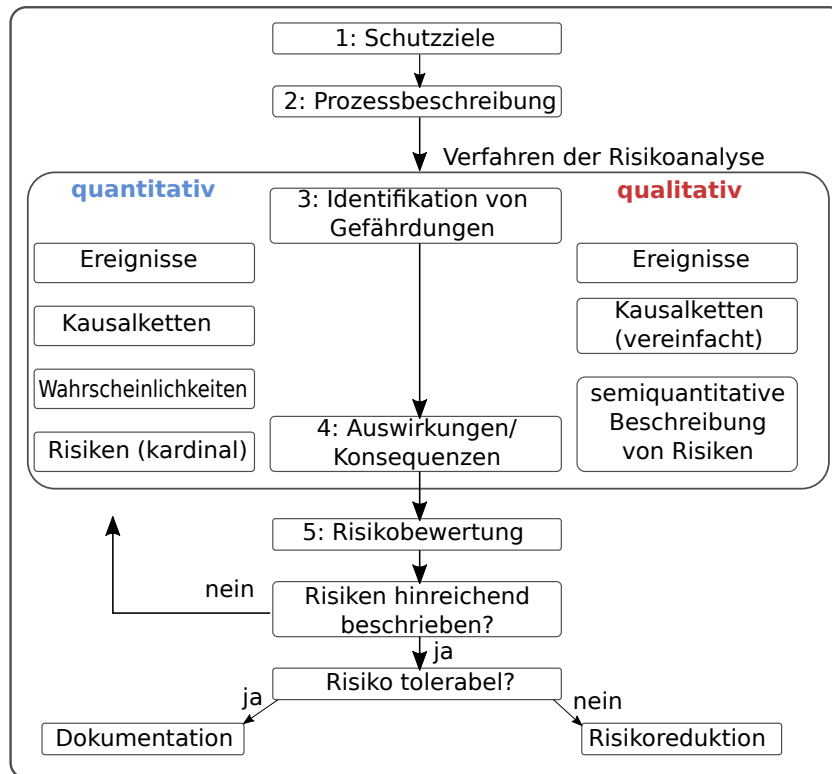


Abbildung 2.3: Illustration von wesentlichen Arbeitsschritten in Risikoanalysen sowie Unterscheidung von qualitativen und quantitativen Verfahren der Risikoanalyse.

2.2.1. Erläuterungen zum Ablauf einer Risikoanalyse

1: Schutzziele

Der überwiegende Teil aller Risikoanalysen beginnt mit einer Festlegung der Zielsetzung bzw. der Herausarbeitung der zuvor genannten gesetzlich einzuhaltenden Schutzziele. In Abhängigkeit dieser Ziele werden alle relevanten Informationen zu Prozessen, Systemen, Anlagen bis hin zu organisatorischen Abläufen bereitgestellt. Dies beinhaltet Standortinformationen, Konstruktionsmerkmale, verfahrenstechnische Beschreibungen, Angaben zu verwendeten Stoffen und insbesondere deren Mengen sowie physikalische Prozessparameter. In vielen unternehmerischen Risikoanalysen wird auch ein Erreichungsgrad definiert, bei dem eine Analyse als vollständig bzw. hinreichend erachtet werden kann.

2: Prozessbeschreibung

Üblicherweise werden bei komplexen Systemen bzw. Abläufen nicht alle Teile gleichermaßen untersucht, da eine Vorpriorisierung praktisch immer möglich ist. Es sollen insbesondere die für die Zielstellung relevanten Teile separiert werden. Die Auswahl der weiteren Verfahren und die methodische Vorgehensweise der Risikoanalyse ist hiervon abhängig, weil nicht alle Verfahren für jede Problemstellung die gleiche Eignung bzw. Effizienz aufweisen.

3: Identifikation von Gefährdungen

Die Gefährdungsanalyse hat das Ziel, alle relevanten Gefährdungen im Zusammenhang mit den Schutzziele zu ermitteln. Von der Qualität dieses Arbeitsschrittes ist es letztendlich abhängig, ob unentdeckte Risiken zu unerwünschten Spätfolgen bzw. Unfallereignissen führen können. Die Gefährdungsanalyse ist bisweilen selbst oft eine qualitative Risikoanalyse oder

deren Hauptbestandteil (muss es aber nicht sein). Daher sind für diesen Arbeitsschritt verschiedene systematische Verfahren verfügbar, von denen einige etwas weiter unten beschrieben werden.

4: Auswirkungen und Konsequenzen

Die Verfahren haben das Ziel, die identifizierten Gefährdungen einschätzbar bzw. bewertbar zu machen. Dazu ist es erforderlich, aus der einfachen Einschätzung, dass möglicherweise eine Gefährdung vorliegt, ein Risiko abzuleiten. Wie bereits erwähnt, implizieren viele Verfahren der Gefährdungsanalyse dies bereits. Dazu müssen Ursachen für die Gefährdungen ermittelt und Konsequenzen abgeschätzt werden. Der Unterschied zwischen qualitativer und quantitativer Risikoanalyse zeigt sich hierbei im Skalenniveau, auf dem beide Größen für die Risikoermittlung bestimmt werden. Die Punkte 3 und 4 liegen praktisch immer innerhalb der Anwendung eines spezifischen Verfahrens der Risikoanalyse. Die anderen Punkte können mit im Gesamtkonzept eines Verfahrens enthalten sein, müssen es aber nicht.

5: Risikobewertung, Maßnahmendefinition, Risiko-Monitoring

In diesem Schritt versucht man, die Risiken zu bewerten, um einen Handlungsbedarf ableiten zu können. Zumeist werden hierfür semiquantitative Einschätzungen vorgenommen (Risikomatrix). Dies ist auch von dem verwendeten Verfahren der Risikoanalyse abhängig, welches rein qualitativ bis hin zu quantitativ sein kann. Je nach Ergebnis der Risikoanalyse können Maßnahmen priorisiert und ein Handlungsziel festgelegt werden. Durch Risiko-Monitoring kann die Wirksamkeit umgesetzter Maßnahmen überwacht werden. Praktisch immer ist der Ablauf der Risikoanalyse zu protokollieren, um die Ergebnisse und Schlussfolgerungen nachvollziehbar festzuhalten.

2.2.2. Übersicht über häufig verwendete Verfahren der Risikoanalyse

Je nach unternehmerischem Risiko, Produkttyp und Branche haben sich im Risikomanagement unterschiedliche Verfahren und Vorgehensweisen entwickelt. Einige davon sollen im Folgenden kurz aufgelistet und eingeordnet werden. Der Schwerpunkt wurde auf Verfahren gelegt, welche in der Anlagensicherheit für Störfallauswirkungsbetrachtungen herangezogen werden. Anzumerken ist, dass Verfahren der quantitativen Risikoanalyse auch qualitativ angewendet werden können. Ereignisbäume, Fehlerbäume bis hin zu Bayesschen Netzen können auch ohne genaue Spezifikation von Wahrscheinlichkeiten aufgestellt und für Sicherheitsbetrachtungen herangezogen werden. Es wurde daher immer das höchstmögliche Skalenniveau für ein Verfahren angegeben. Die Ausführungen und Listen haben keinen Anspruch auf Vollständigkeit.

- **Qualitative und semiquantitative Risikoanalysen**
 - PAAG: Akronym für Prognose, Auffinden der Ursachen, Abschätzen der Auswirkungen, Gegenmaßnahmen [9]
 - HAZOP: Akronym für HAZard and OPerability [9]
 - Risikoeinschätzung mittels Risikomatrix nach Nohl [11]
 - Verfahren, die gegebenen Standards folgen (z. B. DIN EN ISO 12100) und damit für Unternehmen / bei Genehmigungsfragen von Behörden als akzeptabel angesehen werden oder industriezweigbezogene Risiken beherrschbar machen sollen, z. B. Checklistenverfahren und zahlreiche Mischformen [57]
- **Quantitative Risikoanalysen**

- FMECA: Akronym für Failure Mode, Effects and Criticality Analysis bzw. FMEA-Verfahren: Fehlermöglichkeits- und -einflussanalyse, Failure Mode and Effects Analysis [72, 8]
- LOPA: Akronym für Layer Of Protection Analysis [26]
- ROGA: Akronym für Risikoorientierte Gefahrenanalyse [61]
- EBA: Ereignisbaumanalyse bzw. ETA: Event Tree Analysis [7]
- FBA: Fehlerbaumanalyse bzw. FTA: Fault Tree Analysis [73, 6]
- BN: Bayessche Netze [74]

Oft findet man des Weiteren eine Einteilung der Verfahren in **induktive** (vorwärts gerichtet) und **deduktive** (rückwärts gerichtet) Verfahren:

- **Induktive Verfahren:**

Werden bisweilen auch als Bottom-up-/Vorwärtsanalysen bezeichnet. Der Ausfall bzw. ein Zustand eines Systems wird als Startpunkt der Analyse angenommen. Es wird zeitlich vorwärts in einer hypothetischen Kausalkette (induktiv) auf mögliche Konsequenzen geschlussfolgert. Ein Beispielverfahren, welches diesem Prinzip folgt, ist die Ereignisbaumanalyse.

- **Deduktive Verfahren:**

Werden bisweilen auch als Top-down-/Rückwärtsanalysen bezeichnet. Der Ausfall eines Systems wird als Startpunkt der Analyse angenommen. Er wird zeitlich rückwärts in einer hypothetischen Kausalkette (deduktiv) auf mögliche Ursachen zurückgeführt. Ein Beispielverfahren, welches diesem Prinzip folgt, ist die Fehlerbaumanalyse.

- **Inferenzfähige Verfahren:**

Diese Verfahren sind sowohl induktiv als auch deduktiv und bilden die Kausalkette der Ereignisse vollständig ab. Sie können für multiple kausale Inferenzen verwendet werden, wie Schlussfolgern von Ursachen zu Wirkungen und von Wirkungen zu Ursachen. Ein Beispiel für Verfahren dieser Gruppe sind Bayessche Netze. Diese beinhalten zudem Ereignisbäume sowie Fehlerbäume als echte Untermengen, sind oberhalb des Standes der Technik und werden daher in dieser Arbeit verwendet und demonstriert.

2.3. Kurzbeschreibung ausgewählter Verfahren der Risikoanalyse

Bevor versucht wird, das jeweilige Grundprinzip einiger zuvor genannter Verfahren mit wenigen prägnanten Sätzen zu beschreiben, sollen einige allgemeine Bemerkungen vorangestellt werden. Wie zuvor angedeutet, haben sich eine Vielzahl von Verfahren entwickelt, mit denen Risiken verschiedenster Art abgeschätzt werden können. Um ein Verfahren sicher anwenden zu können, ist viel Erfahrung mit den zu beurteilenden Systemen erforderlich sowie auch mit dem Verfahrensablauf der Risikoanalyse selbst.

Je stärker ein zu betrachtendes System auf einer Verkettung von elektrischen, elektronischen oder mechanischen Komponenten mit hoher Nutzungserfahrung beruht, desto geeigneter sind Beschreibungen mit Fehler- oder Ereignisbäumen. Grund ist, dass Schaltkreise, verlötete elektronische Komponenten oder verlegte Kabel strukturierte Systeme mit voller Information sind, die sich gut mit Boolescher Logik (Strukturfunktionen) oder binär wiedergeben lassen. Daher sind in der Kerntechnik Verfahren wie Fehler- und Ereignisbäume etabliert und stark bevorzugt. Die Sicherheit einer kerntechnischen Einrichtung soll bestehen und überwachbar sein, ohne dass komplexe Personalhandlungen für Steuerungsfunktionen erforderlich sind.

Jede quantitative Risikoanalyse setzt gewissermaßen ein qualitatives Verfahren voraus oder es muss eine qualitative Komponente geben. Zwar sind die konkreten Arbeitsweisen innerhalb

der qualitativen Verfahren unterschiedlich, aber alle haben gemeinsam, dass Experten unterschiedlicher Kompetenz (die dadurch möglichst die zu analysierende Anlage vollumfänglich aus verschiedenen Perspektiven einschätzen können) mit einer Gefährdungsanalyse beginnen. Dennoch gilt auch hier, dass die Verfahren nur dann effektiv funktionieren, wenn man sich mit der zu analysierenden Anlage (ein Teil des Expertenteams) und mit dem Verfahren (ein anderer Teil des Expertenteams) sehr gut auskennt. Verfahren wie PAAG oder der Verfahrensprung HAZOP stellen dies durch die strukturelle Zusammensetzung des Untersuchungsteams sicher.

Nicht jedes Verfahrenskonzept passt gut zu jeder Branche. HAZOP oder PAAG mit dem Leitwortkonzept passen gut zu Prozessanlagen der Verfahrenstechnik oder der chemischen Industrie. Hier müssen überwiegend physikalische Parameter wie z. B. Drücke, Temperaturen oder Volumenströme überwacht werden, welche sich als zu hoch oder zu niedrig (typische Leitwörter) erweisen können. Für solche Anlagen wurde es auch entwickelt. Für die Sicherheit im Schienenverkehr (eher Zuverlässigkeit der Signaltechnik) oder für die Sicherheit in der Luftfahrtbranche (eher FMEA/FMECA, siehe weiter unten) ist es nicht ausgelegt, ebenso nicht für viele Gefährdungsbeurteilungen am Arbeitsplatz.

Bei Verwendung neuer Konzepte zur Steuerung von Mensch-Maschine-Interaktionen (etwa mobile Steuerung oder Überwachung) mit Softwareschnittstellen oder Verknüpfungen zu (wechselnden) Personalhandlungsstrukturen gibt es weniger Erfahrung in der Analyse von möglichen Gefährdungen. Softwareschnittstellen, Online-Funktionen und Web-Access stellen zudem auch immer ein Sicherheitsproblem dar, sind in aktuellen Entwicklungen in der Industrie allerdings immer mehr vertreten. Viele damit verbundene Gefährdungen sind nicht konstruktiv strukturell gegeben. Über Pfade zu Risiken und deren Wahrscheinlichkeiten liegt teilweise Unkenntnis vor bzw. die Wahrscheinlichkeiten können auch von Experten nur in Intervallen geschätzt werden. Es ist möglich und auch oft der Fall, dass sich Expertenansichten, je nach Erfahrung, konkretem Einsatzfeld und Verständnistiefe für das betrachtete System bisweilen signifikant unterscheiden können. Dann wird es schwer, reine Fehler- und Ereignisbäume effektiv anzuwenden. Um hier dennoch eine bestmögliche Prognose abgeben zu können, wird ein Verfahren benötigt, was auch bei Unkenntnis geeignet ist, eine bestmögliche Handlungsempfehlung abzuleiten, in dem Wissen aus unterschiedlichen Quellen bestmöglich aggregiert wird.

Hier kann z. B. mit Bayesschen Netzen gearbeitet werden. Der Einbezug von Expertenwissen in Ermangelung von Daten stellt hier eher die Regel als die Ausnahme dar. Bayessche Netze bieten unter den genannten Verfahren für das Erstellen von Kausalketten die höchste Flexibilität, da es bezüglich der Eingangsereignisse und der Verknüpfungslogik keine Beschränkung gibt. Bayessche Netze bauen zudem recht intuitiv auf Kausalketten auf, wie sie beispielsweise in dem überwiegenden Teil qualitativer Verfahren erhoben werden. Dies bedeutet jedoch nicht, dass Bayessche Netze immer das effektivste Verfahren wären. Zudem sind sie mathematisch sehr anspruchsvoll und (anders als PAAG bzw. HAZOP) nur softwaregestützt anwendbar. Bayessche Netze sind ebenso die Methode der Wahl, wenn man eine quantitative Analyse benötigt, jedoch wegen vorhandener Systemunkenntnis Fehler- und Ereignisbäume nicht (oder nur sehr schwerfällig, siehe Kapitel 3) anwenden könnte.

2.3.1. PAAG (HAZOP)

Das PAAG-Verfahren [9] ist ein leitwortgesteuertes, teamorientiertes Verfahren der qualitativen Risikoanalyse und stellt eine systematische Vorgehensweise zum Auffinden möglicher Abweichungen vom bestimmungsgemäßen Betrieb in Prozessanlagen dar. Das Akronym PAAG steht für Prognose (systematische Suche nach Abweichungen), Auffinden der Ursachen, Abschätzen der Auswirkungen und Gegenmaßnahmen. Das Verfahren ist identisch zum HAZOP-Verfahren (HAZard and OPerability), welches seinen Ursprung in den Imperial Chemical Industries (ICI) hatte und auf Arbeiten von Trevor Kletz zurückzuführen ist [75, 9]. Grundlegend für die Anwendung des Verfahrens sind Funktionsbeschreibungen der zu untersuchenden Anlage, wie etwa

Rohrleitungs- und Instrumentenfließschemata (R&I Schemata) oder Prozessflussdiagramme. Auch Anlagen in Designphasen können untersucht werden, wenn der Entwicklungsstand hinreichend fortgeschritten ist. Ein speziell zusammengestelltes PAAG-Team stellt systematisch alle Funktionseinheiten zur Diskussion, um herauszufinden, welche Abweichungen von Sollfunktionen möglich sind, welche Ursachen für diese Abweichungen in Betracht kommen und welche Konsequenzen als Folge der Abweichungen von der Sollfunktion möglich erscheinen. Zur Wahrung einer methodischen Form und zum Erreichen einer zielgerichteten und objektbezogenen Diskussion, werden definierte Leitwörter und Parameter eingesetzt. Die Untersuchungen werden ebenso grundsätzlich von einem Team durchgeführt, welches alle Sachbereiche zum Verständnis der Anlage abdeckt (Verfahrenstechniker, Sicherheitstechniker, Prozessleittechnik (PLT)-Experte, weitere). Der Teamleiter sollte unvoreingenommen zum Untersuchungsgegenstand sein und das Verfahren beherrschen. Ebenso beinhaltet das Team einen Protokollführer. Ziel des PAAG-Verfahrens ist eine Entscheidungsgrundlage, ob bestehende Sicherheitsvorkehrungen genügen oder ob weitere Maßnahmen als erforderlich erachtet werden.

Praktische Anwendungen des Verfahrens sind nicht selten sehr aufwändig. PAAG ist jedoch eine gute Ausgangsbasis für die Erstellung von Kausalzusammenhängen, die in weiterführenden Verfahren tiefergreifend analysiert werden können.

Letztendlich beruhen viele Gefährdungsbeurteilungen auf ähnlich gewonnenen Einschätzungen, die im Wesentlichen ein intelligentes Brainstorming darstellen. Es wurde bereits angegeben, dass die Vollständigkeit von Gefährdungsbeurteilungen immer ein Problem ist, dessen Nachweis und behördliche Kontrolle sich als schwierig erweisen kann. PAAG stellt aus Sicht des Autors ein Verfahren bereit, das auf Grund der Systematik vollständiger ist, als viele einfachere Alternativen. Dies ist insbesondere dann entscheidend, wenn präzise quantitative Analysen mit zu den Kausalketten aufgestellten Ereignisbäumen, Fehlerbäumen oder Bayesschen Netzen durchgeführt werden sollen. Auch umfassende baum- bzw. netzartige Strukturen bieten keine Garantie hinsichtlich Fehlerfreiheit und insbesondere Vollständigkeit.

2.3.2. Layer of Protection Analysis (LOPA)

LOPA ist eine standardisierte (IEC 61508 [26]) semi-quantitative Methode zur Beurteilung von Prozess- oder anderen Anlagenrisiken und zur Festlegung zusätzlicher Schutzmaßnahmen zur Risikoreduktion. Im Allgemeinen ist die LOPA eine systematische Fortführung einer zuvor durchgeführten qualitativen Risikoanalyse wie PAAG und zahlreicher weiterer Beurteilungen von Gefährdungen und Schutzmaßnahmen. Die betroffenen Schutzgüter und gesetzlichen Anforderungen können vielfältig sein. Auch über gesetzliche Forderungen hinausgehende Unternehmensmaßstäbe können einbezogen werden. Jede Maßnahme, technisch wie organisatorisch, wird durch voneinander unabhängige Schutzbarrieren repräsentiert, die alle zeitgleich versagen müssten, damit das unerwünschte oder auch störfallrelevante Ereignis die zu verhindernde Konsequenz auslöst. Durch die Unabhängigkeit der Schutzbarrieren stellt sich die Wahrscheinlichkeit hierfür als Produkt der Einzelwahrscheinlichkeiten für das Versagen jeder Barriere dar. Diese Einzelwahrscheinlichkeiten werden innerhalb von LOPA näherungsweise ermittelt. Die Genauigkeit von LOPA (Skalenniveau) richtet sich nach der Genauigkeit, mit welcher die quantitative Ermittlung zum Versagen der Sicherheitsbarrieren durchgeführt wurde. Für Risikoabschätzungen werden die erwarteten Eintrittshäufigkeiten unerwünschter Ereignisse nach Versagen der Barrieren mit kategorisierten Unfallfolgen verglichen und eine entsprechende Bewertung vorgenommen.

LOPA ist in diesem Sinne auch ein konzeptionelles Verfahren, welches grundsätzlich immer als aufbauendes Verfahren benutzt werden kann. Insbesondere kann es die anderen hier genannten Verfahren, je nach Zweckmäßigkeit, stets in Zwischenuntersuchungen einsetzen. Für übergreifende Sicherheitskonzepte, welche unterschiedlichen Anforderungen und Bereichen im Risikomanagement genügen müssen, ist es zudem sehr anschaulich. In dieser Arbeit wird jedoch nicht auf der Hierarchieebene gearbeitet, wo ein übergreifendes Sicherheitskonzept benötigt

wird, weswegen LOPA selbst nicht zur Anwendung kommt.

2.3.3. Failure Mode Effects Criticality Analysis (FMECA)

FMEA und die Erweiterung FMECA sind analytische Methoden der Zuverlässigkeitstechnik. Die FMEA wurde um 1950 vom US-Militär zur Optimierung der Munitionsproduktion entwickelt und eingesetzt [72]. Für sehr viele Sicherheitsbetrachtungen kann es ein sehr effektives Analysewerkzeug sein, welches anschließend zunächst von der NASA und etwas später auch von der Automobil- und Luftfahrtindustrie übernommen wurde. In verschiedenen Verfahrensvariationen kann es zur Untersuchung von Funktions-, Design- oder Prozessfehlern verwendet werden. FMECA wird mittlerweile gegenüber FMEA bevorzugt angewendet und zählt zu den am häufigsten eingesetzten Verfahren innerhalb der Industrie. Das Verfahren beruht im Wesentlichen auf der Identifikation von Systemschwachstellen. Je nachdem, wie hoch ein identifiziertes Risiko ausfällt, werden Änderungen zur Reduktion der auslösenden Wahrscheinlichkeit vorgenommen, oder versucht, die Auswirkungen auf den Rest des Systems zu verringern. Auf diese Weise lassen sich auch Prozesse und Anlagen im Designstatus untersuchen. Damit können Fehlerfolgekosten in der Produktion und Entwurfsmängel bei neuen Produkten und Prozessen vermieden werden. FMECA erweitert die FMEA um eine Kritikalitätsanalyse. Innerhalb dieser werden Wahrscheinlichkeiten von Ausfällen oder Ereignissen anhand der Konsequenz (Risiko) priorisiert. Das Ergebnis hebt Ausfälle mit relativ hohem Risiko hervor, sodass Gegenmaßnahmen auf die Ereignisse ausgerichtet werden, bei denen sie den größten Nutzen erzielen. Wie im zuvor beschriebenen PAAG-Verfahren wird ein Expertenteam zusammengestellt, welches mögliche Fehlermechanismen eines Systems, Ablaufs oder einer Anlage auflistet. Die entdeckten Risiken werden meistens in Form einer tabellarischen Übersicht dokumentiert. Diese Übersichten beinhalten Systemmerkmale wie Ort und Funktion, die Beschreibung möglicher Fehlerzustände (in fortlaufenden Nummern), Abschätzungen zur Wahrscheinlichkeit, Beschreibungen von möglichen Konsequenzen, Erkennensmerkmale, Risikopriorisierungen und Handlungsempfehlungen. Gegenüber dem PAAG besitzt es den Vorteil, dass es Risiken, zumindest in guter möglicher Näherung, quantifiziert, aber bei entsprechender Teamzusammenstellung ähnlich gute Aufdeckungswahrscheinlichkeiten für Systemschwachstellen erzielt.

Kritisiert wird oftmals der hohe Verfahrensaufwand (wie bei PAAG) und der dennoch oft hohe Spielraum in der Interpretation der Ergebnisse. Wie auch beim LOPA ist in einer FMECA nicht ausgeschlossen, dass Teilanalysen mit systematischen Verfahren, wie Ereignis- oder Fehlerbäumen, bzw. mit Bayesschen Netzen durchgeführt werden.

2.3.4. Ereignisbaumanalyse (ETA)

Dieses Verfahren ist standardisiert in der DIN EN 62502 [7]. Der Ausfall bzw. ein unerwünschter Zustand eines Systems wird als Startpunkt (Top-Event) der Ereignisbaumanalyse angenommen. Es wird zeitlich vorwärts in hypothetischen Kausalketten (induktiv) auf mögliche Konsequenzen geschlussfolgert. Eine Besonderheit hierbei ist, dass die Verzweigungen (überwiegend) binär angegeben werden beispielsweise durch ja oder nein, sich grundsätzlich jedoch alle Alternativen an einer Verzweigung gegenseitig ausschließen müssen. Dadurch wird sichergestellt, dass die Alternativen innerhalb eines Ereignisbaumes nicht gleichzeitig auftreten können. Die Gesamtwahrscheinlichkeit für jeden Pfad kann bei quantitativer Verfahrensanwendung ermittelt werden. Typische Visualisierungen stellen die Pfade üblicherweise von links nach rechts dar, jeweils mit Abzweigungen für die Alternativen. Auf diese Weise erhält man auch visuelle Darstellungen von Ursache-Wirkungs-Beziehung am untersuchten System. Ereignisbaumanalysen können auch in Entwurfsphasen einer Anlage oder eines Systems genutzt werden, um potenzielle Schwachstellen zu identifizieren. In vielen quantitativen Risikoanalysen werden Ereignis- und Fehlerbäume kombiniert eingesetzt. Strukturell ist jeder Ereignisbaum in ein (einfaches) Bayessches Netz überführbar, die Umkehrung gilt jedoch nicht.

2.3.5. Fehlerbaumanalyse (FTA)

Die Fehlerbaumanalyse ist ein deduktives Verfahren für Risiko- und Zuverlässigkeitsanalysen von technischen Anlagen und Systemen. Der Ausfall eines Systems wird als Startpunkt der Analyse angenommen (Hauptereignis). Ausgehend von diesem werden Zwischen- und Primärerereignisse betrachtet, die als Ursachen für das Hauptereignis in Betracht gezogen werden müssen. Fehlerbäume sind keine Binärstrukturen, sondern verknüpfen die Ereignisse mit logischen Gattern (z. B. UND- oder ODER-Gatter) auf der Grundlage der booleschen Algebra. Das Verfahren ist international standardisiert mit der IEC 61025 (EN 61025) [73]. Das betrachtete Gesamtsystem wie auch jedes für die Analyse betrachtete Teilsystem kann sich nur in genau einem der beiden Zustände, funktionsfähig (logisch-0) oder ausgefallen (logisch-1), befinden. Diese Einschätzung betrifft hierbei die Eingangsereignisse der Gatter, welche als Operatoren wirken. Mit Hilfe von Umformungsregeln lassen sich Zwischenereignisse und Transfergatter systematisch ersetzen. Als Folge wird eine Gleichung ermittelt, welche das Hauptereignis lediglich in Abhängigkeit der Primärerereignisse angibt. Man bezeichnet diese Gleichung als Strukturfunktion. Diese ist immer eindeutig und umfasst alle möglichen Kombinationen der Ereignisse, die zum Hauptereignis führen [5]. Wie bei Ereignisbäumen kann jeder Pfad im Prinzip quantifiziert werden, womit die Wahrscheinlichkeit für die Zustände in jeder Stufe ermittelt werden kann. In Kapitel 3 werden Bayessche Netze mit Fehlerbäumen verglichen, so dass auf diese etwas genauer eingegangen wird.

2.3.6. Bayessche Netze (BN)

Bayessche Netze dienen der Speicherung, der Verarbeitung und der Repräsentation von unsicherheitsbehafteten Wissen in netzartigen Strukturen. Sie stellen eine echte Erweiterung von Ereignis- und Fehlerbäumen dar und beinhalten diese als jeweilige Spezialfälle. Bayessche Netze bestehen aus Knoten und Kanten und sind gerichtete azyklische Graphen. Durch die Azyklizität wird sichergestellt, dass Ursache und Wirkung kausal immer eindeutig zugeordnet werden können. Die Knoten selbst sind Zufallsvariablen, welche Systemzustände oder ganz allgemein zu untersuchende Tatbestände in Form von unterscheidbaren Hypothesen repräsentieren. Eingangsdaten sind unabhängige oder bedingte Wahrscheinlichkeiten, welche aus zur Verfügung stehenden Datenbanken entnommen oder geeignet ermittelt werden müssen. Bayessche Netze sind flexible Modelle zur Realisierung lernender Systeme und sind logikbasierten Systemen wie Fehlerbäumen überlegen, wenn mit fehlender Information geschlussfolgert werden muss. In Ereignis- und Fehlerbäumen wie auch für Bayessche Netze müssen Ursache und Wirkung im Vorfeld bekannt sein. Evidenzbasiertes Schlussfolgern (kausale Inferenz) ist dagegen nur in Bayesschen Netzen möglich. Ebenso bleiben Bedienungsfehler und Fehler in Personallhandlungen in Ereignis- und Fehlerbäumen üblicherweise unberücksichtigt. Als Nachteile werden bisweilen der hohe mathematische Anspruch genannt sowie auch die Tatsache, dass komplexe Netze unanschaulich und nur softwaregestützt verarbeitet werden können. Diese Nachteile besitzen Ereignis- und Fehlerbäume allerdings auch. Detailliertere Angaben zum Aufbau und zur Anwendung Bayesscher Netze wie auch Vergleiche mit Fehlerbäumen werden im folgenden Kapitel 3 angegeben.

2.4. Zusammenfassung und Diskussion der Vorteile quantitativer Risikoanalysen

Die zuvor angegebenen Aussagen zeigen deutlich, dass mit dem derzeitig praktizierten Vorgehen (Stand der Technik) die Möglichkeiten von Risikoanalysen, definierte Schutzziele zu erreichen, nicht ausgeschöpft sind. Ebenso wurde deutlich, dass Verbesserungen gegenüber dem Stand der Technik einen Mehraufwand darstellen. Da der Gesetzgeber den Einsatz quantitativer Risikoanalysen andererseits nicht ausschließt, bleibt zu erörtern, wo quantitative Risikoanalysen

stärker in Betracht gezogen werden sollten. Auch bei fehlender gesetzlicher Forderung bleibt die Frage, warum Unternehmen diese zukünftig stärker in Managementüberlegungen einbeziehen sollten. Zur Beantwortung dieser ausgewählten Eingangsfragen sollen die Vorteile und Ergebnisse quantitativer Risikoanalysen herangezogen werden. Die Diskussion erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit.

Wenn aus einer Menge an Möglichkeiten bzw. Maßnahmen, welche alle risikobehaftet sind, eine Alternative ausgewählt werden soll, dann müssen die jeweiligen Gesamtrisiken mindestens ordinal bekannt sein. Allerdings ist diese Bewertung unsicher. Ohne eine zweckmäßige Unsicherheitsbetrachtung kann also eine Priorisierung der Alternativen nicht den eigentlichen Zielstellungen entsprechen.

Es kann sich möglicherweise eine Alternative als günstig herausstellen, die sehr konterintuitiv ist. Daher ist sofort ersichtlich, dass für objektive Entscheidungen eigentlich immer eine quantitative Risikoanalyse inklusive Unsicherheitsbetrachtung erforderlich ist.

Banken, welche einen Kredit gewähren, Versicherungen, die einen Schaden absichern und Unternehmen, welche eine hohe Investition tätigen wollen, würden ihr Geschäftsprinzip nicht auf dem Stand der Technik der Anlagensicherheit beruhen lassen. Für diese Unternehmen ist das eingenommene Kapital, reduziert um die erhobenen monetärer Risiken, eine Chance (Risiko eines Gewinns), die es zu optimieren bzw. zu maximieren gilt. Unternehmerische Maßnahmen, welche hohen Einfluss auf die Werteentwicklung oder den Bestand haben, werden üblicherweise ausschließlich über die Erhebung möglichst genauer finanzieller Risiken (Chancen) entschieden. Diese Risikoerhebungen betreffen Erwartungswerte und Verteilungen, wobei auch Monte-Carlo-Simulationen für Risikosimulationen zum Einsatz kommen [76].

Nun unterliegt die Anlagensicherheit keinem Extremalprinzip, so dass ein Erreichen eines hinreichenden Sicherheitsniveaus durchaus plausibel ist. Allerdings ist in Deutschland (z.B. für Störfallbetriebe) auch hierzu kein Wert oder Bereich verbindlich gegeben. Dadurch verlieren praktisch durchgeführte Risikoanalysen in der Anlagensicherheit weite Teile sowohl ihrer subjektiven Einschätzungen als auch ihrer Unsicherheiten nicht. Da selbst spezifische qualitative Verfahren nicht vorgeschrieben sind, bleibt fragwürdig, wie vollständig viele Gefährdungsbeurteilungen, Untersuchungen von Gutachtern und behördliche Kontrollen in Genehmigungsfragen tatsächlich sind.

Auf Experteneinschätzungen beruhende qualitative Risikoanalysen wie HAZOP bzw. PAAG sind oftmals Hauptbestandteil von Gefährdungsbeurteilungen. Auch wenn diese entsprechend zu dokumentieren sind, können Einschätzungen sich einer späteren Nachvollziehbarkeit, z. B. nach einem unerwarteten Ereignis, entziehen⁶. Im Falle von quantitativen Risikoanalysen inklusive Unsicherheitsbetrachtung sind die bewerteten Szenarien deutlich besser innerhalb einer Risikokommunikation diskutierbar, besser mit anderen Risikowerten vergleichbar und können dadurch eine nachhaltigere Akzeptanz zulassen. Durch Hinzufügen von neuen Erkenntnissen können zudem die Risikobewertungen stetig aktualisiert und präzisiert werden. Viele Risikoabschätzungen sind zudem auf konzeptionell ähnliche Anlagen übertragbar, wie verschiedene Ausfalldatenbanken (z. B. OREDA im Offshore-Bereich) zeigen. Die stärkere Förderung oder Forderung nach quantitativen Verfahren kann es ermöglichen, dass die Anzahl der Systeme mit quantitativ abgeschätzten Risiken zunehmen würde.

Für zukünftige Entwicklungen ist abzusehen, dass die Verwendung von quantitativen Risikoanalysen auch abschöpfbare Einsparungen von Unternehmensinvestitionen bzw. Aufwendungen (Personal, Kosten) ermöglichen können. Beispiele sind Risikobasierte Wartung (RBI)⁷ oder

⁶Wenn eine Quantifizierung gefordert ist, werden zugrundeliegende Kausalzusammenhänge oftmals tiefgründiger analysiert.

⁷Etwa bei Vermeidung von Überinspektionen unkritischer, risikoarmer Komponenten an Stelle einer zeitlich starren Inspektionsplanung.

auch die Erfassung der Lifecycle Performance⁸ von Produkten und Anlagen. Des Weiteren wurde bereits genannt, dass quantifizierbare Einschätzungen zu Mensch-Maschine-Interaktionen bis hin zu Einschätzungen von Cyberangriffen auch mit Verfahren der quantitativen Risikoanalyse abgebildet werden können (Bayessche Netze). Erwähnenswert ist, dass insbesondere dynamische Risikoentwicklungen auf rein qualitativer Ebene schwierig abzubilden und verifizierbar zu machen sind. Wenn Prognosen über ein System gegeben werden sollen, könnten quantitative Risikoanalysen zusätzlich zeitabhängig gestaltet werden. Qualitative und quantitative Risikoanalysen unterscheiden sich des Weiteren im Forschungsverständnis, Forschungsgegenstand und im Forschungsbedarf. Mit quantitativen Risikoanalysen können zum Teil sehr komplexe Anlagen oder Systeme durch geeignete Verfahren auf wesentliche Merkmale reduziert werden. Der Gewinn an Informationen gegenüber rein qualitativen Analysen besteht somit auch in einer möglichen erheblichen Datenreduktion und Objektorientierung. Eine Forderung nach stärkerer Berücksichtigung quantitativer Verfahren kann also Anreize schaffen, Forschung zielgerichtet weiter voranzutreiben und dadurch effizientere Verfahren bzw. Verfahrenskonzepte hervorzu- bringen.

Innerhalb der weiter oben angegebenen Übersicht zu Verfahren der qualitativen und quantitativen Risikoanalyse wurde ersichtlich, dass nicht alle Verfahren das gleiche Potential besitzen, die zuvor genannten Herausforderungen zu meistern. Auch muss festgehalten werden, dass einige Verfahren Gesamtkonzepte für ein Unternehmen bereitstellen (FMECA, LOPA) und andere der genannten Verfahren als Unterverfahren durchaus enthalten können. Für spezifische quantitative Risikoanalysen sind daher Ereignisbaumanalysen, Fehlerbaumanalysen oder auch Bayessche Netze Elementarverfahren. Aus diesem Grund werden in dieser Arbeit Gesamtkonzepte wie FMECA oder LOPA nicht explizit betrachtet. Sind die verwendeten Verfahren auf unterster Hierarchieebene präzise, so können mit FMECA oder LOPA als übergeordnete Verfahrenskonzepte im Prinzip sehr hohe Qualitäten im Sicherheitsmanagement erreicht werden. Die weiteren Aussagen beziehen sich daher eher auf Risikoanalysen aufbauend auf grundlegenden Verfahren. Es wird in diesen eine hohe Flexibilität in verschiedenen, sich dennoch überlappenden Anwendungsbereichen gefordert, ebenso die Möglichkeit, unsicheres Wissen, Systemunkenntnis und Datenunsicherheiten optimal verarbeiten zu können. Bayessche Netze besitzen dieses Potential und wurden daher für die Risikoanalysen in dieser Arbeit ausgewählt. Ein weiteres Problem vieler Risikoanalysen ist die fehlende Mitquantifizierung von Parameter- und Modellunsicherheiten innerhalb der Risikoanalyse selbst, als auch innerhalb von Untermodellen. In dieser Arbeit werden daher grundsätzlich immer Möglichkeiten aufgezeigt, wie innerhalb einer Risikoanalyse und allen relevanten Untermodellen eine vollständige Fehler- bzw. Unsicherheitsanalyse gemacht werden kann. Zahlreiche Methoden entsprechen hierbei dem aktuellen Stand der Forschung. Die Demonstration erfolgt im folgenden Kapitel abstrakt innerhalb des gewählten Verfahrens der quantitativen Risikoanalyse und in darauf folgenden Kapiteln für ausgewählte Untermodelle. Abschließend erfolgt eine Anwendungsdemonstration an einem industrielevanten Anwendungsbeispiel. Durch eine rein qualitative Risikoanalyse wäre die ausgewählte Problemstellung nicht lösbar gewesen. Als positive Nebeneffekte konnten Kausalzusammenhänge und Eintrittswahrscheinlichkeiten erhoben werden, die auch bei anderen Problemstellungen zu den betrachteten Anlagen nützlich sein können. Dadurch ist auch demonstriert, dass vorhergesagte positive Aspekte bei quantitativer Verfahrensführung zu erwarten sind und gewonnene Daten den Austausch von Wissen unter Betreibern und Forschern fördern können.

Als letzter Satz sei noch gesagt: „Ein Unternehmen, das Risiken nicht richtig analysiert, hat keinen Vorteil gegenüber einem Unternehmen, das diese Risiken nicht erhoben hat.“⁹.

⁸Dadurch kann nachgewiesen werden, dass ein in der Anschaffung teureres Produkt über die Lebensdauer betrachtet, weniger Gesamtkosten verursacht. Dies kann sich positiv auf die Vermarktung auswirken.

⁹Frei zitiert nach [77].

3. Bayessche Netze und deren Anwendung als Verfahren der Risikoanalyse

Beim Umgang mit Risiken müssen Entscheidungen häufig auf Grund von unvollständigen oder sogar widersprüchlichen Informationen getroffen werden. Um Experten¹ bei Entscheidungsfindungsprozessen zu unterstützen, wurden Computersysteme, sogenannte Expertensysteme entwickelt. Diese sollen auch bei unsicherer Informationslage bestehende Erkenntnisse verknüpfen und auswerten, um eine Handlungsempfehlung geben zu können. In der Praxis sind solche Expertensysteme damit konfrontiert, komplexe kausale Zusammenhänge zwischen den Einflussvariablen berücksichtigen zu müssen.

Bayessche Netze stellen ein solches probabilistisches Expertensystem für Entscheidungsfindungsprozesse bei unsicherer Informationslage dar. Die Verarbeitung und die Repräsentation von unsicherheitsbehaftetem Wissen erfolgt in azyklischen, gerichteten netzartigen Strukturen. Im Kapitel zuvor wurden einige elementare Verfahren der Risikoanalyse bereits genannt: Ereignisbaumanalyse (ETA) oder auch Fehlerbaumanalyse (FTA), mit welchen oftmals solche Abhängigkeiten zwischen vielen verschiedenen Ereignissen schwer abgebildet werden können. Diese Methoden sind für logische Ketten aufeinander folgender Ereignisse konzipiert, nicht für die Beschreibung von Systemen mit zahlreichen Querverbindungen zu anderen Ereignisketten. Des Weiteren kann mit Bayesschen Netzen die Wahrscheinlichkeit von Ereignissen berechnet werden, welche mehrere voneinander unabhängige Ursachen bzw. eine Vielzahl von Zielgrößen haben. Mit Bayesschen Netzen können kausale Zusammenhänge zwischen betrachteten Größen schon auf der Grundlage unseres allgemeinen Verständnisses der kausalen Beziehungen zwischen Variablen aufgebaut und auch visualisiert werden. Im Vergleich zu den zuvor genannten Verfahren (ETA, FTA) sind Bayessche Netze kein international standardisiertes Verfahren der Zuverlässigkeit oder für Risikoanalysen und werden in Deutschland hierfür kaum verwendet. Ziel dieses Kapitels ist es daher, nach einem Literaturüberblick die Grundzüge des Verfahrens anzugeben, wesentliche Rechnungen analytisch vorzuführen und Vorteile herauszustellen. Hierfür soll dieses Verfahren mit Ereignis- und Fehlerbäumen verglichen werden. Praktische Anwendungen erfordern bisweilen das Arbeiten mit großen Netzen, weswegen hier auch auf verfügbare Software eingegangen werden soll. Abschließend werden einige Beispiele diskutiert, die im Rahmen der Habilitation betrachtet wurden, wobei auf die Anwendung der Bayesschen Netze für das industrierelevante Beispiel im Kapitel 6 ausführlicher eingegangen wird.

Zusammenfassung: In diesem Kapitel stehen Bayessche Netze als ein mögliches Verfahren für quantitative Risikoanalysen im Fokus. Durch Vergleiche mit etablierten Methoden wie Ereignis- oder Fehlerbaumanalyse soll gezeigt werden, welches Potential und welche Vorteile Bayessche Netze besitzen. Angaben zu Anwendungen in der Anlagensicherheit und zu Softwarepaketen sind ebenso berücksichtigt.

3.1. Kurzer Überblick zur Herkunft Bayesscher Netze

Basierend auf dem Bayesschen Wahrscheinlichkeitsbegriff [78] werden Kausalzusammenhänge im Rahmen der Bayesschen Statistik bereits seit mehr als einem Jahrhundert untersucht. Der Begriff des *Bayesschen Netzes* wurde allerdings erst 1985 von Judea Pearl [79] benutzt bzw.

¹Experten sind in diesem Kontext Personen, die zur Erledigung ihrer Aufgaben Entscheidungen treffen müssen und hierfür auf überdurchschnittlich viel Fachwissen zurückgreifen können.

erfunden. Ein Hauptgegenstand seiner Forschung war die Verarbeitung von unsicherheitsbehaftetem bzw. subjektivem Wissen (Information) in Kausalzusammenhängen und wie im Rahmen von kausaler Inferenz mit diesem Wissen geschlussfolgert werden kann.

Zusammen mit Arbeiten von Richard Neapolitan [80] wurden Bayessche Netze als eigenständiges Untersuchungsobjekt etabliert und zahlreiche Eigenschaften und Anwendungsschritte allgemein angegeben und formalisiert. Ein sehr umfassendes Werk zu Bayesschen Netzen von Richard Neapolitan ist *Learning Bayesian Networks* [81], welches nicht nur mathematische Grundlagen sondern auch sehr viele Beispielanwendungen zeigt. Eine umfangreiche Arbeit aus Sicht von Judea Pearl ist *Probabilistic Reasoning in Intelligent Systems: Networks of Plausible Inference* [74]. Aktuell gibt es sehr viele Lehrbücher zum Einstieg in das Arbeiten mit Bayesschen Netzen wie auch für Fortgeschrittene, welche in spezifischen Anwendungsdisziplinen Informationen suchen. Einige werden etwas weiter unten bei den Anwendungsbeispielen erwähnt. Ebenso wurde hier darauf verzichtet, einen allgemeinen Überblick über die sehr hohe Anzahl an Fachpublikationen zu diesem Thema zu geben. Für Vergleiche von Fehlerbäumen und Bayesschen Netzen, für Kombinationen von Bayesschen Netzen mit Fuzzy-Logik und für die betrachteten Anwendungsbeispiele erfolgen Literaturangaben im Verlaufe dieses Kapitels.

Die Untersuchung von Bayesschen Netzen splittete sich auf Grund der Komplexität in verschiedene Teilzweige auf. Einige davon sollen kurz umrissen werden. Unter dem Begriff *Lernen* von oder in Bayesschen Netzen versteht man Konzepte zur automatischen Generierung eines Netzes, welches sowohl die Daten als auch die Kausalzusammenhänge möglichst gut beschreibt. Hierbei unterscheidet man das automatische Bestimmen der Graphenstruktur von der optimalen Bestimmung von bedingten Wahrscheinlichkeiten für die Transfermatrizen (zu beiden Punkten siehe etwas weiter unten). Hierunter fallen auch Techniken der Optimierung von Netzen. Bestehen Netze nur aus einer kleinen Anzahl an Knoten und Kanten und werden in den Knoten nur wenige Hypothesen differenziert, so sind die Netze oft noch intuitiv zugänglich. Für komplexe Kausalzusammenhänge kann es sehr schnell unmöglich werden, diese vollständig zu überblicken. Neben geeigneter Software kommen dann auch unterschiedliche Techniken (exakte bzw. approximative) für kausale Inferenz zum Einsatz [81].

Werden in Bayesschen Netzen Eigenschaften als explizit zeitabhängig angesehen, so spricht man von dynamischen Bayesschen Netzen. Hier gibt es bereits zahlreiche Anwendungen in der Robotik beim Data Mining² [83].

In der Mehrzahl der Anwendungen von Bayesschen Netzen steht die Verarbeitung von unsicherheitsbehaftetem Wissen im Vordergrund. Für viele Probleme bei der Entscheidungsfindung sind genaue Wahrscheinlichkeiten zudem nicht zwingend nötig. Dennoch wird selbstverständlich untersucht, welche Auswirkungen Modell- und Datenunsicherheiten auf die Schlussfolgerungen haben. Einen Überblick zu verschiedenen Techniken hierzu bietet [32]. In dieser Arbeit werden Kombinationen aus Fuzzy-Logik und Bayesschen Netzen benutzt, wie sie in [84, 32] vorgestellt wurden.

3.2. Kurzübersicht zur Anwendung Bayesscher Netze

Wie bereits mehrfach angegeben, finden Bayessche Netze überall dort Anwendung, wo es eine sehr starke kausale Verknüpfung zwischen vielen Ereignissen und Ereignisketten gibt. Auf die Vielzahl an Anwendungen kann hier nicht eingegangen werden. Für einen kurzen Überblick soll dennoch die folgende Aufzählung nützlich sein.

1. Anwendungen in der Medizin

Für einen Arzt stellt sich das Problem, zu einem realen Krankheitsbild eine idealisierte

²Unter Data Mining versteht man die statistische Untersuchung sehr großer Datenmengen zur Ableitung von allgemeinen Eigenschaften, Kausalzusammenhängen oder Trends [82].

Beschreibung einer Krankheit zuordnen zu müssen. Oftmals sind Patientenbeschreibungen bei der Anamnese trotz gewisser Ähnlichkeit zu einem typischen Krankheitsverlauf widersprüchlich bis uneindeutig. Dann muss anhand der Ähnlichkeit eine (unsicherheitsbehaftete) Entscheidung getroffen werden. Hier werden Bayessche Netze als Assistenzsysteme in der medizinischen Diagnostik verwendet [85].

Ein weiteres Beispiel ist die während der Habilitation vom Autor erstellte Veröffentlichung [86]. Hierin wurde mit Bayesschen Netzen untersucht, welche Vorteile die Alarmierung von qualifizierten Ersthelfern mittels einer Smartphone-App haben, wenn diese bei Patienten mit Herz-Kreislauf-Stillstand zusätzlich zum bestehenden Rettungsdienst alarmiert werden. Es konnte gezeigt werden, dass diese die Patienten signifikant früher erreichen und die Überlebenschancen deutlich verbessern. Insbesondere konnte gezeigt werden, dass der bestehende Rettungsdienst diese Verbesserung strukturell nicht erreichen kann.

2. Anwendungen in der Bioinformatik

Die Bildung von Proteinen in Zellen wird durch sogenannte genetische regulatorische Netzwerke gesteuert, welche Interaktionen zwischen Genen und Proteinen beschreiben. Hier wird z. B. versucht, das genetische regulatorische Netzwerk durch Bayessche Netze zu modellieren, wobei jedes Gen als Knoten modelliert wird und eine Kante eine regulatorische Beziehung zwischen zwei Genen anzeigt [87].

3. Informatik

Mustererkennung, Sprachverarbeitung, Spamfilter, Bildverarbeitung. In den zuvor genannten Bereichen muss aus einer ungünstigen Datenlage heraus (unscharfes, verrauschtes Bild bzw. Muster, geringe Eingangsinformationsmenge) eine möglichst optimale Erkennung oder Zuordnung gelingen [88]. Ein anderes Beispiel sind Softwareentwicklungen wie [89] bei Microsoft. Durch Bayessche Netze sollen Softwarepakete den Bedürfnissen von Benutzern besser angepasst werden, in dem typische Interaktionen zwischen Nutzer und Software (Zeitverlauf, Aktionsfolgen, Hilfeaufrufe und weitere) analysiert werden.

4. Anlagensicherheit und Anlagenzuverlässigkeit

Hierfür bietet diese Habilitation mit Kapitel 6 ebenso ein Beispiel, wo die Formierungswahrscheinlichkeit einer gefährlichen explosionsfähigen Atmosphäre an Lagertanks für Raffinerieprodukte untersucht wurde. Eine andere Anwendung mit Beteiligung des Autors war die Untersuchung der Ausfallwahrscheinlichkeit der Hochspannungs-Gleichstrom-Übertragung von einer Offshore Konverterplattform an Land durch Versagen der Transformatorenkühlung. Auch im vorbeugenden Brandschutz und für Fluchtwegskonzepte sind Bayessche Netze bereits aufgestellt und benutzt worden.

Anwendungen dieser Art sind international zahlreich publiziert. Dennoch werden Bayessche Netze in Deutschland für Untersuchungen innerhalb der Anlagensicherheit selten verwendet. Eine weitere umfassende Übersicht zu Anwendungen von Bayesschen Netzen in der Anlagenzuverlässigkeit findet man z. B. in [90]. Literaturangaben zu Bayesschen Netzen selbst sowie zu den hier verwendeten methodischen Erweiterungen und Anwendungsbeispielen finden sich im Verlauf des Kapitels.

3.3. Verfahrensgrundlagen und analytische Anwendung

3.3.1. Mathematische Grundlagen

Für das Arbeiten mit Bayesschen Netzen sollen zunächst einige mathematische Größen bzw. Sachverhalte kurz erklärt werden. Insbesondere die Bayessche Formel und bedingte Wahrscheinlichkeiten werden benötigt. Auf eine hohe mathematische Strenge bei der Einbettung und der

Darstellung wurde verzichtet. Da es sich um mathematische Grundlagen handelt, welche in jedem Einführungsbuch zur Wahrscheinlichkeitsrechnung zu finden sind, wurde auf die Angabe von Quellen verzichtet.

Zufallsexperiment, Ergebnis, Ereignis

Ein unter kontrollierten Bedingungen durchgeführter Versuch möge als Versuchsausgang mehrere mögliche Ergebnisse besitzen, deren Eintreten vom Zufall abhängig sei. Solch einen Versuch nennt man Zufallsexperiment und das Ergebnis Zufallsergebnis. Mit dem Begriff Zufall ist hier gemeint, dass es keine (hinreichend einfache) deterministische Kausalkette gibt, mit der im Prinzip eine Vorherbestimmung des Versuchsausganges möglich wäre³. Sei ω nun ein Zufallsergebnis, so nennt man die Menge aller Zufallsergebnisse eines Zufallsexperimentes den Ergebnisraum Ω . Ein Ereignis ist eine Menge von Ergebnissen eines Zufallsexperimentes, dem eine Wahrscheinlichkeit zugeordnet werden kann. Ein Ereignis tritt ein, wenn es das Ergebnis eines Zufallsexperimentes als Element enthält.

Sei Ω eine nichtleere Ergebnismenge und Σ eine Struktur, welche die folgenden Axiome erfüllt:

$$(i) \quad \Sigma \subseteq \mathcal{P}(\Omega) \tag{3.1}$$

$$(ii) \quad \Omega \subseteq \Sigma \tag{3.2}$$

$$(iii) \quad A \subseteq \Sigma \Rightarrow \Omega \setminus A \subseteq \Sigma, \tag{3.3}$$

dann ist Σ ein Ereignisfeld über Ω . Hierin ist $\mathcal{P}(\Omega) = \{U | U \subseteq \Omega\}$ die Potenzmenge von Ω , also die Menge aller Teilmengen, die aus Ω gebildet werden können. Der Punkt (i) besagt, dass Ereignisse (im Folgenden immer mit Großbuchstaben wie A oder E bezeichnet) immer Teilmengen der Potenzmenge vom Ergebnisraum sind⁴. Aus (ii) folgt, dass die Menge Ω selbst immer dabei sein muss und wegen (iii) gilt, dass, wenn ein Ereignis A zum Ereignisraum gehört, dann muss auch sein Komplement (Gegenereignis) dazu gehören.

Wahrscheinlichkeitsraum

Das Tripel (Ω, Σ, P) nennt man Wahrscheinlichkeitsraum mit dem Wahrscheinlichkeitsmaß P , wenn gilt:

$$(i) \quad \forall A \in \Sigma : P(A) \in [0, 1] \tag{3.4}$$

$$(ii) \quad P(\Omega) = 1 \tag{3.5}$$

$$(iii) \quad A_i, i = 1, \dots, n, n \in \mathbb{N}, A_i \cap A_j = \emptyset \quad \forall i, j : i \neq j \text{ wobei:}$$

$$P(A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_n) = \sum_{i=1}^n P(A_i). \tag{3.6}$$

Gemäß (i) muss jedem Ereignis A eine wohldefinierte Wahrscheinlichkeit zugeordnet sein, welche eine Zahl zwischen null und eins ist. Nach (ii) tritt die Ergebnismenge, welche nach der Definition zuvor auch immer ein Ereignis ist, mit der Wahrscheinlichkeit eins ein. Wegen (iii) folgt, dass die Wahrscheinlichkeit der Vereinigungsmenge aus paarweise disjunkten Ereignissen gleich der Summe der Einzelwahrscheinlichkeiten der Ereignisse ist.

Wahrscheinlichkeitsräume werden in der Mathematik definiert, um Zufallsexperimente formal untersuchen und beschreiben zu können. Interessant ist z. B., dass damit Ereignisse und Ergebnisse nicht das Gleiche sind und nicht synonym benutzt werden können. Ergebnisse sind Elemente des Ergebnisraumes Ω , während Ereignisse Teilmengen der Ergebnismenge Σ sind. Es

³In der Quantenmechanik kann beispielsweise die Existenz eines objektiven Zufalls (eine Ursache ist nicht erforderlich) geschlussfolgert werden. Als Beispiel findet sich oft der radioaktive Zerfall. Solche Ereignisketten sind dann prinzipiell indeterministisch.

⁴Beispielsweise ist das Ereignis G *Würfeln einer geraden Zahl* eine solche Teilmenge: $\{2, 4, 6\} \subseteq \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$.

ist nirgends gefordert, dass jedes Ergebnis auch ein Ereignis ist.

Nimmt man für die Konstruktion des Wahrscheinlichkeitsraumes auch die Ergebnisse als elementare Teilmengen mit in die Ereignismenge Σ auf, so sind auch die Ergebnisse nicht weiter zerlegbare Ereignisse. Man nennt sie dann Elementarereignisse.

3.3.2. Absolute und relative Häufigkeit

Ein Zufallsexperiment werde n -mal unter denselben Bedingungen wiederholt. Nun soll ein Ereignis A eines Ereignisraumes zum Zufallsexperiment betrachtet und der Grad der Bestimmtheit seines Eintretens quantifiziert werden.

Ist bei n Wiederholungen des Zufallsexperimentes das Ereignis A genau $h_n(A)$ mal eingetreten, so ist $h_n(A)$ die absolute Häufigkeit des Ereignisses A .

Ist bei n Wiederholungen des Zufallsexperimentes das Ereignis A genau $h_n(A)$ mal eingetreten, so ist $r_n(A) = \frac{h_n(A)}{n}$ die relative Häufigkeit des Ereignisses A .

Anzumerken ist noch, dass verschiedene Versuchsserien vom Umfang n im Allgemeinen auch verschiedene absolute $h_n(A)$ und relative Häufigkeiten $r_n(A)$ liefern werden. Ist der Umfang n jedoch hoch genug, so wird es umso wahrscheinlicher, dass sich die relativen Häufigkeiten in der Nähe eines Wertes befindet, den man als die Wahrscheinlichkeit $P(A)$ interpretieren kann. Für die Anlagensicherheit bedeutet dies z. B., dass für die Ermittlung einer Ausfallwahrscheinlichkeit eine hinreichende Anzahl gleichartig präparierter Systeme untersucht werden muss.

Bedingte Wahrscheinlichkeit und Produktregel

A und B seien zwei beliebige Ereignisse und $P(B) > 0$, dann ist die bedingte Wahrscheinlichkeit von A unter der Bedingung B definiert durch:

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}. \quad (3.7)$$

$P(A|B)$ ist eine a posteriori Einschätzung der Wahrscheinlichkeit von A , wenn die Information des Eintritts von B vorliegt. Die verbleibenden Möglichkeiten von A liegen dann in B . Aus der Definition (3.7) folgt der Produktsatz:

$$P(A \cap B) = P(A|B)P(B). \quad (3.8)$$

Wenn gilt:

$$P(A|B) = P(A) \Rightarrow P(A \cap B) = P(A)P(B). \quad (3.9)$$

Die beiden Ereignisse A und B sind dann stochastisch unabhängig. Es gilt auch:

$$P(A|B) = P(A) \Rightarrow P(B|A) = P(B), \quad \text{wenn } P(A) > 0. \quad (3.10)$$

Stochastische Unabhängigkeit und totale Wahrscheinlichkeit

A_1, A_2, \dots, A_n seien abzählbar viele Ereignisse. Wenn für jedes $k \in \mathbb{N}$ mit $1 < k \leq n$ und für jede Teilmenge von k -Ereignissen $A_{i_1}, A_{i_2}, \dots, A_{i_k}$ der Menge $\{A_1, \dots, A_n\}$ gilt:

$$P(A_{i_1} \cap A_{i_2} \cap \dots \cap A_{i_k}) = P(A_{i_1})P(A_{i_2}) \cdots P(A_{i_k}), \quad (3.11)$$

dann sind die Ereignisse vollständig stochastisch unabhängig. Der Nachweis der vollständigen stochastischen Unabhängigkeit erfordert das Erfüllen von $(2^n - n - 1)$ -Gleichungen. Sind die abzählbar vielen Ereignisse A_1, A_2, \dots, A_n vollständig stochastisch unabhängig, dann gilt auch:

$$P(A_1 \cap A_2 \cap \dots \cap A_n) = P(A_1)P(A_2) \cdots P(A_n). \quad (3.12)$$

Man beachte allerdings, dass die Umkehrung des letzten Satzes nicht erfüllt ist, also aus der Gültigkeit von (3.12) nicht die vollständige stochastische Unabhängigkeit folgt.

Seien nun A_1, A_2, \dots, A_n abzählbar viele, paarweise disjunkte Ereignisse $A_i \cap A_j = \emptyset \forall i \neq j$. Wenn nun zusätzlich gilt, dass $P(A_i) > 0 \forall i$ und:

$$\sum_{i=1}^n P(A_i) = 1, \quad (3.13)$$

dann nennt man die Ereignisse A_1, A_2, \dots, A_n eine vollständige Ereignisdisjunktion. Aus der paarweisen stochastischen Unabhängigkeit folgt im Allgemeinen nicht die vollständige stochastische Unabhängigkeit. Sei nun B ein beliebiges Ereignis mit $P(B) > 0$:

$$\begin{aligned} P(B) &= P(B \cap \Omega) = P\left(B \cap \left[\bigcup_{i=1}^n A_i\right]\right) = P\left(\left[\bigcup_{i=1}^n B \cap A_i\right]\right) \\ &= \sum_{i=1}^n P(B \cap A_i) = \sum_{i=1}^n P(B|A_i)P(A_i). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Die letzte Formel beschreibt die totale Wahrscheinlichkeit des Ereignisses B . Mit (3.7) folgt für eine vollständige Ereignisdisjunktion $A_i, i = 1, \dots, n$:

$$P(A_k|B) = \frac{P(A_k \cap B)}{P(B)} = \frac{P(B \cap A_k)}{P(B)} = \frac{P(B|A_k)P(A_k)}{\sum_{i=1}^n P(B|A_i)P(A_i)}. \quad (3.15)$$

Die Formel (3.15) wird als die Bayessche Formel bezeichnet, welche für die Bayesschen Netze eine wichtige Bedeutung hat. Dort verwendet man an Stelle des Begriffes Ereignis auch den Begriff Hypothese. Hierin sind:

- $P(A_k)$: a priori Wahrscheinlichkeiten für die A_k . Die Bewertung wird vor Kenntnis des Eintretens von B vorgenommen.
- $P(A_k|B)$: a posteriori Wahrscheinlichkeit für die A_k . Die Bewertung wird nach dem Eintreten von B vorgenommen.
- $P(B|A_k)$: Diagnostische Unterstützung des Ereignisses B durch den Zustand A_k .

Diese Größen sollen im Folgenden kurz am Beispiel des *Würfels* verdeutlicht werden. Hierzu seien A_i Ereignisse des Würfels der jeweiligen Zahl i , wobei hierfür sechs Möglichkeiten $i \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ bestehen und B sei das Ereignis des Würfels einer geraden Zahl. Es ist klar, dass die a priori Wahrscheinlichkeiten für alle Ereignisse A_i gleich $P(A_i) = \frac{1}{6}$ sind, da es sich um ein Laplace-Experiment mit sechs möglichen Versuchsausgängen handelt. Zudem bilden die A_i eine vollständige Ereignisdisjunktion:

$$\sum_{i=1}^6 P(A_i) = 1, \quad A_i \cap A_j = \emptyset \quad \forall i \neq j. \quad (3.16)$$

Des Weiteren kann über die bedingten Wahrscheinlichkeiten $P(B|A_i)$ ausgesagt werden:

$$P(B|A_i) = \frac{P(B \cap A_i)}{P(A_i)} = \begin{cases} 0 & \text{falls } i = 1, 3, 5 \\ 1 & \text{falls } i = 2, 4, 6 \end{cases}. \quad (3.17)$$

Man erkennt an den Zahlen, wie stark die Hypothese B durch die einzelnen A_i diagnostisch unterstützt wird. Diese Unterstützung ist erwartungsgemäß maximal für gerade und null für

ungerade Zahlen. Für die totale Wahrscheinlichkeit von B gilt nun:

$$P(B) = \sum_{i=1}^6 P(B|A_i)P(A_i) = 0 + \frac{1}{6} + 0 + \frac{1}{6} + 0 + \frac{1}{6} = \frac{1}{2}. \quad (3.18)$$

Für die a posteriori Wahrscheinlichkeiten für die A_k gilt:

$$P(A_k|B) = \frac{P(A_k \cap B)}{P(B)} = \frac{P(B|A_k)P(A_k)}{\sum_{i=1}^6 P(B|A_i)P(A_i)} = 2P(A_k \cap B) = \begin{cases} 0 & , i = 1, 3, 5 \\ \frac{1}{3} & , i = 2, 4, 6 \end{cases} \quad (3.19)$$

Auch diese sind erwartungsgemäß null für eine ungerade Zahl und $\frac{1}{3}$ für eine gerade Zahl, da mit Kenntnis von B offen bleibt, welche der drei möglichen geraden Zahlen vorliegt.

3.3.3. Analytische Verfahrensdurchführung

Bayessche Netze sind als sogenannte *azyklische, gerichtete Graphen* eine Untermenge verallgemeinerter Graphen, welche die Einschränkung der Azyklizität und der Gerichtetheit nicht besitzen. Allgemein sind Graphen Modelle für netzartige Strukturen, bestehend aus Knoten und Kanten, deren Eigenschaften und Beziehungen zueinander innerhalb der Graphentheorie untersucht werden. Beispiele sind Straßennetze (z. B. die anzusteuern den Haltestellen durch einen Bus), Computernetze (z. B. ein vom Autor genutzter Großrechner der Universität, bei der die CPUs durch einen „Kautz-Graphen“ vernetzt sind), elektrische Schaltungen, bis hin zu Bayesschen Netzen. Gegenstand der Theorie ist die Suche nach allgemeinen Struktureigenschaften [91]. Sind alle Verbindungen zwischen den Knoten durch Pfeile eindeutig gerichtet, so können dadurch Ursache-Wirkungs-Zusammenhänge wiedergegeben werden (gerichteter Graph). Durch die Azyklizität wird nun die Eindeutigkeit der Ursache-Wirkungs-Zusammenhänge ermöglicht. Die Knoten stellen dabei Zufallsvariablen dar, während die probabilistischen Zusammenhänge zwischen den Variablen durch die Struktur des Netzes selbst gegeben sind.

Abstrakt betrachtet stellen Bayessche Netze eine gemeinsame, multivariate Wahrscheinlichkeitsverteilung der Zufallsvariablen in faktorisierte Form dar (siehe etwas weiter unten). Eine explizite Angabe der multivariaten Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion ist in vielen praktischen Fällen weder möglich noch sinnvoll oder erforderlich, worin die eigentliche Bedeutung der Bayesschen Netze liegt. Auf ungerichtete Graphen soll hier nicht weiter eingegangen werden. Für weitere Informationen sei hierzu, wie auch zu Graphen allgemein, auf die Literatur verwiesen [91].

Aufbau Bayesscher Netze

Zum Arbeiten mit Bayesschen Netzen haben sich spezifische Benennungen etabliert, welche mit Hilfe der Abbildung 3.1 erläutert werden sollen. Ein Knoten wird als *Elternknoten* bezeichnet, wenn er in der Kausalkette darunterliegende, sogenannte *Kinderknoten* besitzt. Hat ein Knoten selbst keinen Elternknoten, so wird er als *Wurzelknoten* bezeichnet. Die Menge der Wurzelknoten sind stochastisch unabhängige Zufallsvariablen im Bayesschen Netz. Die Menge aller Knoten, die nicht Wurzelknoten sind, nennt man zudem *innere Knoten*.

Für die Verbindungen zwischen den Knoten gibt es fünf Möglichkeiten: *zyklisch, ungerichtet, seriell, divergent* und *konvergent*, wobei im Bayesschen Netz nur die letzten drei relevant sind. Bei einer seriellen Verbindung zwischen Knoten gibt es eine direkte Reihenfolge. Von einem Knoten startet eine divergente Verbindung, wenn von diesem Kanten in mehrere Knoten münden. Laufen dagegen mehrere Kanten in einem Knoten zusammen, so nennt man dies konvergent. Diese allgemeinen Struktureigenschaften sind relevant, wenn man durch die Verwendung graphentheoretischer Kriterien auf mögliche Zustände schließen möchte. In gerichteten Graphen ist insbesondere die d-Separation (für *dependence*) von Bedeutung, weil sich dadurch Unabhängigkeiten zwischen Zufallsvariablen ergeben.

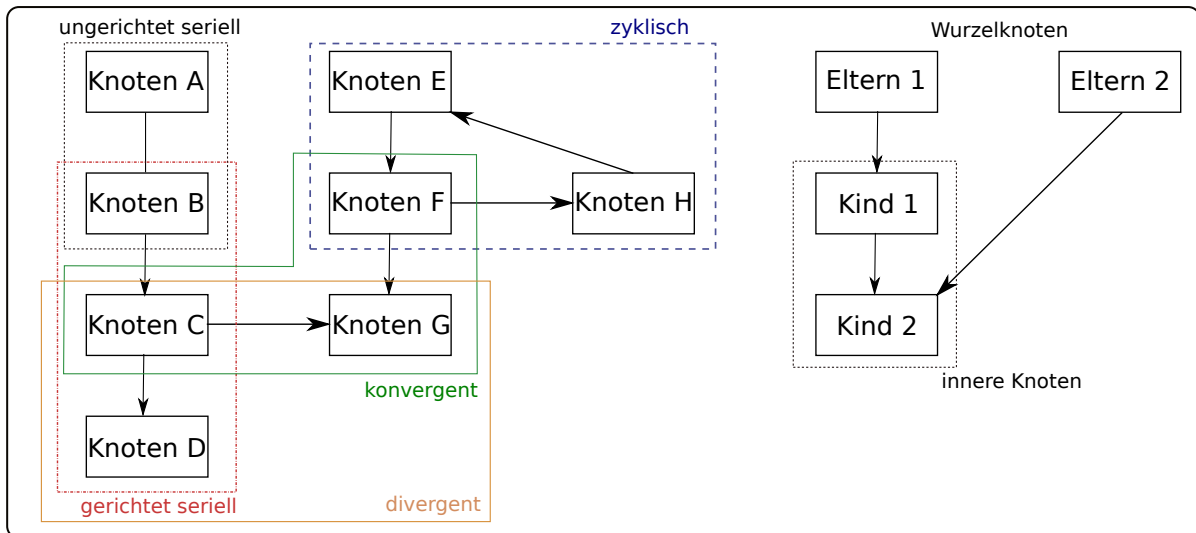


Abbildung 3.1: Übersicht zu Bezeichnungen und Strukturen in Bayesschen Netzen (mit Ausnahme der zyklischen Verbindung).

In einer seriellen Verbindung (siehe Knoten $B \rightarrow C \rightarrow D$ in Bild 3.1) sind die Knoten B und D unabhängig, wenn Knoten C bekannt ist. Eine Kenntnis von B liefert dann keine zusätzliche Information über D . In einer konvergenten Verbindung wie Knoten $C \rightarrow G \leftarrow F$ müssen dazu alle unbestimmt und in einer divergierenden Verbindung wie $C \rightarrow G, C \rightarrow D$ liefert dagegen d-Separation für D und G bei bekanntem C vor. Durch d-Separation werden letztendlich Kausalzusammenhänge unterbrochen, die zuvor bestanden haben. Ist in der betrachteten seriellen Verbindung sozusagen B die Vergangenheit, C die Gegenwart und D die Zukunft, so werden mit Kenntnis von C Vergangenheit und Zukunft unabhängig voneinander. Für weitere Details muss erneut auf die Fachliteratur verwiesen werden [91].

Bayessche Netze als gemeinsame Wahrscheinlichkeitsverteilung

Mit Blick auf die Anlagensicherheit verwendet man Bayessche Netze, um den Beitrag von Einzelrisiken auf ein Gesamtrisiko eines Systems graphisch darzustellen und berechnen zu können. Die Zufallsvariablen an den Knoten stellen hierbei die feinsten, in der Risikoanalyse aufgeschlüsselten Teilrisiken des Gesamtsystems dar. Ist das Netz mit Hilfe der Zufallsvariablen K_1, \dots, K_n konstruiert, so ist für die Gesamtwahrscheinlichkeitsverteilung [81]:

$$P(K_1, \dots, K_n) = \prod_{i=1}^n P(K_i | \text{Elternknoten}(K_i)). \quad (3.20)$$

Hierin wird ersichtlich, dass die bedingten Wahrscheinlichkeiten an einem Knoten nur von den Hypothesen der Elternknoten abhängig sind. Dahinter verbirgt sich die Faktorisierung in Bayesschen Netzen, die eine enorme Vereinfachung in der Darstellung der gemeinsamen Verteilungsfunktion beinhaltet. Das BN wird genutzt, um das Gesamtvertrauen in einzelne Zustände der Zufallsvariablen zu bestimmen. Später wird auch gezeigt, dass die Stärke der kausalen Korrelation durch die Dicke der gerichteten Kanten illustriert werden kann. Das Wissen über einen Zustand einer Zufallsvariablen (Evidenz) kann benutzt werden, den damit verträglichen, wahrscheinlichsten Zustand der anderen Zufallsvariablen über Wahrscheinlichkeitspropagation zu bestimmen. Hierfür werden a priori Wahrscheinlichkeiten für die stochastisch unabhängigen Wurzelknoten benötigt sowie bedingte Wahrscheinlichkeiten für die inneren Knoten. Diese werden in Form von (mehrdimensionalen) Wahrscheinlichkeitsmatrizen abgespeichert. Die Matrizen mit den bedingten Wahrscheinlichkeiten für die inneren Knoten sind jedoch nur bedingt

abhängig von deren Elternknoten. Die mathematische Grundlage hierfür ist die in 3.15 angegebene Bayessche Formel. Sei E im Folgenden ein Ereignis und K_j Hypothesen des Knotens K (aus einem Satz disjunkter Hypothesen), so gilt:

$$P(K_j|E) = \frac{P(E|K_j) \cdot P(K_j)}{\sum_{j=1}^n P(E|K_j) \cdot P(K_j)}. \quad (3.21)$$

Die Größe $P(K_j|E)$ stellt das Vertrauen (später: BEL-Wert bzw. BELIEVE) in die Hypothese K_j dar, wenn E beobachtet wurde. Weiterhin gilt für die totale Wahrscheinlichkeit des Ereignisses E :

$$P(E) = \sum_{j=1}^m P(E|K_j) \cdot P(K_j), \quad (3.22)$$

wenn K_j , $j = 1, \dots, m$ ein vollständiger Satz disjunkter Hypothesen ist.

Die Gleichung (3.21) erlaubt zwei Interpretationen. Sei beispielsweise S ein Schaden (vgl. Kapitel 6) ein Defekt an einer Dichtung an einem Schwimmdachtank) und E eine Konsequenz oder ein detektierbares Ereignis (z. B. eine erhöhte Emission), dann ist $P(E|S)$ die bedingte Wahrscheinlichkeit einer erhöhten Emission durch den Schaden. Dies sind üblicherweise numerische Werte, die durch die Spezifikation der Transfermatrizen gegeben sind und mit der Initialisierung des Netzes errechnet werden.

Die bedingte Wahrscheinlichkeit $P(S|E)$ stellt die Wahrscheinlichkeit für einen spezifischen Schaden dar, wenn E beobachtet wurde. Dies wird durch Propagation von Wahrscheinlichkeiten mit Hilfe des Netzes berechnet.

3.3.4. Initialisierung Bayesscher Netze

Unter der Initialisierung eines Bayesschen Netzes versteht man die Eingabe der Wahrscheinlichkeitsdaten an allen Knoten und die Bestimmung des aktuellen Vertrauens in die Hypothesen. Hier wird davon ausgegangen, dass sowohl die Graphenstruktur als auch die Ausdifferenzierung der einzelnen Hypothesen an den Knoten bereits vorgegeben ist. Änderungen an der Kausalstruktur machen üblicherweise andere oder weitere Wahrscheinlichkeitsdaten erforderlich, während Änderungen an den Hypothesen üblicherweise Anforderungen an den Detaillierungsgrad der vorhandenen Informationen stellen. Für weitere Informationen sei auf die Bücher von Pearl und Neapolitan [74, 81] verwiesen.

In der Initialisierungsphase ordnet man den Wurzelknoten a priori Wahrscheinlichkeiten zu. Gemäß (3.20) sind die hierbei spezifizierten Wahrscheinlichkeitsdaten stochastisch unabhängig voneinander, da es zwischen den Wurzelknoten keine Kanten gibt. Als hierfür wichtige Datenquellen sind Datenbanken, Expertenmeinungen und Literaturdaten zu nennen. Hinter jeder Hypothese verbirgt sich eine Realisierung des Zustandes des betreffenden Knotens. Es wird grundsätzlich angenommen, dass das zu beschreibende System bezüglich seines Zustandes jederzeit klassifizierbar ist. Daher gilt, dass die Summe der Wahrscheinlichkeiten der Hypothesen stets 1 ist. Sei A ein Wurzelknoten und A_i , $i = 1, \dots, n$ die unterschiedenen Hypothesen, so gilt demnach:

$$\sum_{i=1}^n P(A_i) = 1, \quad P(A_i) \geq 0. \quad (3.23)$$

Für innere Knoten B werden nach (3.20) bedingte Wahrscheinlichkeiten in Abhängigkeit von den Hypothesen der (unmittelbaren) Elternknoten benötigt. Für feste Bedingungen gilt:

$$\sum_{i=1}^n P(B_i|A_{j_1} A_{j_2} \cdots A_{j_n}) = 1, \quad (3.24)$$

weil für jede feste Bedingung eine Konsequenz eintreten muss. Bedingte Wahrscheinlichkeiten werden als geschichtete Matrizen dargestellt. Die Einträge in diesen Matrizen entsprechen den zuvor spezifizierten Wahrscheinlichkeiten:

$$M(B_1|A_2 \cdots A_n)_{i_1, i_2, \dots, i_n}, \quad (3.25)$$

mit $|i_1|$ -Schichten aus $n - 1$ dimensionalen Matrizen. Die Summe der einzelnen Schichten für eine feste Bedingung ergibt stets eine Eins-Matrix:

$$\sum_{i_1=1}^n P(B_1|A_2 \cdots A_n)_{i_1, i_2, \dots, i_n} = \mathbb{1}. \quad (3.26)$$

Eine Eins-Matrix zeichnet sich dadurch aus, dass für alle Elemente dieser Matrix $a_{m,n} = 1$ gilt. Für die Summe zugehöriger Matrixelemente über die Schichten gilt somit (3.24).

Die Transfermatrizen stellen die Wahrscheinlichkeiten der Hypothesen eines Knotens in Abhängigkeit zu den Hypothesen der vorangegangenen Knoten dar. Ein Spezialfall dafür ist ein Knoten mit nur einem Elternknoten. Die Verbindungsmatrix für jeweils zwei angenommene Hypothesen bei Kinder- und Elternknoten ist dann:

$$1. \text{ Schicht : } M(B_1|A)_j = \begin{pmatrix} P(B_1|A_1) & P(B_1|A_2) \end{pmatrix}, \quad (3.27)$$

$$2. \text{ Schicht : } M(B_2|A)_j = \begin{pmatrix} P(B_2|A_1) & P(B_2|A_2) \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

Die beiden Verbindungsmatrizen sind im Format 1×2 und lassen sich daher der besseren Übersicht halber in die folgende 2×2 -Matrix zusammenschreiben:

$$M(B|A) = \begin{pmatrix} P(B_1|A_1) & P(B_1|A_2) \\ P(B_2|A_1) & P(B_2|A_2) \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

Ein Knoten mit beispielsweise zwei Elternknoten (A, C), in denen wiederum genau zwei Hypothesen unterschieden werden, ist gemäß (3.25) durch folgende Matrizen gekennzeichnet:

$$1. \text{ Schicht : } M(B_1|AC)_{j,k} = \begin{pmatrix} P(B_1|A_1C_1) & P(B_1|A_1C_2) \\ P(B_1|A_2C_1) & P(B_1|A_2C_2) \end{pmatrix}, \quad (3.30)$$

$$2. \text{ Schicht : } M(B_2|AC)_{j,k} = \begin{pmatrix} P(B_2|A_1C_1) & P(B_2|A_1C_2) \\ P(B_2|A_2C_1) & P(B_2|A_2C_2) \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

Sind alle a priori und bedingten Wahrscheinlichkeiten zugeordnet, so schließt die Initialisierung mit der Berechnung des aktuellen Gesamtvertrauens in die Hypothesen aller Knoten ab. Auf der Grundlage der eingestellten Daten spiegelt das Netz dann die gemeinsame Wahrscheinlichkeitsverteilung wider. Hierfür werden für jede Hypothese an jedem Knoten π -, λ - und BEL -Werte bestimmt. Die π -, λ - und BEL -Werte werden für die Knoten bisweilen zu Vektoren zusammengefasst und bilden später eine geeignete Form, um ebenso Evidenzen zu verarbeiten und Vertrauenswerte zu berechnen. Dies soll zunächst allgemein dargestellt werden.

Sind ein Ereignis E und disjunkte Hypothesen K_j , ($j = 1, \dots, n$) des Knotens K vorhanden, gilt mit der Bayesschen Formel (3.15):

$$P(K_j|E) = \frac{P(E|K_j) \cdot P(K_j)}{\sum_{j=1}^n P(E|K_j) \cdot P(K_j)}. \quad (3.32)$$

Den einzelnen Termen ordnet man nun neue Symbole (π -, λ -, und BEL) zu:

$$BEL(K_j) \hat{=} P(K_j|E) \text{ mit } \sum_{i=1}^n BEL(K_i) = 1,$$

$$\begin{aligned}\lambda(K_j) &\hat{=} P(E|K_j), \\ \pi(K_j) &\hat{=} P(K_j), \\ \alpha &\hat{=} \frac{1}{\sum_{j=1}^n P(E|K_j) \cdot P(K_j)}.\end{aligned}$$

Hierin ist α ein Normierungsfaktor. Vergleiche mit dem weiter oben angegebenen Würfelbeispiel zeigen folgende Interpretation:

- Der π -Wert repräsentiert dabei das aktuelle Maß für die kausale Unterstützung einer Hypothese. Es ist eine datenbezogene Grundwahrscheinlichkeit für die Hypothesen bzw. für die disjunkten Ereignisse. Diese Größe zeigt damit auch, wie stark eine Hypothese durch die Grundeinstellung des Netzes auf der Basis der Initialisierungsdaten gestützt wird. Bei einem Wurzelknoten ist dies in der Initialisierung mit der a priori Wahrscheinlichkeit identisch.
- Der λ -Wert ist das aktuelle Maß für die diagnostische Unterstützung einer Hypothese durch die Kinderknoten. Repräsentiert wird die Eintrittswahrscheinlichkeit von einem Ereignis E , wenn A_i eintritt.
- Der BEL-Wert ist das Maß für das Gesamtvertrauen in eine Hypothese, wenn ein Ereignis E beobachtet wurde. Bei einem Wurzelknoten ist dies in der Initialisierung mit der a priori Wahrscheinlichkeit identisch.

Setzt man die π -, λ -, und BEL -Vektoren in (3.32) ein, so folgt:

$$\overrightarrow{BEL} = \alpha \times \overrightarrow{\lambda}(K_j) \times \overrightarrow{\pi}(K_j). \quad (3.33)$$

Hierbei handelt es sich nicht um Vektor- oder Skalarprodukte. Die Multiplikation ist zeilenweise auszuführen. Die Anzahl der Komponenten der π -, λ - und BEL -Vektoren entspricht der Anzahl der Hypothesen eines Knotens:

$$\begin{aligned}BEL(K_1) &= \alpha \cdot \lambda(K_1) \cdot \pi(K_1) \\ BEL(K_2) &= \alpha \cdot \lambda(K_2) \cdot \pi(K_2) \\ &\vdots \\ BEL(K_n) &= \alpha \cdot \lambda(K_n) \cdot \pi(K_n)\end{aligned} \hat{=} \alpha \begin{pmatrix} \lambda(K_1) \\ \lambda(K_2) \\ \vdots \\ \lambda(K_n) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \pi(K_1) \\ \pi(K_2) \\ \vdots \\ \pi(K_n) \end{pmatrix}, \quad (3.34)$$

α wird dabei so bestimmt, dass gilt:

$$\sum_{j=1}^n BEL(K_j) = \alpha \cdot \sum_{j=1}^n \lambda(K_j) \cdot \pi(K_j) = 1 \quad \longrightarrow \quad \alpha = \frac{1}{\sum_{j=1}^n \lambda(K_j) \cdot \pi(K_j)}. \quad (3.35)$$

Die λ -Vektoren der Knoten sind zu $\overrightarrow{\lambda} = 1$ gewählt. In der Initialisierungsphase ist das Gesamtvertrauen bestimmt durch die kausale Unterstützung der Hypothesen (BEL -Vektor = π -Vektor), was der totalen Wahrscheinlichkeit entspricht. Bei Wurzelknoten ist dies identisch mit den a priori Wahrscheinlichkeiten. Sind die Wahrscheinlichkeiten bedingt durch die Hypothesen der Vorgängerknoten, muss die totale Wahrscheinlichkeit für K_1, K_2, \dots, K_n mit (3.14) berechnet werden. Ist K von E_1, E_2, \dots, E_n Sätzen disjunkter Ereignisse abhängig, folgt für $\pi(K)$:

$$P(K) = \pi(K) = \sum_{j_1=1}^{m_1} \sum_{j_2=1}^{m_2} \dots \sum_{j_n=1}^{m_n} P(K|E_{j_1}E_{j_2} \dots E_{j_n}) \cdot P(E_{j_1}) \cdot P(E_{j_2}) \dots P(E_{j_n}). \quad (3.36)$$

Nachdem alle Knoten mit den π -, λ - und BEL -Vektoren versehen wurden, ist die Initialisierungsphase abgeschlossen. Dem Netz können Vertrauenswerte entnommen werden und es ist

3. Bayessche Netze und deren Anwendung als Verfahren der Risikoanalyse

vorbereitet zur Verarbeitung von Evidenzen. Eine grafische Veranschaulichung zur Netzkonstruktion und Initialisierung zeigt die Abbildung 3.2. Die gezeigten Handlungsschritte können ebenso als Workflow bzw. als Handlungsrezept für eine typische Aufstellung und Initialisierung eines Bayesschen Netzes aufgefasst werden.

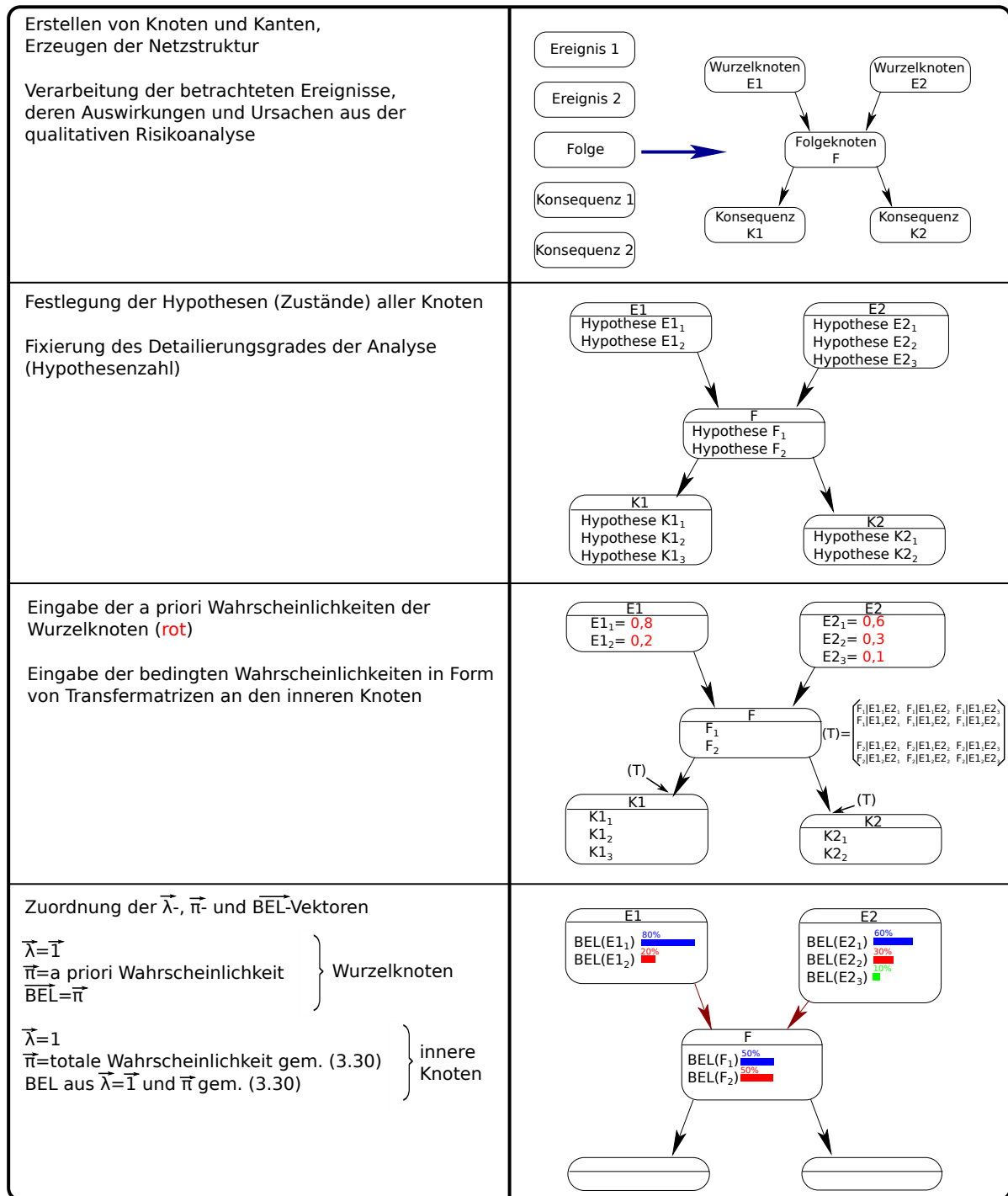


Abbildung 3.2: Darstellung eines vereinfachten Ablaufschemas zur Netzkonstruktion und zur Initialisierung.

3.3.5. Propagieren von Wahrscheinlichkeiten in Bayesschen Netzen

Kausale Inferenz

Eine wichtige Besonderheit Bayesscher Netze ist die Fähigkeit zur Untersuchung von kausalen Inferenzen. Darunter versteht man das gezielte Einspeisen von Beobachtungen (Evidenzen) und einer Aktualisierung des Netzes. Beobachtungsdaten werden in das Netz eingegeben, in dem gezielt das Vertrauen in ausgewählte Hypothesen verändert wird. Hierzu modifiziert man Bedingungen oder Zustände („Was wäre, wenn ...?“). Die Stärke der kausalen Beeinflussung ist zudem nicht für alle Verbindungen zwischen den Knoten im Netz identisch, wodurch weitere Informationen gewonnen werden können. Das Einspeisen von Beobachtungsdaten geschieht hierbei dadurch, dass die BEL-Werte an einzelnen Hypothesen gezielt modifiziert werden. Durch die Aktualisierung werden die Vertrauenswerte aller anderen Knoten neu berechnet und widerspiegeln die aktualisierte gemeinsame Verteilung unter der Bedingung der eingespeisten Beobachtung.

Üblicherweise unterscheidet man folgende Inferenztypen:

- diagnostisch (Welche Ursachen müssen gegeben sein, damit eine spezifische Konsequenz beobachtet wird?),
- kausal (Wie verändern sich die Konsequenzen bei Modifikation der Ursachen?),
- gemischt (Kombinationen aus den vorgenannten Fragen).

Dadurch können Schlussfolgerungen gezogen und Bayessche Netze dazu verwendet werden, um Vermutungen über nicht beobachtetes Verhalten bzw. Prognosen zu treffen.

Anzumerken ist, dass in Bayesschen Netzen zwar bedingte Wahrscheinlichkeiten zur Beschreibung der Abhängigkeiten eingespeist werden, aber die grundsätzliche Frage nach dem Vorhandensein einer echten Kausalität oder nur einer Korrelation unbeantwortet bleibt⁵. Durch das Arbeiten mit dem Netz wird eine Kausalität unterstellt. Ob die getroffenen Annahmen über stochastische Unabhängigkeit und die bedingten Abhängigkeiten zutreffen, kann nicht durch das Netz entschieden werden. Hierzu sind oftmals weitere Untersuchungen an den Ausgangsdaten notwendig.

Propagation von Wahrscheinlichkeiten

Das Verfahren der Propagation von Wahrscheinlichkeiten soll verkürzt dargestellt werden. Es werden die folgenden Zuordnungen getroffen:

- K ist ein innerer Knoten mit den Hypothesen K_1, K_2, \dots, K_n ,
- K hat die Vorgängerknoten V_1, V_2, \dots, V_n mit den Hypothesen $V_{m,1}, \dots, V_{m,m_i}$,
- der Knoten K hat zu seinen Vorgängerknoten V_1, V_2, \dots, V_n eine mehrdimensionale, mehrschichtige Verbindungsmatrix $M(K|V_1 V_2 \dots V_n)$.

Bei Eintritt einer Evidenz an dem Knoten K wird der vorhandene λ -Vektor aktualisiert, indem er durch einen neuen λ -Vektor ersetzt wird. Der neue λ -Vektor repräsentiert das neue Vertrauen in die Hypothesen als Konsequenz der Beobachtung. Der π -Vektor bleibt dabei für den

⁵In diesem Sinne kann man ein Bayessches Netz aufstellen, das einen Zusammenhang zwischen Babys und Störchen darstellt. Es ist allgemein bekannt, dass es zwischen den Beobachtungswerten eine Korrelation geben könnte, aber keinen Kausalzusammenhang. Dennoch müssen die gefundenen Schlussfolgerungen mit einem hierfür aufgestellten Bayesschen Netz nicht zwingend alle falsch sein.

Knoten K unverändert. Jedem Vorgängerknoten wird nun ein Spaltenvektor als λ -Nachricht übermittelt, der so viele Zeilen enthält, wie der Vorgängerknoten Hypothesen hat:

$$\lambda_K(V_i) = \begin{pmatrix} \lambda_K(V_{i,1}) \\ \vdots \\ \lambda_K(V_{i,m_i}) \end{pmatrix}. \quad (3.37)$$

Die λ -Nachricht an den Vorgängerknoten wird wie folgt berechnet:

$$\lambda_K(V_{i,L}) = \sum_{y=1}^h (\lambda(K_y)) \cdot \left[\sum_{j_1=1}^{m_1} \cdots \sum_{j_{i-1}=1}^{m_{i-1}} \sum_{j_{i+1}=1}^{m_{i+1}} \cdots \sum_{j_n=1}^{m_n} M(K|V_1 \cdots V_n)_{y,j_1,j_{i-1},j_{i+1},j_n} \cdot \prod_{q=1, q \neq i}^n \pi_K(V_{q,j_q}) \right]. \quad (3.38)$$

Für einen Knoten K mit nur einem Vorgängerknoten folgt aus (3.38) der Spezialfall:

$$\lambda_K(V_L) = \sum_{y=1}^h \lambda(K_y) M(K|V)_{y,L}. \quad (3.39)$$

Für einen Knoten mit zwei Vorgängerknoten folgt aus (3.38) der Spezialfall:

$$\lambda_K(V_{1,L}) = \sum_{y=1}^h \lambda(K_y) \left[\sum_{j_2=1}^{m_2} M(K|V_1 V_2)_{y,L,j_2} \cdot \pi_K(V_{2,j_2}) \right]. \quad (3.40)$$

Mit der λ -Nachricht von Knoten K und weiteren Nachfolgeknoten K_n kann der λ -Wert der jeweiligen Vorgängerknoten V_1, V_2, \dots, V_n aktualisiert werden. Nicht aktivierte Knoten gehen mit dem λ -Wert aus der Initialisierungsphase ein. Es gilt folgende Gleichung:

$$\lambda(V_n) = \prod_{i=1}^s \lambda_i(V_n). \quad (3.41)$$

Zusätzlich zur λ -Nachricht senden aktivierte Knoten an nicht aktualisierte, durch Kanten verbundene Nachfolger einen neuen π -Vektor mit einer π -Nachricht:

$$\pi_N(K) = \pi(K_j) \cdot \prod_{K=1, K \neq j} \lambda_{k,j}(K). \quad (3.42)$$

Mit der π -Nachricht wird der π -Vektor des Nachfolgeknotens aktualisiert:

$$\pi(K_n) = \sum_{j_1=1}^{m_1} \cdots \sum_{j_n=1}^{m_n} M(K|V_1 \cdots V_n)_{i,j_1, \dots, j_n} \pi_K(V_{1,j_1}) \cdots \pi_K(V_{n,j_n}). \quad (3.43)$$

Abschließend werden der \overrightarrow{BEL} -Vektor und α gemäß (3.33) und (3.35) für alle aktualisierten Knoten neu berechnet.

In Abbildung 3.3 ist ein allgemeines Ablaufschema (Rezept) für die Durchführung der Propagierung von Wahrscheinlichkeiten dargestellt. Dieses Rezept geht davon aus, dass eine Initialisierung gemäß des Rezeptes aus Abbildung 3.2 bereits durchgeführt wurde. Die jeweils aktivierten Knoten wurden farbig hervorgehoben.

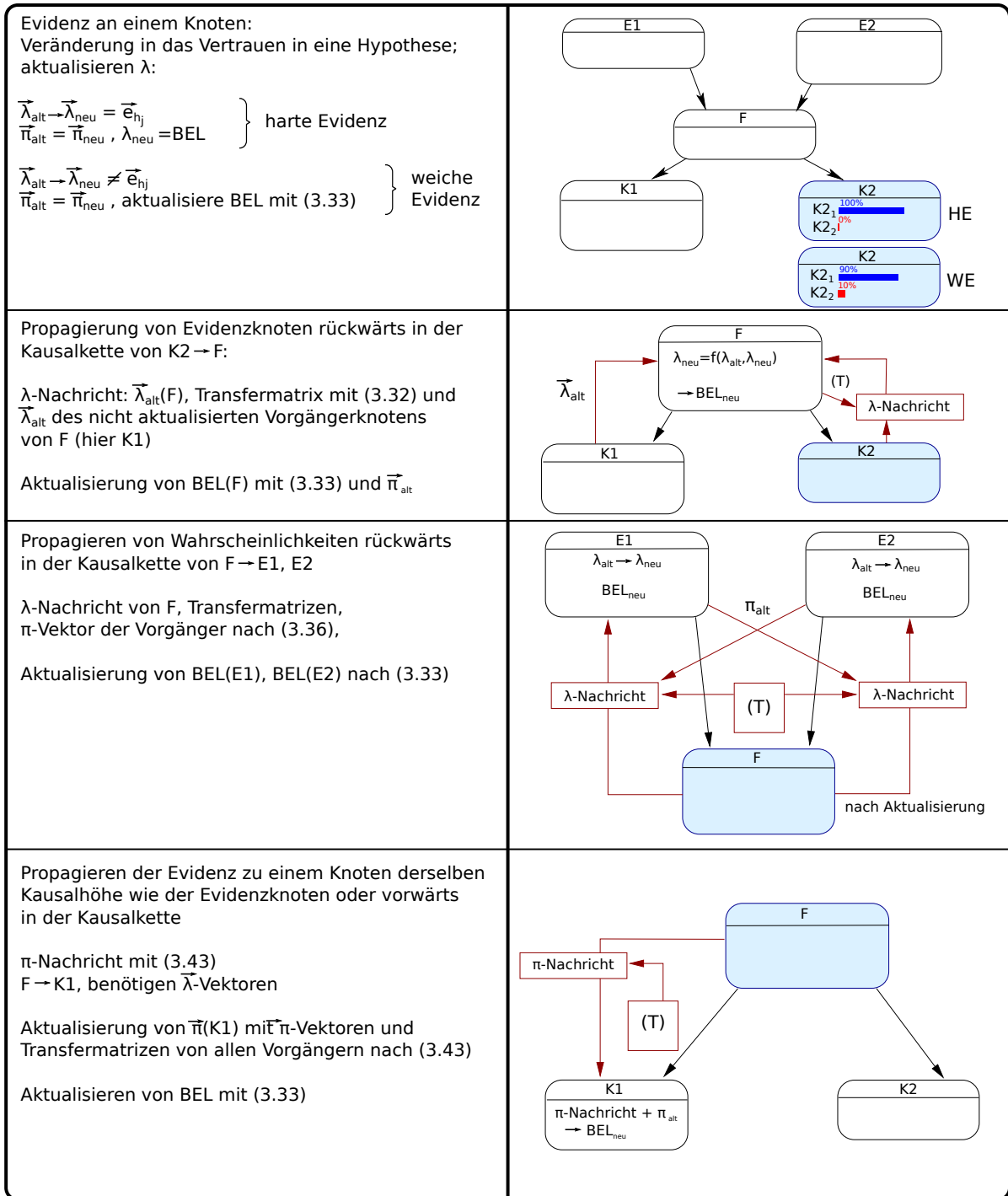


Abbildung 3.3: Ablaufschema zur Aktualisierung des Netzes nach Einspeisen einer Beobachtung (Evidenz).

3.3.6. Analytische Beispielrechnungen

Netzausschnitt für die Beispielanwendung

Für die Demonstration einer Beispielrechnung wurde ein Teilbereich des Bayesschen Netzes zum Schwimmdachtank aus Kapitel 6 ausgewählt. Die Erstellung der Illustration zum Netz erfolgte mit der Software GeNIe [92]. Hinweise zur (intuitiven) Bedienung finden sich ebenso in den Abbildungen. Zur Vereinfachung der Berechnungen wurde die Datengrundlage zu den Knoten so modifiziert, dass nur wenige Nachkommastellen benötigt werden. Bild 3.4 zeigt

das volle Netz für die Bestimmung der Wahrscheinlichkeit zur Herausbildung einer gefährlichen explosionsfähigen Atmosphäre an einem Schwimmdachtank und den Netzauszug, welcher zunächst näher betrachtet werden soll. Das Teilnetz besteht aus Knoten, welche emissions-

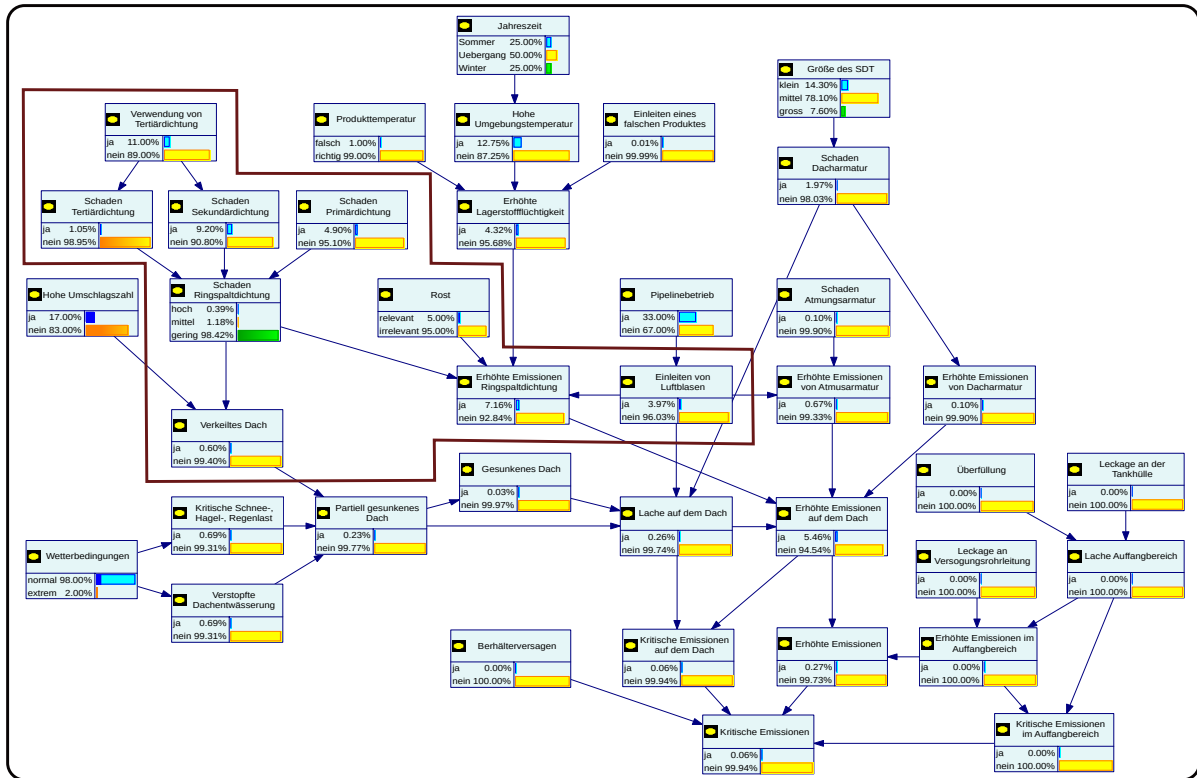


Abbildung 3.4: Illustration des Netzes für die Bestimmung der Wahrscheinlichkeit zur Herausbildung einer gefährlichen explosionsfähigen Atmosphäre an einem Schwimmdachtank und den für weitere Betrachtungen ausgewählten Netzauszuges.

relevante Schäden an der Ringspaltabdichtung sowie Rost und Luftblasen erfassen und deren Auswirkungen auf eine mögliche Erhöhung der Emissionen einschätzen. Bei den Dichtungsschäden ist die Anzahl der vorhandenen Dichtungsränge wichtig, weil mit jeder zusätzlichen Dichtungsstufe die Emissionsneigung abnimmt und die innenliegenden Dichtungsränge stärker von Witterungseinflüssen abgeschirmt sind. Allerdings besitzen nicht alle Schwimmdachtanks eine Tertiärdichtung. Durch Rostbildung nimmt die Schmierfilmdicke an der Tankhülle zu, so dass sich hierdurch tendenziell höhere Emissionen ergeben, ebenso wie im Falle einer höheren grundsätzlichen Lagerstoffflüchtigkeit (z. B. durch hohe Produkttemperaturen) oder beim Einleiten von Luft in den Tank (z. B. im Pipelinebetrieb). Weitere Details zum Netz werden ausführlich in Kapitel 6 diskutiert. Aus diesem Netzauszug wurden weitere Knoten entfernt, die für die Präsentation einer analytischen Beispielrechnung unnötigen Ballast darstellen würden. In Abbildung 3.5 ist das verbleibende, ausgewählte Beispielnetz (rechts) dargestellt. Es besteht aus fünf Knoten zur Beschreibung erhöhter Emissionen aus der Ringspaltabdichtung und einer möglichen Verkeilung des Tankdaches. In der Abbildung wird auch angedeutet, wie man mit der Software GeNIe Knoten spezifiziert und Kanten setzt. Durch einen Mausklick auf die gelbe Ellipse setzt man zunächst einen Knoten, dessen Eigenschaften man mittels Betätigen der rechten Maustaste unter *node properties* einstellt. Dies sind der Name, die zu unterscheidenden Hypothesen und die Datengrundlage. Die Verbindung zweier Knoten erfolgt durch Auswahl des *Arc* in der Auswahlzeile. Anschließend klickt man auf den Startknoten und zieht den Pfeil bis zum Zielknoten.

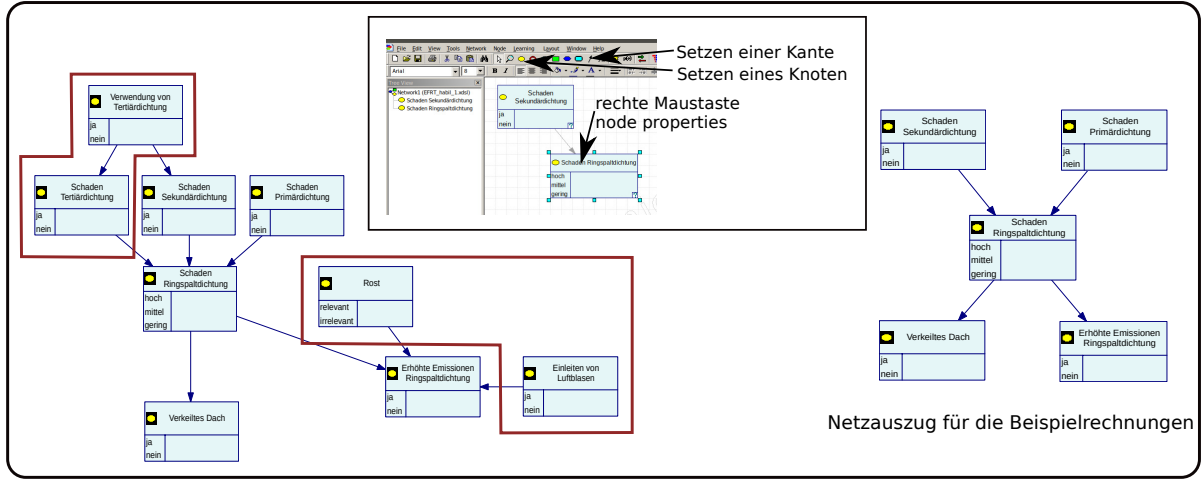


Abbildung 3.5: Illustration der Auswahl des Teilnetzes für die Beispielrechnungen (rechts). Die rot umrandeten Knoten (links) wurden hierfür ebenso ausgelassen. Der mittlere Teil zeigt die Auswahl von Knoten und Kanten in GeNIe.

Beispielrechnung zur Initialisierung

Für das Beispielnetz müssen zunächst a priori Wahrscheinlichkeiten für die Wurzelknoten *Schaden Sekundärdichtung* (S) und *Schaden Primärdichtung* (P) eingespeist werden. Diese wurden aufwändig durch Betreiber- und Expertenbefragungen erhoben [93], hier jedoch zur Vereinfachung der Rechnungen willkürlich gesetzt. Für die Wurzelknoten gilt:

$$\begin{aligned}
 P(S) &= \begin{pmatrix} P(S_1) \\ P(S_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P(\text{Schaden Sekundärdichtung: ja}) \\ P(\text{Schaden Sekundärdichtung: nein}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0, 20 \\ 0, 80 \end{pmatrix} \\
 P(P) &= \begin{pmatrix} P(P_1) \\ P(P_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P(\text{Schaden Primärdichtung: ja}) \\ P(\text{Schaden Primärdichtung: nein}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0, 10 \\ 0, 90 \end{pmatrix}. \quad (3.44)
 \end{aligned}$$

Durch diese willkürlichen Werte wird dennoch berücksichtigt, dass die Sekundärdichtung als äußerster Dichtungsring tendenziell häufiger beschädigt ist. Alle anderen Knoten des Beispielnetzes benötigen für die Initialisierung Matrizen mit bedingten Wahrscheinlichkeiten in Abhängigkeit der Hypothesen der jeweiligen Elternknoten. Zunächst gelte für den Knoten *Schaden Ringspalttdichtung* (R):

$$\begin{pmatrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{Schaden Ringspalttdichtung: hoch} \\ \text{Schaden Ringspalttdichtung: mittel} \\ \text{Schaden Ringspalttdichtung: gering} \end{pmatrix}. \quad (3.45)$$

Gemäß (3.25) läßt sich die Transfermatrix als dreischichtige 2×2 -Matrix darstellen. Für die Schichten gelte:

$$M(R_1|S P)_{j,k} = \begin{pmatrix} P(R_1|S_1P_1) & P(R_1|S_1P_2) \\ P(R_1|S_2P_1) & P(R_1|S_2P_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0, 30 & 0, 10 \\ 0, 20 & 0, 00 \end{pmatrix}, \quad (3.46)$$

$$M(R_2|S P)_{j,k} = \begin{pmatrix} P(R_2|S_1P_1) & P(R_2|S_1P_2) \\ P(R_2|S_2P_1) & P(R_2|S_2P_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0, 60 & 0, 50 \\ 0, 50 & 0, 00 \end{pmatrix}, \quad (3.47)$$

$$M(R_3|S P)_{j,k} = \begin{pmatrix} P(R_3|S_1P_1) & P(R_3|S_1P_2) \\ P(R_3|S_2P_1) & P(R_3|S_2P_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0, 10 & 0, 40 \\ 0, 30 & 1, 00 \end{pmatrix}. \quad (3.48)$$

Für den Knoten *Verkeiltes Dach* (V) werden zwei Hypothesen unterschieden:

$$\begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{Verkeiltes Dach: ja} \\ \text{Verkeiltes Dach: nein} \end{pmatrix}. \quad (3.49)$$

Für die Transfermatrix gelte:

$$M(V|R)_{i,j} = \begin{pmatrix} P(V_1|R_1) & P(V_1|R_2) & P(V_1|R_3) \\ P(V_2|R_1) & P(V_2|R_2) & P(V_2|R_3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,20 & 0,10 & 0,00 \\ 0,80 & 0,90 & 1,00 \end{pmatrix}. \quad (3.50)$$

Der Knoten *Erhöhte Emissionen Ringspalttdichtung* (E) besitzt wiederum zwei Hypothesen:

$$\begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{Erhöhte Emissionen Ringspalttdichtung: ja} \\ \text{Erhöhte Emissionen Ringspalttdichtung: nein} \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

Für die Transfermatrix gelte:

$$M(E|R)_{i,j} = \begin{pmatrix} P(E_1|R_1) & P(E_1|R_2) & P(E_1|R_3) \\ P(E_2|R_1) & P(E_2|R_2) & P(E_2|R_3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,5 & 0,3 & 0,0 \\ 0,5 & 0,7 & 1,0 \end{pmatrix}. \quad (3.52)$$

Für die Initialisierung verbleibt die Zuordnung bzw. die Berechnung der λ -, π - und BEL-Werte. Der λ -Vektor wird bei der Initialisierung auf $\lambda = 1$ gesetzt. Das Gesamtvertrauen in die Hypothesen der Wurzelknoten entspricht den a priori Wahrscheinlichkeiten. Die π - und BEL-Vektoren sind damit trivial und identisch:

$$\overrightarrow{BEL}(S) = \alpha \times \overrightarrow{\lambda}(S) \times \overrightarrow{\pi}(S) = 1 \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0,20 \\ 0,80 \end{pmatrix} = \underline{\underline{\begin{pmatrix} 0,200 \\ 0,800 \end{pmatrix}}}, \quad (3.53)$$

$$\overrightarrow{BEL}(P) = \alpha \times \overrightarrow{\lambda}(P) \times \overrightarrow{\pi}(P) = 1 \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0,10 \\ 0,90 \end{pmatrix} = \underline{\underline{\begin{pmatrix} 0,100 \\ 0,900 \end{pmatrix}}}. \quad (3.54)$$

Der π -Wert für den Knoten R wird mit (3.36) bestimmt:

$$\begin{aligned} \pi(R_1) &= P(R_1) = \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^2 P(R_1|S_j P_k) \cdot P(S_j) \cdot P(P_k), \\ \pi(R_2) &= P(R_2) = \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^2 P(R_2|S_j P_k) \cdot P(S_j) \cdot P(P_k), \\ \pi(R_3) &= P(R_3) = \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^2 P(R_3|S_j P_k) \cdot P(S_j) \cdot P(P_k). \end{aligned} \quad (3.55)$$

Zunächst soll $\pi(R_1)$ berechnet werden:

$$\begin{aligned} \pi(R_1) &= P(R_1|S_1 P_1) \cdot P(S_1) \cdot P(P_1) + P(R_1|S_1 P_2) \cdot P(S_1) \cdot P(P_2) \\ &+ P(R_1|S_2 P_1) \cdot P(S_2) \cdot P(P_1) + P(R_1|S_2 P_2) \cdot P(S_2) \cdot P(P_2) \\ &= 0,30 \cdot 0,2 \cdot 0,10 + 0,10 \cdot 0,2 \cdot 0,90 + 0,20 \cdot 0,8 \cdot 0,10 + 0,00 \cdot 0,8 \cdot 0,90 \\ &= 0,040. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Die Berechnung der verbleibenden Komponenten liefert insgesamt für $\vec{\pi}(R)$:

$$\vec{\pi}(R) = \begin{pmatrix} 0,040 \\ 0,142 \\ 0,818 \end{pmatrix}. \quad (3.57)$$

Schließlich kann der BEL-Vektor berechnet werden:

$$\overrightarrow{BEL}(R) = \alpha \times \vec{\lambda}(R) \times \vec{\pi}(R) = 1 \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0,040 \\ 0,142 \\ 0,818 \end{pmatrix} = \underline{\underline{\begin{pmatrix} 0,040 \\ 0,142 \\ 0,818 \end{pmatrix}}}. \quad (3.58)$$

Mit der Initialisierung von R können anschließend dessen Kinderknoten V und E initialisiert werden. Der π -Wert für Knoten V wird wie folgt bestimmt:

$$\begin{aligned} \pi(V_1) &= \sum_{j=1}^3 P(V_1|R_j) \cdot P(R_j), \\ \pi(V_2) &= \sum_{j=1}^3 P(V_2|R_j) \cdot P(R_j). \end{aligned} \quad (3.59)$$

Mit der Transfermatrix von V und dem π -Vektor von R gilt:

$$\vec{\pi}(V) = \begin{pmatrix} 0,20 \cdot 0,04 + 0,10 \cdot 0,142 + 0,00 \cdot 0,818 \\ 0,80 \cdot 0,04 + 0,90 \cdot 0,142 + 1,00 \cdot 0,818 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,0222 \\ 0,9778 \end{pmatrix}. \quad (3.60)$$

Der BEL-Vektor für den Knoten V wird wie folgt bestimmt:

$$\overrightarrow{BEL}(V) = \alpha \times \vec{\lambda}(V) \times \vec{\pi}(V) = 1 \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0,0222 \\ 0,9778 \end{pmatrix} = \underline{\underline{\begin{pmatrix} 0,0222 \\ 0,9778 \end{pmatrix}}}. \quad (3.61)$$

Der π -Wert für Knoten E wird wie folgt bestimmt:

$$\begin{aligned} \pi(E_1) &= \sum_{j=1}^3 P(E_1|R_j) \cdot P(R_j), \\ \pi(E_2) &= \sum_{j=1}^3 P(E_2|R_j) \cdot P(R_j). \end{aligned} \quad (3.62)$$

Mit der Transfermatrix von E und dem π -Vektor von R gilt:

$$\vec{\pi}(E) = \begin{pmatrix} 0,50 \cdot 0,04 + 0,30 \cdot 0,142 + 0,00 \cdot 0,818 \\ 0,50 \cdot 0,04 + 0,70 \cdot 0,142 + 1,00 \cdot 0,818 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,0626 \\ 0,9374 \end{pmatrix}. \quad (3.63)$$

Der BEL-Vektor für den Knoten E wird wie folgt bestimmt:

$$\overrightarrow{BEL}(E) = \alpha \times \vec{\lambda}(E) \times \vec{\pi}(E) = 1 \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0,0626 \\ 0,9374 \end{pmatrix} = \underline{\underline{\begin{pmatrix} 0,0626 \\ 0,9374 \end{pmatrix}}}. \quad (3.64)$$

Mit der Bestimmung dieser Werte ist das Netz vollständig initialisiert. Die angegebenen drei Stellen sind für die weiteren Berechnungen erforderlich, da sich sonst zwischen den gerundeten und den mit der Software bestimmten Werten merkliche Abweichungen zeigen. Die Abbildung 3.6 zeigt das initialisierte Netz, erstellt mit der Software GeNIe. Man erkennt, dass die berech-

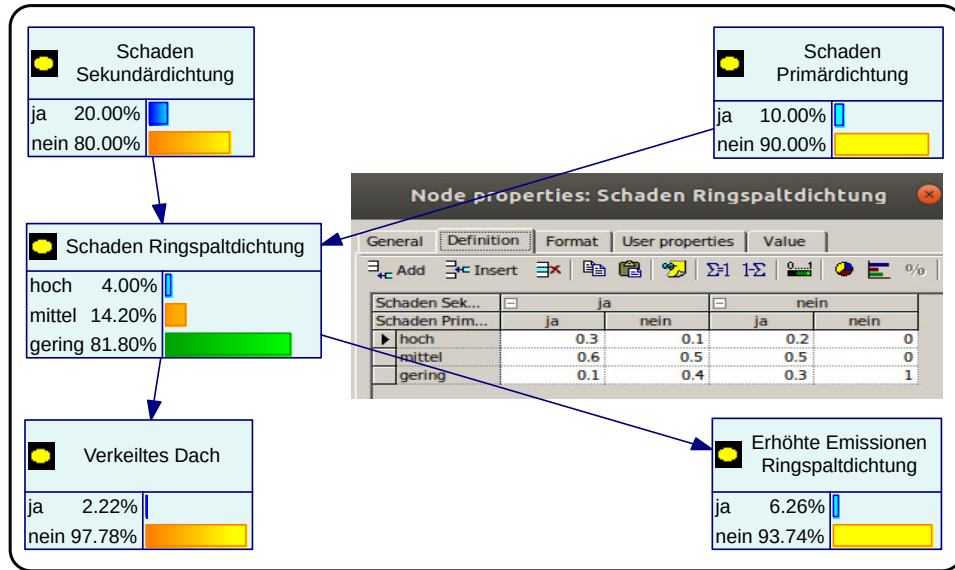


Abbildung 3.6: Illustration des Netzauszuges nach der Initialisierung. Ebenso wurde ein Eingabefenster für die Spezifikation einer Transfermatrix gezeigt.

neten und die durch die Software ermittelten BEL-Werte übereinstimmen.

Beispielrechnung zur Aktualisierung nach Einspeisung einer Evidenz

Eine Evidenz bzw. eine Beobachtung führt an einem Knoten zur Änderung der gespeicherten λ -Werte. Man unterscheidet harte und weiche Evidenzen. Bei einer harten Evidenz ist die Wahrscheinlichkeit für eine Hypothese eins und mit dem λ -Wert identisch, während die anderen Werte null sind. Eine weiche Evidenz ist ein λ -Vektor mit beliebigen Einträgen, wobei die Komponentensumme stets eins ergibt, ohne dass eine Komponente selbst bereits eins ist. In GeNIe stellt man dies als virtuelle Evidenz ein. Sind die Komponenten des λ -Vektor identisch, so entspricht dies jedoch dem Falle ohne neue Information. Im Folgenden wurde eine virtuelle Evidenz am Knoten **verkeiltes Dach** angenommen. Das λ_V ersetzt dabei laut Rezept den ursprünglichem λ -Wert des Knotens:

$$\vec{\lambda}(V)_{alt} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \implies \vec{\lambda}(V)_{neu} = \begin{pmatrix} 0,9 \\ 0,1 \end{pmatrix}. \quad (3.65)$$

Diese Wahl des λ -Vektors kann so interpretiert werden, dass es zwar nicht sicher, aber dennoch sehr wahrscheinlich ist, dass sich das Dach verkeilt hat. Durch die Evidenz müssen α und der BEL -Vektor neu berechnet werden, wogegen der π -Vektor erhalten bleibt. Mit (3.35) folgt zunächst:

$$\alpha = \frac{1}{\sum_{i=1}^2 \lambda(V_i)_{neu} \cdot \pi(V_i)_{alt}} = \frac{1}{(0,9 \cdot 0,0222 + 0,1 \cdot 0,9778)} = \frac{3125}{368}. \quad (3.66)$$

Mit (3.33) folgt für den BEL -Vektor des Knoten E :

$$\overline{BEL}(V)_{neu} = \alpha \times \vec{\lambda}(V)_{neu} \times \vec{\pi}(V)_{alt} = \frac{3125}{368} \times \begin{pmatrix} 0,9 \\ 0,1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0,0222 \\ 0,9778 \end{pmatrix} = \frac{1}{5888} \begin{pmatrix} 999 \\ 4889 \end{pmatrix}. \quad (3.67)$$

Gemäß des Rezeptes aus Abbildung 3.3 übermittelt der Knoten V nach der Aktualisierung eine λ -Nachricht an seinen Vorgängerknoten R . Mit (3.39) folgt für diese λ -Nachricht:

$$\begin{aligned}\vec{\lambda}_V(R_l) &= \sum_{y=1}^2 \lambda(V_y) \cdot M(V|R)_{y,l}, \\ \vec{\lambda}_V(R_l) &= \begin{pmatrix} \lambda(V_1) \cdot M(V_1|R_1) + \lambda(V_2) \cdot M(V_2|R_1) \\ \lambda(V_1) \cdot M(V_1|R_2) + \lambda(V_2) \cdot M(V_2|R_2) \\ \lambda(V_1) \cdot M(V_1|R_3) + \lambda(V_2) \cdot M(V_2|R_3) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Für die Berechnung werden das $\lambda_{neu}(V)$ und die Transfermatrix zwischen V und R eingesetzt:

$$\vec{\lambda}_V(R) = \begin{pmatrix} 0,9 \cdot 0,2 + 0,1 \cdot 0,8 \\ 0,9 \cdot 0,1 + 0,1 \cdot 0,9 \\ 0,9 \cdot 0 + 0,1 \cdot 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,260 \\ 0,180 \\ 0,100 \end{pmatrix}. \quad (3.69)$$

Die λ -Nachricht von Knoten E wird ebenfalls mit der Formel (3.39) berechnet. Da dieser jedoch nicht aktiviert ist, gilt:

$$\vec{\lambda}_E(R) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.70)$$

Der Knoten R hat nun die λ -Nachrichten all seiner Nachfolger erhalten. Mit den λ -Nachrichten der Vorgängerknoten wird gemäß (3.41) ein neuer λ -Vektor bestimmt:

$$\vec{\lambda}(R)_{neu} = \lambda_E(R) \cdot \lambda_V(R) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0,260 \\ 0,180 \\ 0,100 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,260 \\ 0,180 \\ 0,100 \end{pmatrix}. \quad (3.71)$$

Mit dem neuen λ -Vektor von R können sowohl α als auch der BEL -Vektor neu berechnet werden (π -Vektor unverändert): Für α gilt:

$$\alpha = \frac{1}{\sum_{i=1}^3 \lambda(R_i)_{neu} \cdot \pi(R_i)_{alt}} = \frac{1}{(0,260 \cdot 0,040 + 0,180 \cdot 0,142 + 0,100 \cdot 0,818)} = \frac{3125}{368}. \quad (3.72)$$

Der BEL -Vektor wird mit (3.33) berechnet:

$$\overline{BEL}(R)_{neu} = \alpha \times \vec{\lambda}(R)_{neu} \times \vec{\pi}(R)_{alt} = \frac{3125}{368} \times \begin{pmatrix} 0,260 \\ 0,180 \\ 0,100 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0,040 \\ 0,142 \\ 0,818 \end{pmatrix} = \frac{1}{2944} \begin{pmatrix} 260 \\ 639 \\ 2045 \end{pmatrix}. \quad (3.73)$$

Der Knoten R sendet nun seinerseits λ -Nachrichten an seine Vorgängerknoten S und P . Mit (3.38) folgt zunächst für die λ -Nachricht an den Knoten S :

$$\lambda_R(S_i) = \sum_{y=1}^3 \lambda(R_y) \cdot \left[\sum_{j=1}^2 M(R|S P)_{y,i,j} \cdot \pi(P)_j \right]. \quad (3.74)$$

Ausgeschrieben bedeutet dies für die λ -Nachricht zur Aktualisierung der ersten Komponente von S :

$$\begin{aligned}\lambda_R(S_1) &= \lambda(R_1) \cdot [M(R_1|S_1P_1) \cdot \pi(P_1) + M(R_1|S_1P_2) \cdot \pi(P_2)] \\ &+ \lambda(R_2) \cdot [M(R_2|S_1P_1) \cdot \pi(P_1) + M(R_2|S_1P_2) \cdot \pi(P_2)] \\ &+ \lambda(R_3) \cdot [M(R_3|S_1P_1) \cdot \pi(P_1) + M(R_3|S_1P_2) \cdot \pi(P_2)].\end{aligned}$$

Setzt man die Transfermatrix zwischen den Knoten S , P und R sowie die π -Vektoren von P ein, so folgt:

$$\begin{aligned}\lambda_R(S_1) &= 0,260 \cdot [0,30 \cdot 0,10 + 0,10 \cdot 0,90] \\ &+ 0,180 \cdot [0,60 \cdot 0,10 + 0,50 \cdot 0,90] \\ &+ 0,100 \cdot [0,10 \cdot 0,10 + 0,40 \cdot 0,90] \\ \lambda_R(S_1) &\approx \underline{\underline{0,1600}}.\end{aligned}\tag{3.75}$$

Die fehlende Komponente von $\lambda_R(S_2) = 0,1026$ wurde ebenso bestimmt. Die λ -Nachricht von R stellt den aktualisierten $\lambda(S)_{neu}$, da R der einzige Nachfolger von S ist:

$$\lambda_R(S) = \vec{\lambda}(S)_{neu} = \begin{pmatrix} 0,1600 \\ 0,1072 \end{pmatrix}.\tag{3.76}$$

Mit dem neuen λ -Vektor von S , dem π -Vektor ($\vec{\pi}(S)_{neu} = \vec{\pi}(S)_{alt}$) folgt für α und $BEL(S)$:

$$\alpha = \frac{1}{\sum_{i=1}^2 \lambda(S_i)_{neu} \cdot \pi(S_i)} = \frac{1}{(0,160 \cdot 0,2 + 0,1072 \cdot 0,8)} = \frac{3125}{368}.\tag{3.77}$$

Der BEL -Vektor wird mit (3.33) berechnet:

$$\overrightarrow{BEL}(S)_{neu} = \alpha \times \vec{\lambda}(SD)_{neu} \times \vec{\pi}(SD) = \frac{3125}{368} \times \begin{pmatrix} 0,160 \\ 0,1072 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0,2 \\ 0,8 \end{pmatrix} = \frac{1}{92} \begin{pmatrix} 25 \\ 67 \end{pmatrix}.\tag{3.78}$$

Die Aktualisierung des Knotens P wird genauso durchgeführt, so dass hier die Angabe des Ergebnisses genügen soll:

$$\overrightarrow{BEL}(P)_{neu} = \alpha \times \vec{\lambda}(P)_{neu} \times \vec{\pi}(P) = \frac{3125}{368} \times \frac{1}{1250} \begin{pmatrix} 221 \\ 139 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0,10 \\ 0,90 \end{pmatrix} = \frac{1}{1472} \begin{pmatrix} 221 \\ 1251 \end{pmatrix}.\tag{3.79}$$

Zum Abschluss verbleibt die Aufgabe, den Knoten E zu aktualisieren. Gemäß Rezept ist hierfür eine π -Nachricht vom Vorgängerknoten R erforderlich:

$$\vec{\pi}_E(R) = \begin{pmatrix} \pi(R_1) \\ \pi(R_2) \\ \pi(R_3) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \lambda(R_1) \\ \lambda(R_2) \\ \lambda(R_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,260 \\ 0,180 \\ 0,100 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0,040 \\ 0,142 \\ 0,818 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,0104 \\ 0,02556 \\ 0,0818 \end{pmatrix}.\tag{3.80}$$

Der neue π -Vektor von E wird mit der folgenden Gleichung bestimmt:

$$\vec{\pi}(E_i) = \sum_{j=1}^3 \pi_E(R_j) \cdot M(E|R)_{i,j} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^3 \pi_E(R_j) \cdot M(E_1|R)_j \\ \sum_{j=1}^3 \pi_E(R_j) \cdot M(E_2|R)_j \end{pmatrix}.\tag{3.81}$$

Es folgt:

$$\vec{\pi}(E) = \begin{pmatrix} 0,0104 \cdot 0,50 + 0,02556 \cdot 0,30 + 0,0818 \cdot 0,0 \\ 0,0104 \cdot 0,50 + 0,02556 \cdot 0,70 + 0,0818 \cdot 1,00 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,012868 \\ 0,104892 \end{pmatrix}. \quad (3.82)$$

Mit unverändertem λ -Vektor folgt für α :

$$\alpha = \frac{1}{\sum_{i=1}^2 \lambda(E_i)_{alt} \cdot \pi(E_i)_{neu}} = \frac{1}{(1 \cdot 0,012868 + 1 \cdot 0,104892)} = \frac{3125}{368} \quad (3.83)$$

und anschließend für den BEL -Vektor gemäß (3.33):

$$\overrightarrow{BEL}(E)_{neu} = \alpha \times \vec{\lambda}(E)_{alt} \times \vec{\pi}(E)_{neu} = \frac{3125}{368} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0,012868 \\ 0,104892 \end{pmatrix} = \frac{1}{29440} \begin{pmatrix} 3217 \\ 26223 \end{pmatrix}. \quad (3.84)$$

Damit sind alle Knoten des Netzes aktualisiert. Der neue Netzzustand gibt das Vertrauen in die Zustände an, nachdem eine Vermutung über den Zustand des Tankdaches getroffen wurde. Die Abbildung 3.7 zeigt das aktualisierte Netz, erstellt mit der Software GeNIe. Man erkennt,

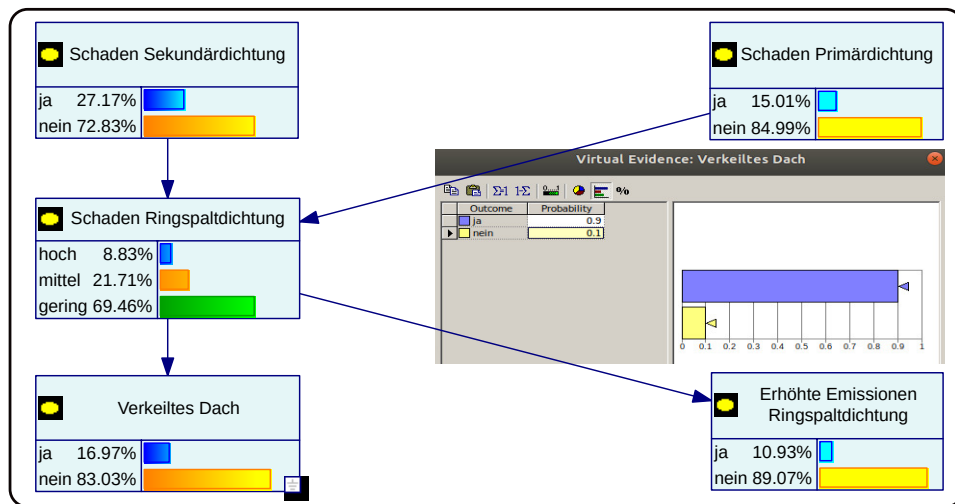


Abbildung 3.7: Illustration des Netzauszuges nach Einspeisen einer virtuellen Evidenz (siehe Eingabefenster).

dass die berechneten und die durch die Software ermittelten BEL-Werte exakt übereinstimmen. Speist man weitere Evidenzen ein, so wiederholt man die angegebenen Schritte vom Zustand des aktualisierten Netzes aus. Die Reihenfolge der Einspeisung von Evidenzen ist dabei unwesentlich. Würde man beispielsweise eine zweite Evidenz am Knoten E einstellen, so erkennt man bereits an (3.71), dass die λ -Nachricht zum Knoten R unabhängig von der Reihenfolge ist.

3.4. Unsicherheitsbetrachtungen in Bayesschen Netzen: Fuzzy Bayessche Netze

3.4.1. Allgemeine Bemerkungen

Bereits in der Einleitung und im Kapitel 2 wurde dargelegt, wieso Unsicherheiten berücksichtigt werden müssen. Anlagen, Prozesse bis hin zu Personalhandlungen werden nicht auf einen Punkt, sondern in einem Bereich ausgelegt, in dem die ablaufenden Prozesse hinreichend stabil gegenüber äußeren Einflüssen ablaufen sollen. Physikalisch gesehen ist ein Zustand stabil, wenn

seine Potentialmulde tiefer als die Summe der einwirkenden Energien ist. Für die Risikoanalyse bedeutet dies, dass ein Nachweis einer hinreichenden Systemauslegung es erfordert, Unsicherheiten in störenden Einflüssen und in der Stabilität des Systems zu bestimmen. Die Verwendung von scharfen Wahrscheinlichkeiten (sogenannte *crisp probabilities*) bietet diese Untersuchungsmöglichkeit nicht und gibt deswegen einer Diskussion diesbezüglich keine Unterstützung. Durch eine Analyse der Unsicherheiten werden Entscheidungsträger, Behörden und Betroffene erst in die Lage versetzt, eine Risikoanalyse nachvollziehen und bewerten zu können. Sozusagen liefert erst die Unsicherheitsanalyse den Nachweis, dass die Schutzziele stabil gegenüber äußeren Einflüssen erreicht werden.

Wenn nun für quantitative Risikoanalysen Bayessche Netze verwendet werden, so müssen auch hier weitere Verfahren angekoppelt werden, mit denen eine Unsicherheitsbetrachtung ermöglicht wird. Eine Möglichkeit wäre die Durchführung von Monte-Carlo-Sampling, vergleichbar zur Anwendung in den Kapiteln 4 und 5, bei der man die Wahrscheinlichkeiten entsprechend gewählter Verteilungsfunktionen schwanken lässt und die Schwankungsbereiche der Zielgrößen aufzeichnet. In Kapitel 4 wird jedoch gezeigt, dass Monte-Carlo-Verfahren im Allgemeinen sehr langsam konvergieren und Kopplungen mit größeren Bayesschen Netzen zu numerisch sehr aufwändigen Problemstellungen führen. Eine aktuell in der Literatur benutzte Kopplung von Bayesschen Netzen mit Unsicherheitsbetrachtungen, welche lediglich einen überschaubaren Mehraufwand mit sich bringt, ist die Kopplung mit der Fuzzy-Logik zu sogenannten Fuzzy-Bayesschen Netzen [84, 32, 94]. Diese Kopplung soll auch hier benutzt werden.

Es sei hier jedoch noch erwähnt, dass die Mitberücksichtigung von Parameterunsicherheiten nur eine Unsicherheitsquelle darstellt. Eine weitere Quelle sind Unsicherheiten in dem durch das Netz repräsentierten Modell selbst. Beispiele für Unsicherheiten sind in der Annahme kausaler Beziehungen, in der Festlegung einzubeziehender oder auch ausgeklammerter Einflussvariablen und innerhalb der kausalen Verknüpfung zu finden. Oftmals sind solche modellinhärenten Unsicherheiten schwieriger zu erfassen, als Parameterunsicherheiten. Für bestimmte Anwendungen in der Medizin, Statistik oder Robotik benutzt man auch Verfahren zur Automatisierung der Bestimmung von Netzen (sogenannte *lernende Bayessche Netze*) [95]. Hierbei werden auf der Grundlage von Beobachtungsdaten automatisiert Annahmen über zu Grunde liegende Verteilungseigenschaften getroffen. Auf die hierbei auftretenden Formen von Unsicherheiten wird in diesem Kapitel nicht eingegangen. Es wird angenommen, dass alle wesentlichen Einflussvariablen erfasst und korrekt vernetzt wurden. Für weitere Details hierzu sei z. B. auf [95] verwiesen.

3.4.2. Fuzzy-Logik und Zugehörigkeitsfunktionen

Unschärfe Mengen und Zugehörigkeitsfunktion

Viele Einschätzungen in Bayesschen Netzen sind graduell zu interpretieren. Als Beispiele seien beim Schwimmdachtank (siehe Kapitel 6) die Hypothesen an den Knoten *Rost*, *Lagerstoffflüchtigkeit* und *Temperatur* genannt, welche niedrig, ..., hoch sein können. Zwar kann man jeden Zustand exakt einordnen, jedoch muss diese Einordnung nicht zwingend sein. Eine Lagerstofftemperatur von 300 K ist sicher hoch. Würde man dort die Grenze setzen, so wären 299 K nicht mehr hoch. Allerdings sind 299 K eher im Bereich von hoch als 285 K. Dies soll motivieren, dass man an Stelle einer scharfen Grenze einen Zugehörigkeitsgrad zu einer Menge definieren kann. Sei beispielsweise Θ die Menge der Temperaturen und $T \in \Theta$ eine spezielle Temperatur. Dann kann man den Grad an Zugehörigkeit zu einer unscharfen Teilmenge Θ_{teil} durch eine Zugehörigkeitsfunktion $\mu_{teil} : T \rightarrow [0 : 1]$ angeben. Hierbei bedeuten $\mu_{teil} = 1$ eine volle und $\mu_{teil} = 0$ keine Zugehörigkeit zur unscharfen Menge. Abbildung 3.8 zeigt zwei Beispiele für solche Zugehörigkeitsfunktionen: Dreiecke und Trapeze, welche auch in dieser Arbeit verwendet werden. An der Ordinate trägt man den Grad der Zugehörigkeit (Wert zwischen null und eins) für jeden Wert der Abszissengröße ab. Der Graph widerspiegelt die Zugehörigkeitsfunktion selbst. Legt man auf der Ordinate einen Mindestwert α für die Zugehörigkeit fest, so wird

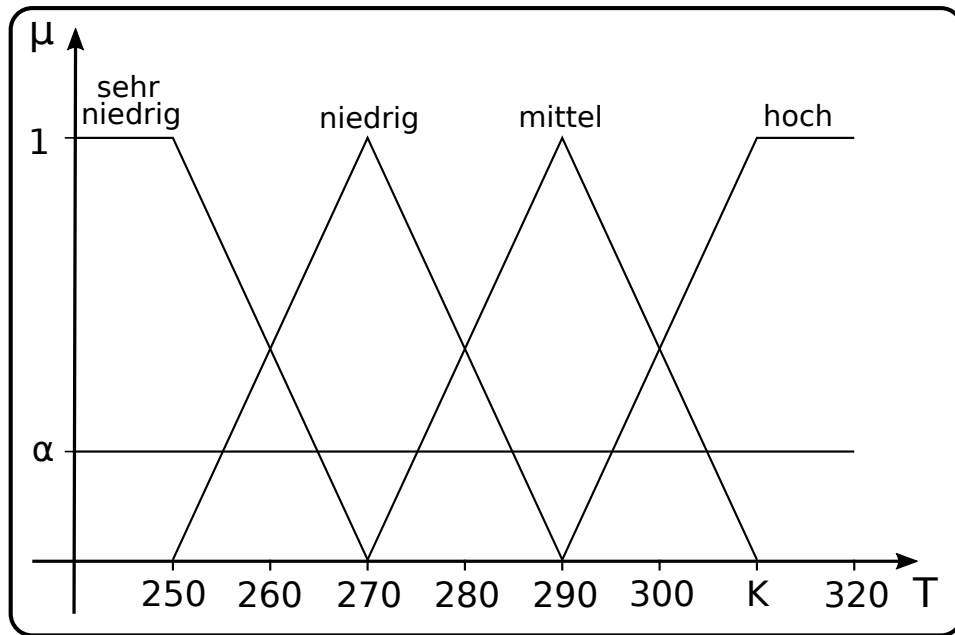


Abbildung 3.8: Darstellung verschiedener Zugehörigkeitsfunktionen.

die Menge aller Elemente T der Grundmenge Θ mit einem Zugehörigkeitswert von mindestens α als α -cut bezeichnet.

In dem α -cut sind alle Werte der Abzissengröße enthalten, für die der Ordinatenwert größer oder gleich α ist:

$$\Theta_\alpha = [a, b] = \{T \in \Theta \mid \mu_\Theta(T) \geq \alpha\}. \quad (3.85)$$

Verwendung von Fuzzy Intervallen und Initialisierung

In diesem Abschnitt soll an Stelle scharfer Wahrscheinlichkeiten $\hat{p}(crisp)$ jeweilige Fuzzy Intervalle verwendet werden. Die Intervallgrößen (α -cuts) werden dadurch spezifiziert, dass zusätzlich zum Erwartungswert \hat{p} ein unterer Wert \underline{p} und ein oberer Wert \bar{p} angegeben wird:

$$\hat{p}(crisp) \Rightarrow (\underline{p}, \bar{p}, \hat{p}). \quad (3.86)$$

Es handelt sich somit um Dreieck-Zugehörigkeitsfunktionen, wobei hier $\alpha = 0$ gewählt wurde. Die Zuordnungen für die Wurzelknoten und auch für Transfermatrizen müssen entsprechend erweitert werden. Die Intervalle für die Zuordnungen sind dabei so gewählt, dass der Wert der abgebildeten Größe mit hohem Gesamtvertrauen in diesem Intervall liegt und nur mit kleinerer Wahrscheinlichkeit außerhalb.

Im Folgenden sollen zur Demonstration die weiter oben angegebenen analytischen Beispielrechnungen wiederholt werden. Die Demonstrationsrechnungen folgen im Prinzip dem in [94] angegebenen Beispiel, was die Festlegung der Intervalle betrifft. Hierfür wurden die unteren und oberen Intervallgrenzen stets durch $\pm 0,01$ festgelegt. In Unterscheidung zur Wahrscheinlichkeit zuvor wird im Folgenden das Symbol P_f (Fuzzy-Wahrscheinlichkeit) verwendet. Zunächst folgt für die beiden Wurzelknoten *Schaden Sekundärdichtung* und *Schaden Primärdichtung*:

$$P_f(S) = \left(\begin{array}{l} (0,19|0,20|0,21) \\ (0,79|0,80|0,81) \end{array} \right), \quad P_f(P) = \left(\begin{array}{l} (0,09|0,10|0,11) \\ (0,89|0,90|0,91) \end{array} \right). \quad (3.87)$$

Die Transfermatrizen der inneren Knoten lauten nun:

$$M_f(R_1|S P)_{j,k} = \begin{pmatrix} P_f(R_1|S_1P_1) & P_f(R_1|S_1P_2) \\ P_f(R_1|S_2P_1) & P_f(R_1|S_2P_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (0, 29|0, 30|0, 31) & (0, 09|0, 10|0, 11) \\ (0, 19|0, 20|0, 21) & (0, 00|0, 00|0, 01) \end{pmatrix},$$

$$M_f(R_2|S P)_{j,k} = \begin{pmatrix} P_f(R_2|S_1P_1) & P_f(R_2|S_1P_2) \\ P_f(R_2|S_2P_1) & P_f(R_2|S_2P_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (0, 59|0, 60|0, 61) & (0, 49|0, 50|0, 51) \\ (0, 49|0, 50|0, 51) & (0, 00|0, 00|0, 01) \end{pmatrix},$$

$$M_f(R_3|S P)_{j,k} = \begin{pmatrix} P_f(R_3|S_1P_1) & P_f(R_3|S_1P_2) \\ P_f(R_3|S_2P_1) & P_f(R_3|S_2P_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (0, 09|0, 10|0, 11) & (0, 39|0, 40|0, 41) \\ (0, 29|0, 30|0, 31) & (0, 99|1, 00|1, 00) \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} M_f(V|R)_{i,j} &= \begin{pmatrix} P_f(V_1|R_1) & P_f(V_1|R_2) & P_f(V_1|R_3) \\ P_f(V_2|R_1) & P_f(V_2|R_2) & P_f(V_2|R_3) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (0, 19|0, 20|0, 21) & (0, 09|0, 10|0, 11) & (0, 00|0, 00|0, 01) \\ (0, 79|0, 80|0, 81) & (0, 89|0, 90|0, 91) & (0, 99|1, 00|1, 00) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} M_f(E|R)_{i,j} &= \begin{pmatrix} P_f(E_1|R_1) & P_f(E_1|R_2) & P_f(E_1|R_3) \\ P_f(E_2|R_1) & P_f(E_2|R_2) & P_f(E_2|R_3) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (0, 49|0, 50|0, 51) & (0, 29|0, 30|0, 31) & (0, 00|0, 00|0, 01) \\ (0, 49|0, 50|0, 51) & (0, 69|0, 70|0, 71) & (0, 99|1, 00|1, 00) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.88)$$

Für die analytischen Berechnungen sind folgende Rechenregeln erforderlich [94]. Hierzu seien $X_\alpha = [a, b]$ und $Y_\alpha = [c, d]$ zwei Intervallgrößen für alle $\alpha \in [0, 1]$ und $0 \notin [c, d]$:

$$\begin{aligned} X_\alpha \oplus Y_\alpha &= [a, b] + [c, d] = [a + c, b + d], & X_\alpha - Y_\alpha &= [a, b] + [-d, -c] = [a - d, b - c] \\ X_\alpha \otimes Y_\alpha &= [a, b] \otimes [c, d] = [\min\{ac, bc, ad, bd\}, \max\{ac, ad, bc, bd\}] \\ X_\alpha / Y_\alpha &= [a, b] / [c, d] = [\min\{a/d, b/d, a/c, b/c\}, \max\{a/d, b/d, a/c, b/c\}]. \end{aligned} \quad (3.89)$$

Wie zuvor gilt in der Initialisierung, dass der λ -Vektor für jeden Intervallwert zu eins gewählt wird und der BEL-Vektor der totalen Wahrscheinlichkeit (= π -Vektor) entspricht. Für den Knoten S folgt somit:

$$\begin{aligned} \overline{BEL}_f^\rightarrow(S) &= \alpha_f \otimes \bar{\lambda}_f^\rightarrow(S) \otimes \bar{\pi}_f^\rightarrow(S) \\ &= (1|1|1) \otimes \begin{pmatrix} (1|1|1) \\ (1|1|1) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} (0, 19|0, 20|0, 21) \\ (0, 79|0, 80|0, 81) \end{pmatrix} \\ &= \underline{\underline{\begin{pmatrix} (0, 19|0, 20|0, 21) \\ (0, 79|0, 80|0, 81) \end{pmatrix}}}. \end{aligned} \quad (3.90)$$

Für den Knoten P folgt analog:

$$\begin{aligned} \overline{BEL}_f^\rightarrow(P) &= \alpha_f \otimes \bar{\lambda}_f^\rightarrow(PD) \otimes \bar{\pi}_f^\rightarrow(P) \\ &= (1|1|1) \otimes \begin{pmatrix} (1|1|1) \\ (1|1|1) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} (0, 09|0, 10|0, 11) \\ (0, 89|0, 90|0, 91) \end{pmatrix} \\ &= \underline{\underline{\begin{pmatrix} (0, 09|0, 10|0, 11) \\ (0, 89|0, 90|0, 91) \end{pmatrix}}}. \end{aligned} \quad (3.91)$$

Für die Initialisierung der Kinderknoten wird erneut (3.55) verwendet, wobei jedoch für die Multiplikation (3.89) benutzt wird. Die Erwartungswerte (mittlere Werte) berechnen sich hierbei wie zuvor. Es soll hier nur die Berechnung von $\pi_f(R_1)$ gezeigt werden. Die anderen Komponenten werden lediglich mit angegeben:

$$\begin{aligned}
 \pi_f(R_1) &= P_f(R_1|S_1P_1) \otimes P_f(S_1) \otimes P_f(P_1) \\
 &\oplus P_f(R_1|S_1P_2) \otimes P_f(S_1) \otimes P_f(P_2) \\
 &\oplus P_f(R_1|S_2P_1) \otimes P_f(S_2) \otimes P_f(P_1) \\
 &\oplus P_f(R_1|S_2P_2) \otimes P_f(S_2) \otimes P_f(P_2).
 \end{aligned} \tag{3.92}$$

Nach Einsetzen der π_f -Vektoren von S , P und der Transfermatrix $M_f(R_1)$ folgt:

$$\begin{aligned}
 \pi_f(R_1) &= (0, 29|0, 30|0, 31) \otimes (0, 19|0, 20|0, 21) \otimes (0, 09|0, 10|0, 11) \\
 &\oplus (0, 09|0, 10|0, 11) \otimes (0, 19|0, 20|0, 21) \otimes (0, 89|0, 90|0, 91) \\
 &\oplus (0, 19|0, 20|0, 21) \otimes (0, 79|0, 80|0, 81) \otimes (0, 09|0, 10|0, 11) \\
 &\oplus (0, 00|0, 00|0, 01) \otimes (0, 79|0, 80|0, 81) \otimes (0, 89|0, 90|0, 91) \\
 &= (0, 033687|0, 040|0, 054264) \quad \text{und:} \\
 \pi_f(R_2) &= (0, 127787|0, 142|0, 164364) \\
 \pi_f(R_3) &= (0, 784176|0, 818|0, 845613).
 \end{aligned} \tag{3.93}$$

Der BEL_f -Vektor von R ist damit:

$$\begin{aligned}
 \overrightarrow{BEL_f}(R) &= \alpha_f \otimes \overrightarrow{\lambda_f}(R) \otimes \overrightarrow{\pi_f}(R) \\
 &= (1|1|1) \otimes \begin{pmatrix} (1|1|1) \\ (1|1|1) \\ (1|1|1) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} (0, 033687|0, 04|0, 054264) \\ (0, 127787|0, 142|0, 164364) \\ (0, 784176|0, 818|0, 845613) \end{pmatrix} \\
 &= \underline{\underline{\begin{pmatrix} (0, 033687|0, 04|0, 054264) \\ (0, 127787|0, 142|0, 164364) \\ (0, 784176|0, 818|0, 845613) \end{pmatrix}}}.
 \end{aligned} \tag{3.94}$$

Für den π_f -Vektor des Knotens V gilt:

$$\begin{aligned}
 \pi_f(V_1) &= \sum_{j=1}^3 P_f(V_1|R_j) \otimes P_f(R_j), \\
 \pi_f(V_2) &= \sum_{j=1}^3 P_f(V_2|R_j) \otimes P_f(R_j).
 \end{aligned} \tag{3.95}$$

Setzt man hierin die Transfermatrix $M_f(V|R)$ und den π_f -Vektor von R ein, so folgt:

$$\begin{aligned}
 \overrightarrow{\pi_f}(V_1) &= (0, 19|0, 20|0, 21) \otimes (0, 033687|0, 04|0, 054264) \\
 &\oplus (0, 09|0, 10|0, 11) \otimes (0, 127787|0, 142|0, 164364) \\
 &\oplus (0, 00|0, 00|0, 01) \otimes (0, 784176|0, 818|0, 845613) \\
 &= \underline{\underline{(0, 0179|0, 0222|0, 037932)}}
 \end{aligned} \tag{3.96}$$

Für $\pi_f(V_2)$ folgt:

$$\begin{aligned}
 \overrightarrow{\pi}_f(V_2) &= (0, 79|0, 80|0, 81) \otimes (0, 033687|0, 04|0, 054264) \\
 &\oplus (0, 89|0, 00|0, 91) \otimes (0, 127787|0, 142|0, 164364) \\
 &\oplus (0, 99|1, 00|1, 00) \otimes (0, 784176|0, 818|0, 845613) \\
 &= \underline{\underline{(0, 9167|0, 9778|1, 0)}},
 \end{aligned} \tag{3.97}$$

und damit für den BEL_f -Vektor:

$$\begin{aligned}
 \overrightarrow{BEL}_f(V) &= \alpha_f \otimes \overrightarrow{\lambda}_f(V) \otimes \overrightarrow{\pi}_f(V) \\
 &= (1|1|1) \otimes \begin{pmatrix} (1|1|1) \\ (1|1|1) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} (0, 0179|0, 0222|0, 037932) \\ (0, 9167|0, 9778|1, 0) \end{pmatrix} \\
 &= \underline{\underline{\begin{pmatrix} (0, 0179|0, 0222|0, 0379328) \\ (0, 9167|0, 9778|1, 0) \end{pmatrix}}}.
 \end{aligned} \tag{3.98}$$

Auf dieselbe Weise wird der π_f - und BEL-Vektor für den Knoten E bestimmt:

$$\begin{aligned}
 \overrightarrow{BEL}_f(E) &= \alpha_f \otimes \overrightarrow{\lambda}_f(E) \otimes \overrightarrow{\pi}_f(E) \\
 &= (1|1|1) \otimes \begin{pmatrix} (1|1|1) \\ (1|1|1) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} (0, 05356|0, 0626|0, 08708) \\ (0, 88101|0, 9374|0, 998999) \end{pmatrix} \\
 &= \underline{\underline{\begin{pmatrix} (0, 05356|0, 0626|0, 08708) \\ (0, 88101|0, 9374|0, 998999) \end{pmatrix}}}.
 \end{aligned} \tag{3.99}$$

Damit ist die Initialisierung abgeschlossen. Man findet die in der Initialisierungsrechnung zuvor angegebenen Erwartungswerte wieder. Zuzüglich zu diesen sind nun Intervalle spezifiziert, welche einen Vergleich zwischen a priori und a posteriori Zugehörigkeit erlauben. Die spezifizierten Zugehörigkeitsintervalle wurden mit $\bar{p} \pm 0,01$ vergleichsweise scharf gewählt. Des Weiteren ist die relative Unschärfe für kleine und große \bar{p} verschieden. In [94] wird diskutiert, dass weniger scharfe Zugehörigkeitsintervalle zu hohen Schwankungen in den a posteriori Intervallen führen. Nimmt man eine absolute Schwankung von 10% des Betrages (aber mindestens $\pm 0,02$) von \bar{p} , so folgt als Beispiel für $\pi_f(R_3)$:

$$P_f(S) = \begin{pmatrix} (0, 18|0, 20|0, 22) \\ (0, 72|0, 80|0, 88) \end{pmatrix}, \quad P_f(P) = \begin{pmatrix} (0, 08|0, 10|0, 12) \\ (0, 81|0, 90|0, 99) \end{pmatrix}. \tag{3.100}$$

und:

$$M_f(R_3|S P)_{j,k} = \begin{pmatrix} P_f(R_3|S_1P_1) & P_f(R_3|S_1P_2) \\ P_f(R_3|S_2P_1) & P_f(R_3|S_2P_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (0, 08|0, 10|0, 12) & (0, 36|0, 40|0, 44) \\ (0, 27|0, 30|0, 33) & (0, 90|1, 00|1, 00) \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned}
 \pi_f(R_3) &= P_f(R_3|S_1P_1) \otimes P_f(S_1) \otimes P_f(P_1) \\
 &\oplus P_f(R_3|S_1P_2) \otimes P_f(S_1) \otimes P_f(P_2) \\
 &\oplus P_f(R_3|S_2P_1) \otimes P_f(S_2) \otimes P_f(P_1) \\
 &\oplus P_f(R_3|S_2P_2) \otimes P_f(S_2) \otimes P_f(P_2).
 \end{aligned} \tag{3.101}$$

Nach Einsetzen der π_f -Vektoren von S , P und der Transfermatrix $M_f(R_1|S_iP_j)$ folgt:

$$\begin{aligned}
 \pi_f(R_3) &= (0, 08|0, 10|0, 12) \otimes (0, 18|0, 20|0, 22) \otimes (0, 08|0, 10|0, 12) \\
 &\oplus (0, 36|0, 40|0, 44) \otimes (0, 18|0, 20|0, 22) \otimes (0, 81|0, 90|0, 99) \\
 &\oplus (0, 27|0, 30|0, 33) \otimes (0, 72|0, 80|0, 88) \otimes (0, 08|0, 10|0, 12) \\
 &\oplus (0, 90|1, 00|1, 00) \otimes (0, 72|0, 80|0, 88) \otimes (0, 81|0, 90|0, 99) \\
 &= (0, 594|0, 818|1, 00),
 \end{aligned} \tag{3.102}$$

was merklich über den möglichen Bereich $[0, 1]$ verschmiert ist und eine Interpretation erschwert. Andererseits zeigt dies jedoch auch, dass sich Unsicherheiten sehr stark auf das Vertrauen in bestimmte Hypothesen auswirken können.

Propagierung von Wahrscheinlichkeiten mit Fuzzy-Intervallen

Im Folgenden wird erneut eine (unsichere) virtuelle Evidenz am Knoten V beobachtet:

$$\vec{\lambda}_f(V) = \begin{pmatrix} (0, 89|0, 90|0, 91) \\ (0, 09|0, 10|0, 11) \end{pmatrix}. \tag{3.103}$$

Die Aktualisierung von V erfolgt mit:

$$\begin{aligned}
 \overline{BEL}_f(V) &= \alpha_f \otimes \vec{\lambda}_f(V) \otimes \vec{\pi}_f(V) \\
 &= \alpha_f \otimes \begin{pmatrix} (0, 89|0, 90|0, 91) \\ (0, 09|0, 10|0, 11) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} (0, 0179|0, 0222|0, 037916) \\ (0, 91668|0, 9778|1, 0) \end{pmatrix} \\
 &= \alpha_f \otimes \begin{pmatrix} (0, 01593|0, 01998|0, 034518) \\ (0, 0825|0, 09778|0, 11) \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{3.104}$$

Der Normierungsfaktor α_f ist:

$$\alpha_f = \left(\frac{1}{0, 03452 + 0, 11} \mid \frac{1}{0, 01998 + 0, 09778} \mid \frac{1}{0, 01593 + 0, 0825} \right) = (6, 919|8, 492|10, 1591). \tag{3.105}$$

Damit folgt für $BEL_f(V)$:

$$\overline{BEL}_f(V) = \underline{\underline{\begin{pmatrix} (0, 1102|0, 1697|0, 3606) \\ (0, 5708|0, 8303|1, 00) \end{pmatrix}}}. \tag{3.106}$$

Die λ_f -Nachricht von V zu R zur Aktualisierung von R lautet nun:

$$\vec{\lambda}_{fV}(R_l) = \sum_{y=1}^2 \lambda_f(V_y) \otimes M_f(V|R)_{y,l}. \tag{3.107}$$

Ausgeschrieben für $\vec{\lambda}_{fV}(R_l)$ lautet dies:

$$\vec{\lambda}_{fV}(R_l) = \lambda_f(V_1) \otimes M_f(V_1|R_l) \oplus \lambda_f(V_2) \otimes M_f(V_2|R_l). \tag{3.108}$$

Die Berechnung wird hier nur für die Komponenten $\vec{\lambda}_{fV}(R_1)$ angegeben:

$$\begin{aligned}\vec{\lambda}_{fV}(R_1) &= (0, 89|0, 90|0, 91) \otimes (0, 19|0, 20|0, 21) \\ &\oplus (0, 09|0, 10|0, 11) \otimes (0, 79|0, 80|0, 81) \\ &= (0, 2402|0, 26|0, 2802).\end{aligned}\tag{3.109}$$

Mit den anderen Komponenten folgt für $\vec{\lambda}_{fV}(R)$:

$$\vec{\lambda}_{fV}(R) = \begin{pmatrix} (0, 2402|0, 26|0, 2802) \\ (0, 1602|0, 18|0, 2002) \\ (0, 0891|0, 10|0, 1191) \end{pmatrix}.\tag{3.110}$$

Da die λ -Nachricht vom Knoten E eine Matrix ausschließlich mit der eins besetzt ist, stellt diese λ -Nachricht auch den neuen λ -Vektor von R . Zur Aktualisierung von R berechnet man den neuen BEL:

$$\begin{aligned}\overline{BEL}_f(R) &= \alpha_f \otimes \vec{\lambda}_f(R) \otimes \vec{\pi}_f(R) \\ &= \alpha_f \otimes \begin{pmatrix} (0, 2402|0, 26|0, 2802) \\ (0, 1602|0, 18|0, 2002) \\ (0, 0891|0, 10|0, 1191) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} (0, 033687|0, 04|0, 054264) \\ (0, 127787|0, 142|0, 164364) \\ (0, 784176|0, 818|0, 845613) \end{pmatrix} \\ &= \underline{\underline{\begin{pmatrix} (0, 05437|0, 0883|0, 15447) \\ (0, 13756|0, 217055|0, 33429) \\ (0, 46948|0, 69464|1, 00) \end{pmatrix}}}.\end{aligned}\tag{3.111}$$

Nach der Aktualisierung von R sendet dieser λ_f -Nachrichten zu S und P . Die Bestimmung der λ_f -Nachricht zu S sei erneut angegeben:

$$\vec{\lambda}_{fR}(S_i) = \sum_{y=1}^3 \lambda_f(R_y) \otimes \left[\sum_{j=1}^2 P_f(R|S P)_{y,i,j} \cdot \pi_f(P)_j \right].\tag{3.112}$$

Die lautet für die Komponente $\vec{\lambda}_{fR}(S_1)$:

$$\begin{aligned}\vec{\lambda}_{fR}(S_1) &= \lambda_f(R_1) \otimes \left[\sum_{j=1}^2 P_f(R_1|S_1 P)_j \otimes \pi_f(P)_j \right] \\ &\oplus \lambda_f(R_2) \otimes \left[\sum_{j=1}^2 P_f(R_2|S_1 P)_j \otimes \pi_f(P)_j \right] \\ &\oplus \lambda_f(R_3) \otimes \left[\sum_{j=1}^2 P_f(R_3|S_1 P)_j \otimes \pi_f(P)_j \right].\end{aligned}\tag{3.113}$$

Setzt man die λ - und π -Vektoren sowie die Transfermatrix ein, so folgt:

$$\begin{aligned}\vec{\lambda}_{fR}(S_1) &= (0, 2402|0, 26|0, 2802) \otimes [(0, 29|0, 30|0, 31) \otimes (0, 09|0, 10|0, 11) \\ &\quad \oplus (0, 09|0, 10|0, 11) \otimes (0, 89|0, 90|0, 91)] \\ &\oplus (0, 1602|0, 18|0, 2002) \otimes [(0, 59|0, 60|0, 61) \otimes (0, 09|0, 10|0, 11) \\ &\quad \oplus (0, 49|0, 50|0, 51) \otimes (0, 89|0, 90|0, 91)] \\ &\oplus (0, 0891|0, 10|0, 1191) \otimes [(0, 09|0, 10|0, 11) \otimes (0, 09|0, 10|0, 11) \\ &\quad \oplus (0, 39|0, 40|0, 41) \otimes (0, 89|0, 90|0, 91)].\end{aligned}\tag{3.114}$$

Für diese Komponente (hier gleich zusammen mit der anderen angegeben) folgt:

$$\vec{\lambda}_f(S) = \underline{\underline{\begin{pmatrix} (0, 13553|0, 16|0, 18983) \\ (0, 09200|0, 1072|0, 13452) \end{pmatrix}}}. \quad (3.115)$$

Die Aktualisierung von S folgt über:

$$\begin{aligned} \overline{BEL}_f(S) &= \alpha_f \otimes \vec{\lambda}_f(S) \otimes \vec{\pi}_f(S) \\ &= \alpha_f \otimes \underline{\underline{\begin{pmatrix} (0, 13553|0, 16|0, 18983) \\ (0, 09200|0, 1072|0, 13452) \end{pmatrix}}} \otimes \begin{pmatrix} (0, 19|0, 20|0, 21) \\ (0, 79|0, 80|0, 81) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.116)$$

was zunächst für α_f :

$$\alpha_f = (6, 719|8, 492|10, 159) \quad (3.117)$$

ergibt und anschließend für $\overline{BEL}_f(S)$:

$$\overline{BEL}_f(S) = \underline{\underline{\begin{pmatrix} (0, 17303|0, 27174|0, 40498) \\ (0, 48839|0, 72825|1, 00) \end{pmatrix}}}. \quad (3.118)$$

Die Aktualisierung von P wird ebenso durchgeführt, worauf hier jedoch verzichtet werden soll. Zur Aktualisierung des Knotens E erhält dieser von R eine π_f -Nachricht:

$$\begin{aligned} \vec{\pi}_{fE}(R) &= \begin{pmatrix} \pi_f(R_1) \\ \pi_f(R_2) \\ \pi_f(R_3) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \lambda_f(R_1) \\ \lambda_f(R_2) \\ \lambda_f(R_2) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (0, 033687|0, 04|0, 054246) \\ (0, 127787|0, 142|0, 164364) \\ (0, 784176|0, 818|0, 845613) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} (0, 2402|0, 26|0, 2802) \\ (0, 1602|0, 18|0, 2002) \\ (0, 0891|0, 10|0, 1191) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (0, 00809|0, 0104|0, 01520) \\ (0, 02047|0, 02556|0, 032906) \\ (0, 06987|0, 0818|0, 10071) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.119)$$

Zunächst wird damit der π -Vektor von E aktualisiert:

$$\vec{\pi}_f(E_i) = \sum_{j=1}^3 \vec{\pi}_{fE}(R_j) \otimes P_f(E|R)_{i,j}. \quad (3.120)$$

Wiederum zunächst für die Komponente $\vec{\pi}(E_1)$:

$$\begin{aligned} \vec{\pi}(E_1) &= \vec{\pi}_{fE}(R_1) \otimes P_f(E_1|R_1) \\ &\oplus \vec{\pi}_{fE}(R_2) \otimes P_f(E_1|R_2) \\ &\oplus \vec{\pi}_{fE}(R_3) \otimes P_f(E_1|R_3) \\ &= (0, 00809|0, 0104|0, 01520) \otimes (0, 49|0, 50|0, 51) \\ &\oplus (0, 02047|0, 02556|0, 032906) \otimes (0, 29|0, 30|0, 31) \\ &\oplus (0, 06987|0, 0818|0, 10071) \otimes (0, 00|0, 00|0, 01) \\ &= (0, 0099|0, 01286|0, 01896). \end{aligned} \quad (3.121)$$

Auf ähnliche Weise wurde $\vec{\pi}(E_2)$ berechnet:

$$\vec{\pi}(E_2) = (0, 08726|0, 10489|0, 13183), \quad (3.122)$$

womit der BEL -Vektor von E aktualisiert werden kann. Zunächst ist

$$\begin{aligned}\overrightarrow{BEL}_f(E) &= \alpha_f \otimes \overrightarrow{\lambda}_f(E) \otimes \overrightarrow{\pi}_f(E) \\ &= \alpha_f \otimes \begin{pmatrix} (1|1|1) \\ (1|1|1) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} (0, 0099|0, 01286|0, 01896) \\ (0, 08726|0, 10489|0, 13183) \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (3.123)$$

und α_f :

$$\alpha_f = (6, 63|8, 49|10, 29). \quad (3.124)$$

womit für $\overrightarrow{BEL}_f(E)$ folgt:

$$\overrightarrow{BEL}_f(E) = \underline{\underline{\begin{pmatrix} (0, 06566|0, 10926|0, 19515) \\ (0, 5786|0, 89064|1, 000) \end{pmatrix}}}. \quad (3.125)$$

Zunächst kann man feststellen, dass die Mittelwerte der Intervalle mit den im Abschnitt zuvor bestimmten scharfen Werten übereinstimmen. Allerdings sind die Intervallbreiten bisweilen sehr groß. Dies stammt auch daher, dass ebenso für die Transfermatrizen Unsicherheitsintervalle spezifiziert wurden. Würde man für diese jeweils drei identische Werte in den Intervallen eintragen (Spezialfall für eine scharfe Zahl), so würde sich die Unsicherheit merklich reduzieren. Dies soll hier lediglich für den Knoten R in der Initialisierungsphase kurz angegeben werden. Zunächst ist:

$$\begin{aligned}\pi_f(R_i) &= P_f(R_i|S_1P_1) \otimes P_f(S_1) \otimes P_f(P_1) \\ &+ P_f(R_i|S_1P_2) \otimes P_f(S_1) \otimes P_f(P_2) \\ &+ P_f(R_i|S_2P_1) \otimes P_f(S_2) \otimes P_f(P_1) \\ &+ P_f(R_i|S_2P_2) \otimes P_f(S_2) \otimes P_f(P_2).\end{aligned}\quad (3.126)$$

Nach Einsetzen der π_f -Vektoren von S , P und den Transfermatrizen $M_f(R_i)$ folgt:

$$\begin{aligned}\pi_f(R_1) &= (0, 30|0, 30|0, 30) \otimes (0, 19|0, 20|0, 21) \otimes (0, 09|0, 10|0, 11) \\ &\oplus (0, 10|0, 10|0, 10) \otimes (0, 19|0, 20|0, 21) \otimes (0, 89|0, 90|0, 91) \\ &\oplus (0, 20|0, 20|0, 20) \otimes (0, 79|0, 80|0, 81) \otimes (0, 09|0, 10|0, 11) \\ &\oplus (0, 00|0, 00|0, 00) \otimes (0, 79|0, 80|0, 81) \otimes (0, 89|0, 90|0, 91) \\ &= (0, 0363|0, 040|0, 0439) \quad \text{und:} \\ \pi_f(R_2) &= (0, 1304|0, 1420|0, 1540) \\ \pi_f(R_3) &= (0, 7840|0, 8180|0, 8324).\end{aligned}\quad (3.127)$$

Der BEL_f -Vektor von R ist damit (Vergleich unten angegeben):

$$\begin{aligned}\overrightarrow{BEL}_f(R) &= \alpha_f \otimes \overrightarrow{\lambda}_f(R) \otimes \overrightarrow{\pi}_f(R) \\ &= (1|1|1) \otimes \begin{pmatrix} (1|1|1) \\ (1|1|1) \\ (1|1|1) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} (0, 0363|0, 0400|0, 0439) \\ (0, 1304|0, 1420|0, 1540) \\ (0, 7840|0, 8180|0, 8324) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (0, 0363|0, 0400|0, 0439) \\ (0, 1304|0, 1420|0, 1540) \\ (0, 7840|0, 8180|0, 8324) \end{pmatrix} \quad \text{zuvor:} \begin{pmatrix} (0, 0337|0, 0400|0, 0542) \\ (0, 1278|0, 1420|0, 1644) \\ (0, 7218|0, 8180|0, 8456) \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (3.128)$$

Im Prinzip kann man auf vergleichbare Weise auch Sensitivitätsanalysen durchführen, in dem man die Unschärfe nur für ausgewählte Größen benutzt und die anderen wie im Beispiel zuvor scharf einstellt.

3.4.3. Verwendung von Fuzzy-Intervallen zur Abbildung linguistischer Variablen

In dieser Habilitation wurde bereits mehrfach angegeben, dass Experteneinschätzungen immer unsicherheitsbehaftet sind. Für das im Kapitel 6 diskutierte Anwendungsbeispiel und auch für die etwas weiter unten angegebenen weiteren Beispielanwendungen zu Bayesschen Netzen wurden Experten gebeten, eine verbale Einschätzung zu Sachverhalten anzugeben. Solche Sachverhalte können Ereignisraten sein, beispielsweise nach denen man „Wie häufig im Jahr ...?“ fragen würde oder Ereignismöglichkeiten: „Kann es sein, dass ...?“. Antworten auf diese Fragen nennt man *linguistische Einschätzungen*. Im Falle von „Kann es sein, dass ...?“ sind mögliche Antworten: ja, nein, kommt darauf an, weiß nicht und im Falle von „Wie häufig im Jahr ...?“ sind mögliche Antworten: sehr häufig, häufig, ... selten, unwahrscheinlich. Solche linguistischen Ausdrücke kann man verwenden, wenn dabei beachtet wird:

- Alle Experten müssen darin geschult sein (bzw. es muss Einigkeit herrschen), welchen Wertebereich eine Zuordnung einer linguistischen mit einer physikalischen Variable hat. Ein Beispiel ist die Zuordnung *sehr häufig* \Leftrightarrow *mehr als einmal im Monat* oder *sehr selten* \Leftrightarrow *weniger als einmal in 100 Jahren*. Die in den Beispielrechnungen (motiviert durch die Arbeit [94]) zuvor angegebenen Intervalle sind eine Möglichkeit (Dreieck-Zugehörigkeitsfunktionen⁶), Unsicherheiten in Experteneinschätzungen unter Verwendung von linguistischen Variablen zu berücksichtigen. Die Zuordnung *sehr häufig* könnte durch (0.79|0.80|0.81) oder auch durch (0.70|0.80|0.90) spezifiziert werden, hier mit erkennbar unterschiedlicher Unsicherheit bei gleichem Erwartungswert.
- Die Menge der verwendeten linguistischen Variablen sollte so hoch sein, dass eine sinnvolle Unterscheidung in den Einschätzungen noch möglich ist. Üblich sind fünf bis neun Stufen [84]. Da die Zuordnung zwischen den Fuzzy-Intervallen, sowohl für den Wertebereich als auch für den Typ willkürlich ist, (man könnte dem Begriff *sehr häufig* auch einen anderen Erwartungswert als 0.8 zuordnen), muss diesbezüglich ebenso Einigkeit herrschen.
- Die Experten dürfen nicht raten bzw. sollte der Grad der Expertise eingeschätzt werden können (siehe etwas weiter unten) und sollten alle dieselben linguistischen Variablen benutzen. Weichen Expertenansichten zu stark voneinander ab, sollten grundsätzlich weitere Informationen zum einzuschätzenden Sachverhalt eingeholt werden, weil dies meistens als Hinweis auf verborgene Unterschiede in den Systemen zurückzuführen ist, an denen die Experten ihre Einschätzungen erlernt haben.

In [94] wurden hierbei den linguistischen Variablen direkt Wahrscheinlichkeiten (*fuzzy-probabilities*) zugeordnet. Allerdings ist es oft zweckmäßig, eine einheitliche Zuordnung zwischen linguistischen Variablen und den jeweiligen Fuzzy-Zugehörigkeitskennzahlen (im Folgenden als *fuzzy sets* bezeichnet) zu treffen, wobei diese dann in *fuzzy-possibilities* umgerechnet werden. Die Zuordnung wird dann von der konkreten Betrachtung entkoppelt und später durch eine Zuordnung zwischen *fuzzy-possibilities* und *fuzzy-probabilities* erweitert.

In [84] wurde dies benutzt, um Experteneinschätzungen mit Hilfe von *fuzzy sets* zu erfassen, zu wichten und anschließend zu *defuzzifizieren*. Darunter versteht man die Bestimmung eines scharfen Erwartungswertes für die Variablen, wobei die gewichteten Expertenmeinungen inklusive der zugeordneten Unsicherheiten berücksichtigt wurden. Anders als in der zuvor angegebenen analytischen Beispielrechnung müssen dann die *cut sets* nicht explizit in den Berechnungen im Bayesschen Netz berücksichtigt werden. Dies soll im Folgenden kurz illustriert werden.

Fussy sets und Defuzzifizierung

In der Tabelle 3.1 sind Zuordnungen zwischen linguistischen Variablen und fuzzy sets angegeben. Die Tabelle wurde aus [84, 96] übernommen.

⁶Weiter unten werden als Alternative trapezoide Zugehörigkeitsfunktionen diskutiert.

Tabelle 3.1: Zuordnungen zwischen linguistischen Variablen und fuzzy sets (a_1, a_2, a_3, a_4) nach [84, 96].

Abkürzung	Beschreibung	Häufigkeit	fuzzy set
SH	sehr hoch	einmal im Monat	$(0, 8; 1, 0; 1, 0; 1, 0)$
H-SH	hoch-sehr hoch	einmal in 1-3 Monaten	$(0, 7; 0, 9; 1, 0; 1, 0)$
H	hoch	einmal in 3-6 Monaten	$(0, 6; 0, 8; 0, 8; 1, 0)$
EH	eher hoch	einmal in 6-12 Monaten	$(0, 5; 0, 65; 0, 65; 0, 8)$
M	mittel	einmal in 1-5 Jahren	$(0, 3; 0, 5; 0, 5; 0, 7)$
EG	eher gering	einmal in 5-10 Jahren	$(0, 2; 0, 35; 0, 35; 0, 5)$
G	gering	einmal in 10-15 Jahren	$(0, 0; 0, 2; 0, 2; 0, 4)$
G-SG	gering-sehr gering	einmal in 15-20 Jahren	$(0, 0; 0, 0; 0, 1; 0, 3)$
SG	sehr gering	einmal in der Lebensphase oder noch nicht beobachtet	$(0, 0; 0, 0; 0, 0; 0, 2)$

Die durch das angegebene *fuzzy set* (a_1, a_2, a_3, a_4) repräsentierte Zugehörigkeitsfunktion $\mu(x)$ hat im Gegensatz zum *fuzzy set* aus dem Rechenbeispiel die Gestalt eines Trapezes (trapezoides *fuzzy set*):

$$\mu(x) = \begin{cases} 0, & \text{wenn } x < a_1 \\ \frac{x - a_1}{a_2 - a_1}, & \text{wenn } x \in [a_1, a_2] \\ 1, & \text{wenn } x \in [a_2, a_3] \\ \frac{a_4 - x}{a_4 - a_3}, & \text{wenn } x \in [a_3, a_4] \\ 0, & \text{wenn } x > a_4 \end{cases}. \quad (3.129)$$

Geben Experten nun eine Einschätzung zu einem Sachverhalt in linguistischer Form, so werden zunächst *fuzzy sets* zugeordnet:

$$\text{Experte}_j \Rightarrow (a_{1,j}, a_{2,j}, a_{3,j}, a_{4,j}). \quad (3.130)$$

Haben alle teilnehmenden Experten eine Einschätzung zu einem Sachverhalt abgegeben, so können die Einschätzungen zusammengefasst werden:

$$a_i^* = \sum_{j=1}^n \omega_j \cdot a_{i,j}, \quad i = 1, \dots, 4. \quad (3.131)$$

Hierin ist ω_j ein Wichtungsfaktor, mit dem die Expertenansichten individuell gewichtet werden können. Im Falle der Gleichwichtung ist ω_j das Reziproke der Expertenanzahl. In [84, 97] wurden zur Wichtung Lebensarbeitszeit, Karriereposition und Ausbildungsgrad erfasst und dafür Punktzahlen vergeben. Je höher Erfahrungszeit, Position und Ausbildung liegen, desto mehr Punkte werden vergeben. Der Wichtungsfaktor ist dann das Verhältnis aus Punktzahlen des Experten dividiert durch die Gesamtpunktzahl aller Experten. Insgesamt wird dadurch

erreicht, dass möglicherweise unterschiedliche Einschätzungen in ein *fuzzy set* münden. Hierzu ein Beispiel: Es wurden vier Experten bezüglich ihrer Einschätzung zum emissionsrelevanten Schaden an einer Sekundärdichtung (siehe Kapitel 6) befragt:

- Experte 1 $\rightarrow G \rightarrow (0, 0; 0, 2; 0, 2; 0, 4)$,
- Experte 2 $\rightarrow G \rightarrow (0, 0; 0, 2; 0, 2; 0, 4)$,
- Experte 3 $\rightarrow G \rightarrow (0, 0; 0, 2; 0, 2; 0, 4)$.
- Experte 4 $\rightarrow G\text{-SG} \rightarrow (0, 0; 0, 0; 0, 1; 0, 3)$.

Die Expertise wurde als gleichwertig erachtet, womit als Einschätzung folgt:

$$\text{Schaden S: } \Rightarrow (0, 0; 0, 15; 0, 175; 0, 375), \quad (3.132)$$

was im Bereich von gering bis sehr gering liegt und innerhalb eines Zeitraumes von 15-20 Jahren durchaus erwartet werden muss. Auf diese Weise wurden die Expertenbefragungen in dieser Arbeit umgesetzt. Durch die Defuzzifizierung wird der Schwerpunkt (in x) (*fuzzy-possibility*) FP für das jeweilige Trapez bestimmt:

$$\begin{aligned} FP &= \frac{\int \mu \cdot x dx}{\int \mu dx} \\ &= \frac{1}{3} \cdot \frac{(a_4 + a_3)^2 - a_4 \cdot a_3 - (a_1 + a_2)^2 + a_1 \cdot a_2}{a_4 + a_3 - a_1 - a_2} \\ &= \frac{23}{384} \approx 0.06 \quad (\text{für die S}). \end{aligned} \quad (3.133)$$

Interpretiert man dies als mittlere Ausfallrate, so folgt für einen emissionsrelevanten Schaden an einer Sekundärdichtung $\lambda = 0,06 \frac{1}{a}$. Für das Bayessche Netz in Kapitel 6 wurde ein etwas konservativerer Wert von $\lambda = 0,07 \frac{1}{a}$ verwendet.

In [84] wurden die auf diese Art bestimmten (*fuzzy-possibilities*) anschließend in (*fuzzy-probabilities*) umgerechnet. Die hierfür verwendeten Ansätze gehen auf [98] zurück, der im Rahmen von Zuverlässigkeitsanalysen menschlicher Handlungsabläufe *fuzzy sets* in Fehleraten und anschließend in Fehlerwahrscheinlichkeiten umgerechnet hat. Mit e als Fehlerwahrscheinlichkeit und Er als Fehlerrate wurde dort:

$$e = \begin{cases} \frac{1}{1+K \cdot \log\left(\frac{1}{Er}\right)^3}, & Er \neq 0 \\ 0, & Er = 0 \end{cases} \quad (3.134)$$

verwendet. Zudem wurde für die Konstante K eine untere Grenze für menschliche Fehlhandlungen zu $5 \cdot 10^{-3}$ je Handlung eingestellt, was für K :

$$K = \frac{1}{\log\left(\frac{1}{5 \cdot 10^{-3}}\right)} = 0,4345 \quad (3.135)$$

ergibt. Allerdings werden in [84] auch Werte umgerechnet, deren Ereignisraten nicht auf Personalhandlungen zurückzuführen sind, was die Methode fragwürdig erscheinen lässt⁷. Hier wurden diese Umformungen nicht verwendet. Die Experten sollten somit grundsätzlich direkt die Ausfallraten linguistisch abschätzen.

⁷In der zitierten Arbeit finden sich leider zahlreiche weitere Fehler in Formeln und Berechnungen.

3.5. Software zur Anwendung Bayesscher Netze

Die zuvor durchgeführten Beispielrechnungen konnten wegen der geringen Anzahl an Knoten und Hypothesen exakt und analytisch durchgeführt werden. Es ist sofort einsichtig, dass in praxisrelevanten Anwendungen deutlich komplexere Netze erforderlich sind, für die sich diese Vorgehensweise nicht anbietet. So müssen beispielsweise Variablen nicht zwingend in diskretisierter Form verwendet werden, sondern auch in Form von Verteilungsfunktionen. Für die Berechnungen in Bayesschen Netzen werden dann zumeist Sampling-Verfahren benutzt. Man kann den analytischen Beispielen auch entnehmen, dass die Transfermatrizen mit der Anzahl der Eltern- und Hypothesen an den beteiligten Knoten sehr rasch wachsen. Selbst wenn (was oft das eigentliche Problem darstellt) Daten für die Definition dieser Transfermatrizen vorliegen, so kann die Anzahl an Rechenschritten zu Limitierungen durch das Computersystem führen. Zur Bewältigung der erforderlichen Berechnungen in Bayesschen Netzen, selbst bei Standardanwendungen, wie sie in dieser Arbeit demonstriert sind, sind somit Softwarepakete erforderlich. Diese benutzen des Weiteren zur Reduktion des numerischen Aufwandes auch Verfahren zur approximativen Inferenz, auf die hier jedoch nicht weiter eingegangen werden soll. Im Rahmen einer Bachelor- und einer Masterarbeit⁸ wurden geeignete Softwarepakete gesucht, installiert und einem Vergleich unterzogen. Hier soll eine Kurzzusammenfassung der Arbeiten [99, 100] genügen.

Es wurden zum Vergleich nur Softwarepakete herangezogen, für die eine Evaluation kostenlos möglich war, entweder mit Hilfe einer Testversion oder weil die Software selbst frei verfügbar ist. Vergleichsaspekte waren:

- unterstützte Benutzeroberflächen und Nutzerfreundlichkeit,
- Verfügbarkeit bzw. Zugriffsmöglichkeiten auf den Quellcode,
- Anschaffungskosten sowie Support.

In der Tabelle 3.2 wird eine aktualisierte Übersicht gegeben, die jedoch keinen Anspruch auf Vollständigkeit hat. Als Ergebnis des Softwarevergleiches wurde die Software GeNIe für die Anwendungen innerhalb der Arbeitsgruppe ausgewählt, da diese alle erforderlichen Tools zur Bearbeitung von Standardanwendungen beinhaltet, im akademischen Bereich, insbesondere zu Publikationszwecken kostenfrei verwendet werden kann und eine der besten graphischen Benutzeroberflächen bietet. Für weitere Details sei auf die zitierten Arbeiten verwiesen.

3.6. Vergleich von Bayesschen Netzen mit Ereignis- und Fehlerbäumen

In diesem Abschnitt sollen Bayessche Netze mit Ereignis- und Fehlerbäumen verglichen werden. Der Schwerpunkt liegt auf einem Vergleich mit Fehlerbäumen. Dazu sollen zunächst die Fehlerbaumanalyse und die Ereignisbaumanalyse stark verkürzt dargestellt werden.

3.6.1. Fehlerbaumanalyse

Die Fehlerbaumanalyse als Verfahren der quantitativen Risikoanalyse ist in der DIN EN 61025 [73] ausführlich dargestellt. Die Fehlerbaumanalyse besteht hierbei aus der strategischen Anwendung von Fehlerbäumen⁹ zur Ermittlung von Systemzuverlässigkeiten. Die Risikoanalyse

⁸Die Arbeiten wurden vom Autor diesbezüglich initialisiert, thematisch ausgerichtet und betreut, weil es keine vergleichbaren Softwaregegenüberstellungen in publizierter Form gab. Der Autor hat des Weiteren jedes der genannten Softwarepakete selbst installiert und getestet.

⁹Fehlerbäume können selbstverständlich auch außerhalb der Risikoanalyse eingesetzt werden.

Tabelle 3.2: Darstellung einer Auswahl von Softwarepaketen zu Bayesschen Netzen für einen Vergleich, (R) Registrierung erforderlich, (nk) nur nichtkommerzielle Verwendung, (T) Testversion verfügbar, (aL) akademische Lizenz (Tabelle modifiziert aus [99]).

Software, Quelle	Plattform	Bemerkungen
Freier Code, nichtkommerzielle Lizenz		
AIspace [101]	Windows, Linux, MacOS	Java, frei, nk
Banjo [102]	Windows, Linux, MacOS	Java, frei, R, nk
BNJ [103]	Windows, Linux, MacOS	Java, frei, R, nk
SamIam [104]	Windows, Linux, MacOS	Java, frei, R, nk
UnBBayes [105]	Windows, Linux, MacOS	Java, frei, R, nk
Proprietärer Code, kommerzielle Lizenz		
SMILE [92]	Windows, Linux, MacOS	aL (frei für 6 Monate)
GeNIe [92]	Windows, Linux, MacOS	aL, frei
JavaBayes [106]	Windows, Linux, MacOS	Java, T, R, nk
AgenaRisk [107]	Windows, Linux, MacOS	T, frei für 1 Monat
BayesiaLab [108]	Windows, Linux, MacOS	T, reduzierter Funktionsumfang
Bayes Server [109]	Windows	API verfügbar
BNet [110]	Windows	T
Flint [111]	Windows (Dos-Box)	Unsicherheit mittels Fuzzy-Logik
HUGIN [112]	Windows, Linux, MacOS	Online-Schulungen, API verfügbar
Netica [113]	Windows	(T)

beinhaltet Zieldefinitionen, Systembeschreibungen, Zustandsbedingungen, Leistungsbeschreibungen und die Festlegung eines Detaillierungsgrades der Analyse. Durch die damit gegebene Konzeptionierung soll letztendlich erreicht werden, dass der aufzustellende Fehlerbaum zweckorientiert und nicht allgemein aufgestellt wird. Für weitere Informationen hierzu muss auf die DIN EN 61025 verwiesen werden. Kern der Fehlerbaumanalyse ist die Erstellung und Verwendung eines Fehlerbaumes.

In Fehlerbäumen wird ein Hauptereignis (auch Top-Event) untersucht, in dem deduktiv Ereignisketten (in gewissem Sinne zeitlich rückwärts) ermittelt werden, die das Hauptereignis auslösen können. Der jeweilige Detaillierungsgrad legt fest, wie weitreichend diese Auflösung erfolgt. Ereignisse unterhalb des Hauptereignisses werden als Zwischenereignisse und die am Ende stehenden (nicht weiter auf noch tiefere Ursachen zurückgeführten) Ereignisse als Primärereignisse bezeichnet. Eine Besonderheit von Fehlerbäumen ist, dass die Zustände der durch die Ereignisse beschriebenen Sachverhalte nur durch null oder eins (nicht funktionsfähig bzw. Ausfall, funktionsfähig) repräsentiert werden. Die Verknüpfung dieser Ereignisse erfolgt durch logische Gatter, die mehrere Eingänge haben können und jeweils einen Ausgang besitzen. Für

quantitative Betrachtungen ermittelt man Eintrittswahrscheinlichkeiten für die jeweiligen Zustände und berechnet die totale Wahrscheinlichkeit des Hauptereignisses unter Beachtung der logischen Gatter.

Bekannte logische Gatter sind *UND*-, *ODER*- sowie auch das *Nicht*-Gatter, wobei in der Anwendung von Fehlerbaumanalysen auch weitere benutzt werden. Verkettungen von logischen Gattern können mit Hilfe der Booleschen Algebra funktionell angegeben und umgeformt werden. Wird eine bestimmte Struktur eines Fehlerbaumes funktionell angegeben, so werden die Ereignisse durch Variablen und die Gatter durch Operatoren repräsentiert. Diese Strukturfunktionen sind in dem Sinne eindeutig, dass durch diese die logische Verknüpfung des Fehlerbaumes angegeben wird. Zwei strukturell verschiedene Fehlerbäume werden verschiedene Strukturfunktionen aufweisen. Dennoch können Strukturfunktionen unter Beachtung von Umformungsregeln für Boolesche Ausdrücke umgeformt werden, so dass äquivalente Strukturfunktionen entstehen. Diese Umformungen werden zum Auffinden einer möglichst einfachen Repräsentation des Fehlerbaumes vorgenommen. Sind zwei nicht weiter reduzierbare Strukturfunktionen verschieden, so auch die durch diese repräsentierten Fehlerbäume. Als Beispiel soll hier angegeben werden, dass sich allein mit *NAND*- (nicht UND) oder alternativ mit *NOR*-Gattern (nicht ODER) alle logischen Verknüpfungen und somit auch vollständige Logiksysteme zusammenstellen lassen. Das bedeutet jedoch nicht, dass die damit verbundene Strukturfunktion die einfachste Form annimmt.

In Abbildung 3.9 ist ein Beispiel für einen Fehlerbaum angegeben, in dem einige der genannten Sachverhalte illustriert sind. Die Strukturfunktion für den angegebenen Beispielfehlerbaum

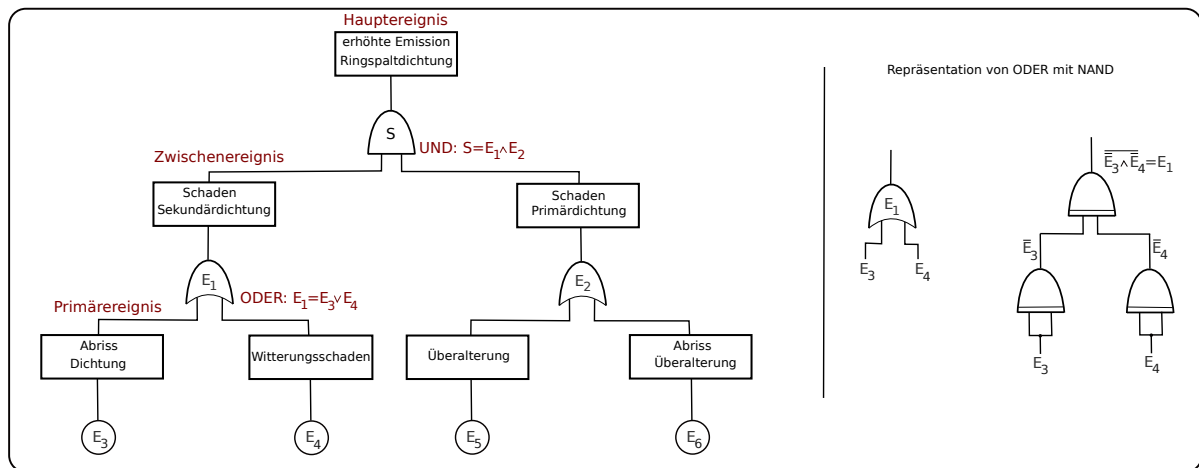


Abbildung 3.9: Darstellung eines Fehlerbaumes und Symbolerklärungen.

lautet:

$$S = (E_3 \vee E_4) \wedge (E_5 \vee E_6). \quad (3.136)$$

Würde man nun für die Ereignisse Wahrscheinlichkeiten einsetzen, so würde gelten:

$$\begin{aligned} P(E_1 \cap E_2) &= P(E_1) \cdot P(E_2) && \text{für UND} \\ P(E_3 \cup E_4) &= 1 - P(\bar{E}_3 \cap \bar{E}_4) = 1 - P(\bar{E}_3) \cdot P(\bar{E}_4) && \text{für ODER} \\ P(S) &= [1 - P(\bar{E}_3) \cdot P(\bar{E}_4)] \cdot [1 - P(\bar{E}_5) \cdot P(\bar{E}_6)] && \text{für P(S)}. \end{aligned} \quad (3.137)$$

In der Digital- sowie Schaltungstechnik sind die vom System zu übernehmenden Funktionen so aufgebaut, dass diesen durch die Verwendung der Gatter optimal entsprochen wird, weswegen eine Fehlerbaumanalyse für diese Systeme optimal geeignet ist.

Erwähnenswert sind abschließend folgende Punkte:

1. Fehlerbäume in praktischen Anwendungen können sehr umfangreich sein. Besitzt die

Strukturfunktion n Variablen, so gibt es 2^n Wahrheitszustände, die bei einer direkten Untersuchung analysiert werden müssten. Besondere Aufmerksamkeit bekommen *Single-Point-Failures*, *Cut-Sets* und *Minimal Cut-Sets*, für deren Auffinden es Computeralgorithmen gibt. Unter *Single-Point-Failures* versteht man Fehlerzustände, die das Hauptereignis direkt auslösen, was somit einer sehr kritischen Systemkomponente mit Blick auf den Sachverhalt entspricht. In *Cut-Sets* werden Systemkomponenten (Basis-Ereignisse) zusammengefasst, deren gemeinsamer Ausfall das Hauptereignis auslöst. Die *Minimal Cut-Sets* sind eine besondere Unterform, bei welcher solche Systemkomponenten zu einem Set zusammengefasst werden, deren gemeinsamer Ausfall das Hauptereignis auslöst. Lässt man aus dieser Menge ein Ereignis weg, so darf das verbleibende Set kein *Cut-Set* mehr sein. In dem in Abbildung 3.9 angegebenen Fehlerbaum gibt es keinen *Single-Point-Failure*, vier *Minimal Cut-Sets* ($E_3 \wedge E_5$), ($E_3 \wedge E_6$), ($E_4 \wedge E_5$) und ($E_4 \wedge E_6$). Die Anzahl der Ereignisse eines *Minimal Cut-Sets* nennt man die Ordnung des Sets (im Beispiel: 2). In großen Fehlerbäumen werden solche Sets softwaregestützt gesucht, weil diese Auskunft über Systemschwachstellen ermöglichen [114]. Im Beispiel wäre zudem ($E_3 \wedge E_4 \wedge E_5 \wedge E_6$) ein *Cut-Set*, aber kein *Minimal Cut-Set*, weil die Entfernung von einem Ereignis immer noch ein *Cut-Set* wäre.

2. Hohe Bedeutung für die Fehlerbaumanalyse als Verfahren der Risikoanalyse haben gemeinsam verursachte Ausfälle, sogenannte *Common Cause Failures*. Darunter versteht man einzelne Ereignisse, welche eine Vielzahl von Folgeausfällen, selbst in redundant ausgeführten Systemkomponenten verursachen können. Im angegebenen Beispiel wäre dies gegeben, wenn im Winter beide Dichtungsränge an der Tankhülle festfrieren und bei der Dachsenkung (partiell) ab- oder einreißen. Ein anderer Fall wären stark erhöhte Temperaturen, die unabhängig von der Tüchtigkeit der Dichtung zu einer erhöhten Lagerstoffflüchtigkeit und somit zu erhöhten Emissionen führen. Zur Berücksichtigung könnte man diese zusätzlichen Ereignisse (z. B. durch Hinzunahmen eines ODER-Gatters) direkt im Fehlerbaum modellieren. Für alternative Strategien (z. B. Marshall-Olkin-Modell, β -Faktor-Modell, Binomial Failure Rate Modell) sei auf die Literatur verwiesen [115].
3. Es ist ersichtlich, dass für eine Fehlerbaumanalyse die zugrundeliegende Systemlogik bekannt sein muss. Für ein System mit hoher Unkenntnis (*Black Box*) können Fehlerbäume nicht aufgestellt werden.

3.6.2. Ereignisbaumanalyse

Im Gegensatz zur Fehlerbaumanalyse ist die Ereignisbaumanalyse induktiv (zeitlich vorwärts in einer Kausalkette gerichtet), nimmt also einen unerwünschten Zustand als gegeben an und ermittelt alle möglichen Konsequenzen. Die entstehenden Verzweigungen werden im Allgemeinen binär angenommen. Entweder wird das betrachtete Zwischensystem als voll funktionsfähig angesehen oder als ausgefallen ohne Berücksichtigung denkbarer Zwischenstufen. Es handelt sich ebenso um ein genormtes Verfahren, beschrieben in der DIN EN 62502 [7]. Das Besondere an der Ereignisbaumanalyse ist, dass nicht die systeminhärente Struktur des Systems durch diese abgebildet wird, sondern kausale Beziehungen und bedingte Abhängigkeiten. Die zuvor diskutierte Fehlerbaumanalyse bildet die Art der Beziehung zwischen den Basis-, Zwischen- und dem Hauptereignis ab, jedoch keine Form von Kausalität. Ereignisbäume wiederum stellen weniger die Struktur des Systems, als vielmehr die physikalische Abhängigkeit, die Kausalität in den Vordergrund. Bereits hieran mag man erkennen, dass in Bayesschen Netzen beide Aspekte gleichwertig wiedergefunden werden können. Die logischen Gatter können ebenso berücksichtigt (durch sehr einfache Transfermatrizen; siehe etwas weiter unten) werden wie auch die Kausalstruktur. Für weitere Details zur Ereignisbaumanalyse sei erneut auf die Literatur [7] verwiesen.

3.6.3. Vergleich mit Bayesschen Netzen

In verschiedenen Literaturquellen wurden bereits Vergleiche zwischen Bayesschen Netzen und Fehlerbäumen angegeben, z. B. in [116, 117, 118, 119]. Zunächst wurde in [116] gezeigt, wie Fehlerbäume allgemein in Bayessche Netze überführt werden können. Die weiter unten angegebenen Transformationsbeispiele orientieren sich an dieser Publikation. Zusammenfassend wurde gezeigt, dass jeder Fehlerbaum in ein Bayessches Netz transformiert werden kann, wogegen über die Umkehrung dieses Satzes (die Frage, ob auch jedes Bayessche Netz in einen äquivalenten Fehlerbaum überführt werden kann) keine Aussage getroffen wird. Die Umformung geschieht dadurch, dass die stochastisch unabhängigen Basisereignisse zu Wurzelknoten und die Eigenschaften der logischen Gatter in den Transfermatrizen berücksichtigt werden. Die Transfermatrizen sind hierbei lediglich mit Nullen oder Einsen besetzt, also vergleichsweise trivial. Die Demonstration erfolgt an einem kleinen Multiprozessorsystem. Ebenso werden verrauschte Gitter (*noisy-or*, *noisy-and*) diskutiert, mit denen sich abweichendes Verhalten von den reinen Gittern beschreiben lässt. Als weiterer Vorteil von Bayesschen Netzen werden Variablen mit mehr als zwei Zuständen (z. B. logisch 0 oder 1) diskutiert, die sich in Bayesschen Netzen zwanglos berücksichtigen lassen.

Als Erweiterung dieser Arbeit kann die Publikation [117] angesehen werden, bei welcher dynamische Fehlerbäume in dynamische Bayessche Netze überführt werden. Die explizite Modellierung der Zeitabhängigkeit, z. B. zur Modellierung von exponentiellem Ausfallverhalten erfolgt über eine Diskretisierung der Zeit in kleine Intervalle Δ und dem Vergleich der Aussagen der Netze aus benachbarten Zeitschichten. Auch in dieser Arbeit wird gezeigt, dass diese Überführung grundsätzlich möglich ist, wobei erneut die Vorteile der höheren Flexibilität von Bayesschen Netzen gegenüber Fehlerbäumen hervorgehoben werden.

Die etwas später erschienene Arbeit [118] vergleicht Fehlerbaumanalysen mit Analysen basierend auf Bayesschen Netzen für Sicherheitsanalysen in Prozesseinrichtungen, kommt allerdings nicht zu neuen Erkenntnissen. Ebenso die aus demselben Jahr stammende Arbeit [120], bei der ein Vergleich am Beispiel sicherheitskritischer Komponenten im Schienenverkehr durchgeführt wurde. In einer vergleichsweise jungen Arbeit [119] wurde ein Functional Resonance Analysis Method (FRAM)-Ansatz mit Fehlerbaumanalysen und Bayesschen Netzen verglichen. Die (vermeintlichen) Vorteile von FRAM sind jedoch wenig überzeugend bzw. nicht nachvollziehbar angegeben oder schlicht unzutreffend. Es wird behauptet, dass insbesondere Einflüsse durch menschliche Eingriffe mit FRAM-Ansätzen einfacher und überschaubarer zu modellieren sein sollen. Einen Beweis bleibt die Arbeit jedoch schuldig. Die Komplexität Bayesscher Netze widerspiegelt die kausalen Abhängigkeiten des betrachteten Systems, ohne durch Modellfunktionalität zusätzliche Größen und Annahmen hinzuzufügen. Wenn also die kausalen Verkettungen in einem Modell essentiell für deren Beschreibung sind, so kann ein vermeintlich einfacheres Modell unter Auslassung von Abhängigkeiten keine äquivalenten Aussagen treffen. Der wohl wesentliche Unterschied zwischen Fehlerbäumen und Bayesschen Netzen besteht darin, dass die Strukturfunktion keine gemeinsame Wahrscheinlichkeitsverteilung repräsentiert. Ändert man eine Wahrscheinlichkeit an einem Primäreignis, so bekommt man zwar eine neue Wahrscheinlichkeit für darüberliegende Ereignisse bzw. für das Hauptereignis, allerdings keine aktualisierte Einschätzung in das Vertrauen der anderen Variablen. Selbiges gilt für den Fall, dass eine Beobachtung (Evidenz) an einem Ereignis vorliegt.

Im Folgenden sollen die Grundzüge der Überführung von Fehlerbäumen in Bayesschen Netze angegeben und dann verglichen werden.

Logische Gatter und Transfermatrizen

Im Folgenden soll ein einfaches logisches Gatter betrachtet werden, bei dem zwei Primäreignisse BE_1 und BE_2 in ein Hauptereignis HE münden. Das logische Gatter selbst kann ein *UND*-, *NAND*-, *ODER* oder *NOR*-Gatter sein (als Black-Box gekennzeichnet). Dieser klei-

ne Fehlerbaum soll durch ein äquivalentes Bayessches Netz ersetzt werden. Abbildung 3.10 illustriert Fehlerbaum und Bayessches Netz. Die Wahrheitstabelle für den Fehlerbaum aus Ab-

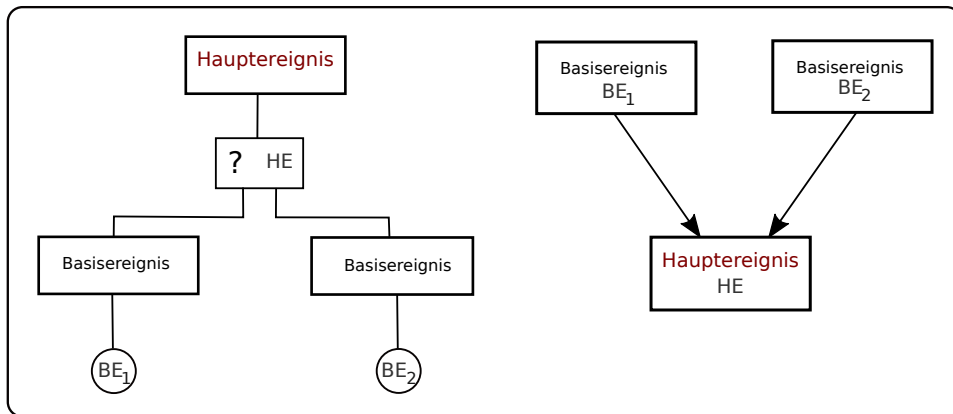


Abbildung 3.10: Darstellung eines kleinen Fehlerbaumes und eines äquivalenten Bayesschen Netzes.

Abbildung 3.10 ist von der konkret gewählten Verknüpfung der Basisereignisse abhängig. Die Tabelle 3.3 gibt eine Übersicht über einige Möglichkeiten.

Tabelle 3.3: Wahrheitstabellen für verschiedene Repräsentationen der Black Box.

BE_1	BE_2	UND	NAND	ODER	NOR
0	0	0	1	0	1
0	1	0	1	1	0
1	0	0	1	1	0
1	1	1	0	1	0

Für das Hauptereignis werden sowohl im Fehlerbaum als auch im Bayesschen Netz zwei Zustände unterschieden: $(HE, \overline{HE}) \equiv (HE_1, HE_2)$. Für die Basisereignisse (BE_1, BE_2) werden ebenso zwei Zustände $(BE_{11}, \overline{BE}_{11} \equiv BE_{12})$ bzw. $(BE_{21}, \overline{BE}_{21} \equiv BE_{22})$ unterschieden, für die zudem folgende Wahrscheinlichkeiten zugeordnet seien: $(P(BE_{11}) = 0,1, P(BE_{12}) = 0,9)$ bzw. $(P(BE_{21}) = 0,2, P(BE_{22}) = 0,8)$. Im Falle einer **UND**-Verknüpfung tritt das Hauptereignis dann ein, wenn sowohl BE_{11} als auch BE_{21} eintreten. Die Wahrscheinlichkeit dafür ist:

$$P(HE) = P(BE_{11}) \cdot P(BE_{21}) = 0,1 \cdot 0,2 = 0,02 \quad \Rightarrow \quad P(\overline{HE}) = 0,98. \quad (3.138)$$

Für eine **ODER**-Verknüpfung würde gelten:

$$P(HE) = 1 - P(\overline{BE}_{21}) \cdot P(\overline{BE}_{22}) = 1 - 0,9 \cdot 0,8 = 0,28 \quad \Rightarrow \quad P(\overline{HE}) = 0,72. \quad (3.139)$$

Für **NAND** und **NOR** würden sich die Wahrscheinlichkeitswerte bei **UND** und **ODER** lediglich vertauschen.

Für das äquivalente Bayessche Netz würden die stochastisch unabhängigen Basisereignisse zu stochastisch unabhängigen Wurzelknoten. Die Eintrittswahrscheinlichkeiten für die Zustände an den Basisereignissen wären unmittelbar die Wahrscheinlichkeiten der Hypothesen dieser Wurzelknoten. Die Struktur des Fehlerbaumes, in diesem Fall die Eigenschaft des logischen

Gatters, legt nur die Besetzung der Transfermatrix fest:

$$M(HE_1|BE_{1j}BE_{2k})_{j,k} = \begin{pmatrix} P(HE_1|BE_{11}BE_{21}) & P(HE_1|BE_{11}BE_{22}) \\ P(HE_1|BE_{12}BE_{21}) & P(HE_1|BE_{12}BE_{22}) \end{pmatrix}, \quad (3.140)$$

$$M(HE_2|BE_{1j}BE_{2k})_{j,k} = \begin{pmatrix} P(HE_2|BE_{11}BE_{21}) & P(HE_2|BE_{11}BE_{22}) \\ P(HE_2|BE_{12}BE_{21}) & P(HE_2|BE_{12}BE_{22}) \end{pmatrix}. \quad (3.141)$$

Die Wahrscheinlichkeiten für die einzelnen Hypothesen folgen mit:

$$P(HE_k) = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 P(HE_k|BE_{1i}BE_{2j})_{i,j} \cdot P(BE_{1i}) \cdot P(BE_{2j}). \quad (3.142)$$

Für die **UND**-Verknüpfung würde so für das Hauptereignis folgen:

$$\begin{aligned} P(HE_1) &= \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 P(HE_1|BE_{1i}BE_{2j})_{i,j} \cdot P(BE_{1i}) \cdot P(BE_{2j}) \\ &= P(HE_1|BE_{11}BE_{21}) \cdot P(BE_{11}) \cdot P(BE_{21}) \\ &+ P(HE_1|BE_{11}BE_{22}) \cdot P(BE_{11}) \cdot P(BE_{22}) \\ &+ P(HE_1|BE_{12}BE_{21}) \cdot P(BE_{12}) \cdot P(BE_{21}) \\ &+ P(HE_1|BE_{12}BE_{22}) \cdot P(BE_{12}) \cdot P(BE_{22}) \\ &= 1 \cdot 0,1 \cdot 0,2 = 0,02 \quad (\text{analog: } P(HE_2) = 0,98), \end{aligned} \quad (3.143)$$

weil die Transfermatrizen nur mit Nullen und Einsen besetzt sind:

$$M(HE_1|BE_{1j}BE_{2k})_{j,k} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.144)$$

$$M(HE_2|BE_{1j}BE_{2k})_{j,k} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.145)$$

Zur Realisierung von **NAND** müsste man lediglich die letztgenannten Matrizen vertauschen. Damit ist unmittelbar einleuchtend, dass jeder Fehlerbaum in ein Bayessches Netz überführt werden kann, wobei die Transfermatrizen nur mit Nullen und Einsen besetzt sind. Für eine **ODER**-Verknüpfung würden diese lauten (bei **NOR** vertauscht man beide Matrizen):

$$M(HE_1|BE_{1j}BE_{2k})_{j,k} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.146)$$

$$M(HE_2|BE_{1j}BE_{2k})_{j,k} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.147)$$

In Bayesschen Netzen ist man jedoch nicht daran gebunden, dass die Transfermatrizen nur diese Besetzungen aufweisen. Matrizen der Art:

$$M(HE_1|BE_{1j}BE_{2k})_{j,k} = \begin{pmatrix} 0,2 & 0,5 \\ 0,3 & 0,5 \end{pmatrix}, \quad (3.148)$$

$$M(HE_2|BE_{1j}BE_{2k})_{j,k} = \begin{pmatrix} 0,8 & 0,5 \\ 0,7 & 0,5 \end{pmatrix} \quad (3.149)$$

wären durchaus erlaubt, würden allerdings einer Art Überlagerung aller Gattereigenschaften entsprechen und keiner konkreten Schaltlogik.

Weitere Vergleichsaspekte zwischen den Verfahren

Für die quantitative Risikoanalyse in Kapitel 6 liegen Situationen, wie die zuvor diskutierte, häufig vor. Die Nutzung reiner Beobachtungs- bzw. Erfahrungswerte von Experten ist daher nicht hinreichend für die Entwicklung eines begründeten Fehlerbaumes zu einem Problem. Mit den hierzu gewonnenen Daten kann eine Transfermatrix abgeleitet werden, jedoch keine (eindeutige) Struktur aus logischen Gattern. Dies ist immer der Fall, wenn zu einem betrachteten (technischen) System Unkenntnis vorliegt. Kann diese Unkenntnis nicht ausgeräumt werden, sollte man vermutlich keine Fehlerbaumanalyse durchführen. Hiermit umgehen zu können, ist letztendlich die eigentliche Stärke Bayesscher Netze.

Etwas weiter oben wurde angegeben, dass die Analyse und Berücksichtigung von *Common Cause Failures* in Fehlerbaumanalysen bisweilen nicht unkompliziert ist. In Bayesschen Netzen können solche Abhängigkeiten vergleichsweise einfach durch Hinzunahme von Knoten und kausalen Verbindungen modelliert werden. Zwar nehmen dann die zu spezifizierenden Abhängigkeiten in den Kinderknoten zu (was eine weitere Datengrundlage erforderlich macht), allerdings ist dies oft intuitiv zugänglich.

3.7. Kurzbeschreibung von Anwendungsbeispielen

Während der Anfertigung der Habilitation wurden Bayessche Netze für zahlreiche Problemstellungen entwickelt, von denen einige publiziert bzw. innerhalb der Veröffentlichungsphase sind und andere sich im Bearbeitungsstatus befinden. Hier soll ein kurzer Überblick über ausgewählte Untersuchungen gegeben werden. Die Beispiele unterstreichen die breite Anwendbarkeit des Verfahrens, zeigen allerdings auch, wo weiterer Forschungsbedarf besteht.

3.7.1. Kühlsystemversagen einer Offshore-Konverterplattform

Zusammen mit der DNV GL-Oil & Gas Germany wurde eine Masterarbeit [100] betreut, in welcher die Ausfallwahrscheinlichkeit für die Hochspannungsgleichstromübertragung von einer Offshore-Konverterplattform an Land durch Versagen des Kühlsystems der Transformatoren untersucht wurde. Hauptgegenstand war das Herausfinden von Bedingungen, die einen maßgeblichen Beitrag zum *Emergency-Shutdown* der Konverterplattform haben. Das Bayessche Netz wurde auf der Grundlage einer zuvor durchgeführten FMECA erstellt. Fehlende Daten stammen aus Expertenbefragungen. Erste Ergebnisse zeigen eine vermutlich stark überschätzte Ausfallwahrscheinlichkeit, so dass derzeit an einer Verbesserung der Eingangsdaten, an einer Mitberücksichtigung von Unsicherheiten, aber auch an einer grundsätzlichen Beseitigung von Unzulänglichkeiten am Netz gearbeitet wird. Eine Publikation wird angestrebt, wenn im Zuge der Bearbeitung eine Verbesserung der Datengrundlage erreicht wird.

3.7.2. Kürzere Hilfsfristen: Smartphonebasierte Ersthelferalarmierung

Herz-Kreislauf-Stillstände stellen akute und sehr zeitkritische Notfälle dar. Werden bei einem Herz-Kreislauf-Stillstand keine Reanimationsmaßnahmen durchgeführt, entsteht ein therapiefreies Intervall. In diesem sinkt die Überlebenswahrscheinlichkeit pro Minute um 10%. Je nach Bundesland beträgt die übliche Eintreffzeit von Hilfskräften 10-15 Minuten und es bestehen große Probleme bei der Einhaltung selbst dieser Zeiten. Eine Reduzierung auf eine notfallmedizinisch sinnvolle Zeit von 5 Minuten ist allein durch das bestehende Rettungssystem aus logistischen und ökonomischen Gründen nicht möglich. Eine zusätzliche und vielversprechende Möglichkeit zur Reduzierung des therapiefreien Intervalls stellen smartphonebasierte Ersthelferalarmierungssysteme (sbEAS) dar [121]. Hierbei handelt es sich um eine zusätzliche Erstversorgungsstruktur, welche nicht auf die bestehende Infrastruktur des Rettungssystems zurückgreift, sondern smartphonebasiert ist.

Der Disponent benachrichtigt im Notfall registrierte und medizinisch ausgebildete Fachkräfte in unmittelbarer Nähe zum Notfallort über eine Smartphoneanwendung.

Hierzu wurde ein Bayessches Netz erstellt, das die zu erwartende Höhe der Vorteile sowie auch die wesentlichen Einflussfaktoren quantitativ bestimmt. Erste Ergebnisse wurden publiziert [86]. Derzeitig ist in Kooperation mit Politik und Entscheidungsträgern die Auswahl eines Landkreises zum testweisen Einsatz dieser Systeme in Sachsen-Anhalt geplant, um zukünftig mit Hilfe genauerer und umfassenderer Daten Erweiterungen am Netz sowie genauere Aussagen treffen zu können.

3.7.3. Gefährliche explosionsfähige Atmosphären an Schwimmdachtanks

In diesem Projekt wurde die Wahrscheinlichkeit abgeschätzt, mit der es bei einem Lagertank für Roh- und Mineralöle zur Herausbildung einer gefährlichen explosionsfähigen Atmosphäre kommen kann. Hierfür wurden alle Betriebszustände (Normalbetrieb, Produktwechsel, Revision) sowie alle bekannten Schadenstypen erfasst. Die Schwierigkeit lag in der Beschaffung der einzubeziehenden Schadenstypen und der Abschätzung der zugehörigen Eintrittswahrscheinlichkeiten. Um diese Daten zu beschaffen, wurden umfangreiche Betreiber- und Expertenumfragen durchgeführt. Hierauf wird ausführlich in Kapitel 6 eingegangen. Auf Grund der Datenunsicherheiten und der Vielzahl an Tankbauweisen gibt die Analyse nur die Größenordnung für die Formierungswahrscheinlichkeit wieder.

4. Modellierung von Unsicherheiten, Response-Surface-Methoden (RSM)

Während des Physikstudiums (des Autors) galt die Aussage, dass eine Messgröße, welche ohne Unsicherheiten angegeben wird, praktisch wertlos ist. Wenn etwa der Betrag einer Messgröße von fundamentaler Bedeutung für Postulate einer physikalischen Theorie ist, so kann nur mit einem Messwert allein keine Entscheidung getroffen werden. Üblich sind daher Mehrfachmessungen sowie die Bestimmung von Erwartungswerten und Vertrauensbereichen in aussagekräftigen Fehlerdiskussionen. Wie in der Einleitung bereits angedeutet, finden sich in der Literatur viele Beispiele von qualitativen Sicherheitsanalysen von Anlagen und Prozessen bis hin zu CFD-Simulationen zu Strömungs-, Ausbreitungs- und Brandereignissen, die entweder verfahrensbedingt ohne Unsicherheitsbetrachtungen auskommen müssen oder bei denen eine detaillierte Betrachtung dieser zu Gunsten eines Einzelszenarios ausgelassen wurde.

Solche Analysen müssen nicht zwingend falsch oder unbrauchbar sein, da es durchaus Problemstellungen gibt, die auf diese Weise bereits diskutiert werden können. Für die in dieser Arbeit durchgeführten quantitativen Risikoanalysen und CFD-Ausbreitungssimulationen gilt das nicht. Die hier vorliegenden modell- und dateninhärenten Unsicherheiten müssen einbezogen werden. In diesem Kapitel soll daher auch diskutiert werden, weshalb CFD-Simulationen und Fehlerbetrachtungen notwendig sind. Typische Unsicherheitsquellen sind Verfahrenslimitierungen, welche Limitierungen aus der Abstraktion natürlicher Prozesse, Modellgrenzen aus der mathematischen Modellierung bis hin zum Informationsmangel beinhalten. Des Weiteren werden zusätzlich empirische Daten aus Datenerhebungen, statistischen Analysen bis hin zu Daten aus Expertenbefragungen benötigt, welche ebenso unsicherheits- aber auch unkenntnisbehaftet sein können.

Die konsequente Mitberücksichtigung dieser Unsicherheiten ist jedoch bisweilen problematisch. Ausbreitungssimulationen, für die CFD-Modelle verwendet werden, sind selbst überwiegend aufwändige Parallelprozesse auf geeigneten Computern oder Rechenclustern, für welche zudem geeignete Softwarepakete nötig sind. Unsicherheitsbetrachtungen bedeuten hierbei üblicherweise die Durchführung von Parameterstudien, welche eine Vielzahl von Einzelsimulationen nach sich ziehen, bis hin zur Auseinandersetzung mit zusätzlichen Einflüssen der Software¹.

In diesem Kapitel soll daher, nach einer geeigneten Klassifikation von Modellunsicherheiten und Fehlerquellen, angegeben werden, wie Parameterstudien in CFD-Simulationen durchgeführt werden können. Hierbei werden Monte-Carlo-Sampling und Latin-Hypercube-Sampling beschrieben, bei denen vermöge geeigneter Zufallszahlengeneratoren Stützstellen für die Parameterbereiche der Eingangsvariablen unter Berücksichtigung der zugehörigen Verteilungsfunktionen ermittelt werden.

In praktischen Fällen, wie auch für das hier diskutierte industrierelevante Anwendungsbeispiel, kann dies zu aufwändig sein. Dann kann sich eine geeignete Definition eines Ersatzmodells als vorteilhaft erweisen, bei dem die Abhängigkeit zwischen den erklärenden Variablen und einer oder mehrerer Antwortvariablen nicht über die CFD-Simulation erfolgt, sondern über ein passend definiertes, multivariates Polynom. Dieses Ersatzmodell bezeichnet man bisweilen als Response-Surface und die Vorgehensweise als Response-Surface-Methode. Diese ist für das Kapitel von zentraler Bedeutung und soll ausführlich diskutiert werden. Ein kurzer Literaturüberblick hierzu wird zeigen, dass diese Methodik viele Anwendungsgebiete besitzt. Anzu-

¹Einige solcher Einflüsse werden in diesem Kapitel angegeben, jedoch ist deren Mitberücksichtigung nicht Gegenstand der Arbeit.

merken ist, dass sich, insbesondere bei der Definition der Response-Surface für Eingangsvariablen mit wohldefinierter Wahrscheinlichkeitsverteilung, auch die Bezeichnung Stochastische Response-Surface-Modelle (SRSM) etabliert hat. Während in der als klassisch bezeichneten Response-Surface-Methode eine Anpassung von multivariaten Polynomen an diskrete Messwerte oder Modellwerte erfolgt, so wird in SRSM explizit genutzt, dass geeignete Zufallsvariablen innerhalb einer polynomiellen Chaostwicklung mittels orthogonaler Polynome anderer Zufallsgrößen entwickelt werden können. Diese als abstrakte Fourierreihenentwicklung interpretierbare Darstellung soll in diesem Kapitel ebenso angegeben werden, denn sie zeigt, dass die Verwendung von multivariaten Polynomen zur Ersatzmodelldefinition gut begründbar ist. Abschließend erfolgen allgemeine Bemerkungen zur praktischen Umsetzung der mathematischen Vorgehensweise.

Zusammenfassung: In diesem Kapitel werden Quellen und Klassifikationen von Unsicherheiten allgemein und speziell in CFD-Simulationen angegeben. Ein Überblick über verwendete Verfahren zu deren Berücksichtigung erfolgt im Rahmen einer Literaturübersicht. Monte-Carlo-Verfahren und Verfahren zur Definition von Ersatzmodellen (Response-Surface-Methoden) mittels multivariater Polynome und deren Verwendung zur Unsicherheitsbetrachtung werden detaillierter beschrieben. Für die Begründung der Polynome wird die polynomielle Chaostwicklung von Zufallsvariablen diskutiert. Die Bestimmung der Koeffizienten der ausgewählten multivariaten Polynome erfolgt durch Anwendung der Methode der kleinsten Fehlerquadrate (Regression).

4.1. Herkunft und Klassifikation von Unsicherheiten in Ingenieurmethoden

4.1.1. Unsicherheiten und Fehler aus der Modellbildung

Um natürliche Abläufe, wie auch von Menschen initiierte Prozesse, beschreibbar zu machen, werden praktisch immer Modelle verwendet. Solche Modelle sind zweckbezogen und sollen mindestens eine ausgewählte Teilmenge von Verhaltensbeobachtungen reproduzieren können. Modelle können auch so aufgestellt werden, dass mit ihnen Prognosen über künftiges Systemverhalten oder über nicht explizit für die Modellierung herangezogene Beobachtungen möglich sind [122]. Modelle treten mit einer enormen Vielfalt auf: stationär oder dynamisch, diskret, quasikontinuierlich oder kontinuierlich, deterministisch oder probabilistisch. Es ist nicht das Anliegen dieser Einleitung, hierzu einen Überblick zu geben. Der Leser sei hier z. B. auf [123, 124] verwiesen. Für die Zwecke dieser Arbeit genügt eine vereinfachte Unterscheidung von zwei Strategien physikalischer Modellbildung:

Strategie A: Direkte mathematische Modellierung eines physikalischen Systems,

Strategie B: Ausnutzung der Dimensionshomogenität physikalischer Gleichungen und anschließender Spezifikation von Funktionen unabhängiger, dimensionsloser Potenzprodukte durch Experimente.

Innerhalb der Strategie A versucht man, die wesentlichen Systemeigenschaften zu erkennen und daraus zunächst ein geeignetes physikalisches Modell zu entwickeln. Diese physikalische Modellbildung kann (und typischerweise wird) bereits Näherungen implizieren. Etwa dadurch, dass eine Größe mit vermutetem kleinen betraglichen Einfluss ausgelassen wird. Die erste mathematische Beschreibung erfolgt zunächst streng auf der Basis gegebener Naturgesetze wie Energieerhaltung oder anderer Fundamentalsätze. Anschließend können weitere Vereinfachungen durch Betrachtungen von Symmetrien bzw. von Vertauschungsrelationen, Beschränkungen auf stationäres Verhalten und anderes erfolgen. Üblicherweise folgt eine Modellgleichung oder ein Modellgleichungssystem. Diese kann bzw. können linear oder nichtlinear sein, gewöhnliche oder partielle Ableitungen beinhalten oder Integralgleichungen darstellen. Üblich sind daher weitere

Vereinfachungen, etwa durch Linearisierungen bis hin zur Verwendung von numerischen Strategien zum Auffinden einer Untermenge möglicher Lösungen.

Im Allgemeinen soll damit ein möglichst wenig komplexes Modell mit einem Maximum an beobachtbaren Verhalten des Realsystems abgeleitet werden. Allerdings darf man hier nicht vergessen, dass verschiedene Stufen der Modellbildung verwendet wurden und dass Modellaussagen nicht die Realität, sondern das Modell, mit all seinen Vereinfachungen, betreffen [122]. Ein Vergleich zwischen Modellaussagen und Experiment kann dann helfen, die Güte des Modells und dessen Eignung zu ermitteln. Je mehr physikalische Effekte man zum physikalischen Modell hinzunimmt und je akkurater das entsprechende mathematische Modell ist, desto genauer ist potentiell die Beschreibung bzw. die Übereinstimmung mit beobachtbaren Verhalten. Allerdings ist das Modell dann auch komplexer und schwieriger in seiner Anwendung [123].

Interessanterweise kann die Strategie bisweilen sehr schwer sein oder sogar scheitern, weil die gewonnenen Gleichungen nicht gelöst werden können². Um dennoch empirische Formeln abzuleiten, kann man mit Strategie B ausnutzen, dass jede physikalische Größe eine wohldefinierte Dimension haben muss. Auf der Grundlage des Π -Theorems [125, 126] können funktionale Zusammenhänge zwischen den unabhängigen Variablen gefunden werden, ohne die für dieses Problem relevanten Grundgleichungen aufstellen und lösen zu müssen. Diese Strategie wird zur Begründung eines Schwergasausbreitungsmodells, welches wiederum eine erste Demonstration für die Anwendung von Response-Surface-Methoden in dieser Arbeit (in Kapitel 5) sein soll, verwendet. Die Herleitung und das Modell selbst sind im Anhang A kurz beschrieben.

Die bisher angegebenen Aussagen zeigen, dass bereits mit der Modellbildung Unsicherheiten in die Beschreibung einfließen. Würde man etwa ein totales Differential mit den erklärenden Variablen des Modells und deren Toleranzbereiche aufstellen, so würde man eine Fehlerabschätzung nur innerhalb dieses Modells vornehmen können. Beiträge etwa von ausgelassenen Variablen, verborgenen (nicht entdeckten) Effekten oder Konsequenzen aus möglicherweise genutzten linearen Näherungen wären nicht enthalten.

4.1.2. Unsicherheiten und Fehler in den Modelleingangsdaten

Zu den zuvor beschriebenen Unsicherheiten kommen Fehlerquellen aus den Modelleingangsdaten hinzu. Diese Daten sind üblicherweise:

- Naturkonstanten bzw. dimensionslose Konstanten in Ingenieurberechnungen,
- Messwerte, empirische Daten oder
- Wahrscheinlichkeitsdaten zufälliger Ereignisse.

Für Naturkonstanten gibt es im Allgemeinen das Bestreben, diese möglichst genau zu bestimmen, in dem der Definitionsprozess ein Zugriff auf Messverfahren hoher Genauigkeit zulässt³. Auch dimensionslose Konstanten in Ingenieurberechnungen sind nicht zwingend scharf bestimmt, wie, um auch hier ein Beispiel zu geben, die für die Definition von Windprofilen erforderliche von Karman-Konstante [129].

Messwerten haften grundsätzlich die Ungenauigkeiten einer Messapparatur und die der Messdurchführung an, während empirische Daten aus Datenerhebungen beschränkt sind durch den Stichprobenumfang und durch das Erhebungsverfahren.

²Ein Beispiel hierfür ist das Problem zur Bestimmung der Aufstiegs geschwindigkeit einer Luftblase in einem flüssigkeitsgefüllten Rohr, ausführlich diskutiert in [125].

³Ursprünglich wurde, um nur ein Beispiel zu nennen, die Vakuumlichtgeschwindigkeit c auf der Basis von Meter- und Sekundendefinition experimentell gemessen [127]. Es erwies sich jedoch zweckmäßig, c exakt festzulegen und mit der sehr hohen Reproduktionsgenauigkeit einer Sekunde das Meter als Messgröße zu definieren [128].

Für die Zwecke der Prozess- und Anlagensicherheit werden zusätzlich Modelldaten aus Zufallsereignissen benötigt. Hierunter zählen alle Größen, zu denen nur eine Wahrscheinlichkeitsaussage möglich ist wie etwa Ausfallwahrscheinlichkeiten, Überlebenswahrscheinlichkeiten und Ausfallraten. Würde man diese Unsicherheiten in Ingenieurberechnungen unberücksichtigt lassen, so bestünde das Risiko unzureichender technischer Auslegungen oder von Überauslegungen, welche negative Auswirkungen auf die Störanfälligkeit einer Anlage haben (vgl. [43]) oder unnötige Investitionen bewirken können (Man beachte hierzu die Motivation zur Umsetzung des industrierelevanten Anwendungsbeispiels.).

4.1.3. Klassifikation von Unsicherheiten und Fehlern

Es gibt umfassende Untersuchungen und Publikationen zu diesem Thema, wie man Fehler erkennen, klassifizieren und in Analysen einbeziehen kann. Praktisch jedes Buch zur Experimentalphysik beinhaltet hierzu einen Abschnitt, weswegen auf eine längliche Erörterung verzichtet werden soll. Allgemein bekannt sind Fehlereinteilungen in systematische (messprozessbedingte) und in zufällige Fehler. Hier soll eine etwas erweiterte Klassifikation mit Einteilung in aleatorische und epistemische Fehler angegeben werden [43, 130, 131].

Aleatorische („auf Zufall beruhende“) Fehler sind hier eine Zusammenfassung systematischer und zufälliger Fehler, die in den Naturwissenschaften üblicherweise unterschieden werden. Für die Mitberücksichtigung dieser Fehler, durch Beschreibung mit passenden Verteilungsfunktionen, werden überwiegend probabilistische Verfahren wie Monte-Carlo-Verfahren verwendet [132, 133]. Unter epistemischen Fehlern („auf Erkenntnis beruhende“) versteht man Fehler und Unsicherheiten, die sich aus einer ungenauen Kenntnis heraus ergeben können. Beispiele hierfür sind subjektive Experteneinschätzungen [43, 46]. Diese Fehlerart wird oft mit intervallmathematischen Methoden [134] oder mit Fuzzy-Set-Theorien [135] berücksichtigt. Angemerkt werden soll, dass der Begriff „epistemisch“ und auch die Fehlerart („epistemischer Fehler“) in der Literatur widersprüchlich definiert bzw. widersprüchlich in verschiedenen Kontexten verwendet wird.

Eine graphische Übersicht mit einer Illustration unterschiedlicher Relationen zufälliger und systematischer Fehlereinflüsse zeigt Abbildung 4.1.

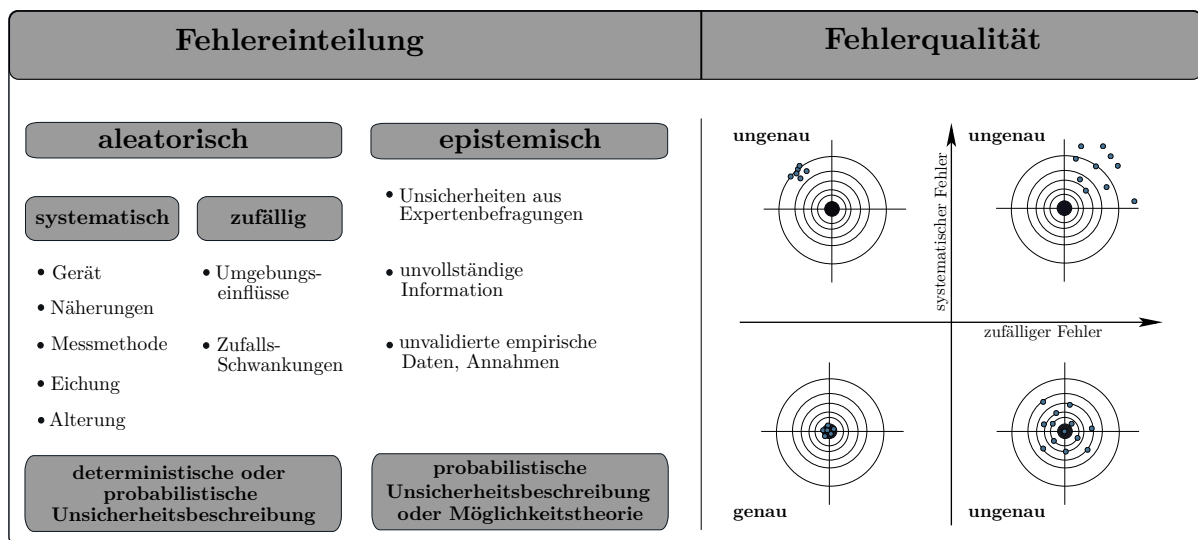


Abbildung 4.1: Überblick über eine Einteilung von Fehlern in aleatorische und epistemische Fehler und Illustration der Fehlerqualität.

In dieser Arbeit wird versucht, beide Arten von Fehlern bzw. Unsicherheiten zu erfassen. Als Ausnahme verbleibt die echte Unkenntnis als unbekanntes Risiko (vgl. Kapitel 2), welche in der Fehlereinteilung den epistemischen Fehlern zugerechnet werden könnte. Die Verkettung von

kausal zusammenhängenden Schadensereignissen erfolgt unter Verwendung von (bedingten) Ereigniswahrscheinlichkeiten mittels Bayesscher Netze, vorgestellt in Kapitel 3. Dort werden Unsicherheiten durch Fuzzy-Sets berücksichtigt.

In den durchgeführten Ausbreitungsanalysen werden die unsicheren Parameter durch entsprechende Verteilungsfunktionen erfasst. Dies soll im Folgenden näher beschrieben werden. Mit den weiter unten in diesem Kapitel angegebenen Kopplungen von Ausbreitungsanalysen und Response-Surface-Methoden können weite Bereiche der beschriebenen Unsicherheiten probabilistisch erfasst werden [46]. Es zeigt sich hierbei, dass dadurch der Aufwand gegenüber einer direkten Kopplung von CFD-Simulationen mit Monte-Carlo-Verfahren deutlich reduziert werden kann.

Anmerkung:

In der englischsprachigen Literatur wird bei Wahrscheinlichkeitsbetrachtungen oft zwischen *possibilities* und *probabilities* unterschieden, siehe etwa [46] bei der stochastischen Modellierung von Stoffausbreitungen in der Atmosphäre. Der Begriff *probability* „Wahrscheinlichkeit“ ist mathematisch innerhalb der Wahrscheinlichkeitstheorie definiert. Vereinfacht ausgedrückt, muss für jedes Element A des Ereignisfeldes Σ eines Wahrscheinlichkeitsraumes (Ω, Σ, P) eine Abbildungsvorschrift $p : A \in \Sigma \rightarrow p(A) \in [0, 1]$ existieren. Sind die Ergebnisse $\omega \in \Omega$ im Ereignisfeld (als sogenannte Elementarereignisse), so muss die Summe der Wahrscheinlichkeiten all dieser Ereignisse eins sein. Liegen jedoch für eine Untermenge von Ergebnissen keine hinreichenden Informationen vor, so kann diese Bedingung nur realisiert werden, indem man untere und obere Schranken für die Wahrscheinlichkeiten dieser Ereignisse angibt [136]. Der Unterschied zwischen beiden Begriffen liegt darin, dass man unter einer Possibilität ein Zufallsereignis versteht, bezüglich dessen nur eine unvollständige Information vorliegt [136]. Eine mathematische Theorie hierzu wurde erstmals 1978 von Lotfi Zadeh [135] entwickelt. Die Unsicherheitsintervalle nennt man auch Fuzzy-Intervalle [137] (siehe auch Kapitel 3).

In dieser Arbeit werden die Fuzzy-Intervalle innerhalb der quantitativen Risikoanalyse bei der Aggregation der Experteninformationen benutzt, nicht jedoch in den Ausbreitungsanalysen. Eine Verknüpfung zwischen Response-Surface- und Fuzzy-Methoden wird beispielsweise in [46] demonstriert, wenn auch an einem sehr trivialen Ausbreitungsmodell. Etwas weiter unten im Kapitel wird zwar das Prinzip erklärt, jedoch soll auf diesen Mehraufwand verzichtet werden.

4.1.4. Notwendigkeit für Unsicherheitsbetrachtungen in CFD-Simulationen

Die Durchführung einer CFD-Simulation kann als eigenständiger Prozess, welcher neben der eigentlichen Simulation noch aus Pre- und Post-Processing besteht, aufgefasst werden. Ausgehend von einer Problemstellung, wie die Untersuchung einer Stoffausbreitung, einer Umströmung oder eines Brandes, müssen zunächst maßgebliche physikalische Größen und bauliche bzw. räumliche Gegebenheiten festgelegt werden. Anschließend folgen üblicherweise Geometrie- und Gitterdefinitionen mit einem geeigneten CAD-Programm oder bereits innerhalb der Simulationssoftware sowie die Festlegung der Anfangs- und Randbedingungen (Pre-Processing). Mit einer geeigneten Simulationssoftware (Solver) wird im Hauptprozess die eigentliche Simulation durchgeführt. Hierfür sind sowohl mathematische Methoden für die Lösung des zugeordneten diskretisierten Gleichungssystems auszuwählen, bis hin zu Steuerungen von Zeit- und Orts-schrittweiten, der Festlegung von Konvergenzkriterien und der Ausgabewerte. Im Rahmen eines Post-Processing werden die Simulationsergebnisse bewertet. Es können sich Simulationswiederholungen als erforderlich erweisen, etwa für Sensitivitätsuntersuchungen oder für Gitterstudien. Die bis hierhin aufgeführten Arbeitsschritte beinhalten eigene Fehlerquellen: Modellbildungsfehler, ungünstiges Turbulenzmodell, Diskretisierungsfehler bis hin zu Fehlern im Computercode.

Auf solche Fehlermöglichkeiten, die mit dem Simulationssetup und mit der numerischen Lösung

verbunden sind, soll in dieser Habilitation nicht eingegangen werden. Hier sei auf die Literatur verwiesen [138, 139, 140]. Es soll für die wesentlichen Betrachtungen vorausgesetzt sein, dass die CFD-Simulation selbst prinzipiell korrekt erfolgt.

Innerhalb der Modellierung atmosphärischer Ausbreitungsvorgänge auf der Basis von Euler-Modellen (CFD-Simulationen) hat es sich etabliert, einer *Best Practice Guideline*, z. B. [140], zu folgen. Mit modernen Softwarepaketen wie OpenFOAM [141] oder ANSYS [142] kann man rasch Ausbreitungsgebiete definieren und Simulationen starten. Allerdings besteht die Gefahr, dass abseits interessant aussehender Simulationsergebnisse der physikalische Kontext unvollständig ist, fälschlich auf Basis unbegründeter *Default Values* simuliert wird oder Einzelsimulationen nicht statistisch repräsentativ für die Ausgangsmöglichkeiten des Eingangsproblems sind. Sind verhältnismäßig einfach zu berücksichtigende Modellparameter wie die Größe des Simulationsgebietes um das Hauptobjekt zu klein gewählt, so können die Strömungsrandbedingungen auf den Oberflächen des Simulationsgebietes das Simulationsergebnis grob verfälschen oder die Anlaufstrecke ist unzureichend für den Aufbau der Turbulenz [140].

Vorgeschlagen wird daher neben Grundsatzempfehlungen zur Modellierung, Mehrfachsimulationen durchzuführen und die gewonnenen Ergebnisse mit Messungen im Windkanal oder mit Experimenten im Realmaßstab zu vergleichen. Aber auch hier gilt es zu vermeiden, nicht statistisch repräsentative Simulationen mit nicht statistisch repräsentativen Einzelexperimenten zu vergleichen. Als Folge sind daher mindestens Parameterstudien in der Simulation und Mehrfachdurchführungen von Experimenten erforderlich: Letztendlich Unsicherheitsbetrachtungen. Hierzu sollen zwei Beispiele ergänzt werden, welche erneut die Verwendung von CFD-Simulationen motivieren und Konsequenzen mangelnder statistischer Repräsentanz aufzeigen.

COST Action ES1006

In der COST Action ES1006 wurden atmosphärische Ausbreitungsmodelle für unfallbedingte Freisetzungen in Städten und Industriegebieten evaluiert. Ein vollständiger Bericht ist in [143] zu finden. Viele Simulationswerkzeuge nutzen stark vereinfachte Modellansätze bzw. ist zunächst nicht naheliegend, welcher Aufwand mindestens zu betreiben ist, um dem Wunsch nach Genauigkeit, Rechenzeit und Komplexität optimal zu entsprechen. In der COST Action ES1006 wurde der Versuch unternommen, eine Vielzahl verschiedener (Störfall-)Ausbreitungsmodelle zu vergleichen. Hierzu wurden die verwendeten Ausbreitungsmodelle den drei für Leichtgasausbreitung relevanten Modellklassen zugeteilt: Gaußmodelle, Lagrangesche Partikeltrajektorienmodelle und Eulermodelle (CFD). Ziele der durchgeführten Vergleiche der COST Action ES1006 waren:

- Nachweis der Eignung der Modelle für Ausbreitungsprognosen bei bekanntem Quellort und Quellstärke.
- Maß der Umsetzbarkeit bzw. die Möglichkeit, lokale Orographie zu berücksichtigen.
- Korrektheit der Einschätzung von Gefahrenbereichen in Abhängigkeit der Emission.
- Validierung der Ergebnisse der Ausbreitungssimulationen mit Realmessungen.
- Vergleiche in der grundsätzlichen Güte der Modellklassen.

In einem Teilabschnitt des Gesamtvorhabens wurden Windkanal- und Feldexperimente mit kurzzeitigen und kontinuierlichen Tracer-Freisetzungen im städtischen Bereich durchgeführt. Als städtischer Bereich wurde hierzu Hamburg ausgewählt und für die Windkanaluntersuchungen im Maßstab 1:500 verkleinert. Zugleich wurden aber auch Realfreisetzungen mit SF_6 in Hamburg durchgeführt, die im Projekt als Vergleichsdatensatz aufgearbeitet wurden. Hierin wurden etwa 2400 Strömungsmessorte, 350 Immissionsmessorte und 41 Messorte für die Gefahrstofffreisetzung (200 Messungen je Ort) berücksichtigt.

4. Modellierung von Unsicherheiten, Response-Surface-Methoden (RSM)

Durch diese Konstellation aus Realversuchen, Windkanalmessungen und numerischen Simulationen wurde eine optimale Basis für einen Modellvergleich geschaffen. Insgesamt waren 7 Gaußmodelle, 5 auf diagnostischen Windfeldern beruhende Partikeltrajektorienmodelle und 10 Eulermodelle (6 verschiedene) vertreten. In dieser Kurzübersicht kann auf die Fülle an gewonnenen Details nicht eingegangen werden. Wichtige Resultate der Untersuchung waren:

- Modellanwendungsfehler konnten identifiziert werden, womit die entsprechenden Simulationen ausgeschlossen werden konnten. Jede Testgruppe hat das verwendete Modell in optimaler Weise und hoher Fehlerzuverlässigkeit angewendet.
- Grundsätzlich steigt die Ergebnisgüte mit der physikalischen Komplexität der Modelle: Gute Prognosen sind mit Gaußmodellen nicht ausgeschlossen, allerdings zeigen die Blindtests, dass auch sehr hohe Schwankungen in der Aussagegüte erwartet werden müssen. Partikeltrajektorienmodelle sind in ihrer Güte intermediär angesiedelt. Sie können Gebäudekontouren und Straßenverläufe besser berücksichtigen, wenn das zugrundegelegte Windfeld entsprechen bestimmt wurde. Höchste Genauigkeit und kleinste Schwankungen im Modellvergleich zeigen die Eulermodelle (CFD-Simulationen).
- Der Simulationsaufwand steigt rapide mit der Komplexität der Modelle an. Während typische numerische Simulationen auf der Basis von Gaußmodellen Rechenzeiten im Bereich weniger Minuten beanspruchen, liegt die Rechenzeit bei Partikeltrajektorienmodellen im Bereich Minuten bis einige Stunden. Die komplexesten Eulermodelle benötigen Simulationszeiten im Bereich von Stunden bis einige Tage oder in Extremfällen auch darüber.

In der Abbildung 4.2 sieht man die Unterschiede in der Kontour der Ausbreitungsvorhersage einzelner Modelle und eine Darstellung von Mittelwerten über die Modellensembles. Die Er-

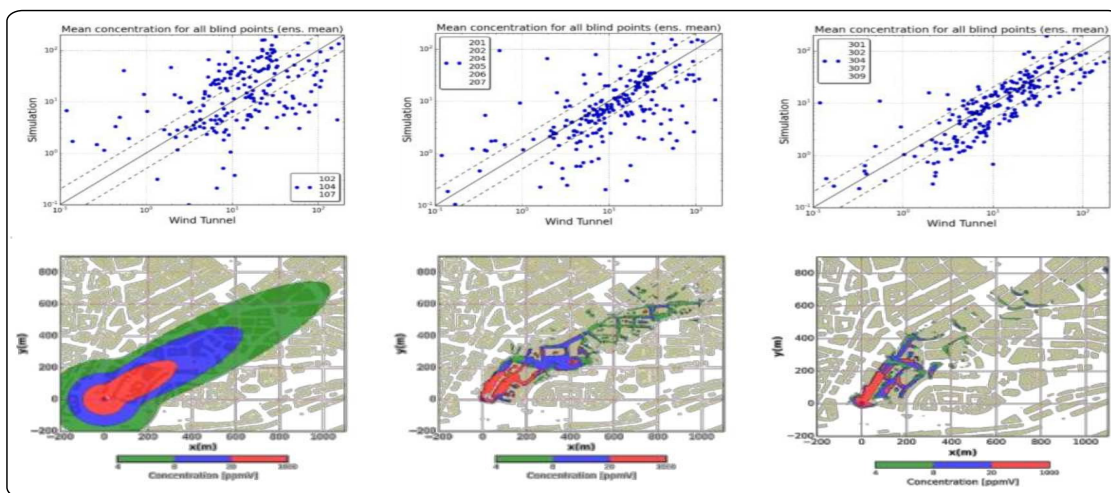


Abbildung 4.2: Vergleich der Ausbreitungsmodelle; oben: statistische Abweichungen in der Vorhersagegüte. Im Idealfall sollten die Punkte auf der mittleren Geraden liegen. Die unteren sechs Figuren veranschaulichen die Aussagenqualität der Modellgruppen: Gaußmodelle (l), Partikeltrajektorienmodelle (m), CFD-Modelle (r); entnommen aus [143].

gebnisse zeigen klar, dass in der Zukunft eine Erhebung von CFD-Simulationen zum Stand der Technik unvermeidlich sein wird. Angemerkt werden soll auch, dass selbst in den CFD-Simulationen bisweilen beträchtliche Schwankungen zu finden sind. Daher ist es erstaunlich, wie oft in Fachpublikationen Ergebnisse von Einzelsimulationen mit denen von Einzelmessungen übereinstimmen. Es liegt der Verdacht nahe⁴, dass mit Kenntnis der Messergebnisse

⁴Aus verständlichen Gründen werden hierfür keine Quellen zitiert, da es sich im Zweifelsfall um eine Behauptung handelt. Gespräche auf Fachtagungen lassen dies jedoch vermuten.

Simulationseinstellungen in deren Richtung vorgenommen wurden. Eine Analyse der Ursachen solcher Abweichungen würde unmittelbar eine systematische Fehleranalyse oder eine Analyse der Unsicherheitsbereiche der Modellparameter sein.

Wiederholbarkeit von Realbrandversuchen

Um die Aussagekraft von Einzelbrandversuchen experimentell zu testen, wurden, unter Beteiligung des Autors, Serien von Brandversuchen im Realmaßstab durchgeführt. Die Experimente erfolgten im Institut für Brand- und Katastrophenschutz (Heyrothsberge)[144]. Es wurden hierbei wiederholt wohldefinierte Mengen an Brandstoff (Hexan, Fichtenholz) in einem Versuchsraum mit Korridor unter stets gleichen Anfangs- und Randbedingungen entzündet. Der Flüssigkeitsbrand wurde als Poolfeuer ausgeführt, während aus dem Fichtenholz nahezu identische Kleinkrippen gebaut wurden. Erfasst wurden Gaskonzentrationen (CO , CO_2), Rußanteile, Parameter zum Brandverlauf bis hin zu Auslösezeiten von Rauchmeldern und Sprinkleranlagen.

Sinn der Untersuchung war die Bestimmung und die statistische Auswertung der Streubandbreite durch stochastische Einflüsse, bei gleichzeitiger Minimierung systematischer Fehlergrößen. Die Ergebnisse wurden publiziert [145] und zeigen, dass die Schwankungen in den Messergebnissen die Erwartungen, gegeben durch Kalibrierungs- und Messungenauigkeiten, weit übersteigen können.

Schlussfolgerungen oder auch Risikoaussagen, basierend auf einem willkürlich ausgewählten Einzelversuch der Serien, können somit unbegründet oder gar falsch sein. Für weitere Details sei auf die zuvor genannte Publikationen oder auf [146] verwiesen. Selbst bei hohem Bemühen, einen Brandablauf gleichartig zu wiederholen, können hohe Unterschiede im tatsächlichen Ablauf auftreten. Dies wird umso mehr gelten, wenn ein realistischer Brand mit nichttrivialem Setup vorliegt.

Gerade vor diesem Hintergrund können CFD-Simulationen (in diesem Fall Brandsimulationen), gekoppelt mit umfassenden Unsicherheitsbetrachtungen hilfreich sein, auch um viele „Was wäre wenn?“- Situationen zu testen⁵.

4.2. Unsicherheitsbetrachtungen in CFD-Simulationen

Zunächst sei angenommen, dass zwischen einer interessierenden Zielgröße y und einer oder mehreren erklärenden Variablen x_1, \dots, x_n ein funktionaler Zusammenhang $y = f(x_1, \dots, x_n)$ besteht. Ist dieser bekannt und differenzierbar, so können Fehler- bzw. Unsicherheitsbetrachtung mit Fehlerfortpflanzungsgesetzen (totales Fehlerdifferential oder Gaußsche Fehlerfortpflanzung [148]) untersucht werden.

Für CFD-Simulationen zu Ausbreitungs- oder Brandereignissen liegt ein solcher funktionaler Zusammenhang nicht vor. Die Simulationen basieren auf nichtlinearen partiellen Differentialgleichungssystemen [138], auf welche die genannten Fehlerfortpflanzungen nicht angewendet werden können. Im Folgenden soll daher zunächst eine kurze Übersicht gegeben werden, welche Möglichkeiten zur Mitbetrachtung von Unsicherheiten in der Literatur untersucht wurden. Diese, sowie die Abbildung 4.3, wurden sinngemäß dem Überblicksartikel [149] entnommen. Für eine etwas ausführlichere Übersicht sei der Leser daher an [149] und an die darin gelisteten Referenzen verwiesen. Einige der für die folgende Übersicht ausgewählten Methoden werden näher beschrieben.

Fehlerfortpflanzungsmethoden haben das Ziel, Fehler bzw. Unsicherheiten der Eingangsdaten eines Modells so zu berücksichtigen, dass deren Einfluss in den Modellausgangsdaten ersicht-

⁵Dies wird in einem eingeworbenen Promotionsprojekt des Autors: „Modellierung von Brandszenarien in komplexen Gebäudestrukturen mittels strömungsdynamischer Methoden“, gefördert durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie [147], detailliert untersucht.

lich wird [148], etwa die Bestimmung von Δy bei Berücksichtigung der Eingangsunsicherheiten Δx_i .

In verschiedenen Quellen [46, 133, 149] werden für die nähere Beschreibung der Δx_i zwei Gruppen unterschieden: Nicht-probabilistische Methoden und probabilistische Methoden. Nicht-probabilistische Methoden besitzen wiederum zwei Untergruppen: (i) durch Angabe eines Intervalls und (ii) durch Angabe einer Zugehörigkeitsfunktion, während probabilistische Methoden auf der Angabe von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen beruhen. Abbildung 4.3 stellt diese Gruppen und Unterteilungen in einer Übersicht dar.

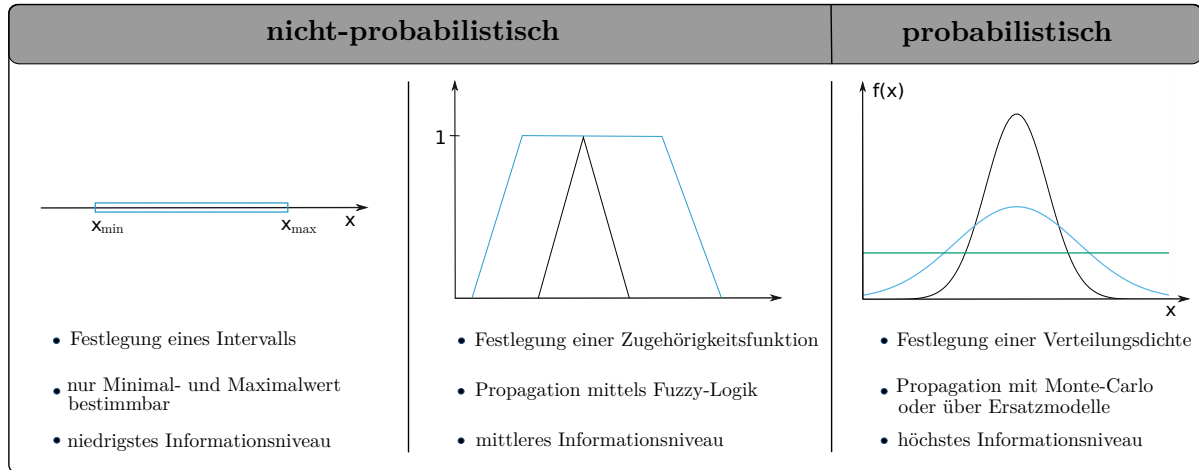


Abbildung 4.3: Illustration verschiedener Möglichkeiten für die Repräsentation von Unsicherheiten in Modelleingangsdaten in Abhängigkeit der vorliegenden Information [149] (modifizierte Abbildung).

Nicht-probabilistische Methoden

Zu den nicht-probabilistischen Methoden zählen Intervallmethoden, in denen die Unsicherheiten lediglich durch $x_i \in [x_{i,min}, x_{i,max}]$ repräsentiert werden. Ziel der Berücksichtigung ist die Abschätzung eines Intervalls $y \in [y_{min}, y_{max}]$. Das totale Fehlerdifferential ist hierfür ein Beispiel, wenn $y = f(x_1, \dots, x_n)$ bekannt und hinreichend differenzierbar ist. Ist $y = f(x_1, \dots, x_n)$ nicht explizit bekannt, wie im Falle von CFD-Simulationen, dann könnte man etwa mit den Minimal- und Maximalwerten (gegebenenfalls auch mit Rasterpunkten dazwischen) simulieren. Ebenso als nicht-probabilistisch werden Unsicherheitsbetrachtungen eingestuft, welche durch Zugehörigkeitsfunktion $\mu(x)$ im Rahmen der Fuzzy-Logik (Möglichkeitstheorie) beschrieben werden können. Die verfügbare Information zur Unsicherheit ist größer als im Falle einer Intervallangabe, allerdings genügt sie nicht für die Plausibilisierung einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion. Hier sei auf die ausführlichere Beschreibung in Kapitel 3 verwiesen.

Weitere Vertreter der Gruppe der nicht-probabilistischen Methoden sind Sensitivitätsanalysen [150, 151]. Ziel ist das Auffinden der Untermenge von Modelleingangsgrößen, bezüglich derer das Modell die größte Sensitivität zeigt. Kleine bzw. moderate Schwankungen dieser Modellgrößen zeigen stärkeren Einfluss auf das Ergebnis, als jene der weniger sensitiven Größen. Die Anwendung solcher Methoden kann sich als zweckmäßig erweisen, wenn zunächst untersucht werden soll, für welche Eingangsvariablen sich eine detailliertere Analyse, etwa die Definition einer geeigneten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, lohnt.

Probabilistische Methoden

Probabilistische Methoden benötigen hinreichende Informationen, um für jede Eingangsvariable x_i eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $f_{PDF,i}(x_i)$ oder im Falle von Korrelationen eine

gemeinsame Verteilungsdichtefunktion $f_{PDF,I}(\{x_{i \in I}\})$ (I Indexmenge) bestimmen zu können. Ziel ist es nun, durch Propagation vom Modelleingang bis zum Modellausgang für die Zielgröße y eine geeignete Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion zu finden. Hierfür gibt es wiederum zwei mögliche Herangehensweisen:

1. Durch explizite, analytische Berücksichtigung der Dichtefunktionen in den Modellgleichungen. Die Auswahl der Verfahren dieser Gruppe ist abhängig von der Komplexität der Modellgleichungen. Sind dies algebraische Modellgleichungen, so wird oft die Momentenmethode [152] eingesetzt. Ein Beispiel innerhalb einer Risikobetrachtung in der Anlagensicherheit zeigt z. B. [153]. In anderen Fällen nutzt man Störungstheorie [154], stochastische Differentialgleichungen [155] oder stochastische Galerkin-Verfahren unter Verwendung verallgemeinerter polynomieller Chaosentwicklungen [156]. In [156] wurde gezeigt, wie mit Letzterem eine Diffusionsgleichung mit zufälligen Koeffizienten näherungsweise gelöst werden kann. In [157] wird etwa die Langevin-Gleichung als ein Vertreter stochastischer Differentialgleichung aufgestellt und zur Begründung von Partikeltrajektorienmodellen für atmosphärische Ausbreitungsprobleme benutzt. Sinn ist bei Letzterem die Berücksichtigung von Zufallsbewegungen von Luftparzellen in turbulenten Luftströmungen. Für das industrierelevante Anwendungsbeispiel wurde ebenso ein Partikeltrajektorienmodell zum Vergleich mit den CFD-Simulationen verwendet. Polynomielle Chaosentwicklung wird in dieser Arbeit verwendet (siehe weiter unten), die anderen Methoden jedoch nicht.
2. Durch Verwendung von Sampling-Verfahren. Dies sind überwiegend Verfahren, bei denen eine Menge an Zufallswerten $\{x_i\}$ ausgewählt (Stichproben, auch „Samples“ genannt) wird, welche die zugrundeliegenden Verteilungsdichtefunktionen statistisch repräsentativ wiedergeben (bzw. im Falle von Korrelationen die gemeinsame Verteilung). Mit diesen Zufallswerten werden $j = 1, \dots, n$ Zufallsparametersätze \vec{x}_j für den Modelleingang erzeugt. Für jeden dieser n Parametersätze wird das Modellproblem, etwa die Durchführung einer CFD-Simulation, umgesetzt und die Zielgröße y_j bestimmt. Abbruchbedingung ist meistens eine hinreichend genau bestimmte statistische Verteilung der y_j . Beispiele sind alle Monte-Carlo-Verfahren, auf die im folgenden Abschnitt näher eingegangen wird.

4.2.1. Monte-Carlo-Sampling, Monte-Carlo-Verfahren

Auf einen geschichtlichen Werdegang des Verfahrens soll hier nicht eingegangen werden. Es handelt sich um ein sehr oft angewendetes Standardverfahren, zudem es umfassende Literatur gibt, z. B. [37, 38]. Erwähnenswert sind Arbeiten von S. Ulam und J. v. Neumann zur Untersuchung von Neutronendiffusion in Spaltmaterial an Nuklearwaffenprojekten in den 1940er Jahren, welche bisweilen als erste numerische Anwendung des Prinzips angesehen werden [158]. Als grundlegende Veröffentlichung gilt laut [159] die Arbeit [160].

Das allgemeine Grundprinzip von Monte-Carlo-Verfahren bzw. von Monte-Carlo-Sampling bei der Ermittlung der Parametersätze wurde bereits weiter oben genannt. In dieser Arbeit können zudem die Begriffe Monte-Carlo-Sampling, Monte-Carlo-Verfahren, Monte-Carlo-Analyse oder auch Monte-Carlo-Methode als Synonyme angesehen werden. Erwähnenswert für praktische Umsetzungen sind zwei Eigenschaften:

1. Man kann zeigen, dass die korrekte Verteilung der Zielgröße y für $n \rightarrow \infty$ im Wahrscheinlichkeitslimes gefunden wird [161]. Dies stellt sicher, dass die Kopplung von Modellgleichungen, wie auch CFD-Simulationen mit Monte-Carlo-Verfahren im Prinzip immer funktionieren sollte.
2. Die Konvergenzgeschwindigkeit von Monte-Carlo-Verfahren (ohne weitere Modifikationen) ist klein. Es sind üblicherweise sehr hohe n nötig, um die Zielgröße y hinreichend

genau zu bestimmen. Man kann beispielsweise zeigen, dass für $y = f(x)$ die Genauigkeit nicht direkt proportional mit der Anzahl n an der Stützstellen x_i ist sondern nur $\sim \sqrt{n}$ [38]. Soll demnach der relative Fehler halbiert werden, so muss n vervierfacht werden.

Um eine Verteilungsfunktion repräsentativ zu erfassen, sind bisweilen sehr hohe Stichprobenumfänge nötig. Die etwaige Anzahl ist davon abhängig, welche Quantile der Verteilung benötigt werden. Üblich sind $n \geq 10^1$ bis $n \approx 10^2$ oder auch weit darüber. Meistens wiederholt man die Generierung neuer Samples solange, bis die Zielgröße y hinreichend stabil ist, z. B. durch geeignete Konvergenzkriterien.

Für solche Kriterien sowie für spezifische Strategien zur Festlegung geeigneter Wertebereiche für die durch Dichtefunktionen beschriebenen Parameter gibt es mittlerweile zahlreiche Strategien. Hier sei erneut auf die Literatur verwiesen [37]. In [43] wurden umfassende Unsicherheitsbetrachtungen an biologischen Kläranlagen durchgeführt, in dem algebraische Modelle direkt mit Monte-Carlo-Verfahren gekoppelt wurden. Dies war möglich, weil auch bei Kombinationen unsicherer Eingangsparameter die Auswertung der Modellgleichungen sehr schnell erfolgen kann. Dieses Prinzip wurde unter Beteiligung des Autors zur Betrachtung von Unsicherheiten bei der Rauchausbreitung, beschrieben mit einem Zonenmodell, übertragen [162]. Beide Anwendungen im Ingenieursbereich zeigen, dass Erwartungswerte für auslegungs- und sicherheitsrelevante Größen besser begründet sind und des Weiteren Vertrauensbereiche mit quantifiziert werden können.

In beiden Analysen werden jedoch Möglichkeiten zur Verbesserung der Konvergenzgeschwindigkeit bzw. zur Varianzreduktion (z. B. Latin-Hypercube-Sampling, siehe weiter unten) nicht betrachtet. In [43] wurde sogar argumentiert, dass auf diesen Mehraufwand verzichtet werden kann. Als Gründe wurden die Leistungsentwicklungen der Computer und der möglicherweise unbegründete mathematische Mehraufwand genannt.

Sind, wie in praktisch allen CFD-Simulationen, zahlreiche unsichere Parameter zu berücksichtigen, so trifft diese Argumentation nicht zu. CFD-Simulationen sind überwiegend schon für einen Parametersatz numerisch sehr aufwändig. In [163] (zitiert in [149]) wurde beispielsweise eine CFD-Simulation eines schrägen Verdichtungsstoßes mit einer Monte-Carlo-Analyse gekoppelt. Auch bei wenigen Gitterzellen und wenigen Parametern stellt dies hohe Anforderungen an den Rechner. Moderne, industrierelevante Ausbreitungsanalysen mit Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS)-Modellen oder möglicherweise mit expliziter Auflösung von Wirbelstrukturen, sogenannter Large Eddy Simulation (LES), sind selbst bereits nur auf Parallelrechnern mit sinnvollem Zeitaufwand durchzuführen. Für eine Abschätzung des notwendigen Aufwandes könnte man in erster Näherung bei m unabhängigen Parametern n^m ansetzen. Derartig oft lassen sich CFD-Simulationen, wie auch die im Kapitel 6 betrachteten Simulationen für das industrierelevante Anwendungsbeispiel, nicht wiederholen.

4.2.2. Latin-Hypercube-Sampling, Varianzreduktion

Wie bereits angegeben, wird in Monte-Carlo-Verfahren eine Verteilung durch die Stichprobe (Samples) umso besser wiedergegeben, je größer der Stichprobenumfang ist. Eine charakteristische Eigenschaft des Bestimmungsverfahrens ist die Gedächtnislosigkeit. Die generierten Datenpunkte der Stichprobe werden stochastisch unabhängig voneinander bestimmt. Der $n + 1$ -te Wert der Stichprobe ist unabhängig von den n zuvor bestimmten Werten. Verfahren dieser Art nennt man auch Markov-Chain-Monte-Carlo-Verfahren (MCMC) [37].

Latin-Hypercube-Sampling

Die Grundidee vom Latin⁶-Hypercube⁷-Sampling⁸ [39, 40] ist nun die Bestimmung einer kleinen Stichprobe, welche die zugrunde gelegte Verteilungsfunktion ebenso gut oder besser wiedergibt. Dies kann erreicht werden, in dem man die Vorgeschichte (die Position der zuvor zufällig gezogenen n Werte) für die Generierung (des $n + 1$ -ten Wertes) der Stichprobe nutzt. Üblicherweise werden Parametersätze $\vec{x}_j = (x_{1,j}, x_{2,j}, \dots, x_{n,j})$, $j = 1, \dots, m$ mit folgendem Ablauf generiert:

1. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $f_i(x_i)$ jeder Variablen x_i , $i = 1, \dots, n$ wird in m Intervalle $[x_{i,k}^A, x_{i,k}^E]$, $k = 1, \dots, m$ gleicher Wahrscheinlichkeit eingeteilt:

$$\int_{x_{i,k}^A}^{x_{i,k}^E} f_i(x_i) dx_i = \frac{1}{m}$$
. Dies erlaubt die Generierung von m Zufallswerten.
2. Jedem dieser m Intervalle für jede Variable x_i wird genau ein Wert zufällig entnommen. Als Ergebnis wird jede Verteilungsdichtefunktion $f_i(x_i)$ einer jeden Variablen x_i durch m Stützstellen repräsentiert.
3. Zur Erzeugung der Parametersätze $\vec{x}_j = (x_{1,j}, x_{2,j}, \dots, x_{n,j})$, $j = 1, \dots, m$ werden die gewonnenen Listen zufällig kombiniert, so dass aus jeder der m -Stichprobensätze in jedem Parametersatz genau ein Vertreter ist (womit sich insgesamt der Latin-Hypercube ergibt).
4. Sind verschiedene Variablen nicht unabhängig voneinander, so kann man genauso verfahren, wird jedoch die Samples durch geeignete Transformationen auf unkorrelierte Normalverteilungen abbilden und die Korrelation über Cholesky-Transformation hinzufügen. Eine inverse Transformation liefert dann die korrelierten Parametersätze.

Die Vorgehensweise für unkorrelierte Variablen ist in Abbildung 4.4 illustriert. Vergleicht man

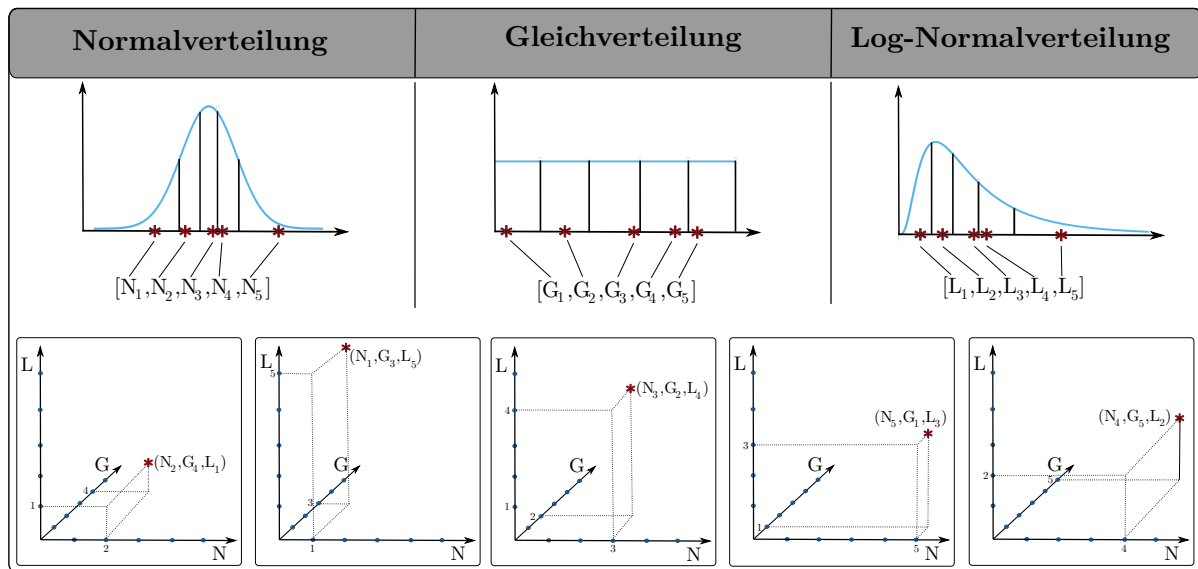


Abbildung 4.4: Illustration der Vorgehensweise vom Latin-Hypercube-Sampling am Beispiel einer Normal-, Gleich- und einer Log-Normalverteilung. Aus den fünf Stichproben jeder Verteilung werden fünf Parametersätze gebildet.

⁶Ein Latin Square (lateinisches Quadrat) ist eine regelmäßige Zerlegung eines Quadrates in n -Zeilen und n -Spalten, wobei jedes Feld mit einem von n verschiedenen Symbolen belegt ist. Dabei darf jedes Symbol in jeder Zeile und Spalte genau einmal auftreten.

⁷Ein Latin Hypercube ist die Verallgemeinerung des Latin Square auf beliebige Dimensionen $d \geq 2$.

⁸Der Name leitet sich von der Selektion der Stichprobe ab, welche aus jeder achsenausgerichteten Hyperebene nur eine Stichprobe zulässt.

Latin-Hypercube-Sampling mit Monte-Carlo-Sampling, so findet man:

- Sowohl beim Latin-Hypercube- als auch beim Monte-Carlo-Sampling wird eine Verbesserung der statistischen Genauigkeit bei Vergrößerung des Stichprobenumfangs erreicht [164, 165]. Beide Verfahren sind erwartungstreue Schätzer für die Parameter der Verteilungsdichtefunktion [165].
- Das Latin-Hypercube-Sampling ist vorteilhaft, weil es deutlich schneller konvergiert und weil es für ein repräsentatives Sampling deutlich weniger Datenpunkte benötigt. Die tatsächlich benötigte Anzahl ist wiederum modellabhängig und kann nicht allgemeingültig festgelegt werden. Üblich sind $m = 2 \cdot n$ bis $m = 10 \cdot n$ oder auch darüber.

In praktischen Anwendungen ist das Latin-Hypercube-Sampling daher dem einfachen Monte-Carlo-Sampling vorzuziehen. Anzumerken ist, dass ein LHS wegen der Zufallsauswahl für den Parametersatz nicht eindeutig ist.

Weitere Verfahren zur Varianzreduktion

Betrachtet man eine Zufallsvariable, so wird bei einer Zufallsauswahl mit einem Monte-Carlo-Verfahren eine Stichprobe gemäß der Wahrscheinlichkeitsverteilung ermittelt. Man kann erwarten, dass die Anzahl der Repräsentanten vom Quantil abhängig ist. Extreme Werte der Verteilung werden durch den Zufallsprozess auch nur sehr selten zufällig getroffen. Möchte man statistisch repräsentativ (für die Wahrscheinlichkeitsverteilung) seltene Ereignisse analysieren, so benötigt man extrem hohe Stichprobenzahlen. In der Anlagensicherheit kann dies von Bedeutung sein, wenn Bereiche kleiner Ausfallwahrscheinlichkeiten bzw. Ausfallraten explizit untersucht werden sollen. Dann bieten sich weitere Verfahren zur Varianzreduktion wie z. B. Importance-Sampling an, mit denen eine Steigerung der Effizienz von Monte-Carlo-Simulationen erreicht werden kann [166]. Für eine Übersicht zu diesen Verfahren sei auf die Literatur verwiesen, z. B. auf [37]. Importance-Sampling als Möglichkeit zur Varianzreduktion wurde in dieser Arbeit nicht genutzt.

4.2.3. Response-Surface-Monte-Carlo

Im Abschnitt 4.3 werden die Grundlagen von Response-Surface-Methoden ausführlich beschrieben. An dieser Stelle sei lediglich vorweggegriffen, dass es sich um Ersatzmodelle handelt, welche eine alternative Zuordnungsvorschrift $(x_1, x_2, \dots, x_n) \rightarrow y$ durch die Anpassung multivariater Polynome aufstellen. Ist diese eine hinreichend gute Approximation des Originalmodells, dafür aber deutlich weniger komplex, so kann das Ersatzmodell mit einer Monte-Carlo-Analyse oder mit modifizierten Sampling-Verfahren, wie das zuvor beschriebene Latin-Hypercube-Sampling, gekoppelt werden (siehe weiter unten).

4.3. Response-Surface-Methoden (RSM)

4.3.1. Allgemeiner Überblick über RSM

Zunächst soll ein allgemeiner Überblick über Response-Surface-Methoden angegeben werden. Ziel dieses Abschnittes ist die Beantwortung folgender Fragestellungen:

1. Was versteht man unter einer Response-Surface-Methode?
2. Welche mathematischen Modelle werden für die Aufstellung einer Response-Surface überwiegend benutzt?
3. Wann ist die Verwendung von Response-Surface-Methoden sinnvoll oder gar notwendig?

4. In welchen Anwendungsbereichen kommen Response-Surface-Methoden zum Einsatz?
5. Warum und wie werden diese Methoden in dieser Arbeit genutzt?

Zuzüglich zur Beantwortung dieser Fragen soll dieser Abschnitt auch eine kleine, auf Grund der Fülle an Anwendungen jedoch unvollständige, Literaturübersicht geben.

Unter einer Response-Surface-Methode versteht man ganz abstrakt die Modellierung der Abhängigkeit zwischen erklärenden Variablen x_i , $i = 1, \dots, n$ (auch $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$) und einer Zielgröße y , auch Antwortvariable oder Response genannt. Diese Abhängigkeit kann man auch als $y = f(\vec{x})$, $y : A \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ schreiben.

In vielen praktischen Anwendungen versucht man, diese Abhängigkeit über Polynome niedriger Ordnung auszudrücken oder diese damit zumindest näherungsweise wiederzugeben. Es zeigt sich, dass dies in vielen praktischen Anwendungen gut funktioniert und sich somit gute Ersatzmodelle finden lassen. Im Abschnitt 4.3.2 wird etwas abstrakter begründet, wieso eine Anpassung von Polynomen sogar naheliegend ist. Eine mögliche allgemeine Darstellung könnte gegeben werden mit:

$$y = \vec{f}(\vec{x}) \cdot \vec{a} + r. \quad (4.1)$$

Hierin ist $\vec{a} = (a_0, a_1, \dots, a_p)$ ein Koeffizientenvektor aus p konstanten Koeffizienten und $\vec{f}(\vec{x})$ ein p -dimensionales Vektorfeld, das in jeder Komponente aus beliebigen Potenzprodukten der erklärenden Variablen bestehen kann. Mit r modelliert man einen Zufallseinfluss, von dem man üblicherweise annimmt, dass dieser bei n Wiederholung der Bestimmung ($\vec{x}_i \rightarrow y_i$) den Erwartungswert $\frac{1}{n} \sum_i r_i \approx 0$ besitzt.

Für die Modellierung der Abhängigkeit verwendet man üblicherweise Modelle 1. und 2. Ordnung, je nach der höchsten im Polynom auftretenden Ordnung:

$$y = a_0 + \sum_{i=1}^n a_i x_i + r \quad (\text{Modell 1. Ordnung}) \quad (4.2)$$

$$y = a_0 + \sum_{i=1}^n a_i x_i + \sum_{i=1}^n a_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1, j | i < j}^n a_{ij} x_i x_j + r \quad (\text{Modell 2. Ordnung}) \quad (4.3)$$

Beide Modelle bestehen aus multivariaten Polynomen 1. oder 2. Ordnung. Die eigentliche Aufgabe besteht nun darin, die Anzahl der Variablen im Polynom bzw. eine geeignete Termstruktur auszuwählen und die Koeffizienten zu bestimmen.

Die Idee zur Aufstellung solcher Response-Surfaces, die man auch Ersatzmodelle, Surrogate-Modelle oder Meta-Modelle nennt, geht auf eine Arbeit von G. E. P. Box und K. B. Wilson aus dem Jahre 1951 [167] zurück, welche bei chemischen Reaktionen die Temperatur-, Druck-, Reaktionszeit- und Zusammensetzungsabhängigkeit mit Blick auf die Ausbeute in einem Ersatzmodell abbilden wollten, um in diesem Modell mit mehreren Freiheitsgraden Prozesskosten minimieren zu können. Hierzu war es erforderlich, den experimentellen Prozess als Ganzes zu betrachten und in einem Modell abzubilden. Die Idee bestand darin, durch eine geeignete Stützstellenauswahl ein Polynom an diese Daten anzupassen, um Extremwerte mit Hilfe dieses multivariaten Polynoms zu bestimmen. In der Arbeit werden sowohl Modelle 1. als auch Modelle 2. Ordnung verwendet. Die Autoren gaben bereits an, dass sich das Prinzip auf zahlreiche weitere Anwendungen übertragen lassen sollte.

Mittlerweile gibt es auch Übersichtsartikel, welche einen Literaturüberblick über die Entwicklung dieser Methodik geben. Stellvertretend sei hier die Arbeit [168] genannt. Dort werden im Wesentlichen drei Perioden unterschieden:

1. Periode (1951-1975)

Diese Periode ist gekennzeichnet durch das Auffinden optimaler experimenteller Vorgehensweisen zur Bestimmung von Ersatzmodell mit zumeist 1. Ordnung, welche man auch lineare Response-Modelle nennt.

2. Periode (1975-1999)

Diese Periode ist gekennzeichnet durch die Beschäftigung mit geeigneten Regressionsstrategien zur Anpassung multivariater Polynome höherer Ordnung. Die Robustheit gegenüber Störeinflüssen war von hoher Bedeutung (robust parameter design).

3. Periode (1999-2010)

Nun standen die Untersuchungen von Zufallseinflüssen und die Verwendung von Teststatistiken im Vordergrund. Auch wurden erstmalig RSM über polynomielle Chaosesentwicklung begründet und versucht, Modellunsicherheiten und Fehlereinflüsse statistisch zu modellieren.

Beispiele von bedeutenden Arbeiten in jeder der genannten Perioden finden sich in den Referenzen dieser Arbeit. In neueren Entwicklungen rückt der Fokus immer stärker auf eine Kombination von stochastischer Modellierung der Einflussvariablen über die Erfassung von deren Verteilungsdichtefunktionen bei der Untersuchung von komplexen numerischen Modellen mit Chaosesentwicklungen (siehe Abschnitt 4.3.2)[46, 47]. Allerdings sind die bisher publizierten Anwendungen überwiegend Prinzipdemonstrationen einer mathematisch bisweilen schwierigen Vorgehensweise an einfachen Beispielen. Eine Anwendung an einem nichttrivialen und industrierelevanten Anwendungsfall erfolgt in dieser Habilitation. Weitere Literaturquellen für eine allgemeine Beschreibung von RSM, aber auch für zahlreiche Anwendungen sind die Lehrbücher [169, 170, 171] sowie auch der Übersichtsartikel [172]. Vor der Beschreibung typischer Anwendungsgebiete, soll diskutiert werden, wann die Verwendung von Response-Surface-Methoden sinnvoll oder gar notwendig ist.

Ist der funktionale Zusammenhang $y = f(\vec{x})$ bekannt und von einfacher algebraischer Struktur, so besteht kein Grund, ein Ersatzmodell zu nutzen. Für gewünschte Werte x aus dem Definitionsbereich bzw. aus einem interessierenden Eingangsbereich rechnet man die „Response“ einfach aus. Auch lokale Extrema können dann einfach genug gefunden werden.

Ist jedoch der Zusammenhang f in $y = f(\vec{x})$ nicht bekannt, sondern zunächst nur vermutet, so könnte man mit einer Dimensionsanalyse beginnen mit der Aufstellung von:

$$y = x_1^{k_1} x_2^{k_2} \dots x_n^{k_n} h(\vec{\Pi}) \quad (4.4)$$

(für eine Erklärung sei auf den Anhang A verwiesen) und zunächst prüfen, ob der Ansatz $y = f(\vec{x})$ im Prinzip möglich ist. Dann müsste jedoch eine Funktion $h(\vec{\Pi})$, welche von unabhängigen, dimensionslosen Potenzprodukten der (x_1, x_2, \dots, x_n) abhängig ist, aufwändig experimentell genähert werden. Dies ist derzeit noch Stand der Technik bei der Modellierung der Ausbreitung schwerer Gase [35] in Deutschland.

Ein Zusammenhang $y = f(\vec{x})$ kann auch schwierig zu untersuchen sein, wenn die zugehörigen (Differential-)Gleichungen nicht analytisch gelöst werden können, wie im Falle von CFD-Simulationen.

Dann kann die Approximation des Zusammenhanges über eine Response-Surface sehr sinnvoll sein, weil letztere einfach auf algebraischem Wege ausgewertet wird. Bei diesen Auswertungen sind folgende Punkte überwiegend im Fokus:

- Verwendung des Ersatzmodells für Parameterstudien bis hin zur vollständigen Unsicherheits- und Einflussanalyse auf die Zielgröße,
- Untersuchung der Signifikanz einzelner Modellvariablen,
- Optimierung von Prozessen durch Variation der Einflussvariablen in einem Interessengebiet,
- Kurvenregression oder zur Anpassung multivariater Polynome bei der Suche nach funktionalen Zusammenhängen,

4. Modellierung von Unsicherheiten, Response-Surface-Methoden (RSM)

- Aufwandsreduktion bei Interpolation, Extrapolation oder bei Parameterstudien.

In dieser Habilitation werden RSM benutzt, um insbesondere den ersten und den letzten Punkt zu adressieren:

- Die Zuordnung $y \stackrel{CFD}{\Leftrightarrow} (x_1, x_2, \dots, x_n)$ ist im Anwendungsbeispiel sehr aufwändig, die Zuordnung $y \stackrel{RSM}{\Leftrightarrow} (x_1, x_2, \dots, x_n)$ dagegen einfach algebraisch.
- Eine Parameterstudie bis hin zur vollständigen Unsicherheits- und Einflussanalyse auf die Zielgröße ist mit der Kopplung von CFD-Simulationen mit beispielsweise Sampling-Verfahren (MCS, LHS) nicht möglich. Eine Kopplung dieser Sampling-Verfahren mit der RS kann jedoch vorgenommen werden.
- Das Ersatzmodell kann im Falle einer Eignung auch ohne Spezialkenntnisse (wie z. B. der Fähigkeit zur Durchführung und Auswertung von CFD-Simulationen) für Folgebetrachtungen verwendet werden.

In Fachartikeln werden gelegentlich [46, 133] Response-Surface-Modelle begrifflich zu Stochastischen Response-Surface-Modellen erweitert. Durch die Bezeichnung SRSM soll hervorgehoben werden, dass mit der Aufstellung der Response-Surface (über PCE) explizit die Verteilungseigenschaften der einflussgebenden Zufallsvariablen berücksichtigt werden sollen. Die Begründung der Auswahl und der Struktur der multivariaten Polynome erfolgt dann über PCE und ausgewählten orthogonalen Polynomensystemen als Polynombasis. Hier soll diese begriffliche Unterscheidung nicht verwendet werden.

Zum Abschluss dieser Einleitung zu RSM soll auf einige spezielle (und aktuelle) Anwendungen eingegangen werden.

In Isukapalli et al., 1998 [133] wird der Begriff Stochastische Response-Surface-Methode zur Unterscheidung von der deterministischen Response-Surface-Methode geprägt. In der Arbeit wird festgehalten, dass diese Vorgehensweise der Polynomaufstellung und Anpassung für umfassende Fehler- und Toleranzbetrachtungen anwendbar sein sollte. Sind direkte Kopplungen zwischen CFD-Analysen mit Monte-Carlo-Verfahren zu aufwändig, so können die Ersatzmodelle jedoch gut mit Letzteren untersucht werden. Es werden zwei vereinfachte Anwendungen demonstriert: ein „reactive plume model“ (photochemische Umwandlung von Schadstoffen in einer Schadstoffwolke unter dem Einfluss von Lufteinmischung und photochemischer Umwandlungsreaktionen) und ein pharmakokinetisches Modell zu Verteilungs-, Um- und Abbauprozessen von Perchlorethylen im menschlichen Körper. Ergebnis der Untersuchung ist die erfolgreiche Prinzipdemonstration. Zudem konnte gezeigt werden, dass der Aufwand der Kopplung von RSM und Monte-Carlo-Verfahren tatsächlich zu einer Aufwandsreduktion führt. Für die Anpassung werden Hermitepolynome 2. und 3. Ordnung verwendet.

Das Prinzip wird auch in dieser Habilitation angewendet, jedoch an deutlich komplexeren Ausbreitungsmodellen.

In Chutia et al., 2014 [46] wird diskutiert, wie aleatorische und epistemische Fehler gleichermaßen in SRSM betrachtet werden können. Der Werdegang der Begründung der anzupassenden Polynome ist identisch zur Arbeit zuvor, allerdings werden aleatorische Einflüsse über Dichteverteilungsfunktionen der Einflussvariablen und epistemische Einflüsse über Zugehörigkeitsfunktion (Fuzzy-Intervalle) beschrieben.

Interessant ist diese Arbeit, weil in ihr gleichermaßen ein sehr umfangreicher Literaturüberblick gegeben wird, was Strategien zur Kopplung von Monte-Carlo-Verfahren, Latin-Hypercube-Verfahren und Stochastische Response-Surface-Methoden betrifft. Es werden Hermite-Polynome bis zur 2. Ordnung angepasst für ein fast triviales Ausbreitungsmodell:

$$c = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z}, \quad (4.5)$$

was die Konzentration c von freigesetzten Gasen aus einer Punktquelle in erster Näherung beschreiben kann. Zur Größendefinition sei auf den Anhang B zum Gaußmodell verwiesen, bei dem der angegebene Term lediglich den ersten Faktor darstellt.

Die einzelnen epistemischen Größen werden durch Zugehörigkeitsfunktionen dargestellt, die stückweise durch Gleichverteilungen approximiert werden. Anschließend werden alle Verteilungen auf Standardnormalverteilungen transformiert und für jede Zugehörigkeit zu einem α -cut eine eigene RS aufgestellt. Dies erfolgt so, dass für jede durch ein Fuzzy-Intervall angegebene Größe ein unterer, ein oberer und ein mittlerer Wert erfasst wird. Im Anwendungsbeispiel wird dieses Vorgehen allerdings nur für eine (epistemische) Einflussvariable, der Freisetzungsfläche A für den Quellterm Q gemacht.

Hier ist jedoch anzumerken, dass man alternativ die epistemische Einflussvariable, zumindest versuchsweise, durch eine Dichteverteilungsfunktion hätte nähern können. Dann bliebe die Frage nach dem effektiven Nutzen bzw. Mehrwert durch die explizite Verwendung der Zugehörigkeitsfunktionen.

In Weyenberge et al., 2017/2018 [47, 48] wurde eine Response-Surface für die Beschreibung eines Raumbrandes verwendet. Die verwendeten unsicheren Größen in [47] sind die maximale Brandfläche, die Wärmefreisetzungsrate und die Abbrandrate. Es wurde ein Polynom 2. Ordnung mit 7 Koeffizienten und drei Variable an Stützstellen angepasst, welche mit LHS ausgewählt und deren Response mit CFD-Brandsimulationen bestimmt wurden. Ziel war der Vergleich von Regressionspolynomen mit Polynomen, begründet durch PCE, was beim Lesen den Eindruck erweckt, als hätten die Autoren nicht ganz verstanden, welchen Hintergrund PCE hierbei hat. So wird das Regressionspolynom ohne die quadratischen Terme der Einzelvariablen (dafür die gemischten Terme) angepasst (und als „Least Square Methode“ bezeichnet) und im Falle von PCE die quadratischen Terme ohne die gemischten Terme. In beiden Fällen fitten die Autoren ein Polynom 2. Ordnung mit 7 Koeffizienten.

Als Fazit wurde angegeben, dass PCE bessere Anpassungswerte liefert. Dies ist vor dem Hintergrund, dass in beiden Fällen dieselbe Regressionsanpassung (gleitende, gewichtete Regression, siehe etwas weiter unten) durchgeführt wurde, unverständlich. Hätte man in beiden Fällen ein Polynom 2. Ordnung mit 10 Koeffizienten verwendet, so wären die Ergebnisse identisch. Das in der Arbeit [47] hierbei zwei „Methoden“ unterschieden werden, ist nicht nachvollziehbar⁹. Dennoch sind diese Arbeiten interessant, weil sie das Prinzip auf Brandsimulationen übertragen haben und in eine Serie von Metamodellen einbetten [48].

Das Brandszenario ist wiederum nur für eine methodische Präsentation geeignet. Im bereits genannten Promotionsprojekt [147] soll dies auf nichttriviale Brandsimulationen angewendet werden.

4.3.2. Mathematische Bestimmung von Response-Surfaces

Polynomielle Chaosentwicklung (PCE)

Im ersten Teil dieses Kapitels wurde der Ursprung von Unsicherheiten bezüglich der Eingangsdaten von Modellen angegeben. Dabei wurde deutlich, dass eine Mitberücksichtigung dieser Unsicherheiten erforderlich ist.

Sind die Eingangsdaten zu Modellparametern nicht deterministisch, sondern besitzen Zufallscharakter, so bezeichnet man die zugehörigen Modellgleichungen bisweilen auch als zufällige Gleichungen bzw. im Falle von Differentialgleichungssystemen als zufällige Differentialgleichungssysteme¹⁰[156]. Zufällige Differentialgleichungssysteme können im Allgemeinen nicht analytisch

⁹Die Autoren wurden kontaktiert, jedoch konnte dieses Problem nicht diskutiert werden, da der angegebene Korrespondenzautor nicht geantwortet hat. Auch nicht auf Bitten eines weiteren Coauthors.

¹⁰In Unterscheidung zu stochastischen Differentialgleichung wie z. B. der in Abschnitt 4.2 erwähnten Langevin-Gleichung zur Modellierung von Zufallstrajektorien in Partikeltrajektorienmodellen. Diese werden (im Gegensatz zu zufälligen Differentialgleichungen) mittels stochastischer Integration (Itô-Kalkül) untersucht.

gelöst werden, so dass geeignete Methoden erforderlich sind, den Zufallseinfluss durch das Differentialgleichungsproblem hindurch auf die gesuchten Lösungen zu propagieren.

Hierfür kann PCE ein Hilfsmittel sein, weil mit dieser die gesuchte numerische Lösung so aufgebaut werden kann, dass bei Kenntnis von Verteilungen von zufälligen Eingangsgrößen die Verteilungsfunktion der Lösung mitbestimmt wird.

In [156] wurde dies beispielsweise durchgeführt, um eine zufällige stationäre Diffusionsgleichung (Berücksichtigung einer Verteilung des Diffusionskoeffizienten) mittels stochastischer Galerkin-Verfahren unter Verwendung von PCE zu lösen.

Man kann PCE allerdings auch als Ausgangspunkt benutzen, um ein Ersatzmodell für die Untersuchung eines komplexen Problems, etwa der beschriebenen umfassenden Unsicherheitsberücksichtigung in CFD-Simulationen, zu ermitteln [47, 133, 173].

Der Begriff „polynomial chaos“ besitzt seinen Ursprung in Arbeiten von Norbert Wiener [174, 175]. In [174] hat er (unter anderem) gezeigt, dass unter gewissen Voraussetzungen beliebige Messgrößen beliebig genau durch Polynome (Hermite-Polynome) approximiert werden können [174].

Unter PCE versteht man zunächst, dass eine Zufallsgröße Y , welche abhängig von standardnormalverteilten Zufallsgrößen X_i , $i = 1, \dots, n$ ist, durch eine verallgemeinerte Fourierreihenentwicklung (im Sinne der Entwicklung quadratintegrabler Funktionen in Hilberträumen) in multivariate Hermitepolynome entwickelt werden kann [176, 177].

Dies kann weiter verallgemeinert werden [178, 179, 180], wobei die Zufallsvariablen keine standardnormalverteilten Zufallsgrößen sein müssen. Es kann gezeigt werden [178], dass unter bestimmten mathematischen Voraussetzungen eine sogenannte verallgemeinerte PCE möglich ist, wobei die für die Entwicklung herangezogenen multivariaten Polynome entsprechend der Verteilungseigenschaften der für die Entwicklung verwendeten Zufallsgrößen gewählt werden. Dadurch können nahezu beliebig verteilte Zufallsgrößen Argumente der Entwicklung von Y sein.

Stark vereinfacht könnte man dies so beschreiben, dass nahezu beliebige zufallsbehaftete physikalische Zusammenhänge beliebig genau durch Polynome approximiert werden können.

Zur Einordnung der PCE und auch zum besseren Verständnis der Methode sollen zunächst einige Vorbetrachtungen angegeben werden. Allerdings soll auf eine hohe mathematische Strenge (Einbettung des Problems, umfassende Definitionen und Beweise) verzichtet werden. Die Verdeutlichung einiger Grundgedanken steht im Mittelpunkt.

Zunächst sei $y = f(x) : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ eine quadratintegrale Funktion einer reellen Veränderlichen:

$$\int_a^b [f(x)]^2 dx < \infty. \quad (4.6)$$

Sind des Weiteren $f_n(x)$ ein Funktionensystem von n komplexwertigen Funktionen der reellen Variable x , für die

$$\int_a^b |f_n(x)| dx \quad \text{und} \quad \int_a^b |f_n(x)|^2 dx \quad (4.7)$$

existieren. Zusätzlich mögen diese ein vollständiges orthogonales Funktionensystem bilden:

$$\int_a^b f_n^*(x) f_m(x) dx = \langle f_n(x) | f_m(x) \rangle = c_n \delta_{n,m}, \quad \text{Orthogonalität} \quad (4.8)$$

$$\int_a^b [f(x)]^2 dx = \sum_{n=1}^{\infty} |\langle f_n(x) | f(x) \rangle|^2, \quad \text{Vollständigkeit (Parseval-Gleichung)}. \quad (4.9)$$

Hierin ist $\langle \cdot | \cdot \rangle$ das Skalarprodukt des Hilbertraumes L^2 der quadratintegrablen Funktionen, zu denen auch $f(x)$ gehört. Dann kann die Funktion $f(x)$ in diesem Funktionensystem entwickelt

4. Modellierung von Unsicherheiten, Response-Surface-Methoden (RSM)

werden:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} a_n f_n(x) \quad \text{mit} \quad a_n = \frac{\langle f_n(x) | f(x) \rangle}{\langle f_n(x) | f_n(x) \rangle} = \frac{1}{c_n} \int_a^b f_n(x) f(x) dx. \quad (4.10)$$

Man nennt (4.10) auch die Fourierreihenentwicklung von $f(x)$ ¹¹. Betrachtet man in der Reihenentwicklung (4.10) nur eine endliche Anzahl von Koeffizienten, d. h. bricht man die Entwicklung nach p -Koeffizienten ab, so stellt die verbleibende Summe eine Näherung dar:

$$\sum_{i=1}^p a_n f_n(x) \approx f(x). \quad (4.11)$$

Entwickelt man beispielsweise eine Funktion $y = f(x)$ auf $[-1, 1]$ nach den Legendre-Polynomen

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^k \frac{(2n-2k)!}{(n-k)! (n-2k)! k! 2^n} x^{n-2k} \quad \text{mit} \quad \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor = \begin{cases} \frac{n}{2} & n \text{ gerade} \\ \frac{n-1}{2} & n \text{ ungerade,} \end{cases} \quad (4.12)$$

welche orthogonal auf $[0, 1]$ sind:

$$\int_{-1}^1 P_n(x) P_m(x) dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{nm}, \quad (4.13)$$

so folgt für die Entwicklungskoeffizienten:

$$a_n = \frac{2n+1}{2} \int_{-1}^1 P_n(x) f(x) dx. \quad (4.14)$$

Ist etwa $f(x) = x^2$ mit $x \in [-1, 1]$, so folgt für die Entwicklungskoeffizienten:

$$a_0 = \frac{1}{3}, \quad a_1 = 0, \quad a_2 = \frac{2}{3}, \quad a_k = 0, \quad (\forall k > 2) \quad (4.15)$$

und damit:

$$x^2 = \frac{1}{3} P_0(x) + \frac{2}{3} P_2(x). \quad (4.16)$$

Die Funktion $f(x) = x^2$ ist also auf diesem Intervall exakt darstellbar. Dies war jedoch zu erwarten, da die Legendre-Polynome eine alternative Polynomenbasis zur einfachen Polynomenbasis $\{1, x, x^2, x^3, \dots\}$ ist. Bis hier wurde also zunächst in Erinnerung gerufen, dass die orthogonalen Polynome mit den angegebenen Eigenschaften eine Basis des Hilbertraumes L^2 bilden. Jedes Element des Funktionenraumes kann somit in eine Reihe der Art (4.10) entwickelt werden. Man nennt diese Entwicklungen auch verallgemeinerte Fourierreihenentwicklungen. Einige Polynomfamilien, welche vollständige orthogonale Polynomensysteme auf bestimmten reellen Intervallen bilden, sind recht bekannt und bedeutend. Die angegebenen Legendre-Polynome haben Anwendungen in der Elektrodynamik und der Quantenmechanik. Laguerre- und Hermite-Polynome werden ebenso in der Quantenmechanik benötigt, letztere beispielsweise bei der Darstellung der

¹¹Wählt man beispielsweise $f_n = e^{inx}$ auf dem Intervall $[0, 2\pi]$, so gilt:

$$\langle f_n | f_m \rangle = \int_0^{2\pi} e^{-inx} e^{imx} dx = 2\pi \delta_{nm}.$$

Auf diesem Intervall quadratintegrierbarer Funktionen $f(x)$ besitzen die Darstellung:

$$f(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} a_n f_n(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} a_n e^{inx} \quad \text{mit} \quad a_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x) e^{-inx} dx.$$

Was die im Ingenieurbereich sehr bedeutende Fourierreihenentwicklung periodischer Funktionen ist.

Eigenfunktionen des quantenmechanischen harmonischen Oszillators. Die Hermite-Polynome, sowie orthogonale Polynomensysteme generell, stehen des Weiteren auch im Vordergrund bei der sich anschließenden Betrachtung zur polynomiellen Chaostwicklung.

Viele Größen in physikalischen Modellen bis hin zu Größen in CFD-Simulationen sind vom mathematischen Standpunkt aus reelle Zufallsvariablen X . Darunter versteht man Größen, die gewisse reelle Zahlen mit einer von den Eigenschaften der Zufallsgröße abhängigen Wahrscheinlichkeit annehmen. Formal definiert sind Zufallsvariablen als messbare Funktion von einem Wahrscheinlichkeitsraum in einen Messraum.

Die Zufallsvariablen X sind hierbei Funktionen, die jedem Ergebnis ω eines Ergebnisraumes Ω eine reelle Zahl zuordnen:

$$\forall x \in \mathbb{R} : \{\omega \mid X(\omega) \leq x\} \in \Sigma \quad (4.17)$$

Σ ist hierbei ein Ereignisraum über Ω , welches zudem eine σ -Algebra über Ω ist. Die Zufallsvariable X wird bei einer Versuchsdurchführung (oder bei einer Messung) den Wert x annehmen, welchen man als Realisierung bezeichnet. Als Beispiel sei hier der Wert einer Geschwindigkeitsmessung (Betrag) genannt. Ist die Zufallsgröße Geschwindigkeit X_u standardnormalverteilt, d.h. $\sim N(0, 1)$, so gilt:

$$P(X_u \leq u^*) = \int_{-\infty}^{u^*} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{u^2}{2}} du. \quad (4.18)$$

Man kann (4.18) bereits entnehmen, dass eine Realisierung in der Nähe einer bestimmten Geschwindigkeit nur mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit p angenommen wird.

Der Ausdruck $Y = Y(X)$ bedeutet zunächst, dass die Zufallsvariable Y von der Zufallsvariablen X abhängig ist. Da Y in $Y = Y(X)$ abhängig von X ist, wird die Realisierung $y = f(x)$ eintreten, wenn X die Realisierung x annimmt. Ist $Y = Y(X_1, X_2, \dots, X_n)$ eine Zufallsvariable, welche von einem Vektor aus n reellen Zufallsvariablen X_i abhängig ist, so nennt man Y eine multivariate Zufallsgröße und die X_i Randverteilungen. Hierzu sind die X_i auf dem gleichen Wahrscheinlichkeitsraum zu definieren. In vielen praktischen Anwendungen wie auch in dieser Arbeit ist die genaue Auseinandersetzung der Gestalt des zugrunde gelegten Wahrscheinlichkeitsraumes nicht erforderlich. Auch hier soll lediglich die Angabe der entsprechenden Verteilungsdichtefunktionen zur Klassifikation der Zufallsvariablen genügen und auf mathematische Strenge verzichtet werden.

Fasst man nun die Abbildung $f \in L^2$ als Funktion einer standardnormalverteilten Zufallsgröße X mit endlichem Erwartungswert $E[f(X)] < \infty$ (nun berechnet im Wahrscheinlichkeitsraum mit dem Lebesgue-Integral) auf, so kann man diese ebenso in einer äquivalenten Reihe darstellen:

$$f(X) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j H_j(X), \quad \text{mit: } f_j = E[f(X), H_j(X)]. \quad (4.19)$$

Auch wenn Zufallsvariablen auf Wahrscheinlichkeitsräumen definiert sind, so kann $y = f(x)$ in eine verallgemeinerte Fourierreihe (Chaostwicklung) mit Hermite-Polynomen entwickelt werden, wenn die Zufallsvariable Y ein endliches Moment 2. Ordnung (endliche Varianz) besitzt [176, 177]:

$$y = \sum_{j=0}^{\infty} a_j H_j(x), \quad \text{mit: } H_j(x) = (-1)^j e^{x^2} \frac{d^j}{dx^j} e^{-x^2}. \quad (4.20)$$

Der Index j kennzeichnet die Ordnung der Hermite-Polynome. Ist $Y = Y(X_1, X_2, \dots, X_n)$ eine Zufallsvariable, welche von einem Vektor aus n reellen Zufallsvariablen X_i abhängig ist, so gelingt eine solche Chaostwicklung durch die Verwendung von multivariaten Hermite-Polynomen als Basis. Diese Basis wird aus Tensorprodukten der jeweiligen univariaten Basispolynome gewonnen.

Sei zunächst $Y = Y(X_1, X_2)$ eine bivariate Zufallsgröße zweier unabhängiger, standardnormalverteilter Zufallsgrößen. In zwei Variablen berechnet sich das Tensorprodukt wie ein dyadisches

Produkt:

	$b_0 H_0(x_2)$	$b_1 H_1(x_2)$	$b_2 H_2(x_2)$	\dots
$a_0 H_0(x_1)$	$a_0 b_0 H_0(x_1) H_0(x_2)$	$a_0 b_1 H_0(x_1) H_1(x_2)$	$a_0 b_2 H_0(x_1) H_2(x_2)$	\dots
$a_1 H_1(x_1)$	$a_1 b_0 H_1(x_1) H_0(x_2)$	$a_1 b_1 H_1(x_1) H_1(x_2)$	$a_1 b_2 H_1(x_1) H_2(x_2)$	\dots
$a_2 H_2(x_1)$	$a_2 b_0 H_2(x_1) H_0(x_2)$	$a_2 b_1 H_2(x_1) H_1(x_2)$	$a_2 b_2 H_2(x_1) H_2(x_2)$	\dots
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots

(4.21)

Terme 0. Ordnung sind blau, Terme 1. Ordnung magenta und Terme 2. Ordnung grün hervorgehoben. Die Entwicklung kann man nun schreiben zu:

$$y = a_0 b_0 H_0(x_1) H_0(x_2) + a_0 b_1 H_0(x_1) H_1(x_2) + a_1 b_0 H_1(x_1) H_0(x_2) + a_0 b_2 H_0(x_1) H_2(x_2) + \dots$$

$$a_{i0} + a_{i1} H_1(x_1) + a_{21} H_1(x_2) + a_{11,21} H_1(x_1) H_2(x_2) + a_{12} H_2(x_1) + \dots \quad (4.22)$$

In der zweiten Zeile von (4.22) wurde die Indizierung a_{ij} verwendet, in der i die Variable und j die Ordnung kennzeichnet. Dies kann man weiter abkürzen durch:

$$y = a_0 \Gamma_0 + \sum_{i=1}^2 a_{i1} \Gamma_1(x_{i1}) + \sum_{i1=1}^2 \sum_{i2=1}^{i1} a_{i1,i2} \Gamma_2(x_{i1}, x_{i2}), \quad (4.23)$$

wobei Γ_1 und Γ_2 Kombinationen der univariaten Hermite-Polynome sind, deren Gesamtordnung dem Index entspricht. Verallgemeinert man dies auf den multivariaten Fall mit n unabhängigen, standardnormalverteilter Zufallsgrößen X_1, X_2, \dots, X_n , so folgt:

$$y = a_0 \Gamma_0 + \sum_{i=1}^n a_{i1} \Gamma_1(x_{i1}) + \sum_{i1=1}^n \sum_{i2=1}^{i1} a_{i1,i2} \Gamma_2(x_{i1}, x_{i2})$$

$$+ \sum_{i1=1}^n \sum_{i2=1}^{i1} \sum_{i3=1}^{i2} a_{i1,i2,i3} \Gamma_3(x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}) + \dots \quad (4.24)$$

Der erste Summand ist eine Konstante, der zweite Summand beinhaltet alle Terme 1. Ordnung, der dritte Summand alle multivariaten Kombinationen der Variablen mit 2. Ordnung, gekennzeichnet durch den Index p am Ausdruck $\Gamma_p(x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ip})$, den man auch polynomielles Chaos der Ordnung p nennt. Die multivariaten Hermite-Polynome der Ordnung p für die Γ_p kann man auch angeben (Physiker-Konvention) mit:

$$\Gamma_p(x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ip}) = (-1)^p e^{\frac{1}{2} \vec{x}^T \vec{x}} \frac{\partial^p}{\partial x_{i1} \dots \partial x_{ip}} e^{-\frac{1}{2} \vec{x}^T \vec{x}}. \quad (4.25)$$

Die Entwicklungskoeffizienten a_j (j ist hier ein Vielfachindex, der die Ordnung kennzeichnet) berechnen sich bei bekanntem Zusammenhang $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ wie im Falle der Fourierreihenentwicklung über die Skalarprodukte.

Diese polynomielle Chaosentwicklung kann wiederum weiter verallgemeinert werden, wenn die X_1, X_2, \dots, X_n nicht standardnormalverteilt sind. Dann kann eine Entwicklung nach anderen orthogonalen Polynomensystemen vorgenommen werden. Dies wird im Folgenden kurz diskutiert. Nimmt man an, dass Y ein endliches Moment 2. Ordnung besitzt und alle X_i endliche Momente in beliebiger Ordnung [181], dann können die Realisierungen y mittels orthogonaler Polynome $\{\Psi_{\mathbf{j}}(\vec{x}), \mathbf{j} \in \mathbb{N}^n\}$ dargestellt werden:

$$y = \sum_{\mathbf{j} \in \mathbb{N}^n} a_{\mathbf{j}} \Psi_{\mathbf{j}}(\vec{x}), \quad (4.26)$$

wobei gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^n} \Psi_{\mathbf{j}}(\vec{x}) \Psi_{\mathbf{k}}(\vec{x}) f_{\vec{x}}(\vec{x}) d\vec{x} = \delta_{\mathbf{j}\mathbf{k}}. \quad (4.27)$$

Hierbei ist $\mathbf{j} \in \mathbb{N}^n$ erneut ein Vielfachindex, der die Ordnung kennzeichnet. Das Element $j_i \in \mathbf{j}$ kennzeichnet somit die Ordnung von $\Psi_{\mathbf{j}}(\vec{x})$ in der i -ten Variablen. Die totale Ordnung $|\mathbf{j}|$ von $\Psi_{\mathbf{j}}(\vec{x})$ ist nun $\sum_i j_i$.

Sind die n Zufallsvariablen unabhängig voneinander, so gibt es für $\Psi_{\mathbf{j}}(\vec{x})$ wieder eine Tensorprodukt-darstellung, bei der für jede einzelne Variable ein eigenes orthogonales Polynomensystem verwendet wird. Somit können auch Zufallsvariablen in Polynome entwickelt werden, die nicht durch eine einfache Transformation auf Standardnormalverteilung überführt werden können [178]. Eine wichtige Klasse orthogonaler Polynome sind in der sogenannten Askey-Wilson [182] Polynomenfamilie zusammengefasst. Neben den Hermite-Polynomen (Standardnormalverteilung) zählen hierzu auch die Jakobi-Polynome (Beta-Verteilung), welche die Legendre-Polynome als Spezialfall enthalten (Gleichverteilung), die Laguerre-Polynome (Gamma-Verteilung) und weitere. In [178] wurden PCE für eine Untermenge der Askey-Wilson Polynomenfamilie gezeigt, welche auch die hier aufgelisteten betrifft. Die in Klammern angegebene Verteilung ist die entsprechende Dichtefunktion in der Orthogonalitätsrelation der Polynome. Für die Zwecke dieser Arbeit genügen jedoch die Hermite-Polynome (siehe etwas weiter unten).

In praktischen Anwendungen wird die Reihenentwicklung üblicherweise bei einer bestimmten Polynomenordnung abgebrochen, um nur eine endliche Menge an Entwicklungskoeffizienten bestimmen zu müssen.

Üblich ist die grundsätzliche Limitierung der Ordnung [178] mit:

$$A^{n,p} = \{\mathbf{j} \in \mathbb{N}^n : |\mathbf{j}| \leq p\}, \quad (4.28)$$

wobei $|\mathbf{j}| = \sum_{i=1}^n j_i$ die totale Ordnung von $\Psi_{\mathbf{j}}$ und p die höchste mitbetrachtete Ordnung ist. Dann gibt es $\binom{n+p}{p}$ Koeffizienten im Polynom. Ein anderes Abbruchschema, welches z. B. in [47] in einer RSM für eine Modellierung eines Brandes verwendet wurde, ist:

$$A^{n,p,q} = \{\mathbf{j} \in A^{n,p} : \|\mathbf{j}\|_q \leq p\}, \quad \text{mit } (q \in [0 : 1] \text{ und } \|\mathbf{j}\|_q = \left(\sum_i j_i^q \right)^{\frac{1}{q}}). \quad (4.29)$$

Zur Verdeutlichung soll nun eine Zufallsgröße Y betrachtet werden, die von drei unabhängigen, standardnormalverteilten Zufallsgrößen X_1, X_2, X_3 abhängig sein möge. Bricht man die Reihenentwicklung in multivariate Hermite-Polynome bei der 2. Ordnung ab, so verbleiben $\binom{5}{2} = 10$ Koeffizienten. Für die Realisierungen gilt dann:

$$\begin{aligned} y(x_1, x_2, x_3) &= a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3 + a_4 (x_1^2 - 1) + a_5 (x_2^2 - 1) + a_6 (x_3^2 - 1) \\ &+ a_7 x_1 x_2 + a_8 x_1 x_3 + a_9 x_2 x_3. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Verwendet man in der zweiten Abbruchrelation beispielsweise $q = 0.5$, so fallen die Terme mit den Koeffizienten a_7, a_8 und a_9 heraus, weil $\|\mathbf{j}\|_{0.5} = (\sqrt{1} + \sqrt{1})^2 = 4 \stackrel{!}{>} 2$ ist. Für a_4, a_5 und a_6 ist dagegen $\|\mathbf{j}\|_{0.5} = (\sqrt{2})^2 = 2 \stackrel{!}{\leq} 2$, so dass diese in der Entwicklung blieben.

Für die Bestimmung der Koeffizienten gibt es unterschiedliche Verfahren. Ist der Zusammenhang $y = f(x_1, \dots, x_n)$ bekannt, so können die Skalarprodukte möglicherweise direkt berechnet werden. Beim Vorliegen von Differentialgleichungen kann man versuchen, das Problem variationell darzustellen und einen Reihenansatz für die Lösung zu verwenden. Die Entwicklungskoeffizienten können dann z. B. mittels Galerkin-Verfahren [156] bestimmt werden.

In dieser Arbeit liegen für die zu untersuchenden Zusammenhänge $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ nur

Stützstellenwerte vor, so dass die Koeffizienten a_i mit der Methode der kleinsten Fehlerquadrate bestimmt werden sollen. Dadurch ist der genaue Zufallscharakter der Zufallsvariablen nicht mehr von hoher Bedeutung.

In [173] wurde argumentiert, dass die Matrizen für die Bestimmung der Koeffizienten (siehe Abschnitt 4.3.2) im Falle der Verwendung von orthogonalen Polynomen als Basis besser konditioniert sind, weil es weniger Kollinearität gibt. Eigene Untersuchungen zeigen, dass dies jedoch nicht zwingend ist. Verwendet man zur Anpassung eine einfache Polynomenbasis, so können die auf diese Weise bestimmten Koeffizientensätze durch einfache Transformation überführt werden. Daher werden in dieser Arbeit Polynome mit einfacher Polynomenbasis angepasst.

Regressionsmodelle

Im Abschnitt zuvor wurde gezeigt, dass innerhalb von RSM multivariate Polynome an Stichprobenwerten der erklärenden Variablen und der Response $(x_1, x_2, \dots, x_n, y)$ anzupassen sind. Selbst wenn ein solches Polynom über polynomelle Chaosentwicklung begründet wurde, benötigt man eine Strategie, die unbestimmten Koeffizienten zu ermitteln. Eine einfache und überwiegend verwendete Möglichkeit sind Quadratminimierungsmethoden (Methode der kleinsten Fehlerquadrate), welche auch hier verwendet werden sollen.

Im Folgenden soll die Herleitung für das Anpassungsgleichungssystem mit linear unabhängigen Funktionen für die Darstellung von Termen multivariater Polynome beliebiger Ordnung gezeigt werden. Man nennt diese Anpassung auch Regression und die Modelle Regressionsmodelle [183]. In praktischen Anwendungen sind unsicherheitsbehaftete Messwerte oder, wie in dieser Arbeit, Werte aus CFD-Simulationen als Eingangsgrößen zu verarbeiten. Mitunter ist die Datenqualität nicht für alle Stichprobenwerte oder auch Wertebereiche gleich, so dass auch kurz auf die Behandlung von Ausreißern und auf Datenwichtung eingegangen werden soll. Bei den Regressionsverfahren handelt es sich um Standardverfahren, welche in der Literatur häufig verwendet und beschrieben werden. Für weitere Details sei auf [183, 184] verwiesen.

Ausgangspunkt sei ein Polynom aus $p + 1$ Koeffizienten mit beliebigen zur Regression gewählten linear unabhängigen Funktionen $f_j(\vec{x})$, $j = 0, \dots, p$. Der Vektor $\vec{x} = (x_1, \dots, x_n)$ kann aus n erklärenden Variablen bestehen. Die Funktionen $f_j(\vec{x})$ sind Terme multivariater Polynome, z.B. für den Fall $n = 1$ $(f_1(x), f_2(x), f_3(x), \dots) = (1, x, x^2, \dots)$, wenn man eine einfache Polynomenbasis $\{1, x, x^2, \dots\}$ oder $(f_1(x), f_2(x), f_3(x), \dots) = (1, 2x, 4x^2 - 2, \dots)$, wenn man als Basisfunktionen für die Entwicklung Hermite-Polynome $\{1, 2x, 2x^2 - 2, \dots\}$ verwendet. Für $n \neq 1$ ergeben sich die Terme aus dem Tensorprodukt von n univariaten Polynomen. Zunächst sei die Response y :

$$y = f(\vec{x}) \stackrel{!}{=} \sum_{j=0}^p a_j f_j(\vec{x}) + r. \quad (4.31)$$

Hierin sind die a_j mit $j = 0, \dots, p$ die durch Anpassung zu bestimmenden Koeffizienten und r ein Maß für den Anpassungsfehler. Um die Koeffizienten aus (4.31) mit Quadratminimierungsmethoden bestimmen zu können, sei weiterhin angenommen, dass mehr Datensätze \vec{x}_i , $i = 1, \dots, m$ als Koeffizienten bestimmt wurden ($m > p + 1$). Für jeden Datensatz i gilt:

$$y_i = f(\vec{x}_i) \stackrel{!}{=} \sum_{j=0}^p a_j f_j(\vec{x}_i) + r_i = \hat{f}(\vec{x}_i) + r_i.$$

In Quadratminimierungsmethoden werden die Koeffizienten so bestimmt, dass die Summe der Abweichungsquadrate minimal wird. Die Summe der Abweichungsquadrate $F(a_0, \dots, a_p)$ ist

eine Funktion der unbestimmten Parameter. Für diese gilt zunächst:

$$F(a_0, \dots, a_p) = \sum_{i=1}^m [f(\vec{x}_i) - \hat{f}(\vec{x}_i)]^2 = \sum_{i=1}^m \left[f(\vec{x}_i) - \sum_{j=0}^p a_j f_j(\vec{x}_i) \right]^2 = \sum_{i=1}^m r_i^2. \quad (4.32)$$

Notwendige Bedingung für die Minimierung der Summe der Abweichungsquadrate ist:

$$\nabla F(a_0, \dots, a_p) \stackrel{!}{=} \vec{0} \iff \left(\frac{\partial F}{\partial a_0}, \dots, \frac{\partial F}{\partial a_p} \right) = \vec{0}. \quad (4.33)$$

Führt man die partielle Ableitung nach a_k aus, so folgt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial a_k} &= \frac{\partial}{\partial a_k} \left\{ \sum_{i=1}^m \left[f(\vec{x}_i) - \sum_{j=0}^p a_j f_j(\vec{x}_i) \right]^2 \right\} \stackrel{!}{=} 0 \\ &\Rightarrow \sum_{i=1}^m \left[f(\vec{x}_i) f_k(\vec{x}_i) - \sum_{j=1}^p a_j f_j(\vec{x}_i) f_k(\vec{x}_i) \right] = 0. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Man erhält nach Ausführung aller partiellen Ableitungen somit $p + 1$ Gleichungen für $p + 1$ Koeffizienten a_0, \dots, a_p . Verwendet man die folgenden Zuordnungen:

$$\vec{z}^T = \left[\sum_{i=1}^m f(\vec{x}_i) f_0(\vec{x}_i), \sum_{i=1}^m f(\vec{x}_i) f_1(\vec{x}_i), \dots, \sum_{i=1}^m f(\vec{x}_i) f_p(\vec{x}_i) \right], \quad \vec{a}^T = [a_0, a_1, \dots, a_p] \quad (4.35)$$

sowie:

$$A = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m f_0(\vec{x}_i) f_0(\vec{x}_i) & \sum_{i=1}^m f_1(\vec{x}_i) f_0(\vec{x}_i) & \cdots & \sum_{i=1}^m f_p(\vec{x}_i) f_0(\vec{x}_i) \\ \sum_{i=1}^m f_0(\vec{x}_i) f_1(\vec{x}_i) & \sum_{i=1}^m f_1(\vec{x}_i) f_1(\vec{x}_i) & \cdots & \sum_{i=1}^m f_p(\vec{x}_i) f_1(\vec{x}_i) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^m f_0(\vec{x}_i) f_p(\vec{x}_i) & \sum_{i=1}^m f_1(\vec{x}_i) f_p(\vec{x}_i) & \cdots & \sum_{i=1}^m f_p(\vec{x}_i) f_p(\vec{x}_i) \end{pmatrix}, \quad (4.36)$$

so kann man das Gleichungssystem zur Bestimmung der Koeffizienten auch als $A\vec{a} = \vec{z}$ mit der symmetrischen Matrix A im Format $(p + 1) \times (p + 1)$ schreiben. Dieses Gleichungssystem besitzt eine alternative Darstellung. Mit:

$$M = \begin{pmatrix} f_0(\vec{x}_1) & f_1(\vec{x}_1) & \cdots & f_p(\vec{x}_1) \\ f_0(\vec{x}_2) & f_1(\vec{x}_2) & \cdots & f_p(\vec{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_0(\vec{x}_m) & f_1(\vec{x}_m) & \cdots & f_p(\vec{x}_m) \end{pmatrix}, \quad (4.37)$$

findet man zunächst $M^T M = A$, wobei die Matrix M das Format $m \times (p + 1)$ hat. Definiert man:

$$\vec{y}^T = [f(\vec{x}_1), f(\vec{x}_2), \dots, f(\vec{x}_m)] \quad \text{und} \quad \vec{a}^T = [a_0, a_1, \dots, a_p] \quad (4.38)$$

so folgt $M^T \vec{y} = \vec{z}$ und für das zu lösende Gleichungssystem:

$$M^T M \vec{a} = M^T \vec{y} \Rightarrow \vec{a} = (M^T M)^{-1} M^T \vec{y}. \quad (4.39)$$

Mit (4.39) können somit die gesuchten Koeffizienten durch Lösung des Gleichungssystems bestimmt werden. Die Darstellung (4.31) für das Regressionspolynom wurde gewählt, weil die

Funktionen $f_j(\vec{x})$ beliebige Terme aus Tensorprodukten von Polynomen bis zu einer bestimmten Ordnung sein können. Mit den weiter oben bei der Beschreibung der polynomiellen Chaosentwicklung angegebenen Abbruchbedingungen konnten sowohl die Ordnung des Polynomes als auch eine Festlegung auf bestimmte Koeffiziententypen vorgenommen werden. Zunächst findet man, dass es für ein Polynom der Ordnung d mit n erklärenden Variablen:

$$\binom{n+d}{d} \quad (4.40)$$

Koeffizienten gibt. Für ein Polynom 2-ter Ordnung mit n erklärenden Variablen sind dies $p+1$ Koeffizienten:

$$p+1 = \binom{n+2}{2} = 1 + \frac{1}{2}n(n+1) + n. \quad (4.41)$$

Ist $n = 2$, so wird

$$y = f(x_1, x_2) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_1x_2 + a_4x_1^2 + a_5x_2^2 \quad (4.42)$$

und damit $p+1 = 6$ und im Falle von $n = 3$ folgt:

$$\begin{aligned} y = f(x_1, x_2) &= a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3 \\ &+ a_7x_1^2 + a_8x_2^2 + a_9x_3^2 \end{aligned} \quad (4.43)$$

und $p+1 = 10$. Das Ersatzmodell mit 6 Koeffizienten wird an den einfachen Beispielen zur Schwergasausbreitung in Abschnitt 5.1.1 bzw, für die Leichtgasausbreitung mit dem Gaußmodell in Abschnitt 5.2.1 demonstriert. Zum Vergleich werden dort auch Polynome höherer Ordnung angepasst. Verwendet man beispielsweise Polynome 3.(4.) Ordnung, so wären bei $n = 3$ [4] Variablen bereits 20 [35] (35) ([70]) Koeffizienten zu bestimmen. Man erkennt, dass sowohl der numerische Aufwand zu deren Bestimmung wie auch der Stützstellenbedarf rasch mit der Anzahl der Variablen und der Ordnung anwachsen und man einen Kompromiss zwischen Genauigkeit und Aufwand finden muss. Hier wird ein Ersatzmodell mit 10 Koeffizienten für eine CFD-Simulation zu einer Schwergasausbreitung in Abschnitt 5.1.2 verwendet sowie für das industrierelevante Anwendungsbeispiel in Abschnitt 5.2.2.

Wichtung von Datenpunkten und Ausreißern

Ob ein Wert als Ausreißer angesehen werden kann oder nicht, ist oft nicht einfach zu beurteilen. Eine wichtige Grundüberlegung soll jedoch hier durch Diskussion eines einfachen physikalischen Beispielen angegeben werden. Betrachtet man einen physikalischen Zusammenhang, so wird dieser durch eine dimensionshomogene Funktion $y = f(x)$ gegeben. Im einfachsten Fall ist ein solcher Zusammenhang linear wie für den Fall *Weg* s und *Zeit* t bei einer geradlinig gleichförmigen Bewegung: $s \sim t$ bzw. $s = a_0 \cdot t$. Der Koeffizient a_0 hat hier die Dimension einer Geschwindigkeit. Misst man nun in einem physikalischen Experiment während der Bewegung n verschiedene Wege und Zeiten mit geeigneten Messgeräten, so kann man damit die Geschwindigkeit als Anstieg der Geraden durch lineare Regression der Datenpunkte bestimmen. Allerdings werden die Messungen zufällige Messabweichungen zeigen. Eine plausible und überwiegend verwendete Annahme ist, dass zufällige Einflüsse normalverteilte, homokedastische Streuungen verursachen werden. Das bedeutet, dass die Residuen $r_i = y_i - f(x_i)$ nicht gleich groß sein werden, aber aus derselben Normalverteilung $N(0, \sigma)$ folgen. Würde man also den Limes $n \rightarrow \infty$ betrachten, so sollte die Wahrscheinlichkeit für eine Abweichung zwischen wahren Wert der Geschwindigkeit und dem Regressionswert gegen Null streben, bzw. der durch Regression bestimmte Wert eine gute Näherung darstellen. Da man allerdings nur weiß, dass

die Residuen $r_i \sim N(0, \sigma)$ bei unbekanntem σ streuen, kann man nicht einfach willkürlich einen Wert mit einem großen Residuum als Ausreißer ansehen. Sind genügend Datenpunkte vorhanden, so können Analysen der Residuen, etwa Analysen zur Größenverteilungen oder Hypothesentests, bei der Entscheidung helfen. Immer sinnvoll ist es daher, hinreichend Messdaten zu bestimmen und eine brauchbare Vermutung über den physikalischen Zusammenhang $y = f(x)$ zu haben.

Bei Verwendung einer Datenwichtung in einem Regressionsmodell wird eingestellt, wie stark sich ein Datenpunkt auf die Regression auswirken soll. Hierbei wird die Wichtung meistens als ein zweistufiges Verfahren ausgeführt. In einem ersten Schritt wird die Minimierungsmethode angewendet, um das Fitpolynom zu bestimmen. Dann können große Residuen identifiziert werden und es folgt eine erneute Anpassung, wobei eine Wichtung nach Größe der Residuen erfolgt. Für diese Methode wird die bestehende Näherungsgleichung wie folgt angepasst:

$$\vec{a} = \left(M^T W M \right)^{-1} M^T W \vec{y}, \quad (4.44)$$

wobei W eine quadratische Diagonalmatrix der Größe $m \times m$ ist. Der Spezialfall ohne Wichtung ist in (4.44) enthalten, wenn man für W die Einheitsmatrix wählt. Für den einfachsten Fall der Entfernung von Ausreißern ist W eine modifizierte Einheitsmatrix, welche jedoch in der Zeile des zu entfernenden Datenpunktes an Stelle der Eins eine Null enthält. Als Alternative kann man eine Funktion für die Wichtung der Werte festlegen. Die Stärke der Wichtung kann indirekt proportional zur Größe des Residuums, bezogen auf die i -te Stützstelle, sein. Ein möglicher Ansatz für die Diagonalelemente von W ist:

$$w_i = \frac{1}{1 + r_i^2}, \quad (4.45)$$

wobei r_i hier der Betrag des i -ten Residuums ist.

Es ist auch möglich, die Wichtungsmatrix ortsabhängig zu definieren. Dies nutzt man, wenn Datenpunkte in der Nähe der Anpassungsstelle am stärksten in die Regression einfließen sollen (lokale Wichtung). Man nennt dieses Vorgehen gleitende gewichtete Regression. Diese Wichtungsmethode benötigt keine vorhergehende Regression und ist somit ein einstufiges Verfahren. Ein möglicher Ansatz für die Diagonalelemente von W ist:

$$w_i = \frac{1}{1 + d_i^2}, \quad (4.46)$$

wobei d_i hier der Betrag des Abstandes der Datenstelle vom Wichtungsort ist. Im Rahmen dieser Arbeit wurden verschiedene Wichtungen getestet, siehe z. B. Kapitel 5. Es zeigte sich, dass die Verwendung der lokalen Wichtung auch zu lokal genaueren Ersatzmodellen führen kann, die jedoch dann nur für Parameterwerte in diesem Bereich geeignet sind.

Überanpassung, Unteranpassung und Varianzanalyse

Allgemein bei Regressionsproblemen ist man damit konfrontiert festzulegen bzw. untersuchen zu müssen, welche Ordnung das Ausgleichspolynom zweckmäßigerweise haben soll oder welche Entwicklungskoeffizienten signifikant/nicht-signifikant sind.

Diese Probleme sollen zunächst an einem einfachen Beispiel demonstriert werden. Für einen Satz von sechs Stützstellen $(x_1, x_2, \dots, x_6) = (0, 1, 2, 3, 4, 5)$ wurden mit dem Zusammenhang $y = f(x) = (x - 2)^2$ sechs Funktionswerte bestimmt, zu denen kleine, normalverteilte Fehler $\Delta y_i = (-0, 2720; 0, 8029; -0, 2271; -0, 07708; 0, 5106; -0, 9961)$ aufaddiert wurden. Die auf diese Weise gewonnenen Wertepaare (x_1, y_1) bis (x_6, y_6) wurden anschließend für die Anpassung von Polynomen 1. bis 5. Ordnung verwendet. Diese sind in Abbildung 4.5 angegeben.

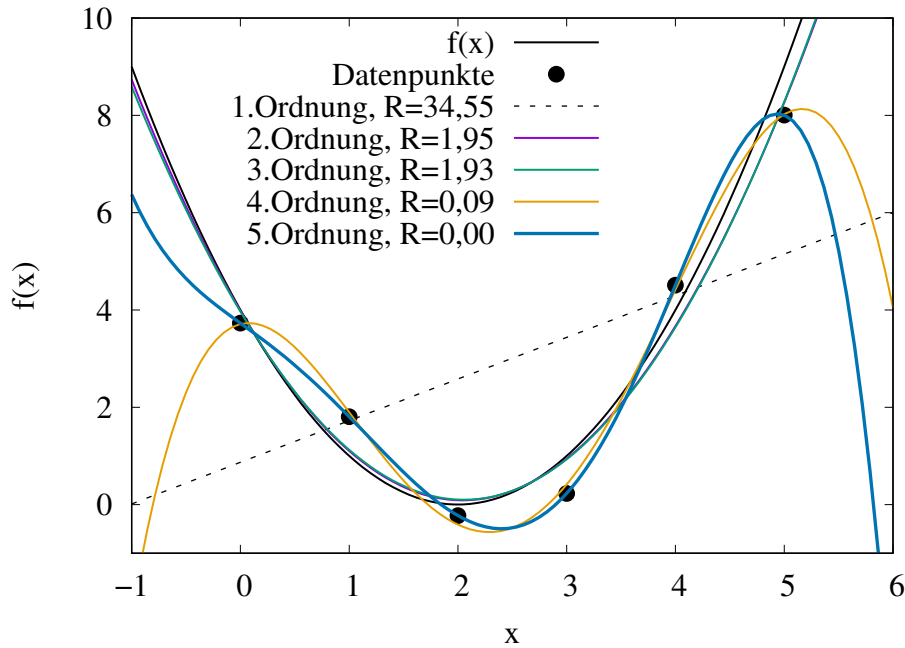


Abbildung 4.5: Illustration von Unteranpassung und Überanpassung bei einem Regressionsproblem. R ist die Summe der Beträge der Residuen.

Man kann der Abbildung entnehmen, dass das Polynom 1. Ordnung den Verlauf der Datenpunkte nicht gut beschreibt und der Trend der Datenpunkte nicht korrekt wiedergegeben wird. Für Extrapolationen könnte man dieses Polynom nicht verwenden. Hier liegt eine Unteranpassung vor. Würde man die Regression wichten, so ließe sich in einem Bereich aber eine lokal brauchbare Näherung erreichen. Das Polynom 2. Ordnung folgt erwartungsgemäß dem Verlauf der Datenpunkte besser, gibt auch global gute Approximationen und eignet sich für Extrapolationen. Die Summe der Residuenquadrate ist zudem deutlich kleiner als für das Polynom 1. Ordnung. Erhöht man die Ordnung des Polynomes weiter, so nimmt die Summe der Residuenquadrate weiter ab und die Kurven schmiegen sich den Punkten besser an. Im Fall des Polynoms 5. Ordnung ist die Residuensumme null und die Kurve verläuft exakt durch die Datenpunkte. Allerdings zeigt das Polynom Oszillationen, die hier nichts mit dem Ausgangsmodell zu tun haben und bei Inter-/Extrapolationen schlechtere Werte vorhersagen, als das Polynom 2. Ordnung, was ein Überanpassungsproblem ist. Kennt man den Zusammenhang $y = f(x)$ nicht und hat eine begrenzte Auswahl an Stützstellen, so ist die Festlegung eines geeigneten Polynomes mitunter nicht naheliegend.

Polynome bzw. Regressionsmodelle 2. Ordnung sind hierbei ein Kompromiss. Zum einen sind sie durch die höhere Parameterzahl anpassungsfähiger als Modelle 1. Ordnung, zum anderen sind Folgen von möglicher Überanpassung noch gering. Ein weiteres Argument ist, dass Ersatzmodelle mit $n > 1$ erklärenden Variablen höherer als 2. Ordnung rasch eine hohe Koeffizientenzahl besitzen. Für das Polynom 2. Ordnung in drei Variablen müssen nach (4.41) 10 Koeffizienten angepasst werden. Für ein allgemeines Polynom der Ordnung d mit n erklärenden Variablen ist die Koeffizientenzahl $\binom{n+d}{d}$, also beispielsweise müssen bei einem Polynom 3. Ordnung in drei Variablen bereits 20 Koeffizienten angepasst werden. Die Beschränkung der Polynomordnung auf 2. Ordnung dient also auch der Limitierung des Rechenaufwandes zur Aufstellung und Nutzung des Ersatzmodells.

Eine Möglichkeit zur Untersuchung der Signifikanz von Entwicklungskoeffizienten bieten Varianzanalysen. In [173] wurden Ersatzmodelle einer Veränderlichen mit polynomieller Chaotentwicklung aufgestellt und die Koeffizientenauswahl der Entwicklung nach orthogonalen Polyno-

4. Modellierung von Unsicherheiten, Response-Surface-Methoden (RSM)

men mit einer Varianzanalyse durchgeführt. Auch wenn in dieser Arbeit einige Fehler gefunden wurden¹², so zeigt die Arbeit, dass Varianzanalysen nützlich sein können, um weitere Vermutungen über das Originalmodell zu finden und in das Ersatzmodell einzufügen. Eine mögliche Varianzanalyse soll im Folgenden demonstriert werden, um das Prinzip zu verdeutlichen und um anzugeben, inwieweit diese Möglichkeiten in dieser Arbeit genutzt wurden. Weitere Details zur Varianzanalyse entnehme man z. B. [185].

Zunächst wurden mit dem Zusammenhang $f(x_1, x_2, x_3) = 1 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$ zwanzig Funktionswerte bestimmt, zu denen normalverteilte Fehler aufaddiert wurden. Die auf diese Weise gewonnenen Wertetupel wurden anschließend für die Anpassung von einem Polynom 2. Ordnung in drei Variablen (10 Koeffizienten) verwendet:

$$\begin{aligned} y(x_1, x_2, x_3) &= a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3 \\ &+ a_7x_1^2 + a_8x_2^2 + a_9x_3^2 \\ &= y_{.0} + y_{.1} + \dots + y_{.9} \end{aligned} \quad (4.47)$$

Für die Hinzunahme normalverteilter Fehler wurde mit einem Zufallszahlengenerator $N(0; 0, 5)$ -verteilte Zufallswerte Δy_i erzeugt und zu den mit (4.47) berechneten y_i hinzuaddiert, um etwas gestreute Wertetupel („Beobachtungen“) $(x_{1i}, x_{2i}, x_{3i}, y_i)$, $i = 1, \dots, 20$ zu erhalten. Anschließend wurde der Regressionsansatz (4.47) verwendet, um mit der Methode der kleinsten Fehlerquadrate die Koeffizienten a_0 bis a_9 zu bestimmen. Mit dem nun bekannten Polynom können die erklärten Wertetupel $(x_{1i}, x_{2i}, x_{3i}, \hat{y}_i)$, $i = 1, \dots, 20$ bestimmt und die Signifikanzanalyse durchgeführt werden. Es soll entschieden werden, welche Koeffizienten signifikant sind und welche nicht. Die Erwartungshaltungen für die Anpassung und für den Signifikanztest sind, dass die Koeffizienten a_1 bis a_6 näherungsweise null und nicht-signifikant und die Koeffizienten a_0 , a_7 , a_8 und a_9 näherungsweise gleich, etwa eins und signifikant sind.

Eine gebräuchliche Methode, das Regressionspolynom auf Signifikanz zu untersuchen, ist die Durchführung von F-Tests [185]. Auf Details zur Begründung dieser Tests soll hier verzichtet und auf die Literatur [185, 186] verwiesen werden. Der hier angegebene Test wurde im Prinzip entsprechend [173] durchgeführt, wenn auch mit anderen Größendefinitionen.

Zunächst sei:

$$R = \sum_{i=1}^n r_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad \text{Summe der Residuenquadrate.} \quad (4.48)$$

Fittet man ein Polynom mit p -Koeffizienten ($k = p-1$ Anstiegskoeffizienten) an n -Datenpunkte, so besitzt R genau $n - p$ -Freiheitsgrade. Das gesamte Polynom besitzt zehn Freiheitsgrade und jeder Term $y_{.j}$, $j = 0, \dots, 9$ einen Freiheitsgrad. Die Teststatistiken lauten nun:

$$F_j = \frac{n-p}{R} \sum_{i=1}^n \hat{y}_{ij}^2, \quad \text{Entscheidung: } F_{(1-\alpha)}(1, n-p)\text{-Quantil} \quad (4.49)$$

$$F_g = \frac{n-p}{R(k+1)} \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=0}^9 \hat{y}_{ij} \right)^2, \quad \text{Entscheidung: } F_{(1-\alpha)}(k+1, n-p)\text{-Quantil} \quad (4.50)$$

Zunächst ergeben sich die verwendeten Wertetupel $(x_{1i}, x_{2i}, x_{3i}, y_i)$, $i = 1, \dots, 20$ zeilenweise

¹²Eine Kontaktaufnahme zum Autor blieb erfolglos. Fehler liegen in der Angabe falscher Funktionswerte, falscher Freiheitsgraddefinitionen und einer falschen graphischen Darstellung.

aus:

$$\vec{x}_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \\ -1 \\ -1 \\ -3 \\ 4 \\ -3 \\ 4 \\ 0 \\ 4 \\ 2 \\ 2 \\ -5 \\ -5 \\ 3 \\ -5 \\ 1 \\ -2 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix} \quad \vec{x}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -4 \\ -4 \\ -3 \\ 2 \\ -5 \\ -4 \\ 0 \\ 5 \\ 1 \\ 3 \\ 3 \\ -3 \\ -1 \\ -5 \\ 2 \\ -3 \\ -4 \\ 4 \\ 4 \end{pmatrix} \quad \vec{x}_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 2 \\ 5 \\ 4 \\ 5 \\ 1 \\ 4 \\ -2 \\ 3 \\ -2 \\ -5 \\ 2 \\ -3 \\ -5 \\ -4 \\ 1 \\ -2 \\ -2 \\ 3 \end{pmatrix} \quad \Delta\vec{y} = \begin{pmatrix} 0,4130 \\ -0,0571 \\ 0,5598 \\ -0,4357 \\ 0,6915 \\ 0,4583 \\ 0,1674 \\ 0,1326 \\ -1,1064 \\ -0,3694 \\ 0,3462 \\ -0,1393 \\ -0,3934 \\ 0,0176 \\ 0,5720 \\ -0,4556 \\ 1,5059 \\ 0,2439 \\ 0,5927 \\ -0,1063 \end{pmatrix} \quad \vec{y} = \begin{pmatrix} 4,4130 \\ 21,9429 \\ 22,5598 \\ 35,5643 \\ 30,6915 \\ 67,4583 \\ 27,1674 \\ 33,1326 \\ 28,8935 \\ 26,6306 \\ 18,3462 \\ 38,8607 \\ 38,6067 \\ 36,0176 \\ 60,5720 \\ 45,5444 \\ 13,5059 \\ 25,2439 \\ 25,5927 \\ 50,8937 \end{pmatrix}. \quad (4.51)$$

Nach der Anpassung folgt für das Polynom:

$$y(x_1, x_2, x_3) = 1,7895 + 0,08654x_1 - 0,06906x_2 - 0,00131x_3 - 0,02941x_1x_2 - 0,01887x_1x_3 + 0,00255x_2x_3 + 1,0024x_1^2 + 0,97642x_2^2 + 0,96668x_3^2. \quad (4.52)$$

Der Koeffizientenvektor lautet also:

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} 1,7895 \\ 0,0865 \\ -0,0691 \\ -0,0013 \\ -0,0294 \\ -0,0189 \\ 0,0026 \\ 1,0024 \\ 0,9764 \\ 0,9667 \end{pmatrix}. \quad (4.53)$$

Die Auswertung der Signifikanzuntersuchung ist in Tabelle 4.1 angegeben. Als Signifikanzniveau für die Entscheidung für oder gegen die Nullhypothese wurde $\alpha = 0.05$ verwendet. Die Hypothesen lauten dabei wie folgt:

H_0 : Alle erklärenden Variablen haben keinen Einfluss auf die abhängige Variable, d. h. die zugehörigen Koeffizienten aus F_j bzw. F_g sind null.

H_1 : Mindestens eine Variable ist signifikant.

Überschreiten die nach (4.49) bzw. nach (4.50) berechneten Werte für F_j bzw. F_g bei gegebenem Signifikanzniveau den kritischen Wert des $F_{(1-\alpha)}(1, n-p)$ - bzw. des $F_{(1-\alpha)}(k+1, n-p)$ -Quantils der Fischer-Verteilung, so verwirft man die Nullhypothese zu Gunsten der Alternativhypothese. Man kann der Tabelle 4.1 entnehmen, dass sowohl das gesamte Polynom, als auch die Koeff-

Tabelle 4.1: F -Test für multivariates Polynom mit 10 Koeffizienten zum Signifikanzniveau $\alpha=0,05$ für die gesamte Regression und für jeden einzelnen Term. Hellgrau bedeutet Ablehnung und dunkelgrau Nichtablehnung der Nullhypothese.

Term	$\sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=0}^9 \hat{y}_{ij} \right)^2, \sum_{i=1}^n \hat{y}_{ij}^2, \mathbf{R}$	Freiheitsgrade	F_g, F_j
Polynom	25586	10	7121,1
y_0	64,046	1	178,25
y_1	1,4903	1	4,1479
y_2	1,0826	1	3,0132
y_3	0,0003	1	0,001
y_4	1,6175	1	4,5017
y_5	0,82289	1	2,2903
y_6	0,015580	1	0,0434
y_7	3612,3	1	10054
y_8	3671,5	1	10219
y_9	3374,4	1	9391,5
Residuen	3,593	10	-

fizienten a_0, a_7, a_8 und a_9 signifikant sind. Die anderen Koeffizienten sind nicht signifikant. Mit (4.53) findet man auch die Erwartungshaltung zu den Beträgen näherungsweise bestätigt. Für dieses konstruierte Beispiel würde die Signifikanzanalyse (wenn beispielsweise nur die Eingangsdaten bekannt wären) weitere Hinweise über die Struktur des Zusammenhanges liefern können.

In dieser Arbeit wurden Signifikanzanalysen beispielsweise verwendet, um für ein Ersatzmodell Parameter, zumindest teilweise, zu entfernen. Für das gezeigte Beispiel könnte man (gedacht des Falles, dass man den funktionalen Zusammenhang nicht kennen würde) als Ersatzmodell demnach ein Polynom 2. Ordnung ohne lineare und gemischte Anteile ansetzen.

4.3.3. Praktische Umsetzung der RSM

Für die Anpassungen von multivariaten Polynomen an Datenpunkte wurde in dieser Arbeit Gleichung (4.44) verwendet. Je nach Anwendung wurden zunächst die Variablen identifiziert, die einer Toleranzanalyse unterzogen werden sollen. Da es sich immer um Ausbreitungsanalysen handelt, stellt sich die Frage, ob die räumlichen Koordinaten Teil des Polynoms sein sollen oder nicht.

Betrachtet man die Gaußsche Schadstoffausbreitung (siehe auch Abschnitt 5.2.1), so findet man, dass die Konzentrationen senkrecht zur Ausbreitungsachse gemäß einer Normalverteilungsdichtefunktion abnehmen. Die Stärke der Turbulenz bzw. die atmosphärische Stabilität wird darin durch unterschiedliche Varianzen wiedergegeben. Im Prinzip sind Normalverteilungsdichtefunktionen durch Polynome beliebig genau approximierbar (Taylorreihenentwicklung), allerdings zeigen alle Anpassungspolynome endlicher Ordnung nicht das typische exponentielle Abklingverhalten. Es bietet sich somit nicht an, den Ort global als Variable im Regressionspolynom aufzunehmen. Letzteres gilt insbesondere, weil die Ordnung der Regressionspolynome auf zwei beschränkt ist. Allerdings kann man auch mit Regressionspolynomen 2. Ordnung eine Normal-

verteilungsdichtefunktion lokal beliebig genau nähern. Zu einer globalen Repräsentation kann man nun gelangen, indem der Ort in passende Intervalle zerlegt wird und für jedes Intervall ein individuelles Regressionspolynom angepasst wird.

Daher wird jeder räumliche Ausbreitungsbereich in Zellen zerlegt. Zu jeder dieser Zellen werden dann hinreichend viele Datensätze aus Variationen der anderen Modellparameter bestimmt, um anschließend für jede Zelle ein Regressionspolynom zu bestimmen. Dieser Satz aus Regressionspolynomen bildet dann insgesamt die Response-Surface.

Führt man CFD-Simulationen aus, so werden die Simulationsergebnisse ohnehin meistens als Mittelwert für jede Gitterzelle ausgegeben. Selbst bei beliebig hoher Anzahl an Gitterzellen können diese unmittelbar für die Aufstellung der Response-Surface benutzt werden.

Für die Zwecke dieser Arbeit wurde ein C++-Programm erstellt, das entsprechende Ausgabedateien aus Simulationsprogrammen (wie etwa aus OpenFOAM oder aus ANSYS) einlesen kann. In diesem Programm spezifiziert der Nutzer zunächst Anzahl n der erklärenden Variablen und gibt Listen für deren Stützstellenwerte ein. Im Programm wird z. B. für $n = 3$ darauffolgend ein Polynom mit 3 Variablen und 10 Parametern für die Regression genutzt:

$$a_0 + a_1u + a_2q + a_3w + a_4u^2 + a_5q^2 + a_6w^2 + a_7uq + a_8uw + a_9qw. \quad (4.54)$$

Aus den Listen für die 3 Variablen, hier u , v und w mit $u \in \{u_1, u_2, \dots, u_m\}$, $v \in \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ und $w \in \{w_1, w_2, \dots, w_p\}$ bezeichnet¹³, entnimmt das Programm die nötigen Informationen zur Identifizierung der Einträge der Input-Datei. Diese hat einen festen Aufbau. Zunächst zerlegt man das räumliche Gebiet:

$$\begin{aligned} [x_{min}, x_{max}] &: i\text{-Intervalle für } x\text{-Richtung} \\ [y_{min}, y_{max}] &: j\text{-Intervalle für } y\text{-Richtung} \\ [z_{min}, z_{max}] &: k\text{-Intervalle für } z\text{-Richtung.} \end{aligned} \quad (4.55)$$

Die Input-Datei ist dann eine $(i \cdot j \cdot k) \times (m \cdot n \cdot p + 3)$ -Matrix:

$$\begin{pmatrix} x_1 & y_1 & z_1 & f(u_1, v_1, w_1|x_1, y_1, z_1) & \cdots & f(u_m, v_n, w_p|x_1, y_1, z_1) \\ x_1 & y_1 & z_2 & f(u_1, v_1, w_1|x_1, y_1, z_2) & \cdots & f(u_m, v_n, w_p|x_1, y_1, z_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_i & y_j & z_k & f(u_1, v_1, w_1|x_m, y_n, z_p) & \cdots & f(u_m, v_n, w_p|x_m, y_n, z_p) \end{pmatrix} \quad (4.56)$$

Die Reihenfolge der Einträge in (4.56) muss beachtet werden, um die richtige Zuordnung zwischen den Parameterkombinationen und Koeffizienten zu haben. Es wird so vorgegangen, dass zuerst die Variable w ihre Stützstellen durchläuft, wobei die Variablen u und v ihren Index (u_1 und v_1) behalten. Dies liefert die Parametersätze u_1, v_1, w_1 bis u_1, v_1, w_p . Nach einem Durchlauf von w_1 bis w_p ändert sich der Index der zweiten Variable v und es folgen die Parametersätze u_1, v_2, w_1 bis u_1, v_2, w_p . Der beschriebene Ablauf wird bis zum Durchlaufen aller Parameterkombinationen wiederholt. Nach dem Einlesen der Anzahl n der erklärenden Variablen und der zugehörigen Listen kann die Matrix M aus (4.44) aufgestellt werden. Die Matrix M ist eine $(m \cdot n \cdot p \times 10)$ -Matrix, mit der $(M^T M)^{-1}$ bestimmt wird. Zudem ist M für jede räumliche Zelle des Gitters identisch, so dass die Berechnung der Inversen (10×10) -Matrix (für den hier betrachteten Fall) nur einmal erfolgen muss. Mit der Input-Datei kann der Vektor \vec{y} aus (4.44) für jede Zeile (jede räumliche Zelle) aufgestellt werden.

Die zuvor genannten Arbeitsschritte werden im C++-Programm parallel ausgeführt. In einer vom Nutzer zu modifizierenden Steuerungsdatei können beliebige Polynomordnungen und Variablenzahlen ausgewählt werden, vorausgesetzt die einzulesende Eingangsdatei (Inputdatei) passt zu den Eingaben. Das Programm schätzt auch den prognostischen Speicherbedarf

¹³Die Umbenennung der erklärenden Variablen wurde hier vorgenommen, damit die Variablen x , y und z als Raumkoordinaten verwendet werden können.

4. Modellierung von Unsicherheiten, Response-Surface-Methoden (RSM)

und damit die Durchführbarkeit auf dem verwendeten Computersystem ab. Zunächst werden die Zeilen der Input-Datei auf eine verfügbare Anzahl von Prozessoren aufgeteilt, welche dann jeder für sich nach (4.44) die Koeffizienten bestimmen und ausgeben. Diese Parallelisierung ist dabei ideal, weil die Prozesse keine Daten austauschen müssen und der parallele Algorithmus bis zu hoher CPU-Zahl sehr gut skaliert. In der Ausgabedatei werden zu jeder räumlichen Zelle die Koeffizienten des Regressionspolynomes ausgegeben. Ein weiterer Programmteil kann, je nach Festlegung in der Steuerdatei, mit diesen Regressionspolynomen Analysen durchführen:

- Durchführung von Stützstellenberechnungen,
- Identifikation von Einflussvariablen hoher bzw. niedriger Signifikanz und Identifikation von Koeffizienten hoher bzw. niedriger Signifikanz im Rahmen von Varianzanalysen,
- Durchführung von Monte-Carlo- bzw. Latin-Hypercube-Analysen,
- Ausgabe von räumlichen Konzentrationsprofilen.

Ein vereinfachtes Flussdiagramm zum C++-Programm zeigt Abbildung 4.6.

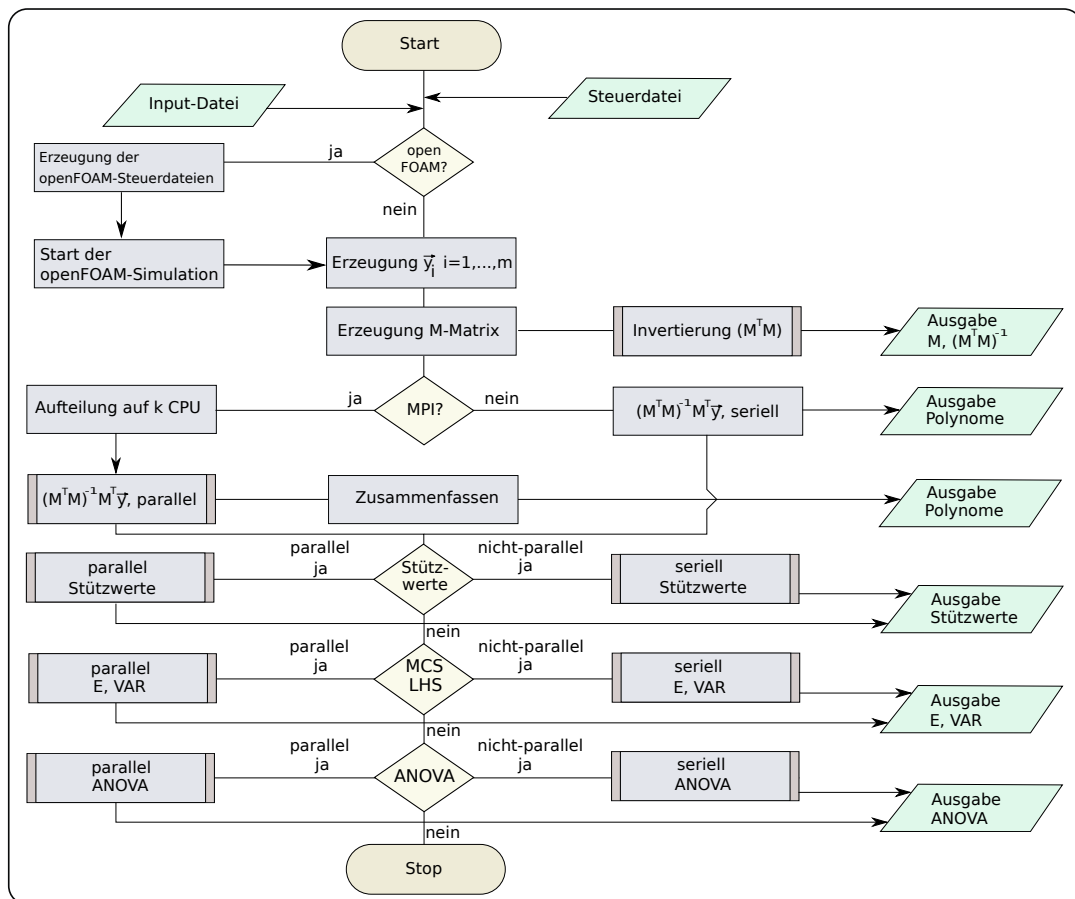


Abbildung 4.6: Vereinfachtes Ablaufschema zum Programm (C++) zur Polynomenbestimmung und für Folgeuntersuchungen.

Hier soll noch angemerkt werden, dass dem Programm ein Makefile beiliegt, mit dem eine Compilierung auf verschiedenen Systemen gelingen kann. Eine ausführliche Dokumentation wurde im Rahmen einer Masterarbeit erstellt und liegt dem Programm bei. Die ausgegebenen räumlichen Konzentrationsprofile können zudem für Visualisierungen, z. B. mit ParaView [187], genutzt werden.

5. Beispiele für Ausbreitungsanalysen mit Response-Surface-Methoden

In diesem Kapitel werden die zuvor angegebenen Methoden angewendet. Es stehen Ausbreitungen von schweren (Abschnitt 5.1), neutralen und leichten Gasen (Abschnitt 5.2) im Vordergrund, wie sie auch bei Störfallfreisetzungen vorliegen können. Zielgröße ist die Konzentration der freigesetzten Gase in Abhängigkeit vom Ort, von Quelleigenschaften und zahlreichen weiteren Parametern. Die Modellierung von Schwergas- und Leichtgasausbreitungen unterscheiden sich voneinander, was in der stark unterschiedlichen Beeinflussung der Luftströmung begründet liegt. Die Dichte schwerer Gase ist hierbei höher als die der Umgebungsluft, so dass diese nach der Freisetzung absinken und sich bodennah ausbreiten. Gleichzeitig sinken die Gase in Richtung abnehmender Strömungsgeschwindigkeit und Turbulenz und stören das Turbulenzverhalten der Luftströmung. Derzeitig werden Störfallfreisetzungen schwerer Gase mit dimensionsanalytischen Modellen betrachtet [35]. Für die Demonstration der im Kapitel 4 angegebenen Methoden soll hier ein vergleichbares Modell von Britter-McQuaid [34] als Einstieg verwendet werden. Höhere Genauigkeiten werden von CFD-Modellen erhofft, welche derzeitig noch im Entwicklungsstadium sind¹. Als zweites Beispiel soll eine Schwergasausbreitung in einem Bauungsgebiet XIX nach [35] betrachtet werden, welches mit einem CFD-Modell untersucht wurde.

Neutrale und leichte Gase haben die gleiche bzw. eine kleinere Dichte als die Umgebungsluft. Hinreichend ist dann die Annahme eines passiven Mittransportes mit der Umgebungsströmung. Standard hier sind Modelle, welche auf einer Advektions-Diffusions-Gleichung beruhen wie etwa Gaußmodelle [33]. Ein einfaches Gaußmodell wird hier als Einstiegsbeispiel zur Demonstration der Methoden aus Kapitel 4 benutzt. Für höhere Genauigkeiten sind wiederum CFD-Modelle nötig (vgl. Abschnitt 4.1.4). Als Demonstrationsbeispiel wird diesbezüglich das industrierelevante Anwendungsbeispiel benutzt, ohne jedoch das Anwendungsproblem detailliert zu erörtern. Letzteres wird im Kapitel 6 vorgenommen. Hauptziel dieses Kapitels ist es zu zeigen, dass nichttriviale Ausbreitungsproblemstellungen recht genau auf Ersatzmodelle abgebildet und umfassende Parameterstudien oder Fehlerbetrachtungen daran durchgeführt werden können. Bei den jeweils zum Einstieg gewählten Modellen könnten diese Betrachtungen zwar noch am Originalmodell vorgenommen werden, jedoch nicht bei den CFD-Anwendungsfällen. **Zusammenfassung:** In diesem Kapitel werden Ersatzmodelle für Parameterstudien zu Schwer- und Leichtgasausbreitungen aufgestellt, bei denen die ortsabhängige Konzentration der freigesetzten Gase von unsicheren Modellparameter abhängig ist. Die Demonstration erfolgt jeweils an einem einfachen Modell auf dem Niveau des Standes der Technik und anschließend an einem CFD-Ausbreitungsproblem.

5.1. Schwergasausbreitungen

5.1.1. Schwergasausbreitung nach Britter-McQuaid

Das Schwergasausbreitungsmodell nach Britter-McQuaid wurde für die folgenden Betrachtungen wegen seiner Einfachheit ausgewählt. Eine Begründung des Modells mittels Dimensionsanalyse und Hinweise zur Bestimmung der unbekanntenen Funktion einer dimensionslosen Parame-

¹Als schwierig erweist sich die Beschreibung der bodennahen Strömungs- und Turbulenzeigenschaften, welche sehr vom konkreten Untergrund bestimmt werden.

5. Beispiele für Ausbreitungsanalysen mit Response-Surface-Methoden

terkombination sind im Anhang A angegeben. Daher soll für eine Erklärung der Modellgrößen und auch für die Modellanwendung selbst auf diesen Anhang verwiesen werden. Übliches Anwendungsziel ist die Bestimmung von Entfernungen in Windrichtung zur Quelle, bei der die Konzentration eines freigesetzten Gases einen bestimmten Schwellenwert unterschreitet. Dieser Schwellenwert kann durch Explosionsgrenzen (überwiegend die Untere Explosionsgrenze (Lower Explosive Limit, LEL) (UEG)) entzündbarer Gase, durch Toxizitätsgrenzen oder durch die Kopplung mit einem anderen Modell gegeben sein. Falls für die Ausbreitung eine bestimmte Konzentration (üblich sind 1% [35]) deutlich unterschritten werden muss, nimmt man mitunter eine Kopplung mit einem Leichtgasmodell vor. Angemerkt werden soll, dass alle folgenden Betrachtungen mit einem dafür erstellten C++-Programm durchgeführt wurden.

Innerhalb des Modells von Britter-McQuaid unterscheidet man plötzliche und kontinuierliche Freisetzungsszenarien. Hier werden nur Letztere betrachtet. Für diese ist die Entfernung zur Quelle x_w , bei der eine bestimmte Konzentration w erreicht wird, eine Funktion der Gasdichte ρ_g , der Windgeschwindigkeit u und des Quellvolumenstromes q_0 :

$$x_w = f(\rho_g, u, q_0), \text{ mit: } g_0 = g \frac{\rho_g - \rho_a}{\rho_a} \text{ gilt auch: } x_w = f(g_0, u, q_0). \quad (5.1)$$

Zunächst sollen für dieses Modell mit der Abbildung 5.1 einige Abhängigkeiten diskutiert werden. Stellvertretend wurde hier die Entfernung bis zur 5%-Konzentration verwendet.

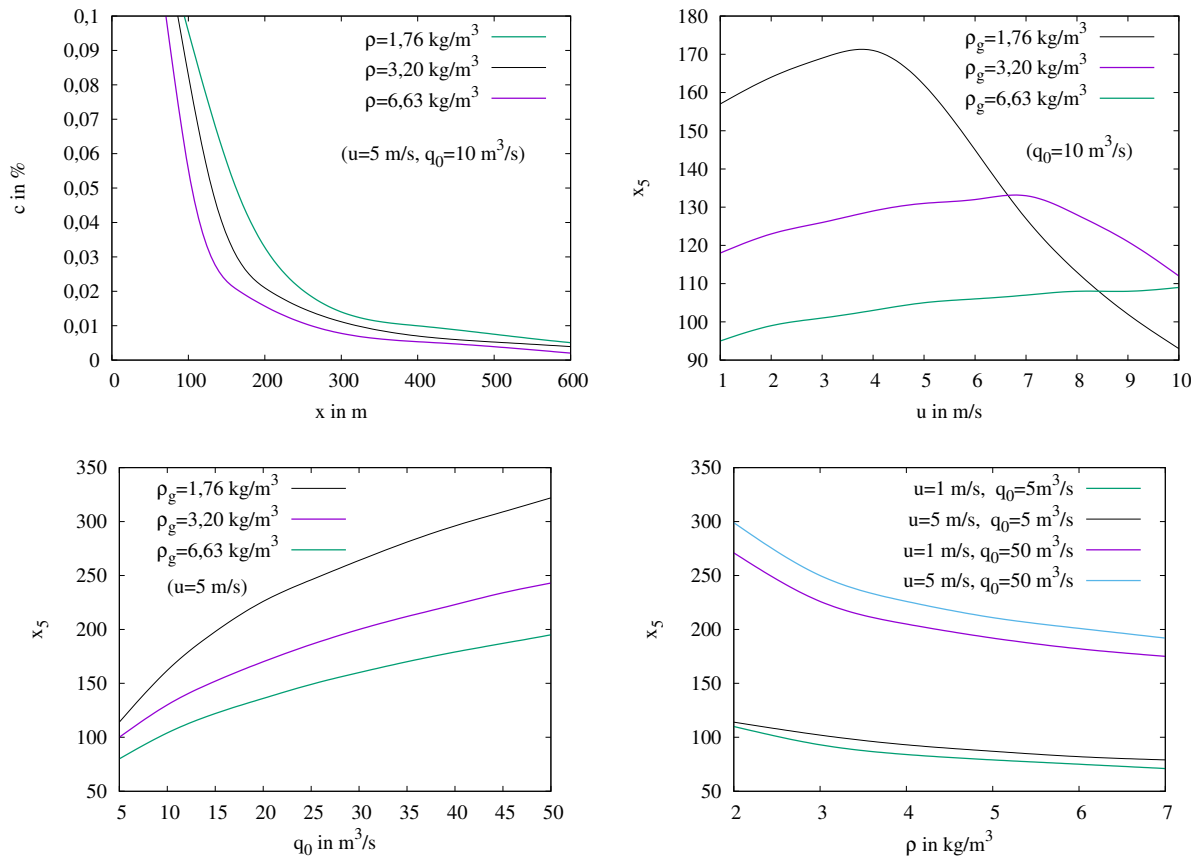


Abbildung 5.1: Illustration verschiedener Abhängigkeiten im Britter-McQuaid Ausbreitungsmodell. Oben links: Konzentration in Abhängigkeit der Entfernung zur Quelle, oben rechts: Entfernung bis zur 5%-Konzentration in Abhängigkeit der Windgeschwindigkeit, unten links: Entfernung bis zur 5%-Konzentration in Abhängigkeit des Quellvolumenstromes und unten rechts: Entfernung bis zur 5%-Konzentration in Abhängigkeit der Dichte.

Oben links ist die Konzentration des Schwergases in Abhängigkeit der Entfernung zur Quelle gezeigt. Hier wird immer angenommen, dass aus der Quelle pures Schwergas ausströmt und sich bodennah ausbreitet. Allgemein könnte aber auch ein verdünntes Gas ausströmen. Je größer die Entfernung zur Quelle ist, desto geringer ist die verbleibende Schwergaskonzentration am Boden. Dieses Verhalten entspricht auch der Erwartung. Anzumerken ist hier, dass die Konzentrationen von leichten Gasen sehr viel stärker mit der Entfernung zur Quelle abnehmen würden. Hier zeigt sich demnach eine Besonderheit in der Ausbreitung schwerer Gase. Bei der gewählten Geschwindigkeit nimmt die Gaskonzentration jedoch umso schneller ab, je dichter das Gas ist. Würde man die Geschwindigkeit erhöhen, so würde sich dieses Verhalten ändern, was man an der Abbildung oben rechts erkennen kann. Grundsätzlich findet man, dass die gezeigten Abhängigkeiten weniger markant verlaufen, wenn die Gasdichte zunimmt. Bei hoher Gasdichte ändert sich beispielsweise die Entfernung bis zur 5%-Konzentration kaum mit der Windgeschwindigkeit (im gezeigten Bereich). Dies kann so verstanden werden, dass mit zunehmender Gasdichte Schwergaseffekte stärker ausgeprägt sind und weniger Dispersion stattfindet. Höher ist dagegen die Geschwindigkeitsabhängigkeit bei geringerer Schwergasdichte.

Die Abbildung unten links zeigt die Entfernung bis zur 5%-Konzentration in Abhängigkeit des Quellvolumenstromes. Auch hier sind die Entfernungsbereiche von der Gasdichte abhängig und für das dichteste Gas am schwächsten ausgeprägt. Wie man der Abbildung unten rechts entnehmen kann, ist die Entfernung bis zur 5%-Konzentration, bei fixierten Geschwindigkeiten und Quellvolumenströmen, kaum bis moderat dichteabhängig, wenig von der Geschwindigkeit jedoch stark vom Quellvolumenstrom.

Insgesamt kann erwartet werden, dass sich die Abhängigkeiten durch Polynome 2. Ordnung beschreiben lassen sollten, wobei die q_0 -Abhängigkeiten stärker ausgeprägt sein werden, als die u - bzw. ρ_g -Abhängigkeiten. Auch kann erwartet werden, dass die Anpassung für kleinere Schwergasdichten weniger genau sein wird, als für höhere Schwergasdichten.

Zur Erstellung von Ersatzmodellen wurden zunächst die Konzentrationen 1% und 5% ausgewählt. Hierbei könnte es sich um Explosionsgrenzen, um Toxizitätsgrenzen oder wie hier einfach um Betrachtungswerte handeln. An diesen Werten soll nur das Prinzip demonstriert werden, wobei andere Konzentrationen genauso geeignet wären. Für die Windgeschwindigkeit $u \in [1 : 10] \text{ ms}^{-1}$ in Schritten zu 1 ms^{-1} und für den Quellvolumenstrom $q_0 \in [5 : 50] \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ in Schritten zu $5 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ werden 100 Kombinationen auf einem Raster bestimmt. Für diese 100 Kombinationen werden die Entfernungen in Windrichtung zur Quelle ermittelt, bei der die Restkonzentrationen noch 1% bzw. 5% betragen. Als Schwergas wurde hier Schwefelhexafluorid (SF_6) mit einer Dichte von $\rho_g = 6,63 \text{ kg m}^{-3}$ angenommen. Berechnet man die zugehörigen Entfernungen $x_1 = x_{1\%}(q_0, u | \rho_g)$ bzw. $x_5 = x_{5\%}(q_0, u | \rho_g)$ und stellt diese graphisch dar, so erhält man die in Abbildung 5.2 angegebenen Punkteverteilungen. An diese wurden nun Polynome 2. Ordnung in den Variablen q_0 und u gefittet und als Response-Surfaces in Abbildung 5.2 abgebildet:

$$x_1 = 144.415 + 3.093u + 10.779q - 0.197u^2 - 0.086q^2 + 0.029uq \quad (5.2)$$

$$x_5 = 51.354 + 3.565u + 4.111q - 0.228u^2 - 0.034q^2 + 0.034uq. \quad (5.3)$$

Um die Größe der Abweichungen darzustellen, könnte man die Residuensummen angeben. Hier soll ein Beispiel genügen. Für die Kombination $u = 4 \text{ m s}^{-1}$ und $q_0 = 10 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ folgen:

$$x_1 = 254 \text{ m}, \quad x_{5\%} = 101 \text{ m} \quad (\text{Polynom}) \quad (5.4)$$

$$x_1 = 259 \text{ m}, \quad x_{5\%} = 103 \text{ m} \quad (\text{Originalmodell}) \quad (5.5)$$

Die verwendeten Datenpunkte liegen recht gut auf den Response-Surfaces und zeigen nur schwach ausgeprägte Änderungen im u - und q -Anstiegsverhalten. Die Polynome geben das Originalmodell gut wieder.

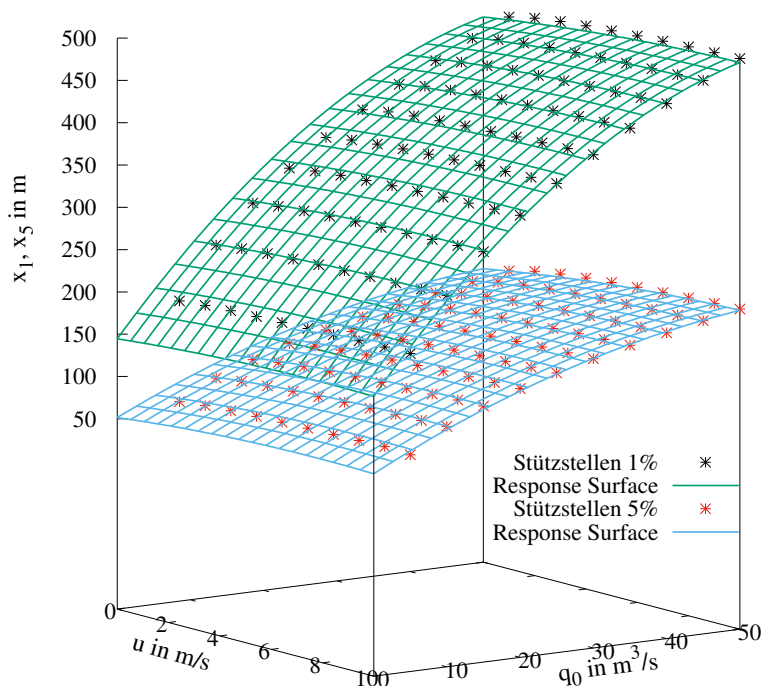


Abbildung 5.2: Darstellung der Entfernungen $x_1 = x_1(q_0, u | \rho_g)$ bzw. $x_5 = x_5(q_0, u | \rho_g)$ für $\rho_g = 6,63 \text{ kg m}^{-3}$ in Abhängigkeit von u und q_0 . Die Punkte wurden mit dem Originalmodell bestimmt. Die gezeigten Flächen sind graphische Darstellungen der Regressionspolynome.

Für den nächsten Vergleich sei angenommen, dass die Freisetzung q_0 gleichverteilt $q_0 \sim U(5, 15)$ und die Windgeschwindigkeit u normalverteilt $u \sim N(4, 1)$ streuen mögen, um eine gewisse Unkenntnis nachzustellen. Originalmodell und Polynome werden nun mit Monte-Carlo-Verfahren gekoppelt, welche solange neue Kombinationen aus den Verteilungen auswählen, bis empirischer Erwartungswert und empirische Standardabweichung hinreichend genau bestimmt sind. Hier konnte nach etwa 1000 Kombinationen abgebrochen werden, weil sich dann keine Veränderungen mehr im Zentimeterbereich ergeben haben. Diese Größenordnung in der Genauigkeit ist zudem für Sicherheitsabstände ohnehin nicht relevant. Die Verwendung von LHS war nicht erforderlich, da dieses einfache Monte-Carlo-Sampling in Sekunden durchführbar ist. Es ergaben sich:

$$x_1 = 253 \text{ m} \pm 27 \text{ m}, \quad x_5 = 102 \text{ m} \pm 11 \text{ m} \quad (\text{Polynom}) \quad (5.6)$$

$$x_1 = 257 \text{ m} \pm 30 \text{ m}, \quad x_5 = 102 \text{ m} \pm 12 \text{ m} \quad (\text{Originalmodell}). \quad (5.7)$$

Sowohl die empirischen Erwartungswerte als auch die empirischen Standardabweichungen stimmen gut überein.

Nimmt man an, dass auch die Dichte des Schwergases nicht genau bekannt ist, so kann diese als ein weiterer Parameter aufgenommen werden. Mit den 100 Kombinationen aus u und q_0 wurden nun für $\rho_g \in \{2, 3, 4, 5, 6, 7\} \text{ (kg m}^{-3}\text{)}$ insgesamt 600 Parametersätze (u, q_0, ρ_g) mit dem Modell bestimmt und Polynome 2. Ordnung in 3 Variablen daran angepasst. Als Beispiel

soll hier das Polynom für die Entfernung bis zur 5%-Konzentration angegeben werden:

$$x_5 = 135,184 + 1,632u + 6,171q_0 - 27,280\rho_g - 0,620u^2 - 0,041q_0^2 + 1,983\rho_g^2 + 0,065uq_0 + 0,948u\rho_g - 0,293q_0\rho_g. \quad (5.8)$$

Zum Vergleich sei erneut $q_0 \sim U(5, 15)$, $u \sim N(4, 1)$ und zusätzlich $\rho_g \sim N(6, 1)$ angenommen, um eine gewisse Unkenntnis nachzustellen. Originalmodell und Polynome wurden wieder mit entsprechenden Monte-Carlo-Verfahren gekoppelt. Es ergaben sich:

$$x_5 = 106 \text{ m} \pm 12 \text{ m} \quad (\text{Polynom}) \quad (5.9)$$

$$x_5 = 106 \text{ m} \pm 13 \text{ m} \quad (\text{Originalmodell}). \quad (5.10)$$

Man findet erneut eine gute Übereinstimmung. Dies liegt jedoch daran, dass die Parameterkombination in einem Bereich liegt, wo die Anpassung zwischen Polynom und Modell sehr gut ist. Dies ist in Abbildung 5.3 illustriert. Durch die Stützstellenauswahl über weite Bereiche von

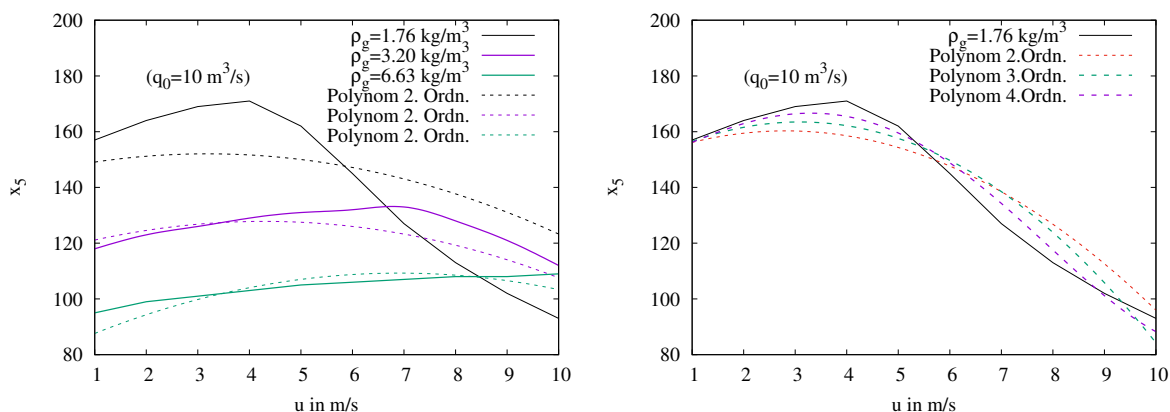


Abbildung 5.3: Illustration der Anpassung der Polynome (gestrichelte Linien) an das Britter-McQuaid-Modell (durch die Gasdichten gekennzeichnet). Links: für unterschiedliche Gasdichten und Polynome 2. Ordnung, rechts: für $\rho_g = 1,76 \text{ kg m}^{-3}$ und Polynome 2., 3., und 4. Ordnung auf einem eingeschränkten Parameterbereich.

u , q_0 und ρ_g ist die Anpassung nur für mittlere bis hohe Werte der Gasdichte gut. Kleinere Gasdichten werden weitaus schlechter wiedergegeben.

Ändert man jedoch die Parameterbereiche für die Stützstellenauswahl, z. B. $u \in [1 : 10] \text{ ms}^{-1}$ in Schritten zu 1 ms^{-1} , $q_0 \in [5 : 15] \text{ m}^3\text{s}^{-1}$ in Schritten zu $0,1 \text{ m}^3\text{s}^{-1}$ und $\rho_g \in [2, 3] \text{ kg m}^{-3}$ in Schritten zu 1 kg m^{-3} , so findet man eine deutlich bessere Anpassung in diesem Bereich, insbesondere bei Vergrößerung der Polynomordnung, wie rechts in Abbildung 5.3 gezeigt ist. Für das Polynom 3. Ordnung wurden hierzu 20 Koeffizienten und für das Polynom 4. Ordnung 35 Koeffizienten ermittelt. Auf eine Auflistung der Koeffizienten bzw. auf eine explizite Angabe der Polynome soll hier verzichtet werden². Offensichtlich kann das Modell von Britter-McQuaid im Prinzip gut durch Response-Surface-Modelle approximiert werden. Nur wird man hier dennoch die Polynome nicht als Ersatzmodell verwenden, weil jede gezeigte Form der Unsicherheitsanalyse leicht mit dem Originalmodell durchgeführt werden könnte. Man hätte zwar eine alternative Repräsentation des Modells, aber noch keinen Bearbeitungsvorteil. Dies kann anders sein, wenn die Modellgleichungen nicht explizit vorliegen, wie im Fall der Schwergasausbreitung im nächsten Abschnitt.

²Erwähnenswert ist jedoch, dass die Polynome nicht durch Inversion der im Abschnitt 4.3.3 definierten Matrix M bestimmt wurden, sondern iterativ mit einem Levenberg-Marquard-Verfahren. Dieses Verfahren kann im C++-Programm alternativ gewählt werden. Ist die Koeffizientenzahl wie hier deutlich größer als zehn, so ist eine Inversion von M ohnehin nicht sinnvoll. Das Iterationsverfahren ist dann zudem deutlich schneller.

5.1.2. CFD-Simulation einer Schwergasausbreitung im Bebauungsgebiet XIX nach VDI 3783

In diesem Abschnitt soll eine Anwendung der RSM für eine CFD-Schwergasausbreitungssimulation gezeigt werden. Wie bereits mehrfach angegeben, werden in Deutschland für Untersuchungen zur Störfallfreisetzung schwerer Gase Modelle verwendet, welche auf dimensionsanalytischen Ansätzen beruhen [35]. Das zuvor betrachtete Modell von Britter-McQuaid (Herleitung siehe Anhang A) zeigt hierzu die prinzipielle Verfahrensweise. Die dimensionsanalytischen Betrachtungen erfordern grundsätzlich die experimentelle Bestimmung von Funktionen dimensionsloser Potenzprodukte der Einflussvariablen. Für das Modell von Britter-McQuaid waren dies Freilandversuche u. a. in Thorney Island [34], wobei für die Validierung der VDI 3783-2 Messungen im Windkanal durchgeführt wurden.

In der zitierten Richtlinie werden für die Abschätzung der Schwergasausbreitung verschiedene Ausbreitungsgebiete unterschieden³. In praktischen Anwendungen muss zunächst das Ausbreitungsgebiet ausgewählt werden, dass der Problemstellung am ähnlichsten ist. Anschaulich ist klar, dass dies praktisch immer eine sehr grobe Anpassung darstellt, da lokale Besonderheiten in Gelände und Architektur ebensowenig berücksichtigt werden können wie präzise Freisetzungsszenarien und -umstände.

Mittels CFD-Simulationen lassen sich sowohl die tatsächliche Bebauungssituation als auch die Freisetzung wesentlich genauer erfassen. Langfristiges Ziel wird es auch hier sein, den Stand der Technik in Richtung der Verwendung von CFD-Simulationen zu erhöhen. Die Untersuchung von Schwergasausbreitungen mit CFD-Simulationen ist nicht unproblematisch, da die Schwergasereffekte, besonders in der Anfangsphase der Ausbreitung, die Turbulenzeigenschaften der anströmenden Luft stark beeinflussen. Des Weiteren erfolgt die Ausbreitung bodennah, womit eine genaue Erfassung und Berücksichtigung der überströmten Oberfläche (Rauigkeit, Rauigkeitselemente) erforderlich ist. Die Anwendung von OpenFOAM zu diesem Zwecke ist Gegenstand einer Forschungskoopeation⁴ innerhalb einer Promotion (BAM). Im Rahmen dieser Kooperation wurde die Möglichkeit der Unsicherheitsmodellierung über Response-Surface-Methoden einbezogen. Hierfür wurde das Ausbreitungsgebiet XIX (ebenes Gelände mit gleichförmiger Bebauung) gewählt. In OpenFOAM wurde der Solver *rhoReactingBuoyantFoam* (OpenFOAM 5.0) mit einem modifizierten *k-ε*-Turbulenzmodell verwendet, mit welchem eine genaue Beschreibung der bodennahen atmosphärischen Grenzschichtströmung angestrebt ist.

Für weitere Details muss hier auf die Forschungskoopeation verwiesen werden. Ziel dieses Abschnittes ist es zu zeigen, dass sowohl eine Ergebnisdarstellung wie auch eine Unsicherheitsmodellierung über Response-Surface-Methoden erfolgen kann. Hierzu sind zunächst in Abbildung 5.4 das Bebauungsgebiet XIX und das CFD-Gitter visualisiert. Das Ausbreitungsgebiet ist hierbei ein ebenes Gelände, welches mit würfelförmigen Strukturen regelmäßig überzogen ist. Es wurde ein kontinuierliches Freisetzungsszenario angenommen. Dann entspricht die Höhe der Bebauung dem halben seitlichen Abstand. Die Größen und Abstände werden in Einheiten L_{cc} angegeben, was hierbei der charakteristischen Länge der kontinuierlichen Freisetzung (mit den im Anhang A definierten Größen ist dies $\sqrt[5]{\frac{q_0^2}{g_0}}$) entspricht. Die konkreten Abmessungen sind hier 6,5 m für die Kantenlänge der Kuben und 13 m für deren Abstand. Die Abmessungen des Simulationsgebietes sind 300 m × 100 m × 100 m (Länge, Breite, Höhe). Es handelt sich um ein blockstrukturiertes Gitter mit 1205299 Zellen, von denen wandnahe Zellen 0,25 m und wandferne Zellen 2 m Kantenlänge besitzen.

Als Parameter für die Erstellung der Response-Surface wurden die Windgeschwindigkeit $u \in \{2; 3; 6; 8; 10\} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ und die Bodenrauigkeit $z_0 \in \{0, 1; 0, 2; 0, 3; 0, 4; 0, 5\} \text{ m}$ in dem angegebenen Rasterbereich verwendet. Für den Vergleich zwischen Response-Surface und Originalmodell

³Diese sind für die Ausbreitungsgebiete VI bis XXV als Ergänzungsblätter publiziert.

⁴Kooperation zwischen dem meteorologischen Institut der Universität Hamburg [188], der Bundesanstalt für Materialforschung und -Prüfung (BAM, Abteilung 2.1)[189] und der Arbeitsgruppe des Autors.

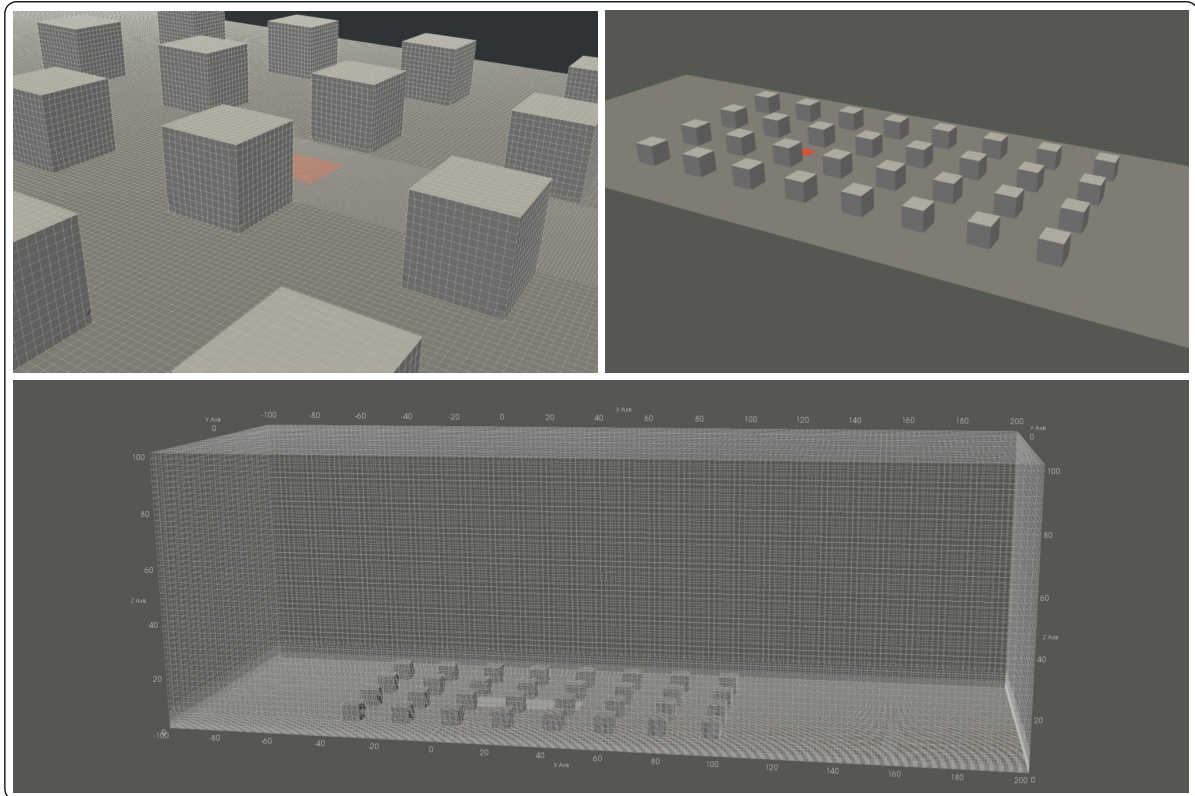


Abbildung 5.4: Darstellung des Ausbreitungsgebietes XIX nach VDI 3783-2 [35] und des für die CFD-Simulation (OpenFOAM) verwendeten Gitters.

wurden die Werte $u = 4 \text{ m s}^{-1}$ und $z_0 = 0,5 \text{ m}$ ausgewählt und 1205299 Polynome 2. Ordnung in den Variablen u und z_0 angepasst. In Abbildung 5.5 sind Schnittbilder illustriert. Hierbei werden Longitudinal-, Lateral- und Horizontalschnitte mittig durch die Quelle gezeigt. Die Höhe über dem Boden beträgt $z = 1,0 \text{ m}$. Links findet man die Ergebnisse aus der CFD-Simulation und rechts die Ergebnisse mit der Response-Surface. Die Legende zeigt die Konzentration als Anteil zur Quellkonzentration.

Man erkennt eine sehr gute Übereinstimmung, welche auch für hier nicht gezeigte Parameterkombinationen erhalten bleibt. In der Abbildung 5.6 sind weitere Schnittbilder gezeigt, bei denen die horizontalen Schnitte in verschiedenen Höhen angefertigt wurden. Man erkennt erneut eine sehr hohe Übereinstimmung, so dass auch hier davon ausgegangen werden kann, dass die Ersatzmodellierung für weitergehende Untersuchungen zur Schwergasausbreitung geeignet ist. Die hierfür erforderlichen Polynome wurden vom verwendeten C++-Programm auf einem Kern einer core i9 9900K @3.6 GHz CPU innerhalb von 9s bestimmt und benötigen 0,6 GB Festplattenspeicher. Die Zeit für eine CFD-Simulation betrug dagegen etwa 10 h. In Abbildung 5.7 sind die Anpassungspolynome für eine ausgewählte Zelle abgebildet. Hierfür wurde $z_0 = 0,3 \text{ m}$ konstant gehalten und die Konzentration in Abhängigkeit der Windgeschwindigkeit dargestellt. Man kann erkennen, dass die Polynome die Daten sehr gut interpolieren. Insbesondere die Daten, welche zu den angrenzenden Bodenrauigkeiten von $z_0 = 0,2 \text{ m}$ und $z_0 = 0,4 \text{ m}$ gehören, sind klar von den Polynomen zu $z_0 = 0,3 \text{ m}$ abgrenzbar. In diesem Sinne können die Polynome die Abhängigkeit von z_0 auflösen. Dies bleibt ebenso auch für andere, hier nicht gezeigte Zellen erhalten.

Für das Ersatzmodell 2. Ordnung wurde Monte-Carlo- und Latin-Hypercube-Sampling durchgeführt. Als Abbruchbedingung wurde programmiert, dass mindestens die ersten beiden Stellen signifikant sein sollen. Als Verteilungsfunktionen wurde $u \sim N(4, 1)$ und $z_0 \sim U(0,2, 0,4)$ angenommen. In Abbildung 5.8 sind erneut Konzentrationsprofile durch Schnittbilder gezeigt,

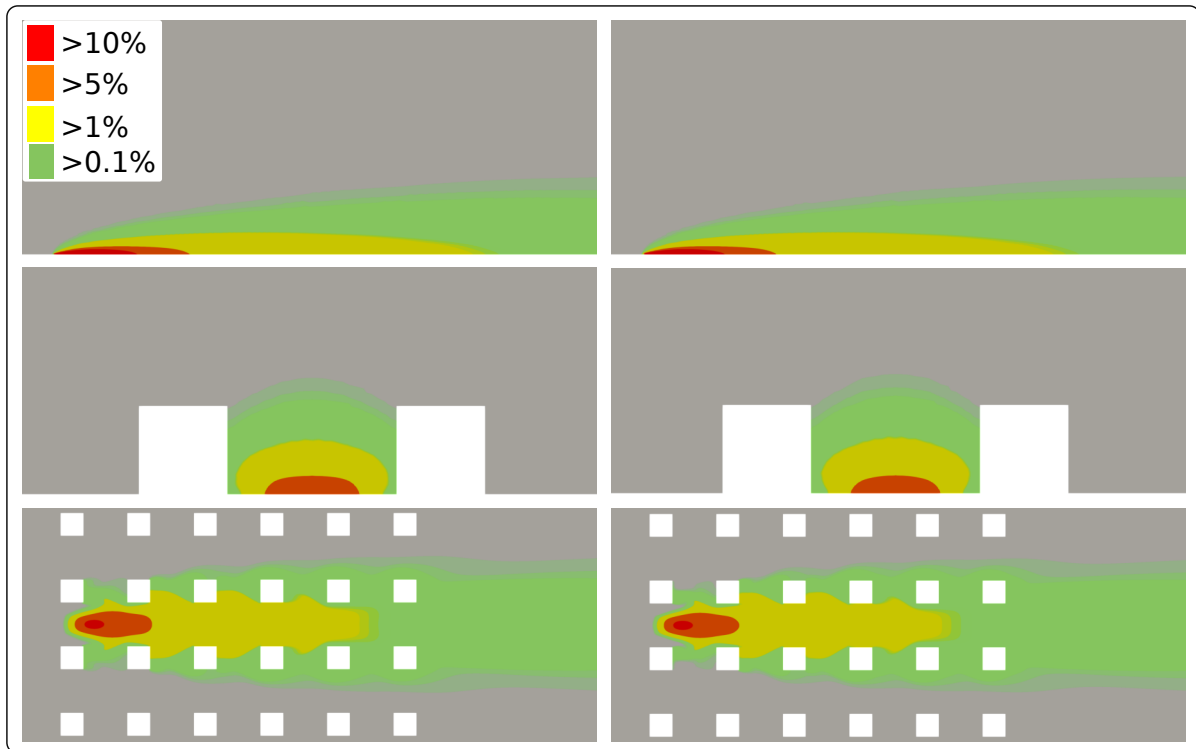


Abbildung 5.5: Gegenüberstellung von räumlichen Visualisierungen und Schnittbildern zur Schwergasausbreitung im Bebauungsgebiet XIX. Links: Response-Surface, rechts: CFD-Simulation (OpenFOAM) für die Werte $u = 4 \text{ m s}^{-1}$ und $z_0 = 0,5 \text{ m}$.

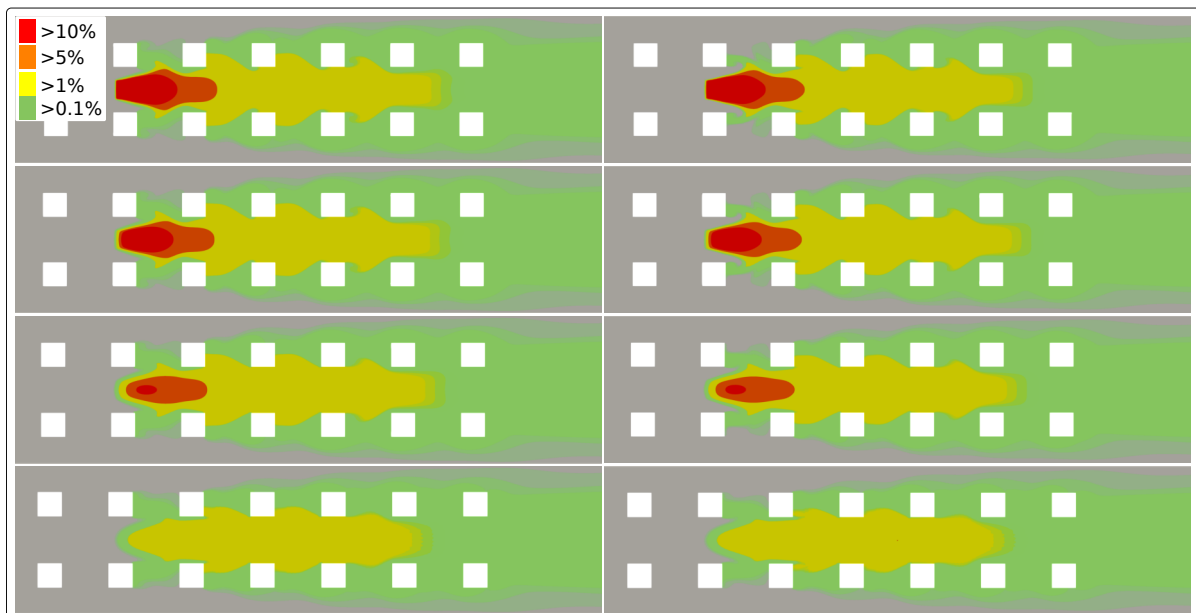


Abbildung 5.6: Gegenüberstellung von räumlichen Visualisierungen und Schnittbildern zur Schwergasausbreitung im Bebauungsgebiet XIX. Links: Response-Surface, rechts: CFD-Simulation (OpenFOAM) für die Werte $u = 4 \text{ m s}^{-1}$ und $z_0 = 0,5 \text{ m}$ in den Höhen $z = 0,2 \text{ m}$, $z = 0,5 \text{ m}$, $z = 1,0 \text{ m}$ und $z = 2,0 \text{ m}$.

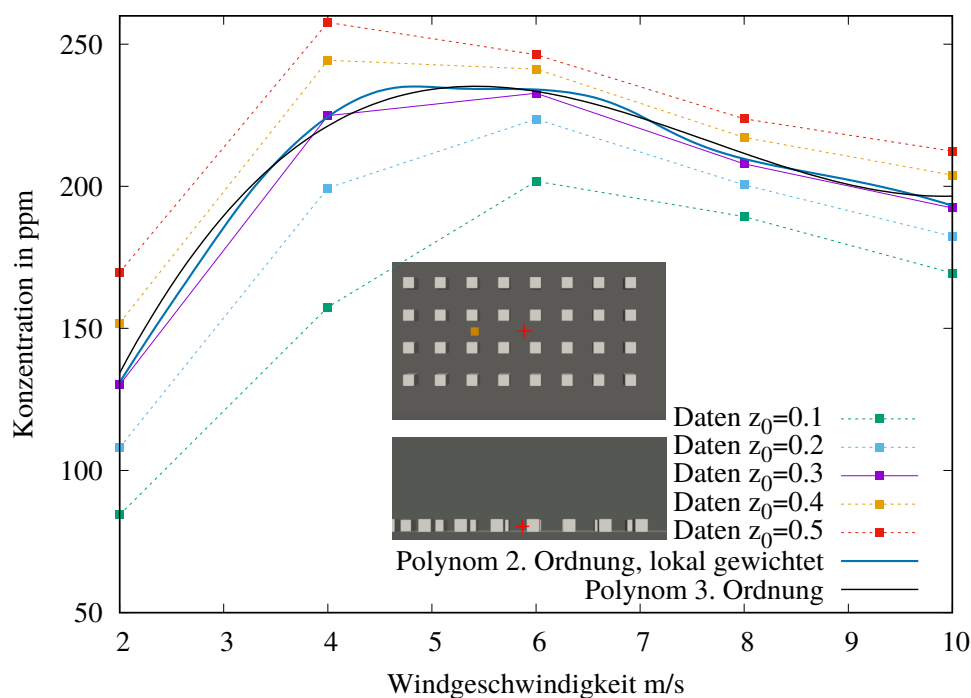


Abbildung 5.7: Darstellung der Konzentration in Abhängigkeit der Windgeschwindigkeit für eine ausgewählte Gitterzelle (siehe inset Figur). Es werden Polynome 2. (mit lokaler Wichtung) und 3. Ordnung gezeigt. Zu Vergleichszwecken wurden Daten für $z_0 = 0,1$ m, $0,2$ m, $0,4$ m und $0,5$ m (gepunktete Linien) hinzugenommen.

allerdings nur für die Response-Surface. Auf der linken Seite sind die Erwartungswerte und auf der rechten Seite die Erwartungswerte \pm eine Standardabweichung gezeigt. Diese Figur stellt dar, welchen Einfluss die Annahmen zu den Verteilungsfunktionen auf die Konzentrationsprofile haben. Dies hat hier jedoch nur demonstrativen Charakter. Man kann jedoch an den deutlichen Unterschieden bereits eine eingangs aufgestellte Behauptung wiederfinden: Parameterunsicherheiten haben oftmals einen größeren Einfluss, als die Genauigkeit des (CFD-) Modells. Weitere Details sind Gegenstand einer kürzlich eingereichten Veröffentlichung [190].

5.2. Leichtgasausbreitungen

5.2.1. Gaußsche Schadstoffausbreitung

Für die Übertragung der Betrachtungen aus Kapitel 4 für den Fall einer Leichtgasausbreitung wurde, wiederum wegen seiner Einfachheit, zunächst ein Gaußmodell ausgewählt. Eine Begründung und Herleitung des Modells ist im Anhang B angegeben. Daher soll für eine Erklärung der Modellgrößen und auch für die Modellanwendung selbst auf diesen Anhang verwiesen werden. Übliches Anwendungsziel ist die Bestimmung von Konzentrationsprofilen in Windrichtung zur Quelle. Die Quellen für die Schadstoffe werden im Modell als Punktquellen betrachtet, welche sich in einer bestimmten Höhe oberhalb des Bodens befindet. Typische Höhen sind beispielsweise die Höhen von Schornsteinen.

Auch für dieses Modell sollen zunächst einige Abhängigkeiten diskutiert werden. Hierfür sei stellvertretend eine Emission von SO_2 mit der Emissionsrate Q aus einem Schornstein angenommen. Die Windgeschwindigkeit in Ausbreitungshöhe sei u . Für die Abbildung wurden die effektive Emissionshöhe h und die atmosphärische Stabilität variiert. In der Abbildung 5.9 sind einige Zusammenhänge illustriert.

An der Abbildung 5.9 kann man erkennen, dass die atmosphärische Stabilität nicht vernach-

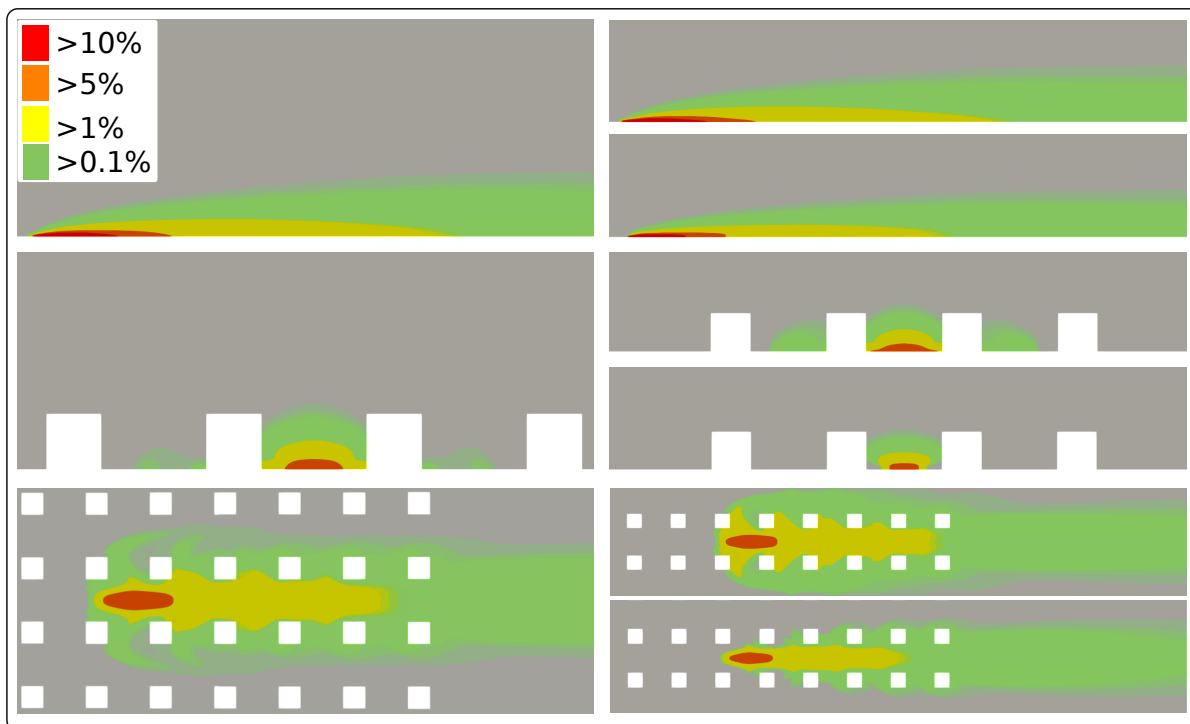


Abbildung 5.8: Darstellung der Konzentrationsprofile für die Erwartungswerte (links) und für den Erwartungswert \pm einer Standardabweichung durch longitudinale, laterale und horizontale Schnitte (von oben nach unten).

lässigt werden bzw. dass nicht nur mit einer Art mittleren Stabilität gerechnet werden kann. Die Unterschiede zwischen den Maximalkonzentrationen sind zu groß. Auch die Unterschiede in den Entfernungen zwischen der Quelle und dem Ort der Maximalkonzentration sind beträchtlich (mehr als eine Zehnerpotenz). Je instabiler die Atmosphäre, desto höher ist die maximale Bodenkonzentration, desto näher liegt diese an der Quelle und umso spitzer ist der Peak ausgeprägt. Mit steigender Höhe der Quelle sinken die Maximalkonzentrationen der Stabilitätsklassen und sie liegen weiter von der Quelle entfernt. Durch eine andere Zusammenstellung der Kurven kann man den Einfluss der Quellhöhe leichter erkennen. Hier wurden die Stabilitätsklassen A und F herausgegriffen und die Bodenkonzentrationsprofile für unterschiedliche Quellhöhen im Vergleich abgebildet. Die entsprechenden Kurven sind in den unteren 2 Abbildungen 5.9 gezeigt. Der Vergleich der Stabilitätsklassen A und F zeigt, dass sich die Kurven nach einer gewissen Entfernung von der Quelle annähern und die Konzentration unabhängig von der Höhe der Quelle wird. Die Unterschiede in den Konzentrationsprofilen sind also besonders im quellnahen Bereich ausgeprägt. Für größere Entfernungen zur Quelle scheint die effektive Quellhöhe nur von untergeordneter Bedeutung zu sein.

Für den Vergleich des Gaußmodells mit dem Ersatzmodell wurden Konzentrationsprofile für die Stabilitätsklasse B bestimmt. Dazu wurden mit dem Gaußmodell Bodenkonzentrationsprofile ($z = 0 \text{ m}$) ohne vertikale Abweichung ($y = 0 \text{ m}$) bestimmt. Für die Profile $c(x)$ wurde das Intervall $x \in [200 : 1000] \text{ m}$ gewählt. Es wurde weiterhin angenommen, dass aus einer Quelle mit $z = h = 100 \text{ m}$ das Gas SO_2 ($M = 0,064 \text{ kg mol}^{-1}$, $T = 293 \text{ K}$ und $p = 101,3 \text{ kPa}$) mit unterschiedlichen Masseströmen freigesetzt werde. Auch die Windgeschwindigkeit und die Entfernung x in Windrichtung zur Quelle wurde für die Erstellung der Response-Surface gerastert:

$$\begin{aligned}
 x &= \{200, 300, 400, 500, 600, 700, 800, 900, 1000\} \text{ m} \\
 Q &= \{0, 1; 0, 15; 0, 2; 0, 25; 0, 3\} \text{ kg s}^{-1} \\
 u &= \{3, 4, 5\} \text{ m s}^{-1}.
 \end{aligned} \tag{5.11}$$

5. Beispiele für Ausbreitungsanalysen mit Response-Surface-Methoden

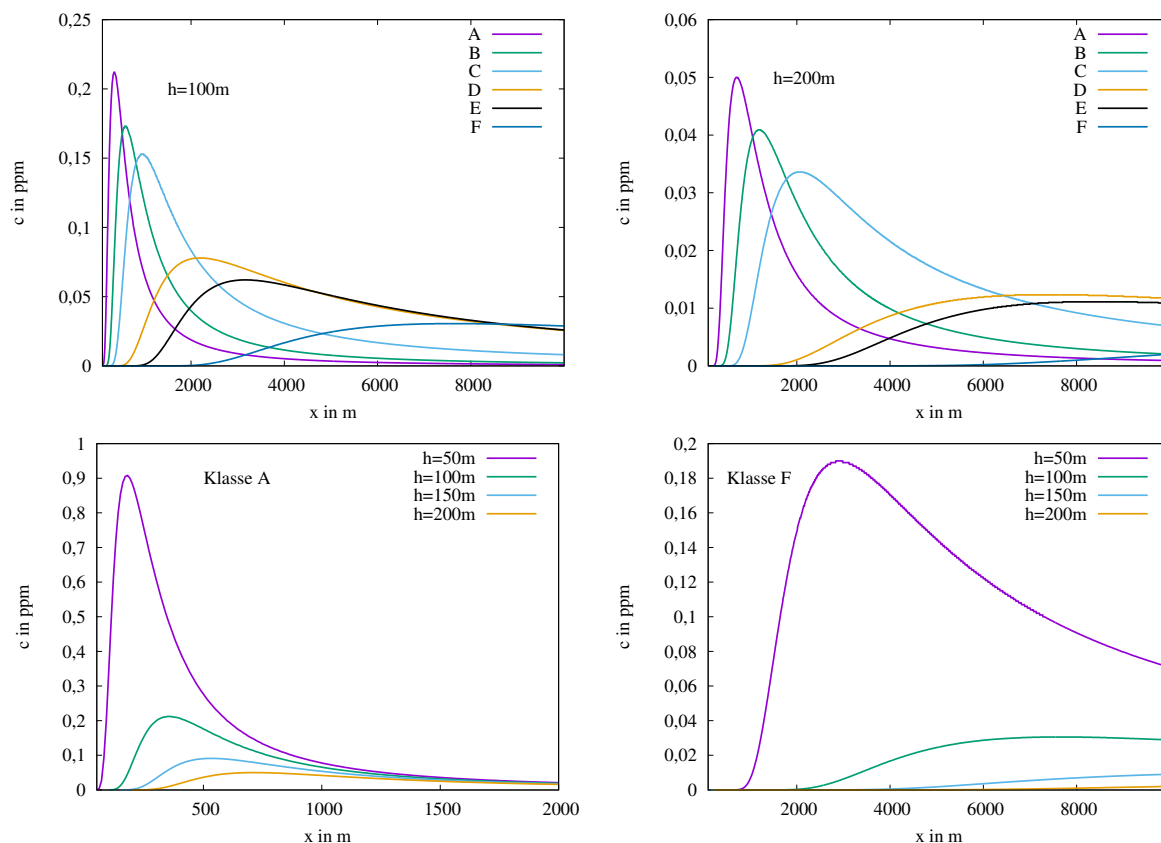


Abbildung 5.9: Illustration verschiedener Abhängigkeiten im Gaußmodell. Oben: Bodenkonzentrationsprofile in Abhängigkeit der Quellhöhen (links: $h = 100\text{ m}$, rechts: $h = 200\text{ m}$) für die Stabilitätsklassen A-F, unten: Abhängigkeit der Bodenkonzentrationsprofile von den Stabilitätsklassen (links: A, rechts: F) für verschiedene Quellhöhen.

Aus den Einzelwerten von Q und u ergeben sich 15 Wertekombinationen, zu denen mit dem Gaußmodell die zugehörigen Konzentrationen für jede der neun Entfernungen x bestimmt wurden. An diese wurden Polynome in 2 Variablen angepasst, womit insgesamt neun Polynome (Response-Surface) folgen. Mit diesen wurde der Vergleich zum Originalmodell durchgeführt. Für eine Vergleichsabbildung sind Kurven für Wertekombinationen aus u und Q bestimmt worden, die nicht auf den Rasterpunkten liegen. Zudem wurde eine Kombination (Wertepaar 1) gewählt, die innerhalb des Rasterbereiches liegt und zwei Kombinationen (Wertepaare 2 und 3), welche außerhalb liegen:

$$\begin{aligned} \text{Wertepaar 1: } Q_1 &= 0,18 \text{ kg s}, & u_1 &= 4,5 \text{ m s}^{-1} \\ \text{Wertepaar 2: } Q_2 &= 0,35 \text{ kg s}, & u_2 &= 5,5 \text{ m s}^{-1} \\ \text{Wertepaar 3: } Q_3 &= 0,05 \text{ kg s}, & u_3 &= 2,5 \text{ m s}^{-1}. \end{aligned}$$

Die angegebenen Werte wurden auch in das Gaußmodell eingesetzt, mit denen die Konzentrationsprofile für jedes x berechnet werden können. Der Vergleich ist in Abbildung 5.10 gezeigt. Man kann der Abbildung entnehmen, dass durch die RS eine sehr gute Näherung für Kombinationen aus u und Q innerhalb des Rasterbereiches möglich ist (Interpolation). Die Abweichungen zwischen den Polynomen und dem Gaußmodell sind unbedeutend. Vergleicht man die RS für Kombinationen aus u und Q außerhalb des Rasterbereiches (Extrapolation), so sind die Abweichungen höher. Dennoch sind die Approximationen als gut zu bezeichnen.

Nimmt man eine lokal optimierte Wichtung vor (Abbildung 5.10, rechts, roter Graph), so wird die Anpassung besser. Hierbei werden diejenigen Rasterwerte u und Q am stärksten in die

5. Beispiele für Ausbreitungsanalysen mit Response-Surface-Methoden

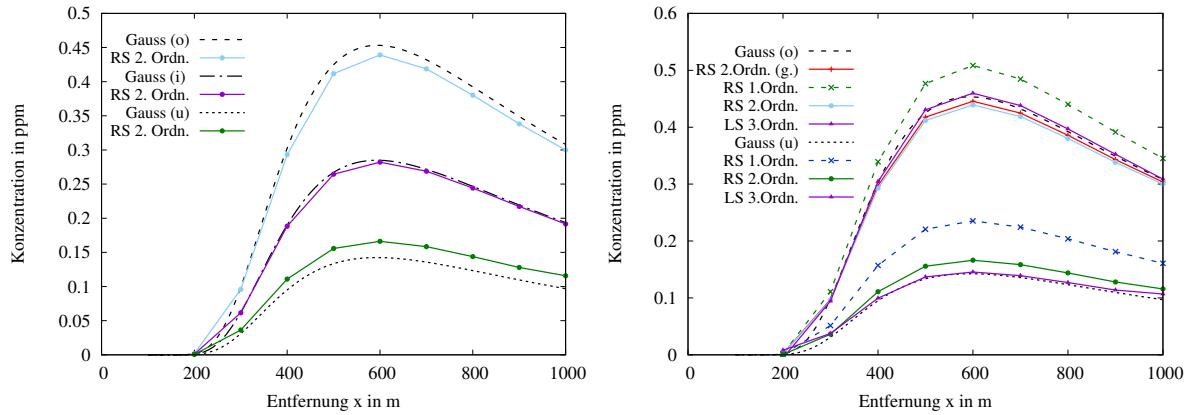


Abbildung 5.10: Darstellung eines Vergleiches zwischen RS und dem Gaußmodell für verschiedene Wertekombinationen aus u und Q . Links: Vergleich für ein Wertepaar innerhalb des Rasterbereiches (mittig (i)) und für zwei Wertepaare außerhalb des Rasterbereiches (oben (o), unten (u)), rechts: Vergleich für die Wertepaare außerhalb des Rasterbereiches, zusätzlicher lokaler Wichtung sowie Demonstration des Einflusses der Polynomordnung.

Regression einbezogen, die der betrachteten Kombinationen aus u und Q am nächsten liegen. Weiterhin eingezeichnet sind Anpassungen mit Polynomen 1. und 3. Ordnung. Man erkennt, dass eine Response-Surface auf der Basis von Polynomen 1. Ordnung den Verlauf des Konzentrationsprofils zwar korrekt beschreibt, sich jedoch höhere Abweichungen als jene für Polynome 2. Ordnung zeigen. Response-Surfaces auf der Basis von Polynomen 3. Ordnung sind merklich genauer. Allerdings ist der Aufwand zu deren Anpassung deutlich höher. In diesem Sinne können Response-Surfaces auf der Basis von Polynomen 2. Ordnung ein guter Kompromiss zwischen Genauigkeit und Aufwand sein.

Zur Aufstellung einer Response-Surface für das dreidimensionale Konzentrationsfeld wurde die in Abschnitt 4.3.3 beschriebene Vorgehensweise genutzt. Zunächst wurde der Ort diskretisiert:

$$\begin{aligned} x &\in [1, 1000] \text{ m}, & \Delta x = 1 \text{ m} & \Rightarrow 1000 \text{ Intervalle} \\ y &\in [-100, 100] \text{ m}, & \Delta y = 1 \text{ m} & \Rightarrow 201 \text{ Intervalle} \\ z &\in [0, 100] \text{ m}, & \Delta z = 1 \text{ m} & \Rightarrow 101 \text{ Intervalle.} \end{aligned}$$

Es ergaben sich 20301000 Kuben der Kantenlänge 1 m, für die hinreichend viele Konzentrationen bestimmt werden mussten. An die Konzentrationswerte zu jedem Kubus wird ein Polynom 2. Ordnung in den Variablen Q und u angepasst. Folgende Stützwerte sollen verwendet werden:

$$\begin{aligned} Q &= \{1, 2, 3, 4, 5\} \text{ kg s}^{-1} \\ u &= \{2, 3, 4, 5\} \text{ m s}^{-1}, \end{aligned} \quad (5.12)$$

womit insgesamt 20 Wertekombinationen folgen. Die 20301000 Regressionspolynome stellen in ihrer Gesamtheit die Response-Surface dar. Diese Polynome zur Definition der Response-Surface werden vom C++-Programm auf nur einem Kern einer core i9 9900K @3.6GHz innerhalb von 190s bestimmt und benötigen anschließend 2,5 GB Festplattenspeicher. Die Zeit zur Berechnung einer Ausgabespalte (eine u - Q Kombination) beträgt 34s. Mit dem Code zum Gaußmodell sind die Konzentrationswerte für die hierfür benötigten (20) Kombinationen aus u und Q innerhalb von 160s bestimmt. Die Ausgabedatei benötigt zusätzlich 5,4 GB Festplattenspeicher. Mit den Polynomen können nun für gewünschte Kombinationen aus q und u die Konzentrationen aller Kuben bestimmt werden. Die auf diese Weise ermittelten Werte können als Kubusmittelwerte interpretiert werden.

Für die nicht in das Anpassungsraster einbezogenen Werte $u = 2,5 \text{ m s}^{-1}$ und $Q = 2,5 \text{ kg s}^{-1}$ sind diese in Abbildung 5.11 in einer 3d-Ansicht, als horizontale, vertikale und laterale Schnitte im Vergleich zum Originalmodell gezeigt. Die Konzentrationswerte des Originalmodells wurden auf dem selben Raster bestimmt.

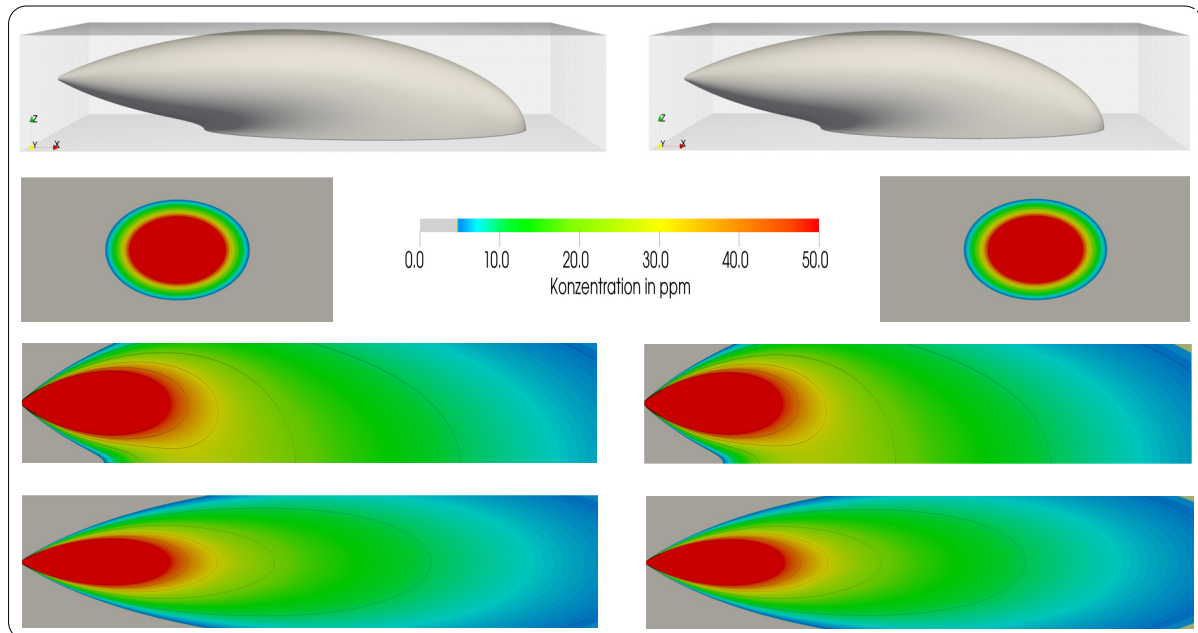


Abbildung 5.11: Darstellung eines Vergleiches zwischen RS (links) und dem Gaußmodell (rechts) für $u = 2,5 \text{ m s}^{-1}$ und $Q = 2,5 \text{ kg s}^{-1}$. Von oben nach unten: 3d-Ansicht und Gitter (15 ppm), Lateralschnitt ($x = 100 \text{ m}, y \in [-100, 100] \text{ m}, z \in [50, 100] \text{ m}$), Longitudinalschnitt ($x \in [1, 1000] \text{ m}, y = 0 \text{ m}, z \in [0, 100] \text{ m}$), Vertikalschnitt ($x = 1 \text{ m}, y \in [-100, 100] \text{ m}, z = 100 \text{ m}$).

Die Visualisierungen der Konzentrationen in Abbildung 5.11 wurden mit ParaView angefertigt⁵. Man findet in beiden Fällen die typische Ausbreitungscharakteristik des Gaußmodells vor. Die Konzentration des freigesetzten Gases nimmt von einem Maximum auf der Ausbreitungsachse senkrecht dazu gemäß einer Gaußschen Glockenkurve ab. Die elliptische Gestalt der Lateralschnitte widerspiegelt unterschiedlichen turbulenten Transport in y - und z -Richtung. Zwischen den auf diese Weise visualisierten Konzentrationsverteilungen bestehen keine nennenswerten Unterschiede. Die mit dem Gaußmodell bestimmten Konzentrationen weichen von denen, die mit der Response-Surface bestimmt wurden, nur um bis zu zwei ppm ab.

In vielen CFD-Simulationen sind die verwendeten Zellenzahlen kleiner als $20 \cdot 10^6$, so dass die Anpassung von Polynomen 2. Ordnung in zwei oder drei Variablen ohne Weiteres für das Originalgitter der CFD-Simulation möglich ist. Führt man die Berechnungen wie hier nicht-parallel aus, so benötigt der Code dennoch weniger Zeit, als für die Originalsimulation erforderlich war. Der (hier nicht verwendete) Parallelalgorithmus kann die Rechenzeit erheblich verkürzen, wird allerdings nur für Polynome höherer Ordnung, einer Variablenzahl $n > 3$ oder für sich möglicherweise anschließende Monte-Carlo-Analysen effektiv benötigt (siehe auch nächster Abschnitt).

⁵Dazu wurde das einfache Gitter mit Blockmesh in einem geeigneten OpenFOAM-case erstellt. Die Ergebnisspalte für eine im case enthaltene skalare Größe wird dann durch die mit den Polynomen berechnete Spalte ersetzt. Anschließend öffnet man das Netz in ParaView und wählt zur Visualisierung die skalare Größe aus, deren Spalte ausgetauscht wurde.

5.2.2. CFD-Simulation von VOC-Emissionen aus Schwimmdachtanks

Eine detaillierte Beschreibung der Ausgangsproblemstellung, auf Grund derer das Emissionsverhalten von Schwimmdachtanks untersucht wurde, erfolgt in Kapitel 6. Hier soll demonstriert werden, dass mittels Response-Surface-Methoden eine Mitbetrachtung der Unsicherheiten wichtiger Modelleingangsgrößen vorgenommen werden kann. In diesem Abschnitt soll die atmosphärische Ausbreitung der Emissionen durch Simulation des Mittransportes mit einem geeigneten Strömungsfeld betrachtet werden.

Als Strömungslöser bzw. zur Umsetzung am PC werden die Softwarepakete ANSYS [142] und OpenFOAM [141] verwendet. Die Beschreibung der turbulenten Strömung wird mittels eines RANS-Modells vorgenommen. Für die Untersuchungen im Rahmen des Projektes wird dies als hinreichend erachtet, da keine transienten (instationären) Strömungs- oder Freisetzungsbedingungen untersucht werden sollen. Unterschiede in der Präzision verschiedener Turbulenzmodelle oder im Vergleich zu theoretisch genaueren LES-Simulationen sind von kleinerer Größenordnung, als die Konsequenzen aus den Unsicherheiten in den Modellparametern. Letztere sollen hier jedoch berücksichtigt werden, so dass die Simulationen vom geringeren numerischen Aufwand im Vergleich zu LES-Simulationen profitieren. Dazu wird im Folgenden das Gitter für die CFD-Simulation beschrieben und illustriert, weil auf diesem auch die Response-Surface ermittelt wird.

Diese wird für die Variablen Windgeschwindigkeit u , Emissionsmassenstrom q und für die Bodenrauigkeit z_0 aufgestellt. Für das unterstellte Emissionsszenario ist das Tankdach bei vollem Tank gesunken, so dass größtmögliche Flüchtige Organische Kohlenwasserstoffe (Volatile Organic Compound) (VOC)-Emissionen auftreten. Diese Situation stellt auch ein Worst-Case-Szenario dar, welches zu den ausgedehntesten, explosionsgefährdeten Bereichen führen wird. Ziel ist erneut eine Demonstration des Verfahrens, basierend auf den Ergebnissen von CFD-Simulationen. Gleichzeitig werden jedoch weite Bereiche wichtiger Einflussgrößen aus dem Anwendungsbeispiel erfasst. Wegen der Bedeutung dieses Beispiels für diese Arbeit soll die Beschreibung der CFD-Simulation etwas ausführlicher erfolgen, als für den Fall der Schwer-gassimulation.

Beschreibung des CFD-Modells

Als Grundmodell für den Schwimmdachtank und für den Auffangbereich wurde der Ottokraftstofftank aus dem Forschungsprojekt verwendet [191]⁶. Zu diesem liegen alle Abmessungsdaten vor und es ist ein direkter Vergleich der im Projekt gemessenen Emissionswerte mit den Ausbreitungssimulationen möglich. Der betrachtete Tank sowie seine Umgebung können als repräsentativ für Tanklagersituationen angesehen werden. Auf die Untersuchung von Abweichungen von den dortigen Gegebenheiten und deren Einfluss auf die Ausbreitung soll hier verzichtet werden.

Eine Darstellung des Auffangbereiches und des Tanks zeigt Abbildung 5.12. Man kann der Abbildung 5.12 entnehmen, dass für die Modellbildung verschiedene Objekte ausgelassen wurden. Dies betrifft Anbauten wie Probenahmestelle, Deichübergänge und zahlreiche Hindernisse in der näheren Umgebung. Einige dieser Objekte sind nicht an jedem Schwimmdachtank zu finden und für die Umströmung nur relevant, wenn der unmittelbare Nahbereich zu diesem Objekt von Interesse ist oder genau der spezifische Einfluss des Objektes beurteilt werden soll. Da hier jedoch die Ausbreitung der Emissionen von einem Schwimmdachtank allgemein erfolgen soll, werden Freisetzungen konservativ eingestellt, um die Größenordnung der Isokontourflächen zu ermitteln. Andererseits werden dafür aber lokale Details ausgelassen. Ebenfalls ausgelassen werden Vorbelastungen der anströmenden Luft (Raffinerieluft) und die Berücksichtigung von Lagedetails zum Tankstandort. Letzteres umfasst z. B. den Raffineriestandort und Position des Tanks innerhalb der Raffinerie. Oftmals ist eine Vielzahl von gleichartigen Tanks gitterartig

⁶Teile des Textes und einige Figuren sind dem Bericht (ebenso vom Autor angefertigt) entnommen.

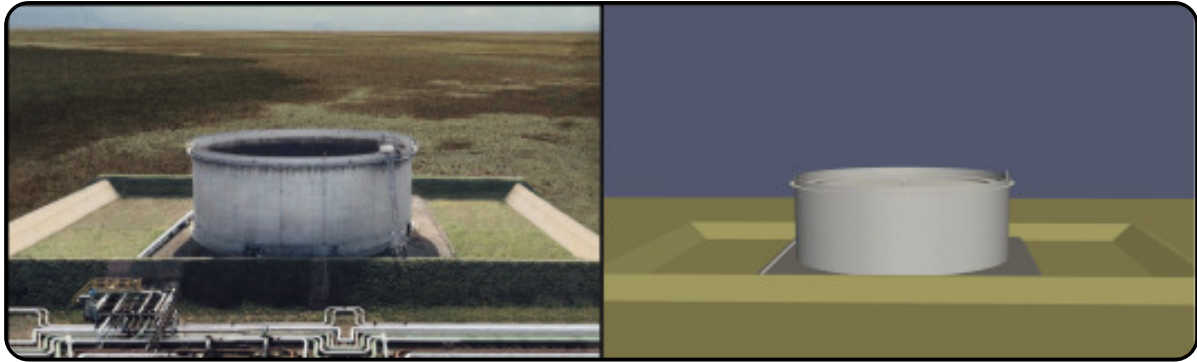


Abbildung 5.12: Darstellung eines Schwimmdachtanks für Ottokraftstoffe innerhalb eines Auffangbereiches; links: bearbeitetes Foto, rechts: abgeleitetes Modell für die Ausbreitungssimulationen.

in einem Areal angeordnet. Aus Sicht der Ausbreitungsmodellierung sind diese Besonderheiten von hohem Einfluss auf das grundsätzliche Umströmungsverhalten, sollen hier jedoch nicht berücksichtigt werden. Die Vielfalt an Möglichkeiten würde dadurch enorm steigen. Für die Untersuchung der Konzentrationsfelder auf einem Schwimmdach in Quellnähe und für die Ausbreitung der Emissionen oberhalb des Schwimmdaches sind diese Einflüsse wiederum gering und gehen in den sehr konservativen Emissionsmassenströmen unter.

Insgesamt soll daher nur die Umströmung und die Ausbreitung von Emissionen eines isolierten Einzeltanks betrachtet werden. Das Gelände um den Auffangbereich wird als eben und homogen angenommen und von einem Windfeld mit fester Windrichtung und definiertem Windprofil überströmt.

Das Tankmodell aus Abbildung 5.12 wurde in einen Quader eingebettet und mit SnappyHex-Mesh (OpenFOAM) bzw. mit ANSYS Meshing (ANSYS) vernetzt. Es handelt sich hier um eine unstrukturierte Vernetzung.

Die Einbettung des Tanks und die Auswahl der Quaderabmessungen erfolgte entsprechend [140]. Dort wird empfohlen, dass Simulationsgebiet nicht zu klein zu wählen, um nicht durch die Geometrie und die Randbedingungen eine ungünstige Beeinflussung der Strömungsabbildung zu erhalten. Sind hierbei $(H_{obj}, B_{obj}, L_{obj})$ typische Abmessungen (Höhe, Breite, Länge) des Simulationsobjektes (z. B. die Tankabmessungen), so sollte das Simulationsgebiet etwa die Abmessungen $[(5 - 10)H_{obj}, (2 - 5)B_{obj}, 5L_{obj}$ (Einlass); $2L_{obj}$ (Auslass)] aufweisen.

Objekte in Tanknähe der Höhe H_H haben vernachlässigbaren Einfluss, wenn $(6 - 10)H_H < H_{obj}$ ist. Damit sind der Deich für die Anströmung sowie auch das große Versorgungsrohr des Tanks für die Umströmung relevant und werden mit vernetzt.

Das gesamte Simulationsgebiet besitzt damit die Abmessungen $(160\text{ m}, 200\text{ m}, 520\text{ m})$ und ist in Abbildung 5.13 dargestellt.

Für die Gitterzellendefinition wurde berücksichtigt, welche Abmessungen Emissionsquellen auf dem Schwimmdach (Ringspalt, Atmungsarmatur) und welche Abmessungen typische lokale Strömungshindernisse haben. Emissionsquellen sowie Dacharmaturen wurden im Zentimeterbereich aufgelöst und die Oberflächen des Tankdaches im Dezimeterbereich $(10 - 20)\text{ cm}$. Die größten Zellen im Meterbereich befinden sich in Gebieten, die weit vom Tank oder eines Randbereiches entfernt liegen.

Durchgeführte Gittervergleiche zeigen, dass der Gewinn bei weiterer Verfeinerung des Gitters gering ist. Die Unsicherheit in den physikalischen Parametern hat hier merklich höheren Einfluss, so dass das verwendete Gitter als ein guter Kompromiss zwischen Modellgenauigkeit und Simulationsaufwand aufgefasst werden kann.

Einen hohen Einfluss auf die lokale Ausbreitung der Emissionen hat die Position des Tank-

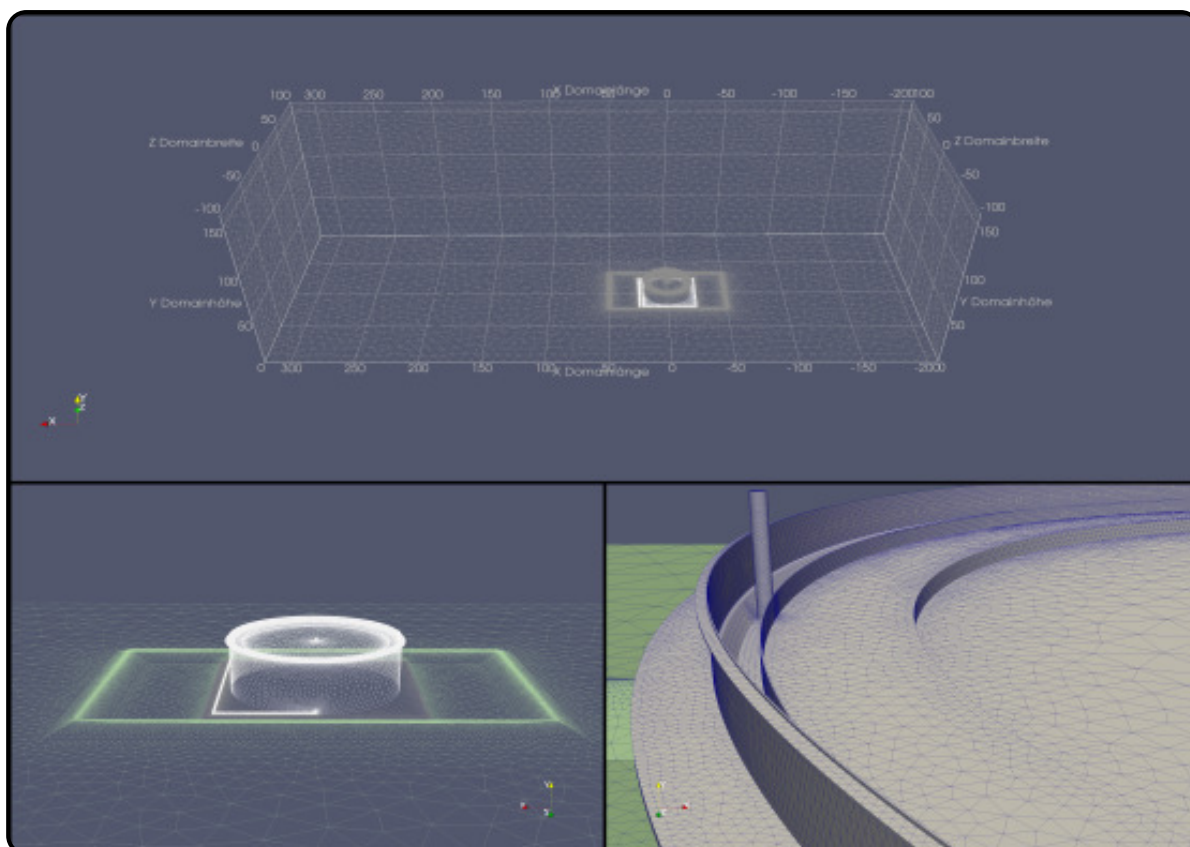


Abbildung 5.13: Darstellung des Simulationsgebietes und des Simulationsgitters mittels paraView. Oben: Gesamtansicht des Simulationsgebietes und Angabe der Abmessungen im Vergleich zum Tank, links: Vernetzung des Simulationsgebietes und des Tanks, rechts: Detailansicht zur Tankvernetzung.

daches. Im Projekt wurden zwei Situationen unterschieden: Das Tankdach befindet sich am unteren bzw. am oberen Umkehrpunkt. Abbildung 5.14 illustriert diese Situationen.

Strömungsmodell in ANSYS und OpenFOAM

Die Durchführung der CFD-Ausbreitungssimulationen erfolgte an einem handelsüblichen PC mittels der Softwarepakete ANSYS [142] und OpenFOAM [141]. Beide Pakete stellen sehr umfangreiche Funktionsbibliotheken bereit. ANSYS besitzt den Vorteil einer ausgereiften und den Funktionsumfang umfassenden graphischen Benutzeroberfläche. Im Gegenzug ist OpenFOAM frei verfügbar und verursacht weder Anschaffungs-, noch Lizenzkosten. In OpenFOAM liegt zudem der verwendete Quellcode offen, so dass alle Details der physikalischen Modellierung bis hin zu mathematischen Algorithmen diskutiert werden können. In ANSYS wurde der Strömungslöser ANSYS CFX verwendet, während in OpenFOAM der Solver *rhoReactingBuoyandFoam* benutzt wurde. Die Beschreibung der turbulenten Strömung wird in beiden Paketen mittels RANS-Modellen vorgenommen. Als Turbulenzmodell wurde das SST-Modell (Shear Stress Transport) benutzt, welches eine Kombination aus einem $k - \omega$ -Modell in Wandnähe und einem $k - \epsilon$ -Modell in weiter von Wänden entfernt liegenden Zellen nutzt.

Für die Wände des Tanks wurde eine *no slip*-Randbedingung eingestellt und angenommen, dass diese hydraulisch glatt sind. Diese Randbedingung sorgt bei reibungsbehafteten Strömungen dafür, dass die Strömungsgeschwindigkeit der Luft an festen Oberflächen stets null ist. In OpenFOAM wurde für die Bodenoberfläche zudem eine Bodenrauigkeitslänge z_0 , die variablel

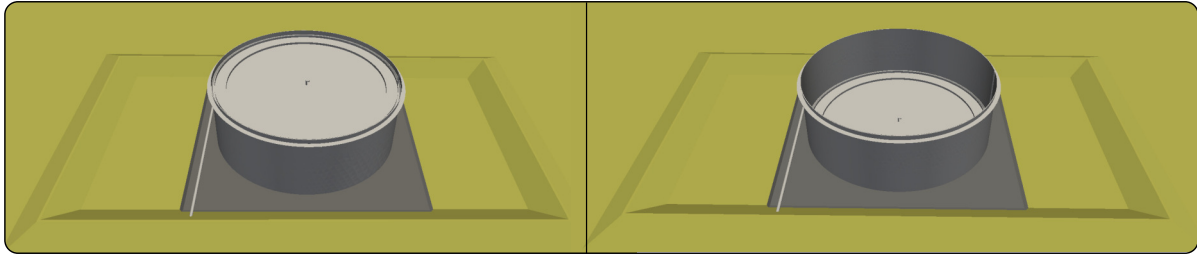


Abbildung 5.14: Darstellung der Dachposition am oberen (links) bzw. am unteren (rechts) Umkehrpunkt.

im Zentimeterbereich eingestellt wurde und das überströmende Windprofil beeinflusst, eingestellt. Hierdurch klingt für größere z_0 die Strömungsgeschwindigkeit in Bodennähe rascher auf null ab.

In ANSYS CFX wurde für das Windprofil ein Potenzansatz $u(z) \sim z^p$ (p ist hier ein Profilexponent) verwendet, während in OpenFOAM ein logarithmisches Windprofil ($u(z) \sim Ln(z/z_0)$) benutzt wurde.

Durch diese Unterschiede in den Einstellungen, aber auch durch Unterschiede in der konkreten programminternen Umsetzung des Strömungsproblemekes in beiden Softwarepaketen, sind die Simulationsergebnisse nicht identisch. Allerdings kann man dadurch auch eine Information über die Größenordnung möglicher Abweichungen durch numerische Ungenauigkeiten bzw. Unterschiede erkennen. Die Simulationsergebnisse aus ANSYS CFX wurden für die Erstellung der Response-Surface verwendet. Die Eignung von OpenFOAM wurde hierfür bereits demonstriert. Die Diskussion der Simulationsergebnisse für zahlreiche Emissionsszenarien und der Vergleich beider Softwarepakete erfolgt ausführlich in Kapitel 6.

Erstellung der Response-Surface

Die Response-Surface wurde direkt für das ANSYS-Gitter erstellt. Dieses besteht aus etwa 4 Millionen Zellen. Allerdings werden die Ergebnisse nur für eine Untermenge an Knoten (elementbasierte finite-Volumen-Methode, hier 726458) ausgegeben. Dementsprechend sind nur eine geringere Anzahl an Polynomen anzupassen.

Wie bereits angegeben, wird die Response-Surface für die Variablen Windgeschwindigkeit u , Emissionsmassenstrom \dot{q} und für die Bodenrauigkeit z_0 aufgestellt:

$$\begin{aligned} u &= \{1, 2, 3, 4, 5\} \text{ m s}^{-1}, \\ \dot{q} &= \{1, 3, 5\} \text{ kg s}^{-1}, \\ z_0 &= \{0, 01; 0,1; 0,2\} \text{ m.} \end{aligned} \tag{5.13}$$

Für die Simulationen wurde ein Emissionsszenario zu Grunde gelegt, dem eine sehr große Lache auf dem Dach oder gar ein Dachuntergang entspricht. Für weitere Details sei hier auf das Kapitel 6 verwiesen. Insgesamt wurden 45 Parameterkombinationen (= Anzahl der CFD-Simulationen) benutzt, um 726458 Polynome anzupassen. Für einen Vergleich wurden Polynome 2. und 3. Ordnung angepasst, für welche 10 bzw. 20 Koeffizienten durch Regression zu bestimmen sind. Zunächst soll erneut das Originalmodell mit der Response-Surface verglichen werden. Als Parameterkombination wurde hierfür $u = 4 \text{ m s}^{-1}$, $\dot{q} = 3 \text{ kg s}^{-1}$ und $z_0 = 0,1 \text{ m}$ gewählt. Das Konzentrationsprofil ist in Abbildung 5.15 durch longitudinale (Schnitt durch die Tankmitte in Windrichtung), laterale (Schnitt 1 m neben dem Tank mit Windrichtung als Normale) und horizontale (Schnitt 1 m oberhalb des Daches) Schnitte des räumlichen Konzentrationsprofils dargestellt. Für die Abbildung wurden Polynome 2. Ordnung inklusive lokaler Wichtung benutzt. Erneut findet man eine gute Übereinstimmung zwischen Originalmodell und

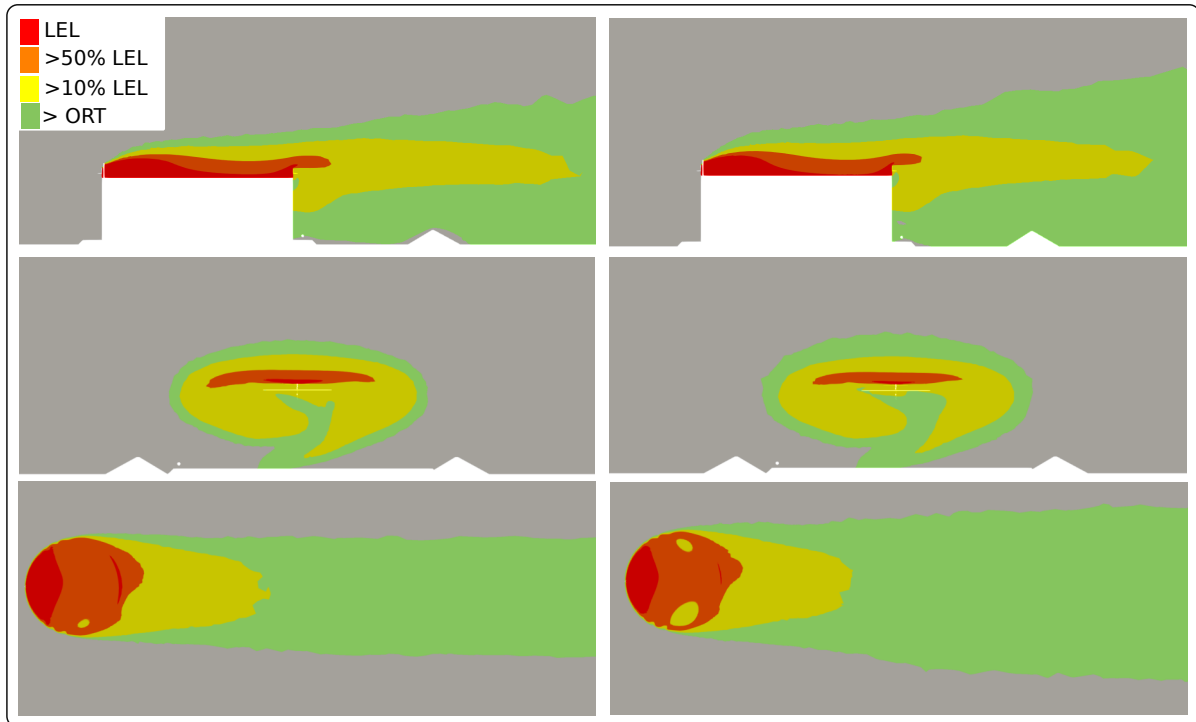


Abbildung 5.15: Vergleich des Originalmodells (links) mit der Response-Surface (rechts) mit longitudinalen, lateralen und horizontalen Schnitten (von oben nach unten) des räumlichen Konzentrationsprofils. Für die Farbeinteilung wurden die untere Explosionsgrenze (LEL (siehe UEG), 6000 ppm) und die Erkennungsschwelle des Geruches (ORT, 6 ppm) verwendet.

Response-Surface, was auch für andere hier nicht gezeigte Parameterkombinationen erhalten bleibt. Selbstverständlich sind auch hier die Konzentrationsprofile nicht identisch. Die Unterschiede sind jedoch deutlich geringer als zu erwartende Abweichungen bei Berücksichtigung der Parameterunsicherheiten. Für die Bestimmung der Polynome mit dem C++-Programm benötigte eine CPU eines core i9 9900K @3.6 GHz etwa 14 s und es waren 0,75 GB Festplattenspeicher erforderlich. Für die Auswertung der Polynome (Berechnung einer Parameterkombination) wurden 0,25 s (CFD-Simulation ungefähr 10 h) benötigt.

Abbildung 5.16 zeigt die Polynome für eine ausgewählte Zelle des zugehörigen CFD-Gitters. Nun wurden $\dot{q} = 3 \text{ kg s}^{-1}$ und $z_0 = 0,1 \text{ m}$ konstant gehalten und die Windgeschwindigkeit variiert. Man kann erkennen, dass die Polynome 2. Ordnung die Daten bereits gut interpolieren. Zu Vergleichszwecken wurden lokal gewichtete Polynome 2. und 3. Ordnung (ohne Wichtung) hinzugenommen. Diese interpolieren die Daten etwas besser. Auch hier gilt, dass die Güte der Anpassung für alle Zellen ähnlich ist, so dass die Response-Surface als gutes Ersatzmodell betrachtet werden kann. Zur Untersuchung des Einflusses der Parameterunsicherheiten mittels MCS und LHS wurden lokal gewichtete Polynome 2. Ordnung benutzt. Als Abbruchbedingung wurde eingestellt, dass mindestens zwei Stellen signifikant sein müssen. Da es sich erneut um eine Demonstration handelt, wurde angenommen, dass $u \sim N(4, 1)$, $\dot{q} \sim U[1, 5]$ und $z_0 \sim U(0,01, 0, 2)$ gelten. Abbildung 5.17 zeigt Konzentrationsprofile für den Erwartungswert (links) und für den Einfluss der Schwankungen (rechts, \pm eine Standardabweichung). Für die Erfüllung der Abbruchbedingung wurde etwa 10000 (MCS) bzw. 1000 (LHS) samples benötigt. Zur Veranschaulichung der erforderlichen Gesamtzeit wurde in einem wiederholten Durchlauf die Sampling-Zahlen für alle Polynome fixiert zu 10000 (sowohl für MCS als auch für LHS). Ein Kern einer core i7 4930K @3.4GHz benötigte $19 \cdot 10^3 \text{ s}$ (MCS) und $65 \cdot 10^3 \text{ s}$ (LHS) zur Bestimmung von Erwartungswert und Varianz für alle Polynome.

Zur Demonstration der Parallelisierung wurde zusätzlich zum core i7 ein compute node einer

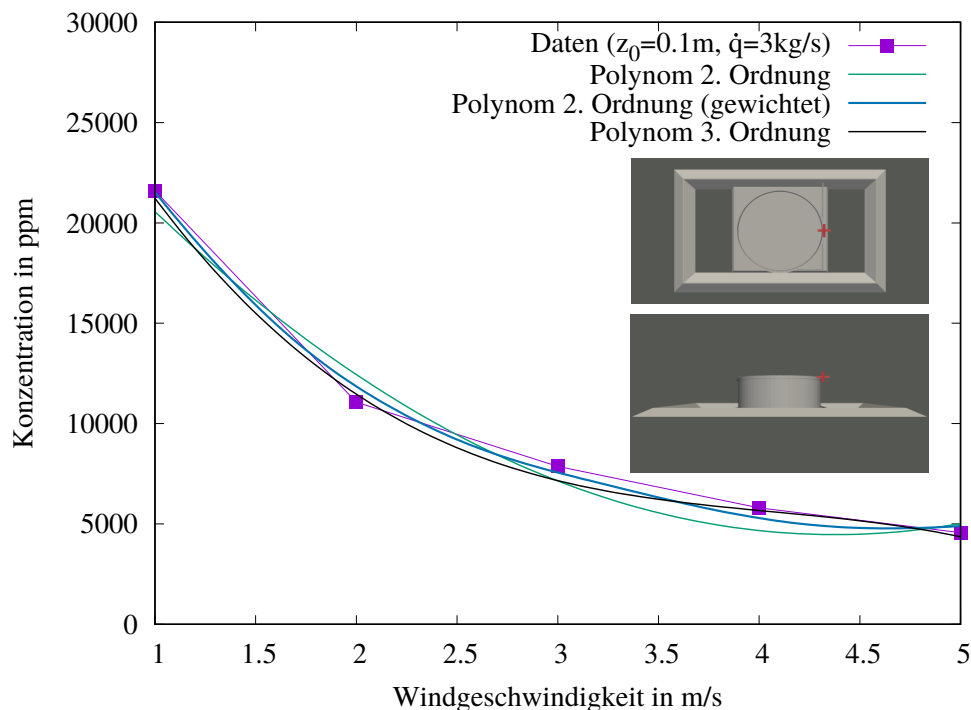


Abbildung 5.16: Darstellung der Konzentration in Abhängigkeit der Windgeschwindigkeit für eine ausgewählte Zelle (inset Figur: rotes Kreuz). Hierfür wurden Polynome 2. (zusätzlich inklusive lokaler Wichtung) und 3. Ordnung verwendet.

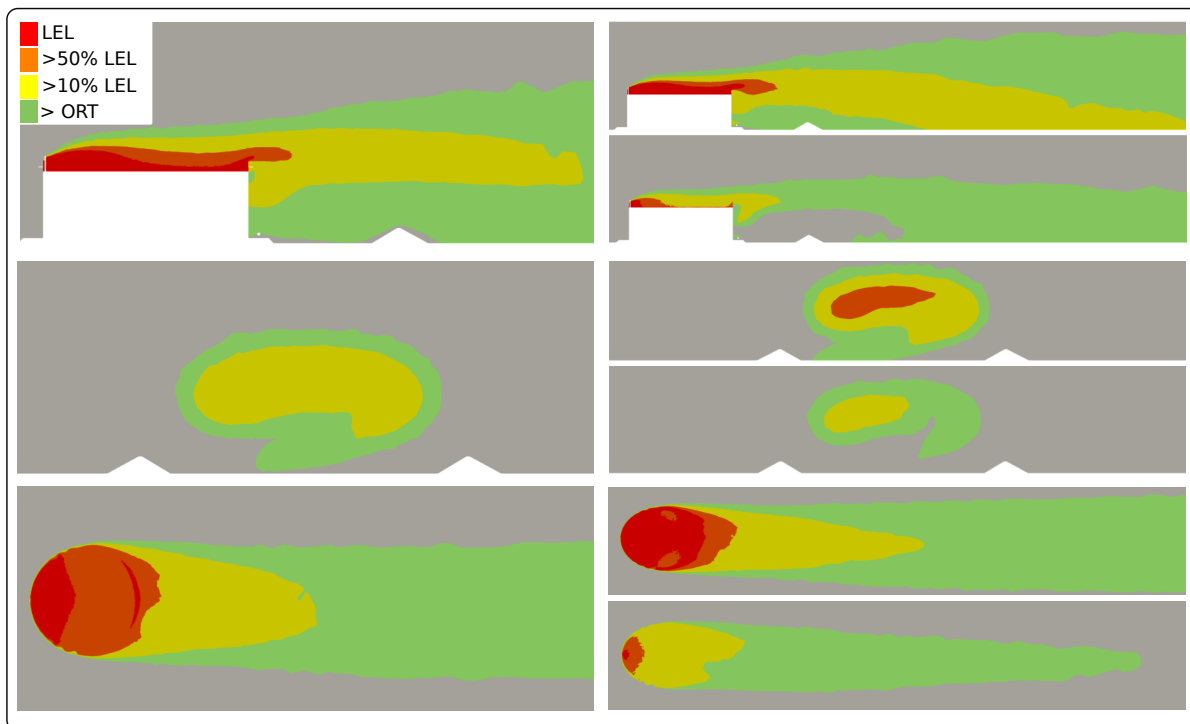


Abbildung 5.17: Illustration der Konzentrationsprofile für den Erwartungswert (links) und für den Einfluss der Schwankungen (rechts, \pm eine Standardabweichung) mittels longitudinaler, lateraler und horizontaler Schnitte (von oben nach unten).

infiniband-connected 16 core-ccNuma-nodes mit Xeon E5-2630v3 (Haswell)@2.4GHz Kernen eines HPC verwendet. Abbildung 5.18 zeigt, dass die Parallelisierung nahezu ideal ist und einfache MCS bzw. LHS sehr schnell ausgeführt werden können. Es wurden hierfür 100000 Polynome benutzt.

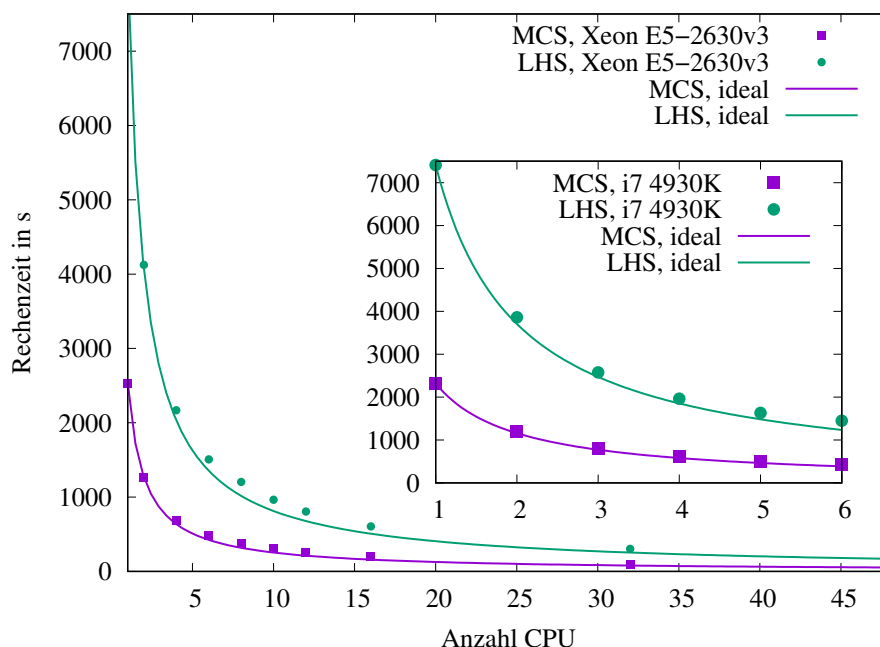


Abbildung 5.18: Darstellung der Berechnungszeit für MCS/LHS (10000 samples) von 100000 Polynomen in Abhängigkeit der Anzahl der verwendeten CPUs.

5.3. Abschließende Bemerkungen

Anpassungsgüte

Alle zuvor betrachteten Beispielmuster haben gemeinsam, dass der größte Einfluss auf die Konzentrationsprofile durch die Ortsabhängigkeit gegeben ist. Diese kann durch eine feine Rasterung bzw. durch das CFD-Gitter so stark untergliedert werden, dass lokale Änderungen innerhalb einer Zelle klein ausfallen. Wenn die Konzentrationsänderungen durch Variation der Parameter ebenso gering ausfallen, dann eignen sich die Polynome zur Approximation. Bei stärkerer Anhängigkeit kann man durch eine feinere Rasterung der betreffenden Variablen wiederum eine lokal genauere Anpassung erreichen. Dadurch steigen zwar die durchzuführenden (CFD-)Simulationen an, aber deutlich geringer, als würde man direkt die Simulation sampeln. Dadurch begründet sich der Vorteil dieser Verfahrensführung. Das Verfahren wird nicht funktionieren, wenn die Zielgröße stark nichtlinear von den Eingangsvariablen abhängig ist. Ein solches Verhalten wurde bisher jedoch nicht beobachtet. Dies mag damit zusammenhängen, dass nur stationäre Konzentrationsfelder untersucht wurden. Würde man einzelne Wirbelstrukturen auf kleinen Größenskalen auflösen wollen (Direkte Numerische Simulation (DNS)), so würde dieses Verfahren voraussichtlich scheitern.

Rasterung, Interpolation, Extrapolation

Die Anpassungspolynome liegen, wie die zahlreichen Abbildungen zuvor gezeigt haben, überwiegend dicht an den Stützstellen. Das Oszillationsverhalten ist wegen der zumeist geringen Polynomordnung gering ausgeprägt. Damit eignen sich die Polynome zur Interpolation der

durch Simulation bestimmten Rasterwerte. Auch wenn dies nicht durch eine Abbildung gezeigt ist, kann man unphysikalische Werte für den Fall finden, wo die Polynome zur Extrapolation genutzt werden. Polynome sind immer divergent und zeigen daher mehr oder weniger hohe Abweichungen vom zu erwartenden Trend außerhalb des Rasterbereiches. Auch wenn (geringe) Extrapolationen möglich sind, sollte der wesentliche (durch die Dichtefunktionen gegebene) Bereich innerhalb des Simulationsrasters liegen.

Parallelisierung, OpenFOAM vs. ANSYS

Die Anpassung der Polynome und deren Verwendung zur Werteberechnung ist so schnell durchführbar, dass selbst für sehr große CFD-Gitter ein Parallelcode nicht erforderlich ist. Durch die Zeilenweise Berechnung wird kaum Arbeitsspeicher benutzt. Für die Durchführung von Monte-Carlo- oder Latin-Hypercube-Sampling ist die Nutzung von MPI dagegen sehr sinnvoll. Hierbei müssen die Parallelprozesse nicht miteinander kommunizieren, so dass zur parallelen Berechnung auch preiswerte Cluster aus handelsüblichen PC (sogenannte Beowulf-Cluster) verwendet werden können. Die von modernen HPC bereitgestellten hohen Übertragungsbandbreiten zwischen den compute-nodes sind damit nicht erforderlich. Hier zeigt sich des Weiteren ein Vorteil von OpenFOAM im Vergleich zu ANSYS. Wegen der fehlenden Abhängigkeit von Softwarelizenzen können beliebig viele (bis zur Ausnutzung der vollen Systemressourcen) Simulationen parallel ausgeführt werden.

Numerischer Aufwand

Der Mehraufwand durch die hier verwendete Vorgehensweise der Unsicherheitsanalyse besteht lediglich darin, dass die CFD-Simulation für eine gewisse Anzahl von Wertekombinationen der Eingangsvariablen zu wiederholen sind. Hierbei genügt es oft, die Eingangsvariablen grob auf einem Raster festzulegen und je eine Simulation für die sich ergebenden Kombinationen durchzuführen. Im Zusammenhang mit der Verwendung von OpenFOAM kann ebenso der C++-Code benutzt werden. Dieser kopiert die notwendigen Unterordner aus OpenFOAM, stellt die entsprechenden Parameter in den Steuerdateien ein und startet für jede Parameterkombination automatisch eine Simulation. Letzteres kann nacheinander seriell oder parallel auf einem Großrechner durchgeführt werden. Dadurch ist es insgesamt möglich, alle Arbeitsschritte bis zur Fertigstellung der Response-Surface automatisiert ablaufen zu lassen.

Sampling von Polynomen

Es ist nicht zwingend erforderlich, die Eigenschaften der Verteilungsdichtefunktionen durch Sampling zu berücksichtigen. Da die Polynome nach Wahl der Ordnung und Parameter festliegen, könnte man diese direkt berechnen. Sind X_1, \dots, X_n Zufallsvariablen, so wäre zumindest:

$$E\left(\sum_i X_i\right) = \sum_i E(X_i). \quad (5.14)$$

Bei stochastisch unabhängigen Variablen X_1, \dots, X_n würde auch gelten, dass:

$$E(\Pi_i X_i) = \Pi_i E(X_i). \quad (5.15)$$

Allerdings gilt im Allgemeinen nicht:

$$E(g(X_i)) = g(E(X_i)). \quad (5.16)$$

Hier müsste eine Integration ausgeführt werden:

$$E(g(X_i)) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)f(x)dx, \quad (5.17)$$

wobei die Funktion $f(x)$ die Dichtefunktion der Zufallsvariablen X_i ist. Für ein Polynom 2. Ordnung in einer Variablen müsste man dies bereits ausführen, weil mit den quadratischen Termen (5.14) und (5.14) nicht gelten. Ähnliches gilt für die Bestimmung der Varianz, wobei hier auf eine Angabe der Gleichungen verzichtet werden soll. Bei Verwendung von multivariaten Polynomen wird das zu lösende (mehrdimensionale) Integral komplexer, ist jedoch im Prinzip ausführbar.

Allerdings ist die Programmierung und Durchführung des Sampling sehr effizient und ideal parallel ausführbar. Man kann schnell Änderungen an den Dichtefunktionen, an der Termstruktur und Ordnung der Polynome vornehmen. Die C++-Programmstruktur für die Durchführung der Samplings ist zudem vergleichsweise einfach. Ein passendes Unterprogramm zur Integration erschien für den allgemeinen Fall nicht trivial und es ist offen, ob dies bei der erforderlichen Freiheit in der Wahl der Polynomenstruktur und der Verteilungseigenschaften einen echten Vorteil bieten kann. Es wurde daher entschieden, nur die Terme mit dem Code zu sampeln, für die eine triviale Berechnung des Anteils zum Erwartungswert und zur Varianz nicht möglich ist.

6. Anwendungsbeispiel: Explosionsgefährdete Bereiche an Schwimmdachtanks

In der Einleitung zur Habilitationsschrift wurde angegeben, dass die verschiedenen Verfahren zur Mitberücksichtigung von Unsicherheiten auf der Daten- und Modellebene auf ein industrie-relevantes Beispiel angewendet werden sollen. Dieses Anwendungsbeispiel ist der Hauptgegenstand dieses Kapitels.

Hierfür wurde die Wahrscheinlichkeitseinschätzung für gefährliche explosionsfähige Atmosphären an zylindrischen Schwimmdachtanks für Mineralölprodukte ausgewählt. Die Ausgangsproblemstellung wurde als offenes Forschungsproblem an die Universität von Industrieverbänden und einer Berufsgenossenschaft herangetragen. Im Normalbetrieb und bei Abweichungen von diesem, insbesondere im Schadenfall, emittieren Schwimmdachtanks flüchtige, organische Kohlenwasserstoffe (VOC) in die Umwelt. Schwimmdachtanks selbst und die angrenzenden Areale sind somit explosionsgefährdete Bereiche, denen durch die TRGS 509 [49] Zonen unterschiedlicher Eintrittswahrscheinlichkeiten für gefährliche explosionsfähige Atmosphären zugeordnet werden. Die Wahrscheinlichkeit des gleichzeitigen Auftretens von zündfähigen VOC-Konzentrationen und von Zündquellen, zu denen auch Naturereignisse wie Blitze hinzugezogen werden müssen, ist hier so gering wie möglich zu halten. Ausgangsproblemstellung ist die Frage, ob die derzeitige Zonenzuweisung der explosionsgefährdeten Bereiche überkonservativ oder angemessen ist. Im letzteren Fall würden möglicherweise Erweiterungen in den Blitzschutzmaßnahmen erforderlich sein, um den Anforderungen der TRGS 723 [54] und der DIN-VDE 62305 [55] zu entsprechen. Kann man jedoch zeigen, dass die gemeinsame Auftretenswahrscheinlichkeit von Blitz und gefährlicher explosionsfähiger Atmosphäre gering ist, so kann möglicherweise darauf verzichtet werden.

In diesem Kapitel sollen die Ausgangsproblemstellungen, die Projektziele und Projektbestandteile sowie die jeweiligen Untersuchungsergebnisse angegeben werden. Die Untersuchungsergebnisse wurden in umfassenden Forschungsberichten [192, 191] und in (internationalen) Fachzeitschriften publiziert [193, 194, 195, 196, 93]. Der Abschnitt 6.1 gibt zunächst zu allen Projektbestandteilen einen Kurzüberblick. In den folgenden Abschnitten 6.2-6.4 werden ausgewählte Projektbestandteile dann ausführlicher dargestellt.

Zusammenfassung: In diesem Kapitel wird ein Kurzüberblick über wesentliche Projektziele, Projektbestandteile und Ergebnisse zum industrielevanten Anwendungsproblem „Explosionsgefährdete Bereiche an Schwimmdachtanks“ angegeben. Die Darstellung ist ebenso eine Kurzfassung zweier umfangreicher Forschungsberichte. In beiden war die Mitberücksichtigung von Unsicherheiten in allen Eingangsparametern und Modellgrößen wesentliches Ziel. Die in den Kapiteln zuvor beschriebenen Verfahren zur Mitberücksichtigung von Unsicherheiten auf Daten- und Modellebene kamen (bis auf die Response-Surface) zur Anwendung. Ausgewählte Teilprojekte werden in diesem Kapitel detaillierter beschrieben.

6.1. Kurzüberblick über wesentliche Projektziele, Bestandteile und Teilergebnisse

6.1.1. Ausgangsproblemstellung

In Raffinerien benötigte Grundstoffe wie Rohöl und die dort hergestellten petrochemischen Produkte werden vor dem Verkauf in Lagertanks zwischengelagert, bevor eine Umfüllung in

6. Anwendungsbeispiel: Explosionsgefährdete Bereiche an Schwimmdachtanks

gefahrenrechtlich zulässige Transportbehälter und ein Abtransport erfolgt. Üblicherweise kommen für die Zwischenlagerung Festdach- oder Schwimmdachtanks in Betracht, wobei für dieses Projekt Schwimmdachtanks im Vordergrund standen. Es gibt hier verschiedene Bauformen die alle durch ein bewegliches Dach gekennzeichnet sind, welches bei Entleer- und Befüllvorgängen dem sich ändernden Flüssigkeitspegel folgt und auf dem Lagergut schwimmt. Insbesondere gibt es bei Schwimmdachtanks kein weiteres Dach oberhalb des Tanks zur Emissionsminderung bzw. zur Abgrenzung von Wettereinflüssen.

Hauptgegenstand dieses Projektes war die Untersuchung von Emissionen leichtflüchtiger Verbindungen aus Schwimmdachtanks (SDT) im Normalbetrieb bei Abweichungen von diesem und im Falle von Schäden. Im Normalbetrieb gehen die Emissionen nahezu vollständig vom Dachbereich aus.

Abgedichtet wird das bewegliche Tankdach zur Tankhülle und zu notwendigen Dachdurchführungen durch spezielle Dichtungen bzw. Dichtungssysteme. Trotz der Beweglichkeit des Daches und der zahlreichen Dichtungen ist das Emissionsverhalten gegenüber alternativen Tankbauweisen gering. Im Forschungsbericht [191] wird beispielsweise auch ein Quervergleich zu Festdachtanks diskutiert. Ohne auf die Bauform konkret einzugehen sei hier angegeben, dass bei SDT kaum Luftvolumen zur Bildung von Gasphasen unter dem Dach zur Verfügung steht und eine permanent aktive Tankatmung entfällt.

Emissionen von Schwimmdachtanks im Normalbetrieb werden hierbei durch Verdunstungen von Schmierfilmen bei der Entnahme (Entnahmeverluste) und durch Entweichungen leichtflüchtiger Komponenten an Dichtungssystemen (Standverluste) verursacht. In einer Revisionsphase werden die flüssigen Lagerstoffe zunächst vollständig aus dem Schwimmdachtank entfernt. Vor einer Begehung des Tanks erfolgt üblicherweise der Anschluss einer Nachverbrennung (Fackel) oder einer Dämpfespeicherung. In diesem Fall werden die flüchtigen organischen Stoffe bis zur Freimessung abgesaugt und können nicht in die Umgebung entweichen. Wesentliche Emissionen ergeben sich in der Entleerphase durch Standverluste bei offener Atmungsarmatur, bei restentleertem Tank durch Schmierfilmverdunstung bzw. Verdunstungen aus dem Tanksumpf und beim Wiederbefüllen durch Verdrängungsverluste von teilgesättigter Luft. Liegen an einem Schwimmdachtank Schäden vor, so sind die daraus resultierenden Emissionen vom konkreten Schadenfall, vom Lagerstoff und von äußeren Umständen abhängig. Wie bereits in der Kapitel-einleitung angegeben, werden die Zonen an Tanks und in deren Umfeld in Abhängigkeit von Häufigkeit und Dauer des Vorhandenseins einer gefährlichen explosionsfähigen Atmosphäre eingeteilt. Die TRGS 509 gibt konkrete Empfehlungen für die räumliche Ausprägung der Zonen. In Abbildung 6.1 ist ein bearbeitetes Foto eines Tanks¹ und die aktuelle Zonenzuweisung dargestellt. So ordnet die TRGS 509 Bereiche über dem Tankdach und dem Auffangraum die Zone

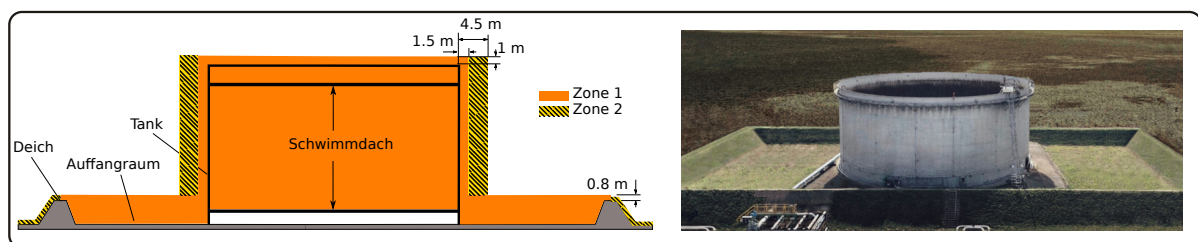


Abbildung 6.1: Darstellung der aktuellen Zonenzuweisung gemäß der TRGS 509 und Abbildung eines repräsentativen Schwimmdachtanks.

1 zu. In Zone 1 liegt laut Definition der Gefahrstoffverordnung gelegentlich eine gefährliche explosionsfähige Atmosphäre vor, deren Entzündung verhindert werden muss. Dies wird zum einen mit der Nutzung geeigneter Ausrüstung sichergestellt. Zum anderen dürfen von außen keine Zündquellen, wie z.B. ein Blitz, in die Zone 1 hineinwirken können. Die Blitzschutzan-

¹Hier wurde das Raffinerieumfeld und die Bezeichnung des Tanks entfernt.

forderungen in Abhängigkeit von der Zone werden näher in TRGS 723 [54] und der DIN-VDE 62305 [55] beschrieben.

Grundlegend geht aus den beiden zuvor genannten Vorschriften hervor, dass in einer Zone 1 kein Blitz als Zündquelle wirksam werden darf, aber die Blitzableitung durch die Zone möglich ist, wenn der Ableiter selbst keine Zündquelle darstellt.

Bei strenger Auslegung der TRGS 723 müssten an vielen aktuell verwendeten Schwimmdachtanks weitere Blitzschutzmaßnahmen ergriffen werden. Sollte allerdings die momentane Zoneneinteilung übermäßig konservativ sein, so könnte eine andere Zoneneinteilung erfolgen. Eine Abstufung auf eine Zone 2 würde bedeuten, dass mit dem Auftreten einer gefährlichen explosionsfähigen Atmosphäre im Normalbetrieb normalerweise nicht, wenn dennoch, dann nur selten und kurzzeitig zu rechnen ist.

Leider sind die Begriffe gelegentlich, selten und kurzzeitig in den zitierten Quellen nicht klar definiert. Grundsätzlich könnte man jedoch bei hinreichend geringer gleichzeitiger Auftretenswahrscheinlichkeit von einem Blitz und einer gefährlichen explosionsfähigen Atmosphäre auch bei bestehender Zoneneinteilung von erweiterten Blitzschutzmaßnahmen absehen und dies im Rahmen der Gefährdungsbeurteilung nach § 6 Abs. 8 GefStoffV begründen. Die hierfür erforderliche Bestimmung der Auftretenswahrscheinlichkeit einer gefährlichen explosionsfähigen Atmosphäre im Normalbetrieb, bei Revisionen und bei Schäden war das Ziel der durchgeführten Untersuchungen.

6.1.2. Langzeitmessungen an einem Schwimmdachtank für Ottokraftstoffe

Für den Forschungsbericht 793 [192], beauftragt von der Deutschen Wissenschaftlichen Gesellschaft für Erdöl, Erdgas und Kohle e.V. (DGMK), wurden Emissionsabschätzungen und Langzeitemissionsmessungen an einem repräsentativen Schwimmdachtank für Ottokraftstoffe durchgeführt. Hierfür wurde ein Lagertank (siehe Abbildung 6.1 (rechts)) für handelsübliche Ottokraftstoffe mit einer Größe von etwa 12 000 m³ ausgewählt. Das Hauptziel des Forschungsprojektes war die Messung des tatsächlichen Emissionsverhaltens eines Schwimmdachtanks und der Vergleich mit der Erwartung gemäß der Zonenzuordnung.

Zur Durchführung der Emissionsmessungen wurde der Tank und der Auffangraum mit einem geeigneten Netz an IR-Detektoren ausgestattet. Abbildung 6.2 zeigt die gewählten und im Bericht begründeten Detektorpositionen.

Die verwendeten Detektoren [197] waren für Langzeitüberwachungen geeignet und zeichneten die Emissionen für den Zeitraum von einem halben Jahr (01.07.2016-23.12.2016) lückenlos auf. Die Überwachung beinhaltete auch die zeitsynchrone Aufzeichnung vom Wettergeschehen (Windstärke, Temperatur und Sonneneinstrahlung) sowie die Aufzeichnung der Position des Tankdaches. Im Rahmen des Berichtes wurde die eingesetzte Messtechnik detailliert beschrieben und die Eignung der Messgeräte aufwändig² unter Laborbedingungen untersucht. Hierfür wurde ein Satz baugleicher Detektoren verwendet, um auch Abweichungen zwischen den Messgeräten erfassen zu können.

Es wurde der Nachweis erbracht, dass die untere Detektionsgrenze und die Genauigkeit der Messerfassung für die Projektdurchführung hinreichend sind. Auch musste eine geeignete Kalibrierung für die Detektion der emittierten Stoffgemische gefunden werden.

Für die Laboruntersuchungen wurde zusätzlich ein hochauflösender Photoionisationsdetektor (PID) [198] für simultane Messungen mit dem Infrarotdetektor (IRD) eingesetzt. Der PID wurde ebenfalls benutzt, um bei einem Entleervorgang reale Konzentrationen auf dem Tankdach punktuell zu messen. Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass sich die verwendeten IR-Detektoren als geeignet erwiesen haben, unter den im Außenbereich geltenden Bedingungen relevante Emissionen detektieren zu können. Die hierfür wesentlichen Detektoreigenschaften

²Es wurde beispielsweise eine Messkammer entwickelt, mit der sehr genau vordefinierte Konzentrationen für die simultane Messung mit Infrarot- und Photoionisationsdetektoren eingestellt werden konnte sowie ein Windkanal zur Untersuchung des Ansprechverhaltens des Infrarotdetektors bei instationären Bedingungen.

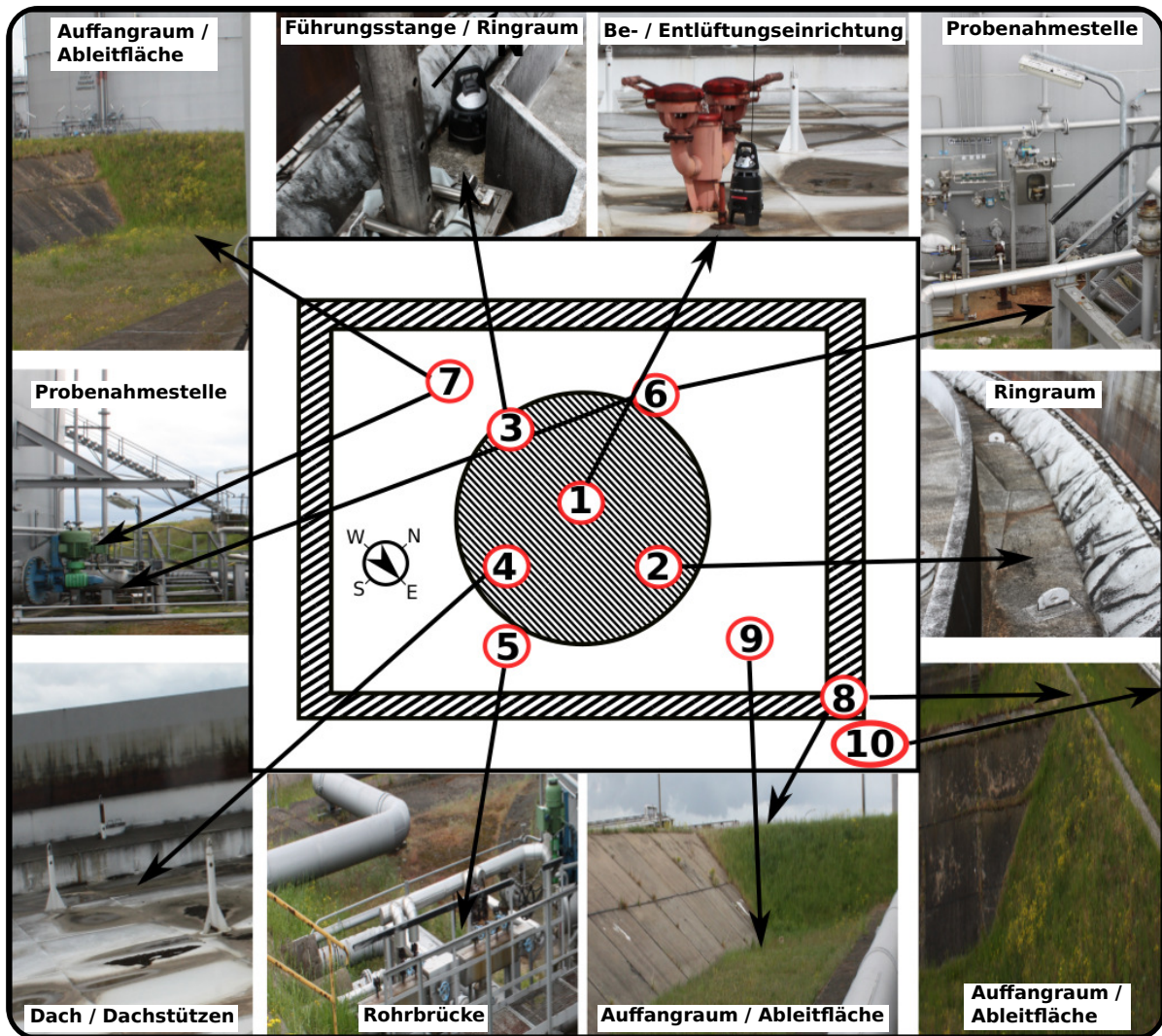


Abbildung 6.2: Illustration der Detektorpositionen für die Langzeitemissionsmessungen an einem repräsentativen Schwimmdachtank im Rahmen des DGMK Forschungsprojektes 793 [192].

wie Detektierbarkeit, Detektionsgrenze und Messauflösung mit Bezug zur unteren Explosionsgrenze von Ottokraftstoffdämpfen waren hinreichend.

Für umfassende Unsicherheitsbetrachtungen wurden Unterschiede in den Gemischzusammensetzungen (Blends), Abweichungen zwischen verschiedenen Messgeräten, Kalibrierungengenauigkeiten und instationäre Bedingungen ebenso einbezogen wie Einflüsse von Schwankungen in der Zusammensetzung der Emissionen. Der Vergleich der im Labor gewonnenen mit denen vom Hersteller bereitgestellten Daten zum Detektor zeigte sogar, dass die Herstellerangaben sehr konservativ zu Lasten der Gerätegüte angegeben wurden.

Im Forschungsbericht 793 wurde die API 2517/2519 [56] und die VDI 3479 [199] verwendet, um das Emissionsverhalten konservativ abzuschätzen. Emissionsspitzen von etwa $4,8 \cdot 10^{-4} \text{ kg s}^{-1}$ (Kombination ungünstiger Bedingungen) führen unter den am Tank vorliegenden Bedingungen vermutlich nur zu Konzentrationen im ein- bis zweistelligen ppm-Bereich.

Die Auswertung der von den Detektoren aufgezeichneten Messreihen ergab zu keinem Zeitpunkt eine Detektion einer für eine gefährliche explosionsfähige Atmosphäre relevanten Konzentration. Bis auf wenige Ausnahmen rauschten die Detektoren unterhalb der vom Hersteller angegebenen Nachweisgrenze. Eine Korrelation zu Wetter- und Befahrdaten ging wegen der geringen Emissionen im Sensorrauschen unter. Mit dem Photoionisationsdetektor wurden Konzentrationen

im ein- bis zweistelligen ppm-Bereich in Tankwandnähe und im Ringspalt gemessen. In der Tankmitte lagen die gemessenen Konzentrationen im einstelligen ppm-Bereich, was insgesamt konsistent mit den Erwartungen gemäß API 2517/2519 und die VDI 3479 angesehen werden konnte. Die Ergebnisse des Forschungsbericht 793 können so zusammengefasst werden, dass innerhalb der Überwachungszeit, außer Sensorrauschen, keine explosionsfähige Konzentrationen detektiert wurden. Für weitere Details soll hier auf den Bericht [192] verwiesen werden.

6.1.3. Datenerhebung zu Tankschäden mit Einfluss auf das Emissionsverhalten

Wie zuvor angegeben, können mit der API 2517/2519 oder der VDI 3479 Emissionen aus Schwimmdachtanks im Normalbetrieb abgeschätzt werden. In beiden Richtlinien finden sich jedoch keine Ansätze zur Emissionsabschätzung bei Schäden am Tank. Auch Angaben zu gelegentlich bis häufig beobachteten Schäden werden nicht vorgenommen. Für das Forschungsprojekt wurde daher entschieden, eine deutschlandweite Betreiberumfrage zu Tankschäden und deren Eintrittshäufigkeiten sowie eine Literaturrecherche durchzuführen. Verschiedene Experten (Raffinerien, TÜV, Hersteller von Tankkomponenten) wurden darüber hinaus bei Besichtigungen oder in Gesprächen zu Häufigkeiten beobachteter Schäden befragt. Zusätzlich wurden die kontaktierten Betreiber gebeten, eine möglichst vollständige Auflistung zu den genutzten Schwimmdachtanks (Umschlagszahlen, Konstruktionsdaten, Lagerstoffe) bereitzustellen. Etwa ein Drittel der deutschlandweit verwendeten Tanks konnten für die Analyse benutzt werden. Bezüglich der Umfragebögen, der gestellten Fragen und der zugehörigen Vorgehensweise bei der Auswertung sei hier auf den Forschungsbericht [191] verwiesen. Dort wurden die berichteten Schäden gruppiert, um repräsentative Vertreter dieser Gruppen für Emissionsabschätzungen auswählen zu können.

Bedeutende Schadenereignisse in Deutschland sind in der ZEMA-Datenbank [31] hinterlegt. Diese dient der Erfassung und Bewertung von Störfällen in Anlagen, die der Störfall-Verordnung unterliegen und in denen meldepflichtige Ereignisse stattfanden. Die Berichte enthalten Informationen über den Ort und die Zeit des Ereignisses, über den Ereignisverlauf sowie über die Konsequenzen, Notfallmaßnahmen und Schlussfolgerungen, die sich daraus ergeben haben. Die (wenigen) gemeldeten Fälle wurden für die Untersuchungen berücksichtigt. Mittels dieser Datenbank und der Betreiber- bzw. Expertenbefragung konnten Ereignisraten bestimmt werden. Berücksichtigt man N Tanks unterschiedlicher Ausstattung i , $i = 1, \dots, m$ und sind n_i die Häufigkeiten sowie t_i die Gesamtnutzungszeiten des Tanktypes i in Stunden, so gilt:

$$N = \sum_{i=1}^m n_i, \quad T_g = \sum_{i=1}^m t_i. \quad (6.1)$$

Hierin ist T_g die Gesamtnutzungszeit aller Tanks in Stunden. Werden nun Schäden hinzugenommen, so sei $n_{i,j}$ die Anzahl der Tanks vom Typ i bei denen der Schaden j , $j = 1, \dots, p$ auftrat. Damit sind:

$$h_{i,j} = \frac{n_{i,j}}{t_i}, \quad h_j = \sum_{i=1}^m \frac{n_{i,j}}{t_i} \quad \text{bzw.:} \quad h_j = \frac{n_j}{T_g} \quad (6.2)$$

die Schadenrate $h_{i,j}$ für den Schaden j beim Tanktyp i je Betriebsstunde bzw. h_j die Schadenrate des Schadens j über alle Tanks. In der Formel rechts in (6.2) wurde nur berücksichtigt, wie häufig ein Schaden j bei Berücksichtigung aller Tanks insgesamt auftrat. Aus der durchgeführten Umfrage wurde mittels der Nutzungszeit der Schwimmdachtanks die Gesamtbetriebszeit T_g aller Tanks bestimmt zu $T_g = 8 \cdot 10^3$ a. Ebenso mit Hilfe der Umfrage und der Expertenbefragung können für verschiedene Schadenereignisse die Häufigkeiten gemäß (6.2) abgeschätzt werden. Die entsprechenden Daten sind in Tabelle 6.1 angegeben.

Beispielsweise gab es für den Schaden $j :=$ „Schwimmdach gesunken“ $n_j = 2$ Ereignisse, womit

Tabelle 6.1: Übersicht zu den Eintrittshäufigkeiten (Schadenraten) verschiedener Schadenereignisse an Schwimmdachtanks. Es wurden Literaturdaten, Daten abgeleitet mit Hilfe der ZEMA-Datenbank sowie Daten aus der deutschlandweiten Umfrage eingetragen.

Ereignis	Rate je Tank in a ⁻¹	Quellen
Lache auf dem Dach	$1,6 \cdot 10^{-3}$	[200, 201]
Schwimmdach gesunken	$1,1 \cdot 10^{-3}$	[200, 201]
Lache im Deich	$2,8 \cdot 10^{-3}$	[200, 201]
Behälterversagen	$3,0 \cdot 10^{-6}$	[200, 201]
Ringspaltbrand	$1,6 \cdot 10^{-3}$	[200, 201]
Ringspaltbrand	$3,8 \cdot 10^{-4}$	[202]
Vollbrand des Dachbereiches	$1,2 \cdot 10^{-4}$	[200]
Vollbrand des Dachbereiches	$3,0 \cdot 10^{-5}$	[201]
Vollbrand des Dachbereiches	$4,2 \cdot 10^{-5}$	[202]
kleines Feuer im Deich	$9,0 \cdot 10^{-5}$	[200, 201]
großes Feuer im Deich	$6,0 \cdot 10^{-5}$	[200, 201]
Feuer im Deich	$1,6 \cdot 10^{-5}$	[202]
Lachenbrand auf dem Dach	$3,0 \cdot 10^{-5}$	[201]
Lachenbrand auf dem Dach	$6,5 \cdot 10^{-6}$	[202]

Ereignis	Rate je Tank in a ⁻¹	Quellen
Primärdichtungsschaden	$5 \cdot 10^{-2}$	Umfrage
Sekundärdichtungsschaden (keine TD)	$1 \cdot 10^{-1}$	Umfrage
Sekundärdichtungsschaden (mit TD)	$7 \cdot 10^{-2}$	Umfrage
Tertiärdichtungsschaden (TD)	$1 \cdot 10^{-1}$	Umfrage
Lache auf dem Dach	$5 \cdot 10^{-3}$	Umfrage
Schwimmdach gesunken (partiell)	$1,5 \cdot 10^{-3}$	Umfrage
Schwimmdach gesunken	$2,5 \cdot 10^{-4}$	Umfrage
Dacharmaturschaden	$2 \cdot 10^{-2}$	Umfrage
Atmungsarmaturschaden	$1 \cdot 10^{-3}$	Umfrage
Behälterversagen	$1 \cdot 10^{-6}$	Umfrage
Einfüllen (falsches Produkt)	$1,3 \cdot 10^{-4}$	Umfrage
Einfüllen (falsche Temperatur)	$1 \cdot 10^{-2}$	Umfrage
Überfüllen des Tanks	$1 \cdot 10^{-5}$	Umfrage
Schaden mit kritischer Emission	$\approx 1 \cdot 10^{-3}$	Experten

Ereignis	Häufigkeit	Quellen
Rohrleitungsleckage	1	[31]
Leck an der Tankhülle	1	[31]
Loch im Tankboden	1	[31]

folgt:

$$h_j = \frac{n_j}{T} = \frac{2}{8000 \text{ a}} = 2.5 \cdot 10^{-4} \text{ a}^{-1}. \quad (6.3)$$

Sind nicht alle Schäden eines Typs zu den registrierten Tanks erfasst, so werden die auf diese Weise berechneten Schadenraten untere Grenzen darstellen. Die angegebenen Schadenraten besitzen Schätzcharakter, können jedoch in ihrer Größenordnung als korrekt angesehen werden. Zur Berechnung der Schadenswahrscheinlichkeit für einen bestimmten Schaden wurde angenommen, dass die schadensbeschreibende Zufallsvariable exponentialverteilt ist. Die von den Experten geschätzten Schadenshäufigkeiten werden daher als zeitunabhängig aufgefasst und als Schätzwerte der Ausfallrate $h_j = \lambda_j$ der Exponentialverteilung angesehen. Die angegebenen Häufigkeiten stellen einen Erwartungswert für die Ereignisrate je Jahr dar und entsprechen dem Maximum-Likelihood-Schätzwert für die Verteilung auf der Basis der Beobachtungen.

Die für verschiedene Schäden tatsächlich relevante Verteilungsfunktion muss nicht zwingend eine Exponentialverteilung sein. Da hierzu jedoch keine Daten vorliegen, die es erlauben, auf eine andere Verteilungsfunktion zu schlussfolgern, wurde diese Verteilung wegen der mathematischen Einfachheit gewählt und weil wesentliche Grundannahmen für exponentialverteiltes Ausfallverhalten erfüllt sind.

Ist λ der Verteilungsparameter (beobachtete Schadenhäufigkeit), so findet man für die Ausfall- bzw. für die Überlebenswahrscheinlichkeit:

$$F(t) = 1 - e^{-\lambda t}, \quad \overline{F(t)} = 1 - F(t) = e^{-\lambda t}. \quad (6.4)$$

Wegen der Gedächtnislosigkeit der Verteilung ist die bedingte Wahrscheinlichkeit für ein Schadenereignis nach eines Zeitintervalls Δt unter der Annahme, dass es vor der Zeit t_0 keinen Schaden gab, so hoch wie die Wahrscheinlichkeit für einen Schaden nach Δt :

$$F(t \geq t_0 + \Delta t \mid t \geq t_0) = F(t \geq \Delta t) \quad (6.5)$$

Einige der in Tabelle 6.1 angegebenen Ausfallraten wurden als a priori Wahrscheinlichkeiten für Eingangsereignisse (Wurzelknoten) des weiter unten verwendeten Bayesschen Netzes bzw. zur Kontrolle von Zwischenwahrscheinlichkeiten an inneren Knoten benutzt.

Die für den Forschungsbericht [191] durchgeführte Literaturrecherche ergab, dass es zu Ereignissen mit Freisetzungen oder Bränden in Tanklagern zahlreiche Publikationen gibt. Eine sehr umfangreiche Untersuchung zu Unfällen an und mit Lagertanks in Tankanlagen ist die 2006 publizierte Arbeit von Chung und Lin [203], welche 242 gemeldete Unfälle aus einem Zeitraum von 40 Jahren zusammenfasst und analysiert. Als Hauptursachen wurden Blitzeinschläge und Wartungsmängel aufgeführt, die zu Bränden, Explosionen oder zur Freisetzung führten.

Weitere Ursachen für Abweichungen vom bestimmungsgemäßen Betrieb waren Bedienungsfehler, technische Fehler sowie Leckagen oder Brüche. Bei den Bedienungsfehlern dominieren Tanküberfüllungen und bei den technischen Fehlern gesunkene Schwimmdächer. Als Ursachen für das Sinken des Daches werden Ereignisse beschrieben, bei denen das Dach durch Tankdeformation festgeklemmt bzw. in eine Schräglage gebracht wurde, etwa bei Überlastung oder Verstopfung der Dachentwässerung.

Die Ursachen speziell von Bränden und Explosionen an Schwimmdachtanks wurden in einer aktuelleren Übersichtsarbeit von P. Moshashaei et al. (2017) [204] detaillierter untersucht. Eine in beiden zuvor zitierten Übersichtsarbeiten als Referenz angegebene Arbeit von Persson und Lönnemark [205] untersuchte 480 Brandereignisse an Lagertanks im Zeitraum von 1951 bis 2003. Diese Arbeit wiederum zitiert Untersuchungsergebnisse vom LASTFIRE-Projekt [201], welche zu den Brandereignissen bei Schwimmdachtanks Eintrittswahrscheinlichkeiten für Risikobetrachtungen ermittelt haben. Da die Brandereignisse immer Folge einer Freisetzung und einer Zündquelle waren, wurden mit diesen Untersuchungsergebnissen neben Zündwahrscheinlichkei-

ten auch Eintrittswahrscheinlichkeiten für Lachenbildungen, Leckagen und anderen Schäden ermittelt. Diese Angaben werden von der International Association of Oil and Gas Producers (IAOPG) [200] als die verlässlichsten Abschätzungen zu Wahrscheinlichkeiten für Freisetzungen und Brände an Schwimmdachtanks angesehen. Relevante Ereignisraten wurden der Tabelle 6.1 hinzugefügt.

6.1.4. Durchführung von Emissionsabschätzungen

Die API 2517/2519 oder auch die VDI 3479 können benutzt werden, um Emissionen aus Schwimmdachtanks im Normalbetrieb abzuschätzen. Erwähnenswert ist hierbei, dass es sich bei der VDI 3479 lediglich um eine auszugsweise Übertragung der API 2517/2519 in die Deutsche Sprache handelt. Es wurden zudem verschiedene Einheiten in hier gebräuchliche Einheiten umgeformt. Allerdings ist die API 2517/2519 wesentlich umfangreicher und gibt Hinweise zur Begründung der getroffenen Annahmen. Für das Forschungsprojekt wurde die API 2517 benutzt, um für alle aus der Umfrage ermittelten Schwimmdachtanks eine Emissionsabschätzung vornehmen zu können. Hierzu wurden die Tanks nach emissionsrelevanten Komponenten (Ringspaltdichtungs-, Führungsrohrtypen und Zusatzdichtungen) in 5 Kategorien eingeteilt, welche von eher ungünstigem Emissionsverhalten (Typ 1) bis zu sehr günstigem Emissionsverhalten (Typ 5) reichen. Der im Forschungsvorhaben [192] verwendeten Schwimmdachtank kann als Tank mittleren Emissionsverhaltens (Typ 3) aufgefasst werden. Mit einem speziell hierfür vom Autor angefertigten C++-Programm konnten umfassende Emissionsprognosen für die Tanktypen vorgenommen werden, welche zudem die Bandbreite der verwendeten Lagerstoffe sowie die Unsicherheiten in den Stoffdaten und Umgebungsbedingungen berücksichtigten. Über die API 2517/2519 hinausgehend wurden zudem Ansätze beschrieben, wie Emissionsminderung durch dort nicht betrachtete Tertiärdichtungen, Überziehdichtungen für Führungsrohre und weitere vorgenommen werden können.

Für die Abschätzung von Emissionen während der Durchführung von Tankrevisionen wurden die Betreiber um detaillierte Ablaufbeschreibungen gebeten. Mit diesen Beschreibungen wurden dazu passende Emissionsabschätzungen aus der API 2517/2519 ausgewählt und die Emissionsmassenströme begründet, die möglicherweise in Tankrevisionen auftreten könnten.

Im Abschnitt zuvor wurde angegeben, wie Schäden erfasst und dass diese kategorisiert wurden. In der API 2517/2519 sind keine Ansätze zu finden, wie die Verschlechterung des Emissionsverhaltens im Schadenfall für einen spezifischen Tank ausfallen kann. Für jede Schadenkategorie wurden eigene Vorgehensweisen zur Emissionsprognose entwickelt und begründet. Diese umfassen Tertiär-, Sekundär- und Primärdichtungsschäden, den Verlust von vorgenannten Dichtungsringen, Rosteinflüsse, Lachenbildungen auf dem Dach wegen Überschwappen von Lagerstoff, Durchrostungen bis hin zu partiellen oder vollständigen Dachuntergängen. Für die Emissionsprognose bei Lachenbildung wurden zudem eigene Versuchsserien durchgeführt und publiziert [196].

Auszüge aus den Abschätzungen zum Normalbetrieb, für Revisionen und bei Schäden sind weiter unten in Abschnitt 6.2 angegeben. Erwähnenswert ist, dass alle Abschätzungen stets konservativ vorgenommen wurden, um die Emissionen für kein betrachtetes Ereignis zu unterschätzen. Für weitere Details und Visualisierungen von Abhängigkeiten sei wiederum auf den Forschungsbericht [191] verwiesen. Eine etwas ausführlichere Beschreibung der Emissionsabschätzungen findet man etwas weiter unten im Abschnitt 6.2.

6.1.5. Messungen im Windkanal und Ausbreitungssimulationen

Umströmungs- und Ausbreitungsmessungen im Windkanal

Die durchgeführten Windkanaluntersuchungen dienten der Visualisierung der Tankumströmung und der Messung von Konzentrationsprofilen bei definierten Tracergasfreisetzungen aus

der Mitte des Tanks.

Auch wurden im Windkanal gemessene Konzentrationsprofile mit denen aus den durchgeführten CFD-Simulationen verglichen. Durch die gute Übereinstimmung können die Windkanaluntersuchung auch als Plausibilisierung der getroffenen Annahmen für die Durchführung der CFD-Simulationen gewertet werden. Das windkanalgeeignete Tankmodell wurde am meteorologischen Institut der Universität Hamburg [188] konstruiert und im Windkanal *BLASIUS* des EWTL [206] untersucht.

Das Modell ist eine maßstabsgetreue Verkleinerung (1 : 200) des Tanks, für den auch die CFD-Simulationen durchgeführt wurden. Abbildung 6.3 zeigt dieses Modell zusammen mit dem Windkanal. Für eine realitätsnahe Umströmung wurde die Oberfläche des Tankmodells

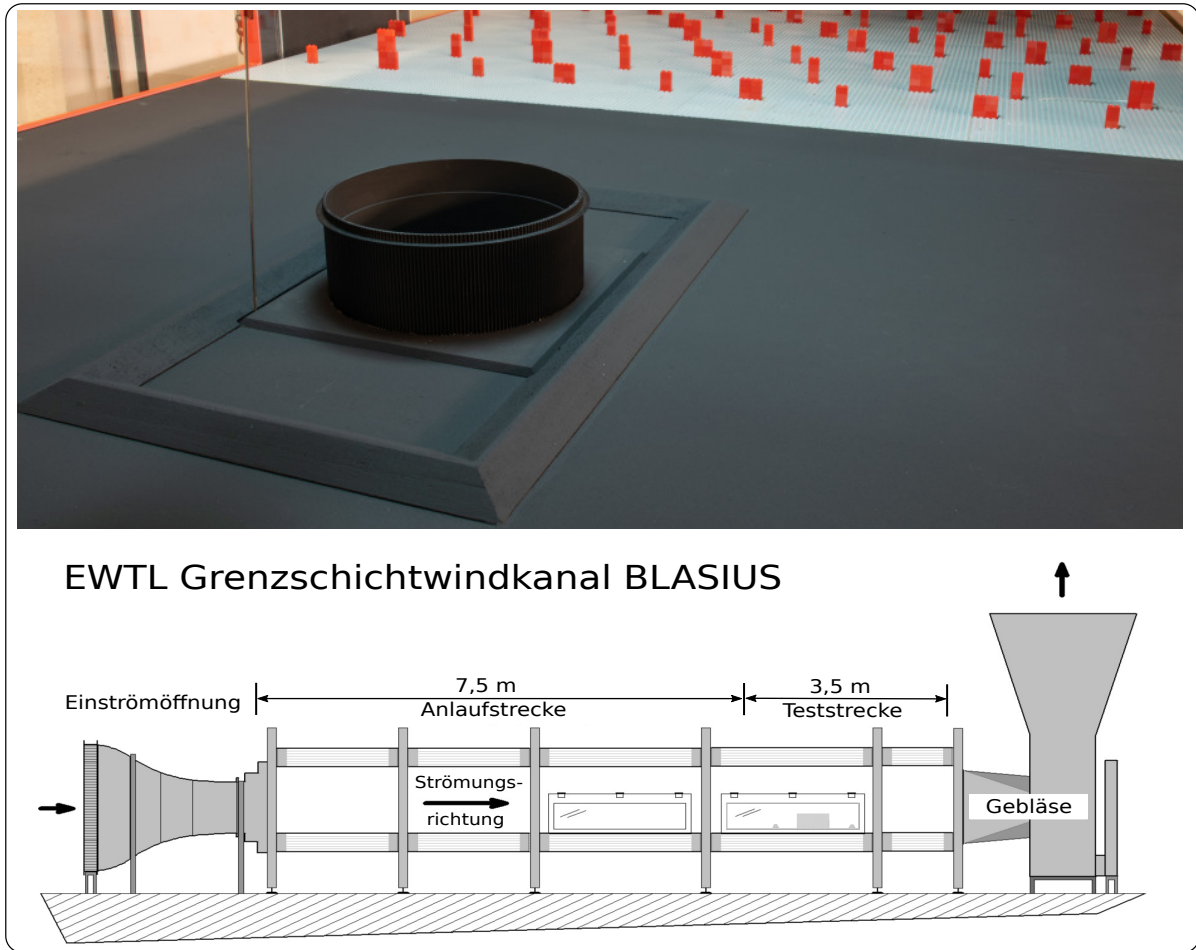


Abbildung 6.3: Darstellung des maßstabsgetreuen Modells (oben) für die Umströmungsuntersuchung im Windkanal (unten). Im Hintergrund erkennt man Rauigkeitselemente (rot) zur Erzeugung einer spezifischen Turbulenz in den anströmenden Luft.

aufgeraut und eine naturähnliche Windgrenzschicht mit Hilfe von Turbulenzgeneratoren und Bodenrauigkeiten im Modellvorlauf erzeugt.

Beim abgebildeten Windkanal handelt es sich um einen Grenzschichtwindkanal, bei dem die Windströmung in den bodennahen Luftschichten der Atmosphäre nachgebildet wird. Die Modellierung von Strömungs- und Ausbreitungsprozessen in der bodennahen Windgrenzschicht erfolgt hierbei gemäß VDI 3783/12 [207]. Für die Messung der Strömung am Schwimmdecks und im Ausbreitungsgebiet wurde ein LASER-Doppler-Anemometer (LDA) verwendet. Als Modellgas für die Freisetzungsmessungen wurde Ethan verwendet. Die Konzentrationsmessungen wurden mit hinreichend schnellen Flammenionisationsdetektoren durchgeführt.

Für weitere Details muss erneut auf den Forschungsbericht [191] verwiesen werden. In diesem wird der verwendete Windkanal und die Messprozedur näher beschrieben.

CFD-Ausbreitungssimulationen und Vergleich mit Windkanalergebnissen

Weiter unten im Abschnitt 6.3 werden Abbildungen zu den Konzentrationsprofilen (Windkanal im Vergleich zu CFD-Simulationen) angegeben und diskutiert. Für die Kurzübersicht in diesem Abschnitt soll genügen, dass Windkanal- und Simulationsergebnisse gut übereinstimmen und es keinen begründeten Anlass gibt anzunehmen, dass die CFD-Simulationen unrealistische Konzentrationsprofile vorhersagen. Für alle Schadenstypen wurden Quellmassenströme definiert und Ausbreitungssimulationen durchgeführt. Auf der Grundlage der Simulationsergebnisse wurden die Freisetzungsszenarien bewertet. Diese Bewertung bezog sich überwiegend auf das Vorhandensein entzündlicher VOC-Konzentrationen und auf die Einschätzung zu deren Gefährlichkeit (Freisetzung in gefahrdrohenden Mengen).

Ausbreitungsbetrachtungen mit einem Partikeltrajektorienmodell

Zu Vergleichszwecken wurden Ausbreitungsuntersuchungen mit einem Partikeltrajektorienmodell durchgeführt. Hierfür wurde das Programm AUSTAL2000 [208] verwendet. In CFD-Simulationen wird der passive Mittransport der Freisetzungen mittels Erhaltungsgleichungen beschrieben. Die enthaltenen skalaren Felder (Konzentrationsfeld, Quellendichte) sowie das Vektorfeld (Strömungsfeld) werden in einem ortsfesten Koordinatensystem spezifiziert (Eulersche Beschreibung). Die strömungsbeschreibenden Größen und die Zielgrößen sind im Allgemeinen orts- und zeitabhängige Felder.

Der Einfluss der Turbulenz wurde durch einen Ansatz, vergleichbar zur molekularen Diffusion, in die Modelle integriert, wo der Stromdichtevektor des turbulenten Transportes dem Konzentrationsgradienten proportional ist (Ficksches Gesetz). Obwohl die Turbulenz eine statistische Größe ist und Wirbel zufällige Erscheinungen sind, konnte die Beschreibung insgesamt im Rahmen eines deterministischen Modells erfolgen.

In Partikeltrajektorienmodellen wechselt die Beschreibung in ein lokales Koordinatensystem (Lagrange-Beschreibung) und modelliert das stochastische Verhalten einiger Größen explizit. So werden Transportprozesse dadurch beschrieben, dass für eine sehr große Anzahl von Molekülen, Partikeln, Stoffeinheiten, Ensembles, ... die Zufallspfade (Trajektorien) in einer turbulenten Strömung modelliert werden. Durch Auszählen der Endpunkte der Trajektorien in einem Raster, z. B. nach Ablauf einer bestimmten Transportzeit, kann auf das Konzentrationsfeld geschlossen werden. Der wesentliche Unterschied zu den CFD-Modellen besteht darin, dass der Einfluss der Turbulenz nicht als deterministischer Mittelwert dargestellt, sondern im Rahmen eines Zufallsprozesses beschrieben wird. Die CFD-Simulationen und die Simulationen mit dem Partikeltrajektorienmodell beruhen demnach auf voneinander verschiedenen Strategien. Daher sind identische Vorhersagen nicht zu erwarten. Durch die Verschiedenheit bekommt man jedoch einen Einblick in den Einfluss der Modellierungsweise auf die Endergebnisse.

Ein im Forschungsbericht [191] angegebener Vergleich zeigt, dass die grundsätzlichen Schlussfolgerungen für mit beiden Ausbreitungsstrategien betrachteten Szenarien gut übereinstimmen, was hier als eine weitere Unterstützung der CFD-Simulationen gewertet werden kann.

Für die Zielstellungen dieser Habilitation sind die Untersuchungen mit dem Partikeltrajektorienmodell nur für die zuvor angegebene Feststellung relevant. Daher soll in diesem Kapitel kein Abschnitt mit einer näheren Erläuterung hinzugenommen werden.

Angegeben werden soll abschließend jedoch, dass derzeit an einem Publikationsprojekt gearbeitet wird, welche die Ausbreitung von Geruchsstoffen aus Schwimmdachtanks als Untersuchungsgegenstand besitzt. Verschiedene Rohölblends beinhalten auch hinreichende Konzen-

trationen von Mercaptanen³, die in sehr geringen Konzentrationen eine Geruchsbelästigung darstellen können. Die räumliche Ausdehnung von emittierten Stoffen aus Schwimmdachtanks mit einer Relevanz für die Geruchswahrnehmung ist bedeutend größer als eine jene mit etwaiger Zündfähigkeit. Wegen der Größe des benötigten Simulationsgitters sind Partikeltrajektorienmodelle daher eine sinnvolle Alternative zu CFD-Simulationen. Eine etwas ausführlichere Beschreibung und Ergebnisdarstellung zu den Windkanalmessungen und CFD-Simulationen findet man etwas weiter unten im Abschnitt 6.3. Auf eine detailliertere Beschreibung der Simulationen mit Partikeltrajektorienmodellen wurde verzichtet.

6.1.6. Quantitative Risikoanalyse

In der Einleitung zum Kapitel wurde angegeben, dass die Wahrscheinlichkeit des Auftretens von zündfähigen VOC-Konzentrationen entscheidend für die Zonenzuweisung zu den explosionsgefährdeten Bereichen ist. Literaturstudien ergaben, dass für Schwimmdachtanks diesbezüglich keine quantitativen Risikoanalysen durchgeführt bzw. publiziert wurden. Zuvor konnte gezeigt werden, dass als Folge unterschiedlicher Schadenstypen an Dichtungselementen und verursacht durch Lachenbildung unterschiedliche Erhöhungen im Emissionsverhalten gegenüber dem bestimmungsgemäßen Betrieb möglich sind. Durch die Ausbreitungssimulationen konnte schadensbezogen eingeschätzt werden, welche räumliche Ausdehnung Konzentrationsfelder oberhalb der UEG haben können und welche Bereiche am Schwimmdachtank davon betroffen sind. Über die Ausdehnung und Menge der Konzentrationsfelder oberhalb der UEG ließe sich auch diskutieren, ob eine gefahrdrohende Menge vorliegen würde. Letzteres wurde im Rahmen der Forschungsuntersuchungen nicht durchgeführt. Allerdings treten die verschiedenen Schäden, darunter auch jene, die zu hohen Emissionen führen können, nur mit kleinen Wahrscheinlichkeiten auf. Mit Hilfe einer quantitativen Risikoanalyse, basierend auf Bayesschen Netzen, wurden Kausalketten zu Schadenereignissen aufgestellt, um Emissionen bestimmter Größenordnung eine Auftretenswahrscheinlichkeit zuzuordnen zu können. Wesentliches Resultat ist, dass Schäden, aus denen die Formierung einer gefährlichen, explosionsfähigen Atmosphäre folgen kann, nur etwa ein mal in 1700 Jahren je Tank (Durchschnittswert) zu erwarten sind. Entscheidend ist bei Einbezug der Unsicherheiten die Größenordnung 10^3 Jahre, nicht beispielsweise 10^2 Jahre oder 10^4 Jahre. Detailliertere Angaben zur Erstellung und Nutzung des Bayesschen Netzes findet man weiter unten im Abschnitt 6.4

6.2. Emissionsabschätzungen im bestimmungsgemäßen Betrieb und im Schadensfall

6.2.1. Emissionsabschätzungen für den Normalbetrieb

Für die Abschätzung von Emissionen aus Schwimmdachtanks werden Stoffeigenschaften (z. B. Dampfdruck, molare Masse), Umgebungsbedingungen (z. B. Windgeschwindigkeit, Temperatur) sowie Bau- und Betriebsparameter zum Tank (z. B. Durchmesser, Dichtungssysteme bzw. Tankumschläge, Entnahmefolumenströme) benötigt. In der folgenden Darstellung der Emissionsabschätzung wurden die Größensymbole, Einheiten und Formeln entsprechend der VDI 3479 verwendet.

Der Gesamtverlustmassenstrom aus dem Schwimmdachtank L_T (in kg a^{-1}) ist die Summe aus dem Standverlustmassenstrom L_S (in kg a^{-1}) und dem Befahrverlustmassenstrom L_W (in kg a^{-1}):

$$L_T = L_S + L_W \quad (6.6)$$

³Mercaptane bzw. Thiole sind organische Verbindungen, die mindestens eine Thiolgruppe ($-SH$ -Gruppe) als funktionelle Gruppen besitzen. Die Wahrnehmungsschwelle beispielsweise von im Erdöl vorkommenden Ethylmercaptan (auch Ethanthiol: $CH_3 - CH_2 - SH$) liegt für den Menschen bei ≈ 1 ppb.

6. Anwendungsbeispiel: Explosionsgefährdete Bereiche an Schwimmdachtanks

Die Befahrverluste sind Emissionen durch Lagergutverdunstung von der Tankinnenhülle, welche sich durch periodisches Absenken und Heben des Tankdaches während der Tankumschläge ergeben. Zur Berechnung der Befahrverluste L_W wird die Oberfläche des Schmierfilmes A_o , die Dichte des Lagerstoffes W_L (in kg m^{-3}) sowie eine Abschätzung zur Dicke C (in m) des sich bildenden Schmierfilmes benötigt.

Die Oberfläche A_o wird mittels des Tankdurchmessers D und der jährlichen Entnahme Q (in $\text{m}^3 \text{a}^{-1}$) für einen Zylinder berechnet, womit für L_W folgt:

$$L_W = \frac{4QCW_L}{D}. \quad (6.7)$$

Anzumerken ist, dass (6.7) für zylindrische Tanks gilt und Befahrverluste nur bei bewegtem Tankdach ($Q \neq 0$) auftreten. Man erkennt an (6.7) auch, dass die Befahrverluste bei hohen jährlichen Entnahmemengen umso geringer ausfallen, je größer der Tankdurchmesser ist. Mit n als Anzahl an Tankumschlägen je Jahr folgt für die Oberfläche des Schmierfilmes:

$$A_o = n\pi Dh. \quad (6.8)$$

Für die Reduktion der Befahrverluste ist die Verwendung eines Tanks mit einem großen Durchmesser und kleiner Umschlagszahlen günstiger als eine hohe Umschlagszahl bei einem kleineren Tank.

Alle anderen Emissionen, welche im Normalbetrieb auftreten können, sind Standverluste. Die Standverluste L_S sind die Summe des Emissionsmassenstromes aus der Randabdichtung zwischen Tankdach und Tankmantel L_R , der Emissionsmassenströme aus den verbauten Dacharmaturen L_F und den Emissionsmassenströmen durch das Dach L_p selbst aufgrund seiner speziellen Bauausführung (alle Größen in kg a^{-1}). Im Falle eines geschweißten Tankdachs wird der Verlustmassenstrom L_p vernachlässigt ($L_p = 0$), da dieses als dicht angesehen wird. Für genietete Tankdächer kann L_p jedoch von Null verschieden sein. Somit folgt für den Standverlustmassenstrom des Tanks:

$$L_S = L_R + L_F + L_p. \quad (6.9)$$

Der Verlustmassenstrom aus der Randabdichtung L_R ist von einer dimensionslosen Funktion aus Umgebungs- und Dampfdruck p^* , von einem Dichtungsverlustfaktor K_R (in $\text{mol m}^{-1} \text{a}^{-1}$), vom Tankdurchmesser D (in m) und von der molaren Masse M (in kg mol^{-1}) des entweichenden Stoffes abhängig:

$$L_R = K_R DK_c M p^*. \quad (6.10)$$

Der Tankdacharmaturenverlust L_F berücksichtigt die verschiedenen Dacharmaturen über den Dacharmaturenverlustfaktor K_{F_i} (in kmol a^{-1}) der betrachteten Armatur und der entsprechenden Häufigkeit N_{F_i} dieser Armatur:

$$L_F = \sum_{i=1}^n N_{F_i} K_{F_i} K_c M p^*. \quad (6.11)$$

Der Faktor K_c in den Gleichungen (6.10) und (6.11) ist ein stoffspezifischer Produktverlustfaktor, welcher für Rohöl $K_c = 0.4$ und für die anderen Mineralölprodukte zu $K_c = 1.0$ gewählt wird. Als Grund für den Unterschied kann man angeben, dass Rohöl, als Ausgangsstoff für die anderen Mineralölprodukte, zahlreiche leichtflüchtige Verbindungen enthält, diese jedoch auf Grund der höheren Viskosität weniger leicht durch die Flüssigkeit diffundieren. Trotz des hohen Dampfdruckes sind damit die Emissionen geringer, was durch den Faktor berücksichtigt wird.

Für eine Übersicht zu Besonderheiten im Verdunstungsverhalten von Roh- und Mineralölen sei hier auch auf die Publikation [209] und eine eigene Veröffentlichung [193] verwiesen. Der

Gesamtverlust L_T errechnet sich damit zu:

$$L_T = L_p + \left(K_R D + \sum_{i=1}^n N_{F_i} K_{F_i} \right) K_c M p^* + \frac{4QCW_L}{D}. \quad (6.12)$$

Die in (6.12) enthaltenen Verlustfaktoren sind von der konkreten Ausführung einer Armatur abhängig und in den zitierten Richtlinien als Funktionen des langjährigen Mittelwertes der (überströmenden) Windgeschwindigkeit \bar{u} ($K_R = K_R(\bar{u})$ und $K_{F_i} = K_{F_i}(\bar{u})$) angegeben. In der API 2517/19 und in der VDI 3479 findet man Werte für die Verlustfaktoren für die vier Windgeschwindigkeiten $\bar{u} = 0 \text{ m s}^{-1}$, $\bar{u} = 2,2 \text{ m s}^{-1}$, $\bar{u} = 4,5 \text{ m s}^{-1}$ und $\bar{u} = 6,7 \text{ m s}^{-1}$. Für Zwischenwerte von \bar{u} wird in der VDI 3479 linear interpoliert. In der API 2517/19 werden hierfür Gleichungen angegeben und weitere Parameter spezifiziert. Hier wurde entschieden, Fitfunktionen der Form:

$$f(\bar{u}) = a + b\bar{u}^c \quad (6.13)$$

zu verwenden, wobei a , b und c Fitparameter sind. Die Struktur der Fitfunktion entspricht der mathematischen Struktur der in der API 2517/19 angegebenen Gleichungen. Zunächst wurden die Parameter der Fitfunktionen passend zu den hier verwendeten Größeneinheiten mittels der Methode der kleinsten Fehlerquadrate bestimmt. Der Parameter a ist daher nicht exakt der armaturspezifische Verlustfaktor für $\bar{u} = 0$ aus den Tabellen, aber nur unbedeutend verschieden. Die Gesamtgüte der Anpassung ist jedoch besser als bei Fixierung von a . Die Abbildungen 6.4 und 6.5 zeigen die spezifischen (für die in der VDI 3479 angegebenen Randabdichtungen und Armaturtypen) Verlustfaktoren in Abhängigkeit der Windgeschwindigkeit und geben die Fitfunktionen an. In Abbildung 6.4 wurden Kurven für reine Primärdichtungen und

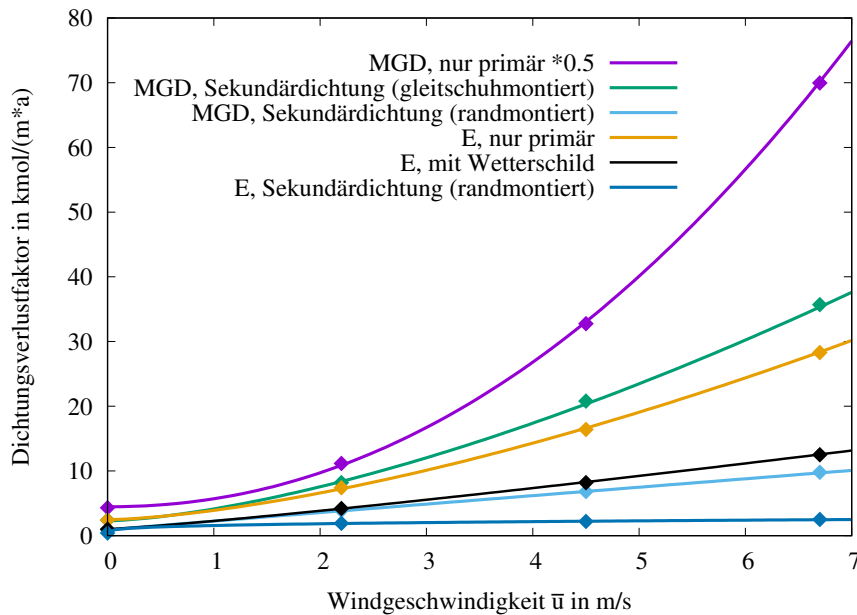


Abbildung 6.4: Darstellung der Verlustfaktoren K_R für verschiedene Typen der Randabdichtung in Abhängigkeit von der Windgeschwindigkeit \bar{u} und die zugehörigen Fitfunktionen. MGD nur primär: $K_R(\bar{u}) = 8.93 + (1,54\bar{u})^{2,09}$, MGD mit gleitschuhmontierter Sekundärdichtung: $K_R(\bar{u}) = 2.30 + (1,49\bar{u})^{1,52}$, MGD mit randmontierter Sekundärdichtung: $K_R(\bar{u}) = 0.91 + (1,34\bar{u})^{0,99}$, E nur primär: $K_R(\bar{u}) = 2.50 + (1,27\bar{u})^{1,52}$, E mit Wetterschild: $K_R(\bar{u}) = 1.00 + (1,23\bar{u})^{1,16}$, E mit randmontierter Sekundärdichtung: $K_R(\bar{u}) = 0.40 + (1,66\bar{u})^{0,30}$.

für kombinierte Systeme aus Primär- und Sekundärdichtung dargestellt. Es werden mecha-

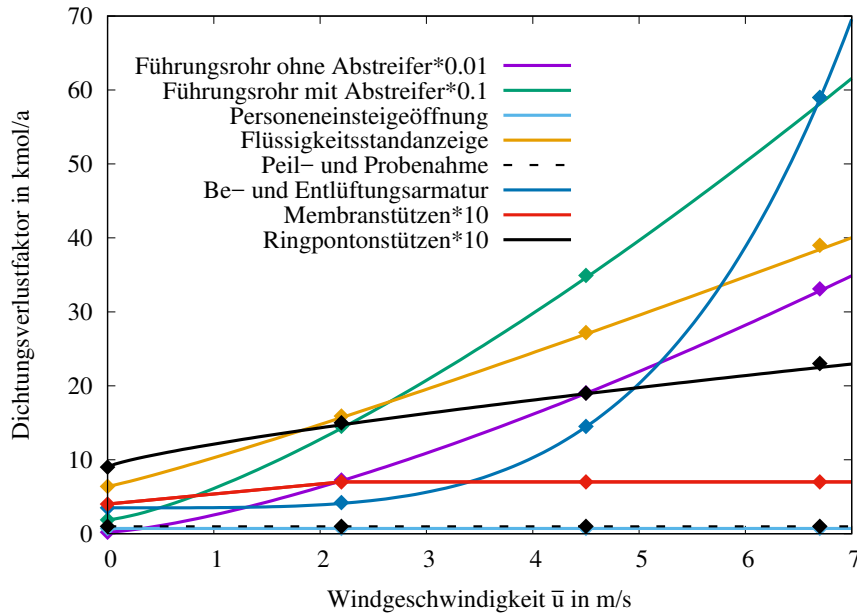


Abbildung 6.5: Darstellung der Verlustfaktoren K_{F_i} in Abhängigkeit von der Windgeschwindigkeit \bar{u} und die zugehörigen Fitfunktionen. Personeneinsteigeöffnung: $K_F(\bar{u}) = 0,70$, Peil- und Probenahmerohr: $K_F(\bar{u}) = 1,00$, Ringpontenstütze: $K_F(\bar{u}) = 0,90 + (0,23\bar{u})^{0,78}$, Membranstütze: kein Fit (Geradenabschnitte, siehe Text), geschlitztes Führungsrohr ohne Abstreifer: $K_F(\bar{u}) = 21,50 + (50,30\bar{u})^{1,39}$, geschlitztes Führungsrohr mit Abstreifer: $K_F(\bar{u}) = 18,90 + (15,70\bar{u})^{1,36}$, Be- und Entlüftungsarmatur: $K_F(\bar{u}) = 3,50 + (0,40\bar{u})^{4,07}$, Flüssigkeitsstandanzeige: $K_F(\bar{u}) = 6,40 + (3,39\bar{u})^{1,11}$.

nische Gleitschuhdichtungen (MGD) und elastische, gefüllte Dichtungen (E) unterschieden⁴. Schwimmdachtanks mit einer ausschließlichen Beschränkung auf eine Primärdichtung werden praktischerweise nicht mehr genutzt (man beachte den Faktor 0.5 für den Verlustfaktor in Abbildung 6.4), da die Emissionsminderung zu gering ist. In der API 2517/19 und in der VDI 3479 werden zudem zwischen einer *durchschnittlich gut sitzenden* und einer *sehr gut sitzenden* Ringspaltichtung unterschieden. Die Unterschiede zwischen diesen Situationen sind nur ausgeprägt, wenn lediglich eine Primärdichtung zum Einsatz kommt. Dann kann der Unterschied im Emissionsmassenstrom (gemessen in $\text{kmol m}^{-1} \text{a}^{-1}$) sogar mehr als 25 % betragen. In allen anderen Fällen sind die Unterschiede gering. Im Sinne konservativer Abschätzungen und für die Darstellungen in Abbildung 6.4 wurde hier immer der Fall einer *durchschnittlich gut sitzenden* Dichtung angenommen.

Gemäß der Erwartungswerte für die Verlustmassenströme sind die elastisch gefüllten, flüssigkeitsmontierten Dichtungen den mechanischen Gleitschuhdichtungen überlegen.

In Abbildung 6.5 wurden verschiedene Verlustfaktoren um eine bzw. um zwei Zehnerpotenzen reduziert oder auch vergrößert, um gemeinsam dargestellt werden zu können. Die Verluste an den Führungsrohren sind gegenüber den anderen Verlusten dominant. Ein Vergleich mit den Verlusten am Ringspalt zeigt, dass diese auch zu den Hauptemissionsquellen zählen. Die Verlustfaktoren der Tankdachstützen wurden für die Darstellung verzehnfacht, weil zum einen die Verluste betragsmäßig sehr klein sind und zum anderen diese Komponenten im Allgemeinen im Bereich von 10 bis 120 Stück (je nach Tankdachgröße) verbaut sind.

Für die Membranstützen wurden die Punkte $K_F(\bar{u})$ lediglich durch Geradenabschnitte verbun-

⁴In der API 2517/2519 werden auch Weichstoffdichtungen *vapor mounted* betrachtet, welche wegen ihrer Schadenanfälligkeit kaum noch zur Anwendung kommen. In der VDI 3479 wird dieser Dichtungstyp nicht betrachtet.

den, da ein Fit aufgrund der Konstanz der Werte (mit Ausnahme des ersten Datenpunktes) nicht erfolgreich ist.

Man erkennt an beiden Abbildungen, dass die Verlustfaktoren in Abhängigkeit von \bar{u} überwiegend auf konvexen Kurven liegen, sodass die in der VDI 3479 angewendete lineare Interpolation die Verlustfaktoren für Zwischenwerte überschätzt und damit konservativ ist. Man kann des Weiteren erkennen, dass die angegebenen Fitfunktionen die Datenpunkte gut interpolieren.

6.2.2. Emissionsabschätzungen zu Überziehdichtungen und Tertiärdichtungen

Mit den in der VDI 3479 bzw. in der API 2517/19 angegebenen Gleichungen zur Emissionsabschätzung im bestimmungsgemäßen Betrieb können die Wirkungen von Tertiärdichtungen und von Überziehdichtungen⁵ an Führungsrohren oder Tankdachstützen nicht abgeschätzt werden, da diese Dichtungen in den Gleichungen unberücksichtigt sind. Hier sollen Näherungsbetrachtungen angegeben werden, die eine Abschätzung der Emissionsreduktion zulassen.

Tertiärdichtungen

Für die Emissionsminderung durch eine Tertiärdichtung werden in [210] zwei Vorgehensweisen diskutiert, die als Näherungsansatz verwendet werden können.

Abschätzung über die prozentuale Emissionsreduktion durch die Sekundärdichtung

Die Verwendung einer Sekundärdichtung wird die Emissionen an der Primärdichtung windgeschwindigkeitsabhängig um einen prozentualen Betrag reduzieren. Man nimmt nun an, dass eine zusätzliche Tertiärdichtung die gleichen windgeschwindigkeitsabhängigen prozentualen Reduktionen erreicht. Für die Verlustfaktoren der Randabdichtung gilt hierbei:

$$K_t(\bar{u}) = \frac{(K_d(\bar{u}))^2}{K_p(\bar{u})}, \quad (6.14)$$

wobei die Indizes p eine Primärdichtung, d eine Doppeldichtung und t eine Dreifachdichtung kennzeichnen. In Abbildung 6.6 sind die prozentualen Reduktionen der Emissionen für den Übergang von einer reinen Primärdichtung auf eine Kombination mit einer weiteren Dichtung dargestellt. Bei den reinen Primärdichtungen wurden die mechanische Gleitschuhdichtung (MGD) und die flüssigkeitsmontierte elastische Dichtung (E) gewählt, während für die weiteren Dichtungen gleitschuh- und randmontierte Sekundärdichtungen angenommen wurden.

Man erkennt, dass die randmontierte Sekundärdichtung bei einer mechanischen Gleitschuhdichtung als Primärdichtung die höchste prozentuale Emissionsreduktion erreicht. Dies gilt sowohl für den Fall der durchschnittlich gut sitzenden (Kurve 1 in Abb. 6.6) als auch für den Fall der sehr gut sitzenden Dichtungen (Kurve 2 in Abb. 6.6). Die gleitschuhmontierte Variante (Kurve 3 in Abb. 6.6) hat die geringste prozentuale Emissionsreduktion, liegt also noch etwas niedriger als beim Übergang von einer reinen flüssigkeitsmontierten elastischen Dichtung (E) auf die Doppeldichtung (Kurve 4 in Abb. 6.6). Alle Kurven zeigen ein ausgeprägtes Minimum in der Emissionsreduktion bei Windgeschwindigkeiten zwischen $\bar{u} = 0,5 \text{ m s}^{-1}$ bis etwa $\bar{u} = 1,0 \text{ m s}^{-1}$ und eine deutliche Zunahme der prozentuale Emissionsreduktion hin zu hohen mittleren Windgeschwindigkeiten. Dieses Verhalten konnte nicht mittels physikalischer Annahmen plausibilisiert werden.

Ein möglicher Ansatz zur Abschätzung der Wirkung der Tertiärdichtung wäre die Verwendung der windgeschwindigkeitsabhängigen prozentualen Reduktion (Methode 1a) oder, etwas konservativer, die Verwendung des Minimums unabhängig von der Windgeschwindigkeit (Methode 1b). Dann würde gelten:

⁵Dabei handelt es sich um Kunststoffdichtungen, welche über Dacharmaturen wie Führungsrohre oder Tankdachstützen gestülpt und am Tankdach befestigt werden.

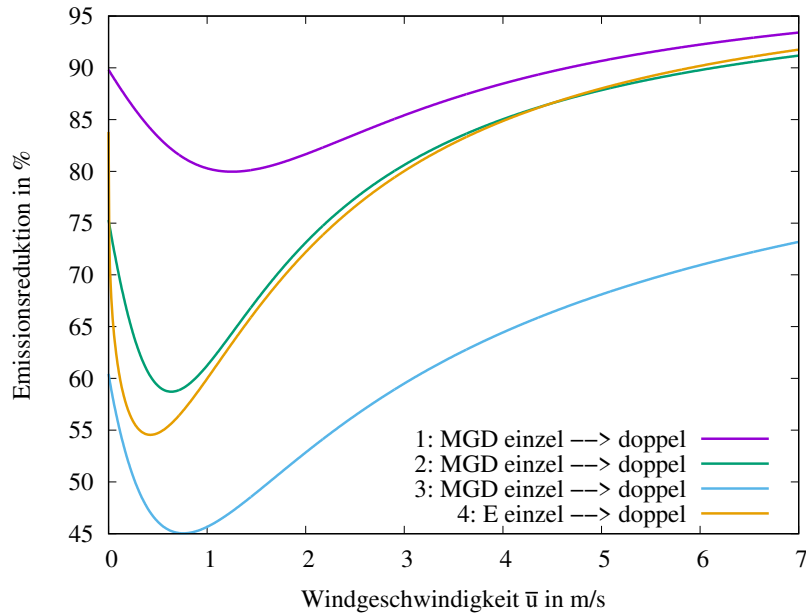


Abbildung 6.6: Prozentuale Reduktionen der Emissionen für den Übergang von einer Einzeldichtung auf eine Doppeldichtung in Abhängigkeit von der Windgeschwindigkeit \bar{u} . 1: durchschnittlich gut sitzende, 2: sehr gut sitzende MGD und randmontierte Sekundärdichtung, 3: durchschnittlich gut sitzende MGD und gleitschuhmontierte Sekundärdichtung, 4: durchschnittlich gut sitzende E und randmontierte Sekundärdichtung.

- Übergang von einer MGD mit einer randmontierten Sekundärdichtung auf eine Dreifachdichtung (durchschnittlich gut sitzend):
Reduktionsfaktor = 0,2
- Übergang von einer MGD mit einer randmontierten Sekundärdichtung auf eine Dreifachdichtung (sehr gut sitzend):
Reduktionsfaktor = 0,42
- Übergang von einer MGD mit einer gleitschuhmontierten Sekundärdichtung auf eine Dreifachdichtung (durchschnittlich gut sitzend):
Reduktionsfaktor = 0,65
- Übergang von einer E mit einer randmontierten Sekundärdichtung auf eine Dreifachdichtung:
Reduktionsfaktor = 0,45

Abschätzung durch Verwendung einer geringeren effektiven Windgeschwindigkeit

Bei Verwendung einer Primär- und Sekundärdichtung sind die windgeschwindigkeitsabhängigen Emissionen geringer als bei ausschließlicher Verwendung einer Primärdichtung. Die Primärdichtung weist somit die gleiche Emission der Doppeldichtung bei reduzierter Windgeschwindigkeit auf. Für die Emissionsabschätzung einer Dreifachdichtung nimmt man nun die Emission der Doppeldichtung bei der zuvor ermittelten reduzierten Windgeschwindigkeit (Methode 2). Für die Verlustfaktoren gilt hierbei:

$$\begin{aligned}
 K_p(\bar{u}_1) &= a_p + (b_p \bar{u}_1)^{c_p} \quad (\text{Index p für Primärdichtung}) \\
 K_d(\bar{u}_2) &= a_d + (b_d \bar{u}_2)^{c_d} \quad (\text{Index d für Doppeldichtung})
 \end{aligned}
 \tag{6.15}$$

Für die reduzierte Geschwindigkeit \bar{u}_1 folgt nach Umstellung:

$$\bar{u}_1 = \exp \left\{ \frac{\ln \left[\frac{a_d - a_p}{b_p^{c_p}} + \left(\frac{b_d^{c_d}}{b_p^{c_p}} \right) \bar{u}_2^{c_d} \right]}{c_p} \right\} \quad (6.16)$$

Dies setzt für eine erfolgreiche Abschätzung voraus:

$$a_d - a_p + b_d^{c_d} \bar{u}_2^{c_d} \stackrel{!}{>} 0, \quad (6.17)$$

womit die Geschwindigkeit \bar{u}_2 nicht zu gering sein darf, weil $a_d - a_p < 0$ ist. Ist nun \bar{u}_2 die wahre mittlere Windgeschwindigkeit, so kann der Verlustfaktor der Tertiärdichtung abgeschätzt werden zu:

$$K_t(\bar{u}_2) = K_d(\bar{u}_1) \quad (\text{Index t für Tertiärdichtung}). \quad (6.18)$$

Diese Abschätzung weist einige Nachteile auf. So kann die Emission einer Dreifachdichtung (oder bei einer beliebig hohen Zahl an Dichtungsstufen) nie kleiner werden, als die Emission einer Doppeldichtung für $\bar{u} = 0$. Dies ist nicht plausibel, betrifft allerdings nur den Bereich ohnehin geringer Emissionen. Wegen der Bedingung (6.17) können nur Umrechnungen für das obere Ende der Geschwindigkeitsskala für \bar{u} vorgenommen werden, weil die Parallele zur Geschwindigkeitsachse für zu geringe \bar{u} nicht beide Kurven $K_p(\bar{u})$ und $K_d(\bar{u})$ schneidet.

So muss für den Übergang von einer MGD auf eine MGD mit randmontierter Sekundärdichtung (durchschnittlich gut sitzend) $\bar{u}_2 > 6,1 \text{ m s}^{-1}$ sein und beim Übergang von einer E auf eine E mit randmontierter Sekundärdichtung (durchschnittlich gut sitzend) sogar $\bar{u}_2 > 7,1 \text{ m s}^{-1}$. Die Methode ist daher nur für Übergänge bei den sehr gut sitzenden Varianten praktikabel. Dort ist für den Übergang von einer MGD auf eine MGD mit randmontierter Sekundärdichtung (sehr gut sitzend) $\bar{u}_2 > 1,4 \text{ m s}^{-1}$ bzw. für den Übergang von von einer E auf eine E mit randmontierter Sekundärdichtung (sehr gut sitzend) $\bar{u}_2 > 2,3 \text{ m s}^{-1}$. Die angegebenen Mindestwerte für \bar{u}_2 erhält man mit den hier errechneten Koeffizienten aus dem Kurvenfitten gemäß (6.13) und den zuvor angegebenen Formeln.

Um dennoch für das gesamte Geschwindigkeitsintervall eine Kurve angeben zu können, kann man mit (6.18) und der Bedingung $K_t(0) = K_d(0)$ Stützstellen ermittelt und eine Extrapolation mit dem Ansatz:

$$f(\bar{u}) = K_d(0) + (b\bar{u})^c \quad (6.19)$$

durchführen. Dies wurde hier für den Übergang von einer MGD auf eine MGD mit randmontierter Sekundärdichtung (sehr gut sitzend) ausgeführt. In Abbildung 6.7 sind die Verlustfaktoren in Abhängigkeit der Windgeschwindigkeit für eine reine MGD, für eine MGD mit randmontierter Sekundärdichtung und für eine MGD mit randmontierter Sekundär- und Tertiärdichtung abgebildet. Man kann der rechten Figur aus Abbildung 6.7 entnehmen, dass die Methode 2 die Emissionen der Dreifachdichtung gegenüber der Methode 1a höher einschätzt, aber beide Abschätzungen größenordnungsmäßig gut übereinstimmen. Methode 1b ist konservativ gegenüber den zuvor diskutierten Alternativen und soll daher in dieser Arbeit verwendet werden. Für die linke Figur aus Abbildung 6.7 wurde die Methode 2 nicht verwendet, da $\bar{u}_2 > 6,1 \text{ m s}^{-1}$ sein müsste und eine Interpolation kaum Stützstellen im relevanten Geschwindigkeitsintervall hätte.

Überziehdichtungen

Für verschiedene Emissionsquellen am Schwimmdachtank gibt es Überziehdichtungen. Beispiele sind Überstülpdichtungen für die Tankdachstützen oder auch Einhüllungen des Führungsrohres [211]. Überstülpdichtungen bestehen in der Regel aus einer Dichthaube, welche über die hochgezogene Dachstütze übergestreift und mit Schlauchschellen befestigt wird. Hierdurch werden

6. Anwendungsbeispiel: Explosionsgefährdete Bereiche an Schwimmdachtanks

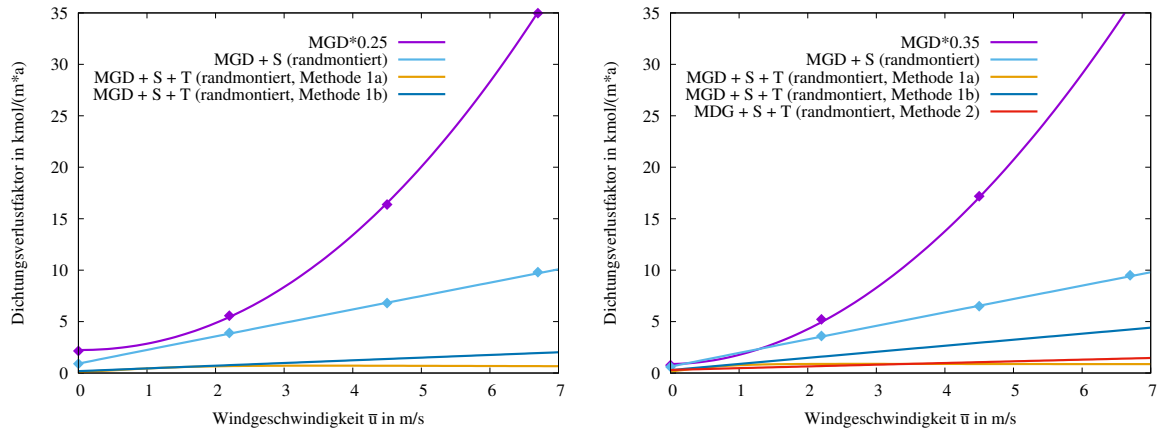


Abbildung 6.7: Darstellung der Verlustfaktoren in Abhängigkeit der Windgeschwindigkeit für eine reine MGD, für eine MGD mit randmontierter Sekundärdichtung und für eine MGD mit randmontierter Sekundär- und Tertiärdichtung in Abhängigkeit von der Windgeschwindigkeit \bar{u} . Links: durchschnittlich gut sitzende, rechts: sehr gut sitzende Variante.

die Emissionen bei den Tankdachstützen so weit reduziert, dass diese Emissionsquelle gegenüber den anderen Quellen zu vernachlässigen ist.

Überziehdichtungen des Führungsrohres sind nach oben hin offen, hüllen allerdings das Rohr auf voller Höhe ein und erhöhen den Emissionswiderstand dadurch maßgeblich. Emissionen sind dann praktischerweise nur durch die Befahrverluste, durch die Verdrängung der Luft innerhalb der Hülle bei der Befüllungsprozedur gegeben. In [211] wird die Wirkung mit einer Emissionsreduktion um 98% abgeschätzt, was hier übernommen werden soll.

Dampfdruckfunktion

Um mit (6.12) Emissionsabschätzungen vornehmen zu können, wird eine dimensionslose Funktion aus Umgebungs- und Dampfdruck p^* benötigt:

$$p^* = \frac{p_d}{p_a} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{p_d}{p_a}} \right)^{-2}. \quad (6.20)$$

Hierin ist p_d der Dampfdruck der gelagerten Flüssigkeit und p_a der Umgebungsdruck. Man beachte, dass der Dampfdruck $p_d = p_d(T)$ stark von der Temperatur und der Gemischzusammensetzung abhängig ist.

Tankdurchmesser D

Typische Tankdurchmesser D liegen im Bereich von 10 m – 80 m, wobei es auch vereinzelt Tanks mit Durchmessern bis 120 m gibt. Für verschiedene Betrachtungen im Forschungsbericht [191] zur Tankeffizienz wurde der Durchmesser D auch als freier Parameter angesehen, um bei konstanten Betriebsparametern die Abhängigkeit vom Durchmesser zu diskutieren.

Entnahmestrom Q und Q_{max}

Der Entnahmestrom Q ist stark von der Ein- und Auslagerung (Tankumschläge je Jahr) durch den Betrieb abhängig und auch von den Abmessungen des Tanks. Entsprechend der von den Betreibern beantworteten Fragebögen, wurden im Forschungsbericht [191] verschiedene repräsentative Werte angenommen. In Raffinerien mit verschiedenen Schwimmdachtanks gleicher oder ähnlicher Baugröße und Ausstattung für ein und denselben Lagerstoff findet man

eine hohe Bandbreite an Tankumschlägen je Jahr. Daher wurde auch der Entnahmestrom Q als Parameter verwendet.

Mit den in der VDI 3479 und in der API 2517/19 angegebenen Gleichungen wird kein Maximalwert für den Befahrverlust errechnet, sondern lediglich ein jährlicher Mittelwert. Grenzt man die Befahrverluste in erster Näherung auf die Entnahmezeiten ein, so vergrößert sich der Emissionsmassenstrom entsprechend. Nimmt man weiterhin an, dass ein freigelegter Schmierfilm unmittelbar verdunstet, so liegen Spitzenemissionen während der schnellsten Entnahme vor, die im Betrieb erreicht wird. Auch hierzu haben die Betreiber eine Auskunft erteilt, so dass auch höchstzulässige Volumenströme bei der Entnahme mit betrachtet werden. Setzt man diesen an Stelle von Q in (6.7) ein, so folgt $L_{W_{max}}$ (später angegeben in kg s^{-1}).

Wandbenetzungsschicht C

In der API 2517/19 wird eine Tabelle angegeben, welche für Ottokraftstoffe, Reinstoffe und Rohöl Werte der Benetzungsfilmstärke im Falle von leichtem Rost, dichtem Rost und für Spritzbeton enthält. Die VDI 3479 übernimmt diese Werte lediglich. Für Ottokraftstoffe wird dort ein Wert von $C = 2,57 \cdot 10^{-6}$ m für eine glatte Tankwand (Baustahl) angegeben und für Rohöl ein Wert von $C = 10,27 \cdot 10^{-6}$ m. Jedoch kann für eine stark korrodierte Tankwand auch ein fünffach höherer Wert vorliegen (dichter Rost). Vor diesem Hintergrund muss die Signifikanz der Nachkommastellen dieser Zahlen bezweifelt werden. Die Auswertung der Fragebögen zeigt zudem, dass die Betreiber den Korrosionsgrad ausnahmslos als gering einstufen, obwohl Vor-Ort-Besichtigungen deutliche Unterschiede erkennen lassen. Da der Korrosionsgrad ohne definierte Einstufung und die Wandbenetzungsschicht C ohne Messung schwierig zu bestimmen sind, wurden hier für die Filmdicke Werte im Intervall $C = 2 \cdot 10^{-6}$ m bis $C = 2 \cdot 10^{-5}$ m pauschal für alle Mineralölprodukte und Rohöl angenommen.

Windgeschwindigkeit u

Die Koeffizienten K_R und K_{F_i} sind von einer mittleren Überströmungsgeschwindigkeit abhängig. In den Richtlinien wird hierzu das langjährige Mittel der Windgeschwindigkeit $u = \bar{u} \pm \Delta u$ am Standort verwendet. Die Mehrzahl der Tankbetreiber konnte hierzu keinen verlässlichen Wert angeben, so dass u als freier Parameter betrachtet wird. Als Fehler Δu wird 25% des Betrages von \bar{u} verwendet.

Dichtungsverlustfaktor, Dacharmaturenverlustfaktor

Zur Emissionsabschätzung werden für den Dichtungsverlustfaktor K_R und zur Berechnung des Dacharmaturenverlustfaktors K_{F_i} repräsentative Tankausstattungen verwendet und miteinander verglichen. Die Annahmen zu den Ausstattungen findet man bei den konkreten Berechnungsbeispielen.

Ergebnisse zur Emissionsabschätzung

Wegen $K_R = K_R(\bar{u})$ und $K_{F_i} = K_{F_i}(\bar{u})$ sind hohe Emissionen mit hohen Windgeschwindigkeiten korreliert. Bei höheren Windgeschwindigkeiten sind somit höhere Emissionen, aber auch eine höhere Dispersion bzw. ein höherer Abtransport zu erwarten.

Standverlustemissionen treten immer auf, wenn sich Lagergut im Tank befindet. Für alle Berechnungen zum Standverlustmassenstrom (Massenverlust je Jahr) wurde angenommen, dass die Tanks ständig benutzt werden. Dies erlaubt eine Umrechnung der ermittelten jährlichen Standverluste auf einen sekundlichen Massenstrom. Für die Befahrverluste muss beachtet werden, dass diese mit (6.7) grundsätzlich als Massenverlust je Jahr berechnet werden. Hierbei wird unterstellt, dass die gebildeten Schmierfilme vollständig verdunstet sind, bevor sich das Dach wieder hebt. Bei Mineralölprodukten höherer Viskosität und bei rascher Wiederbefüllung

muss diese Annahme nicht zwingend erfüllt sein.

Wie bereits angegeben, erfolgten die Berechnungen mit einem vom Autor dafür angefertigten C++-Programm. Fehler bzw. Toleranzen wurden mit dem totalen Fehlerdifferential aus den Erwartungswerten und den Schwankungen der Eingangsparameter berechnet.

In dieser Habilitation sollen nicht alle Berechnungen erneut gezeigt werden, sondern nur die Ergebnisse aus dem Forschungsbericht [191], die sich auf Tanks unterschiedlicher Ausstattung beziehen. Dazu wurden die Betreiberankünfte ausgewertet und exemplarisch mit Blick auf die Emissionen fünf Tankqualitäten unterschieden. Hierbei sind Tank 1 und Tank 2 so ausgestattet, dass ihr Emissionsverhalten eher ungünstig ausfällt. Diese Ausstattungen findet man gelegentlich bei älteren und zumeist kleineren Tanks. Tank 3 entspricht in etwa der Ausstattung des Tanks aus dem Projekt [192]. Tanks mit diesen Ausstattungsmerkmalen sind häufiger zu finden. Die Tanks 4 und 5 zeigen aufgrund ihrer Ausstattung ein günstiges Emissionsverhalten. Anzumerken ist, dass es die gewählten Kombinationen von Ausstattungen⁶ tatsächlich gibt, jedoch wurden für die Abschätzungen weiter unten einige Größendaten (Durchmesser, Umschlagszahlen, Volumen, Anzahl der Tankdachstützen) einander gleichgesetzt, gerundet bzw. auf repräsentative Werte gesetzt. Die Tanks mögen alle ein geschweißtes Tankdach ($L_p = 0$), zwei abgedichtete Personeneinsteigeöffnungen und die gleiche Atmungsarmatur aufweisen. Weitere Ausstattungsmerkmale zeigt die Tabelle 6.2. Zudem sollen folgende wiederkehrende Abkürzungen verwendet werden: gleitschuhmontierte Sekundärdichtung (GMS), randmontierte Sekundärdichtung (RMS), randmontierte Tertiärdichtung (RMT). Eine Übersicht zu den ge-

Tabelle 6.2: Emissionsrelevante Ausstattungsmerkmale der zum Vergleich herangezogenen Tanks. Weitere Abkürzungen: geschlitzt (g), Abstreifer (A), integriertes Führungsrohr (I); die Pfeile geben an, welche Komponente in das Führungsrohr integriert wurde, Überziehdichtung (ÜD), nicht abgedichtet (n. a.), abgedichtet (a.).

Ausstattung	Typ 1	Typ 2	Typ 3	Typ 4	Typ 5
Primärdichtung	MGD	MGD	MGD	MGD	E
Sekundärdichtung	GMS	RMS	RMS	RMS	RMS
Tertiärdichtung	-	-	-	RMT	RMT
Führungsrohr	g, (A)	g, (A)	I	I, ÜD	I, ÜD
Füllstandsanzeige	1	1	↑	↑	↑
Peil- und Probenahme	1	1	↑	↑	↑
Tankdachstützen (Ponton): 20	n. a.	n. a.	a.	a.	a.
Tankdachstützen (Membran): 40	n. a.	n. a.	a.	a.	a.

meinsamen Merkmalen bzw. Stoffeigenschaften für die Abschätzung der Emissionen zeigt Tabelle 6.3. Für die Abschätzung wurden angenommen, dass sich im Schwimmdachtank leichtes Naphtha als Lagerstoff befindet. Dies führt wegen des hohen Dampfdruckes zu den höchsten Emissionen unter den im Forschungsbericht [191] betrachteten Mineralölprodukten. Daher wurden wie zuvor die unsicheren Parameter nach oben abgeschätzt und die Gesamtverlustmassenströme $L_{T_{max}}$ für die fünf Vergleichstanktypen berechnet. Abbildung 6.8 zeigt die Ergebnisse. Der im Emissionsverhalten ungünstigste Vergleichstank (Tanktyp 1) zeigt bei ungünstiger Kombination von Nutzung, Lagerstoff und Umgebungsbedingungen einen Verlustmassenstrom von aufgerundet $\underline{L_{S_{max}}} = 10 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$. Dieser Wert kann als konservative Obergrenze für Emissionsmassenstrom im Normalbetrieb angesehen werden.

⁶Mit Ausnahme von Typ 5, weil im Rahmen der Umfrage kein Schwimmdachtank gemeldet wurde, bei dem eine elastische, gefüllte Dichtung des Typs (E) verbaut ist. Laut Experten- und Betreiberankunft wird dieser Dichtungstyp in Deutschland nicht verwendet.

Tabelle 6.3: Übersicht zu den Grunddaten der für den Vergleich herangezogenen Schwimmdachtanks. Die Stoffdaten beziehen sich auf den Lagerstoff Naphtha (leicht), siehe Tabelle 3.2 aus dem Forschungsbericht [191].

Eigenschaft	Wert
Tankdurchmesser	$D = 40 \text{ m}$
Tankvolumen	$V = 20\,000 \text{ m}^3$
Lagergutdichte	$W_L = (735 \pm 95) \text{ kg m}^{-3}$
Lagerguttemperatur	$T = 298 \text{ K}$
molare Masse	$M = (86 \pm 14) \text{ g mol}^{-1}$
Schmierfilmdicke	$C = 1,5 \cdot 10^{-5} \text{ m}$
Dampfdruck	$p_d = (57,9 \pm 13,4) \text{ kPa}$
maximaler Entnahmestrom	$Q_{max} = 0,2 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$

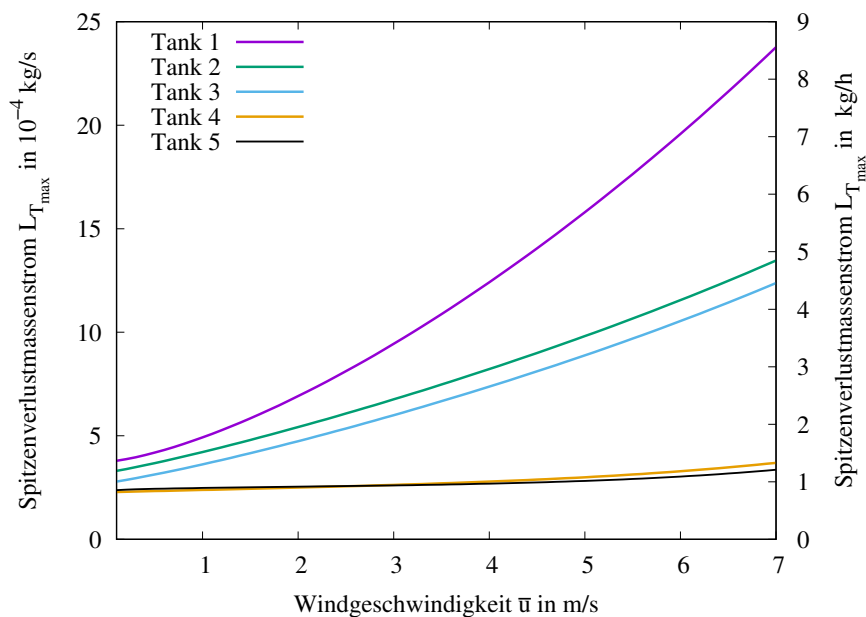


Abbildung 6.8: Darstellung der Maximalwerte der Verluste $L_{S,max}$ in Abhängigkeit von \bar{u} für die fünf Vergleichstanks. Als Lagerstoff wurde Naphtha angenommen.

6.2.3. Emissionsabschätzungen für Tankrevisionen

In einer Revisionsphase werden die flüssigen Lagerstoffe vollständig aus dem Schwimmdachtank entfernt. Dazu werden die Tankdachstützen in die Wartungsposition gebracht und der Tank restentleert. Die Häufigkeit für innere Tankprüfungen, in denen eine Begehrbarkeit hergestellt wird, ist unter anderem vom Lagerstoff, aber auch von der Bauweise (z. B. einfacher Boden oder Doppelboden) abhängig. Gemäß der API 2517/19 werden folgende Annahmen über den Prozess der Restentleerung und des Wiederanfahrens getroffen:

- Das Schwimmdach wird während der Landungsprozedur nicht auf der Flüssigkeit schwimmen, sondern auf den Tankdachstützen stehen.
- Mit dem Aufsetzen der Tankdachstützen öffnet die Atmungsarmatur zur Verhinderung von Unterdruckschäden.
- Die Atmungsarmatur bleibt offen, bis das Tankdach nach dem Wiederbefüllen schwimmt.

Wesentliche Emissionen ergeben sich in der Entleerphase (bei aufsitzendem Tankdach) durch Standverluste bei offener Atmungsarmatur, bei restentleertem Tank durch Schmierfilmverdunstung bzw. Verdunstungen aus dem Tanksumpf und beim Wiederbefüllen durch Verdrängungsverluste von teilgesättigter Luft.

Bezogen auf die Emissionen in der Entleerphase ergeben sich Anforderungen aus der TA Luft, welche für Lagerstoffe wie Rohöl, Naphtha oder Ottokraftstoffe den Anschluss einer Nachverbrennung (Fackel) oder einer Dämpfespeicherung erforderlich machen. In diesem Fall werden die flüchtigen organischen Stoffe bis zur Freimessung abgesaugt und können nicht in die Umgebung entweichen. Der Zeitpunkt der Begehung (Freimessungsbedingungen) durch Mitarbeiter (mit Atemschutz) richtet sich nach dem Lagerstoff, liegt aber üblicherweise so, dass mit genügender Sicherheit keine zündfähige Konzentration mehr vorliegen kann.

Ein Produktwechsel im gleichen Stoffsegment bedeutet im Allgemeinen nicht, dass eine Entleerung erfolgen muss. In anderen Fällen entspricht die Prozedur eines Produktwechsels der einer Revision.

6.2.4. Standverluste bei offener Atmungsarmatur

Steht im Schwimmdachtank eine Flüssigkeitssäule bei gleichzeitig geöffneter Atmungsarmatur, so schätzt man die Emissionen laut API 2517/19 wie im Normalbetrieb ab, trifft allerdings folgende Annahmen:

1. Unabhängig von der tatsächlichen Dichtung nimmt man die Abschätzung so vor, als wäre eine durchschnittlich gut sitzende Weichstoffdichtung ohne Flüssigkeitskontakt als Primärdichtung verbaut.
2. Eventuell vorhandene Sekundär- oder Tertiärdichtungen werden ausgelassen. Ihr Auslassen repräsentiert den zusätzlichen Verlust durch die anderen dachdurchführenden Komponenten.
3. Für die Windgeschwindigkeit wird ein Wert von 10 mph ($4,47 \text{ m s}^{-1}$) angenommen.

Der Dichtungsverlustfaktor für diesen Typ kann angegeben werden durch:

$$K_R(\bar{u}) = 9,23 + (1,57\bar{u})^{2,04} \quad (6.21)$$

Gemäß (6.10) folgt somit für den Standverlust:

$$L_R = [9,23 + (1,57 \cdot 4,47)^{2,04}] K_c D M p^* \quad (6.22)$$

Den höchsten Verlustmassenstrom errechnet man für die Lagerstoffe mit dem höchsten Produkt $K_c M p^*$ (im Forschungsbericht [191] Naphtha und Ottokraftstoffe). In der API 2517/19 wird jedoch nicht berücksichtigt, dass bei diesen Lagerstoffen eine Absaugung der Produktdämpfe (an einer geöffneten Personeneinsteigeöffnung) und die Zuführung an eine Nachverbrennung oder an eine Dämpfespeicherung erfolgt⁷. Um mit (6.22) eine Größenordnung des Emissionsmassenstromes zu ermitteln, wurde mit den Werten ($T = 293 \text{ K}$, $M = 100 \text{ g mol}^{-1}$ und $p_d = 61,1 \text{ kPa}$) (Naphtha leicht, Mittelwerte zuzüglich Toleranz, siehe Tabelle 3.2 aus [191]) gerechnet:

$$L_R = [9,23 + (1,57 \cdot 4,47)^{2,04}] \cdot 40 \cdot 0,1 \cdot 0,227 \cdot 10^3 \text{ kg} \cdot \text{a}^{-1} \approx 6,5 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1} \quad (6.23)$$

Für den Standverlustmassenstrom bei offener Atmungsarmatur soll daher ein aufgerundeter

⁷Lagerstoffe, bei denen ein Anschluss an eine Nachverbrennung oder an eine Dämpfespeicherung nicht erforderlich ist, lassen wegen des höheren Flammpunktes und des geringeren Dampfdruckes keine gefährliche explosionsfähige Atmosphäre erwarten.

Wert von $L_R = 10 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$ als Obergrenze angenommen werden. Die hierbei entweichende Luft wird als gesättigt betrachtet.

6.2.5. Emissionsabschätzungen ausgewählter Schadensfälle

Befüllverluste bei offener Atmungsarmatur

Zur Abschätzung der Befüllverluste wird angenommen, dass der Luftraum zwischen Tankboden und Tankdach Lagerstoffdämpfe enthält und diese innerhalb der Wiederbefüllzeit verdrängt werden. Für den Verlustmassenstrom L_B gilt:

$$L_B = \dot{V} \frac{p_d}{RT} MS. \quad (6.24)$$

Hierin ist \dot{V} der Einlassvolumenstrom und S der Sättigungsfaktor. Der Sättigungsfaktor ($S \in [0, 1]$) gibt den Bruchteil der Sättigungskonzentration des Lagerstoffes an, der für innerhalb der verdrängten Luft angenommen wird. Eins selbst wäre das Maximum und damit gleichbedeutend mit der Annahme, dass mit Lagerstoff gesättigte Luft verdrängt wird. Die Befüllung erfolgt jedoch üblicherweise so rasch, dass eine Sättigung nicht erreicht wird. In der API 2517/19 wird für S ein Wert von $S = 0,15$ als Größenordnung angegeben. Die Wiederbefüllvolumenströme bis zum Aufschwimmen des Tankdaches nach einer Revision sind üblicherweise deutlich geringer als in normalbetrieblichen Befüllvorgängen bei schwimmendem Dach. Nachfragen bei den Betreibern ergaben für die Wiederbefüllprozesse bei Naphtha und Ottokraftstoffen Volumenströme von $\dot{V} = 100 \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ und Temperaturen von etwa $T = 288 \text{ K}$. Setzt man unter diesen Bedingungen erneut konservative Werte (für Naphtha, erneut siehe Tabelle 3.2 aus [191]) ein, so folgt:

$$L_B = 100 \cdot 0,15 \cdot \frac{52000}{8,314 \cdot 288} \cdot 0,1 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \approx 33 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}. \quad (6.25)$$

Der Wiederbefüllvolumenstrom (Verdrängungsvolumenstrom) $\dot{V} = 100 \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ und der Verlustmassenstrom bis zu etwa $L_B = 40 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$ werden als Richtwerte für die Ausbreitungssimulationen angenommen.

Emissionsmassenströme im Falle von Dichtungsschäden

Für die Bestimmung genauer Verlustmassenströme müssten für einzelne Schadensfälle Messungen vorgenommen werden. Da diese nicht vorliegen, können hier nur Abschätzungen der Größenordnung angegeben werden.

Ein Nachlassen der Dichtheit der Ringspaltichtung durch Überalterung, Abnutzung oder Beschädigung kann mit sukzessiver Vergrößerung der Emissionen einhergehen. Gespräche mit Experten bei Tankbesichtigungen haben ergeben, dass eine Beschädigung nur selten hohe Emissionen zur Folge hat und dadurch entdeckt wurde. In vielen Fällen war ein Weiterbetrieb möglich, jedoch wurde wegen der Gefahr von Folgeschäden eine zeitnahe Reparatur empfohlen.

Schäden der Tertiärdichtung

Ist nur die Tertiärdichtung beschädigt, so kann der Massenstrom zwischen den Grenzwerten einer funktionstüchtigen Dichtung und dem Fehlen dieses Dichtungstypes liegen. In [192] konnte gezeigt werden, dass typische Konzentrationen auf dem Tankdach bei funktionierender Primär- und Sekundärdichtung im ein- bis zweistelligen ppm-Bereich liegen. Die Herausbildung einer gefährlichen explosionsfähigen Atmosphäre ist damit sehr unwahrscheinlich und auch gesundheitliche Folgen beim Einatmen dieser Konzentrationen sind bei den üblichen Aufenthaltsdauern nicht zu erwarten. Daher sollen nur Schäden an der Primär- und an der Sekundärdichtung weiter analysiert werden.

Schäden der Sekundärdichtung

Ist nur die Sekundärdichtung beschädigt, so kann der Massenstrom zwischen den Grenzwerten einer funktionstüchtigen Dichtung und dem Fehlen dieses Dichtungstypes liegen. Ein vollständiger Verlust der Sekundärdichtung bzw. ein Schaden, welcher einem Totalverlust gleichwertig ist, ist sehr unwahrscheinlich, soll hier aber für die Abschätzung angenommen werden. Die höchsten Verluste von in Deutschland eingesetzten Primärdichtungen zeigt eine durchschnittlich gut sitzende MGD (nur primär). Gemäß (6.10) folgt somit für den Standverlust:

$$L_R = 8,93 + (1,54 \cdot \bar{u})^{2,09} K_c D M p^* \quad (6.26)$$

Den höchsten Verlustmassenstrom errechnet man für die Lagerstoffe mit dem höchsten Produkt $K_c M p^*$, was im hier betrachteten Vergleichsfeld Naphtha und Ottokraftstoffe sind. Mit den Werten für $T = 293 \text{ K}$ folgt (Naphtha leicht, Mittelwerte zuzüglich Toleranz):

$$L_R = (8,93 + (1,54 \cdot \bar{u})^{2,09}) \cdot 10^3 \cdot 40 \cdot 0,1 \cdot 0,227 \text{ kg} \cdot \text{a}^{-1} \quad (6.27)$$

Liegt die mittlere Geschwindigkeit \bar{u} zwischen 0 und $7 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, so liegt L_R im Intervall $L_R \in [0,9 : 16] \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$.

Für den Emissionsmassenstrom aus dem Ringspalt bei Vorliegen eines Sekundärdichtungsschadens soll daher $L_R = 20 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$ als Obergrenze angenommen werden.

Schäden der Primärdichtung

In der Literatur sind keine Publikationen zu finden, welche sich mit der Abschätzung von erhöhten Emissionsmassenströmen aus Schwimmdachtanks bei Vorliegen von Primärdichtungsschäden befassen. Im Rahmen der Betreiberumfrage sind Schäden an der Primärdichtung als sehr vielfältig beschrieben worden. Beispiele für mögliche Schäden sind Risse oder poröse Stellen in der Primärdichtungslamelle, Schäden am Gleitschuh bzw. an der Andrückkonstruktion oder Schwachstellen am Montageort der Dichtungslamelle. Es ist auch kaum möglich, plausible Schätzungen zu Rissen oder Porositäten abzuleiten. Größere Risse oder Löcher liegen üblicherweise nicht plötzlich vor und lokal erhöhte Emissionen könnten bei Tankbesichtigungen durch Geruchswahrnehmungen auffallen, bevor Emissionen relevant für eine gefährliche explosionsfähige Atmosphäre auftreten. Ist die Primärdichtung beschädigt, so wird der Emissionsmassenstrom neben dem Schadenumfang auch vom Vorhandensein und von der Funktionstüchtigkeit höherer Dichtungsränge abhängig sein⁸.

Schäden der Primärdichtung bei funktionstüchtiger Sekundärdichtung

Näherungsweise soll hier angenommen werden, dass ein Schaden an der Primärdichtungslamelle von einer Sekundärdichtung so kompensiert wird, als wäre die Sekundärdichtung nicht vorhanden, aber die Primärdichtung funktionstüchtig. Ohne hierfür einen Beweis angeben zu können, wird dies für viele Schadensszenarien wie Porositäten, kleine Risse und Alterungserscheinungen konservativ sein.

Für den Emissionsmassenstrom aus dem Ringspalt bei Vorliegen eines Primärdichtungsschades bei mindestens vorhandener Sekundärdichtung soll daher ebenso $L_R = 20 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$ als Obergrenze angenommen werden.

⁸Auch die Wahrscheinlichkeit für eine Entdeckung verschiedener Primärdichtungsschäden ist vom Vorhandensein höherer Dichtungsränge abhängig.

Schäden der Primärdichtung bei beschädigter Sekundärdichtung

Im Falle des gemeinsamen Versagens der Primär- und Sekundärdichtung (bzw. auch noch der eventuell vorhandenen Tertiärdichtung) würde potentiell der höchste denkbare Verlustmassenstrom am Ringspalt auftreten können. Schwere Beschädigungen, die zu einem (partiell) nicht abgedecktem Ringspalt führen, sind sehr selten und nicht pauschal abschätzbar. Die Ringspaltmaße sind abhängig von der Tankgröße und der Tankkonstruktion, das Schadensbild wiederum von der Schadensursache und dem Dichtungstyp.

Erneut wird hier so vorgegangen, dass durch Ausbreitungssimulationen ermittelt wird, welcher Emissionsmassenstrom vom Ringspalt ausgehen muss, um in Tanknähe für gefährliche explosionsfähige Atmosphären relevante Konzentrationen zu erreichen. Dann kann mit den Untersuchungsergebnissen für Sonderfälle geprüft werden, ob eine Freisetzung in dieser Größenordnung für das entsprechende Szenario möglich ist. Hierbei sollen auch Fälle einbezogen sein, bei denen eine Dichtung den Ringspalt nicht ausreichend überbrücken kann.

Schäden und Freisetzungen mit Lachenbildung

Im Forschungsprojekt [191] (siehe auch weiter oben im Kapitel) wurden verschiedene Schadensszenarien betrachtet, bei denen es zur Herausbildung einer Flüssigkeitsoberfläche auf dem Tankdach oder in der Tankwanne kommen kann. Wegen des hohen Dampfdruckes der hier betrachteten Lagerflüssigkeiten und der gegebenen freien Anströmung durch den Wind, können, je nach Lachengröße, die Verdunstungsmassenströme deutlich höher ausfallen, als diffuse Entweichungen aus Dichtungssystemen. Die Verdunstungsmassenströme aus diesen Flüssigkeitsoberflächen wurden mit empirischen Lachenverdunstungsmodellen abgeschätzt. Im Folgenden soll kurz auf die Problematik der Lachenverdunstung von Ottokraftstoffen eingegangen und begründet werden, weshalb die Modelle von Sutton und Pasquill [212, 213], von Deutsch [214] und von Brighton [215]⁹ als empirische Lachenverdunstungsmodelle für die durchzuführenden Abschätzungen des Verdunstungsmassenstromes geeignet sind. Wichtige Modellannahmen werden im Anhang C dargelegt. Die angegebenen Schätzwerte durch die empirischen Modelle wurden experimentell in der Größenordnung bestätigt [193]. Hierzu wurden Stahlbehälter unterschiedlichen Durchmessers mit Ottokraftstoff gefüllt und der Verdunstungsmassenstrom mit Hilfe einer Waage gemessen. Die Durchführung dieser Experimente, die Diskussion der Messergebnisse und die Begründung der für die Ausbreitungssimulationen verwendeten Emissionsmassenströme ist ausführlich im Forschungsbericht [191] angegeben und erfolgt hier in Auszügen.

Lachenbildung und Verdunstungsmodelle

Wird bei Betrieb eines Schwimmdachtanks eine Flüssigkeit in Form einer Lache freigesetzt, so beeinflussen sehr viele Faktoren den weiteren Verbleib dieser Freisetzung. Relevante Einflussbedingungen sind Größe, Form, Temperatur, Umgebungsbedingungen, Lachenstoff und weitere. Bei der Ausbildung einer Lache sind des Weiteren mögliche Umrandungen bzw. Begrenzungen für die Ausbreitung, minimale Schichthöhe, Versickerung, Adhäsion, Porosität, Untergrundtopographie und viele weitere wesentlich. Im realen Fall sind sowohl die Bildung als auch das Schwinden von Lachen dynamische Prozesse, die nicht alle in einem einzigen Modell Berücksichtigung finden können. In der Literatur sind beispielsweise keine Modelle zu finden, welche den Entstehungs- und Schwindprozesse zudem vollständig dynamisch (CFD) beschreiben. Zur Vereinfachung wird oft angenommen, dass die Entstehungsprozesse gegenüber den Schwindprozessen vernachlässigt werden können (instantane Lachenbildung). Für die entstandene Lache nimmt man oft vereinfachend eine wohldefinierte Form auf ebener Unterlage an.

⁹Im Forschungsbericht [191] ist dieses Modell nicht enthalten. Es wurde auf Empfehlung eines Gutachters der Publikation [193] aufgenommen, da es in den USA häufig angewendet wird.

Das Schwinden der Lachen geschieht für die hier betrachteten Lagerstoffe durch Verdunsten. In der Literatur verfügbare Verdunstungsmodelle lassen sich in zwei grundsätzliche Modellgruppen einteilen:

1. stationäre Modelle wie vereinfachte Grenzschichtmodelle und empirische/semiempirische Modelle (inklusive Filmtheorie),
2. instationäre Modelle wie Grenzschichtmodelle (CFD) oder Energiebilanzmodelle.

Grenzschichtmodelle stellen in der Regel ein System partieller Differentialgleichungen für die Grenzschichtfelder $T(\vec{x}; t)$, $p(\vec{x}; t)$, $\vec{v}(\vec{x}; t)$ auf mit dem Ziel, Stoffübergangskoeffizienten β ($[\beta] = LT^{-1}$) mit $\beta = \frac{Sh \cdot D}{L}$ und damit den Massenstrom \dot{m} zu bestimmen. Dies ist im Allgemeinen ein CFD-Problem und wird numerisch gelöst. Im Prinzip lassen sich auf diese Weise multiple Einflüsse durch zusätzliche Bilanzgleichungen auf die Lache mitberücksichtigen. Energiebilanzmodelle z.B. [216] bilanzieren alle wesentlichen, in die Lache ein- und ausgehenden Energieströme (Wärmeströme, Stoffströme, Massenbilanz). Wegen $T = T(t)$ sind die Energieströme a priori dynamisch; bilanziert werden üblicherweise: Wärmeübergang in den Boden und in die Luft. Mit berücksichtigt werden Strahlungswärme (\dot{q}_{Rad}), hinzukommende Lachenflüssigkeit ($q_{ein} \cdot \dot{m}_{ein} = c_p \cdot \dot{m}_{ein} \cdot (T_{austritt} - T_L)$), Verdampfungs- bzw. Verdunstungsenthalpien ($q_{sieden} \cdot \dot{m}$, $q_{verd} \cdot \dot{m}$).

Empirische Modelle versuchen den Stoffübergang von der Lache in die darüberliegende, turbulent strömende Luftschicht durch einen Stoffübergangskoeffizienten zu beschreiben. Dies führt in der Regel direkt zu empirischen Gleichungen für \dot{m} [217, 214, 218], oder zu Advektions-Diffusionsgleichungen, für die für einfache Lachengeometrien analytische Ausdrücke für \dot{m} gefunden werden können [212, 213].

Für die Zwecke der Bestimmung einer plausiblen Größenordnung im Falle der Lachenbildung auf einem Schwimmdachtank oder im Auffangbereich wurde im Forschungsprojekt [191] gezeigt, dass empirische Modelle ausreichend sind. Hier sollen einige der dort angegebenen Ausführungen wiederholt werden, so dass die Eingangsmassenströme für die CFD-Simulationen auch ohne Zugriff auf den Bericht [191] oder die Publikation [193] möglich wäre.

Besonderheiten von Kraftstofflachen

Bezüglich der Verdunstung von Ottokraftstofflachen gibt es einige Publikationen [219, 209, 220, 221, 222, 223, 224], in denen die Verdunstung überwiegend durch Spezifikation eines Stoffübergangskoeffizienten beschrieben wird. Im Gegensatz zu Wasser oder Reinstoffen aus kurzkettigen Alkanen, zeigen komplexe Gemische wie Ottokraftstoffe ein abweichendes Verdunstungsverhalten. Während des Verdunstungsprozesses ändert sich die stoffliche Zusammensetzung des Gemisches, da die leichtflüchtigen Komponenten die Anfangsphase der Verdunstung dominieren [220]. Dadurch ändert sich insbesondere der zeitliche Verlauf der Verdunstung [219, 209], was sowohl den Massenstrom betrifft, als auch die Zusammensetzung der Emission. Bei der Untersuchung von Rohöl- und Ottokraftstofflachen in [209] wurde festgestellt, dass Verdunstungen einer anderen Dynamik genügen, als gemäß der Grenzschichtmodelle zu erwarten wäre. Beispielsweise ist die Verdunstung nicht von der Oberfläche und der überströmenden Windgeschwindigkeit abhängig, wie es bei Reinstoffen zu erwarten wäre. Insgesamt ist der Massenverlust zeitlich nicht konstant, sondern nimmt exponentiell ab. In den anderen zuvor zitierten Arbeiten wurde daher untersucht, wie sich physikalische Parameter (z. B. der Dampfdruck oder die Viskosität) und die Zusammensetzung der Lachenflüssigkeit während Langzeitverdunstungsexperimente ändern [219, 221] bzw. welchen Einfluss zusätzlich etwa Additive wie ETBE (Antiklopffmittel) haben [222]. Zudem wurde auch die vertikale Diffusion und die Herausbildung von Konzentrationsprofilen über Ottokraftstofflachen untersucht [223].

Allerdings beziehen sich alle zuvor zitierten Arbeiten auf Verdunstungsexperimente, in denen winzige Lachen in Petrischalen oder Rundkolbenflaschen untersucht wurden bzw. auf Kleinstverschüttungen auf einem nicht näher spezifizierten Boden. In diesen Arbeiten sind entweder

keine Gleichungen für \dot{m} in der Anfangsphase angegeben oder die angegebenen Gleichungen können nicht benutzt werden. Eine in [219] angegebene Formel für \dot{m} kann nicht für Zeiträume unter einem Tag verwendet werden, weil die Logarithmusfunktion dann einen negativen Massenverlust vorhersagen würde. In der Arbeit [221] wurde kein Wind berücksichtigt, weswegen der Stofftransport nur von diffusiven Prozessen dominiert wird, welche vergleichsweise langsam ablaufen. Auch die Arbeit [209], in der sehr präzise Verdunstungsmassenströme für verschiedene Ölsorten angegeben werden, stellt keine Gleichung zur Abschätzung von \dot{m} für die Erfordernisse dieses Projektes bereit.

Zusammenfassend lässt sich daher festhalten, dass in der Literatur publizierte Untersuchungen das Langzeitverhalten der Verdunstung im Fokus haben, jedoch nicht die mögliche Größenordnung von Verdunstungsmassenströmen kurzzeitig nach einer Freisetzung, möglicherweise durch einen Schaden oder Unfall.

Eine detaillierte Untersuchung vom Verdunstungsverhalten von Ottokraftstoffen auf Betonböden, wie sie häufig an Tankstellen zu finden sind, wurde in [224] durchgeführt. Die Autoren haben ebenso ein empirisches Modell abgeleitet, welches ursprünglich für Vorhersagen zur Wasserverdunstung parametrisiert war. Der Massenverlust wird in [224] in eine Pegelabnahme je Tag unter der Annahme einer konstanten Lachenoberfläche umgerechnet. Die Zusammensetzungsänderung des Gemisches wird hierbei nicht berücksichtigt und es werden keine Experimente zur Validierung durchgeführt.

Noch problematischer ist jedoch, dass in den dort angegebenen Gleichungen fälschlicherweise ein reziproker Ausdruck zur Berechnung der psychrometrischen Konstante verwendet wurde, so dass die angegebenen Vorhersagen zum Pegelverlust und die Figuren falsch sind¹⁰. Auch wurden keine Vergleiche mit den Vorhersagen anderer Modelle vorgenommen.

Insgesamt wurde daher entschieden, den Verdunstungsmassenstrom in der Anfangsphase der Verdunstung, wo Entmischung nur einen untergeordneten Einfluss hat, experimentell zu bestimmen und die Eignung der Modelle zu belegen. Angaben zur Herleitung der Modelle wie auch die Modellgleichungen findet der interessierte Leser im Anhang C.

Stoffparameter für die Verdunstungsmodelle bei Ottokraftstoffen

Gemäß (C.10), (C.20) und (C.23) aus Anhang C fällt der Verdunstungsmassenstrom bei gleicher Lachengröße und Umgebungsbedingungen umso höher aus, je höher der Dampfdruck und der Stoffübergangskoeffizient sind. In [225] wurde D für verschiedene Ottokraftstoffe (91, 95 und 98 Oktan sowie für Gemische daraus) experimentell ermittelt. Es konnte gezeigt werden, dass mit steigender Oktanzahl der Betrag des Diffusionskoeffizienten abnimmt und für $T = 323 \text{ K}$ (50°C) im Bereich von $D \in [7,4 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} : 2,1 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}]$ liegt. Der höchste Stoffübergangskoeffizient wurde für ein Gemisch aus Ottokraftstoff und Ethanol (Sorte: UAE gasoline E+) ermittelt. Nimmt man diese Kraftstoffsorte heraus, so liegt D im Bereich von $D \in [7,4 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} : 6,4 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}]$ mit einem Mittelwert von $D = 7 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$. Diese Werte sollen hier verwendet werden. Die Temperatur wurde in der zitierten Arbeit gewählt, weil es die höchste Umgebungstemperatur für Sicherheitsbetrachtungen am Untersuchungsort darstellte. Da D mit der Temperatur im Allgemeinen steigt, können diese Werte als konservativ für niedrigere Temperaturen angesehen werden. Wegen der Ähnlichkeiten in den Zusammensetzungen sind höchste Werte für D neben Ottokraftstoffen auch für Naphtha zu erwarten.

Das Modell von Deutsch benötigt die dynamische Viskosität von Luft. In [226] wird diese mit $\eta = 15 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ bei $T = 293 \text{ K}$ angegeben.

Für den Dampfdruck werde $p_d = 55,8 \cdot 10^3 \text{ Pa}$ und für die Temperatur entsprechend $T = 293 \text{ K}$ gewählt. Die molare Masse sei $M = 0,11 \text{ kg mol}^{-1}$.

Beide Modelle benötigen die Angabe einer Windgeschwindigkeit in einer Referenzhöhe. Im Modell von Deutsch ist die Referenzhöhe $z = 10 \text{ m}$. Eine Umrechnung der Windgeschwindigkeit

¹⁰Die Autoren der Arbeit wurden auf den Fehler hingewiesen.

auf andere Höhen kann mit dem zuvor angegebenen Profilkfaktor α erfolgen:

$$u(z_1) = u(z_0) \left(\frac{z_1}{z_0} \right)^\alpha. \quad (6.28)$$

Das Modell von Brighton baut auf den Modellannahmen von Sutton und Pasquill auf, benutzt jedoch eine modifizierte Beschreibung des turbulenten Stoffeintrages in die Grenzschicht. Die hierbei neu hinzukommenden Konstanten sind im Anhang C angegeben.

6.2.6. Experimente zur Lachenverdunstung

Für eine detaillierte Beschreibung der experimentellen Bestimmung der Verdunstungsmassenströmen sei hier auf die Publikation [193] bzw. auf den Forschungsbericht [191] verwiesen. Angegeben werden soll jedoch, dass als Testsubstanzen handelsübliches Winter- und Sommerblend (SUPER 95) von einer Tankstelle verwendet wurde. Die Experimente wurden im Sommer und im Winter unter realen Wetterbedingungen durchgeführt. Folgende Größen/Einflüsse wurden bestimmt/untersucht:

- Verdunstungsmassenstrom $\dot{m}(t)$ in Abhängigkeit der Zeit,
- Einfluss von Windgeschwindigkeit, Temperatur und Blend,
- Einfluss der Lachengröße,
- Verdunstung mit Wärmebad und Konzentrationsmessungen im Umfeld.

Anschließend erfolgte ein Vergleich der Messwerte mit den Modellvorhersagen.

Zusammenfassend kann hier angegeben werden, dass die Größenordnungen der gemessenen und vorhergesagten Verdunstungsmassenströme \dot{m} gut übereinstimmen. Die Modelle aus dem Vergleichsfeld liefern zudem eine brauchbare Übereinstimmung in ihren Vorhersagen. Die gemessenen Werte liegen innerhalb der mit den Unsicherheiten spezifizierten Fehlerbereiche, auch wenn das Modell von Deutsch hier weniger konservativ als das Modell von Sutton-Pasquill bzw. das Modell von Brighton ist.

Die Vorhersage einer Lache und deren Spezifikationen bei einem Schaden an einem Schwimmdachtank ist schwierig. Dies gilt sowohl für das Dach als auch für den Auffangbereich. Während man sich die Herausbildung einer wohlgeformten Lache (rund, elliptisch) auf dem Schwimmdach noch vorstellen kann, sind im Auffangbereich weitere größen- und formbeeinflussende Faktoren zu finden. Üblicherweise gibt es dort Übergänge von Beton auf Wiesen- oder Kiesflächen und auch Änderungen im Gefälle. Im Rahmen dieses Projektes wurde es dennoch als hinreichend angesehen, den Verdunstungsmassenstrom \dot{m} mit einfachen empirischen Modellen zu berechnen, wenn sichergestellt ist, dass die Lachenoberflächen nicht unterschätzt werden. Eine Kopplung dieser Modelle mit den CFD-Ausbreitungssimulationen ist somit begründet.

Mit Blick auf die realen Größen von Schwimmdachtanks zeigt Abbildung 6.9 den Größenbereich von \dot{m} in Abhängigkeit vom Tankradius und für verschiedene Windgeschwindigkeiten. Durch die Wahl von $r = 20$ m kann die Verdunstung unmittelbar für die weiter oben spezifizierten Tanktypen 1 bis 5 abgelesen werden. Hier sei erneut betont, dass die bestimmten Verdunstungsmassenströme wegen der zahlreichen möglichen Abweichungen der Realsituation am Schwimmdachtank von den Modellannahmen nur für eine Plausibilisierung der Größenordnung geeignet sind. Des Weiteren wird angenommen, dass die mit den Verdunstungsmassenströmen einhergehende Wärmeabfuhr die Temperatur der Lache nicht senken möge. Da der Verdunstungsmassenstrom mit fallender Lachentemperatur abnimmt, ist diese Annahme wiederum konservativ.

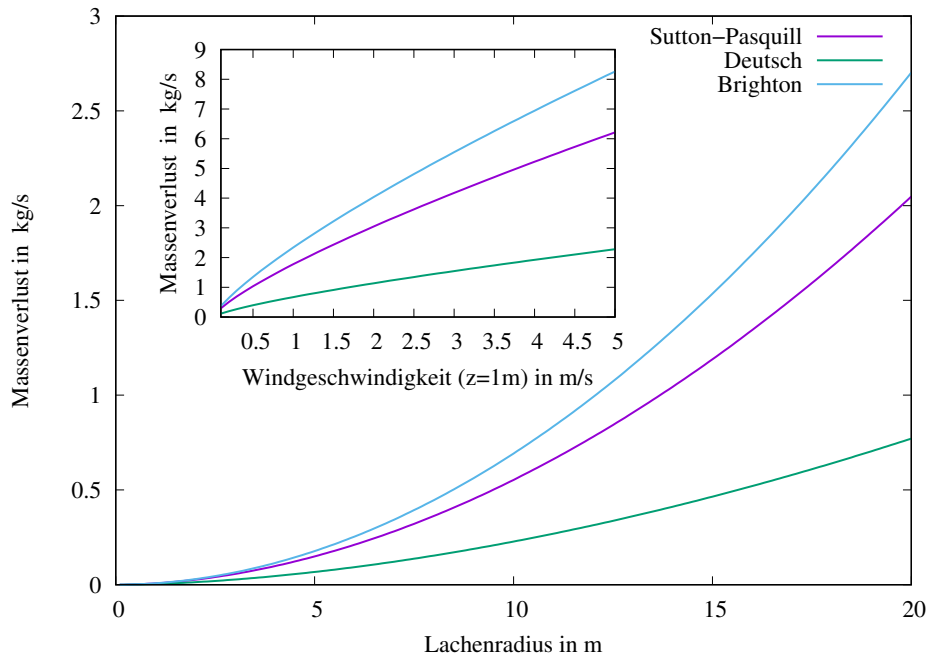


Abbildung 6.9: Darstellung des Massenverlustes durch Verdunstung in Abhängigkeit des Lachenradius ($u(z = 1 \text{ m}) = 1,2 \text{ m s}^{-1}$) berechnet mit den Modellen von Sutton-Pasquill, Deutsch und Brighton. Das Inset zeigt die Verdunstung in Abhängigkeit der Windgeschwindigkeit für eine Lache mit dem Radius von $r = 20 \text{ m}$.

6.2.7. Partieller oder vollständiger Dachuntergang

Geht ein Schwimmdach partiell oder vollständig unter, so wird eine sehr großer Bereich innerhalb des Schwimmdachtanks zu einer freien Lachenoberfläche. Für die Emissionen, welche vom Dachbereich eines Schwimmdachtanks ausgehen können, stellt dies das *Worst-Case-Szenario* dar. Die Emissionsmassenströme für die CFD-Simulationen wurden in Abhängigkeit der Windgeschwindigkeit gemäß (C.10), (C.20) und mit (C.23) bestimmt. Als Größenbereich ist $\dot{m} < 10 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ für die betrachteten Tanktypen 1-5 sinnvoll.

6.2.8. Tanküberfüllung oder Leckagen mit Lachenbildung im Auffangraum

Untersuchungen zu Tanküberfüllungen und zu Tankhüllenschäden zeigen, dass die damit einhergehenden Stofffreisetzungen bei Lagerstoffen wie Ottokraftstoffe oder Naphtha mit hoher Sicherheit zu gefährlichen explosionsfähigen Atmosphären im Tankbereich und darüber hinaus führen werden. Unglücke wie der Buncefield-Unfall in Großbritannien (11.12.2005) [227] oder die Tanklager-Explosion in Puerto Rico (24.10.2009) [228] zeigen, dass mit dem Überlaufen der Tanks große Oberflächen an der Tankhülle überströmt werden und der Lagerstoff regelrecht herunter plätschert. Dabei bilden sich feine Aerosole, Schwergaswolken aus VOCs und ausgedehnte Lachen im Auffangbereich, die daraufhin verdunsten. Übliche Befüllvolumenströme transportieren zu hohe Lagerstoffmengen, als dass eine sich bildende Lache durch einen überlaufenden Tank ungefährlich sein könnte.

Hier wird daher angenommen, dass ein überlaufender Tank oder eine Lache im Auffangraum immer zu einer kritischen Emission führen wird. Selbiges gilt für einen Riss im Tankmantel. Daher sollen für diese Szenarien keine CFD-Simulationen durchgeführt werden. Es sei hier aber explizit auf die CFD-Simulation zum Buncefield-Unfall [227] verwiesen. Dort wurde versucht, die Ausbreitung der flüchtigen organischen Verbindungen nach dem Überlaufen des Tanks zu

simulieren. Die Simulationen benutzen dabei die Daten aus der Rekonstruktion des Unfallherganges.

6.2.9. Gesamtübersicht über Szenarien und Emissionsmassenströme

Die Freisetzungsmassenströme für Freisetzungen im Normalbetrieb, bei Revisionen und für verschiedene Schadenereignisse sind in der Tabelle 6.4 übersichtsartig zusammengefasst. Diese werden als Eingangsparameter für die im folgenden Abschnitt beschriebenen Ausbreitungssimulationen verwendet.

Tabelle 6.4: Übersicht über Emissionen an Schwimmdachtanks und die zugeordneten Freisetzungsmassenströme. Abkürzungen: Primärdichtung (PD), Sekundärdichtung (SD).

Ereignis	Quellterm in $kg\ h^{-1}$	Position der Quelle, Bemerkungen
Normalbetrieb	< 10	variable Aufteilung auf Ringspalt und Führungsrohr
Revision (Standverluste)	< 10	variable Aufteilung auf Ringspalt, Führungsrohr und Atmungsarmatur
Revision (Wiederbefüllen)	< 40	Atmungsarmatur
Schaden SD	< 20	Ringspalt, PD funktionstüchtig
Schaden PD	< 20	Ringspalt, SD funktionstüchtig
Schaden Dichtung	freier Parameter	Dachfehlposition, kombiniertes Dichtungsversagen, Ringspalt
Armatuschaden	freier Parameter	Dachlache variable Größe (partieller, vollständiger Dachuntergang)
Dachuntergang	freier Parameter	Dachlache, Tankdachgröße
Dachuntergang (Beispieltanks)	< 10000	Dachlache, Tankbeispiel 1-5
Leckage	freier Parameter	Lache variabler Größe, Auffangraum

Zu den Einträgen in der Tabelle 6.4 ist anzumerken, dass die angegebenen Quellterme konservative Obergrenzen darstellen. Freier Parameter bedeutet, dass für eine plausible Abschätzung eines Quelltermes zusätzliche Daten bzw. Szenarienanalysen erforderlich sind, welche hier nicht vorliegen. In den Strömungssimulationen wurden daher Emissionen von $100\ kg \cdot h^{-1}$ aus dem Ringspalt und der Atmungsarmatur betrachtet, auch wenn eine so hohe Freisetzung nicht durch ein Szenario beschrieben werden kann. Ziel war es herauszufinden, welche Konzentrationsfelder bei verschiedenen Freisetzungsmassenströme erwartet werden könnten.

6.3. Ausbreitungsuntersuchungen im Windkanal und CFD-Simulationen

6.3.1. Visualisierung der Tankumströmung und der Freisetzung im Windkanal

Im Rahmen der Windkanaluntersuchungen wurde zunächst das Strömungs- bzw. Ausbreitungsfeld visualisiert, indem aus den Quellöffnungen (Atmungsarmatur in der Tankmitte) definiert Rauch freigesetzt und dessen Ausbreitung innerhalb dünner Lichtebenen geometrisch definiert sichtbar gemacht wurde. In Abbildung 6.10 sind vertikale Lichtschnitte unterschiedlicher Belichtungszeit gezeigt. Es wurde hierfür Ethan aus der Atmungsarmatur freigesetzt, wobei sich das Tankdach am unteren Umkehrpunkt (wie im Falle einer Revision) und am oberen Umkehrpunkt befand. Durch kurze Belichtungszeiten lassen sich einzelne Wirbelstrukturen visualisieren. Sol-

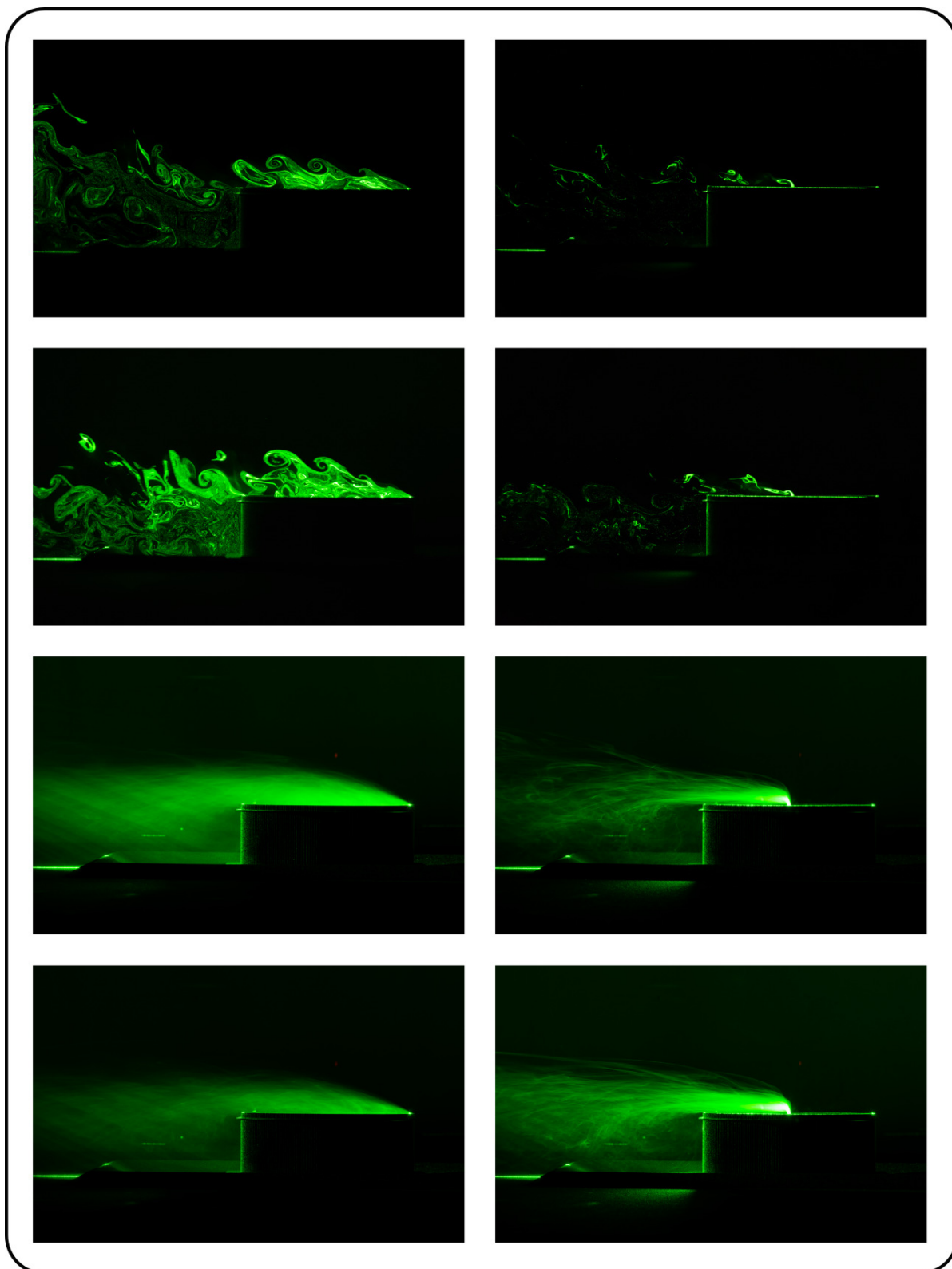


Abbildung 6.10: Darstellung von vertikalen Lichtschnitten unterschiedlicher Belichtungszeit bei Freisetzungen von Ethan aus einer Punktquelle in der Tankdachmitte (vereinfachte Nachbildung der Atmungsarmatur). Von oben nach unten nimmt die Belichtungszeit zu. Links: Tankdach am unteren Umkehrpunkt, rechts: Tankdach am oberen Umkehrpunkt.

che Wirbelstrukturen könnten mittels LES-Simulationen gefunden werden. Die Aufnahmen bei zunehmenden Belichtungszeiten entsprechen tendenziell Konzentrationsmittelwerten. Mit den hier durchgeführten RANS-Simulationen können Konzentrationsprofile erwartet werden, die letzteren sehr ähnlich sind. Man kann der Abbildung 6.10 entnehmen, dass einzelne Wirbelstrukturen vergleichsweise hohe Konzentrationen des freigesetzten Gases beinhalten und diese korreliert transportieren können. Solche Wirbel sind insbesondere im Lee zum Tank interessant, da sie hohe Konzentrationen, wie sie bei Emissionen aus Lachen entstehen, bis in den Auffangbereich am Fuß des Tanks verlagern können. Allerdings zeigen diese Wirbelstrukturen erhöhter Konzentrationen stochastisches Auftretensverhalten und sind nur kurzzeitig. Für die Zwecke dieses Forschungsberichtes ist dies so zu interpretieren, dass kurzzeitige Überschreitungen der UEG im Auffangbereich möglich sind, auch wenn der mit RANS-Simulationen bestimmte Konzentrationsmittelwert noch hinreichenden Sicherheitsabstand zur UEG hat (beispielsweise der RANS-Mittelwert noch weniger als 50 % der UEG ist). Befindet sich im Auffangbereich eine Zündquelle, die mit dem Eintreffen eines solchen Wirbels zusammentrifft, so ist eine Entzündung möglich. Längere Belichtungszeiten zeigen Verteilungsstrukturen, die eher einer stationären Situation entsprechen und nicht nur kurzzeitig (Zeiträume im Sekundenbereich) auftreten. Diskutiert man beispielsweise die Entzündung einer Freisetzung von VOC durch einen Blitzeinschlag im Auffangbereich, so wäre die kombinierte Wahrscheinlichkeit von lokaler Konzentration oberhalb der UEG und dem Einschlagen eines Blitzes ausschlaggebend. Diese ist jedoch kleiner als in dem Fall, wo der Mittelwert der Konzentration oberhalb der UEG liegt.

6.3.2. Konzentrationsmessungen im Windkanal nach Ethanfreisetzungen

Für den Vergleich zwischen CFD-Simulation und Windkanalmessungen wurden verschiedene Konzentrationsprofile im Windkanal experimentell bestimmt. Hierbei wurden Longitudinal-, Vertikal- und Lateralprofile unterschieden. Die Freisetzung erfolgte nahezu impulsfrei aus einem Rohr, das in etwa dem der Atmungsarmatur entspricht. Für den Vergleich der gemessenen Konzentrationen C_m mit den Konzentrationen aus der CFD-Simulation C_s wurden diese in eine dimensionslose Vergleichskonzentration C^* überführt (siehe VDI 3783 Blatt 12):

$$C^* = \frac{C_m u_{ref} L_{ref}^2}{Q_{ref}}. \quad (6.29)$$

Hierin sind u_{ref} die gemessene Referenzwindgeschwindigkeit in der Höhe L_{ref} über dem Boden und Q_{ref} ist der Quellvolumenstrom. Mit (6.29) kann bei Kenntnis der gemessenen und der aus der Simulationen folgenden Konzentration sowohl für den Modellmaßstab, als auch für den Realmaßstab C^* errechnet werden, welche näherungsweise übereinstimmen sollten.

Daher erfolgt der Vergleich der Windkanaluntersuchungen mit den CFD-Simulationen durch eine gemeinsame Darstellung von C^* mittels unterschiedlicher Profile. Die Messungen erfolgten hierbei im windabgewandten Bereich (Lee). Diese Quelleigenschaften wurden in ANSYS-CFX nachgestellt.

In der Übersichtsabbildung 6.11 (oben rechts) sind die Achsen für die Longitudinal-, Vertikal- und Lateralprofile illustriert. Die Längen der eingezeichneten Achsen repräsentieren hierbei die durch die Messungen im Windkanal erfassten Intervalle. Die gestrichelten Linien sollen die Positionierung der Lateralprofile und des Longitudinalprofiles vereinfachen. Es handelt sich um Projektionen der Profillinien auf den Boden. Zudem illustrieren die Profillinien, dass durch die Windkanalmessungen alle für die Zwecke des Forschungsberichtes relevanten Bereiche erfasst wurden.

Die beiden Lateralprofile (y -Richtung) wurden auf der Höhe der Schwimmdachtankoberkante gemessen, ebenso das Longitudinalprofil (x -Richtung = Windrichtung). Für die Messintervalle gilt: ($x = 22 \text{ m}, y \in [-28, 28] \text{ m}, z = 16 \text{ m}$) (Lateralprofil 1), ($x = 50 \text{ m}, y \in [-40, 40] \text{ m}, z = 16 \text{ m}$) (Lateralprofil 2), ($x \in [22, 82] \text{ m}, y = 0 \text{ m}, z = 16 \text{ m}$) (Longitudinalprofil). Die Vertikal-

profile erfassen die Konzentrationen von Bodenhöhe bis auf eine Höhe von 35 m (z -Richtung): ($x = 22$ m, $y = 0$ m, $z \in [0, 35]$ m) (Vertikalprofil 1) und ($x = 82$ m, $y = 0$ m, $z \in [0, 35]$ m).

Die Simulation erfolgte mit $Q_{ref} = 5,6 \cdot 10^{-3} \text{ kg s}^{-1}$, $u_{ref} = 1 \text{ m s}^{-1}$ und $L_{ref} = 10$ m. In der Simulation wurde Ethan mit einer Dichte von $\rho = 1,3 \text{ kg m}^{-3}$ freigesetzt, womit folgt:

$$\frac{u_{ref} L_{ref}^2}{Q_{ref}} = 23255. \quad (6.30)$$

Mit diesem Faktor wurden die in den CFD-Simulationen ermittelten Konzentrationsdaten multipliziert, um die dimensionslose Vergleichskonzentration (6.29) zu bekommen. Die Konzentrationsprofile sind ebenso in der Übersichtsabbildung 6.11 im direkten Vergleich gezeigt. Man findet zwischen den im Windkanal bestimmten Stoffausbreitungen und den Simulationsergebnissen grundsätzlich eine sehr gute Übereinstimmung. Für alle Profile passen der Verlauf (Krümmungsverhalten der Kurven) der Konzentrationen in Abhängigkeit der jeweiligen Entfernung wie auch die Maximalkonzentrationen zueinander. Überwiegend sind jedoch die Messwerte aus den Windkanalversuchen leicht oberhalb der Simulationsergebnisse. Geringe Abweichungen entstehen zum Teil dadurch, dass die Windkanaldaten linear interpoliert wurden und bei höherer Anzahl an Messpunkten dem Kurvenverlauf der Simulationsdaten folgen würden. Beispiel hierfür ist der Verlauf des $x = 22$ m-Lateralprofiles (mitte links in Abbildungen 6.11) bei geringen Konzentrationen. Die Unterschiede zwischen beiden Lateralprofilen liegen darin begründet, dass mit zunehmender Entfernung zum Schwimmdachtank die Konzentrationen rasch abnehmen. Somit zeigt das $x = 50$ m-Lateralprofil (mitte rechts in Abbildung 6.11), welches der Entfernung von der Tankmitte zur Deichoberkante entspricht, bereits ein deutlich geringes Konzentrationsmaximum auf der Achse der Hauptwindrichtung ($y = 0$). Die leichte Welligkeit und die geringfügige Tendenz zur Asymmetrie im $x = 22$ m-Lateralprofil sind Artefakte des Gitters, aus der eine leicht unsymmetrische Ausbreitung der Freisetzung in der Anfangsphase auf dem Tankdach resultiert. Bei einer weiteren Verbesserung des Gitters würden diese Artefakte verschwinden. Die Vertikalprofile in Abbildungen 6.11 (unten) beschreiben die Änderung der Konzentration entlang der Zylinderachse des Schwimmdachtanks. Das $x = 22$ m-Vertikalprofil (links unten) wurde unmittelbar neben dem Tank in Hauptwindrichtung aufgezeichnet. Der unsymmetrische Verlauf liegt daran, dass für $z > 16$ m eine freie Anströmung möglich ist, während für $z < 16$ m die Konzentrationen im Abstrombereich zum Tank gemessen wurden. Die RANS-Simulationen können hierbei die Konzentrationswerte, insbesondere ab Fußpunkt ($z = 0$ m), nicht gut beschreiben. Hierfür wären LES-Simulationen besser geeignet. Hier zeigt sich, dass die RANS-Simulationen die Bodenkonzentrationen tendenziell unterschätzen können. Insofern erscheint es erneut plausibel, die Ausbreitungen der Emissionen im Falle von Lachen bzw. Dachuntergängen konservativ einzuschätzen. Der Vergleich der Longitudinalprofile in Abbildung 6.11 zeigt erneut eine gute Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation, auch wenn die Simulationsdaten bei geringer Entfernung zum Tank etwa 8% geringer sind. Erwartungsgemäß nimmt die Konzentration monoton mit zunehmender Entfernung zum Tank ab. Zusammenfassend kann geschlussfolgert werden, dass die Windkanaldaten die Simulationen bestätigen.

6.3.3. CFD-Simulation zu Emissionen im Normalbetrieb

Weiter oben wurde gezeigt, dass eine konservative Obergrenze von 10 kg h^{-1} aus Dachdichtungen und Dacharmaturen (zusammen) für den zur Simulation verwendeten Tank plausibel ist. Hier nicht dargestellte Simulationsergebnisse zeigen jedoch, dass sich diese Emissionen auch bei wenig Wind rasch verflüchtigen und kaum visualisierbare Bereiche oberhalb der UEG liefern. Dies liegt auch an der gewählten Gitterauflösung, welche noch zu grob ist, um derartig kleine Bereiche in der Nähe der Dichtungselemente aufzulösen, bei denen die Konzentrationen nahe der UEG sind. Daher wurden extreme Emissionen von 100 kg h^{-1} aus dem Ringspalt

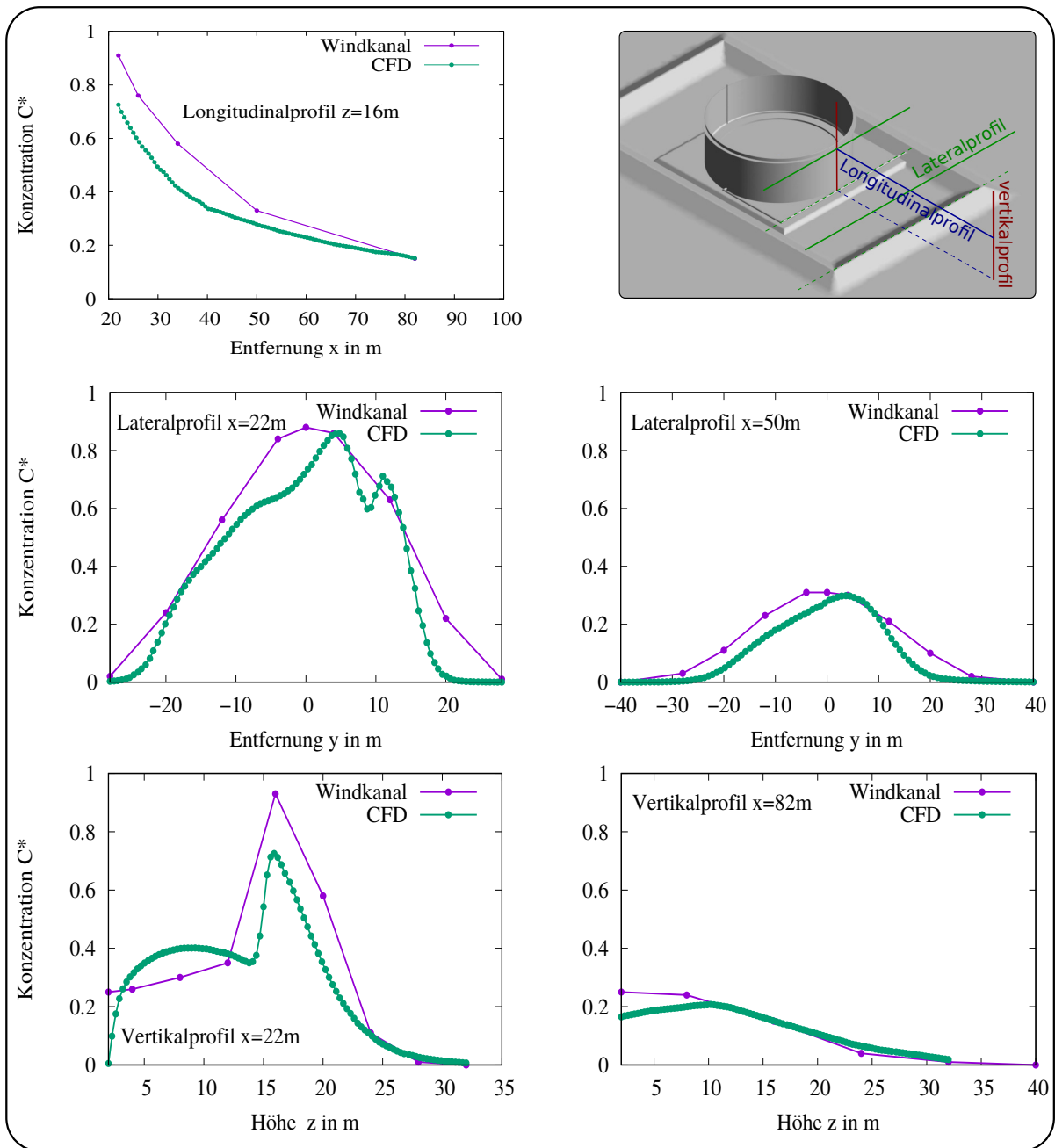


Abbildung 6.11: Vergleiche einer definierten Freisetzung im Windkanal mit einer CFD-Simulation an einem Modell. Dargestellt sind Longitudinalprofile (oben links), Lateralprofile (mittig) und Vertikalprofile (unten) für die dimensionslose Konzentration gemäß (6.29). Oben rechts: Darstellung der Achsen (und Benennungen) für die im Windkanal gemessenen und hier illustrierten Longitudinal-, Vertikal- und Lateralprofile.

6. Anwendungsbeispiel: Explosionsgefährdete Bereiche an Schwimmdachtanks

angenommen, welche sogar die Prognosen der Emissionen bei Dichtungsschäden übertreffen. Abbildung 6.12 zeigt Simulationsergebnisse zur Ausbreitung dieser Emissionen für unterschiedliche Dachpositionen und Windgeschwindigkeiten (letztere in Bezug zu einer Referenzhöhe von 10 m). Man kann der Abbildung 6.12 entnehmen, dass die im Normalbetrieb zu erwartenden

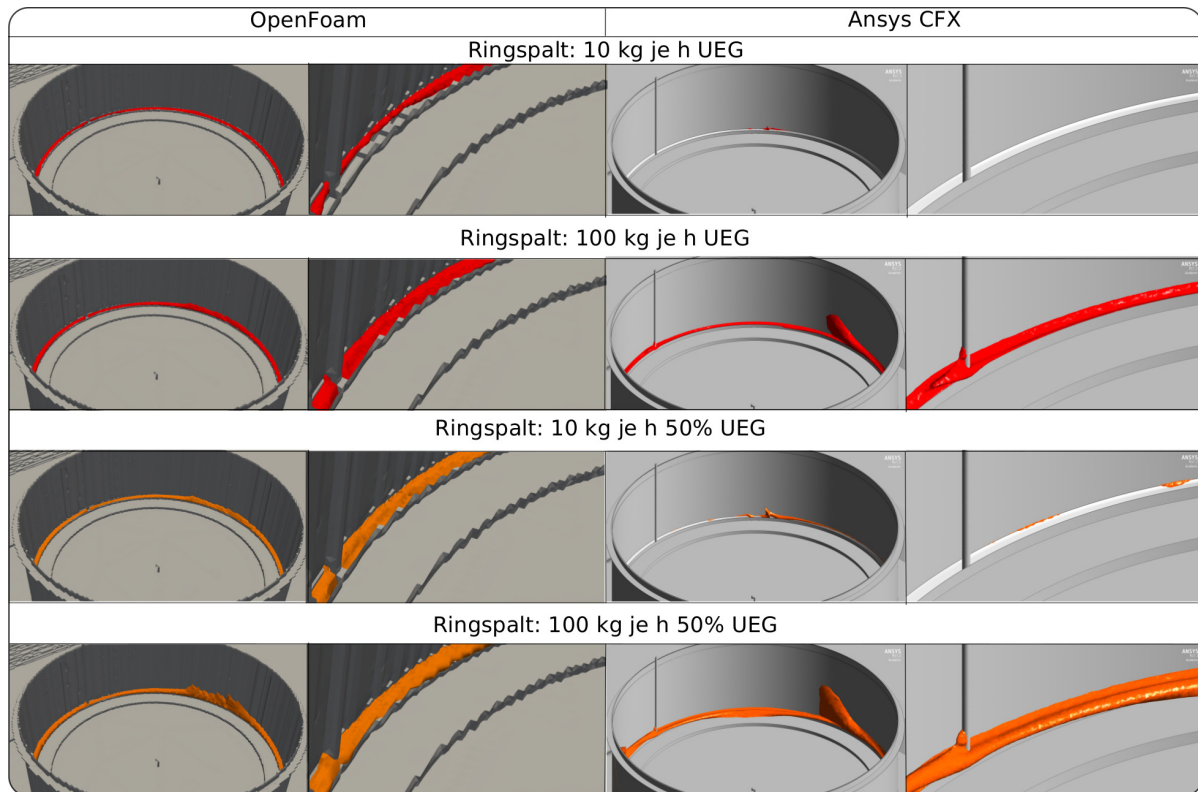


Abbildung 6.12: Illustrationen von Emissionsausbreitungen für unterschiedliche Dachpositionen und Windgeschwindigkeiten. Als Quellstärken wurden 10 kg h^{-1} und 100 kg h^{-1} aus dem Ringspalt angenommen. Im oberen Sammelbild sind die Ausdehnungen der Emissionswolken mit Erreichen der UEG und im unteren Sammelbild mit Erreichen von 50% der UEG angegeben ($u = 1 \text{ m s}^{-1}$).

den Emissionen nur kleine explosionsgefährdete Bereiche auf dem Dach verursachen. Dies gilt selbst für das extreme Szenario bei einer Emission vom zehnfachen des konservativ geschätzten Höchstwertes. Die Softwarepakete ANSYS und OpenFOAM liefern vergleichbare Ergebnisse. Bereiche mit etwa 50% der UEG sind erwartungsgemäß etwas größer, beschränken sich dennoch nur auf kleine Bereiche in der Nähe der Ringspaltabdichtung.

Setzt man wie hier die Geruchschwelle bei 0,1% der UEG an, so liegt auf dem gesamten Dach eine Geruchswahrnehmbarkeit vor. Dies ist in Abbildung 6.13 gezeigt. Mit Ausnahme des extremen Szenario, sind neben dem Tank keine oder nur sehr leichte Geruchswahrnehmungen im Normalbetrieb zu erwarten. Diese Simulationsergebnisse sind auch konsistent mit der Betriebserfahrung bei der Nutzung von Schwimmdachtanks.

6.3.4. CFD-Simulation zu Emissionen bei einer Revision

Emissionen, die in einer Revision auftreten können, wurden zuvor mit 10 kg h^{-1} aus der Ringspaltabdichtung und mit 40 kg h^{-1} aus der Atmungsarmatur abgeschätzt. Für diese geringen Emissionen gilt die gleiche Feststellung wie für die normalbetrieblichen Emissionen. Daher wurden Emissionen von 100 kg h^{-1} aus der Atmungsarmatur zusammen mit einer Emission von 100 kg h^{-1} aus dem Ringspalt angenommen.

6. Anwendungsbeispiel: Explosionsgefährdete Bereiche an Schwimmdachtanks

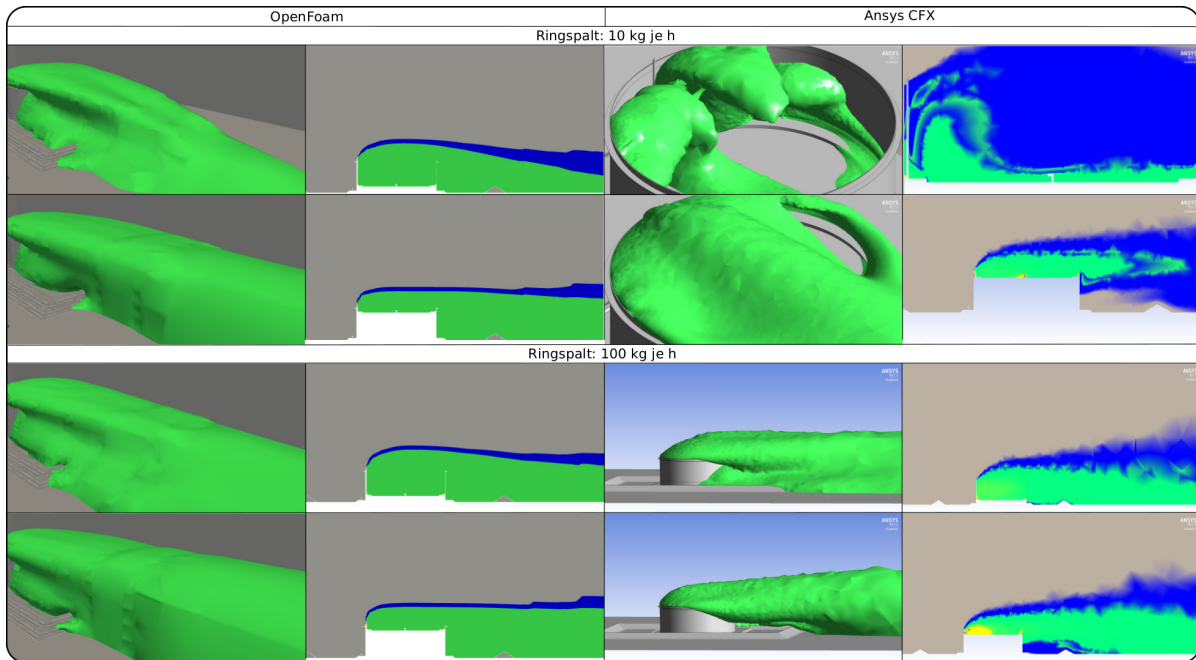


Abbildung 6.13: Illustration der Ausbreitung von Emissionen mit Überschreiten der Geruchschwelle für unterschiedliche Dachpositionen und Windgeschwindigkeiten. Als Quellstärken wurden 10 kg h^{-1} und 100 kg h^{-1} aus dem Ringspalt angenommen.

In Abbildung 6.14 werden jedoch nur Simulationsergebnisse zur Ausbreitung der extremen Emissionen bei unterer Dachposition gezeigt, da die anderen im Fall zuvor bereits enthalten sind. Es wurden hier nur die mit dem Softwarepaket ANSYS-CFX bestimmten Emissionsaus-

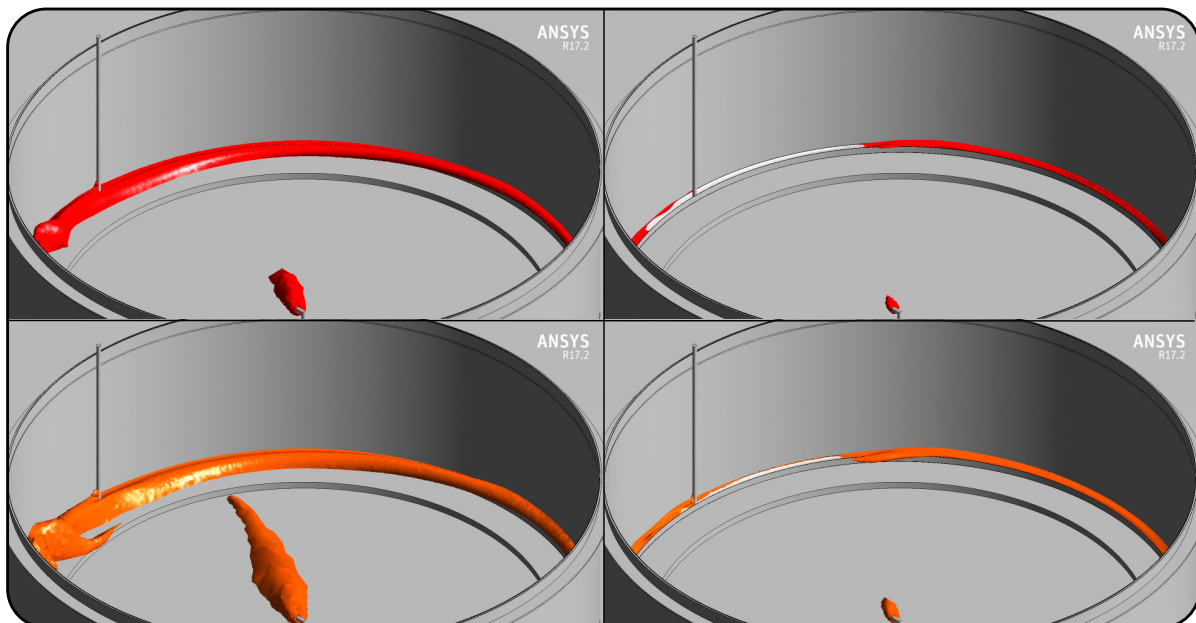


Abbildung 6.14: Illustrationen von Emissionsausbreitungen für Revisionsfreisetzungen. Als Quellstärken wurden 100 kg h^{-1} aus dem Ringspalt und simultan 100 kg h^{-1} aus der Atmungsarmatur angenommen. Im oberen Sammelbild sind die Ausdehnungen der Emissionswolken mit Erreichen der UEG und im unteren Sammelbild mit Erreichen von 50% der UEG angegeben.

6. Anwendungsbeispiel: Explosionsgefährdete Bereiche an Schwimmdachtanks

breitungen dargestellt. Man beachte, dass für das Ausströmen aus der Atmungsarmatur ein zusätzlicher Eingangsvolumenstrom vorliegt.

Wie im Falle der Ausbreitung der Emissionen im Normalbetrieb sind die explosionsgefährdeten Bereiche auf das Dach beschränkt und wenig räumlich ausgeprägt. Die Bildung einer gefährlichen explosionsfähigen Atmosphäre im Auffangbereich und insbesondere im bodennahen Bereich des Auffangbereiches ist sehr unwahrscheinlich und wurden für alle hier durchgeführten Simulationen nicht gefunden. Gründe hierfür sind die rasche Dispersion der flüchtigen organischen Kohlenwasserstoffe und die Tatsache, dass selbst die konservativen Emissionswerte mit Blick auf die Tankdimensionen gering sind.

Geruchswahrnehmungen sind dagegen im Auffangbereich möglich, wie Abbildung 6.15 zeigt.

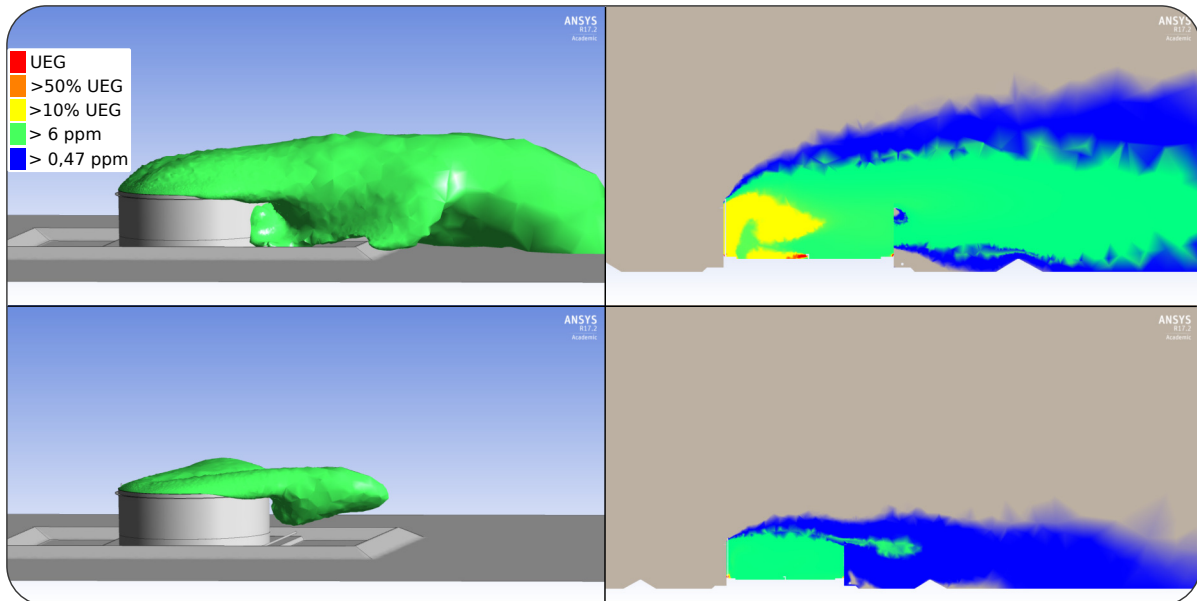


Abbildung 6.15: Illustration der Ausbreitung von Emissionen mit Überschreiten der Geruchsschwelle für Emissionen bei einer Revision. Als Quellstärken wurden 100 kg h^{-1} aus dem Ringspalt und 100 kg h^{-1} aus der Atmungsarmatur angenommen. Windgeschwindigkeit oben: $u = 1 \text{ m s}^{-1}$ unten: $u = 4 \text{ m s}^{-1}$

6.3.5. CFD-Simulation zu Emissionen im Schadenfall

Durch die sehr konservativen Annahmen für die zuvor gezeigten Konzentrationsfelder werden praktisch alle Schäden mit diffusen Emissionen erfasst. Es verbleiben solche Schäden und Ereignisse, die zu einer mehr oder weniger ausgedehnten Lache führen, aus der sich ein Emissionsmassenstrom durch Lachenverdunstung ergibt. Mit den Ergebnissen aus den Verdunstungsmessungen und empirischen Abschätzungen ist bei einer Lache aus einer extrem entzündlichen Flüssigkeit wie z. B. Ottokraftstoff oder Naphtha davon auszugehen, dass der Bereich mit einer explosionsfähigen Atmosphäre die Lache selbst flächenmäßig weit übersteigen kann. Ob hierbei ein Volumen involviert ist, so dass von einer gefährdrohenden Menge ausgegangen werden muss, richtet sich nach der Lachengröße, den Umgebungsbedingungen und nach der Beurteilung des Gegenstandes, auf den eine Bedrohung abzielt. Dies kann hier nicht pauschal beurteilt werden. Daher wurde angenommen, dass jede Freisetzung in den Auffangbereich potentiell kritisch zu sehen ist (vgl. die quantitative Risikoanalyse etwas weiter unten, konservativer Grenzfall).

Als verbleibendes Simulationsproblem wurde hierbei die Frage gestellt, ob eine große Lache auf dem Dach, etwa bei einem Dachuntergang, eine Überschreitung der UEG im Auffangbereich verursachen kann. Daher werden in den folgenden Abbildungen 6.16 bis 6.18 Darstellungen zu

6. Anwendungsbeispiel: Explosionsgefährdete Bereiche an Schwimmdachtanks

Emissionsszenarien gezeigt, bei denen das Schwimmdach untergegangen ist (extremes Szenario). Für die Abbildungen wurden Schnittebenen und Isokonturlinien verwendet. Als Windgeschwindigkeiten wurden erneut $u = 1 \text{ m s}^{-1}$ (links) und $u = 4 \text{ m s}^{-1}$ (rechts) unterschieden.

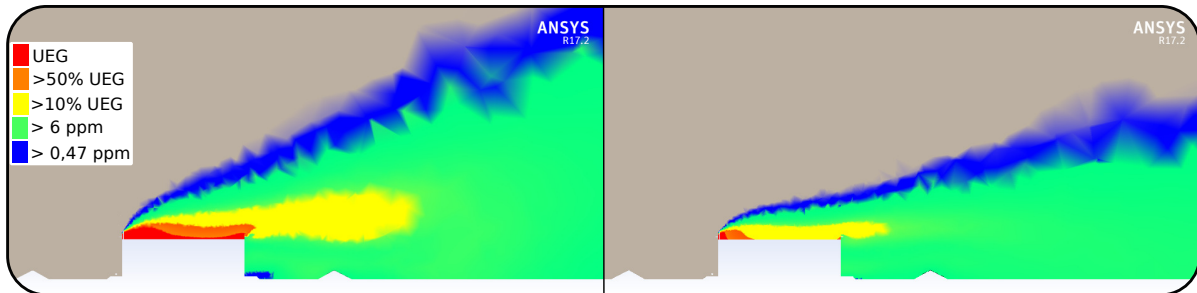


Abbildung 6.16: Illustration der Ausbreitung von Emissionen bei einem Dachuntergang bzw. bei einer vollständigen Flutung des Tankdaches. Als Quellmassenstrom wurde 1 kg s^{-1} angenommen (ANSYS CFX).

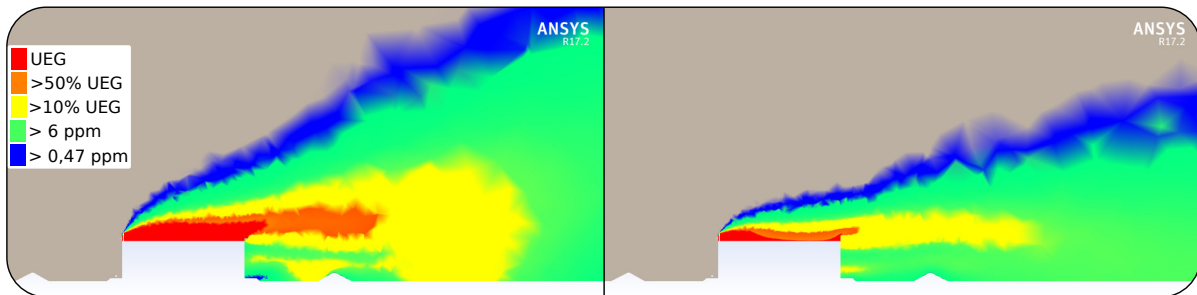


Abbildung 6.17: Illustration der Ausbreitung von Emissionen bei einem Dachuntergang bzw. bei einer vollständigen Flutung des Tankdaches. Als Quellmassenstrom wurde 3 kg s^{-1} angenommen (ANSYS CFX).

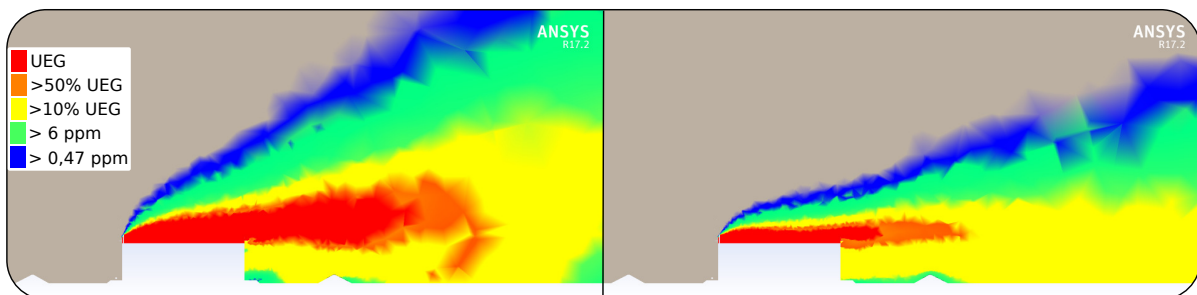


Abbildung 6.18: Illustration der Ausbreitung von Emissionen bei einem Dachuntergang bzw. bei einer vollständigen Flutung des Tankdaches. Als Quellmassenstrom wurde 10 kg s^{-1} angenommen (ANSYS CFX).

Zunächst findet man, dass in jedem Fall der gesamte Dachbereich von einer Emissionswolke oberhalb der UEG eingedeckt ist. Auch für mittlere Lachengrößen bis hinunter zu 25% der Dachfläche (ohne Abbildung) ist der gesamte Dachbereich betroffen. Man findet andererseits allerdings, dass auch bei einem Extremszenario wie bei einem Dachuntergang nicht zwangsläufig eine Überschreitung der UEG im (bodennahen) Auffangbereich vorliegen muss. Die Simulationsergebnisse bestimmt mit OpenFOAM zeigen eine konservativere Einschätzung zu den

Konzentrationsprofilen. Es sind Wetterbedingungen möglich und nicht durch die Simulationen erfasst, aus denen sich ein stärkeres Absinken der Emissionen in den Auffangbereich ergeben könnte. Daher wurde hier geschlussfolgert, Dachuntergänge und große Lachen als potentielle Ursachen für Überschreitungen der UEG, auch im Auffangbereich, anzusehen.

6.4. Quantitative Risikoanalyse mit Bayesschen Netzen

Im Kapitel 3 wurden die Grundlagen zu Bayesschen Netzen und die Art der Berücksichtigung von Unsicherheiten angegeben. In diesem Abschnitt werden die Anwendungen auf das Forschungsproblem dargestellt.

Zunächst wird in Abbildung 6.19 ein kleiner Auszug des Netzes zusammen mit der für diesen Teilbereich relevanten Transfermatrix gezeigt. Stellvertretend für die anderen Transfermatrizen, soll an diesem Beispiel erklärt werden, wie die bedingten Wahrscheinlichkeiten im Netz festzulegen und zu integrieren sind. Die Entscheidungen wurden zusammen mit Experten getroffen oder sie sind Konsequenzen aus den Gesprächsauswertungen. Der Wert $P(R_1|T_1, S_1, P_1)$ ist die bedingte Wahrscheinlichkeit für einen hohen Schaden an der Ringspaltabdichtung unter der Bedingung, dass alle Dichtungsränge (Tertiärdichtungsschaden T_1 , Sekundärdichtungsschaden S_1 und Primärdichtungsschaden P_1) beschädigt sind. Dieser Wert wurde zu 0,10 gewählt, weil nur wenige kombinierte Schäden zu einem emissionsrelevanten Schaden an der Ringspaltabdichtung führen werden. Üblicherweise sind nach ungefähr 10-15 Jahren alle Dichtungsränge gealtert und in Teilen beschädigt, so dass ein Tausch erfolgt. Hier wurde angenommen, dass nur in jedem zehnten Fall ein emissionsrelevanter gemeinsamer Schaden vorliegt. Die bedingte Wahrscheinlichkeit für einen mittleren Schaden an der Ringspaltabdichtung $P(R_2|T_1, S_1, P_1) = 0,20$ wurde als doppelt so hoch angenommen, womit für $P(R_3|T_1, S_1, P_1) = 0,70$ folgt.

Nimmt man nun an, dass die Tertiärdichtung, im Gegensatz zu den anderen Dichtungsrängen, unbeschädigt ist, so sinkt das Vertrauen in einen hohen Ringspaltabdichtungsschaden. Dies wurde angenommen, weil eine funktionierende Tertiärdichtung Emissionen zurückhält, weswegen $P(R_1|T_2, S_1, P_1) = 0,08$ gewählt wurde. Erneut wurde für einen mittleren Schaden an der Ringspaltabdichtung der doppelte Wert $P(R_2|T_2, S_1, P_1) = 0,16$ angenommen, womit $P(R_3|T_2, S_1, P_1) = 0,76$ folgt.

Ist nur die Sekundärdichtung unbeschädigt, so wird das Vertrauen in einen hohen Gesamtdichtungsschaden wiederum etwas sinken, da im Gegensatz zur Tertiärdichtung die Sekundärdichtung als geringfügig effizienter angesetzt wird, womit $P(R_1|T_1, S_2, P_1) = 0,06$, $P(R_2|T_1, S_2, P_1) = 0,12$ und $P(R_3|T_2, S_2, P_1) = 0,82$ folgen. Ein wiederum etwas kleinerer Wert für das Vertrauen in einen hohen Gesamtdichtungsschaden wurde für einen alleinigen Primärdichtungsschaden angesetzt mit $P(R_1|T_1, S_1, P_2) = 0,05$, weil eine funktionierende Primärdichtung üblicherweise kritische Emissionen verhindert.

Der Wert wurde allerdings nicht zu Null gewählt, weil mit den Schäden immer noch die Möglichkeit eines verkanteten Daches verbleibt. Die bedingte Wahrscheinlichkeit für einen mittleren Schaden wurde dreimal so hoch bewertet $p(R_2|T_1, S_1, P_2) = 0,15$, womit $P(R_3|T_1, S_1, P_2) = 0,80$ verbleibt.

Sind zwei Dichtungsränge unbeschädigt, so sinkt das Vertrauen in einen hohen Gesamtdichtungsschaden erneut ab. Grundsätzlich wurde hierbei angenommen, dass eine Primärdichtung effektiver als eine reine Sekundärdichtung und diese wiederum etwas effektiver als eine reine Tertiärdichtung ist. Daher wurden $P(R_1|T_2, S_2, P_1) = 0,04$ und $P(R_1|T_2, S_1, P_2) = 0,02$ gewählt. Wie zuvor wurde für das Vertrauen in einen mittleren Gesamtdichtungsschaden der dreifache Wert $P(R_2|T_2, S_2, P_1) = 0,12$ und $P(R_2|T_2, S_1, P_2) = 0,06$ angenommen, womit $P(R_3|T_2, S_2, P_1) = 0,84$ and $P(R_3|T_2, S_1, P_2) = 0,92$ folgen. Für einen alleinigen Schaden der Tertiärdichtung und für den Fall, dass alle Dichtungsränge unbeschädigt sind, wurde $P(R_1|T_1, S_2, P_2) = 0,00$ und $P(R_1|T_2, S_2, P_2) = 0,00$ angenommen. Nur für das Vertrauen in einen mittleren Schaden wurde ein Unterschied spezifiziert mit $P(R_2|T_1, S_2, P_2) = 0,05$ und

6. Anwendungsbeispiel: Explosionsgefährdete Bereiche an Schwimmdachtanks

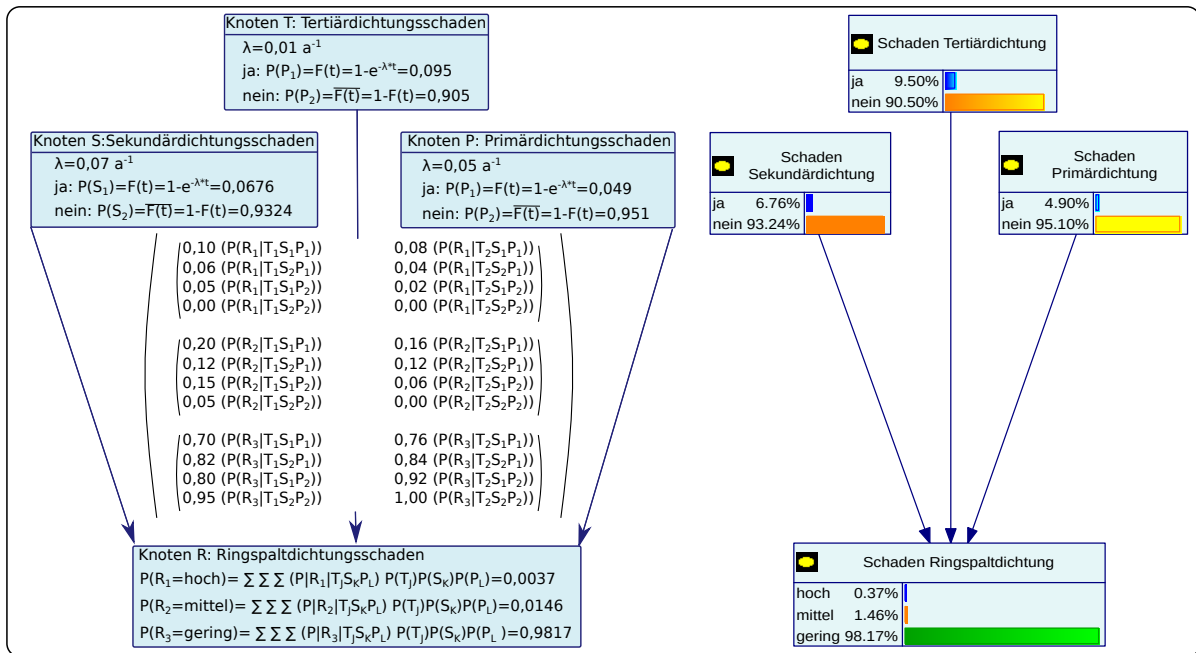


Abbildung 6.19: Illustration eines Netzauszuges mit vier verbundenen Knoten. Die Hypothesen und die angegebene Datengrundlage sollen das Grundprinzip illustrieren. Für die Berechnung der Ausfallwahrscheinlichkeiten $F(t)$ wurde eine Exponentialverteilung angenommen.

$P(R_2|T_2, S_2, P_2) = 0,00$, weil ein Schaden an der Tertiärdichtung nicht ohne Konsequenz bleiben muss. Damit folgen $P(R_3|T_1, S_2, P_2) = 0,95$ und $P(R_3|T_2, S_2, P_2) = 1,00$ als die noch fehlenden bedingten Wahrscheinlichkeiten. Eine ähnliche Vorgehensweise wurde zur Spezifikation der Transfermatrizen zwischen den anderen Knoten verwendet. Im Falle von Uneinigkeit zwischen den Experten oder innerhalb der Aufzeichnungen, wurde eine Wichtung und Mittelwertbildung vorgenommen (siehe Kapitel 3).

6.4.1. Konstruktion des Bayesschen Netzes für Schwimmdachtanks

Hier wird erläutert, welche Ereignisse für die Untersuchung von erhöhten oder kritischen Emissionen kausal miteinander verkettet und welche Annahmen für die Spezifizierung der Transfermatrizen mit den bedingten Wahrscheinlichkeiten getroffen wurden. Als Ergebnis wurde ein BN mit 38 Knoten (12 Wurzelknoten), 48 Kanten und 79 Hypothesen aufgestellt. Das Softwarepaket GeNIe [92] wurde zur Initialisierung, zur Einstellung von Evidenzen und zur Visualisierung verwendet. Aufgrund der Größe des Netzwerks wird es in Auszügen vorgestellt und diskutiert. Eine Darstellung des gesamten Netzwerks ist in Abbildung 6.23 zu sehen.

Es wurde zudem immer angenommen, dass zwischen den Zufallsvariablen eine kausale Beziehung besteht und es sich nicht nur um korrelierte Größen handelt. Dies kann damit untermauert werden, dass die Experten für die Modellbildung nach Ursache-Wirkungs-Mechanismen befragt wurden. Zudem sind viele Größen auch anschaulich proportional zueinander: Je größer der Dichtungsschaden bzw. die Lache, je größer die Emission. Die Kausalitäten könnte in vielen Fällen auch experimentell (am Modell) verifiziert werden.

6.4.2. Zielknoten und Zielhypothesen

Wesentliches Ziel der quantitativen Risikoanalyse soll eine Einschätzung darüber sein, mit welcher Häufigkeit eine erhöhte oder gar kritische Emission vom Schwimmdachtank ausgehen kann. Eine erhöhte Emission kann hierbei ebenso als ein deutlicher Hinweis auf einen Schaden oder

einer Abweichung vom Normalbetrieb angesehen werden, selbst wenn die Emissionshöhe für eine kritische Emission nicht hinreichend ist.

Es sei hier noch einmal angegeben, dass eine Emission als kritisch erachtet wird, wenn es sehr wahrscheinlich ist, dass die untere Explosionsgrenze (UEG) in gefahrdrohenden Mengen erreicht oder gar überschritten wird.

Den Knoten *Erhöhte Emission* und *Kritische Emission* wurden gleichlautende Vorgängerknoten zugeordnet, allerdings wurde zusätzlich eine Unterscheidung zwischen dem Dach- und dem Auffangbereich vorgenommen. Dies wurde als Folge der CFD-Simulationen entschieden, da Emissionen, die zu kritischen Konzentrationen auf dem Dach führen, nicht unbedingt eine kritische Konzentration im Auffangbereich verursachen. Dies ist besonders interessant, da nach den CFD-Simulationen nur ausgeprägte Lachen auf dem Dach, Dachuntergänge oder Überfüllungen Ereignisse sind, die vom Dachbereich ausgehen und zu einer Gefährdung im Auffangbereich führen. Diese Ereignisse sind jedoch alle sehr selten.

Die Gesamtwahrscheinlichkeit beträgt 0,06 Prozent pro Jahr, was einer Schadenrate von etwa einmal alle 1700 Jahre und Tank entspricht. Dies stimmt zudem gut mit der Expertenschätzung überein.

In der Abbildung 6.20 sind die Zielknoten und deren unmittelbare Vorgänger nach der Initialisierung abgebildet. Die Stärke der Pfeile illustriert das Maß der kausalen Korrelation.

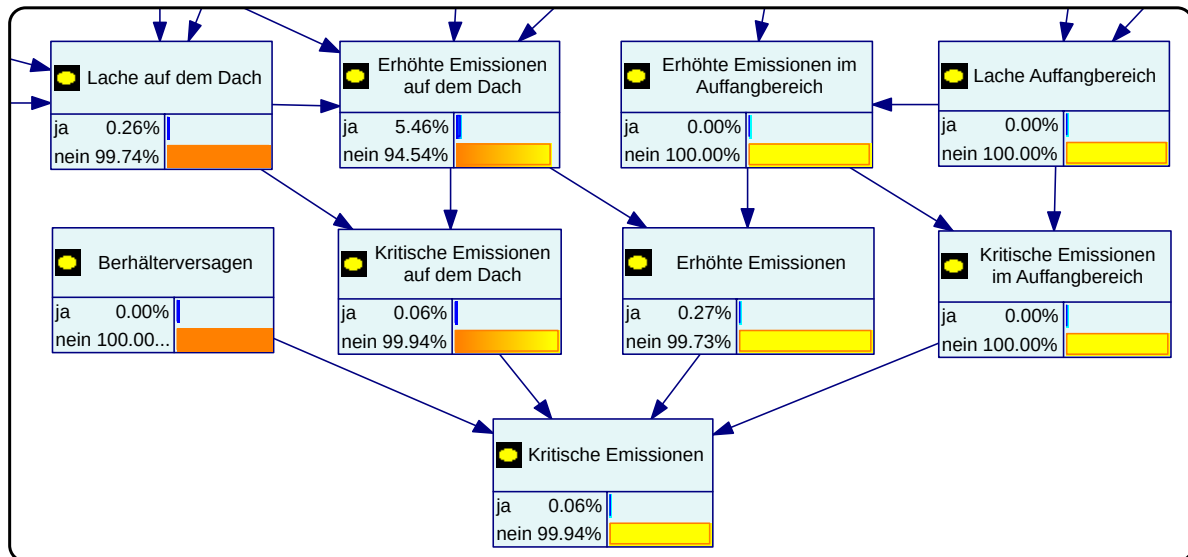


Abbildung 6.20: Darstellung der Zielknoten (*Erhöhte Emission* und *Kritische Emission*) sowie der unmittelbaren Vorgängerknoten.

6.4.3. Einfluss der Lachenbildung auf die Zielknoten

Die Bildung von freien Flüssigkeitsoberflächen ist eine Hauptursache von kritischen, aber auch grundsätzlich von erhöhten Emissionen. In Abbildung 6.21 (oben) sind Ereignisketten dargestellt, die zu Lachen im Auffangbereich führen können. Die dafür angegebenen Knoten sind alle Wurzelknoten, welche mit den in der Tabelle 6.1 angegebenen a priori Wahrscheinlichkeiten initialisiert wurden. Die Daten sind hierbei als Ereignisraten je Jahr und Tank zu verstehen. Es wurde dabei konservativer Weise angenommen, dass jedes Ereignis, das zu einer direkten Freisetzung in den Auffangbereich führt, immer auch eine kritische Emission (und damit auch erhöhte Emission) nach sich zieht.

Im linken Teil der Abbildung 6.21 sind Ereignisketten gezeigt, die zu einer Lache auf dem Schwimmdach führen können.

Diese sind von Schäden an Dachdurchführungen und Dichtungen, von Wetterbedingungen aber auch von Nutzungsparametern wie Tankumschlagszahlen abhängig. Über den Einbezug der Größe des Tanks wurde berücksichtigt, dass die Anzahl verschiedener Dachdurchführungen vom Durchmesser abhängig ist, etwa z. B. die Anzahl der Tankdachstützen.

Ebenso hier wurden die Wurzelknoten mit den in der Tabelle 6.1 angegebenen a priori Wahrscheinlichkeiten initialisiert. Zusammen mit dem Expertenwissen wurden die Transfermatrizen so spezifiziert, dass diese einerseits plausibel erscheinen und andererseits den richtigen Erwartungswert für die beobachteten Lachenhäufigkeiten wiedergeben. Die absoluten Unsicherheiten über die Ereignisse setzen sich zwar im Netzwerk fort, allerdings bleibt dennoch ein Informationsgewinn durch die Veranschaulichung der relativen Beiträge einzelner Bereiche des Netzwerks zur Gesamtwahrscheinlichkeit. Hierbei ist auch zu beachten, dass nur wenige Lachen (je nach Lachengröße und Temperatur) auf dem Dach ausreichen, um eine kritische Emission auszulösen. Interessanterweise ist die Gesamtwahrscheinlichkeit für die Lachenbildung im Auffangbereich

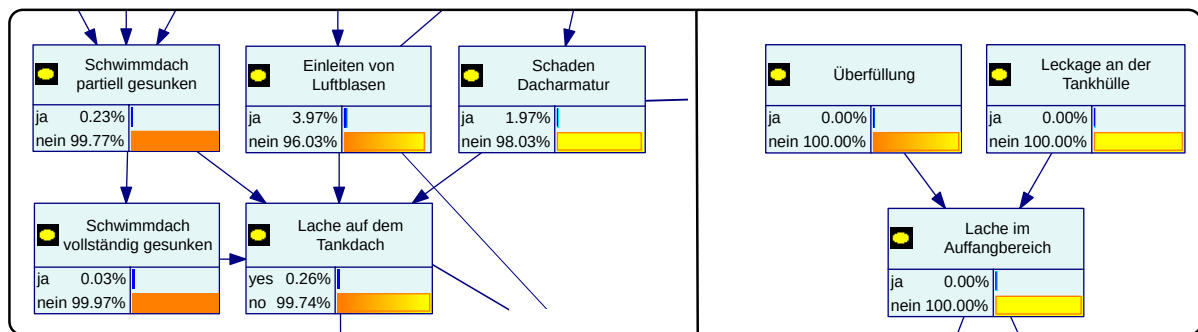


Abbildung 6.21: Darstellung der Knoten und kausalen Abhängigkeiten für Lachenbildung auf dem Schwimmdach.

deutlich kleiner als für die Lachenbildung auf dem Dach. Dies ist etwas im Widerspruch zu den Literaturdaten, wo die Gesamtwahrscheinlichkeit für die Lachenbildung im Auffangbereich in etwa von gleicher Größenordnung ist. Allerdings sind lachenauslösende Ereignisse im Auffangbereich allesamt sehr selten, so dass höhere Zahlenwerte hier nicht plausibilisiert werden konnten. Dies bleibt auch bestehen, wenn die Einflüsse aus den Knoten *Behälterversagen* und *Leckage (Rohrleitung)* mit berücksichtigt werden.

6.4.4. Einfluss von Schäden an Ringspaldichtung und von Betriebsparametern

Einfluss auf erhöhte Emissionen haben verschiedene Schäden bzw. Schadenskombinationen an der Ringspaldichtung. Auch eine erhöhte Lagerstoffflüchtigkeit durch erhöhte Produkttemperaturen oder gar durch Einleitung eines falschen Produktes kann erhöhte Emissionen am Ringspalt nach sich ziehen. Die hierfür im Bayesschen Netz berücksichtigten kausalen Abhängigkeiten sind in Abbildung 6.22 gezeigt.

Insgesamt sind erhöhte Emissionen an der Ringspaldichtung nicht so selten. Eine Schätzung der Größenordnung ergibt einmal alle zehn Jahre pro Tank.

6.4.5. Auswertung des Bayesschen Netzes für Schwimmdachtanks

Mit den Ergebnissen der CFD-Simulationen wurde deutlich, dass nur Ereignisse wie partieller oder vollständiger Dachuntergang, eine sehr große Lache auf dem Dach oder im Auffangbereich, größere Undichtigkeiten oder Tanküberfüllung hinreichend für kritische Emissionen sind. Nach der Initialisierung des Bayesschen Netzes beträgt das erwartete Gesamtvertrauen für dieses Ereignis einmal in ungefähr 1700 Jahren pro Tank. Auch wenn bereits angedeutet wurde, dass

6. Anwendungsbeispiel: Explosionsgefährdete Bereiche an Schwimmdachtanks

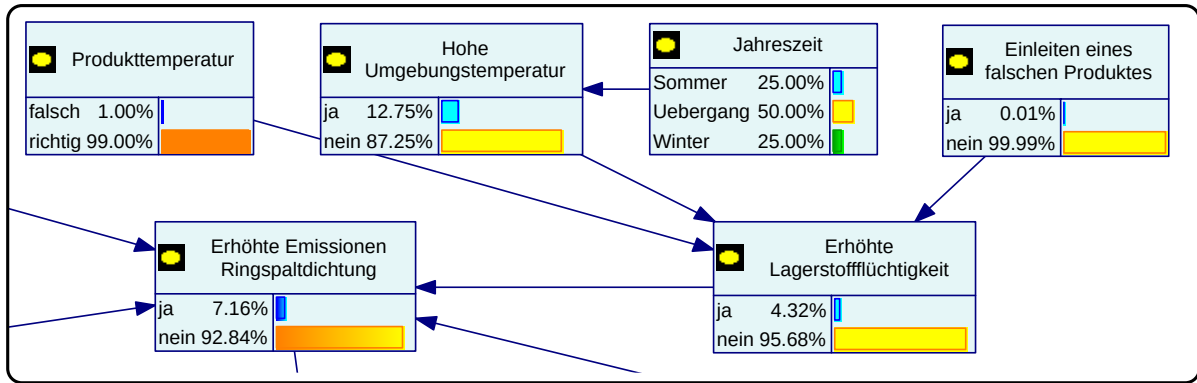


Abbildung 6.22: Illustration der Knoten und der kausalen Abhängigkeiten für erhöhte Emissionen als Folge von zu hohen Produkt- bzw. Umgebungstemperaturen oder durch Einleitung eines falschen Produktes.

bezüglich zahlreicher a priori und bedingter Wahrscheinlichkeiten hohe Unsicherheiten bestehen, so kann dieses Ergebnis dennoch als konservative Schätzung aufgefasst werden. Moderate Modifikationen in den eingegebenen bedingten Wahrscheinlichkeiten modifizieren die Wahrscheinlichkeiten für die Zielgrößen nur unbedeutend, so dass die Zielgrößen hinreichend stabil sind.

Mit auf dem Markt verfügbaren Schwimmdachüberwachungssystemen ist eine permanente Überwachung der Dachposition möglich. Die Wirkung eines solchen Systems wurde getestet (ohne Abbildung) unter der Annahme, dass immer nach einer Warnung durch das System eine Maßnahme zur Verhinderung eines teilweisen oder vollständigen Einsinkens des Daches möglich ist. Dadurch ist die Wahrscheinlichkeit für eine Lachenbildung durch teilweises oder vollständiges Dacheinsinken effektiv null. Dies ist zugleich der Idealfall eines perfekt funktionierenden Systems. Das Vertrauen in eine kritische Emission ändert sich auf etwa einmal in 2500 Jahren pro Tank.

Im Folgenden sollen verschiedene Evidenzen eingestellt und deren Konsequenzen untersucht werden. Zunächst findet man erwartungsgemäß einen vernachlässigbaren Einfluss des Vorhandenseins einer Tertiärdichtung auf das Emissionsverhalten (ohne Abbildung). Stellt man hier eine entsprechende Evidenz ein, so ändern sich die Vertrauenswerte an den Zielknoten *Erhöhte Emission* und *Kritische Emission* nicht innerhalb der angegebenen (sinnvollen) Stellenanzeigen. Dies ist auch bei der Annahme eines hohen Sekundärdichtungsschadens der Fall, was mit Blick auf die eingestellten bedingten Wahrscheinlichkeiten auch nicht überraschend ist.

Es sei hier noch einmal darauf verwiesen, dass die eingestellten bedingten Wahrscheinlichkeiten ihren Ursprung in den durchgeführten Emissionsabschätzungen bzw. CFD-Simulationen haben, aus denen sich praktisch keine Emissionshöhe ergeben hat, die in eine kritische Emission münden kann.

Die Simulationsergebnisse hatten Konzentrationsprofile in der Nähe der UEG nur in einem sehr kleinen schlauchartigen Bereich in der Nähe der Ringspalttdichtung gezeigt, wenn sogar ein Kompletterverlust der Tertiär- und der Sekundärdichtung, zusammen mit den konservativ abgeschätzten Dampfdrücken des Lagerstoffes vorlagen. In diesem Sinne genügt eine ordnungsgemäß funktionierende Primärdichtung zur Verhinderung ausgedehnter explosionsgefährdeter Bereiche.

Der Emissionsmassenstrom für den Fall eines Totalschadens aller Dichtungsringe konnte weiter oben im Kapitel nicht präzise bestimmt werden. Allerdings dürften die sehr konservativen Quellmassenströme der CFD-Simulationen praktisch alle Ereignisse gemeinsamer Dichtungsschäden mit abdecken. Das Netz zeigt daher beim Setzen der Evidenzen für den Fall, dass alle Dichtungsringe beschädigt sind, nur geringfügige Änderungen in den Zielknoten. Eine Illustration

tion zeigt die Abbildung 6.24. Ein möglicher Einflusspfad für diesen Fall ist gegeben durch die Möglichkeit eines verkanteten Daches, so dass partieller oder vollständiger Dachuntergang im Vorliegen von hohen Dichtungsschäden etwas wahrscheinlicher wird.

Erwartungsgemäß führt eine Leckage am Tankmantel oder an einer Rohrleitung im Auffangbereich sofort zu einem sehr hohen Vertrauen in eine erhöhte und kritische Emission. Gleiches gilt für den Fall einer Tanküberfüllung. Dies ist klar, da die Transfermatrizen entsprechend konservativ spezifiziert wurden. Die Beiträge dieser Pfade zu den Zielknoten sind jedoch gering, da die Wahrscheinlichkeiten für diese Ereignisse gering sind.

Ein interessanter Fall ergibt sich bei gleichzeitigem Setzen von Evidenzen an den Knoten *Erhöhte Emission* (liegt vor) und *Erhöhte Emission im Auffangbereich* (liegt nicht vor). Eine Abbildung des BN nach dem Festlegen dieser Evidenzen ist in Abbildung 6.25 dargestellt. Zunächst erkennt man, dass das Vertrauen in das Vorhandensein einer *Erhöhten Emission vom Dach* sicher ist. Ein signifikanter Anstieg auf 93% zeigt sich auch im Vertrauen auf eine erhöhte Emission aus der Ringspaltichtung aufgrund von Luftblasen und einer erhöhten Flüchtigkeit des Lagerstoffes aufgrund falscher Umgebungstemperatur.

Stellt man versuchsweise eine Evidenz auf *Kritische Emission* ein, zeigt das Netzwerk einen deutlichen Anstieg der Wahrscheinlichkeit, dass sich die Emissionsquelle hauptsächlich aufgrund von Lachen auf dem Dach befindet. Unter der Annahme, dass das Dach nicht gesunken ist, gibt das BN dennoch das Dach als wahrscheinlichste Emissionsquelle an. Nun sind jedoch die Einleitung von Luft und erhöhte Temperaturen die Ursachen. Nur wenn man explizit nachweist, dass der Ursprung der Emissionen nicht das Dach ist, wird die Ursache höchstwahrscheinlich durch Überfüllung angezeigt (die letzten drei Aussagen sind ohne Illustration).

Im Rahmen der Expertenbefragung und auch anhand des Fragebogens wurde keine Bewertung der Datenunsicherheit angefordert. Daher wurden hier keine Unsicherheiten explizit untersucht. In diesem Sinne liefern die Aussagen des Netzes nur eine erste Schätzung der Wahrscheinlichkeit kritischer Emissionen.

6. Anwendungsbeispiel: Explosionsgefährdete Bereiche an Schwimmdachtanks

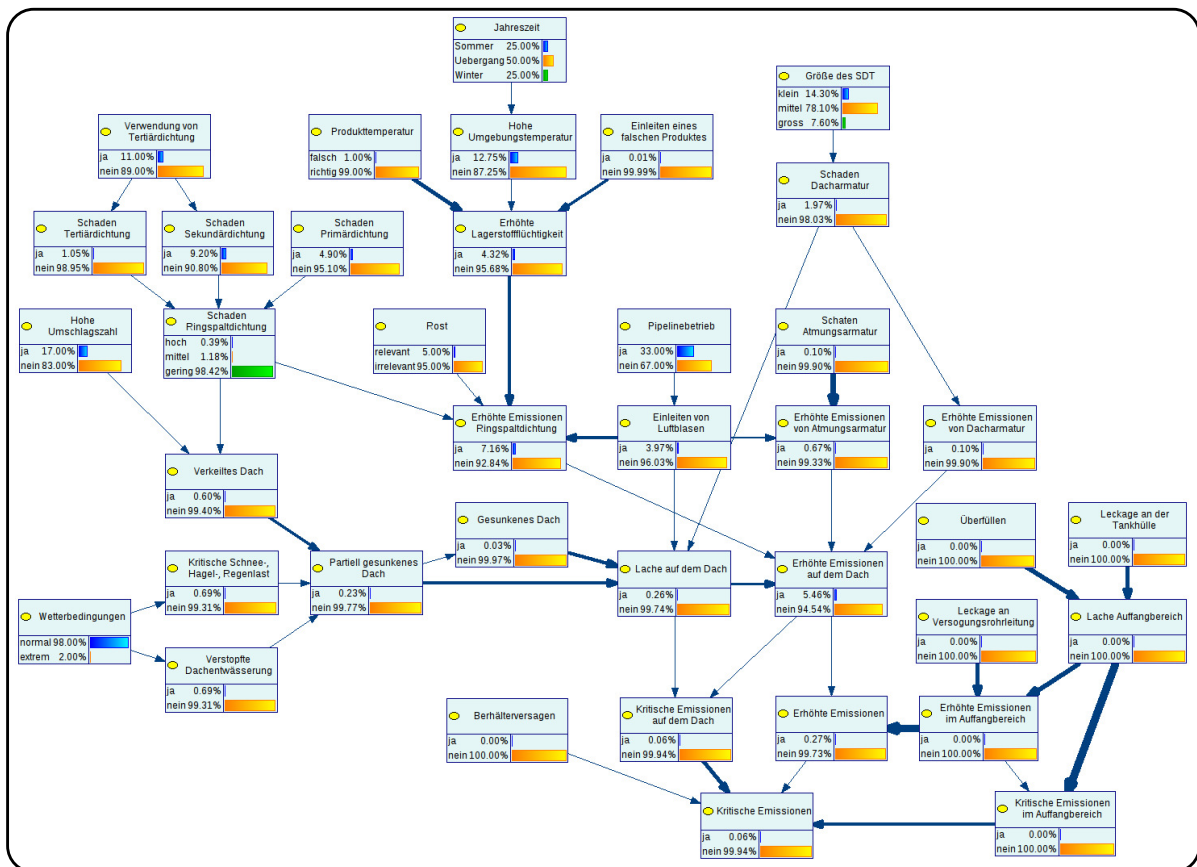


Abbildung 6.23: Darstellung des Bayesschen Netzes für die Untersuchung von Emissionen ausgehend von Schwimmdachtanks nach der Initialisierung.

6. Anwendungsbeispiel: Explosionsgefährdete Bereiche an Schwimmdachtanks

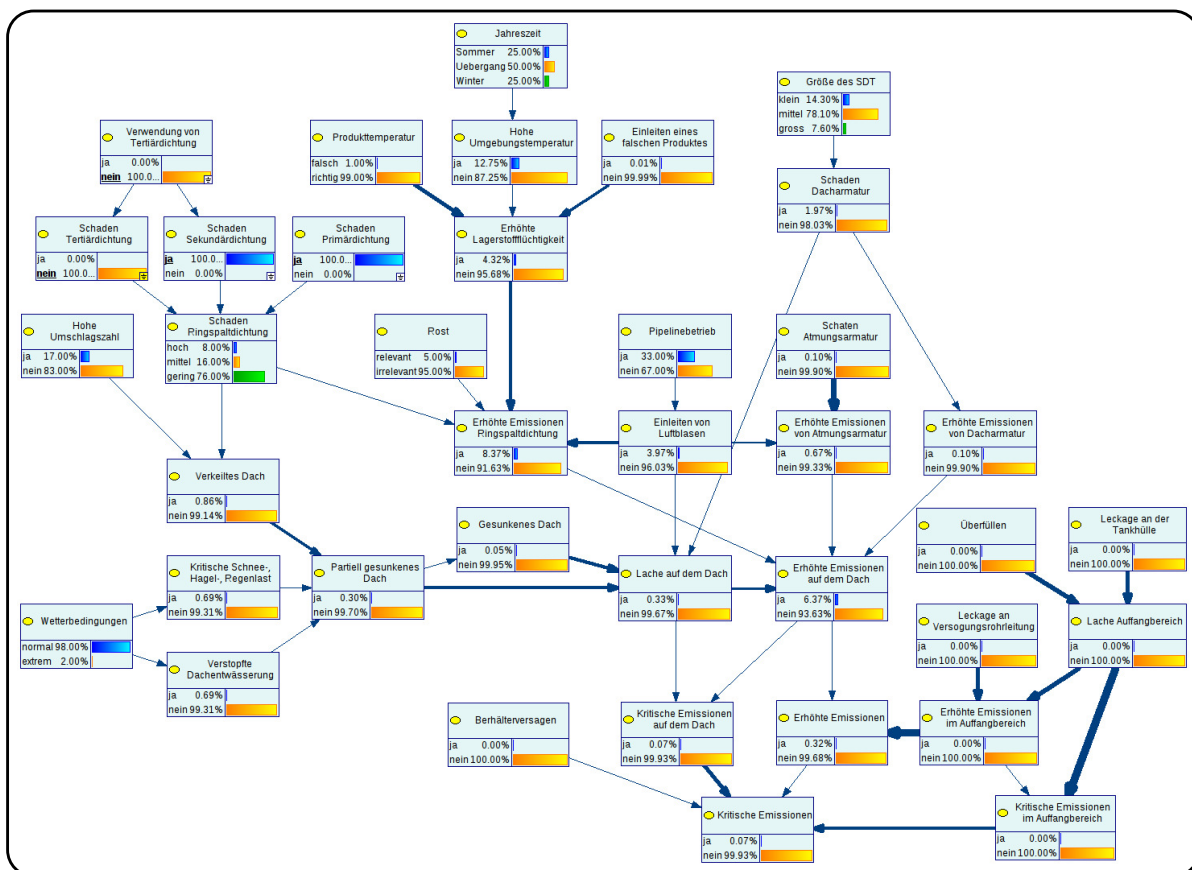


Abbildung 6.24: Darstellung des Bayesschen Netzes für die Untersuchung von Emissionen ausgehend von Schwimmdachtanks ohne Tertiärdichtung und der Berücksichtigung eines Sekundär- und Primärdichtungsschadens.

6. Anwendungsbeispiel: Explosionsgefährdete Bereiche an Schwimmdachtanks

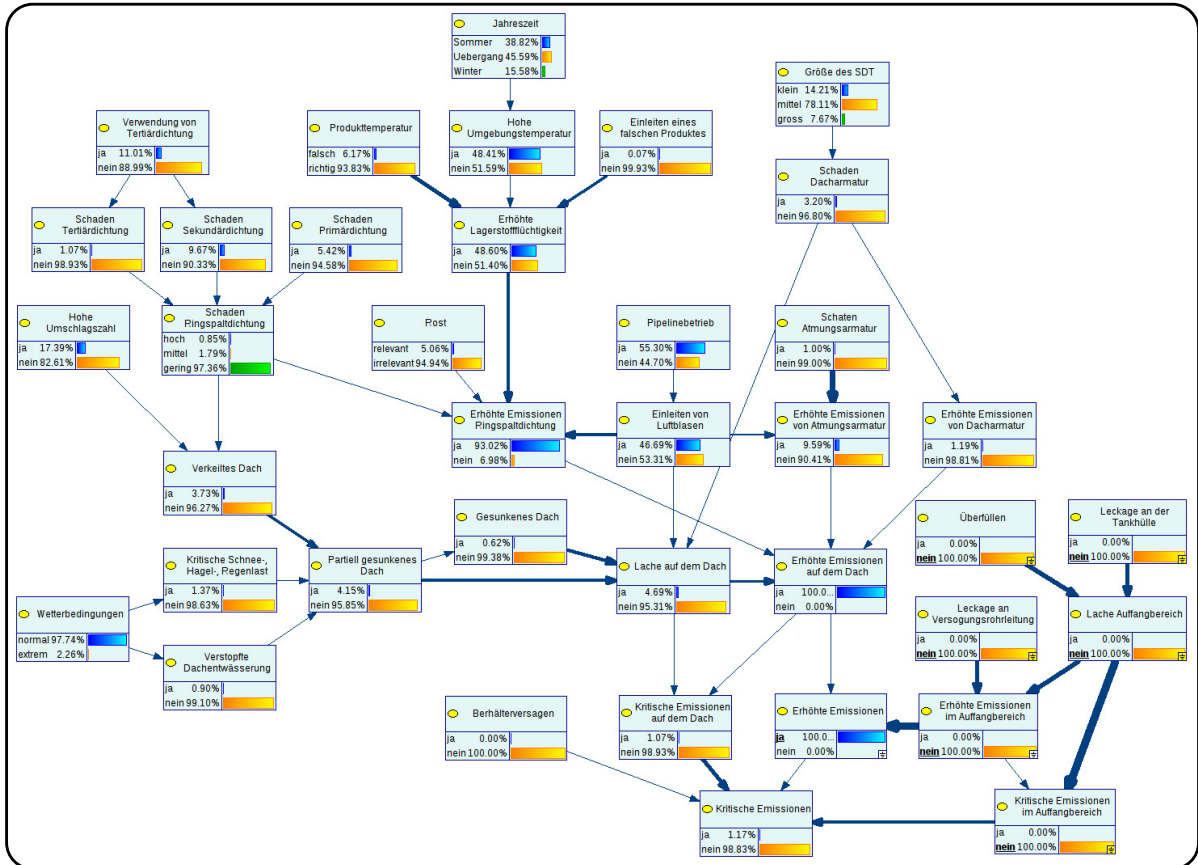


Abbildung 6.25: Darstellung des Bayesschen Netzes für die Untersuchung von Emissionen ausgehend von Schwimmdachtanks nach dem Setzen gleichzeitiger Evidenzen bei den Knoten *Erhöhte Emission* (ja) und *Erhöhte Emission im Auffangbereich* (nein).

7. Zusammenfassung

Zentrales Anliegen dieser Habilitationsschrift sowie auch dessen Hauptziel war das Aufzeigen der Notwendigkeit und der Implementierung von Möglichkeiten zur umfassenden Berücksichtigung von Unsicherheiten in quantitativen Risikoanalysen und in den hierfür notwendigen Untermodellen. Für die hier betrachteten Risikoanalysen waren dies Freisetzungs- und Ausbreitungssimulationen zur Beschreibung von Quelltermen und zur Abschätzung der Größe der durch die Freisetzung betroffenen Gebiete sowie das Verfahren zur quantitativen Risikoanalyse selbst: Bayessche Netze. Die verwendeten Verfahren entsprechen dem Stand der Forschung und sind somit oberhalb des Standes der Technik in Deutschland angesiedelt. Sie wurden aktuellen Veröffentlichungen entnommen und an verschiedenen Stellen erweitert bzw. erstmalig in der präsentierten Form praktisch angewendet.

In der Einleitung und im Kapitel 2 wurde ausführlich diskutiert, dass durch den gegenwärtigen Stand der Technik bei Risikoanalysen verfügbares Wissen ungenutzt bleibt, ebenso Chancen für dessen Erweiterung, was in der Summe nicht selten dazu führt, dass suboptimal oder pauschalisiert entschieden wird. Insbesondere durch die Beschränkung auf qualitative Risikoanalysen können keine Aussagen zu Sicherheitstoleranzen und Unsicherheiten getroffen werden.

Da insbesondere sicherheitsrelevante Systeme sowie auch sicherheitsgerichtete organisatorische Maßnahmen üblicherweise nicht auf einen Punkt, sondern in einem Wirkungsbereich ausgelegt werden, fehlen oftmals notwendige Abschätzungen. Diese sind nur mit einem hierfür ausgelegten quantitativen Verfahren zu bestimmen, wenn zusätzlich die hierfür erforderliche Datengrundlage gegeben ist.

Die umfassende Mitberücksichtigung von Parameter- oder Modellunsicherheiten setzt sich üblicherweise ebenso in die Untermodelle fort.

Die Hinzunahme von letzteren erfordert jedoch die Auswahl von Verfahren, welche mit unsicherheitsbehafteten Daten bzw. Informationen aussagefähig bleiben bzw. unsicherheitsbehaftetes Wissen verarbeiten können oder eine Strategie zur Fehlerfortpflanzung.

In Kapitel 3 wurden Bayessche Netze als ein Verfahren der quantitativen Risikoanalyse vorgestellt, welches sowohl bei Datenunsicherheiten als auch bei partieller Systemunkenntnis als probabilistisches Expertensystem Entscheidungsfindungsprozesse optimal stützen kann. Dieses Verfahren wurde mit alternativen Verfahren der quantitativen Risikoanalyse wie etwa der Fehlerbaumanalyse unter Hervorhebung der Vorteile verglichen. Mittels einer Kombination von Techniken zur kausalen Inferenz und der Fuzzy-Logik gelang auch eine Berücksichtigung von Toleranzen bzw. Datenunsicherheiten.

Im Kapitel 4 wurde dargelegt, dass für Störfallfreisetzungen gegenwärtig fast ausschließlich empirische Modelle verwendet werden, obwohl CFD-Simulationen potentiell eine merklich höhere Aussagequalität und Genauigkeit aufweisen. Der Gewinn an Genauigkeit ist allerdings nur plausibel belegbar, wenn zusätzlich zur Mitberücksichtigung weiterer Einflussparameter auch deren Toleranzen in die Simulation einbezogen werden. Eine direkte Fehlerfortpflanzung ist jedoch nicht möglich, weswegen überwiegend ausgewählte Einzelszenarien simuliert werden.

In dieser Arbeit wurde gezeigt, dass die durch eine CFD-Simulation gegebene Zuordnung zwischen Eingangs- und Zielgrößen alternativ durch eine algebraische Zuordnung modelliert werden kann. Diese als Response-Surface-Methoden bezeichneten Techniken wurden in Kapitel 5 erstmalig auf nichttriviale Ausbreitungssimulationen angewendet und es wurde demonstriert, wie durch Kopplung mit geeigneten Samplingverfahren Wahrscheinlichkeitsverteilungen der unsicheren Parameter berücksichtigt werden können.

7. Zusammenfassung

Eine Demonstration der Verfahren zur Lösung eines aktuellen Industrieproblems wurde in Kapitel 6 gegeben. Von der Industrie wurde das Problem herangetragen, ob zur Reduzierung von Risiken im Explosionsschutz an bestehenden Schwimmdachtanks eine Hinzunahme weiterer Blitzfangeinrichtungen erforderlich ist. Es konnte durch eine Kombination aus quantitativer Risikoanalyse und zahlreicher CFD-Ausbreitungssimulationen gezeigt werden, dass die Entstehungswahrscheinlichkeit für eine gefährliche explosionsfähige Atmosphäre zu gering ist, als dass diese Erweiterung zweckmäßig erscheint. In der Einleitung wurde zudem vom Autor der Wunsch geäußert, mit dieser Arbeit zu zeigen, dass ein Schritt in die Richtung des Überganges von qualitativen zu quantitativen Risikoanalysen ein großer Vorteil sein kann. Hoffentlich ist dies gelungen!

Literaturverzeichnis

- [1] WIKIPEDIA: *Risiko* — *Wikipedia, Die freie Enzyklopädie*. <https://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Risiko&oldid=202890511>. Version: 2020. – [Online; Stand 9. September 2020]
- [2] *DIN ISO 31000:2018-10, Risikomanagement - Leitlinien (ISO 31000:2018)*
- [3] FRANKS, A. ; WHITEHEAD, R. ; CROSTHWAITE, P. ; SMAIL, L.: *Application of QRA in operational safety issues, Research Report 025*. Health and Safety Executive, 2002. – ISBN 0-7176-2570-2
- [4] *DIN EN 31010:2010-11, Risikomanagement - Verfahren zur Risikobeurteilung (IEC/ISO 31010:2009)*. 2010-11
- [5] *DIN 25424-1:1981-09, Fehlerbaumanalyse; Methode und Bildzeichen*
- [6] *DIN 25424-2:1990-04, Fehlerbaumanalyse; Handrechenverfahren zur Auswertung eines Fehlerbaumes*
- [7] *DIN EN 62502 VDE 0050-3:2011-06, Verfahren zur Analyse der Zuverlässigkeit - Ereignisbaumanalyse (ETA) (IEC 62502:2010)*. 2011-06
- [8] *DIN EN 60812:2015-08, Fehlzustandsart- und -auswirkungsanalyse_(FMEA) (IEC_56/1579/CD:2014)*
- [9] *DIN EN 61882:2017-02; VDE 0050-8:2017-02, HAZOP-Verfahren (HAZOP-Studien) - Anwendungsleitfaden (IEC 61882:2016)*. 2017-02
- [10] *DIN EN 61511-3:2019-02; VDE 0810-3:2019-02, Funktionale Sicherheit - PLT-Sicherheitseinrichtungen für die Prozessindustrie - Teil 3: Anleitung für die Bestimmung der erforderlichen Sicherheits-Integritätslevel (IEC 61511-3:2016); Deutsche Fassung EN 61511-3:2017*. 2013-01
- [11] *DIN ISO/TR 14121-2:2013-02; DIN SPEC 33885:2013-02;; DIN SPEC 33885:2013-02, Sicherheit von Maschinen - Risikobeurteilung - Teil 2: Praktischer Leitfaden und Verfahrensbeispiele (ISO/TR_14121-2:2012)*
- [12] DIEDERICHS, Marc: *Risikomanagement und Risikocontrolling*. 3., vollständig überarbeitete Auflage. München : Verlag Franz Vahlen, 2012 (Finance competence). – ISBN 978-3-8006-4222-9
- [13] NITZSCH, Rüdiger von: *Entscheidungslehre: Wie Menschen entscheiden und wie sie entscheiden sollten*. 2., überarb. u. aktualis. Aufl. Stuttgart : Schäffer-Poeschel, 2006. – ISBN 978-3791024714
- [14] GIGERENZER, Gerd ; KOBER, Hainer: *Risiko: Wie man die richtigen Entscheidungen trifft*. 2. Aufl. München : Bertelsmann, 2013. – ISBN 978-3-570-10103-2
- [15] JUNGERMANN, Helmut ; SLOVIC, Paul: Charakteristika individueller Risikowahrnehmung. In: *Bayerische Rück (Hrsg.). Risiko ist ein Konstrukt. Wahrnehmung zur Risikowahrnehmung*. München:Knesebeck, 1993. S. 89-107

- [16] ASCHE, Thomas: *Konsum und Verhalten*. Bd. 27: *Das Sicherheitsverhalten von Konsumenten*. Heidelberg : Physica-Verlag HD, 1990. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-48206-9>. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-48206-9>. – ISBN 978–3–642–48206–9
- [17] SCHÜTZ, H. ; WIEDEMANN, P. M.: Risikowahrnehmung in der Gesellschaft. In: *Bundesgesundheitsblatt - Gesundheitsforschung - Gesundheitsschutz* 46 (2003), Nr. 7, S. 549–554. <http://dx.doi.org/10.1007/s00103-003-0637-y>. – DOI 10.1007/s00103-003-0637-y. – ISSN 1436–9990
- [18] GLASER, Christian: *Risiko im Management: 100 Fehler, Irrtümer, Verzerrungen und wie man sie vermeidet*. Version: 2019. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-658-25835-1>. – DOI 10.1007/978-3-658-25835-1. ISBN 978-3-658-25835-1
- [19] HAUPTMANN, Ulrich: *Prozess- und Anlagensicherheit*. Berlin : Springer Vieweg, 2013. – ISBN 978-3-642-37253-7
- [20] BUNDESMINISTERIUMS DER JUSTIZ UND FÜR VERBRAUCHERSCHUTZ SOWIE DES BUNDESAMTS FÜR JUSTIZ: *Zwölfte Verordnung zur Durchführung des Bundes-Immissionsschutzgesetzes (Störfall-Verordnung - 12. BImSchV): 12. BImSch*. https://www.gesetze-im-internet.de/bimschv_12_2000/12._BImSchV.pdf. Version: 15.03.2017
- [21] RICHTLINIE 2012/18/EU DES EUROPÄISCHEN PARLAMENTS UND DES RATES: *Richtlinie 2012/18/EU des Europäischen Parlaments und des Rates vom 4. Juli 2012 zur Beherrschung der Gefahren schwerer Unfälle mit gefährlichen Stoffen, zur Änderung und anschließenden Aufhebung der Richtlinie 96/82/EG des Rates*. 2012-7
- [22] KOMMISSION FÜR ANLAGENSICHERHEIT: *KAS-18 Leitfaden - Empfehlungen für Abstände zwischen Betriebsbereichen nach der Störfall-Verordnung und schutzbedürftigen Gebieten im Rahmen der Bauleitplanung— Umsetzung § 50 BImSchG: KAS-18*. https://www.kas-bmu.de/files/publikationen/KAS-Publikationen/chronologische%20Reihenfolge/KAS_18k.pdf. Version: 2010
- [23] *Life-Cycle-Performance von Produktionssystemen: Tagungsband zur wbk-Herbsttagung*. 2014
- [24] *DIN EN 16991:2018-07, Risikobasierte Inspektion (RBIF)*
- [25] WIKIPEDIA: *Ausfallverteilung* — *Wikipedia, Die freie Enzyklopädie*. <https://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Ausfallverteilung&oldid=187179128>. Version: 2019
- [26] *DIN EN 61508 - Funktionale Sicherheit sicherheitsbezogener elektrischer/elektronischer/programmierbarer elektronischer Systeme*. 2011-02
- [27] *DIN EN ISO 13849 - Sicherheit von Maschinen – Sicherheitsbezogene Teile von Steuerungen*. 2016-06
- [28] OREDA: *Offshore and onshore reliability data handbook*. 6th edition. Norway : SINTEF Technology and Society: Department of Safety Research, 2015. – ISBN 978–82–14–05948–9
- [29] ISO/TC 67 MATERIALS, EQUIPMENT AND OFFSHORE STRUCTURES FOR PETROLEUM, PETROCHEMICAL AND NATURAL GAS INDUSTRIES: *ISO 14224:2016 Petroleum, petrochemical and natural gas industries — Collection and exchange of reliability and maintenance data for equipment*. 10-2016

- [30] PROCACCIA, H. ; AUFORT, P. ; ARSENIS, S.: *The European industry reliability data bank EIReDA, France*. 1997
- [31] *Zentrale Melde- und Auswertestelle für Störfälle und Störungen (ZEMA)*. <https://www.infosis.uba.de/index.php/de/zema/index.html>
- [32] YAZDI, Mohammad ; KABIR, Sohag: A fuzzy Bayesian network approach for risk analysis in process industries. In: *Process Safety and Environmental Protection* 111 (2017), S. 507–519. <http://dx.doi.org/10.1016/j.psep.2017.08.015>. – DOI 10.1016/j.psep.2017.08.015. – ISSN 09575820
- [33] VDI/DIN-KOMMISSION REINHALTUNG DER LUFT (KRDL) - NORMENAUSSCHUSS: *VDI 3783 Blatt 1:1985-05: Umweltmeteorologie; Ausbreitung von Luftverunreinigungen in der Atmosphäre; Ausbreitung von störfallbedingten Freisetzungen; Sicherheitsanalyse*. 1985
- [34] BRITTER, R. E. ; MCQUAID, J.: *Workbook on the dispersion of dense gases*. Sheffield, U. K. : HSG Contract Research Report No. 17, 1988
- [35] VDI/DIN-KOMMISSION REINHALTUNG DER LUFT (KRDL) - NORMENAUSSCHUSS: *VDI 3783 Blatt 2:1990-07: Umweltmeteorologie; Ausbreitung von störfallbedingten Freisetzungen schwerer Gase; Sicherheitsanalyse*. 1990
- [36] VDI/DIN-KOMMISSION REINHALTUNG DER LUFT (KRDL) - NORMENAUSSCHUSS: *VDI 3945 Blatt 3 - Umweltmeteorologie - Atmosphärische Ausbreitungsmodelle - Partikelmodell*. 2020-04
- [37] GRONBACH, M. T. ; NOVAK, N. ; RITTER, K.: *Monte Carlo-Algorithmen*. Version: 2012. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-89141-3>. – DOI 10.1007/978-3-540-89141-3
- [38] SOBOL, I. M.: Die Monte-Carlo-Methode. In: *Deutscher Verlag der Wissenschaften* (1991)
- [39] MCKAY, M. D. ; BECKMAN, R. J. ; CONOVER, W. J.: Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code. In: *Technometrics* 21 (1979), Nr. 2, S. 239–245. <http://dx.doi.org/10.1080/00401706.1979.10489755>. – DOI 10.1080/00401706.1979.10489755. – ISSN 0040-1706
- [40] IMAN, R. L. ; HELTON, J. C. ; CAMPBELL, J. E.: An Approach to Sensitivity Analysis of Computer Models: Part I—Introduction, Input Variable Selection and Preliminary Variable Assessment. In: *Journal of Quality Technology* 13 (1981), Nr. 3, S. 9. <http://dx.doi.org/10.1080/00224065.1981.11978748>. – DOI 10.1080/00224065.1981.11978748
- [41] KARIMI, M. ; AKDOGAN, G. ; DELLIMORE, K. H. ; BRADSHAW, S. M.: Quantification of numerical uncertainty in computational fluid dynamics modelling of hydrocyclones. In: *Computers & Chemical Engineering* 43 (2012), S. 45–54. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2012.04.009>. – DOI 10.1016/j.compchemeng.2012.04.009. – ISSN 00981354
- [42] DARÓCZY, László: *Practical issues in the optimization of CFD based engineering problems*, Universität Magdeburg, Diss., 2016. <http://dx.doi.org/10.25673/4475>. – DOI 10.25673/4475
- [43] KNETSCH, Th.: *Unsicherheiten in Ingenieurberechnungen*, Universität Magdeburg, Diss., 2004. <http://dx.doi.org/http://dx.doi.org/10.25673/3827>. – DOI <http://dx.doi.org/10.25673/3827>

- [44] OBERKAMPF, William L. ; TRUCANO, Timothy G.: Verification and validation in computational fluid dynamics. In: *Progress in Aerospace Sciences* 38 (2002), Nr. 3, S. 209–272. [http://dx.doi.org/10.1016/S0376-0421\(02\)00005-2](http://dx.doi.org/10.1016/S0376-0421(02)00005-2). – DOI 10.1016/S0376-0421(02)00005-2. – ISSN 03760421
- [45] MONTOMOLI, Francesco ; CARNEVALE, Mauro ; D’AMMARO, Antonio ; MASSINI, Michela ; SALVADORI, Simone: *Uncertainty Quantification in Computational Fluid Dynamics and Aircraft Engines*. Version: 2015. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-14681-2> (SpringerBriefs in Applied Sciences and Technology). – DOI 10.1007/978-3-319-14681-2. ISBN 978-3-319-14681-2
- [46] CHUTIA, R. ; MAHANTA, S. ; DATTA, D: Uncertainty modelling of atmospheric dispersion by stochastic response surface method under aleatory and epistemic uncertainties. In: *Sadhana* 39 (2014), S. 18. <http://dx.doi.org/10.1007/s12046-013-0212-7>. – DOI 10.1007/s12046-013-0212-7
- [47] VAN WEYENBERGE, Bart ; CRIEL, Pieterjan ; DECKERS, Xavier ; CASPEELE, Robby ; MERCI, Bart: Response surface modelling in quantitative risk analysis for life safety in case of fire. In: *Fire Safety Journal* 91 (2017), S. 1007–1015. <http://dx.doi.org/10.1016/j.firesaf.2017.03.020>. – DOI 10.1016/j.firesaf.2017.03.020. – ISSN 03797112
- [48] VAN WEYENBERGE, Bart ; DECKERS, Xavier ; CASPEELE, Robby ; MERCI, Bart: Development of an Integrated Risk Assessment Method to Quantify the Life Safety Risk in Buildings in Case of Fire. In: *Fire Technology* 55 (2018), Nr. 4, S. 1211–1242. <http://dx.doi.org/10.1007/s10694-018-0763-6>. – DOI 10.1007/s10694-018-0763-6. – ISSN 0015-2684
- [49] AUSSCHUSS FÜR GEFAHRSTOFFE: *Lagern von flüssigen und festen Gefahrstoffen in ortsfesten Behältern sowie Füll- und Entleerstellen für ortsbewegliche Behälter: TRGS 509*. https://www.baua.de/DE/Angebote/Rechtstexte-und-Technische-Regeln/Regelwerk/TRGS/pdf/TRGS-509.pdf?__blob=publicationFile. Version: 09-2014
- [50] WIKIPEDIA: *Liste der größten künstlichen, nichtnuklearen Explosionen — Wikipedia, Die freie Enzyklopädie*. https://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Liste_der_gr%C3%B6%C3%9Ften_k%C3%BCnstlichen,_nichtnuklearen_Explosionen&oldid=203592574. Version: 2020
- [51] EUROPÄISCHE WIRTSCHAFTSGEMEINSCHAFT: *Vertrag zur Gründung der europäischen Wirtschaftsgemeinschaft: Vertrag von Rom*. <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/DE/TXT/PDF/?uri=CELEX:11957E/TXT&from=en>. Version: 1957
- [52] BUNDESMINISTERIUMS DER JUSTIZ UND FÜR VERBRAUCHERSCHUTZ SOWIE DES BUNDESAMTS FÜR JUSTIZ: *Gesetz über die Durchführung von Maßnahmen des Arbeitsschutzes zur Verbesserung der Sicherheit und des Gesundheitsschutzes der Beschäftigten bei der Arbeit (Arbeitsschutzgesetz - ArbSchG): ArbSchG*. <https://www.gesetze-im-internet.de/arbschg/ArbSchG.pdf>. Version: 19.06.2020
- [53] BUNDESMINISTERIUMS DER JUSTIZ UND FÜR VERBRAUCHERSCHUTZ SOWIE DES BUNDESAMTS FÜR JUSTIZ: *Verordnung zum Schutz vor Gefahrstoffen (Gefahrstoffverordnung - GefStoffV): GefStoffV*. https://www.gesetze-im-internet.de/gefstoffv_2010/GefStoffV.pdf. Version: 29.03.2017
- [54] AUSSCHUSS FÜR GEFAHRSTOFFE: *Technische Regeln für Gefahrstoffe TRGS 723 Gefährliche explosionsfähige Gemische – Vermeidung der Entzündung gefährlicher explosionsfähiger Gemische: TRGS 723*. <https://www.asecos.com/dokumente/TRBS-2152-Teil-3-GEA-Vermeidung-der-Entzuendung.pdf>. Version: 20.11.2009

- [55] INTERNATIONALE ELEKTROTECHNISCHE KOMMISSION: *DIN EN 62305-1 VDE 0185-305-1:2011-10 Blitzschutz*. 2011-10
- [56] AMERICAN PETROLEUM INSTITUTE: *Manual of Petroleum Measurement Standards Chapter 19- Evaporative Loss Measurement Section 2- Evaporative Loss From Floating-Roof Tanks: API Publication 2517*. <http://ballots.api.org/copm/cele/ballots/docs/Ch19p2e4ballotdraft.pdf>
- [57] INTERNATIONALE ELEKTROTECHNISCHE KOMMISSION: *DIN EN ISO 12100:2011-03 Sicherheit von Maschinen - Allgemeine Gestaltungsleitsätze - Risikobeurteilung und Risikominderung (ISO 12100:2010); Deutsche Fassung EN ISO 12100:2010*. 2011-03
- [58] WIKIPEDIA: *Risk* — *Wikipedia, Die freie Enzyklopädie*. <https://en.wikipedia.org/wiki/Risk>. Version: 2020. – [Online; Stand 21. Januar 2021]
- [59] KAPLAN, S. ; GARRICK, B. J.: *On the Quantitative Definition of Risk*. Version: 1981. <http://dx.doi.org/10.1111/j.1539-6924.1981.tb01350.x..> – DOI 10.1111/j.1539-6924.1981.tb01350.x.
- [60] TERJE, A.: *Quantitative Risk Assessment – The Scientific Platform*. 2011. – Cambridge University Press
- [61] BOCK, F.-J. ; HA FERKAMP, K. ; MISTELE, J. ; SHAH VARDIAN, A.: ROGA-Eine neue Methode der risikoorientierten Gefahrenanalyse zur Erfüllung der Anforderungen der Störfall-Verordnung. In: *Sonderdruck aus TÜ technische Überwachung, Ausgabe 10, 2006* 10 (2006), S. 12
- [62] *Verordnung Nummer 814.012, Verordnung über den Schutz vor Störfällen*. 2019-08
- [63] WIKIPEDIA: *Restrisiko* — *Wikipedia, Die freie Enzyklopädie*. <https://de.wikipedia.org/wiki/Restrisiko>. Version: 2020. – [Online; Stand 9. September 2020, dort zitiert aus: Atomwirtschaft vol. 21, 1976, S. 253]
- [64] INTERNATIONALE ELEKTROTECHNISCHE KOMMISSION: *DIN EN 62061:2016-05; VDE 0113-50:2016-05, Sicherheit von Maschinen - Funktionale Sicherheit sicherheitsbezogener elektrischer, elektronischer und programmierbarer elektronischer Steuerungssysteme*. 2016-05
- [65] FINNEY, D. J.: *Probit Analysis: A statistical treatment of the sigmoid response curve*. Cambridge University Press, 1947. – ISBN 0521135907
- [66] AGENCY, United States Environmental P.: *Acute Exposure Guideline Levels for Airborne Chemicals*. <https://www.epa.gov/aegl>. Version: 2021. – [Online; Stand 7. April 2021]
- [67] AIHA: *Emergency Response Planning Guidelines*. <https://www.aiha.org/get-involved/aiha-guideline-foundation/erpgs>. Version: 2021. – [Online; Stand 7. April 2021]
- [68] 900, TRSB: *Technische Regeln für Gefahrstoffe 900, Zuletzt geändert und ergänzt: GMBL 2021, S. 471[Nr.21](v. 24.03.2021)*. 2021
- [69] BUNDESAMT FÜR STRAHLENSCHUTZ: *Methoden zur probabilistischen Sicherheitsanalyse für Kernkraftwerke*. 2005
- [70] GLEISSNER, W.: *Grundlagen des Risikomanagements im Unternehmen*. Vahlen Verlag, 2008. – ISBN 978-3800634583

- [71] KAJÜTER, P.: *Risikomanagement im Konzern - Eine empirische Analyse börsennotierter Unternehmen*. Vahlen Verlag, 2009. – ISBN 978–3800634408
- [72] DEFENSE, MIL–P–1629 U.S. Department o.: *Procedures for Performing a Failure Mode Effects and Criticality Analysis*. 1949
- [73] INTERNATIONALE ELEKTROTECHNISCHE KOMMISSION: *IEC 61025:2006, Fault tree analysis (FTA)*. 2006-12
- [74] PEARL, J.: *Probabilistic Reasoning in Intelligent Systems*. San Francisco. Wiley Verlag, 1988. – ISBN 978–1558604797
- [75] KLETZ, T.: *Plant design for safety: a user-friendly approach*. Hemisphere Publishing Cooperation, 1991. – ISBN 1–56032–068–0
- [76] FÜSER, K. ; GLEISSNER, W. ; MEIER, G.: *Risikomanagement (KonTraG) - Erfahrungen aus der Praxis*. Der Betrieb. - Düsseldorf: Handelsblatt Fachmedien, 1999. ISSN 0005–9935
- [77] *Zitat frei entnommen aus <https://www.bayesfusion.com/bayesian-networks/>: A man who does not analyze his data has no advantage over a man who has no data.*
- [78] FÜSER, K. ; GLEISSNER, W. ; MEIER, G.: *A Student's Guide to Bayesian Statistics*. SAGE Publications Ltd, 2018
- [79] WIKIPEDIA: *Judea Pearl* — *Wikipedia, Die freie Enzyklopädie*. https://de.wikipedia.org/wiki/Judea_Pearl. Version: 2021. – [Online; Stand 9. März 2021]
- [80] WIKIPEDIA: *Richard Neapolitan* — *Wikipedia, Die freie Enzyklopädie*. https://en.wikipedia.org/wiki/Richard_Neapolitan. Version: 2021. – [Online; Stand 9. März 2021]
- [81] NEAPOLITAN, R.: *Learning Bayesian Networks*. Prentice Hall; 1. Edition, 2003
- [82] WIKIPEDIA: *data mining* — *Wikipedia, Die freie Enzyklopädie*. <https://de.wikipedia.org/wiki/Data-Mining>. Version: 2021. – [Online; Stand 9. März 2021]
- [83] HECKERMAN, D.: Bayesian Networks for Data Mining. In: *Data Mining and Knowledge Discovery* 1 (1997), S. 40. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1023/A:1009730122752>. – DOI <https://doi.org/10.1023/A:1009730122752>
- [84] ZAREI, E. ; KHAKZAD, N. ; COZZANI, V. ; RENIERS, G.: Safety analysis of process systems using Fuzzy Bayesian network (FBN). In: *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 57 (2019), S. 9. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jlp.2018.10.011>. – DOI <https://doi.org/10.1016/j.jlp.2018.10.011>
- [85] REFAI, A. ; MEROUANI, H. F. ; AOURAS, H.: Maintenance of a Bayesian network: application using medical diagnosis. In: *Evolving Systems* 7 (2016), S. 11. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1007/s12530-016-9146-8>. – DOI <https://doi.org/10.1007/s12530-016-9146-8>
- [86] ZINKE, R. ; LANGNICKEL, T. ; HOLSCHMACHER, J. ; SCHON, U. ; RAUHWOLF, T. ; DULLAEUS, R.-B.: Smartphone-based first responder alerting systems: proof of the advantages of applying Bayesian network approaches. In: *Journal of Medical and Dental Science Research* 8 (2021), S. 50–62

- [87] LIN, Xiaotong: *Bayesian Network Learning and Applications in Bioinformatics*. <https://core.ac.uk/download/pdf/213399187.pdf>. Version: 2012. – [Online; Stand 9. März 2021]
- [88] KRUSE, R. ; BORGELT, Ch. ; BRAUNE, Ch. ; KLAWONN, F. ; MOEWES, Ch. ; STEINBRECHER, M.: *Computational Intelligence: Eine methodische Einführung in Künstliche Neuronale Netze, Evolutionäre Algorithmen, Fuzzy-Systeme und Bayes-Netze*. Springer Vieweg; 2., überarb. und erw. Aufl. 2015 Edition, 2015
- [89] HORVITZ, E. ; BREESE, J. ; HECKERMAN, D. ; KOOS, D. ; ROMMELSE, H.: *The Lumiere Project: Bayesian User Modeling for Inferring the Goals and Needs of Software Users*. [arXiv:1301.7385](https://arxiv.org/abs/1301.7385). Version: 1998. – [Online; Stand 9. März 2021]
- [90] CAI, B. ; LIU, Y. ; LIU, Z. ; CHANG, Y. ; JIANG, L.: *Bayesian Networks for Reliability Engineering*. Version: 2020. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1007/978-981-13-6516-4>. – DOI <https://doi.org/10.1007/978-981-13-6516-4>. ISBN 978-981-13-6515-7
- [91] DIESTEL, R.: *Graphentheorie*. Springer Spektrum, 2017. – ISBN 978-3-662-53633-9
- [92] *GeNIe (Graphical Network Interphase) BayesFusion LLC, Data Analytics, Mathematical Modeling*. 2020
- [93] ZINKE, R. ; MELNYCHUK, J. ; KÖHLER, F. ; KRAUSE, U.: Quantitative Risk Assessment of Emissions from External Floating Roof Tanks during Normal Operation and in Case of Damages using Bayesian Networks. In: *Journal of Reliability Engineering and System Safety* 179 (2020), S. 106826. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ress.2020.106826>. – DOI 10.1016/j.ress.2020.106826
- [94] REN, J. ; JENKINSON, I. ; WANG, J. ; XU, D. L. ; YANG, J. B.: An offshore risk analysis method using fuzzy Bayesian network. In: *J. Offshore Mech. Arct. Eng.* (2009), S. 28
- [95] SHAO, Y. ; MIYOSHI, T. ; HASEGAWA, Y. ; BAN, H.: Evaluating the uncertainty of a Bayesian network query response by using joint probability distribution. In: *IEEE 14th International Conference on Machine Learning and Applications Evolving Systems* (2015), S. 6
- [96] CHEN, S.-J. ; HWANG, C.-L.: Fuzzy Multiple Attribute Decision Making Methods. In: *Springer-Verlag Berlin Heidelberg* (1992), S. 97. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1007/978-3-642-46768-4>. – DOI <https://doi.org/10.1007/978-3-642-46768-4>
- [97] RAMZALI, N. ; LAVASANI, M. R. M. ; GHODOUSI, J.: Safety barriers analysis of offshore drilling systems by employing Fuzzy Event Tree Analysis. In: *Safety Science* 78 (2015), S. 10. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ssci.2015.04.004>. – DOI <https://doi.org/10.1016/j.ssci.2015.04.004>
- [98] ONISAWA, T.: An approach to human reliability in man-machine systems using error possibility. In: *Fuzzy Sets and Systems* 27 (1988), S. 16. [http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/0165-0114\(88\)90140-6](http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/0165-0114(88)90140-6). – DOI [https://doi.org/10.1016/0165-0114\(88\)90140-6](https://doi.org/10.1016/0165-0114(88)90140-6)
- [99] HOLSCHEMACHER, J.: Erarbeitung Bayesscher Netze als Verfahren der Riskisobeurteilung und Softwareevaluation. In: *Bachelorarbeit OvGU* (2018)
- [100] SEYDEL, W.: Einarbeitung in die Anwendung von Bayesschen Netzen zur Betrachtung sicherheitsrelevanter Aspekte von Anlagen. In: *Masterarbeit OvGU* (2016)

- [101] AISPACE: *Tools for Learning Artificial Intelligence*. <http://www.aispace.org/>.
Version: 2018. – [Online; Stand 10. April 2018]
- [102] BANJO: *Bayesian Network Inference with Java Objects*. <https://users.cs.duke.edu/~amink/software/banjo/>. Version: 2021. – [Online; Stand 9. März 2021]
- [103] BNJ: *Bayesian Network tools in Java (BNJ)*. <http://bnj.sourceforge.net/>.
Version: 2018. – [Online; Stand 10. April 2018]
- [104] SAMIAM: *Sensitivity Analysis, Modeling, Inference and More*. <http://reasoning.cs.ucla.edu/samiam/>. Version: 2018. – [Online; Stand 10. April 2018]
- [105] UNBBAYES: *Framework plugin for probabilistic graph models*. <http://unbbayes.sourceforge.net/index.html>. Version: 2021. – [Online; Stand 9. März 2021]
- [106] JAVABAYES - VERSION 0.346: *Bayesian Networks in Java*. <https://www.cs.cmu.edu/~javabayes/Home/>. Version: 2018. – [Online; Stand 10. April 2018]
- [107] AGENARISK: *Bayesian Network Software for Risk Analysis and Decision Making*. <https://www.agenarisk.com>. Version: 2021. – [Online; Stand 9. März 2021]
- [108] BAYESIALAB 7: *Artificial Intelligence for Research, Analytics, and Reasoning*. <http://www.bayesialab.com/>. Version: 2018. – [Online; Stand 10. April 2018]
- [109] BAYESSERVER: *BAYESIAN NETWORK SOFTWARE FOR ARTIFICIAL INTELLIGENCE*. <https://www.bayesserver.com/>. Version: 2018. – [Online; Stand 10. April 2018]
- [110] BNET.BUILDER: *A desktop application for rapidly creating Belief Networks*. <https://www.cra.com/work/case-studies/bnetbuilder>. Version: 2018. – [Online; Stand 10. April 2018]
- [111] FLINT: *Logic Programming Associates, Flint toolkit*. <http://www.lpa.co.uk/fln.htm>.
Version: 2018. – [Online; Stand 10. April 2018]
- [112] EXPERT, HUGIN: *HUGIN EXPERT A/S, HUGIN Explorer / HUGIN Educational 8.6*. <https://www.hugin.com/index.php/hugin-explorerhugin-educational/>.
Version: 2018. – [Online; Stand 10. April 2018]
- [113] NETICA: *Norsys Software Corp., Netica*. <http://www.norsys.com/>. Version: 2018. – [Online; Stand 10. April 2018]
- [114] EDLER, F. ; SODEN, M. ; HANKAMMER, R.: *Fehlerbaumanalyse in Theorie und Praxis - Grundlagen und Anwendung der Methode*. Version: 2015. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1007/978-3-662-48166-0>. – DOI <https://doi.org/10.1007/978-3-662-48166-0>
- [115] HENNINGS, W.: *Modelle für abhängige Ausfälle in probabilistischen Risikoanalysen: Beschreibung des Kenntnisstandes und Empfehlungen*. Berichte des Forschungszentrums Jülich, 2631, 1992. ISSN 0366-0885
- [116] BOBBIO, A. ; PORTINALE, L. ; MINICHINO, M. ; CIANCHAMERLA, E.: Improving the analysis of dependable systems by mapping fault trees into Bayesian networks. In: *Reliability Engineering and System Safety* (2001), S. 11. [http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/S0951-8320\(00\)00077-6](http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/S0951-8320(00)00077-6). – DOI [https://doi.org/10.1016/S0951-8320\(00\)00077-6](https://doi.org/10.1016/S0951-8320(00)00077-6)

- [117] MONTANI, S. ; PORTINALE, L. ; BOBBIO, A. ; CODETTA-RAITERI, D.: RADYBAN: A tool for reliability analysis of dynamic fault trees through conversion into Bayesian networks. In: *Reliability Engineering and System Safety* 93 (2008), S. 11. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ress.2007.03.013>. – DOI <https://doi.org/10.1016/j.ress.2007.03.013>
- [118] KHAKZAD, N. ; KHAN, F. ; AMYOTTE, P.: Safety analysis in process facilities: Comparison of fault tree and Bayesian network approaches. In: *Reliability Engineering and System Safety* 96 (2011), S. 7. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ress.2011.03.012>. – DOI <https://doi.org/10.1016/j.ress.2011.03.012>
- [119] SMITH, D. ; VEITCH, B. ; KHAN, F. ; TAYLOR, R.: Understanding industrial safety: Comparing Fault tree, Bayesian network, and FRAM approach. In: *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 45 (2017), S. 13. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jlp.2016.11.016>. – DOI <https://doi.org/10.1016/j.jlp.2016.11.016>
- [120] MAHBOOB, Q. ; STRAUB, D.: Comparison of Fault Tree and bayesian networks for Modeling safety Critical Components in Railway Systems. In: *Advances in Safety, Reliability and Risk Management* (2011), S. 7. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1201/b11433-16>. – DOI <https://doi.org/10.1201/b11433-16>
- [121] STROOP, R. ; KERNER, T. ; STRICKMANN, B. ; HENSEL, M.: Mobile phone-based alerting of CPR-trained volunteers simultaneously with the ambulance can reduce the resuscitation-free interval and improve outcome after out-of-hospital cardiac arrest: A German, population-based cohort study. In: *Resuscitation* 147 (2020), S. 7. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.resuscitation.2019.12.012>. – DOI <https://doi.org/10.1016/j.resuscitation.2019.12.012>
- [122] STACHOWIAK, H.: *Allgemeine Modelltheorie*. Springer (5. Dezember 1973), 1973. – ISBN 978-3211811061
- [123] BOSSEL, H.: *Systeme, Dynamik, Simulation: Modellbildung, Analyse und Simulation komplexer Systeme*. BoD – Books on Demand; 1., Auflage (13. Mai 2004), 2013. – ISBN 978-3833409844
- [124] BUNGARTZ, H.-J. ; ZIMMER, S. ; BUCHHOLZ, M. ; PFLÜGER, D.: *Modellbildung und Simulation: Eine anwendungsorientierte Einführung*. Springer Spektrum; 2., überarb. Aufl. 2013, 2013. – ISBN 978-3642376559
- [125] GÖRDLER, H.: *Dimensionsanalyse: Theorie der physikalischen Dimensionen mit Anwendungen*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1975
- [126] BUCKINGHAM, E.: On physically similar systems: illustrations of the use of dimensional equations. In: *Physical Review* 4 (1914), Nr. 4, S. 31. <http://dx.doi.org/doi.org/10.1103/PhysRev.4.345>. – DOI doi.org/10.1103/PhysRev.4.345. – ISSN 10668527
- [127] FIZEAU, H. L.: Sur une expérience relative à la vitesse de propagation de la lumière. In: *Comptes rendus de l'Académie des sciences* 29 (1849). – ISSN 10668527
- [128] BUREAU INTERNATIONALDES POIDS ET MESURES: Le Système International d'Unités. . – ISBN 978-92-822-2272-0, S. 216
- [129] FOKEN, T.: 50 years of the Monin-Obukhov similarity theory. In: *Boundary-Layer Meteorology* 119 (2006), S. 16. <http://dx.doi.org/10.1007/s10546-006-9048-6>. – DOI [10.1007/s10546-006-9048-6](https://doi.org/10.1007/s10546-006-9048-6). – ISSN 10668527

- [130] HAUPTMANN, U. ; WERNER, W.: *Engineering Risks: Evaluation and Valuation*. Version: 1991. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-95610-2>. – DOI 10.1007/978-3-642-95610-2
- [131] KIUREGHIAN, Armen D. ; DITLEVSEN, Ove: Aleatory or epistemic? Does it matter? In: *Structural Safety* 31 (2009), Nr. 2, S. 105–112. <http://dx.doi.org/10.1016/j.strusafe.2008.06.020>. – DOI 10.1016/j.strusafe.2008.06.020. – ISSN 01674730
- [132] MAHADEVAN, S. ; RAGHOTHAMACHAR, P.: Adaptive simulation for system reliability analysis of large structures. In: *Computers and Structures* 77 (2000), Nr. 6, S. 9. [http://dx.doi.org/10.1016/S0045-7949\(00\)00013-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0045-7949(00)00013-4). – DOI 10.1016/S0045-7949(00)00013-4
- [133] ISUKAPALLI, S. S. ; ROY, A. ; GEORGOPOULOS, P. G.: Stochastic Response Surface Methods (SRSMs) for Uncertainty Propagation: Application to Environmental and Biological Systems. In: *Risk Analysis* 18 (1998), Nr. 3, S. 12. <http://dx.doi.org/10.1111/j.1539-6924.1998.tb01301.x>. – DOI 10.1111/j.1539-6924.1998.tb01301.x
- [134] SWILER, L. ; PAEZ, T. ; MAYES, R.: Epistemic uncertainty quantification tutorial. In: *Conference Proceedings of the Society for Experimental Mechanics Series* (2009), 01
- [135] ZADEH, L. A.: Fuzzy Sets as the Basis for a Theory of Possibility. In: *Fuzzy Sets and Systems 1* 1 (1978), S. 25. [http://dx.doi.org/10.1016/S0165-0114\(99\)80004-9](http://dx.doi.org/10.1016/S0165-0114(99)80004-9). – DOI 10.1016/S0165-0114(99)80004-9
- [136] WIKIPEDIA: *Possibilitätstheorie* — *Wikipedia, Die freie Enzyklopädie*. <https://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Possibilit%C3%A4tstheorie&oldid=188778400>. Version: 2019. – [Online; Stand 22. September 2020]
- [137] ZADEH, L. A.: Fuzzy sets. In: *Information and control* 18 (1965), S. 15. [http://dx.doi.org/10.1016/S0019-9958\(65\)90241-X](http://dx.doi.org/10.1016/S0019-9958(65)90241-X). – DOI 10.1016/S0019-9958(65)90241-X
- [138] LAURIEN, E. ; OERTEL, H. j.: *Numerische Strömungsmechanik*. Version: 2013. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-658-03145-9>. – DOI 10.1007/978-3-658-03145-9
- [139] FREITAS, Ch. J.: The issue of numerical uncertainty. In: *Applied Mathematical Modelling* 26 (2002), S. 11. [http://dx.doi.org/10.1016/S0307-904X\(01\)00058-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0307-904X(01)00058-0). – DOI 10.1016/S0307-904X(01)00058-0
- [140] FRANKE, J. ; HELLSTEN, A. ; SCHLÜNZEN, H. ; CARISSIMO, B.: Best Practice Guideline for the CFD Simulation of Flows in the Urban Environment: COST Action 732 Quality Assurance and Improvement of Microscale Meteorological Models. In: *Meteorological Institute University of Hamburg* (2007)
- [141] OPENFOAM LTD. OPENFOAM LTD.: *OpenFOAM*. <http://www.openfoam.com>
- [142] ANSYS ACADEMIC RESEARCH: *Help System, Coupled Field Analysis Guide, ANSYS, Inc.*
- [143] Evaluation, improvement and guidance for the use of local-scale emergency prediction and response tools for airborne hazards in built environments. In: *COST Action ES1006, April 2015* ISBN 987-3-9817334-2-6
- [144] [Online; Stand 22. September 2020]

- [145] MELCHER, T. ; ZINKE, R. ; TROTT, M. ; KRAUSE, U.: Experimental investigations on the repeatability of real scale fire tests. In: *Fire Safety Journal* 82 (2016), S. 13. <http://dx.doi.org/10.1016/j.firesaf.2016.03.009>. – DOI 10.1016/j.firesaf.2016.03.009. – ISSN 03797112
- [146] MELCHER, T.: *Reproduzierbarkeit von Brandversuchen - experimentelle und numerische Betrachtungen*, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Diss., 2016
- [147] GRS-PROJEKT 1501530: *Modellierung von Brandszenarien in komplexen Gebäudestrukturen mittels fortgeschrittener strömungsdynamischer Methoden, gefördert durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages*
- [148] *DIN 1319: Grundlagen der Meßtechnik*. 1999
- [149] FARAGHER, J.: Probabilistic Methods for the Quantification of Uncertainty and Error in Fluid Dynamics Simulation. In: *Australian Government, Department of Defence, Defence Science and Technology Organization, DSDO-TR-1633* (2004), S. 30
- [150] SALTELLI, A.: Sensitivity Analysis for Importance Assessment. In: *Risk Analysis* 22 (2002), Nr. 3, S. 11. <http://dx.doi.org/10.1111/0272-4332.00040>. – DOI 10.1111/0272-4332.00040
- [151] SIEBERTZ, C. ; BEBBER, d. v. ; HOCHKIRCHEN, T.: *Statistische Versuchsplanung*. Version: 2017. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-662-55743-3>. – DOI 10.1007/978-3-662-55743-3
- [152] RÜSCHENDORF, L.: *Mathematische Statistik*. Version: 2014. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-41997-3>. – DOI 10.1007/978-3-642-41997-3. ISBN 978-3-642-41996-6
- [153] HAUPTMANN, U.: Analytical propagation of uncertainties through fault trees. In: *Reliability Engineering and System Safety* 76 (2002), Nr. 3, S. 2. [http://dx.doi.org/10.1016/S0951-8320\(02\)00016-9](http://dx.doi.org/10.1016/S0951-8320(02)00016-9). – DOI 10.1016/S0951-8320(02)00016-9
- [154] CONNELL, L.D.: An analysis of perturbation based methods for the treatment of parameter uncertainty in numerical groundwater models. In: *Transport in Porous Media* 21 (1995), S. 15. <http://dx.doi.org/10.1007/BF00617407>. – DOI 10.1007/BF00617407
- [155] PROTTER, P.E.: *Stochastic Integration and Differential Equations*. Version: 2003. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-662-10061-5>. – DOI 10.1007/978-3-662-10061-5. ISBN 3540003134
- [156] MUGLER, A.: *Verallgemeinertes Polynomielles Chaos zur Lösung stationärer Diffusionsprobleme mit zufälligen Koeffizienten*, Brandenburgische Technische Universität Cottbus, Diss., 2013
- [157] DEVISSCHER, A.: *Air Dispersion Modeling: Foundations and Applications*. Version: 2013. <http://dx.doi.org/10.1002/clen.201570103>. – DOI 10.1002/clen.201570103. ISBN 978-1-118-07859-4
- [158] WIKIPEDIA CONTRIBUTORS: *Monte Carlo method* — *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Monte_Carlo_method&oldid=976860871. Version: 2020. – [Online; accessed 6-October-2020]

- [159] WIKIPEDIA: *Monte-Carlo-Simulation* — *Wikipedia, Die freie Enzyklopädie*. <https://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Monte-Carlo-Simulation&oldid=203899528>. Version: 2020. – [Online; Stand 6. Oktober 2020]
- [160] METROPOLIS, Nicholas ; ROSENBLUTH, Arianna W. ; ROSENBLUTH, Marshall N. ; TELLER, Augusta H. ; TELLER, Edward: Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. In: *The Journal of Chemical Physics* 21 (1953), Nr. 6, S. 1087–1092. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1699114>. – DOI 10.1063/1.1699114. – ISSN 0021–9606
- [161] GEORGII, H.: *Stochastik - Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik*. de Gruyter, 4. Auflage, 2002. – ISBN 3110215268
- [162] ZINKE, R. ; MELCHER, T.: Consideration of unknown and stochastic distributed Parameters in the Models of Fire Safety Engineering. In: *Proceedings of the 22nd International Conference on Fire Protection, Ostrava* (2013), S. 14
- [163] WALTERS, R. W. ; HUSE, L.: Uncertainty Analysis for Fluid Mechanics with Applications. In: *NASA/CR-2002-211449, ICASE Report No. 2001-1* (2002)
- [164] SALTELLI, A. ; CHAN, K. ; SCOTT, E. M.: *Sensitivity Analysis*. Wiley, 2009. – ISBN 978-0-470-74382-9
- [165] HELTON, J. C. ; DAVIS, F. J.: Sampling-Based Methods for Uncertainty and Sensitivity Analysis. 22 (2002), Nr. 3, S. 31. <http://dx.doi.org/10.1111/0272-4332.00041>. – DOI 10.1111/0272-4332.00041
- [166] BOUHARI, A.: Adaptive Monte Carlo Method, A Variance Reduction Technique. In: *Monte Carlo Methods and Their Applications* 10 (2004), Nr. 1, S. 24. <http://dx.doi.org/10.1515/15693960432309118>. – DOI 10.1515/15693960432309118
- [167] BOX, G. E. W. ; WILSON, K. B.: On the Experimental Attainment of Optimum Conditions. In: *Journal of the Royal Statistical Society: Series B*. 13 (1951), Nr. 1. <http://dx.doi.org/10.1111/j.2517-6161.1951.tb00067.x>. – DOI 10.1111/j.2517-6161.1951.tb00067.x
- [168] KHURI, André I. ; MUKHOPADHYAY, Siuli: Response surface methodology. In: *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics* 2 (2010), Nr. 2, S. 128–149. <http://dx.doi.org/10.1002/wics.73>. – DOI 10.1002/wics.73. – ISSN 1939–5108
- [169] MYERS, R. H. ; MONTGOMERY, D. C. ; ANDERSON-CLARK-COOK, C. M.: *RESPONSE SURFACE METHODOLOGY: Process and Product Optimization Using Designed Experiments*. 2016
- [170] JASBIR, S. A.: *Introduction to Optimum Design*. Version: 2017. <http://dx.doi.org/10.1016/C2013-0-15344-5>. – DOI 10.1016/C2013-0-15344-5. ISBN 978-0-12-800806-5
- [171] FORRESTER, A. ; SÓBESTER, A. ; KEANE, A.: *Engineering design via surrogate modelling: A practical guide*. Hoboken, N.J and Chichester : Wiley, 2008 <http://onlinelibrary.wiley.com/book/10.1002/9780470770801>. – ISBN 978-0-470-06068-1
- [172] MYERS, R. H. ; MONTGOMERY, D. C. ; VINING, G. G. ; BORROR, C. M. ; KOWALSKI, S. M.: Response Surface Methodology: A Retrospective and Literature Survey. In: *Journal of Quality Technology* 36 (2004), Nr. 1, S. 53–77. <http://dx.doi.org/10.1080/00224065.2004.11980252>. – DOI 10.1080/00224065.2004.11980252

- [173] CHOI, Seung-Kyum ; GRANDHI, Ramana V. ; CANFIELD, Robert A. ; PETTIT, Chris L.: Polynomial Chaos Expansion with Latin Hypercube Sampling for Estimating Response Variability. In: *AIAA Journal* 42 (2004), Nr. 6, S. 1191–1198. <http://dx.doi.org/10.2514/1.2220>. – DOI 10.2514/1.2220. – ISSN 0001–1452
- [174] WIENER, N.: The Homogeneous Chaos. In: *American Journal of Mathematics* 60 (1938), Nr. 4, S. 39. <http://dx.doi.org/10.2307/2371268>. – DOI 10.2307/2371268
- [175] WIENER, N.: Nonlinear Problems In Random Theory. In: *MIT Press, Cambridge* (1958). ISBN 9780262230049
- [176] GHANEM, R. G. ; SPANOS, P. D.: Spectral techniques for Stochastic Finite Elements. In: *Archives of Computational Methods in Engineering* 4 (1997), Nr. 1, S. 63–100
- [177] CAMERON, R. H. ; MARTIN, W. T.: The Orthogonal Development of Non-Linear Functionals in Series of Fourier-Hermite Functionals. In: *The Annals of Mathematics* 48 (1947), Nr. 2, S. 385–392
- [178] XIU, D. ; ROY, A. ; KARNIADAKIS, G. E.: The Winer-Askey Polynomial Chaos for Stochastic Differential Equations. In: *SIAM Journal on Scientific Computing* 24 (2002), Nr. 2, S. 25. <http://dx.doi.org/10.1137/S1064827501387826>. – DOI 10.1137/S1064827501387826
- [179] XIU, D.: *Generalized (Wiener-Askey) polynomial chaos*, Brown University, Diss., 2004
- [180] XIU, D. ; KARNIADAKIS, G. E.: Modeling uncertainty in flow simulation via generalized polynomial chaos. In: *Journal of Computational Physics* 187 (2003), Nr. 1, S. 137–167. [http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9991\(03\)00092-5](http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9991(03)00092-5). – DOI 10.1016/S0021-9991(03)00092-5
- [181] ERNST, O. G. ; MUGLER, A. ; STARKLOFF, H.-J. ; ULLMANN, E.: On the convergence of generalized polynomial chaos expansion. In: *ESAIM: M2AN* 46 (2012), Nr. 2, S. 317–339. <http://dx.doi.org/10.1051/m2an/2011045>. – DOI 10.1051/m2an/2011045
- [182] ASKEY, R. ; WILSON, J.: Some basic hypergeometric orthogonal polynomials that generalize Jacobi polynomials. In: *Memoirs of the American Mathematical Society* 54 (1985), S. 319. <http://dx.doi.org/10.1090/memo/0319>. – DOI 10.1090/memo/0319. – ISSN 0065–9266
- [183] URBAN, D. ; MAYERL, J.: *Regressionsanalyse: Theorie, Technik und Anwendung*. VS Verlag, Wiesbaden, 2. Auflage, 2006. – ISBN 3–531–33739–4
- [184] FAHRMEIR, L.: *Regression: models, methods and applications*. Springer Science and Business Media, 2013. – ISBN 978–3–642–34332–2
- [185] FAHRMEIR, L. ; KÜNSTER, R. ; PIGOT, I. ; TUTZ, G.: *Statistik. Der Weg zur Datenanalyse*. Springer Spektrum, Berlin, Heidelberg, 8. Auflage, 2016. – ISBN 978–3–662–50371–3
- [186] HARTUNG, J. ; ELPELT, B. ; KLÖSENER, K.-H.: *Statistik: Lehr- und Handbuch der angewandten Statistik*. De Gruyter Oldenbourg, 15. Auflage, 2009. – ISBN 978–3486590289
- [187] AHRENS ; JAMES ; GEVECI ; BERK ; LAW ; CHARLES: ParaView: An End-User Tool for Large Data Visualization, Visualization Handbook. In: *Elsevier, 2005* (2005). ISBN 978–0123875822
- [188] UNIVERSITÄT HAMBURG: <https://www.mi.uni-hamburg.de/de.html>

- [189] *Bundesanstalt für Materialforschung und -Prüfung (BAM), Fachbereich Chemische Sicherheitstechnik/ Explosionsschutz Gase, Stäube*. 2020
- [190] ZINKE, R. ; WOTHE, K. ; KÖHLER, F. ; DURAREV, D. ; GÖTZE, O. ; KRAUSE, U.: Uncertainty consideration in CFD-models via response surface modelling: application on realistic dense and light gas dispersion simulations. In: *submitted to Journal of Loss Prevention in the Process Industries* (2021)
- [191] ZINKE, R. ; KÖHLER, F.: *Emissionen leichtflüchtiger Kohlenwasserstoffe aus Schwimmdachtanks und deren lokale Ausbreitung: Betrachtungen zum bestimmungsgemäßen Betrieb und im Schadenfall*. Berufsgenossenschaft Rohstoffe, Chemische Industrie (BG-RCI), 2019
- [192] KÖHLER, F. ; ZINKE, R.: *Forschungsbericht 793 - Ermittlung explosionsgefährdeter Bereiche bei Tankanlagen*. DGMK (Deutsche Wissenschaftliche Gesellschaft für Erdöl, Erdgas und Kohle e.V.), 2017. – ISBN 978-3-941721-84-5
- [193] ZINKE, R ; VIROTHI, N. ; KÖHLER, F. ; KLIPPEL, A. ; SCHALAU, S. ; KRAUSE, U.: Experimental measurement of initial evaporation mass flows from gasoline spills and comparison with empirical models. In: *Process Safety Progress* 39 (2020), Nr. e12128. <http://dx.doi.org/10.1002/prs.12128>. – DOI 10.1002/prs.12128. – ISSN 10668527
- [194] ZINKE, R. ; KÖHLER, F.: Explosive gas area classifications at gasoline storage tanks: A project presentation. In: *5. MBET* 5 (2017). ISBN 978-3-00-056201-3
- [195] ZINKE, R. ; KÖHLER, F. ; KRAUSE, U.: Long-term emission measurements at a floating roof tank for gasoline storage. In: *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 55 (2018), S. 152–161. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jlp.2018.05.004>. – DOI 10.1016/j.jlp.2018.05.004
- [196] ZINKE, R. ; KÖHLER, F. ; KLIPPEL, A. ; KRAUSE, U. ; LEITL, B.: Emissions of volatile hydrocarbons from floating roof tanks and their local dispersion: Considerations for normal operation and in case of damage. In: *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 66 (2020), S. 104179. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jlp.2020.104179>. – DOI 10.1016/j.jlp.2020.104179
- [197] DRÄGER: *DrägerSensor DUAL IR Ex/CO 2 68 11 960*. <https://www.draeger.com>. Version: 2018
- [198] *RAE Systems Inc: Photoionization Detector ppb-RAE 3000*. 2018
- [199] VDI/DIN-KOMMISSION REINHALTUNG DER LUFT (KRDL) - NORMENAUSSCHUSS: *VDI 3479 - Emissionsminderung - Raffinerieferne Mineralöltanklager*. 2010-08
- [200] Risk Assessment Data: storage incident frequencies Report. In: *OGP* 434 (2010)
- [201] Lastfire Project: Fire Related Risks of Floating Roof Tanks. (1997)
- [202] *LASTFIRE Public Presentation auf <http://www.lastfire.co.uk/refmatpapers.aspx?id=9>*. 2018
- [203] CHANG, J. I. ; LIN, C.-C.: A study of storage tank accidents. In: *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 19 (2006)
- [204] MOSHSHAEI, P. ; ALIZADEH, S. S. ; KHAZINI, L. ; JAFARABADI, M. A.: Investigate the Causes of Fires and Explosions at External Floating Roof Tanks: A Comprehensive Literature Review. In: *Journal of Failure Analysis and Prevention* (2017), S. 1044–1052

- [205] PERSSON, H. ; LÖNNERMARK, A.: Tank Fires: Review of fire incidents 1951–2003, BRANDFORSK Project 513-021. In: *Swedish National Testing and Research Institute SP Report* (2004)
- [206] EWTL, Windkanallabor der Universität Hamburg. <https://www.mi.uni-hamburg.de/arbeitsgruppen/windkanallabor.htm>. – [Online; Stand 10. April 2021]
- [207] VDI/DIN-KOMMISSION REINHALTUNG DER LUFT (KRDL) - NORMENAUSSCHUSS: *VDI 3783 Blatt 12:2000-12 - Environmental meteorology - Physical modelling of flow and dispersion processes in the atmospheric boundary layer - Application of wind tunnels*
- [208] INGENIEURBÜRO JANICKE: *AUSTAL2000 - Programmbeschreibung zu Version 2.6 (Stand 2014-06-26)*. 2014
- [209] FINGAS, M. F.: *Handbook of Oil Spill Science and Technology*. John Wiley & Sons, 2015
- [210] *Ausgangspunkt (Idee) der Betrachtungen sind unveröffentlichte Arbeiten vom Ingenieurbüro Imhof GmbH (<https://www.imhof-tanktechnik.de/>)*. 2018
- [211] INGENIEURBÜRO IMHOF GMBH: *Workshop Floating Roof Seals*. 2016
- [212] SUTTON, O. G.: Wind structure and evaporation in a turbulent atmosphere. In: *Proceedings of the Royal Society of London A146* (1934), Nr. 858, S. 701. <http://dx.doi.org/10.1098/rspa.1934.0183>. – DOI 10.1098/rspa.1934.0183. – ISSN 0950–1207
- [213] PASQUILL, F.: Evaporation from a plane, free liquid surface into a turbulent air Stream. In: *Proceedings of the Royal Society of London A182* (1943), Nr. 988, S. 75. <http://dx.doi.org/10.1098/rspa.1943.0024>. – DOI 10.1098/rspa.1943.0024
- [214] DEUTSCH, S.: *Verdunstung aus Flüssigkeitslachen unter atmosphärischen Bedingungen*, Universität Dortmund, Diss., 1995
- [215] BRIGHTON, P. W. M.: Evaporation from a plane liquid surface into a turbulent boundary layer. In: *Journal of Fluid Mechanics* 159 (1985), Nr. -1, S. 323. <http://dx.doi.org/10.1017/S0022112085003238>. – DOI 10.1017/S0022112085003238. – ISSN 0022–1120
- [216] LEBUSER, U.: *Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Verdunstung aus Flüssigkeitslachen*, Universität Dortmund, Diss., 1989
- [217] MACKAY, D. ; MATSUGU, R. S.: Evaporation rates of liquid hydrocarbon spills on land and water. In: *Canadian Journal of Chemical Engineering* 51 (1973), S. 434. <http://dx.doi.org/10.1002/cjce.5450510407>. – DOI 10.1002/cjce.5450510407
- [218] CLANCEY, J. V.: The evaporation and dispersion of flammable liquid spillages. In: *Chemical Process hazards Conference* (1974), S. 80
- [219] ZHU, L. ; CHEN, J. ; GENG, R. ; YU, J.: Experimental analysis of evaporation process for gasoline. In: *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 25 (2012), S. 916–922
- [220] OKAMOTO, K. ; WATANABE, N. ; HAGIMOTO, Y. ; MIA, K. ; OHTANI, H.: Evaporation characteristics of multi-component liquid. In: *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 23 (2010), S. 89–97
- [221] OKAMOTO, K. ; WATANABE, N. ; HAGIMOTO, Y. ; MIA, K. ; OHTANI, H.: Changes in evaporation rate and vapor pressure of gasoline with progress of evaporation. In: *Fire Safety Journal* 44 (2009), 756–763. <https://doi.org/10.1016/j.firesaf.2009.03.004>

- [222] OKAMOTO, K. ; HIRAMATSU, M. ; HINO, T. ; OTAKE, T. ; OKAMOTO, T. ; HONMA, M. ; WATANABE, N.: Evaporation characteristics of ETBE-blended gasoline. In: *Journal of Hazardous Materials* 287 (2015), S. 151–161
- [223] OKAMOTO, K. ; HIRAMATSU, M. ; MIYAMOTO, H. ; HINO, T. ; HONMA, M. ; WATANABE, N. ; MIA, K. ; OHTANI, H.: Evaporation and diffusion behaviour of fuel mixtures of gasoline and kerosene. In: *Fire Safety Journal* 49 (2012), S. 47–61
- [224] HILPERT, M. ; BREYSSE, P. N.: Infiltration and evaporation of small hydrocarbon spills at gas stations. In: *Journal of Contaminant Hydrology* 170 (2014), S. 39. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jconhyd.2014.08.004>. – DOI 10.1016/j.jconhyd.2014.08.004
- [225] AL ZUBAIDY, I. ; ALSANEA, O. ; IBRAHIM, S. ; SAEED, Y. ; TURKI, R. ; ALHAMMADI, A.: Diffusion coefficients of UAE gasoline as input to some environmental transport or risk assessment. In: *Journal of Clean Energy Technology* 1 (2013), S. 49–51
- [226] SPRINGER BERLIN HEIDELBERG: *Gesellschaft, VDI: VDI-Wärmeatlas. 10. Aufl.* 2005
- [227] GANT, S. E. ; T., Atkinson G.: *CFD for Reconstruction of the Buncefield Incident.* Wiley-VCH Verlag, 2012. – ISBN 978–3–527–33027–0
- [228] *Caribbean Petroleum Refining Tank Explosion and Fire, final report of the CSB investigation.* <https://www.csb.gov/caribbean-petroleum-refining-tank-explosion-and-fire/>. Version: 2015. – [Stand, 01.03.2019]
- [229] BURG, K. ; HAF, H. ; WILLE, F. ; MEISTER, A.: *Partielle Differentialgleichungen und funktionalanalytische Grundlagen.* Version: 2009. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-8348-9589-9>. – DOI 10.1007/978–3–8348–9589–9
- [230] JONES, R. ; LEHR, W. ; SIMECEK-BEATTY, D. ; REYNOLDS, R. M.: *ALOHA (Areal Locations of Hazardous Atmospheres) 5.4.4: Technical Documentation.* U. S. Dept. of Commerce, NOAA Technical Memorandum NOS OR&R 43. Seattle, WA: Emergency Response Division, NOAA. 96 pp, 2013
- [231] EPA: *ALOHA Software.* <https://www.epa.gov/cameo/aloha-software>. Version: 2020. – [Online; Stand 9. September 2020]
- [232] BRUTSAERT, W.: *Evaporation into the Atmosphere: Theory, History and Applications.* Version: 1982. <http://dx.doi.org/10.1007/978-94-017-1497-6>. – DOI 10.1007/978–94–017–1497–6. ISBN 978–90–277–1247–9

A. Begründung des Modells von Britter-McQuaid mittels Dimensionsanalyse

Im Folgenden soll ein Schwergasausbreitungsmodell nach R. E. Britter und J. McQuaid [34] näher vorgestellt werden. Es wird hier jedoch nur der Modellansatz besprochen, mit dem die Ausbreitung einer Schwergasfreisetzung in Windrichtung unter stationären Bedingungen berechnet werden kann. Für die Beschreibung der Ausbreitung von schweren Gasen im urbanen Raum oder bei starker orographischer Gliederung bzw. hindernisreichen Gebieten (Innenstadt, Gebirge, Wald) ist das Modell nicht geeignet.

Sind die freigesetzten Gase schwerer als Luft und in hoher Konzentration vorhanden, so zeigen diese in Abhängigkeit der Freisetzungsbedingungen ein gravitationsgetriebenes Absinken in der Anfangsphase der Ausbreitung. Eine Advektions-Diffusions-Gleichung zur Beschreibung eines passiven Mittransportes in der Luftströmung beschreibt die Beobachtungen nicht. Der gravitative Einfluss hat in der Regel eine massive lokale Störung der turbulenten Luftströmung im Ausbreitungsgebiet zur Folge, was eine gesonderte Modellierung erfordert.

Einfache und brauchbare empirische Näherung liefert die Dimensionsanalyse. Alternativ müssen (recht aufwändige) CFD-Simulationen durchgeführt werden.

A.1. Vorbetrachtung: Dimensionsanalyse

Viele Modellansätze basieren auf direkten mathematischen Modellierungen der für das Verhalten des Systems relevanten physikalischen Prozesse. Die hierbei aufgefundenen Gleichungssysteme müssen dann zum Auffinden wichtiger Systemeigenschaften gelöst werden, was unter Umständen nur numerisch (oder gar nicht) gelingt. Um zu analytischen Anwendungen zu gelangen, kann man ausnutzen, dass korrekte physikalische Formeln eine wohldefinierte dimensionshomogene Gestalt haben müssen. So können funktionale Zusammenhänge zwischen den unabhängigen Variablen gefunden werden, ohne die für dieses Problem relevanten Grundgleichungen aufstellen und lösen zu müssen. Mathematische Grundlage für diese Verfahrensweise ist das Π -Theorem [125]:

$$y \stackrel{!}{=} f(x_1, x_2, \dots, x_n) \Rightarrow y = x_1^{k_1} x_2^{k_2} \dots x_n^{k_n} h(\Pi_1, \dots, \Pi_d) \quad (\text{A.1})$$

$$(a_{ij})_{\substack{i=1\dots n \\ j=1\dots p}}, \{M_1, \dots, M_p\} - \text{System}, d=n-r, r = \text{Rang}(a_{ij}) \quad (\text{A.2})$$

Hierbei sind die x_1, \dots, x_n Maßzahlen von n physikalischen Größen und (a_{ij}) die Dimensionsmatrix bezüglich des Grundgrößensystems $\{M_1, \dots, M_p\}$.

Physikalisch zu begründen ist der Ansatz $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, was oft intuitiv erfolgen kann. Der Ansatz liefert bei Erfolg jedoch nur eine dimensionsrichtige Gestalt der Gleichung. Über physikalische Gültigkeitsbereiche und darüber, ob alle wesentlichen Einflussfaktoren berücksichtigt wurden, kann er keine Auskunft geben.

Die Π_1, \dots, Π_d bilden ein Fundamentalsystem dimensionsloser Potenzprodukte der x_1, \dots, x_n . Das ursprüngliche Problem des Auffindens eines problembeschreibenden analytischen Ausdrucks reduziert sich somit auf die Bestimmung der Funktion $h(\Pi_1, \dots, \Pi_d)$. Im Extremfall ist h einfach eine unbestimmte Konstante, im Allgemeinen jedoch eine durch Anpassung an empirische Daten zu bestimmende Funktion.

Für die Wahl der dimensionslosen Potenzprodukte der unabhängigen Variablen gibt es auf-

grund möglicher Unterbestimmtheit Wahlfreiheit, sodass oft problemtypische, dimensionslose Kennzahlen gewählt werden (z. B. Richardsonzahl, Schmidtzahl, Sherwoodzahl, Reynoldszahl, ...). Diese Anwendung des Π -Theorems zusammen mit dem Experiment stellt in vielen Ingenieurbereichen den zentralen Kern (siehe auch die Lachenverdunstungsmodelle in Anhang C). Folgende Ergänzungen und Ausführungen sind nützlich:

- Ist der Ansatz $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ unmöglich, d.h. die physikalische Größe y kann keine Funktion der physikalischen Größen x_1, x_2, \dots, x_n sein, so scheitert die Dimensionsanalyse. Ist die Dimensionsanalyse dagegen erfolgreich, so ist dennoch keine Aussage über die physikalische Anwendbarkeit des gewonnenen Zusammenhanges gegeben. Dies kann nur experimentell untersucht werden.
- Die Exponenten k_1, \dots, k_n hängen von verwendeten Grundgrößensystem ab. Das Potenzprodukt $x_1^{k_1} \cdot \dots \cdot x_n^{k_n}$ sorgt für die richtige Dimension von y .
- $y(\Pi_1, \dots, \Pi_d)$ ist eine Funktion dimensionsloser, unabhängiger Potenzprodukte Π_1, \dots, Π_d mit $\Pi_j = x_1^{r_{j1}} x_2^{r_{j2}} \cdot \dots \cdot x_n^{r_{jn}}$, $[\Pi_j] = 1, \forall j = 1, \dots, d$.
- Wählt man sein M_1, M_2, \dots, M_p - System von p unabhängigen Maßzahlen physikalischer Größen, so kann mittels dieses Systems die Dimension der x_k , ($k = 1, \dots, n$), mit Hilfe der Dimensionsmatrix (a_{ij}) dargestellt werden:

$$\begin{array}{c|cccc} & M_1 & M_2 & \dots & M_p \\ \hline x_1 & \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1p} \\ x_2 & \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2p} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ x_n & \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & & \alpha_{np} \end{array} \implies (a_{ij}) = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1p} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2p} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \dots & \alpha_{np} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

- Wählt man ein Basissystem $\{M_1, M_2, \dots, M_p\}$, so gilt für jede in diesem Basisraum definierte Größe y :

$$[y] = M_1^{y_1} M_2^{y_2} \cdot \dots \cdot M_p^{y_p} \quad \text{und} \quad [x_j] = M_1^{\alpha_{j1}} M_2^{\alpha_{j2}} \cdot \dots \cdot M_p^{\alpha_{jp}}. \quad (\text{A.4})$$

Damit folgt:

$$\begin{aligned} [y] &= [x_1]^{k_1} [x_2]^{k_2} \cdot \dots \cdot [x_n]^{k_n} \\ &= \left(M_1^{\alpha_{11}} M_2^{\alpha_{12}} \cdot \dots \cdot M_p^{\alpha_{1p}} \right)^{k_1} \cdot \left(M_1^{\alpha_{21}} \cdot \dots \cdot M_p^{\alpha_{2p}} \right)^{k_2} \cdot \dots \cdot \left(M_1^{\alpha_{n1}} \cdot \dots \cdot M_p^{\alpha_{np}} \right)^{k_n} \\ &= M_1^{k_1 \alpha_{11}} M_1^{k_2 \alpha_{21}} \cdot \dots \cdot M_1^{k_n \alpha_{n1}} \cdot \dots \cdot M_p^{k_1 \alpha_{1p}} M_p^{k_2 \alpha_{2p}} \cdot \dots \cdot M_p^{k_n \alpha_{np}}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Schreibt man also $(y_1, y_2, \dots, y_n) = \vec{y}$ und sei $A = (a_{ij})$, so folgt, dass der gesuchte Vektor \vec{k} Lösung des inhomogenen Gleichungssystems $A^T \vec{k} = \vec{y}$ und die dimensionslosen Potenzprodukte Lösungen eines homogenen Gleichungssystem $A^T \vec{r} = 0$ sind.

A.2. Grundgrößen des Modells

Im Modell werden plötzliche und kontinuierliche Freisetzen unterschieden. Hier soll allerdings nur der Fall einer kontinuierlichen Freisetzung diskutiert werden. Folgende Größen werden benötigt:

- Freisetzungsrates q_0 des Schwergases, $[q_0] = L^3 T^{-1}$

- Windgeschwindigkeit u in einer Höhe von $h = 10 \text{ m}$, $[u] = LT^{-1}$
- Auftriebsfaktor g_0 , $[g_0] = LT^{-2}$
- Freisetzungszeit R_d , $[R_d] = T$
- Schwergasdichte ρ_g , $[\rho_g] = ML^{-3}$
- Umgebungsluftdichte ρ_a , $[\rho_a] = ML^{-3}$
- Entfernung zur Quelle x , $[x] = L$
- Gaskonzentration (Anteil) c , $[c] = 1$ (Volumenanteil; $c = 1$ entspricht 100 %)

Mittels der Freisetzungszeit R_d und der Freisetzungsrate q_0 des Schwergases kann auch ein Freisetzungsvolumen V_0 berechnet werden:

$$V_0 = R_d q_0. \quad (\text{A.6})$$

Damit ist es grundsätzlich möglich, eine Freisetzung kontinuierlich oder plötzlich zu betrachten, etwa wenn die Freisetzungsumstände unklar sind. Man könnte in strittigen Fällen auch beide Szenarien rechnen und das konservativere Resultat für die Bewertung verwenden.

A.3. Britter-McQuaid-Modell, kontinuierlicher Fall

Zunächst sei angenommen, dass aus einer Quelle ein Schwergas kontinuierlich ausströmt und sich bodennah ausbreitet. Die Hauptausbreitungsrichtung wird die Windrichtung sein. Handelt es sich um ein endzündbares oder giftiges Gas, so interessiert man sich für die kritische Distanz zur Quelle in Windrichtung, oberhalb derer eine Zündfähigkeit oder Toxizität nicht mehr gegeben ist. Ist x_c die Entfernung in Windrichtung zur Quelle, wo die Konzentration c (in %) vorliegt so kann man ansetzen:

$$x_c = f(q_0, u, g_0). \quad (\text{A.7})$$

Ein einfacherer Ansatz ist nicht mehr zweckmäßig. Als beschreibendes System zum Aufstellen der Dimensionsmatrix genügt in diesem Fall ein $\{L, T\}$ -System:

$$\begin{array}{c|cc} & L & T \\ \hline q_0 & 3 & -1 \\ u & 1 & -1 \\ g_0 & 1 & -2 \\ \hline x_c & 1 & 0 \end{array} \implies (a_{ij}) = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 1 & -1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.8})$$

Der Rang der Matrix (a_{ij}) ist $r = 2$ womit folgt: $d = 1$. Man benötigt eine dimensionslose Kombination der Variablen q_0, u, g_0 . Die zugehörigen Gleichungssysteme kann man ableiten aus:

$$L^0 T^0 = L^{3r_1} T^{-r_1} L^{r_2} T^{-r_2} L^{r_3} T^{-2r_3} \quad (\text{Bestimmung von } \vec{r}) \quad (\text{A.9})$$

$$L^1 = L^{3k_1} T^{-k_1} L^{k_2} T^{-k_2} L^{k_3} T^{-2k_3} \quad (\text{Bestimmung von } \vec{k}) \quad (\text{A.10})$$

Es folgt zunächst für die Bestimmung von \vec{r} :

$$0 = 3r_1 + r_2 + r_3 \quad (\text{A.11})$$

$$0 = -r_1 - r_2 - 2r_3 \quad (\text{A.12})$$

$$\Rightarrow r_1 = 1(\text{gewählt}), \quad r_2 = -5, \quad r_3 = 2 \Rightarrow \underline{\underline{\Pi = \frac{g_0^2 q_0}{u^5}}}. \quad (\text{A.13})$$

Für die Bestimmung von \vec{k} folgt:

$$1 = 3k_1 + k_2 + k_3 \quad (\text{A.14})$$

$$0 = -k_1 - k_2 - 2k_3 \quad (\text{A.15})$$

$$\Rightarrow k_1 = \frac{1}{2}, \quad k_2 = -\frac{1}{2}, \quad k_3 = 0 \Rightarrow x_c = \sqrt{\frac{q_0}{u}} h \left(\frac{q_0^2 g}{u^5} \right). \quad (\text{A.16})$$

Britter und McQuaid wählten $\sqrt[5]{\Pi}$ für ihre dimensionslose Konstante, was die Funktion h beeinflusst (aber dennoch soll hier keine Umbenennung der Funktion erfolgen), also:

$$x_c = \sqrt{\frac{q_0}{u}} h \left(\sqrt[5]{\frac{g_0^2 q_0}{u^5}} \right). \quad (\text{A.17})$$

Die unbekannte Funktion h wurde experimentell durch zahlreiche Labor- und Freilandversuche für viele Werte von Π bestimmt und validiert. Für Details hierzu sei erneut auf die Originalarbeit [34] verwiesen.

Bemerkungen

Man erkennt, dass es unendlich viele Lösungen zu beiden Gleichungssystemen gibt. Hier wurde z. B. die Richardson-Zahl $\sqrt[5]{\Pi}$ aus dem ursprünglichen Π gewählt. Untersucht man typische Größenbereiche von g_0 , q_0 und u , so findet man für $g_0 = 0 \text{ m s}^{-2}$ bis 10 m s^{-2} , für $q_0 = 0 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ bis $10 \cdot 10^3 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ und für $u = 0 \text{ m s}^{-1}$ bis 10 m s^{-1} , womit $\Pi = 0$ bis $10 \cdot 10^5$ (typische Werte) folgt. Durch die fünfte Wurzel engt man das Intervall wieder auf den Bereich von null bis etwa zehn ein, was für praktische Darstellungen günstig ist. In Abbildung A.1 ist die experimentell bestimmte Funktion h für kontinuierliche Freisetzen gezeigt. Bei dieser Figur handelt es sich nicht um die Originalfigur aus [34], sondern um eine Neuanpassung (Vektorgrafik) zum Zwecke höherer Auflösung.

Hätte man die Freisetzung q_0 nicht in Kubikmeter je Sekunde angegeben, sondern in Kilogramm je Sekunde, würde das Grundgrößensystem um eine Grundgröße wachsen. Man würde also in diesem Fall ein $\{M, L, T\}$ -System auswählen:

$$\begin{array}{c|ccc} & M & L & T \\ \hline q_0 & 1 & 0 & -1 \\ u & 0 & 1 & -1 \\ g_0 & 0 & 1 & -2 \\ \hline x_c & 0 & 1 & 0 \end{array} \Rightarrow (a_{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.18})$$

Der Rang der Matrix (a_{ij}) ist nun $r = 3$ womit folgt: $d = 0$. Man hätte keine dimensionslose Kombination der Variablen q_0, u, g_0 zu bilden und es wäre nur die experimentelle Anpassung einer Konstanten erforderlich. Hier zeigt jedoch der Vergleich zum Experiment, dass der Anpassungsspielraum für diesen Ansatz zu eingeschränkt ist, um brauchbar zu sein. Das zeigt, dass es für die Dimensionsanalyse zahlreiche Ausführungsvarianten gibt, die man nach Zweckmäßigkeit auswählt.

Für die Beschreibung plötzlicher Freisetzen kann im Prinzip wie zuvor vorgegangen werden. Es wird angenommen, dass plötzlich ein bestimmtes Volumen V_0 schlagartig freigesetzt werde:

$$x_c = f(V_0, u, g_0). \quad (\text{A.19})$$

Auf eine Angabe der Ergebnisse soll hier verzichtet werden.

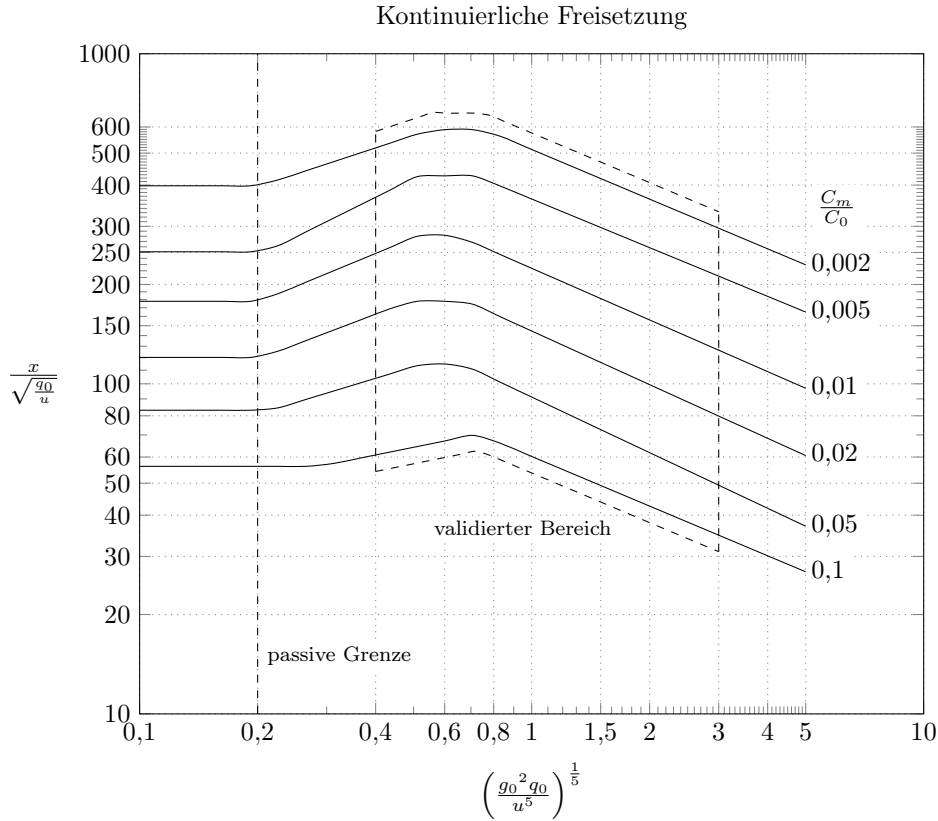


Abbildung A.1: Kennzahlendiagramm nach dem Britter-McQuaid-Modell für eine kontinuierliche Freisetzung [34] (modifiziert).

Alternativ zur Abbildung A.1 wurden die Kurven in den Diagrammen stückweise linear approximiert und die zugehörigen Gleichungen tabelliert. Dazu wird zunächst ein Koeffizient α berechnet:

$$\alpha = \frac{1}{5} \log_{10} \left(\frac{q_0 g_0^2}{u^5} \right), \quad (\text{kontinuierliche Freisetzung}) \quad (\text{A.20})$$

Je nach Größe von α wird ein zugehöriger Geradenabschnitt ausgewählt und eine Größe β bestimmt:

$$\beta = \log_{10} \left(\frac{x}{\sqrt{\frac{q_0}{u}}} \right), \quad (\text{kontinuierliche Freisetzung}) \quad (\text{A.21})$$

Die Gleichungen für β können nach x umgestellt werden, womit letztendlich die zugehörige Entfernung in Windrichtung für eine gesuchte Konzentration bestimmt werden kann. Die Approximation der Kurvenverläufe der Diagramme sind in Tabelle A.1 angegeben.

Erweiterte Ansätze, die auch in der VDI 3783 Blatt 2 [35] beschrieben werden, berücksichtigen zusätzliche Einflussgrößen (Temperatur, charakteristische Längen, Stoffeigenschaften):

$$x_c = f(x, y, z, \rho_g, \eta_0, V_0, h_0, z_0, L_1, \dots, L_n, T). \quad (\text{A.22})$$

Diese sind dimensionsanalytisch und experimentell aufwändiger, funktionieren aber im Prinzip genauso wie die obigen Betrachtungen. Damit ist es möglich, die unbekannt Funktionen auch an komplexere Ausbreitungsbedingungen wie z. B. quellnahe Wände (vor oder hinter der Quelle) oder Ausbreitungen in Schluchten zu betrachten. Für weitere Details sei hier auf die Richtlinie VDI 3783 Blatt 2 verwiesen.

Tabelle A.1: Übersicht über die Koeffizienten α und β zur Approximation der Kurvenverläufe aus der Abbildung A.1, abhängig von der Konzentration c_m (die Konzentration des unverdünnten Gases sei $c_0 = 1$) [34].

kontinuierliche Freisetzung		
Konzentrationsverhältnis $\frac{c_m}{c_0}$	$\alpha = \log_{10} \left(\frac{q_0 g_0^2}{u^5} \right)^{\frac{1}{5}}$	$\beta = \log_{10} \left(\frac{x}{\sqrt{\frac{q_0}{u}}} \right)$
0,1	$\alpha \leq -0,55$	1,75
	$\alpha \in (-0,55; -0,14]$	$0,24\alpha + 1,88$
	$\alpha \in (-0,14; 1,00]$	$-0,50\alpha + 1,78$
0,05	$\alpha \leq -0,68$	1,92
	$\alpha \in (-0,68; -0,29]$	$0,36\alpha + 2,16$
	$\alpha \in (-0,29; -0,18]$	2,06
0,02	$\alpha \leq -0,69$	2,08
	$\alpha \in (-0,69; -0,31]$	$0,45\alpha + 2,39$
	$\alpha \in (-0,31; -0,16]$	2,25
0,01	$\alpha \leq -0,70$	2,25
	$\alpha \in (-0,70; -0,29]$	$0,49\alpha + 2,59$
	$\alpha \in (-0,29; -0,20]$	2,45
0,005	$\alpha \leq -0,67$	2,40
	$\alpha \in (-0,67; -0,28]$	$0,59\alpha + 2,80$
	$\alpha \in (-0,28; -0,15]$	2,63
0,002	$\alpha \leq -0,69$	2,60
	$\alpha \in (-0,69; -0,25]$	$0,39\alpha + 2,872$
	$\alpha \in (-0,25; -0,13]$	2,77
	$\alpha \in (-0,13; 1]$	$-0,50\alpha + 2,71$

B. Herleitung und Lösung der Advektions-Diffusionsgleichung für das Gaußsche Ausbreitungsmodell

Das in Kapitel 5 betrachtete Gaußmodell für die Ausbreitung leichter oder dichteneutraler Gase hergeleitet und in seiner Relevanz soll hier begründet werden. Wie bei der zuvor betrachteten Schwergasausbreitung ist auch dieses Modell ein Ausgangspunkt einer weitreichenden Modellklasse der Gaußschen Schadstoffausbreitungsmodelle, welche mit der VDI 3783 Blatt 1 [33] derzeit noch den Stand der Technik wiedergeben.

Grundannahme ist der passive Mittransport von freigesetzten Gasen mit einer Luftströmung. Grundsätzlich findet man, dass die Luftströmung beeinflusst wird durch:

- Wetter (Windgeschwindigkeit, Windrichtung, Temperatur, Niederschlag, Sonneneinstrahlung)
- Gelände (Gebäude, Wasser-/ Wiesenflächen, Gebirge)
- Quelle (Art und Höhe der Quelle, Auftrieb durch erhöhte Gastemperatur, Anfangsimpuls, Konzentration der Schadstoffe)
- Physikalisch und chemische Besonderheiten der Freisetzung (Reaktivität, Löslichkeit)

Die Atmosphäre kann als stets turbulent und chaotisch charakterisiert werden. Selbst bei konstanten Wetter- und Umgebungsbedingungen werden Schadstoffe eine fluktuierende Konzentrationen aufweisen, was man z. B. optisch gut an der schwankenden Form typischer Abgasfahnen erkennen kann. Ebenfalls soll hier festgehalten werden, dass nicht alle der oben genannten Effekte in jedem Leicht- bzw. Neutralgasausbreitungsmodell enthalten sind. Vom mathematischen Standpunkt aus wäre ein solches Modell sehr komplex, da die Beschreibung des turbulenten Strömungsfeldes bereits die Navier-Stokes-Gleichungen beinhaltet (CFD-Problem) und dann nur numerisch zugänglich ist. Zahlreiche sinnvolle Problemstellungen lassen sich aber mit einem einfacheren Modell beantworten. Zu einer gegenüber den CFD-Modellen vereinfachten mathematischen Beschreibung kann man gelangen, wenn man neben einer hinreichend einfachen Darstellung für die mittlere Quelledichte \bar{q} des Stoffes eine freie Ausbreitung betrachtet. Modelliert man hier den mittleren Einfluss des Strömungsfeldes $\vec{v}(\vec{x}, t)$ in einem Advektionsterm und den mittleren Einfluss der Turbulenzen in einem turbulenten Diffusionsterm, so erhält man eine Advektions-Diffusions-Gleichung für die mittlere Konzentration $\bar{c}(\vec{x}, t)$:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{c} \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{k} \nabla \bar{c} = \bar{q}. \quad (\text{B.1})$$

Der Vektor k beschreibt den turbulenten Diffusionskoeffizienten und ist ein Maß für die durch die turbulenten Fluktuationen hervorgerufene Beweglichkeit der Teilchen. Für praktische Anwendungen wird üblicherweise das Turbulenzverhalten der Atmosphäre (atmosphärische Stabilitätsklassen) in Abhängigkeit von Wetterbedingungen und Tageszeit in Klassen eingeteilt und \vec{k} entsprechend ausgewählt.

Für einfache Quelledichten, z. B. einer Punktquelle und einer eindimensionalen stationären Luftströmung, kann die lineare, homogene, partielle Differentialgleichung 2. Ordnung (B.1) analytisch gelöst werden. Das stationäre Konzentrationsprofil orthogonal zur Windrichtung verhält

sich gemäß einer Gaußschen Normalverteilung, wobei die Varianz der Verteilung vom turbulenten Diffusionskoeffizienten in dieser Raumrichtung abhängig ist. Dieses Verhalten ist typisch und damit namensgebend für die Vertreter der Modelle in dieser Gruppe. Eine grafische Veranschaulichung der Lösung zeigt Abbildung B.1.

Im stationären Fall hat sich die Bezeichnung Gauß-Fahnen-Modelle (Gaussian Plume Model [157]) etabliert. Verbesserungen der Genauigkeit und einfache Mitberücksichtigung von Hindernisstrukturen lassen sich erreichen, wenn man die Advektions-Diffusionsgleichung numerisch löst. Durch zusätzliche Verwendung von Zeitreihen für die Parameter, welche die Ausbreitung steuern, kann auch quasi-instationär gerechnet werden, indem die zu einem Zeitpunkt ausgestoßenen Wolken als unabhängige Entitäten betrachtet werden. Zielkonzentrationen stellen dann einen Ensemblemittelwert dar. Hierfür verwendet man auch die Bezeichnung Gauß-Wolken-Modelle (Gaussian Puff Model [157]). Diese sind insbesondere für kleine Windgeschwindigkeiten genauer und können auch Konzentrationen entgegen der Windrichtung vorhersagen, falls die atmosphärische Turbulenz entsprechend stark ist. Des Weiteren können örtliche und zeitliche Änderungen des Windes erfasst werden, woraus sich weitere Vorteile ergeben.

Numerische Ansätze zu Gaußschen Gasausbreitungsmodellen werden z. B. in der VDI3783 Blatt 1 [33] beschrieben. Ein umfangreiches Lehrbuch, das sich detailliert der Gaußschen Schadstoffausbreitung widmet ist [157], welches für diesen Abschnitt ebenso herangezogen wurde.

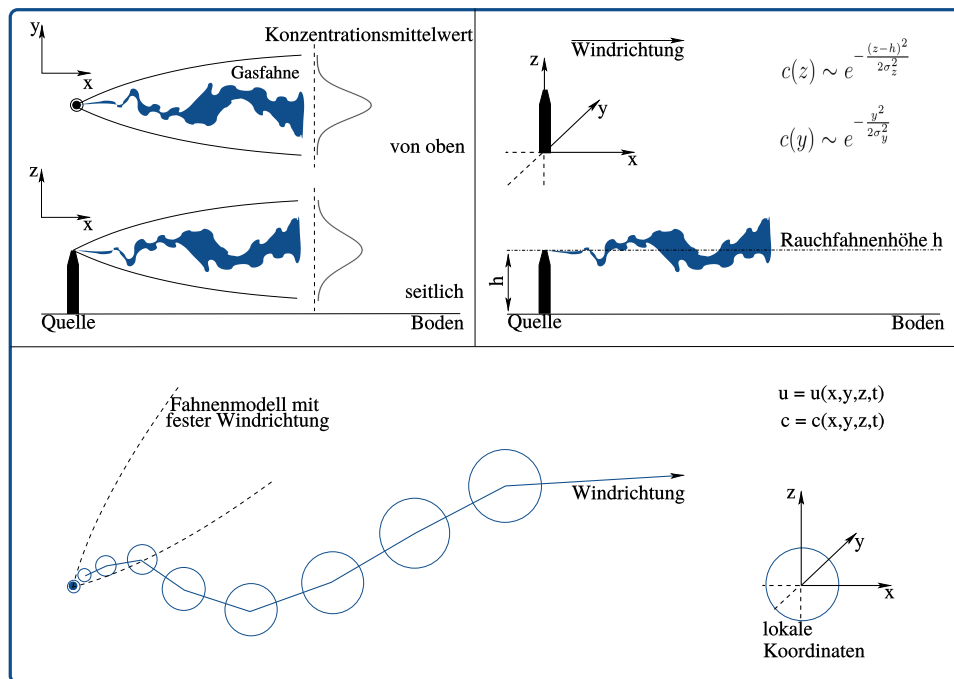


Abbildung B.1: Illustration zur Gaußschen Schadstoffausbreitung; oben: Gauß-Fahnen-Modell, unten: Gauß-Wolken-Modell.

Zusammenfassend lässt sich zu Gaußmodellen festhalten:

- **Berücksichtigt bzw. implementierbar:** Windgeschwindigkeit und einfache Windprofile, atmosphärische Stabilität und Temperaturinversionen, Quellüberhöhung und sehr einfache Hindernisstrukturen.
- **Anwendungsgrenzen:** Komplexe Hindernisstrukturen, Orographie und große Entfernungen zur Quelle.
- **Anwendungsbereiche:** Screening zur Erstabschätzung, Analyse von Haupteinflussfaktoren, Zulassung und Genehmigungsfragen bei der Störfallfreisetzung dichteneutraler oder leichter Gase [33].

Aufgrund der Einfachheit werden Gaußsche Gasausbreitungsmodelle häufig angewendet und in zahlreiche Sicherheitssoftwarepakete implementiert.

B.1. Herleitung und Lösung der Ausbreitungsgleichung

B.1.1. Herleitung der Ausbreitungsgleichung

Zunächst sei $c(\vec{x}, t) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ein differenzierbares (oder ein zumindest hinreichend glattes) skalares Feld, das die Konzentration der Schadstoffe beschreiben möge. Der Transport der Schadstoffe möge durch eine Strömung stattfinden, für die gilt: $\vec{v}(\vec{x}, t) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$.

Für jedes materielle Volumen $\Omega(t)$ gilt dann der Reynoldssche Transportsatz¹

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} c(\vec{x}, t) d\Omega = \int_{\Omega(t)} \frac{\partial c(\vec{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (c(\vec{x}, t) \vec{v}(\vec{x}, t)) d\Omega. \quad (\text{B.2})$$

Handelt es sich bei $c(\vec{x}, t)$ um eine Dichtefunktion zu einer extensiven Größe $C(t)$ in dem Sinne, dass gilt:

$$\int_{\Omega(t)} c(\vec{x}, t) d\Omega = C(t), \quad (\text{B.3})$$

so folgt, falls $C(t)$ eine Erhaltungsgröße ist:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} c(\vec{x}, t) d\Omega = 0 \Rightarrow \frac{\partial c(\vec{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (c(\vec{x}, t) \vec{v}(\vec{x}, t)) = 0. \quad (\text{B.4})$$

Sind in $\Omega(t)$ Quellen, gegeben durch die Quelledichte $Q_c(\vec{x}, t)$, so gilt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} c(\vec{x}, t) d\Omega &= \int Q_c(\vec{x}, t) d\Omega \\ &\Rightarrow \frac{\partial c(\vec{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (c(\vec{x}, t) \vec{v}(\vec{x}, t)) = Q_c(\vec{x}, t). \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Für die Dimensionen gilt: $[C] = M \cdot L^{-3}$, $[\vec{v}] = L \cdot T^{-1}$, $[Q_c] = M \cdot L^{-3} \cdot T^{-1}$. In einer turbulenten Strömung fluktuieren die strömungsbeschreibenden Größen. Üblich ist die Zerlegung der entsprechenden Größen in einen Mittelwert und eine zugehörige Schwankung (Reynoldszersetzung):

$$a(\vec{x}, t) = \bar{a}(\vec{x}, t) + a'(\vec{x}, t), \quad (\text{B.6})$$

wobei für die Summanden gilt:

$$\begin{aligned} \bar{a}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} a(\vec{x}, t') dt' \\ a'(\vec{x}, t) &= \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} a'(\vec{x}, t') dt' \equiv 0. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Für die Anwendung von (B.7) nimmt man an, dass ein sinnvoller Mittelwert existiert, um den eine Fluktuation stattfindet. Das Mittelungsintervall Δt darf daher nicht zu kurz sein.

Man betrachte hierzu das Bild B.2. Dort ist ein Beispiel einer fluktuierenden Größe $a(t)$ in Abhängigkeit der Zeit dargestellt. Man erkennt, dass zu kurze Mittelungsintervalle auf Mittelwerte $\bar{a}(t)_i$ führen, die selbst empfindlich von der Intervalllänge Δt_i abhängig sind. Existiert ein Mittelwert, so werden für größer werdende Intervalllängen die Abweichungen zwischen den $\bar{a}(t)_i$ kleiner. Für eine schwankende Größe konstanter Turbulenz wäre daher eine möglichst

¹Es müssen auch bestimmte Bedingungen durch die Strömung erfüllt werden. Hierzu sei z. B. auf [229] verwiesen.

große Mittelungszeit von Vorteil. Der Zeitabschnitt darf praktischerweise aber auch nicht zu lang sein, da sonst tagesbedingte Schwankungen, die man eventuell explizit berücksichtigen möchte, herausgemittelt werden. Ein guter Schätzwert in der Meteorologie ist $\Delta t = 10 \text{ min}$.

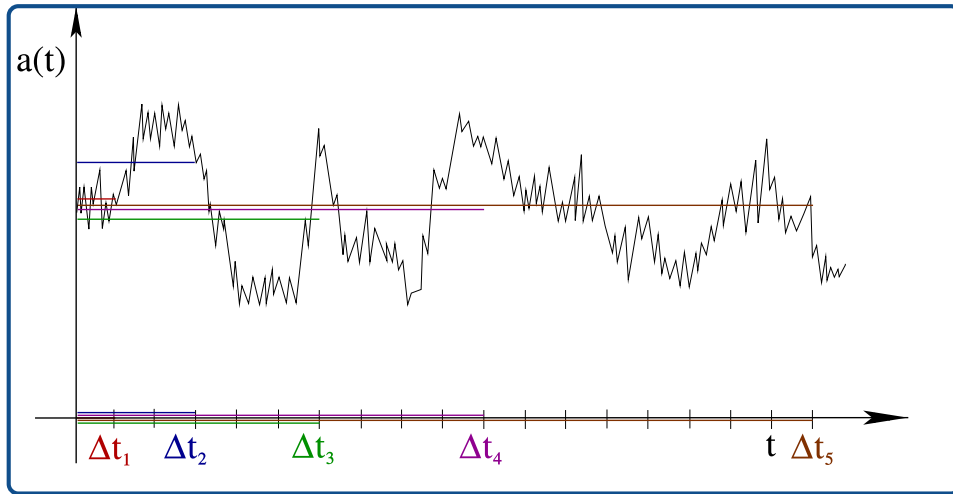


Abbildung B.2: Illustration zum Einfluss der Länge des Mittelungsintervalls auf den Mittelwert einer fluktuierenden Größe $a(t)$.

Interessiert man sich nun nicht für einzelne Turbulenzen, sondern nur für die im Mittel zu erwartenden Schadstoffkonzentrationen, so kann man (B.7) verwenden, um (B.5) zu mitteln (im Folgenden sollen dabei die Argumente der Funktionen, etwa \vec{x} bzw. t ausgelassen werden):

$$\overline{\frac{\partial c}{\partial t}} + \overline{\nabla \cdot (c\vec{v})} = \overline{Q_c} \quad (\text{B.8})$$

Die einzelnen Terme berechnen sich wie folgt:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = \overline{\frac{\partial (\bar{c} + c')}{\partial t}} = \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{c}'}{\partial t} = \frac{\partial \bar{c}}{\partial t}. \quad (\text{B.9})$$

Die Ableitung und die Mittelwertbildung dürfen vertauscht werden, der Mittelwert des Mittelwertes bleibt der Mittelwert und der Mittelwert über die Fluktuationen ist null. Der Advektionsterm splittet sich in vier Summanden auf:

$$\overline{\nabla \cdot (c\vec{v})} = \nabla \cdot (\bar{c}\vec{v}) + \nabla \cdot \overline{c'\vec{v}} + \nabla \cdot \bar{c}\vec{v}' + \nabla \cdot \overline{c'\vec{v}'}, \quad (\text{B.10})$$

von denen die beiden mittleren verschwinden, da der Mittelwert als Konstante vor das Mittelungsintegral geschrieben werden kann und der Mittelwert der im Integranden verbleibenden Fluktuation definitionsgemäß null ist. Der erste Summand beschreibt die mittlere Advektion und der vierte Summand eine Art "mittlere Advektion" durch die turbulenten Fluktuationen. Man beachte, dass der Mittelwert eines Produktes im Allgemeinen **nicht** das Produkt der Mittelwerte ist. Sonst wäre auch der vierte Summand null. Somit folgt insgesamt:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{c}\vec{v}) + \nabla \cdot \overline{c'\vec{v}'} = \overline{Q_c}. \quad (\text{B.11})$$

Für den mittleren Transport durch die turbulenten Fluktuationen $\nabla \cdot \overline{c'\vec{v}'}$ kann man einen zur molekularen Diffusion äquivalenten Ansatz verwenden. Hierzu ist zunächst ein formaler Vergleich interessant. Gemäß des Fick'schen Gesetzes gilt für die Diffusionsstromdichte \vec{j} :

$$\vec{j} = -D\nabla \bar{c} \quad (\text{B.12})$$

und für eine typische Diffusionsgleichung:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} - \nabla \cdot (D \nabla \bar{c}) = 0. \quad (\text{B.13})$$

Die Größe D ist der zugehörige Diffusionskoeffizient. Vergleicht man dies mit (B.11), so könnte man für den turbulenten Fall $\vec{j}_T = \overline{c'v'}$ ansetzen und insgesamt:

$$\vec{j}_T = -\vec{k} \nabla \bar{c}. \quad (\text{B.14})$$

Dann ist auch der mittlere Transport durch den Einfluss der Turbulenz zum Konzentrationsgradienten proportional. Der Vektor \vec{k} ist ein richtungsabhängiger Diffusionskoeffizient und übernimmt die Funktion von D im Fall der molekularen Diffusion. Allerdings wird hier explizit berücksichtigt, dass der turbulente Transport richtungsabhängig sein kann, also z. B. die turbulenten Fluktuationen in x -, y - und z -Richtung verschieden sein können. Des Weiteren sind typische Beträge von \vec{k} viele Zehnerpotenzen größer als D . Das kann man anschaulich daran erkennen, dass typische Transportlängen der molekularen Diffusion wesentlich kleiner sind als Transportlängen bei Wirbeln in der Luft. Damit folgt für die Ausbreitungsgleichung (B.11):

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{c}\vec{v}) - \nabla \cdot \vec{k} \nabla \bar{c} = \overline{Q_c}. \quad (\text{B.15})$$

Folgende Annahmen sollen zunächst zur Vereinfachung von (B.15) getroffen werden:

1. Verwendung eines Bezugssystems, das mit der Grundströmung mitströmt
 $\rightarrow \nabla \cdot (\bar{c}\vec{v})$ entfällt,
2. Vernachlässigung von Quellen $\overline{Q_c} \equiv 0$,
3. der turbulente Diffusionsvektor \vec{k} sei konstant (nicht explizit orts- und zeitabhängig).

Somit folgt aus (B.15):

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = \vec{k} \Delta \bar{c}. \quad (\text{B.16})$$

Die Gleichung B.16 ist eine lineare, homogene, parabolische, partielle Differentialgleichung 2. Ordnung.

B.1.2. Lösung der Ausbreitungsgleichung

Zunächst verwendet man einen Separationsansatz:

$$\bar{c}(\vec{x}, t) = A(t) \cdot B(x) \cdot D(y) \cdot E(z). \quad (\text{B.17})$$

Für die Funktionen $B(x)$, $D(y)$ und $E(z)$ ist die gleiche mathematische Struktur der Lösung zu erwarten, weshalb es genügt

$$\bar{c}(x, t) = A(t) \cdot B(x) \quad (\text{B.18})$$

zu verwenden. Eingesetzt in (B.17) folgt:

$$\frac{1}{A(t)} \frac{dA(t)}{dt} = k_x \frac{1}{B(x)} \frac{d^2 B(x)}{dx^2}. \quad (\text{B.19})$$

Die linke Seite der letzten Gleichung hängt nur von der Zeit und die rechte Seite nur vom Ort ab, so dass beide Seiten für sich genommen bereits konstant sein müssen. Als Separationskonstante sei hier λ^2 gewählt. Damit folgen zwei gewöhnliche Differentialgleichungen für die Größen $A(t)$

und $B(x)$:

$$\begin{aligned}\frac{1}{A(t)} \frac{dA(t)}{dt} &= k_x \lambda^2 \\ \frac{1}{B(x)} \frac{d^2 B(x)}{dx^2} &= \lambda^2\end{aligned}\tag{B.20}$$

$A(t)$ erhält man aus der separierbaren Gleichung mittels:

$$\int \frac{dA}{A} = \int k_x \lambda^2 dt \Rightarrow A(t) = A_1 e^{k_x \lambda^2 t}.\tag{B.21}$$

Für $B(x)$ ist eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung zu lösen. Wählt man den Ansatz $B(x) = e^{\kappa x}$, so folgt das charakteristische Polynom $\kappa^2 - \lambda^2 = 0$. Es gilt damit:

$$B(x) = B_1 e^{\lambda x} + B_2 e^{-\lambda x}\tag{B.22}$$

und insgesamt für $\bar{c}(x, t)$:

$$\bar{c}(x, t) = C_1 e^{k_x \lambda^2 t + \lambda x} + C_2 e^{k_x \lambda^2 t - \lambda x}.\tag{B.23}$$

Wegen der Linearität der partiellen DGL sind alle Überlagerungen von Lösungen wiederum Lösungen zur Differentialgleichung (Superpositionsprinzip). Es werde daher der Ansatz gewählt²:

$$\bar{c}(x, t) = \int \bar{c}(\lambda) e^{k_x \lambda^2 t + \lambda x} d\lambda.\tag{B.24}$$

Zur weiteren Umformung und Lösung des Integrals soll eine Anfangsverteilung von Schadstoffen $Q(x)$ hinzugenommen werden, für die gilt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |Q(x)| dx < \infty,\tag{B.25}$$

wobei $Q(x)$ im gesamten Definitionsbereich mindestens stückweise stetig und monoton ist und die Funktionswerte an eventuellen Unstetigkeitsstellen definiert sind. Dann \exists eine Funktion $V(k)$ für die gilt:

$$Q(x) = \int_{-\infty}^{\infty} V(k) e^{ikx} dk, \quad V(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} Q(x') e^{-ikx'} dx'.\tag{B.26}$$

Mit $\bar{c}(x, 0) = Q(x)$ als Anfangsverteilung findet man:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \bar{c}(\lambda) e^{\lambda x} d\lambda = \int_{-\infty}^{\infty} V(k) e^{ikx} dk.\tag{B.27}$$

Setzt man $\lambda = ik$ und $i\bar{c}(ik) = V(k)$ so folgt:

$$\bar{c}(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} Q(x') e^{-ik(x'-x) - k_x k^2 t} dk.\tag{B.28}$$

²Die Unterscheidung der $\pm\lambda$ -Lösungen entfällt, da über alle λ integriert wird.

Unter Verwendung der Umformungen:

$$-ik(x' - x) - k_x k^2 t = k_x t \left(k + \frac{i(x' - x)}{2k - xt} \right)^2 - \frac{(x' - x)^2}{4k_x t} \quad (\text{B.29})$$

$$k + \frac{i(x' - x)}{2k_x t} = \alpha \quad (\text{B.30})$$

folgt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik(x' - x) - k_x k^2 t} dk = e^{-\frac{(x' - x)^2}{4k_x t}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k_x t + \alpha^2} d\alpha = e^{-\frac{(x' - x)^2}{4k_x t}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{k_x t}}. \quad (\text{B.31})$$

Aus (B.28) folgt nun:

$$\bar{c}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi k_x t}} \int_{-\infty}^{\infty} Q(x') e^{-\frac{(x' - x)^2}{4k_x t}} dx' \quad (\text{B.32})$$

Betrachtet man nun den Limes einer Punktquelle für die Schadstoffemission bei $t = 0^3$:

$$\begin{aligned} \bar{c}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi k_x t}} \lim_{x_0 \rightarrow 0} \int_{-x_0}^0 \frac{Q}{x_0} e^{-\frac{(x' - x)^2}{4k_x t}} dx' \quad (\text{für } t > 0) \\ &= \frac{Q}{\sqrt{4\pi k_x t}} e^{-\frac{(x_0 - x)^2}{4k_x t}}. \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

Nimmt man nun die nicht explizit aufgeführten Koordinaten wieder hinzu, so folgt:

$$\bar{c}(\vec{x}, t) = \frac{Q}{\sqrt{(4\pi t)^3 k_x k_y k_z}} e^{-\frac{(x_0 - x)^2}{4k_x t}} e^{-\frac{(y_0 - y)^2}{4k_y t}} e^{-\frac{(z_0 - z)^2}{4k_z t}}. \quad (\text{B.34})$$

Nun soll angenommen werden, dass die mittlere Strömung nur in x -Richtung erfolgen möge und durch diese Advektion der turbulente Transport in x -Richtung vernachlässigt werden kann:

$$\bar{c}(x, t) = \frac{Q}{\bar{u}}. \quad (\text{B.35})$$

Unter stationären Bedingungen folgt mit den Umformungen:

$$\text{Transformation: } t = \frac{x}{\bar{u}}, \quad (\text{B.36})$$

$$\text{Punktquelle } Q \text{ bei: } \vec{x} = (0, 0, h), \quad (\text{B.37})$$

$$k_y = \sigma_y^2 \frac{\bar{u}}{2x}, \quad k_z = \sigma_z^2 \frac{\bar{u}}{2x}, \quad (\text{B.38})$$

für die Schadstoffkonzentration:

$$\bar{c}(\vec{x}) = \frac{Q}{2\pi \bar{u} \sigma_y(x) \sigma_z(x)} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y(x)^2}} e^{-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z(x)^2}}. \quad (\text{B.39})$$

Es handelt sich hier um eine analytische Lösung der Advektions-Diffusionsgleichung, welche eine Schadstoffdispersion mit dem mittleren Strömungsfeld \bar{u} (konstante Strömung in x -Richtung mit Geschwindigkeit \bar{u}) und angenommener turbulenter Dispersion in y - und z -Richtung beschreibt.

Eine Illustration zur Einbettung der Lösung in eine Schadstoffausbreitungsproblematik findet man in Bild B.3. Üblich ist, das verwendete globale Koordinatensystem so zu orientieren, dass die Windrichtung mit der x -Achse des Koordinatensystems zusammenfällt. In dem Gauß-Fahnenmodell stellt man sich eine kontinuierliche Emission von Schadstoffen aus einer Quelle

³Die noch unbestimmte Quelle $Q(x')$ sei durch $\frac{Q}{x_0}$ (eine Linienquelle) ersetzt.

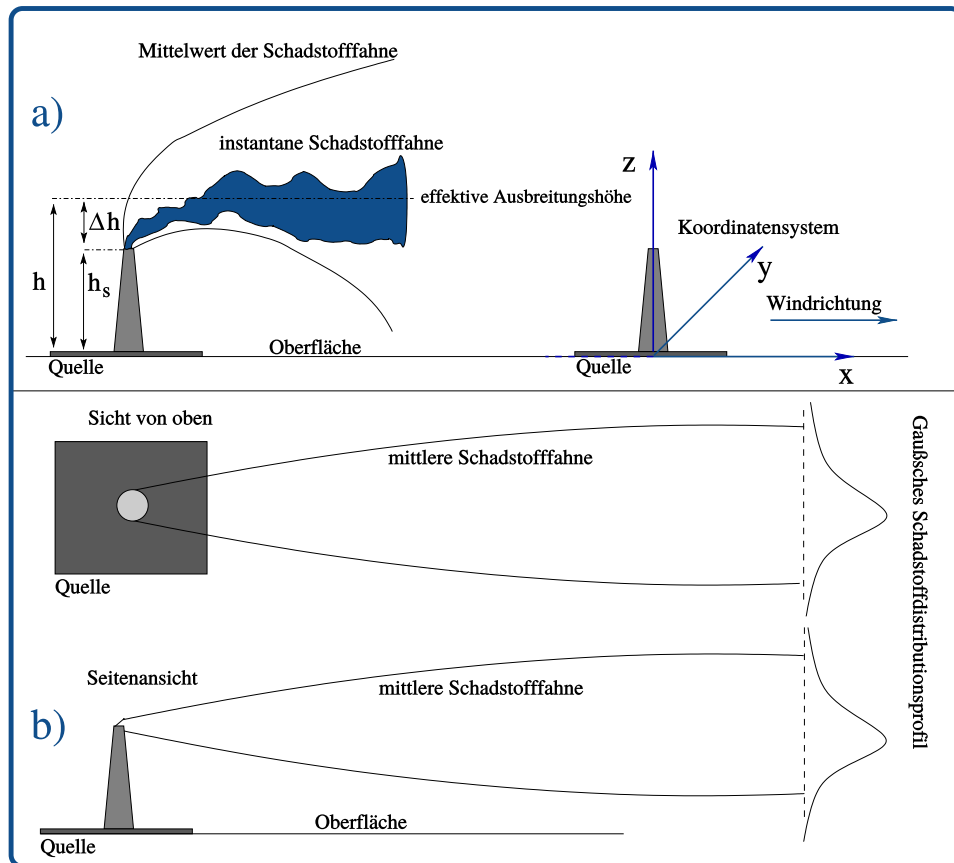


Abbildung B.3: Illustration des zur Gaußschen Schadstoffausbreitung zugrundeliegenden Koordinatensystems und Darstellung relevanter Größen (a) sowie Illustration der Gaußschen Schadstofffahne (Seitenansicht und Draufsicht) (b).

Q vor, die in guter Näherung als Punktquelle betrachtet werden kann. Die Schadstoffe bewegen sich mit \bar{u} durch Advektion maßgeblich in x -Richtung. In y - und z -Richtung verteilen sich die Schadstoffe durch turbulente Dispersion. Dabei nimmt die mittlere Konzentration senkrecht zur Ausbreitungsachse entsprechend einer Gaußschen Verteilungsdichtefunktion ab. Eine Illustration hierzu zeigt ebenfalls Abbildung B.3. Für die Schadstoffausbreitungsproblematik ist hier eine effektive Freisetzungshöhe h relevant, die sich aus der Freisetzungshöhe h_s und einem Schadstoffaufstieg Δh (z. B. durch Impuls oder Wärmeartrieb) ergeben kann. Für die Beschreibung im Modell ist dann $h = h_s + \Delta h$ die geeignetere Höhe, da dies die tatsächliche Position einer Quelle besser widerspiegelt. Dies ist in Abbildung B.4 graphisch veranschaulicht.

Für die bisherigen Modellannahmen ist (B.39) unmittelbar eine geeignete analytische Gleichung. Die eingezeichneten Grenzen für das Aussehen der Fahne sind hier **nicht** absolut zu sehen. Mit zunehmender Entfernung zur Quelle in Windrichtung wird die Verteilungsfunktion flacher und die Varianz nimmt zu. Typischerweise verwendet man ein oder zwei Standardabweichungen der Verteilungsdichtefunktion für die graphische Darstellung der Fahngrenzen. Durch den Einfluss der Turbulenzen wird sich jedoch eine Freisetzung horizontal und vertikal verbreitern. In einer bestimmten Entfernung in Windrichtung erreichen nennenswerte Schadstoffanteile den Boden und die zuvor hergeleitete Lösung würde für größere Entfernungen nennenswerte Konzentrationen unter der Geländeoberfläche vorhersagen⁴. Dies ist unphysikalisch, aber unproblematisch, da dies so interpretiert werden könnte, dass sich die Schadstoffe am

⁴Gemäß der analytischen Lösung sind für $x > 0$ überall Schadstoffe, da die Exponentialfunktion nirgends null ist. Praktisch sind die Konzentrationen aber erst oberhalb eines stoffspezifischen Wertes relevant.

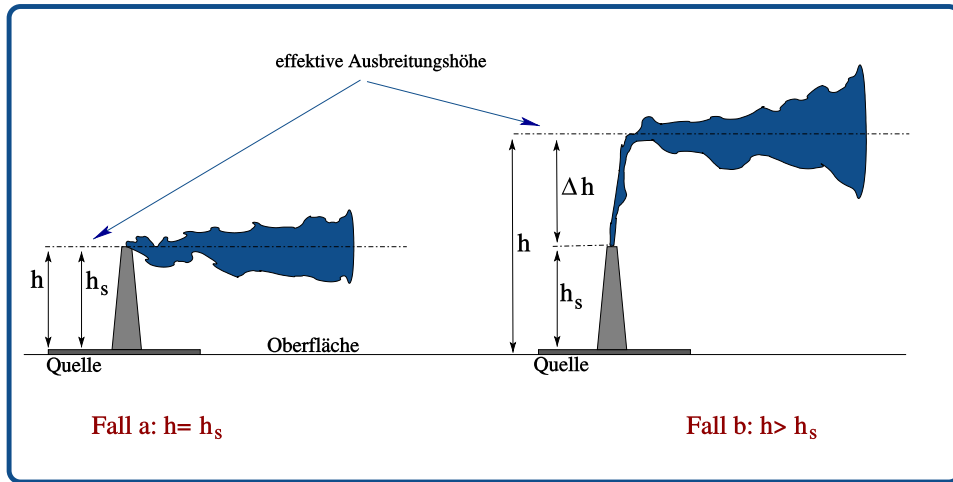


Abbildung B.4: Veranschaulichung der Freisetzungshöhe h_s und der effektiven Freisetzungshöhe h . Die tatsächliche (architektonische) Höhe einer Freisetzung ist nicht immer ein guter Repräsentant für die effektiven Freisetzungshöhe h im Ausbreitungsmodell.

Boden abgesetzt haben und sich nicht weiter in der Luft darüber ausbreiten. Die Vergleiche mit Beobachtungen und Messungen zeigen jedoch, dass die Schadstoffe kaum am Boden haften bleiben, sondern sich eher so verhalten, als würden sie reflektiert werden [157].

Mathematisch kann man diesbezüglich das Modell anpassen, indem eine virtuelle Quelle bei $z = -h$ addiert wird. Der unter dem Boden befindliche Teil der realen Quelle wird oberhalb durch die virtuelle Quelle aufaddiert. Bild B.5 illustriert diesen Zusammenhang. Damit wird

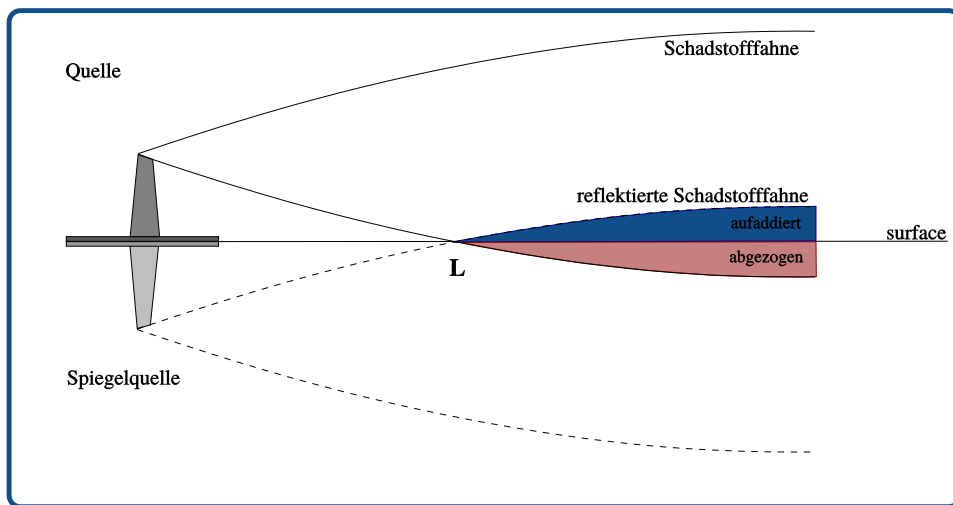


Abbildung B.5: Illustration der Reflexion der Schadstofffahne am Boden (modelliert durch Addition einer Spiegelquelle).

aus (B.39):

$$\bar{c}(\vec{x}) = \frac{Q}{2\pi\bar{u}\sigma_y(x)\sigma_z(x)} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y(x)^2}} \left[e^{-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z(x)^2}} + e^{-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z(x)^2}} \right]. \quad (\text{B.40})$$

Dies ist die Gleichung zur Konzentrationsberechnung, die für die späteren Beispielrechnungen Verwendung finden soll.

Ein etwas komplizierteren Ausdruck erhält man, wenn bei einer Freisetzung in Höhe h , durch vertikale Mischung eine Reflexion am Boden und zusätzlich in einer Höhe h_i eine Inversionsschichtung vorliegt. An dieser Inversionsschicht, welche die Schadstoffe ebenfalls nicht durch-

dringen können, ist die Annahme einer Reflexion ebenfalls experimentell gut verifiziert. Die Schadstoffe werden nun am Boden und an der Inversionsschicht zurückgeworfen, was Vielfachreflexionen nach sich zieht. Abbildung B.6 zeigt den Einfluss dieser Vielfachreflexionen. Man

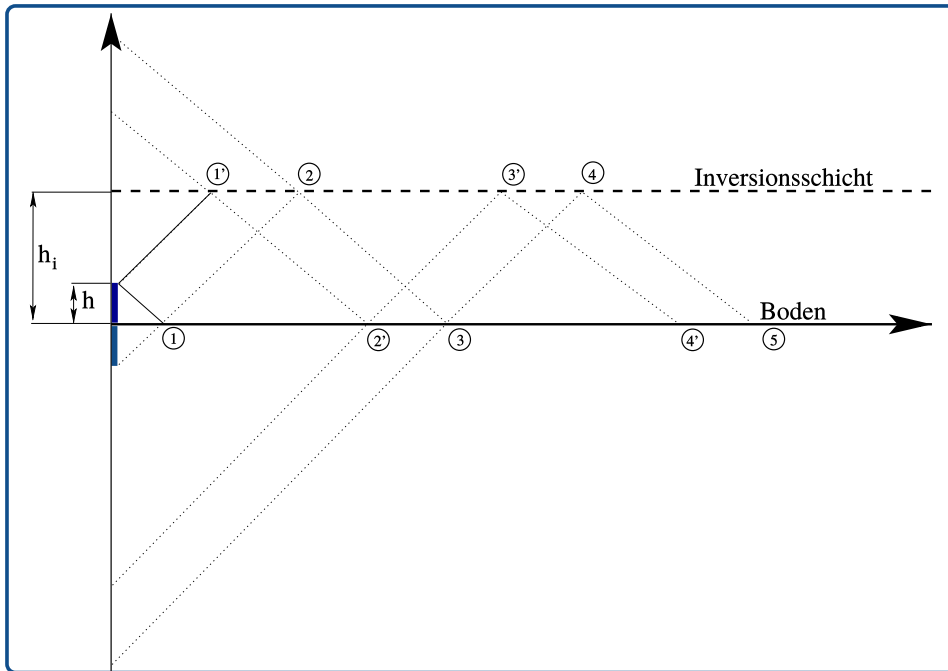


Abbildung B.6: Darstellung der Schadstoffe zwischen Boden und Inversionsschicht. An der Regelmäßigkeit des Musters der benötigten Spiegelquellen erkennt man, dass vier Positionen unterschieden werden können: $2jh_i + h$ (z.B. 2), $-2jh_i - h$ (z. B. 3), $2jh_i - h$ (z. B. 1') und $-2jh_i + h$ (z. B. 2') jeweils für $j = 0, 1, 2, \dots$

erkennt an der Abbildung B.6, dass alle benötigten Spiegelquellen mittels der folgenden Formeln für $j = 0, \dots, \infty$ erfassen kann:

$$1 : z = 2jh_i + h \quad (\text{B.41})$$

$$2 : z = -2jh_i - h \quad (\text{B.42})$$

$$3 : z = 2jh_i - h \quad (\text{B.43})$$

$$4 : z = -2jh_i + h. \quad (\text{B.44})$$

Somit kann man für die Schadstoffkonzentration schreiben:

$$\bar{c}(\vec{x}) = \frac{Q}{2\pi\bar{u}\sigma_y(x)\sigma_z(x)} e^{\frac{-y^2}{2\sigma_y(x)^2}} \left[\sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(z-2jh_i+h)^2}{2\sigma_z(x)^2}} + e^{-\frac{(z+2jh_i+h)^2}{2\sigma_z(x)^2}} \right]. \quad (\text{B.45})$$

Für praktische Rechnungen genügt es zumeist, nur $j = -1, 0, 1$ zu benutzen, da der weitere Genauigkeitsgewinn durch Berücksichtigung weiterer Reflexionen klein ist [33]. Für das Modell ohne Berücksichtigung der Inversionsschicht (B.40) und auch für das erweiterte Modell müssen die turbulenzbeschreibenden Parameter $\sigma_y(x)$ und $\sigma_z(x)$ in Abhängigkeit des Strömungsverhaltens der Atmosphäre bestimmt werden. Es müssen hierfür auch Informationen über die Wetterbedingungen einfließen. Ein recht einfacher Ansatz ist die Verwendung von atmosphärischen Stabilitätsklassen. Je nach Windgeschwindigkeit (mechanisch induzierte Turbulenz) und Sonneneinstrahlung (thermisch induzierte Turbulenz) wird das Maß des turbulenten Transports unterschiedlich ausfallen. Hier soll eine Einteilung in sechs Stabilitätsklassen, beginnend bei sehr instabil (A) bis stabil (F) nach Pasquill und Gifford (entnommen aus [157]) verwen-

det werden. Eine Übersicht zeigt Tabelle B.1. Ist die Stabilitätsklasse bekannt bzw. ermittelt,

Tabelle B.1: Zuordnung der Stabilitätsklassen zur Windgeschwindigkeit und Sonneneinstrahlung

u[m/s] in H =	Tag (Sonneneinstrahlung)			Nacht (Bewölkung)	
	Stark	Normal	Schwach	Wolkig	Wolkenlos
< 2	A	A-B	B	E	F
2 - 3	A-B	B	C	E	F
3 - 5	B	B-C	C	D	E
5 - 6	C	C-D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

so verwendet man zugeordnete Bestimmungsgleichungen für die Dispersionsparameter $\sigma_y(x)$ und $\sigma_z(x)$, welche auf Briggs (entnommen aus [157]) zurückgehen. Für ländliches Gebiet folgen $\sigma_y(x)$ und $\sigma_z(x)$ aus Tabelle B.2.

Tabelle B.2: Bestimmungsgleichungen für die Dispersionsparameter $\sigma_y(x)$ und $\sigma_z(x)$ angepasst an den ländlichen Raum.

Stabilitätsklasse	σ_y [m]	σ_z [m]
A (instabil)	$0,22 x(1+0,0001 x)^{-1/2}$	$0,2 x$
B (moderat instabil)	$0,16 x(1+0,0001 x)^{-1/2}$	$0,12 x$
C (schwach instabil)	$0,11 x(1+0,0001 x)^{-1/2}$	$0,08 x(1+0,0002 x)^{-1/2}$
D (neutral)	$0,08 x(1+0,0001 x)^{-1/2}$	$0,06 x(1+0,0015 x)^{-1/2}$
E (schwach stabil)	$0,06 x(1+0,0001 x)^{-1/2}$	$0,03 x(1+0,0003 x)^{-1}$
F (stabil)	$0,04 x(1+0,0001 x)^{-1/2}$	$0,016 x(1+0,0003 x)^{-1}$

B.2. Anwendungsgrenzen zum Gauß-Fahnenmodell

Die Genauigkeit von Gaußmodellen kann als gut betrachtet werden, wenn maßgebliche Effekte in der Lösung der zugehörigen Advektions-Diffusionsgleichung berücksichtigt wurden. Man benötigt für Gaußmodelle keinen vorgeschalteten Arbeitsschritt zur Ermittlung eines Windfeldes, kann daher alle Effekte, in denen die tatsächliche Strömung von der angenommenen Vereinfachung abweicht, nicht beschreiben.

Dazu zählen: Hindernisumströmungen, typischerweise der gesamte quellnahe Bereich, Überströmung von Arealen mit wechselnder Bodenrauigkeit, Ausbreitungen über große Distanzen und langen Zeitskalen. Bei letzteren zeigt sich die Summe der Fehler durch die vereinfachte meteorologische Modellierung am deutlichsten. Auch sind keine physikalischen oder chemischen Umwandlungen bzw. Reaktionen im Modell enthalten. Dazu zählen Phasenübergänge (etwa durch Temperaturänderungen hervorgerufene Kondensationen, Hydratation), Schwergas-Leichtgasübergänge, Reaktionen vor freigesetzten Gasen mit der Umgebungsluft oder Reaktionen von Gaskomponenten untereinander. Auch das Absetzen von mitgeführten Staub- oder Rußpartikeln (die nicht ausschließlich passiv mit der Luftströmung mittransportiert werden) sowie Auswaschungen durch Regen werden nur ungenau beschrieben.

Einige dieser Effekte können durch weitere Modellannahmen im Rahmen von empirischen An-

sätzen zum Modell berücksichtigt werden. Dies bedarf dann allerdings einer entsprechenden Rechtfertigung. Solche Vor- oder Erweiterungsmodelle sind unter anderem:

- Berücksichtigung von Flächen- oder Volumenquellen (Erweiterung der Punktquelle)
- Modelle zur Korrektur des Fahren- oder Wolkenaufstiegs durch Auftrieb oder Impuls
- Downwash-Effekte und Auswaschungen durch Niederschlag
- Depositionsmodelle (nasse, trockene Deposition)
- Schwergaseinflüsse
- Einflüsse durch bodennahe Freisetzung

Durch die begründete Anwendung weitere Modellannahmen kann die Genauigkeit der Beschreibung verbessert werden. Dadurch, dass diese Modelle am PC mit geringem Aufwand umgesetzt und des Weiteren sehr schnell gelöst werden können, sind diese Modelle Standard in der ersten Evaluation eines Freisetzungproblems. Für Probleme, bei denen die Abbildung des Windfeldes in der beschriebenen Form nicht genügt, sind Partikeltrajektorienmodelle oder CFD-Simulationen erforderlich, z. B. für das in dieser Habilitation betrachtete industrierelevante Anwendungsbeispiel.

C. Lachenverdunstungsmodelle nach Sutton-Pasquill, Deutsch und Brighton

In diesem Kapitel sollen die verwendeten Lachenverdunstungsmodelle von Sutton und Pasquill [212, 213], Deutsch [214] und Brighton [215] kurz beschrieben werden. Wesentliche Teile dieses Kapitels, mit Ausnahme des Modells von Brighton, sind auch im Forschungsbericht [191] angegeben und wurden wortgleich übernommen. Das Hauptaugenmerk liegt nicht auf der Herleitung der Modellgleichungen in allen Details, jedoch sollen wesentliche Grundannahmen und mathematische Beschreibungen angegeben werden. Es wird dadurch ersichtlich, für welche Idealisierung einer Reallache die Modelle eigentlich formuliert wurden. Strenggenommen verletzen die für das industrierelevante Anwendungsbeispiel durchgeführten Verdunstungsexperimente aus Kapitel 6 wichtige Modellannahmen, was hier nicht verschwiegen werden soll. Daher wurde die Entscheidung getroffen, die Eignung ausgewählter Modelle für Abschätzungen zur Größenordnung von Verdunstungsmassenströmen aus Ottokraftstofflachen experimentell zu prüfen, auch wenn die zylindrischen, flüssigkeitsgefüllten Behälter wenig mit einer bodenbündigen Lache gemeinsam haben.

Wegen ihrer Relevanz für das industrierelevante Anwendungsbeispiel und der Tatsache, dass vergleichbare Messungen zu Verdunstungsmassenströmen bisher nicht publiziert waren, wurden die Untersuchungsergebnisse in [193] veröffentlicht. Im Reviewprozess wurde empfohlen, dass Modell von Brighton [215] wegen seiner internationalen Relevanz für Emissionsabschätzungen aus Lachen, hinzuzunehmen. Es ist zudem als Modell zur Bestimmung von Freisetzungsmassenströmen im Programmpaket ALOHA [230] enthalten, welches von der Environmental Protection Agency (EPA) bereitgestellt [231] und weiterentwickelt wird. Es wird weltweit für die Betrachtung von Störfallfreisetzungen verwendet.

Die gewählten Modelle sind in ihren Herleitungen nachvollziehbar und experimentell validiert und zudem auf eine große Varietät von Industrielachen anwendbar. In der Literatur finden sich fehlerhafte Modelle [218, 224] und Modelle mit nicht nachvollziehbaren Modellannahmen wie das von der KAS18 empfohlene Modell von Mackay-Matsugu [217].

Im industrierelevanten Anwendungsbeispiel gibt es Schäden, die eine ausgedehnte Lachenbildung von Mineralölprodukten zur Folge haben können. Verdunstungen dieser Stoffe sind in der Literatur weit weniger untersucht als Verdunstungen chemischer Reinstoffe. Daher wurden Verdunstungsmessungen durchgeführt und veröffentlicht [193]. Die Berechnungen der Lachenverdunstungen erfolgten mit einem selbstprogrammierten C++-Programm.

C.1. Modell von Sutton und Pasquill

Die folgenden Annahmen werden für die Herleitung der Berechnungsgleichung für den Verdunstungsmassenstrom mit dem Modell von Sutton und Pasquill benötigt:

- Die Lache sei ideal rund, elliptisch oder rechteckig.
- Die Lache ist bodenbündig und eben in der Höhe $z = 0$. Durch die Bodenbündigkeit gibt es keine Verwirbelungen an Kanten zwischen Umrandung und Lache.
- Der Boden ist eine flüssigkeitsdichte Barriere, sodass die Flüssigkeit die Lache nur über die Lachenoberfläche verlassen kann.

- Der Zustand der Lache sei stationär: Die Lache habe die Temperatur T und die Lachenflüssigkeit den Dampfdruck p_d .
- Die Lache bestehe aus einem Reinstoff mit dem binären Diffusionskoeffizienten D . Es gibt keine Änderung der Stoffeigenschaften (z. B. Phasenumwandlungen, chemische Reaktionen).
- Der Stofftransport in die Schicht oberhalb der Flüssigkeits-Luft-Grenzschicht geschehe durch molekulare Diffusion. Oberhalb der Phasengrenze zur Luft liege eine Sättigungskonzentration $\rho_0 = \frac{p_d M}{RT}$, $[\rho_0] = ML^{-3}$ vor (M : molare Masse, R : allgemeine Gaskonstante).
- Stofftransport erfolgt mit einem turbulenten Windfeld der Eigenschaft: $\vec{u}(\vec{x}, t) = (\bar{u}(z) + u'(z), v'(z), w'(z))$ und einem nur von der Höhe z über der Lache und einem Profillexponenten abhängigen Windprofil (siehe weiter unten).

Sutton und Pasquill leiten eine Advektions-Diffusionsgleichung her (ρ_L Luftdichte):

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x} = \frac{1}{\rho_L} \frac{\partial}{\partial z} \left[A(z) \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial z} \right], \quad (\text{C.1})$$

worin $A(z)$ ein turbulenter Diffusionskoeffizient ist. Für diesen leitet Sutton den Ausdruck:

$$A(z) = \frac{\rho_L D^n}{1-n} \left[\frac{1}{2} \pi k^2 \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right|^3 \left| \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial z^2} \right|^{-2} \right] \quad (\text{C.2})$$

ab. Für das Windprofil des mittleren Windes gelte nach Sutton ($n \in [0 : 1]$, abhängig vom Turbulenzverhalten, $\bar{u}_1(z_1)$ Windgeschwindigkeit in einer Referenzhöhe):

$$\bar{u} = \bar{u}_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^{\frac{n}{2-n}}. \quad (\text{C.3})$$

Es gelten die Randbedingungen (i) und (ii) für $0 < x \leq L_x$, (iii) für $0 < z$:

$$(i) \lim_{z \rightarrow 0} \bar{\rho}(x, z) = \rho_0, \quad (ii) \lim_{z \rightarrow \infty} \bar{\rho}(x, z) = 0, \quad (iii) \lim_{x \rightarrow 0} \bar{\rho}(x, z) = 0. \quad (\text{C.4})$$

Löst man damit die partielle Differentialgleichung, so folgt zunächst:

$$\dot{m} = K \frac{p_d M}{RT} \bar{u}_1^{\frac{2-n}{2+n}} L_x^{\frac{2}{2+n}} L_y D^{\frac{2n}{2+n}} z_1^{\frac{-n}{2+n}} \quad (\text{Rechtecklache, } A = L_x L_y) \quad (\text{C.5})$$

$$\dot{m} = K' \frac{p_d M}{RT} \bar{u}_1^{\frac{2-n}{2+n}} r^{\frac{4+n}{2+n}} D^{\frac{2n}{2+n}} z_1^{\frac{-n}{2+n}} \quad (\text{Kreislache, } A = \pi r^2) \quad (\text{C.6})$$

mit

$$K = \left(\frac{2+n}{2-n} \right)^{\frac{2-n}{2+n}} \left(\frac{2+n}{2\pi} \right) \sin \left(\frac{2\pi}{2+n} \right) \Gamma \left(\frac{2}{2+n} \right) \left[\frac{\left(\frac{1}{2} \pi k^2 (2n-n^2) \right)^{1-n}}{(1-n)(2n-2)^{2-2n}} \right]^{\frac{2}{2+n}} \quad (\text{C.7})$$

$$K' = K \frac{2^{\frac{2}{2+n}} \sqrt{\pi} \Gamma \left(\frac{3+n}{2+n} \right)}{\Gamma \left(\frac{8+3n}{4+2n} \right)}, \quad \text{für } n \in [0, 2 : 0, 3]: K' \approx 3K. \quad (\text{C.8})$$

Hierin ist Γ die Gamma-Funktion. Man beachte auch, dass für $n < 1$ der Ausdruck innerhalb der Betragsstriche eine komplexe Zahl ist. Für eine etwa neutrale Atmosphäre ist $n = 0,25$, so

dass die Gleichungen zuvor vereinfacht werden können:

$$\dot{m} = 0,0277 \frac{p_d M}{RT} \bar{u}_1^{\frac{7}{9}} L_x^{\frac{8}{9}} L_y D^{\frac{2}{9}} z_1^{-\frac{1}{9}} \quad (\text{Rechtecklache, } A = L_x L_y) \quad (\text{C.9})$$

$$\dot{m} = 0,0824 \frac{p_d M}{RT} \bar{u}_1^{\frac{7}{9}} r^{\frac{17}{9}} D^{\frac{2}{9}} z_1^{-\frac{1}{9}} \quad (\text{Kreislache, } A = \pi r^2) \quad (\text{C.10})$$

Für die Zwecke dieser Arbeit wurde nur die Gleichung für die Kreislache verwendet. Vermutlich ist dies für viele Freisetzungsszenarien auch eine naheliegende Annahme oder zumindest eine brauchbare Näherung. Angemerkt werden soll hier noch, dass das Differentialgleichungsproblem auch für eine elliptische Lache gelöst wurde (ohne Angabe der Gleichung) und im Prinzip auch für andere einfache Geometrien gelöst werden könnte.

C.2. Modell von Deutsch

Bezüglich der geometrischen und physikalischen Randbedingungen verwendet das Modell von Deutsch ebenso die zuvor getroffenen Aussagen. Allerdings wird der Stoffübergang gemäß der Filmtheorie durch Stefandiffusion und nicht durch den Fickschen Ansatz beschrieben. Diese Überlegungen sollen etwas ausführlicher dargestellt werden.

Betrachtet man die Grenze zweier Stoffe A und B, an der durch molekulare Diffusion eine Durchmischung stattfindet, so findet man zwei Stoffströme vor: die Diffusion von A in B und die Diffusion von B in A. Beide sind proportional zum Konzentrationsgradienten und einander entgegengesetzt.

$$\begin{aligned} \vec{j}_{Fick,A} &= -D_{AB} \nabla \rho_A \\ \vec{j}_{Fick,B} &= -D_{BA} \nabla \rho_B. \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

Sind gedanklich beide binären Diffusionskoeffizienten gleich und auch die Ausgangsdichten der Stoffe, so findet an der Grenzschicht kein Nettomassentransport statt, da beide Massenströme entgegengesetzt gleich sind. Die Diffusionsfronten laufen mit der doppelten Geschwindigkeit auseinander, mit der sich eine einzelne Diffusionsfront gegenüber der Grenzlinie bewegt:

$$\begin{aligned} \vec{v}_A &= \frac{1}{\rho_A} \vec{j}_A = -\frac{1}{\rho_A} D \nabla \rho_A \\ \vec{v}_B &= \frac{1}{\rho_B} \vec{j}_B = -\frac{1}{\rho_B} D \nabla \rho_B. \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

Sei nun gedanklich die Grenzschicht für den Stoffstrom A undurchdringlich, so würde er sich an der Grenzschicht so verhalten, als wäre er reflektiert worden (Stefanstrom), womit er den lokalen Konzentrationsgradienten vergrößert und den Stoffstrom von B in A weiter vergrößert. Für den Massenstromdichtevektor des Stefanstromes \vec{j}_{Stefan} setzt man an $\vec{j}_{Stefan} = D \nabla \rho_A \equiv \rho_A \vec{v}_{Stefan}$, womit folgt:

$$\begin{aligned} \vec{j}_{Stefan,A} &= -D \nabla \rho_A + \rho_A \vec{v}_{Stefan} = 0 \\ \vec{j}_{Stefan,B} &= -D \nabla \rho_B + \rho_B \vec{v}_{Stefan} = -D \nabla \rho_B \left(1 + \frac{\rho_B}{\rho - \rho_B} \right). \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

Im letzten Schritt wurde benutzt, dass $\rho_A = \frac{m_A}{V}$, $\rho_B = \frac{m_B}{V}$ und $\rho = \frac{m_A + m_B}{V}$. Gegenüber dem Massenstromdichtevektor gemäß des Fickschen Gesetzes gibt es einen zusätzlichen Faktor $\frac{\rho_B}{\rho - \rho_B}$. Ist der Stoff B stark verdünnt $\rho_B \approx 0$, so ergibt sich gegenüber dem Fickschen Ansatz keine wesentliche Änderung wohl aber für $\rho_B \approx \rho$. Dann ist der Stefanstromdichtevektor für den Stoff B größer als der Ficksche Stromdichtevektor für den Stoff B.

Mit der Umformung:

$$\left(1 + \frac{\rho_B}{\rho - \rho_B}\right) = \left(\frac{\rho}{\rho - \rho_B}\right) \quad (\text{C.14})$$

und mit der Partialdruckdifferenz (der Stoffstrom möge in z-Richtung gerichtet sein):

$$\nabla p_B = \frac{dp}{dz} \vec{e}_z = \frac{RT_B}{M_B} \nabla \rho_B \quad (\text{C.15})$$

folgt für die Massenstromdichtevektoren:

$$\begin{aligned} \vec{j}_{Fick,B} &= -\frac{DM_B}{RT_B} \frac{dp}{dz} \vec{e}_z \\ \vec{j}_{Stefan,B} &= -\frac{DM_B}{RT_B} \left(\frac{\rho}{\rho - \rho_B}\right) \frac{dp}{dz} \vec{e}_z. \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

Durch die Einseitigkeit des Stofftransportes gilt $\frac{d\dot{m}}{dz} = 0 \Rightarrow \dot{m}(z) = const.$ Sei nun p_B der Dampfdruck der Lachenflüssigkeit p_d , so folgt damit nach Integration über die Filmdicke δ_s von (C.16):

$$\dot{m} = \frac{M_B A p D}{RT_B \delta_s} Ln \left(\frac{p}{p - p_{d,z=0}} \right). \quad (\text{C.17})$$

Die Größe $\frac{D}{\delta_s} \equiv \beta$ ist der Stoffübergangskoeffizient der Filmströmung; wegen $\beta = \frac{D \cdot Sh}{L}$ benötigt man nur die Sherwoodzahl Sh : Untersuchungen zum Stofftransport in der Grenzschicht zeigen:

$$Sh = C \cdot Re^{\alpha_1} Sc^{\alpha_2}. \quad (\text{C.18})$$

Wobei Deutsch aus Experimenten im Windkanal in Abhängigkeit von unterschiedlichen Windprofilen (unterschiedliche Rauigkeit) findet:

$$Sh = 0,077 \alpha^{0,156} Re^{0,76} Sc^{0,19}. \quad (\text{C.19})$$

Hierin ist Re die Reynoldzahl. Profilabhängigkeit über α (unterschiedliche Turbulenzspektren in Bodennähe): glatt: $\alpha = 0,08 - 0,12$, mäßig rau: $\alpha = 0,13 - 0,18$, rau: $\alpha = 0,20 - 0,24$, sehr rau: $\alpha = 0,28 - 0,4$. Insgesamt folgt damit:

$$\dot{m} = 0,077 \alpha^{0,156} Re^{0,76} Sc^{0,19} \frac{DM A p}{2RT r_L} Ln \left(\frac{p}{p - p_{d,z=0}} \right), Re(u(z = 10 \text{ m})). \quad (\text{C.20})$$

Anzumerken ist, dass wegen der Verwendung des Stefanstromes im Modell von Deutsch eine grundsätzlich konservativere Annahme bezüglich des Übergang aus der Lache in die Grenzschicht enthalten ist.

C.3. Modell von Brighton (ALOHA)

Das Modell von Brighton [215] baut auf den Modellannahmen von Sutton und Pasquill auf, benutzt jedoch eine modifizierte Beschreibung des turbulenten Stoffeintrages in die Grenzschicht. Für die Modellierung von Freisetzungen gefährlicher Stoffe aus Lachen ist dieses Modell ein weltweit benutztes Standardmodell und insbesondere im Programmpaket Area Location of Hazardous Atmospheres (ALOHA) [230] implementiert.

Zunächst wird von Brighton ein dimensionsanalytischer Ansatz verwendet:

$$\dot{m}(x, z_0, r, u^*, \nu, D, \rho_0) = \rho_0 u^* \bar{j}_T \left(\frac{x}{z_0}, \frac{r}{z_0}, Re_0, Sc \right). \quad (\text{C.21})$$

Hierin ist u^* die Schergeschwindigkeit und \bar{j}_T ein (mittlerer) Massentransferkoeffizient und Re_0 eine Rauigkeitsreynoldszahl. Alle anderen Größen sind bereits zuvor definiert. Für die Schergeschwindigkeit u^* gilt:

$$u^* = 0.03u(z) \left(\frac{10}{z} \right)^n, \quad (\text{C.22})$$

wobei n ein stabilitätsklassenabhängiger Windprofilexponent ($n \approx 0.142$ für eine neutral geschichtete Atmosphäre) ist und $u(z)$ eine in der Höhe z gemessene Bezugswindgeschwindigkeit. Passende n für andere atmosphärische Stabilitätsklassen sind in [230] angegeben. Nimmt man erneut eine kreisförmige Lache an, so zeigt Brighton, dass (C.21) dargestellt werden kann durch:

$$\dot{m} = \pi r^2 \rho_0 u^* \bar{j}_T. \quad (\text{C.23})$$

Um mit (C.23) Verdunstungsmassenströme berechnen zu können, muss der mittleren Massentransferkoeffizienten \bar{j}_T angegeben werden. Dieser ist recht umfangreich und wird daher auf mehrere Gleichungen verteilt. Auf Details zur Herleitung soll hier verzichtet werden. Zunächst ist:

$$\bar{j}_T = \bar{j} \frac{p_d}{p} \text{Ln} \left(\frac{p}{p - p_d} \right), \quad (\text{C.24})$$

womit der Massentransferkoeffizienten \bar{j}_T in einen Massentransferkoeffizienten \bar{j} zuzüglich des konservativen Faktors aus dem Stefanstrom (siehe Modell von Deutsch) aufgesplittet wurde. Der Massentransferkoeffizient \bar{j} ist dimensionslos und kann berechnet werden mit:

$$\bar{j} = \frac{k(1+n)}{Sc_T} \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arctan \left[\frac{A}{\pi} \right] + \frac{1 - \gamma_e}{A^2 + \pi^2} + \frac{\left[1 + (1 - \gamma_e)^2 + \frac{1}{6} \pi^2 \right] A}{[A^2 + \pi^2]^2} \right\} \quad (\text{C.25})$$

Die Größe A ist nur eine Abkürzung für $A = \text{Ln} \left(X e^\Lambda \right)$, wobei die darin enthaltenen Größen X und Λ wiederum Funktionen verschiedener dimensionsloser Kennzahlen sind. Zunächst ist X ist eine dimensionslose Distanz, welche in Windrichtung am Lachenende berechnet wird:

$$X = \frac{2nk^2r}{Sc_T z_0 e^{\frac{1}{n}}}. \quad (\text{C.26})$$

Hierin ist k die von Karman Konstante ($k = 0,4$), γ_e die Eulerkonstante ($\gamma_e = 0,577$), z_0 die Rauigkeitslänge der Oberfläche um die Lache und Sc_T die turbulente Schmidtzahl, welche üblicherweise in [230] zu $Sc_T = 0.85$ gesetzt wird.

Die Größe Λ kann als Rauigkeitslängenverhältnis zwischen Oberflächenrauigkeit der Lache und der Oberflächenrauigkeit des umgebenen Terrains aufgefasst werden [215, 230, 232]:

$$\Lambda = \frac{1}{n} + 2\text{Ln}(1+n) + 1 - 2\gamma_e + \frac{k}{Sc_T} (1+n) f(Sc). \quad (\text{C.27})$$

Hier wiederum wird zusätzlich eine Funktion der Schmidtzahl $f(Sc)$ benötigt:

$$f(Sc) = \left(3,85 \sqrt[3]{Sc} - 1,3 \right) \frac{Sc_T}{k} \text{Ln}(0,13Sc) \quad \text{wenn } Re_0 < 0,13 \quad (\text{C.28})$$

$$f(Sc) = 7,3 \sqrt[4]{Re_0} \sqrt{Sc} - 5Sc_T \quad \text{wenn } Re_0 > 2 \quad (\text{C.29})$$

wobei für die Schmidtzahl $Sc = \frac{\nu}{D}$ und für die in der Gleichung zuvor noch enthaltene Rauigkeitsreynoldszahl $Re_0 = \frac{u^* z_0}{\nu}$ eingesetzt wird. Für Werte $0,13 \leq Re_0 \leq 2$ wird in ALOHA $f(Sc)$ linear zwischen beiden Werten interpoliert.