



STATUSPAPIER

Auswirkungsbetrachtungen bei störungsbedingten Stoff- und Energiefreisetzungen in der Prozessindustrie

Methodenübersicht und industrielle Anwendung



IMPRESSUM

Copyright DECHEMA – Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V. Theodor-Heuss-Allee 25, 60486 Frankfurt am Main, 2012, 2014, 2017

Bearbeiter des Statuspapiers im Rahmen des ProcessNet-Arbeitsausschusses "Auswirkungen von Stoff- und Energiefreisetzungen"

BAM Bundesanstalt für Materialforschung
und -prüfung, Berlin
ehemals Currenta GmbH & Co. OHG, Leverkusen
BASF SE, Ludwigshafen
Landesamt für Natur, Umwelt und
Verbraucherschutz (LANUV) NRW, Essen
Bayer Technology Services GmbH, BTS-OSS-PPS-
MPR, Leverkusen
Inburex Consulting GmbH, Hamm
Evonik Technology & Infrastructure GmbH
LUBW Landesanstalt für Umwelt, Messungen und
Naturschutz Baden-Württemberg, Karlsruhe
Bayer Technology Service GmbH, Leverkusen
Universität Hamburg
BAM Bundesanstalt für Materialforschung
und -prüfung, Berlin
Universität Duisburg-Essen; Campus Essen
Fraunhofer-Institut für Umwelt-, Sicherheits- und
Energietechnik UMSICHT, Oberhausen
Consilab Gesellschaft für Anlagensicherheit mbH,
Frankfurt am Main
Horst Weyer & Partner GmbH, Düren
Otto von Guericke Universität Magdeburg

Herausgeber ProcessNet-Fachgemeinschaft "Anlagen- und Prozesssicherheit" Vorsitzender: Dr. Gasche

Redaktion:

Dr. Claudia Loerbroks, DECHEMA e.V., Frankfurt am Main Dr.-Ing. Konstantinos Mitropetros, DECHEMA e.V., Frankfurt am Main

Das Buch ist mit großer Sorgfalt erstellt worden. Trotzdem kann die Fehlerfreiheit nicht garantiert werden. Die Benutzung dieses Buches und die Umsetzung der darin enthaltenen Informationen erfolgt daher ausdrücklich auf eigenes Risiko.

Erste Auflage, Oktober 2012, ISBN: 978-3-89746-135-2 Zweite, aktualisierte Auflage, Juni 2014, ISBN: 978-3-899746-156-74 Dritte Auflage, Januar 2017

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Freisetzungsflächen	4
2.1	Zweck der Ermittlung und Festlegung von Freisetzungsflächen	
2.2	Ermittlung von Freisetzungsflächen	
2.3	Ermittlung von Leckflächen	5
2.4	Quellenverzeichnis	30
3	Stofffreisetzung aus einer Umschließung	33
3.1	Physikalische Grundlagen	33
3.2	Modellierung	37
3.3	Beispiele	51
3.4	Symbolverzeichnis	54
3.5	Quellenverzeichnis	55
4	Flash-Verdampfung und Spray-Modelle	57
4.1	Einführung	57
4.2	Experimentelle Untersuchungen	58
4.3	Flash-Verdampfung	77
4.4	Spray-Modelle	79
4.5	Beispielrechnungen	106
4.6	Quellenverzeichnis	118
5	Verdunstung und Verdampfung aus einer Lache	122
5.1	Energiebilanz für die Lache	123
5.2	Verdunstungsmodelle	127
5.3	Berechnung der Lachengröße	137
5.4	Vergleichsrechnungen	144
5.5	Quellenverzeichnis	155
6	Gasausbreitung	158
6.1	Freistrahl eines Gases	160
6.2	Impulsfreie Freisetzung	192
6.3	Quellenverzeichnis	223

7	Brände	226
7.1	Voraussetzungen für Verbrennungsvorgänge	227
7.2	Brände von Flüssigkeiten und Gasen	228
7.3	Feststoffbrände	
7.4	Anwendungs- und Berechnungsbeispiele	331
7.5	Quellenverzeichnis	
7.6	Anhang	345
8	Explosion	355
8.1	Gaswolkenexplosion	356
8.2	Behälterbersten	
8.3	BLEVE	
8.4	Trümmerwurf	
8.5	Quellenverzeichnis	
9	Beurteilungswerte für störungsbedingte Expositionen	
9.1	Luftgetragene Schadstoffe	
9.2	Brand	409
9.3	Explosion	416
9.4	Quellenverzeichnis	423

1 Einleitung

Auswirkungsbetrachtungen werden für unterschiedliche Szenarien und Zielsetzungen in den Rechtsbereichen Arbeitsschutz, Immissionsschutz, Bauleitplanung und Katastrophenschutz durchgeführt. Hierbei werden Modelle zur Beschreibung der Emissionsquelle, Modelle für die atmosphärische Ausbreitung von Gasen, Modelle für Brand und Explosionen und Beurteilungswerte für die Auswirkungen dieser Szenarien benötigt.

Im vorliegenden Statuspapier werden Modelle zur Berechnung der Auswirkungen der störungsbedingten Freisetzung von Stoffen zur Verfügung gestellt, deren physikalische Grundlagen erläutert, Einsatzbereiche im Vergleich zu experimentellen Untersuchungen diskutiert und exemplarische Berechnungen gezeigt. Mit den vorgestellten Modellen werden der Stand der Modellierung in der Industrie im deutschsprachigen Raum dargestellt und darüber hinausgehend auch aktuelle Modelle der Wissenschaft vorgestellt. Der Fokus liegt auf der Anwendung von relativ einfachen, handhabbaren Formeln. Das Statuspapier soll durch die vergleichende Diskussion verschiedener Ansätze und Modelle dem Anwender Entscheidungsmöglichkeiten eröffnen, eine der jeweiligen Fragestellung angepasste Berechnungsmethode auszuwählen.

Es werden folgende Themengebiete behandelt:

- Freisetzungsflächen,
- Stofffreisetzung aus einer Umschließung,
- Quellterme bei Sprays und Lachen,
- Gasausbreitung,
- Bränden von Flüssigkeiten, Gasen und Feststoffen,
- Explosionen von Gaswolken und Bersten von Gehältern,
- Beurteilungswerte.

Im vorliegenden Statuspapier *nicht* behandelt werden:

- eine Modellierung der Vorgänge innerhalb einer Umschließung, die (insbesondere durch Druck- und Temperaturerhöhung) zum Versagen der Umschließung und zur Stofffreisetzung führen
- die Freisetzung von Stäuben,
- die Freisetzung in Gewässer und Böden,
- chemische Reaktionen der freigesetzten Stoffe,
- diffuse Quellen und schleichende, lang anhaltende Freisetzungen (> einige Tage).

Das Statuspapier richtet sich an Ingenieure und Naturwissenschaftler, die in der Prozessindustrie, in Forschungseinrichtungen, Universitäten und Hochschulen insbesondere in den Bereichen Verfahrensentwicklung, Planung, Umweltschutz und Anlagensicherheit tätig sind. Weitere Interessenten sind Anlagenbetreiber, staatliche Überwachungs- und Genehmigungsbehörden, Berufsgenossenschaften, unabhängige Prüf- und Beratungsinstitute, sicherheitstechnische Sachverständige sowie Ingenieurbüros für Anlagensicherheit.

Für die Anwendung des Statuspapiers sind Grundkenntnisse in den Bereichen Fluiddynamik, Thermodynamik und Wärmeübertragung nützlich.

Der Aufbau des Statuspapiers orientiert sich am Ablauf eines Szenarios. In der folgenden Abbildung 1.1 wird eine Übersicht der physikalischen Vorgänge bei der Freisetzung von Stoffen unter verschiedenen Freisetzungsbedingungen gegeben. Bevor der freigesetzte Massenstrom berechnet werden kann, müssen Angaben über die Leckflächen vorliegen. Hierzu werden im **Kapitel 2** des Statuspapiers Hinweise und Berechnungsansätze vorgestellt. Im **Kapitel 3** werden dann die Gleichungen für die Berechnung der Massenströme bei der Freisetzung von Flüssigkeiten und Gasen aus einer Umschließung angegeben.

Entsprechend der in der Abbildung 1.1 dargestellten unterschiedlichen Stoffeigenschaften und Betriebszustände bei der Freisetzung kann es bei einer Freisetzung aus der Flüssigphase zu Flashverdampfung und Spraybildung kommen (**Kapitel 4**). Der Anteil an ausgeregneter Flüssigphase bildet am Boden eine Lache, deren Verdampfungs- und Verdunstungsvorgänge im **Kapitel 5** beschrieben werden. Die Gasausbreitungsmodelle für eine impulsfreie Ausbreitung oder einen Freistrahl werden im **Kapitel 6** vorgestellt. Das **Kapitel 7** widmet sich den Bränden von Gasen, Flüssigkeiten und Feststoffen. Modelle zur Berechnung der Auswirkungen von Gasexplosionen, BLEVE (*boiling liquid expanding vapor explosion*) und Behälterbersten werden im **Kapitel 8** vorgestellt. Abschließend werden im **Kapitel 9** Beurteilungswerte vorgestellt und diskutiert.

Das vorliegende Statuspapier basiert auf dem Statuspapier Quelltermberechnung (2014) und wurde durch die Kapitel 8 und 9 erweitert. Darüber hinaus wurde das Kapitel 6 zur Gasausbreitung wesentlich erweitert. Andere Kapitel wurden aktualisiert und ergänzt.



Abb. 1.1: Übersicht über die physikalischen Vorgänge bei der Freisetzung von Stoffen

2 Freisetzungsflächen

2.1 Zweck der Ermittlung und Festlegung von Freisetzungsflächen

Bei Stofffreisetzungen ist die Ermittlung eines Quellterms erforderlich, um störungsbedingte Stofffreisetzungen aus einer Umschließung, ihr Ausmaß und ihre Auswirkungen im Rahmen von Sicherheitsbetrachtungen beurteilen zu können. Als Quelle wird ein Stoffmassenstrom aus einer Austrittsöffnung einer (gefahr-)stoffführenden und ggf. druckbeaufschlagten Umschließung betrachtet. Zur Bewertung dieser Stofffreisetzungen sind zunächst Freisetzungsflächen, die physikalisch begründbar und vernünftigerweise nicht auszuschließen sind, zu ermitteln. Danach sind die daraus austretenden Freisetzungsraten zu berechnen (siehe Kapitel 3). Aus der Freisetzungsfläche und -rate kann dann der Freisetzungsmassenstrom bestimmt werden.

In diesem Kapitel werden verschiedene Ursachen und Arten von Öffnungen einer Umschließung, wie z. B. eine Leckage eines Druckgerätes, und Abschätzungen und Annahmen für diese Freisetzungsflächen dargestellt. Als Ursachen für Leckagen werden verschiedene Störungsszenarien betrachtet. Zur Abschätzung der Leckflächen werden Modelle aus der Literatur zusammengestellt und deren Grundlagen, Anwendungsbereiche und exemplarische Abschätzungen erläutert.

2.2 Ermittlung von Freisetzungsflächen

Störungsbedingte Stofffreisetzungen erfolgen aus Austrittsöffnungen von (gefahr-) stoffführenden Umschließungen in die Atmosphäre. Folgende Arten von Freisetzungsflächen können z. B. auftreten:

- 1. Abriss einer Rohrleitung oder einer Schlauchleitung, z. B. an Füll- oder Entleerstellen,
- 2. Überfüllen, Überlaufen oder Auslaufen eines (Transport-)Behälters,
- Austrittsöffnung von mechanischen Druckentlastungseinrichtungen, z. B. an Sicherheitsventilen oder Berstscheiben, durch die die in der Anlage enthaltenen Stoffe beim Ansprechen dieser Einrichtungen zur Atmosphäre entspannt werden,
- 4. Versagen bzw. Undichtigkeit lösbarer Verbindungen, z. B. einer Dichtung in einer Flanschverbindung,
- Undichtigkeit von Behältern oder Rohrleitungen beispielsweise durch einen Wanddurchbruch, z. B. infolge eines Durchrisses in einer Behälter- oder Rohrleitungswandung, oder durch einen Stutzenabriss.

Eine weitere Art von Freisetzungsflächen können Flüssigkeitslachen darstellen, die sich nach einem Stoffaustritt aus einer Umschließung beispielsweise auf einer Bodenfläche ausgebildet haben. Diese werden in einem separaten Kapitel behandelt.

Diffuse Emissionen, die im Normalbetrieb beispielsweise aus lösbaren Verbindungen, wie Flansch-Dichtungssystemen oder Wellenabdichtungen von Armaturen oder Pumpen austreten können, sind nicht Thema dieses Dokumentes.

Für die Beispiele Nr. 1. bis 4., in denen Anlagenteile zur Atmosphäre öffnen, ergibt sich die Fläche der Freisetzungsöffnung aus dem freien Querschnitt, wie z. B. dem Querschnitt einer angeschlossenen Schlauchleitung oder dem Entlastungsquerschnitt eines Sicherheitsventils oder einer Berstscheibe.

2.3 Ermittlung von Leckflächen

Eine Art der Freisetzungsflächen sind Leckflächen von Wanddurchbrüchen in (gefahr-) stoffführenden und gegebenenfalls druckbeaufschlagten Anlagenkomponenten, wie Druckbehältern und Rohrleitungen. Die Einflussgrößen auf Leckflächen und das Leck-vor-Bruch-Kriterium, die vielen Methoden zugrunde liegen, werden in den Abschnitten 2.3.1 und 2.3.2 beschrieben. Mögliche Vorgehensweisen zur Leckflächenermittlung aus der Literatur und Technischen Regeln sind in den nachfolgenden Abschnitten 2.3.3 bis 2.3.5 zusammengestellt und anhand von Beispielen erläutert. Die Methoden und ihre Grundlagen, Voraussetzungen und Anwendungsgrenzen werden dargelegt.

Leckagen können bedingt sein

 durch Überbeanspruchung von Anlagenkomponenten, d. h. durch Überschreiten der Festigkeitsgrenze des Werkstoffs bei innerer oder äußerer Beanspruchung,

oder

 durch Schädigungen der Komponenten und Werkstoffe infolge von Werkstofffehlern, Korrosion oder Erosion mit flächigem oder lokalem Wanddickenabtrag oder äußeren mechanischen Einwirkungen.

Abschätzungen für Leckflächen basieren beispielsweise auf mechanischen oder chemischphysikalischen Vorgängen, die zu einem Leck führen können, oder auf empirisch ermittelten Modellen. Werden Leckflächen aus werkstofftechnischen, -mechanischen und bruchmechanischen Grundlagen ermittelt, können die Grenzbedingungen aus der Spannungs- oder Energiebilanz des Werkstoffes abgeleitet werden.

Bei der makroskopischen Betrachtung einer Anlagenkomponente, z. B. im Fall unzulässigen inneren Überdrucks, ist die Spannungsbilanz aus der Gesamtbelastung dieses Bauteils und den mechanisch-technologischen Festigkeitskennwerten des Werkstoffes entscheidend. Dazu kann das Verhältnis z. B. aus einer rechnerisch ermittelten Vergleichsspannung (z. B. gemäß AD 2000-Regelwerk [2.9]) und der Zugfestigkeit bewertet werden.

Unter dem mikroskopischen Aspekt, z. B. im Fall von Fehlern innerhalb des Werkstoffs, wird auf Grundlage der Bruchmechanik die Energiebilanz gezogen aus

- der lokalen Beanspruchung innerhalb eines Werkstoffes, z. B. der Spannungsspitze an einer Rissspitze, charakterisiert durch den Spannungsintensitätsfaktor, und
- einem "mikroskopischen" Werkstoffkennwert, z. B. der kritischen Bruchzähigkeit, der die Grenzbedingung für das Wachstum eines Risses ist.

Basierend auf diesen Kriterien der makroskopischen oder mikroskopischen Spannungs- oder Energiebilanz eines Bauteils können das Wachstum von Anrissen und die Leckflächen bei dem Wanddurchbruch dieser Risse berechnet werden. Des Weiteren kann damit rechnerisch überprüft werden, ob dieses Bauteil Leck-vor-Bruch-Verhalten aufweist, d. h. ob sich im eventuellen Leckagefall zunächst eine kleine stabile Lecköffnung ausbildet, bevor das gesamte Bauteil versagt. Dieses Leck-vor-Bruch-Verhalten wird im Abschnitt 2.3.2 erläutert.

Basierend auf diesen werkstofftechnischen Grundlagen können Leckflächen abgeschätzt werden, die bei dem Eintreten der Leckagen entstehen. Werden diese nicht unmittelbar entdeckt und werden nicht unmittelbar wirksame Gegenmaßnahmen getroffen, können sich die Leckagen gegebenenfalls aufweiten und ausdehnen. In diesem Fall sind bei den Auswirkungsbetrachtungen von Stofffreisetzungen die Leckflächen zum Zeitpunkt der Detektion der Leckagen und des Wirksamwerdens geeigneter Gegenmaßnahmen zu betrachten. Diese Leckflächen ergeben sich aus den Erkennungsgrenzen von Schädigungen, Lecköffnungen und/oder den daraus austretenden Stoffen:

- Die Erkennungsgrenzen von Fehlstellen in Anlagenkomponenten, die zu Leckagen führen können oder bereits Leckagen darstellen, sind abhängig von
 - o den Werkstoffeigenschaften,
 - o der Art der zerstörungsfreien Prüfverfahren und
 - o davon, ob repräsentative und kritische Prüforte ausgewählt werden.
- Die Erkennungsmöglichkeiten aufgrund der Eigenschaften und der Massenströme der freigesetzten Stoffströme hängen unter anderem ab
 - von der Erkennbarkeit der Stoffe durch Betriebspersonal, z. B. entsprechend der Geruchsschwelle oder der Sichtbarkeit der austretenden Stoffe,
 - o von der Zugänglichkeit und Einsehbarkeit der Anlagenkomponenten,
 - o von technischen Detektionsverfahren, z. B. Gasspürgeräten,

und in jedem Fall von

 der Art der Ausbreitung, beeinflusst von technischen Umgebungsbedingungen, wie Wärmedämmungen, benachbarten Anlagenteilen und Auffangtassen, und von den witterungsbedingten Umgebungsbedingungen.

Beispiele für die Erkennungsgrenzen sind im Abschnitt 2.3.5 aufgeführt.

Folglich sind Einzelfallbetrachtungen zur Ermittlung der Leckflächen durchzuführen, die auch die Eigenschaften und das Gefährdungspotential der gehandhabten Stoffe berücksichtigen.

2.3.1 Einflussfaktoren auf die Größe von Leckflächen

Die Fläche einer Leckage, die im Fall einer Werkstoff- oder Bauteilschädigung auftreten kann, ist von vielfältigen Einflussfaktoren und Randbedingungen abhängig.

Da die Ausprägung jeder dieser Faktoren und Bedingungen insbesondere in Prozessanlagen der chemischen Industrie eine große Bandbreite aufweisen kann, sind Leckflächen in der Regel als Einzelfallbetrachtungen unter Berücksichtigung dieser Faktoren und Bedingungen zu ermitteln. Diese haben Einfluss auf die Größe der Leckfläche und auf die Wahrscheinlichkeit ihres Auftretens. Diese Einflussfaktoren und Randbedingungen sind unter anderem:

- Mechanisch-technologische Eigenschaften, Qualit\u00e4t und Verarbeitung des Werkstoffs,
- Geometrie und Abmessungen der Anlagenkomponente, z. B. des Druckbehälters oder der Rohrleitung,
- Betriebs- und Umgebungsbedingungen der Anlagenkomponente,
- Werkstoffbeständigkeit, d. h. die Kombination von Werkstoffen und Betriebsbedingungen (wie Durchflussmedien, Aggregatzuständen, Drücken / Temperaturen, Strömungsgeschwindigkeiten),
- Art und Höhe der Beanspruchungen: z. B. Spannungen, lokale Spannungsspitzen, Schwingungen und/oder Lastwechsel, die im Normalbetrieb unter Betriebsbeanspruchungen, im Fall prozessbedingter Störungen (z. B. bei chemischen Reaktionen) oder unter äußeren Beanspruchungen auftreten können,
- Art, Fortschritt und Erkennbarkeit von herstellungsbedingten Fehlstellen oder Korrosionsschädigungen der Innen- oder Außenwandung, z. B. von Schweißnahtfehlern oder von flächigem Korrosionsabtrag, abrasiver oder Erosionskorrosion, Lochfraß- oder Spannungsrisskorrosion,
- Art, Umfang und Häufigkeit der Prüfungen der Anlagenkomponenten und
- Art, Qualität und Intervalle von Kontrollen und Wartungen der Anlagenkomponenten.

Die Qualifikation des Bedienungs- und Wartungspersonals und des "Anlagenläufers" hat einen wesentlichen Einfluss auf die frühzeitige Erkennung eventueller Schädigungen und Leckagen.

Im Rahmen von Gefährdungsbeurteilungen und Sicherheitsbetrachtungen sind unter anderem Beanspruchungen, chemische Reaktionen oder Korrosionen als mögliche Ursachen für Leckagen zu betrachten. Deren ordnungsgemäße Absicherung ist Voraussetzung für die Betrachtungen in diesem Kapitel (Vgl. auch TRAS 410 [2.10]).

2.3.2 Leck-vor-Bruch-Kriterium

Sicherheitstechnisch relevante Anlagenteile werden grundsätzlich so ausgelegt, hergestellt und geprüft, dass sowohl lokales als auch globales Versagen verhindert wird. Eine zusätzliche Sicherheitsreserve ergibt sich bei der Anwendung des Leck-vor-Bruch-Kriteriums, das auf bruchmechanischen Grundlagen beruht.

Druckbeaufschlagte Komponenten können beispielsweise infolge von lokalen Inhomogenitäten im Werkstoff durch Überschreiten der Festigkeitsgrenze des Werkstoffs im gesamten Bauteil oder in großen Bereichen des Bauteils versagen. In der Spannungsbilanz ist die auftretende Beanspruchung der Anlagenkomponente größer als die mechanischtechnologischen Werkstoffkennwerte. Dadurch kann eine lokale Instabilität, d. h. ein Wanddurchbruch, entstehen oder sogar eine globale Instabilität, d. h. ein Aufreißen oder Bersten, der Anlagenkomponente eintreten.

Die durch die Ausbreitung von Rissen infolge wechselnder Beanspruchung auftretenden Leckagen und Brüche können nicht mit der herkömmlichen Festigkeitsberechnung, sondern nur mit der Bruchmechanik erfasst werden. Das Versagensverhalten von Bauteilen kann mit Hilfe der Bruchmechanik beurteilt werden.

Wird bei der Rissverlängerung mehr Energie frei gesetzt als der Aufbau neuer Bruchflächen erfordert, tritt instabiles Risswachstum auf. Für linear-elastisches Werkstoffverhalten und elastisch-plastisches Werkstoffverhalten gelten verschiedenartige Werkstoffkennwerte als Grenzwerte. Bei linear-elastischem Werkstoffverhalten ist die plastische Verformung an der Rissspitze vernachlässigbar gering. Tritt an der Rissspitze eine plastische Zone auf, liegt elastisch-plastisches Werkstoffverhalten vor. Das Risswachstum erfolgt langsamer, da die Neubildung der plastischen Zone an der Rissspitze bei elastisch-plastischem Werkstoffverhalten verschieden verschieden erfolgt.

Mit der lokalen Energiebilanz kann die Rissentstehung und -ausbreitung beschrieben werden. In linear-elastischen, nicht verformungsfähigen Werkstoffen tritt ein lokales Versagen ein, wenn die bruchmechanische Beanspruchung der Rissspitze, der sogenannte Spannungsintensitätsfaktor, die kritische Bruchzähigkeit als lokalen Festigkeitskennwert überschreitet. Bei duktilen Werkstoffen mit einem großen Anteil plastischer Verformung beim Risswachstum, also bei elastisch-plastischem Werkstoffverhalten, tritt lokales Versagen durch plastische Instabilität bei Verringerung des tragenden Querschnitts ein, d. h. durch Überschreiten der plastischen Grenzlast.

Risswachstum

Ausgehend von Werkstoff-Inhomogenitäten, wie z. B. Kerben oder Korrosionsstellen innerhalb der Wandung eines Druckbehälters, können durch die Spannungskonzentration an dieser Stelle neue Oberflächen im Werkstoff gebildet werden, durch die ein Ausgangsriss entstehen kann. Bei einer lokalen Überbeanspruchung im Bereich der Rissspitze kann der Riss je nach Werkstoffeigenschaften und Betriebsbedingungen stetig wachsen (siehe Abbildung 2.1). Infolge zunehmender oder wechselnder Beanspruchung erfolgt dieses Risswachstum langsam und stabil in Längen- und Tiefenrichtung. Bei Erreichen der kritischen Risstiefe tritt lokale Instabilität ein: Das bedeutet, dass der Riss ohne weitere Beanspruchung instabil weiter wächst, bis er die Wand durchbricht. So entsteht ein kleines stabiles Leck.

Bei zunehmender oder wechselnder Beanspruchung wächst dieser Durchriss langsam und stabil in Längsrichtung weiter. Wird die kritische Risslänge des Durchrisses erreicht, schlägt das Risswachstum plötzlich – ohne weitere Beanspruchung - in schnelles instabiles Wachstum um. Dies führt zur globalen Instabilität, d. h. zum Bauteilversagen der gesamten Anlagenkomponente, z. B. zum Aufreißen eines Behälters oder einer Rohrleitung. Ist die Belastung von Rissen mit unterkritischer Rissgröße stationär, d. h. nimmt nicht zu und

ist nicht alternierend, findet kein Risswachstum statt.

Das Risswachstum, die kritischen Rissgrößen und infolgedessen die Versagensart von Anlagenkomponenten hängen im Wesentlichen von den Werkstoffeigenschaften, der Bauteilgeometrie und den Bauteilabmessungen ab. Bei spröden Werkstoffen ist der Anteil der plastischen Verformung bei der Rissausbreitung und beim Bruch geringer. Dies führt zu schnellerem Risswachstum und zu schnellerer globaler Instabilität. Bei zähen Werkstoffen wachsen Risse durch die Neubildung der plastischen Zone an der Rissspitze langsamer.

Leck-vor-Bruch-Verhalten

Eine Anlagenkomponente zeigt Leck-vor-Bruch-Verhalten, wenn ein Leck, d. h. eine lokale Instabilität, vor dem Aufreißen der gesamten Komponente, d. h. einer globalen Instabilität, auftritt (siehe Abbildung 2.1):

In diesem Fall entsteht beim Durchbruch einer Wandung zunächst ein stabiler Durchriss, ein kleines Leck. Die Risslänge beim Erreichen der kritischen Risstiefe (entsprechend der lokalen Instabilität) ist kleiner als die kritische Risslänge (entsprechend der globalen Instabilität).

Bei zunehmender oder wechselnder Beanspruchung wächst dieser Durchriss, diese Leckage, langsam und stabil weiter. Werden keine Maßnahmen ergriffen, kann dies zum Erreichen der kritischen Risslänge, d. h. zu eventuellem globalem Bauteilversagen, führen.

Leck-vor-Bruch-Kriterium

Die Anforderungen des Leck-vor-Bruch-Kriteriums gehen über die des Leck-vor-Bruch-Verhaltens hinaus. Zusätzlich gilt, dass der Zeitraum zwischen einem lokalen Bauteilversagen (einem kleinen, stabilen "Leck") und ggf. einem globalen Versagen (instabilem Risswachstum, z. B. mit Aufreißen eines Bauteils – "Bruch") ausreichend lang sein muss und Gegenmaßnahmen rechtzeitig wirksam werden:

- Eine Leckage muss in dem Zeitraum zwischen "Leck" und "Bruch" sicher und rechtzeitig erkannt werden, und
- es müssen rechtzeitig geeignete Maßnahmen getroffen werden, die ein unzulässiges weiteres Risswachstum, d. h. ein globales Versagen, sicher verhindern.

Die sichere und rechtzeitige Leckerkennung ist mittels technischer und / oder organisatorischer Maßnahmen, z. B. mittels Gaswarngeräten und qualifizierten Anlagenläufern, sicherzustellen. Für den Fall einer Leckage sind rechtzeitig wirksame Vorkehrungen festzulegen und umzusetzen, beispielsweise die Außerbetriebnahme und Instandsetzung der undichten Anlagenkomponente. Mit diesen Maßnahmen wird das Leckvor-Bruch-Kriterium erfüllt, wenn für die Anlagenkomponente selbst das Leck-vor-Bruch-Verhalten nachgewiesen ist.

Voraussetzungen für Leck-vor-Bruch-Verhalten

Die Wahrscheinlichkeit des Leck-vor-Bruch-Verhaltens von Anlagenkomponenten wird erhöht, wenn im Wesentlichen die folgenden Voraussetzungen erfüllt sind [2.12, 2.18]:

- Nachgewiesener Einsatz von duktilen Werkstoffen.
- Spröde Werkstoffe dagegen führen bei Überbeanspruchungen zu einem schnellen Wachstum eines ggf. vorhandenen Risses bis zu einem plötzlichen Zerplatzen der Anlagenkomponente, ohne dass zuvor ein stabiles erkennbares Leck entsteht.
- Geeignete Konstruktion, Fertigung und Herstellung, um lokale Fehlstellen und Spannungsspitzen innerhalb der Werkstoffe zu minimieren und eine Überdimensionierung der Wanddicke der Anlagenkomponenten aus bruchmechanischer Sicht zu vermeiden. Dies ist beispielsweise in der Regel bei der Anwendung des AD2000-Regelwerks [2.9] gegeben. Mit einer Überdimensionierung der Wanddicke wird die Wahrscheinlichkeit des Bruch-vor-Leck-Verhaltens wesentlich erhöht. Denn wächst ein Anriss unter Belastung, erfolgt dies in Tiefen- und Längenrichtung. Hat die Risstiefe die Wanddicke erreicht und der Riss damit die Wandung durchdrungen, ist der Riss zu diesem Zeitpunkt umso länger, je dicker die Wandung des Bauteiles ist. Umso wahrscheinlicher ist es, dass die Länge des Risses beim Wanddurchbruch bereits die kritische Risslänge überschritten hat und unmittelbar zum Aufreißen des Behälters führt.

- Vermeidung schädigender Einflüsse, z. B. Korrosion oder Erosion, und schädigender Beanspruchungen, wie Schwingungen. Beispielsweise gilt das Leck-vor-Bruch-Kriterium nicht für abrasive Abträge und nicht für flächige oder lokale Korrosion.
- Geeignete Prüfungen bei der Herstellung der Werkstoffe und der Anlagenkomponenten, um herstellungsbedingte Fehlstellen weitestgehend zu verhindern (siehe z. B. [2.9]), in Verbindung mit wiederkehrenden Prüfungen während des Lebenslaufes dieser Komponenten, um eventuelle Schädigungen, wie Korrosionserscheinungen, rechtzeitig zu erkennen und ihnen entgegenzuwirken.Mittels geeigneter zerstörungsfreier Prüfungen kann festgestellt werden, ob Schädigungen aufgetreten sind und in welchem Ausmaß sie sich gegebenenfalls ausdehnen. Bei Druckgeräten, die ohne Mängel einer Wasserdruckprüfung unterzogen wurden, kann davon ausgegangen werden, dass eventuell vorhandene Risse zum Zeitpunkt der Prüfung und bis zur nächsten Prüfung unterkritisch sind und somit in diesem Zeitintervall im normalen Betrieb ein stabiles Risswachstum eintritt [2.8, 2.14]. Der Beginn und das Fortschreiten von Schädigungen können mit einer Wasserdruckprüfung jedoch nicht festgestellt werden.

Sicherheitsreserve durch Leck-vor-Bruch-Kriterium

Sicherheitsbetrachtungen mit Hilfe der Bruchmechanik und des Leck-vor-Bruch-Kriteriums ermöglichen beispielsweise die Erhöhung der Sicherheitsreserve bei der geeigneten Auslegung, Herstellung und Prüfung druckführender Apparate und Rohrleitungen. Das Leckvor-Bruch-Kriterium kann bei der differenzierten Sicherheitsbetrachtung von Anlagenkomponenten bezüglich Stoffeinwirkungen und Brandfall-Szenarien angewendet werden. Die bruchmechanische Beurteilung möglicher Leckagen erlaubt es, einzelfallspezifische Störungsszenarien zu ermitteln, um deren Auswirkungen zu beurteilen. In Folge können geeignete ereignisverhindernde und/oder auswirkungsbegrenzende Maßnahmen festgelegt werden



Hierbei bedeuten:

c [mm]	halbe Risslänge
a [mm]	Risstiefe oder Risslänge
Indices	
i	beginnend
С	kritisch
cL	kritisch, bei lokaler Instabilität
cG	kritisch, bei globaler Instabilität

2.3.3 Methoden zur Ermittlung von Leckflächen

In der Literatur sind unterschiedliche Methoden zur Abschätzung von Leckflächen angegeben. Sie beruhen beispielsweise auf werkstofftechnischen Grundlagen, wie der mikroskopischen Energiebilanz innerhalb der Werkstoffe (siehe oben zum Abschnitt 2.3.) oder empirischen Ermittlungen. Für wesentliche Veröffentlichungen zu Abschätzungen von Leckflächen sind die zugrunde liegenden Modelle und Methoden, die Voraussetzungen, Randbedingungen und Anwendungsgrenzen dieser Methoden und Erläuterungen zur praktischen Anwendbarkeit zusammenfassend dargestellt.

Einige dieser Methoden basieren auf der Leckentstehung durch das Wachstum von Anrissen in Werkstoffen und dem Leck-vor-Bruch-Verhalten von Anlagenkomponenten (siehe Abschnitt 2.3.2). Bei den angegebenen Leckflächen handelt es sich um lokale stabile Leckagen, z. B. bei einem Wanddurchbruch eines Risses, nicht um Leckflächen bei einem globalen Versagen, z. B. bei einem Aufreißen oder Bersten von Anlagenkomponenten.

2.3.3.1 Autoren: Brandl / Wiedemann / Strohmeier [2.1]

2.3.3.1.1 Zusammenfassung der Methode

Für eine Zylinder-Stutzen-Verbindung entwickelten die Autoren ein Modell zur Ermittlung der Leckfläche, d. h. des Öffnungsquerschnittes von Lecks, in druckbelasteten Komponenten. Das Modell geht von der Bildung und dem Wachstum von Rissen als Leckursache und vom Leck-vor-Bruch-Verhalten der Komponenten aus.

Mithilfe von Beispielrechnungen dieses Modells wurden Nomogramme erstellt, aus denen die Leckfläche in Abhängigkeit von den Geometriedaten der Zylinder-Stutzen-Verbindung, dem Innendruck und Werkstoffkennwerten (u. a. dem Elastizitätsmodul) entnommen werden kann.

2.3.3.1.2 Grundlage der Methode

Das Rechenmodell basiert auf der mikroskopischen Energiebilanz (siehe Abschnitte 2.3. "Ermittlung von Leckflächen", 2.3.2 "Leck-vor-Bruch-Verhalten"). Aus der Energiefreisetzungsrate bei der Rissentstehung und beim Rissfortschritt infolge der lokalen Spannungsspitze wird die Änderung der potentiellen Gesamtenergie der Werkstoffstruktur und daraus der Spannungsintensitätsfaktor ermittelt. Überschreitet dieses Maß für die lokale Werkstoffbeanspruchung den zulässigen bruchmechanischen Festigkeitsgrenzwert, die kritische Bruchzähigkeit, treten Rissfortschritt und nachfolgend ein wanddurchdringender Durchriss auf.

Mit Versuchen an einer Zylinder-Stutzen-Verbindung wurde zunächst die Stutzeninnenkante als Stelle mit der höchsten Beanspruchung dieses Bauteils ermittelt. Das Berechnungsmodell für die Leckflächen wurde mittels der Finite-Elemente-Methode auf Basis von Versuchen an dieser druckbeaufschlagten Zylinder-Stutzen-Verbindung mit einem Anriss von 1 mm Tiefe an der Stutzeninnenkante entwickelt, der infolge des Risswachstums zu einer Leckage führte.

2.3.3.1.3 Voraussetzungen und Anwendungsgrenzen

Nomogramme zur Ermittlung der Leckfläche von Zylinder-Stutzen-Verbindungen wurden für die folgenden Daten abgebildet:

- Verhältnis von mittlerem Zylinderradius zur Zylinderwanddicke von 10,
- Verhältnis von mittlerem Stutzen- zu mittlerem Zylinderradius von 0 bis 0,5
- Verhältnis der Stutzen- zur Zylinderwanddicke von 0,25 bis 1.

Voraussetzungen für die Anwendung dieses Modells sind die Überprüfung und Bestätigung, dass das Leck-vor-Bruch-Verhalten für die betrachtete Anlagenkomponente gegeben ist (siehe Abschnitt 2.3.2 "Leck-vor-Bruch-Verhalten").

Die mit diesem Modell ermittelte Leckfläche kann als Eingangsgröße für Auswirkungsbetrachtungen genutzt werden, wenn nicht nur das Leck-vor-Bruch-Verhalten, sondern auch das Leck-vor-Bruch-Kriterium erfüllt wird, d. h. die rechtzeitige Erkennung und Wirksamkeit von Gegenmaßnahmen sichergestellt sind.

2.3.3.1.4 Erläuterungen

Für ein Beispiel eines DN 100-Stutzenabzweiges von einem DN 400-Rohr, beide aus nichtrostendem Stahl 1.4492, mit Wanddicken von 10 bzw. 20 mm, ergibt sich unter einem inneren Überdruck von 100 bar eine berechnete Leckfläche von 1,8 mm².

2.3.3.2 Autoren: Strohmeier / Wiedemann [2.3]

2.3.3.2.1 Zusammenfassung der Methode

Dieses Rechenmodell der Autoren geht ebenfalls, wie das vorangehende [2.1], von der Bildung und dem Wachstum von Rissen als Leckursache und vom Leck-vor-Bruch-Verhalten der Komponenten aus. Betrachtet werden in diesem Fall Druckbehälter.

2.3.3.2.2 Grundlage der Methode

Anhand von Finite-Elemente-Berechnungen mit bruchmechanischen Grundlagen, die nicht detailliert angegeben sind, werden Leckflächen in Abhängigkeit von der Behältergeometrie, dem Innendruck (berücksichtigt als tangentiale Membranspannung) und der Streckgrenze und Bruchzähigkeit des Werkstoffes ermittelt. Diese Berechnungen wurden mittels Versuchen verifiziert.

2.3.3.2.3 Voraussetzungen und Anwendungsgrenzen

Voraussetzungen für die Anwendung dieses Modells sind, wie auch bei der Literaturstelle [2.1], die Überprüfung und Bestätigung, dass das Leck-vor-Bruch-Verhalten für die betrachtete Anlagenkomponente gegeben ist (siehe Abschnitt 2.3.2 "Leck-vor-Bruch-Verhalten").

Die Ausführung und Geometrie der untersuchten Druckbehälter sind nicht angegeben. Es ist davon auszugehen, dass es sich um zylindrische Behälter ohne signifikante Stutzenabzweige handelt.

Einige Berechnungsergebnisse für Leckflächen sind beispielhaft für die folgenden einzelnen Daten in einer Tabelle zusammengestellt:

- Zylinderdurchmesser von 400 und 2 000 mm,
- Zylinderwanddicken von 5 und 15 mm,
- eine Streckgrenze von 400 N/mm² und
- Bruchzähigkeiten von 3 000 und 6 000 N mm^{-3/2}.

Die für diese Beispiele ermittelten Leckflächen betragen 70 bis ca. 100 mm².

Die Ermittlung der Leckflächen für andere Parameter ist in dieser Literaturstelle nicht dargestellt.

Da die Grundlagen und Randbedingungen für die rechnerische Abschätzung der Freisetzungsfläche nicht bzw. nicht explizit angegeben sind, kann der Anwendungsbereich dieser Literaturstelle nicht entnommen werden.

2.3.3.3 Autor: Brötz [2.2]

2.3.3.3.1 Zusammenfassung der Methode

W. Brötz geht in seinem Gutachten "Sicherheit von Chemieanlagen im Hinblick auf den Nachbarschaftsschutz" - für bestimmte Rohrleitungsdimensionen - pauschal von der Annahme aus, dass als größte Leckfläche ein Querschnitt von der Länge des Rohrdurchmessers und der Breite von 1/100 des Rohrdurchmessers nicht ausgeschlossen werden kann.

2.3.3.3.2 Grundlage der Methode

Grundlagen und Herleitungen für diese Annahme, z. B. physikalische oder werkstofftechnische Grundlagen oder empirische Untersuchungen, werden in dem Gutachten nicht angegeben.

2.3.3.3.3 Voraussetzungen und Anwendungsgrenzen

Die Annahme der Leckfläche bezieht sich auf Rohrleitungen der Nennweiten DN 80 bis DN 300. Des Weiteren werden in dem Gutachten keine Randbedingungen und Anwendungsgrenzen genannt. Für die Leckflächenannahme dieses Gutachtens können daher in diesem Dokument keine geeigneten Anwendungsfälle angegeben werden.

2.3.3.3.4 Erläuterungen

Ein Vergleich beispielsweise mit der Leckflächenermittlung anhand der Literaturstelle [2.1] ist nicht möglich, da sich diese auf Zylinder-Stutzen-Verbindungen bezieht und in dem Gutachten dieser Literaturstelle von W. Brötz [2.2] Rohrleitungen betrachtet werden. Angaben zu Rohrleitungsabzweigen enthält das Gutachten von W. Brötz nicht.

2.3.3.4 Autoren: Friedel / Westphal [2.4], [2.5], [2.24]

2.3.3.4.1 Zusammenfassung der Methode

Die Autoren gehen in ihrem Bericht "Modelle für die Berechnung der Leckraten aus druckführenden Apparaten und Rohrleitungen" [2.4] ebenfalls von einem Leck-vor-Bruch-Verhalten des Werkstoffes bzw. des Bauteiles aus. Als Ursache von Leckagen wird das Fortschreiten von Anrissen betrachtet, die herstellungsbedingt vorhanden und nach zerstörungsfreien Werkstoffprüfungen unerkannt gebliebenen sind.

Die Größe der Risse, die im Allgemeinen auftreten, geben die Autoren – entsprechend eines Vortrages von H. Gräfen bei dem GVC-/DECHEMA-Arbeitsausschuss "Sicherheitsgerechtes Auslegen von Chemieapparaten" in 01.1986 - mit einer Spaltweite von ca. 0,1 mm und einer

Länge von ca. 50 mm an. Unter der Annahme eines Rechteckquerschnitts ergäbe sich eine Leckfläche von ca. 5 mm².

In einem weiteren Bericht gehen Friedel und Westphal [2.5] von empirischen Leckabmessungen aus, die in der Regel ca. 0,1 bis 1 mm Breite und ca. 10 bis 100 mm Länge, entsprechend häufigen kritischen Risslängen, aufweisen.

2.3.3.4.2 Grundlage der Methode

Bei den angegebenen Leckabmessungen handelt es sich um empirische Abschätzungen für Druckbehälter in Chemieanlagen.

2.3.3.4.3 Voraussetzungen und Anwendungsgrenzen

Voraussetzungen für die Anwendung dieser Abschätzung sind die Überprüfung und Bestätigung, dass das Leck-vor-Bruch-Verhalten für die betrachtete Anlagenkomponente gegeben ist (siehe Abschnitt 2.3.2 "Leck-vor-Bruch-Verhalten").

2.3.3.5 Autoren: Kefer / Kastner / Krätzer [2.6]

2.3.3.5.1 Zusammenfassung der Methode

Die Autoren gehen in Untersuchungen zur Rauhigkeit der Risswände bei realen Lecks (Zug-/ Biegebeanspruchung) von Leckflächen bis zu 14 mm² aus [2.6].

2.3.3.5.2 Grundlage der Methode

Die Vorgehensweise bei dieser Abschätzung wird nicht angegeben.

2.3.3.5.3 Voraussetzungen und Anwendungsgrenzen

Randbedingungen und Voraussetzungen für diese Abschätzung werden nicht genannt.

2.3.3.6 Autor: RWTÜV [2.7]

Eine für die Landesanstalt für Immissionsschutz NRW erstellte Studie des Rheinisch-Westfälischen Technischen Überwachungsvereins, Essen [2.7] schließt die Entstehung einer halbkreis- bzw. ellipsenförmigen Rissfläche für Risse von ca. 40 bis 50 mm Länge nicht aus. Die Annahme des Leck-vor-Bruch-Verhaltens wird bestätigt.

In der Studie wird ein Grenzkriterium zum plötzlichen Versagen von Behältern angegeben. Spontanes Bauteilversagen ist demnach erst bei sehr langen Rissen in der Behälterwand zu erwarten. Das wären, abhängig von Risstiefe und vorherrschender Spannung, Risslängen von 400 bis 500 mm und darüber. Spontanes Entstehen derartig langer Risse ist praktisch auszuschließen. Eine Rissentstehung durch zyklischen Betrieb mit vielen Lastwechseln würde im Rahmen der wiederkehrenden inneren Prüfungen bemerkt werden. Die Ermittlung von Leckflächen wird in dieser Studie nicht angegeben.

2.3.3.7 Autor: J. Schmidt [2.25]

In dem Artikel zur "Auslegung von Schutzeinrichtungen für wärmeübertragende Apparate" untersucht der Autor J. Schmidt Leckagen des Mantelraumes nach außen und Leckagen zwischen zwei Druckräumen von Wärmeüberträgern. Bei inneren Leckagen ist davon auszugehen, dass sie nur in Einzelfällen auszuschließen sind. Die relevanten Einflussgrößen (siehe auch Abschnitt 2.3.1) werden dargelegt. Eine mantelseitige Leckage eines wärmeübertragenden Apparates wird als sehr selten beurteilt und die Möglichkeit des eventuellen Ausschlusses bei wirksamen Prüfungen in Betracht gezogen. Voraussetzung ist die Vermeidung mechanischer Einwirkungen von außen.

2.3.3.7.1 Zusammenfassung und Grundlage der Methode

Entsprechend praktischer Erfahrungen in der chemischen und petrochemischen Industrie wird als gängige Praxis beschrieben, als Fläche einer inneren Leckage unter bestimmten Voraussetzungen geringere Werte als den doppelten Rohrquerschnitt zu betrachten. Die Leckfläche ist als Einzelfallbetrachtung abzuschätzen.

Aufgrund von Erfahrungswerten und statistischen Auswertungen mit Betriebswärmeüberträgern, Schadensuntersuchungen und Messungen an Modellapparaten [2.26] wird die Abschätzung einer Leckfläche von 20 mm², entsprechend einem äquivalenten Durchmesser von 5 mm, als ausreichend konservativ für innere und äußere Leckagen von Wärmeüberträgern der chemischen und petrochemischen Industrie unter den folgenden Voraussetzungen erachtet.

Unter diesen Voraussetzungen kann die Leckfläche von 20 mm² aufgrund von Erfahrungswerten auch für sehr seltene mantelseitige Leckagen an Wärmeüberträgern abgeschätzt werden, wenn ein Leitungsabriss durch mechanische Einwirkungen von außen ausgeschlossen werden kann.

- "Ordnungsgemäße Auslegung des Wärmeübertragers, d. h. alle Beanspruchungen im Betrieb werden bei der Auslegung berücksichtigt (Druck, Temperatur, Eigengewicht, Zusatzbelastungen, Wärmedehnungen, Schwingungen),
- Mindestnennweite DN 50 bei langen Einzelrohren (Rohrschlangen in Behältern),
- ausreichende Festigkeit von Rohranschlüssen, z. B. Mindestnennweite DN 50 bei sehr gefährlichen Stoffen und DN 25 bei den übrigen Gefahrstoffen, und/oder der Schutz gegen Abriss durch äußere Krafteinwirkung,
- zäher Werkstoff (z. B. austenitischer Stahl wie 1.4571),
- keine Korrosions- oder Erosionsbeanspruchung (z. B. Spannungsspitzen neben Schweißnähten, Konzentration korrosiv wirkender Bestandteile, Ausgasung von Sauerstoff, ungeeignete Werkstoffpaarungen, zu hohe Strömungsgeschwindigkeiten),
- keine periodische Erregung nahe der Eigenfrequenz,
- keine regelmäßigen, großen dynamischen Belastungen, z. B.
 Temperaturwechselspannungen beim An-/Abfahren des Apparates,
- keine größeren externen mechanischen Belastungen,
- regelmäßige wiederkehrende Prüfungen,
- zuverlässige und rechtzeitige Leckdetektion vor ernsten Auswirkungen (z. B. Druck, Temperatur, Stand, Konzentrationsüberwachung) und Möglichkeit von geeigneten Gegenmaßnahmen,
- Möglichkeit der Abschottung des Wärmeübertragers von anderen Anlagenteilen bei Störungen."

Diese Leckfläche stellt den kleinsten Freisetzungsquerschnitt dar, der unter den Annahmen in der Veröffentlichung in der Praxis sicher detektiert werden kann, um anschließend den Schutz von Mensch und Umwelt zu gewährleisten.

Weitere Literaturstellen zu Abschätzungen von Leckflächen werden in dieser Veröffentlichung beschrieben:

- Für Anlagen mit wassergefährdenden, unterkühlten Flüssigkeiten:
 - Hypothetische größere Leckflächen von ca. 100 mm² entsprechend einem äquivalenten Durchmesser von ca. 11 mm [2.27]

- Gemäß Berechnungen von K. Strohmeier [2.8], [2.29]:
 - Für zylindrische Behälter mit Innendrücken bis 25 bar: Leckflächen von 4,4 bis 7,9 mm²,
 - Für eine Behälter-Stutzen-Verbindung mit einem Innendruck von 100 bar: Leckflächen von 27 mm².

Für die Leckflächen-Berechnungsergebnisse von K. Strohmeier für Stutzenabzweige an Behältern bei Innendrücken bis 100 bar wurde in diesem Artikel von J. Schmidt die folgende Ausgleichsfunktion, die auch in der zurückgezogenen TRB 801 Nr. 25 Anlage verwendet worden ist, angegeben:

A=0,00035 DN^{2,2}

(2.1)

Hierbei bedeuten:

A [mm ²]	Leckfläche
DN [mm]	Nennweite der Rohrleitung gemäß DIN EN 764-1

Als Fazit wird in diesem Artikel die Leckfläche von 20 mm² für Apparate unter moderatem Innendruck als ausreichend konservativ beurteilt.

2.3.3.7.2 Voraussetzungen und Anwendungsgrenzen

Voraussetzungen der obigen Abschätzungen sind die Sicherstellung der Kriterien zur Erfüllung des Leck-vor-Bruch-Verhaltens der Wärmeübertrager und die Vermeidung mechanischer Einwirkungen von außen. Weitere Voraussetzungen, insbesondere zur Abschätzung innerer Leckagen, die sich im Wesentlichen auf die Auslegung, Herstellung, Prüfung und Beanspruchung der Wärmeübertrager beziehen, werden detailliert angegeben.

2.3.3.8 Autor: Hahn [2.15], [2.16], [2.17]

Das Leck-vor-Bruch-Verhalten wird anhand der Berechnung des Risswachstums eines sogenannten "Ausgangsfehlers" und der kritischen Rissgrößen gemäß der Bruchmechanik überprüft und bestätigt. Auf dieser Basis werden wahrscheinliche und maximale Leckflächen der bruchmechanisch ermittelten Durchrisse berechnet. Dazu werden Modelle zur Leckflächenberechnung verglichen und bewertet. Anhand von Beispielberechnungen für typische druckführende Behälter und Rohrleitungen der chemischen Industrie wird die physikalisch/werkstofftechnische Plausibilität der Größenordnung vorhandener Abschätzungen und Annahmen für Leckflächen bestätigt.

Für typische Bauteile können Nomogramme zur Abschätzung von Leckflächen erstellt werden. Anhand der dargestellten bruchmechanischen Berechnungen können <u>realistische Leckflächen</u> für die voraussichtliche Durchrisslänge (Leck) infolge des Wachstums eines realistischen Ausgangsfehlers ermittelt werden und <u>konservative Leckflächen</u> für die kritische Risslänge als Grenzwert für das "Aufreißen"/globale Bauteilversagen, d. h. als Grenze zwischen "Leck-vor-Bruch-" und "Bruch-vor-Leck"-Verhalten, abgeschätzt werden.

2.3.3.8.1 Zusammenfassung der Methode

Berechnung des Risswachstums:

Risswachstum ist unter bestimmten Randbedingungen berechenbar. Die errechnete Rissgröße hängt, neben den Werkstoffeigenschaften, wesentlich von Art, Form und Größe des angenommenen Ausgangsfehlers ab.

Für typische Behälter und Rohrleitungen der Chemieindustrie wurden nicht detektierbare Anrisse abgeschätzt und das Risswachstum, die kritische Risstiefe, die Durchrisslänge und die kritischen Risslänge bruchmechanisch berechnet. Anhand des Vergleichs der Durchrisslänge mit der kritischen Risslänge wird das Leck-vor-Bruch-Verhalten dieser Anlagenkomponenten bestätigt.

Die im Abschnitt 2.3.2 "Leck-vor-Bruch-Verhalten" zusammengefassten Voraussetzungen für das Leck-vor-Bruch-Verhalten werden anhand dieser Berechnungen bestätigt.

Berechnung der Leckfläche:

Die zu betrachtende Leckfläche entsteht nach einem Wanddurchbruch eines Risses durch dessen Aufweitung unter mechanischer Beanspruchung.

Führen die kinetischen Kräfte des durch das Leck ausströmenden Mediums zur Bewegung der Rissufer, d. h. zur zunehmenden Aufweitung des Leckquerschnitts, ist die dynamische Leckfläche zu betrachten, die sich durch diese dynamischen Effekte ausbildet.

Unter statischen Bedingungen ist die Bewegung der Rissoberflächen eines Durchrisses vernachlässigbar gering. Wechselwirkungen zwischen dynamischer Bewegung der Rissoberflächen und transienten Strömungskräften des austretenden Mediums sind nicht signifikant. Bei dünnwandigen Anlagenkomponenten ist der dynamische Einfluss auf die Leckfläche vernachlässigbar. In diesem Artikel werden statische Leckflächen für annähernd unbewegliche Rissoberflächen betrachtet.

2.3.3.8.2 Grundlage der Methode

Berechnung des Risswachstums:

Für unterkritisches Risswachstum gilt für sinusförmige zyklische Belastung das (halb-) empirische Modell nach P. C. Paris [2.23].

Berechnung der Leckfläche:

Modelle zur Leckflächenberechnung liegen für linear-elastisches und elastisch-plastisches Werkstoffverhalten vor. Einige Modelle beinhalten Korrekturen für die plastische Verformung an der Rissspitze und das Beulen der Bauteile infolge der Oberflächenkrümmung.

Für linear-elastisches Werkstoffverhalten mit vernachlässigbarer plastischer Deformation an der Rissspitze gibt es im Wesentlichen die Modelle von G. R. Irwin und D. S. Dugdale [2.11, 2.13, 2.19]. Weitere Modelle berücksichtigen den Einfluss des Beulens und ggf. der plastischen Verformung: das "KWU-Small-Scale Yielding Modell" von Kastner [2.19, 2.20], das Modell von Wüthrich – jeweils basierend auf den Modellen von Irwin ("Wüthrich I.") und Dugdale ("Wüthrich II") [2.19, 2.22] und das KWU-DLECK-Modell von Bartholomé [2.21].

Diese Modelle zur Leckflächenberechnung wurden anhand von Beispielberechnungen für typische druckführende Behälter und Rohrleitungen der chemischen Industrie verglichen, mittels Plausibilitätskontrolle untereinander bewertet [2.21, 2.22] und an einigen praktischen Beispielen bestätigt. Für die Modelle, die plastisches Verformen und Aufweiten durch Beulen berücksichtigen, ergeben sich Leckflächen in der gleichen Größenordnung. Das Modell, das am konservativsten bezüglich der maximalen Leckfläche und somit bezüglich der ungünstigsten Auswirkungen der Stofffreisetzungen ist, ist das KWU-DLECK-Modell (siehe Abschnitt 2.3.5, Abbildung 2.2). Daher wurden die nachfolgenden Berechnungen von Leckflächen mit diesem Modell durchgeführt.

2.3.3.8.3 Voraussetzungen und Anwendungsgrenzen

Die Berechnungen gelten unter anderem unter den folgenden Randbedingungen:

- Der Ausgangsriss hat eine ideale (halb-)elliptische Form;
- bei dem Ausgangsfehler handelt es sich um eine Werkstoff-Inhomogenität im unbeeinflussten Grundwerkstoff, nicht in oder in der Nähe von Schweißnähten,
- die Betrachtungen gelten nicht im Fall von Schädigungen des Bauteils und des Ausgangsrisses z. B. durch Korrosion, Erosion (gegebenenfalls auch Flächenabtrag) und / oder mechanische Einwirkungen.

Die beispielhaften Berechnungen für ferritischen Stahl bei Umgebungstemperatur (siehe Abschnitt 2.3.5) sind konservativ bezüglich der Werkstoffe mit höherer Duktilität, wie austenitischem Stahl.

2.3.3.8.4 Erläuterungen

Die Beispielberechnungen (siehe Abschnitt 2.3.5) zeigen im Wesentlichen zwei wichtige Auswirkungen der variierten Parameter auf die Leckfläche:

- Zunehmende Beanspruchung, d. h. zunehmender Innendruck, führt zu einer weiteren Rissöffnung und damit zu einer größeren Leckfläche. Da die kritische Risslänge mit vermindertem Innendruck größer wird, nimmt die maximal mögliche Leckfläche ebenfalls zu.
- Die Zunahme der Einflussgröße "Beulen" infolge der Oberflächenkrümmung, die durch abnehmenden Radius und vermindertes Verhältnis zwischen Wanddicke und Radius charakterisiert wird, führt aufgrund der größeren Rissaufweitung zu einer stärkeren Zunahme der Leckflächen mit zunehmender Risslänge.

2.3.3.9 Technische Regel wassergefährdender Stoffe (TRwS) / Arbeitsblatt DWA-A 785: Bestimmung des Rückhaltevermögens bis zum Wirksamwerden geeigneter Sicherheitsvorkehrungen – R1 –[2.28]

2.3.3.9.1 Zusammenfassung der Methode

Für den Gewässerschutz ist für bestimmte Anlagen mit wassergefährdenden Stoffen gemäß Wasserrecht sicherzustellen, dass ein ausreichendes Rückhaltevolumen für Leckageflüssigkeiten vorhanden ist, bis geeignete Sicherheitsvorkehrungen wirksam werden. Dieses Rückhaltevolumen ist unter anderem auf Basis einer potentiellen Leckfläche zu bestimmen.

Für Behälter, Rohre und Formstücke wird in dieser Technischen Regel eine Obergrenze für die Abschätzung einer Leckfläche von 10^{-4} m² = 100 mm² angegeben. Bei Armaturen wird eine Leckfläche nicht berücksichtigt, wenn deren Gehäuse bestimmten Technischen Regeln entsprechen. Anderenfalls ist als Leckfläche die maximale Fläche der Durchlassöffnungen anzusetzen.

Bei Flanschverbindungen ist keine Leckage zu betrachten, wenn diese so ausgeführt sind, dass die Dichtungen nicht aus ihrem Sitz gedrückt werden können, z. B. als Flansche mit Nut/Feder, Vor-/Rücksprung oder bei Verwendung metallarmierter oder kammprofilierter Dichtungen. Werden diese Bedingungen nicht eingehalten, jedoch besondere Anforderungen an Anfahrvorgänge eingehalten und Druckstöße bei der Rohrleitungsauslegung berücksichtigt, ist die Leckfläche nach der Formel 2.1 zu ermitteln. Anderenfalls ist die Leckfläche gemäß der Formel 2.3 abzuschätzen:

$$A = L_s * h_d$$
(2.3)

Hierbei bedeuten:

A	Leckfläche [mm ²]
L _s [mm]	Abstand zwischen zwei benachbarten Flanschschrauben
h _d [mm]	Dicke der Dichtung

2.3.3.9.2 Grundlage der Methode

In dieser Technischen Regel ist eine Grundlage der Methode nicht angegeben. Es ist davon auszugehen, dass die Abschätzung einer maximalen Leckfläche auf Empirie beruht.

2.3.3.9.3 Voraussetzungen und Anwendungsgrenzen

Die für Behälter und Rohrleitungen angegebene Obergrenze der Leckflächenabschätzung gilt für solche Behälter, bei denen das plötzliche großflächige oder totale Versagen der flüssigkeitsführenden Anlagenteile mit hinreichender Sicherheit ausgeschlossen werden kann (Leck-vor-Bruch-Kriterium). In dieser Technischen Regel wird davon ausgegangen, dass das Leck-vor-Bruch-Kriterium erfüllt ist, wenn die Behälter und Rohrleitungen bestimmte Normen und Technische Regeln erfüllen.

2.3.3.10 Purple Book [2.30]

Das "Purple Book" enthält Methoden zur Risikoberechnung für gefährliche Stoffe, die auf verfügbaren Modellen und Daten beruhen. Leckagehäufigkeiten werden für verschiedene Anlagenkomponenten vorgegeben, wie Druckbehälter, drucklose Lagerbehälter oder Rohrleitungen. Diese betrachteten Anlagenkomponenten schließen auch die verbundenen Rohrleitungen ein. Eine Differenzierung nach der Ausführung (z. B. Werkstoffen), Betriebsparametern (Druck, Temperatur), Qualitätsniveau oder möglichen schädigenden Einflüssen erfolgt nicht. Die Qualität des Managements wird ebenso nicht berücksichtigt.

2.3.3.10.1 Zusammenfassung der Methode

Für Behälter, Apparate und Rohre werden Eintrittswahrscheinlichkeiten für globales Versagen, d. h. z. B. einen Rohrabriss, und für lokales Versagen, d. h. eine Leckage, angegeben. Die Eintrittswahrscheinlichkeiten für den lokalen Leckagefall beziehen sich beispielsweise auf

- eine Leckgröße von 10 mm Durchmesser bei Druckbehältern oder drucklosen Lagerbehältern, entsprechend einer Leckfläche von ca. 80 mm², und
- eine Leckfläche mit einem Durchmesser von 10% der nominalen Nennweite bei Rohrleitungen (maximal DN 50), entsprechend einer Leckfläche von ca. 20 mm².

2.3.3.10.2 Grundlage der Methode

Die für diese Berechnungen zu berücksichtigenden Ausfallwahrscheinlichkeiten von Anlagenteilen basieren auf einer sogenannten "COVO-Studie" von 1981. Weitere Ausfallwahrscheinlichkeiten wurden in verschiedenen Studien ermittelt, die über mehrere Jahre im Auftrag der Niederländischen Regierung durchgeführt wurden.

2.3.3.10.3 Voraussetzungen und Anwendungsgrenzen

Bei den angegebenen Eintrittswahrscheinlichkeiten bestimmter Leckgrößen, in Abhängigkeit von z. B. der Nennweite bei Rohrleitungen, sind die Randbedingungen, die die Leckfläche beeinflussen (siehe Abschnitt 2.3.1), nicht angegeben. Eine differenzierte Einzelfallbetrachtung ist mit diesen Daten nicht gegeben.

2.3.4 Beispiele zur Ermittlung von Leckflächen

Das Ausmaß und die Auswirkungen von Stofffreisetzungen können mit Hilfe der Bruchmechanik betrachtet werden, wenn die dafür benötigte Größe der Leckage mit dem Leckvor-Bruch-Kriterium abgeschätzt wird.

Für das Beispiel der Undichtigkeit einer druckführenden Rohrleitung kann die Größe einer vernünftigerweise nicht auszuschließenden Leckage für einen stabil wachsenden Riss in der Außenwandung ermittelt werden, der durch lokale Überbeanspruchung entstanden ist. Um die maximale Größe einer Leckage abzuschätzen, kann davon ausgegangen werden, dass ein größerer Riss bis zum Durchbruch durch die Außenwandung noch stabil fortschreitet, eine Leckage verursacht und gerade noch nicht zum Bersten der Rohrleitung führt.

Mit der bruchmechanischen Ermittlung von Leckgrößen können einzelfallspezifische Beurteilungen erfolgen und geeignete Maßnahmen zur Auswirkungs- und Schadensbegrenzung für die zu betrachtenden Störungsszenarien festgelegt werden. Außerdem können die bruchmechanisch abgeschätzten Leckgrößen zur Plausibilitätsüberprüfung der Konventionen gemäß Regelwerken und gemäß Abstimmungen zwischen Behörden, Sachverständigen und Betreibern angewendet werden.

Beispiel für einen herstellungsbedingten, nicht entdeckten Fehler als Leckursache:

Eine herstellungsbedingte, festigkeitsmäßig unbedenkliche Schweißnahtpore in einem unlegierten Stahl wurde aufgrund der geometrischen Anordnung bei der Durchstrahlungsprüfung der Schweißnaht im Rahmen der Herstellung nicht detektiert. Diese Pore öffnet sich im Laufe des Betriebes bis zur Oberfläche der Schweißnaht, so dass ein kreisförmiges Leck mit einem Durchmesser von ca. 1 mm entsteht. Die entsprechende Leckfläche beträgt in diesem Beispiel ca. 0,8 mm².

Beispiel für einen nicht entdeckten Anriss als Leckursache:

Im Rahmen einer Änderung eines Druckbehälters erfolgte eine nicht erkannte, geringfügige mechanische Beschädigung in Form einer schmalen rissähnlichen Kerbe. Aufgrund der sehr geringen Tiefe und Breite (< 0,1 mm) war diese Oberflächenungänze durch die anschließend durchgeführte visuelle Prüfung und zerstörungsfreie Prüfung (Oberflächenrißprüfung mittels Farbeindringverfahren) nicht erkennbar. Mehrfache Lastwechsel beim An- und Abfahren dieses Druckbehälters von Atmosphären- auf maximalen Betriebsüberdruck führten zum Wachstum dieses Risses in Längen- und Tiefenrichtung. Aufgrund des zähen Werkstoffes, der geeigneten Konstruktion und der Herstelllungsprüfungen ist das Leck-vor-Bruch-Verhalten bei diesem Druckbehälter gegeben. Beim Wanddurchbruch dieses Risses war eine stabile Risslänge von etwa 10 mm bei minimaler Rissbreite erreicht.

Beispiel für eine nicht entdeckte Korrosionsschädigung als Leckursache:

Ein Druckbehälter aus Edelstahl wird mit chlorid-haltiger wässriger Lösung bei ca. 100°C betrieben. Durch Lochfraßkorrosion entsteht ein kreisförmiges Leck von 2 mm Durchmesser, entsprechend einer Leckfläche von ca. 3 mm². In diesem Fall wird davon ausgegangen, dass in Verbindung mit der Lochfraßkorrosion keine Spannungsrisskorrosion auftritt.

Aufgrund der sogenannten "Inkubationszeit" bis zum Beginn einer Lochfraßkorrosion, die grundsätzlich nicht vorhersehbar ist, war die Lochfraßkorrosion bei der letzten regelmäßigen wiederkehrenden Prüfung noch nicht entdeckt.

Diese Leckage ist wegen der kleinen Leckfläche festigkeitsmäßig nicht relevant.

Da der Druckbehälter aus verfahrenstechnischen Gründen nicht wärmegedämmt, sondern nur mit einem Berührungsschutz (Lochblech mit Abstandshalterungen) versehen ist und zugänglich und einsehbar ist, wird diese Leckage durch den Flüssigkeitsaustritt unmittelbar durch den "Anlagenläufer" erkannt und der Behälter entleert und außer Betrieb genommen. Aufgrund der Stoffeigenschaften der chlorid-haltigen wässrigen Lösung (nicht brennbar, nicht giftig) ist der geringe, kurzzeitig freigesetzte Flüssigkeitsstrom sicherheitstechnisch unbedenklich.

Beispiel für eine Leckfläche entsprechend der Erkennungsgrenze des Stoffaustrittes:

In einem Ammoniak-führenden Druckbehälter trat aufgrund unzureichender Konditionierung des Ammoniak eine lokale, stabile Leckage auf. Die Bedingungen für Leck-vor-Bruch-Verhalten waren für diesen Druckbehälter gegeben. Aufgrund der geringen Geruchsschwelle des in dem Behälter gehandelten Stoffes wurde der freigesetzte, durch die Dämmung hindurch tretende Leckagestrom kurzfristig durch das Betriebspersonal ("Anlagenläufer") erkannt und der Druckbehälter unmittelbar abgesperrt und entleert. Die Leckage hatte eine Größe entsprechend einem äquivalenten Durchmesser von ca. 5 mm, d. h. mit einer Leckfläche von ca. 20 mm².

Für dieses Beispiel der Leckfläche wird im nachfolgenden Kapitel 3 "Stofffreisetzung aus einer Umschließung" jeweils ein Berechnungsbeispiel für den Massenstrom einer unterkühlten Flüssigkeit und eines Gas-Flüssigkeits-Gemisches dargestellt.

Berechnungsbeispiele für die bruchmechanische Leckflächenermittlung:

Für zwei typische Beispiele druckführender Komponenten in Chemieanlagen werden die im Abschnitt 2.3.3.8 angegebenen Berechnungen dargestellt.

1. Für das Beispiel eines kugelförmigen Bodens eines Druckbehälters aus ferritischem Stahl mit einem Durchmesser von 1 600 mm (Abbildung 2.2) wurde zunächst die kritische Risslänge gemäß den in dem Abschnitt 2.3.3.8 ausgeführten Werkstoffeigenschaften und den Grenzbedingungen für globales Versagen errechnet. Für diese Grenze zwischen Leck-vor-Bruch- und Bruch-vor-Leck-Verhalten ergibt sich bauteil- und werkstoff-spezifisch eine kritische Risslänge von 300 mm. Für diese maximale Risslänge, bis zu der gerade noch ein stabiles Leck entstehen kann, wurden die Leckflächen ermittelt. Dazu wurden angegebenen KWU-DLECK-Modell Leckflächen gemäß dem oben in variierten Einflussfaktoren Abhängigkeit von den Innendruck und Geometrieparametern des Bauteils. d. h. Durchmesser und Wanddicke. berechnet. Bei einem inneren Überdruck von 100 bar ü z. B. wurden Leckflächen von ca. 120 bis 140 mm² berechnet. Die spezifischen Randbedingungen sind jeweils in Einzelfallbetrachtungen zu berücksichtigen.

2. Als weiteres Beispiel werden Leckflächen für verschiedene Rohre aus ferritischem Stahl in Abhängigkeit von der Risslänge berechnet (Abbildung 2.3). Dabei werden wiederum die Einflussfaktoren Beanspruchung, d. h. Innendruck mit 16 und 40 bar ü, und Geometrieparameter, d. h. Wanddicke und Durchmesser mit den Nennweiten DN 15 und DN 200, variiert.

Realistische Leckflächen werden bei der Betrachtung eines Durchrisses abgeschätzt, der durch Wachstum und Wanddurchbruch eines nicht detektierten Ausgangsfehlers entsteht. Für einen konservativ abgeschätzten Ausgangsriss von 10 mm Länge und 1 mm Tiefe in Rohren aus ferritischem Stahl mit den Nennweiten DN 15 und DN 200 unter innerem Überdruck von 16 und 40 bar führt die bis zu einem Wanddurchbruch durchgeführte Berechnung des Rissfortschritts gemäß Abschnitt 2.3.3.8 zu einer Durchrisslänge von 10,2 bis 11,8 mm. Die anschließende Leckflächenberechnung für eine realistische Durchrisslänge von ca. 10 mm ergibt in diesem Beispiel Leckflächen zwischen ca. 0,01 bis 0,2 mm².

Für Rohre dieses Beispiels werden maximale, d. h. kritische, Risslängen von ca. 30 - 90 mm entsprechend den Versagenskriterien aus dem Abschnitt 2.3.3.8 ermittelt. Die maximale Leckfläche ist durch diese kritische Risslänge von ca. 30 bis 90 mm auf ca. 2 bis 30 mm² begrenzt.



Abbildung 2.2: Leckflächen für einen Durchriß mit kritischer Rißlänge nach verschiedenen Modellen, abhängig von der normierten Membranspannung für einen Kugelboden eines Behälters aus ferritischem Stahl 1.0562. Margit Hahn, 1989



Abbildung 2.3: Leckflächen nach G. Bartholome et al. (KWU-DLECK) in Abhängigkeit von der Rißlänge für Rohre aus ferritischem Stahl 1.0345 mit Nennweiten von 15 und 200 mm bei Innendrücken von 16 und 40 bar Margit Hahn, 1989

2.4 Quellenverzeichnis

- [2.1] Brandl, H.; Wiedemann, G.; Strohmeier, K.: Beanspruchung und Öffnungsquerschnitt von Lecks in druckbelasteten Komponenten, Forschungsjournal Verfahrenstechnik, Heft 1 (1990)
- [2.2] Brötz, W.: Sicherheit von Chemieanlagen im Hinblick auf den Nachbarschaftsschutz Gutachten im Auftrag des Ministers für Arbeit, Gesundheit und Soziales des Landes NRW, Stuttgart, September 1979
- [2.3] Strohmeier, K.; Wiedemann, G.: Risikoanalysen; Maschinenmarkt, Würzburg 92 (1986) 29
- [2.4] Friedel, L.; Westphal, F.: Modelle f
 ür die Berechnung der Leckraten aus druckf
 ührenden Apparaten und Rohrleitungen; DECHEMA Monographien Band 107, VCH Verlagsgesellschaft (1987)
- [2.5] Friedel, L.; Westphal, F.: Mechanistic Prediction Model for Leakage Rates through Cracks; 3Rinternational, 28. Jahrgang, Heft 7, Aug. 1989
- [2.6] Kefer, V.; Kastner, W.; Krätzer, W.: Leckraten bei unterkritischen Rohrleitungsrissen; KWU, Hammerbacherstr. 12, 8520 Erlangen

- [2.7] Rheinisch Westfälischer TÜV, Essen: Beurteilung von Schweißverbindungen an Behältern mit druckverflüssigten Gasen; April 1988
- [2.8] Strohmeier, K.: Leckanalyse bei der Anwendung der Störfall-Verordnung; Chem.-Ing.-Tech. 62 (1990), No. 12
- [2.9] AD 2000-Regelwerk, Herausgeber: Verband der TÜV e. V., Berlin
- [2.10] Technische Regel zur Anlagensicherheit TRAS 410: Erkennen und Beherrschen exothermer chemischer Reaktionen – Ermittlung der Gefahren, Bewertung und zusätzliche Maßnahmen – Sicherheitstechnische Regel der Kommission für Anlagensicherheit, Stand: 9. Oktober 2012
- [2.11] Hahn H. G. (1976) Bruchmechanik. Teubner, Stuttgart
- [2.12] Munz D. (1984) Beurteilung von druckbeaufschlagten Komponenten nach dem Leck-vor-Bruch-Kriterium. In: Munz D. (Hrsg.): Leck-vor-Bruch-Verhalten druckbeaufschlagter Komponenten. Fortschr.-Ber. VDI-Z. 18, No. 14. VDI-Verlag GmbH, Düsseldorf
- [2.13] Rossmanith H. P. (1982) Grundlagen der Ingenieur-Bruchmechanik. In:
 Rossmanith H. P. (Hrsg.): Grundlagen der Buchmechanik. Springer Verlag,
 Berlin, Heidelberg, New York
- [2.14] Kiefer J. F., Mayex W. A., Eiber R. J.: A Study of the Causes of Failure of Defects that have survived a Prior Hydrostatic Test. Columbus, Ohio. The Pipeline Research Committee of the American Gas Association, NG-18 Report No. 111, Nov. 3, (1980)
- [2.15] Hahn H. G. (1970) Spannungsverteilungen an Rissen und festen Körpern. VDI-Forschungsheft 542. VDI-Verlag, Düsseldorf
- [2.16] Hahn, M: Calculation of leak sizes in pressurised vessels and pipes according to the leak-before-break criterion; Forsch Ingenieurwes (2009) 73; 77-86
- [2.17] Hahn, M: Ermittlung von Leckflächen druckführender Apparate und Rohrleitungen nach dem Leck-vor-Bruch-Kriterium; Chem.-Ing.-Tech. 81 (2009) Nr. 8, 1191
- [2.18] Strohmeier K., Wiedemann G. (1986) Risiken analysieren, Rechnerprogramm zur Ermittlung der Leckgröße beim Behälterauslegen. Maschinenmarkt, Würzburg 92 (29) 56-57
- [2.19] Wüthrich C. (1984) Die Berechnung von Leckflächen bei Druckbehältern mit Rissen. In: Munz D. (Hrsg.): Leck-vor-Bruch-Verhalten druckbeaufschlagter Komponenten. Fortschr.-Ber. VDI-Z, 18, No. 14. VDI-Verlag GmbH, Düsseldorf
- [2.20] Kastner W. et al. (1983) Untersuchungen zur instabilen Rißausbreitung und zum Rißstoppverhalten. Abschlußbericht zum Förderungsvorhaben BMFT 150 320.
 Kraftwerk Union, Erlangen
- [2.21] Bartholomé G., Keim E., Senski G. (1986) Experimental and Theoretical Determination of Leakage Areas due to Subcritical Cracks. Fracture Control of Engineering Structures – ECF 6. Kraftwerk Union Abt. R 214, Erlangen
- [2.22] Wüthrich C. (1983) Crack Opening Areas in Pressure Vessels and Pipes.Engineering Fracture Mechanics, Vol. 18, No. 5: 1049-1057
- [2.23] Ilschner B. (1982) Werkstoffwissenschaften. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
- [2.24] Westphal F. (1991) Berechnungsmodell für die Leckraten aus Rissen in Wänden druckführender Apparate und Rohrleitungen. Dissertation Universität Dortmund, Dortmund
- [2.25] Schmidt, J.: Auslegung von Schutzeinrichtungen für wärmeübertragende Apparate; Chem.-Ing.-Tech. 81 (2009), No. 1 - 2; 79 – 95
- [2.26] Thyer A. M., Wilday A. J., Bankes G.: The experimental study and simulation of tube rupture in shell-and-tube heat exchangers, IChemE Hazards XVI Conference, Manchester 2001
- [2.27] Deutscher Verband für Wasserwirtschaft und Kulturbau e. V. (DVWK), Regel zur Wasserwirtschaft 131/1996, Technische Regel wassergefährdender Stoffe (TRwS) – Bestimmung des Rückhaltevermögens, Kommissionsvertrieb Wirtschafts- und Verlagsgesellschaft Gas und Wasser mbH, Bonn 1996
- [2.28] Technische Regel wassergefährdender Stoffe (TRwS) Arbeitsblatt DWA-A 785: Bestimmung des Rückhaltevermögens bis zum Wirksamwerden geeigneter Sicherheitsvorkehrungen – R₁ – Deutsche Vereinigung für Wasserwirtschaft, Abwasser und Abfall e. V., Hennef, Juli 2009
- [2.29] Strohmeier, K.: Abschätzung des Gefährdungspotentials druckverflüssigter Gase; Chem.-Ing.-Tech. 65 (1993), No. 4, 410 – 414
- [2.30] Purple book Guidelines for quantitative risk assessment, CPR 18E, Committee for the Prevention of Disasters (CPR), The Hague, The Netherlands, 1999

3 Stofffreisetzung aus einer Umschließung

3.1 Physikalische Grundlagen

Bei einer Stofffreisetzung aus einer Öffnung in der Wand eines Behälters (Leck, Flansch, Sicherheitsventil) geht man bei der Berechnung der Quellraten von der Vorstellung aus, dass sich das Fluid im Behälter anfangs in Ruhe befindet. Die treibende Kraft für das Ausströmen des Fluids aus einem Behälter ist dann die Druckdifferenz zwischen dem Behälterdruck und der Umgebung. Der Behälterdruck kann prinzipiell entstehen durch

- den Betriebsdruck einer Fördereinrichtung wie Verdichter oder Pumpe.
- den Sättigungsdampfdruck bei Lagertemperatur
- ein entlösendes oder durch eine Reaktion produziertes Gas oder
- eine statische Flüssigkeitssäule

Bei den hier betrachteten Fluiden handelt es sich um Flüssigkeiten und Gase unter verschiedenen Betriebsbedingungen, die wie folgt unterscheiden werden:

- verdichtete Gase,
- druckverflüssigte Gase und
- Flüssigkeiten.

Ein Stoff liegt als Gas vor, wenn seine Temperatur T höher als die thermodynamisch kritische Temperatur T_{kr} ist. Unterhalb der kritischen Temperatur kann der Stoff gasförmig vorliegen, wenn der Druck p geringer als der Sättigungsdampfdruck p_v (T) ist. Die Erhöhung des Druckes über den Sättigungsdampfdruck bei der Betriebstemperatur führt zu einer Kondensation.

Ein Stoff liegt als Flüssigkeit vor, wenn seine Temperatur zwischen der Phasengleichgewichtstemperatur T_s zum aktuell herrschenden Druck und der Schmelztemperatur T_{Sch} liegt. Als Unterkühlung wird die Differenz zwischen tatsächlicher Flüssigkeitstemperatur und der Phasengleichgewichtstemperatur zum aktuell herrschenden Druck bezeichnet.

Mit dem Begriff "druckverflüssigte Gase" werden Stoffe bezeichnet, die als Zweiphasensystem und unter Überdruck in einem Behälter vorliegen. Die Gas- und die Flüssigphase befinden sich im thermodynamischen Gleichgewicht, wobei die Betriebstemperatur zwischen der kritischen Temperatur und der Tripelpunkttemperatur liegen muss. Neben den Fluideigenschaften und den Prozessbedingungen hängt der Massenstrom bzw. die Quellrate auch wesentlich von

- der Lage der Ausströmöffnung (Gas/Dampfraum oder im flüssigkeitsbenetzten Teil des Behälters) und somit von der Phasenzusammensetzung und
- Form der Ausströmöffnung, z. B. kurzer Stutzen, Blende, Rohrleitung oder Riss ab.

In den folgenden Betrachtungen werden soweit möglich die geometrischen Einflussfaktoren auf den Massenstrom von den Medium bedingten Eigenschaften getrennt.

3.1.1 Ausströmöffnungen

Die Festlegung der Ausströmöffnung ist zunächst unabhängig von der Art des Behälters (Rührkessel, Kolonne, Verdampfer, Tank usw.). Grundsätzlich ist zu unterscheiden, ob die Öffnung sich im Gasraum oder im Flüssigkeitsraum befindet.

3.1.1.1 Ausströmöffnung im Gas/ Dampfraum

Befindet sich im Behälter ein komprimiertes Gas, so strömt in der Regel Gasphase aus, bis der Überdruck im Behälter abgebaut worden ist. Bei einer genügend schnellen Entspannung kann es in der Praxis wegen der näherungsweise adiabat isentrop verlaufenden Zustandsänderung im Inneren des Behälters immer zu einer gravierenden Temperaturabsenkung kommen. Durch diese kann sich auch bei zunächst mit Gas gefüllten Behältern durch Kondensation im Nassdampfgebiet ein Zweiphasengemisch ausbilden.

Befindet sich im Behälter ein druckverflüssigtes Gas oder eine Flüssigkeit unter höherem Betriebsdruck so strömt nach der Öffnung des Lecks bzw. des Sicherheitsventils zunächst nur Gas oder Dampf aus. Bei einem durch eine große Ausströmöffnung verursachten großen Druckabfall würde die Flüssigkeit im Behälter nach der schlagartig einsetzenden Entspannungsverdampfung bzw. der (zusätzlichen) Entlösung eines Gases heftig aufwallen, so dass zumindest zeitweilig auch bei einer gasraumseitigen Ausströmöffnung ein Zweiphasengemisch aus Gas und Flüssigkeit austreten kann.

Bei einer kleinen Ausströmöffnung würde es dagegen bei einer Einphasenströmung von Gas bleiben, da der Druckabfall im Behälter relativ langsam erfolgt und die pro Zeiteinheit durch Entlösung oder Verdampfung gebildete Gasmenge vergleichsweise gering ist und das thermodynamische Gleichgewicht zwischen den Phasen praktisch immer erhalten bleibt. Die Abschätzung der Zusammensetzung des Zweiphasengemischs am Eintritt in die Ausströmöffnung ist für die in der Praxis vorkommenden Apparate und Stoffsysteme oft sehr schwierig. Grundsätzlich wird der Aufwallvorgang und damit der Gasgehalt des Zweiphasengemischs von den folgenden Parametern beeinflusst:

- Art der Wärmezufuhr: bei einer äußeren Wärmezufuhr über die Behälterwand, z.B. durch Beheizung oder Feuer, kommt es zu einer ungleichmäßigen Blasenverteilung im Behälter während es bei einer inneren Wärmefreisetzung, z.B. eine chemische Reaktion, eher eine gleichmäßige Gasverteilung vorliegt. Bei der Druckentlastung über ein Leck steht die gesamte Flüssigkeit als Wärmereservoir zur Verfügung. In der Regel entstehen die Blasen aber bevorzugt an Siedekeimen an der Behälterwand.
- Schaumfähigkeit des Systems. Ein Stoffsystem, dass zum Schäumen neigt, wird auch bei nur geringen Füllgraden zu einer Zweiphasenströmung in der Ausströmöffnung führen.
- Viskosität: Auch für viskose Stoffsysteme (> 100 mPa s) ist bekannt, dass es durch die Behinderung der Phasenseparation eher zu einem vollständigen Aufwallen kommt als bei dünnflüssigen Medien.
- Füllgrad: Die Füllhöhe im Behälter ist der wesentliche Parameter, der das Auftreten einer Zweiphasenströmung bei der gasraumseitigen Druckentlastung eines Behälters bestimmt. Dabei ist zu beachten, dass die Bedingungen in kugelförmigen Behältern anders sind als z.B. in stehenden oder liegenden zylindrischen Behältern.

In erster Näherung lässt sich der Gasgehalt am Eintritt in die Ausströmöffnung bei einer gasraumseitigen Druckentlastung mit der Modellvorstellung eines homogenen Flüssigkeits-Gas-Gemisches im Behälter beschreiben. Dabei wird vorausgesetzt, dass Gas und Flüssigkeit im Behälter gleichmäßig verteilt sind und damit der Massendampfanteil x₀ überall gleich ist. Diese Modellvorstellung, die zu einer oberen Abschätzung für den mitgerissenen Flüssigkeitsanteil führt, wird z.B. auch für eine konservative Auslegung von Entlastungseinrichtungen [3.1] herangezogen.

Der Massengasanteil vor der Ausströmöffnung lässt sich wie folgt berechnen:

$$\varepsilon = \frac{V_{Gasraum}}{V_{Behälter}}$$
(3.1)

$$x_{0} = \frac{1}{1 + \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \frac{\rho_{fl}}{\rho_{g}}}$$
(3.2)

3.1.1.2 Ausströmöffnung in der Flüssigphase

Nur bei sehr großer Unterkühlung strömt eine nicht-verdampfende Flüssigkeit aus. Ansonsten führt bei unter höherem Druck stehenden Behältern die Verdampfung der Flüssigkeit bzw. die Entlösung eines Gases aus der Flüssigkeit zur Bildung eines Zweiphasengemisches in der Ausströmöffnung bzw. bei großem Siedeverzug erst in der Umgebung.

3.1.1.3 Form der Austrittsöffnung

In der Praxis treten je nach Störungsfall sehr unterschiedliche Formen von Ausströmöffnungen auf. Für die Bestimmung von Quellraten ist dabei das Länge zu Durchmesser-Verhältnis der Öffnung wesentlich. Charakteristisch sind die folgenden Formen:

- kurze düsenartigen Öffnungen,
- Wanddurchrisse und
- mit einem Behälter verbundene Rohrleitungen.

Düsenartige Öffnung

Bei düsenartigen Öffnungen wird die Abweichung des realen Massenstroms vom dem durch eine ideale Düse austretenden Massenstroms durch eine Ausflussziffer beschrieben. Die gleiche Vorgehensweise wird auch bei der Freisetzung aus einem Sicherheitsventil angewendet. Hier werden von den Herstellern Ausflussziffern für Gase und für Flüssigkeiten angegeben.

Risse in Wänden

Ein Wanddurchriss in einem Behälter oder einer Rohrleitung weist zwar nur eine kurze Strömungsweglänge (entspricht der Wanddicke) auf, die Strömung verhält sich jedoch eher wie die durch eine Rohrleitung, da das Länge/Durchmesser-Verhältnis bei typischen Rissweiten von 0,1 bis 0,5 mm in der Größenordnung von 10 – 100 liegt. Der Massenstrom wird somit wie bei einer Rohrleitung wesentlich durch den Druckverlust längs des Strömungswegs und damit durch die Rauhigkeit der Risswände beeinflusst. Wanddurchrisse zeichnen sich durch zufällig auftretende Schlitzformen und innere Wandrauhigkeiten aus. Der sich ausbildende Strömungsweg wird dabei entscheidend vom Werkstoff und der Entstehungsgeschichte des Risses beeinflusst. In der Literatur sind allerdings nur wenige brauchbare Angaben über Abmessungen, Formen und insbesondere Wandrauhigkeiten von realen Rissen aufgeführt.

Die in [3.2] dargestellte Datenlage macht deutlich, dass im Prinzip für den Einzelfall Aussagen über die Rissgeometrie und evtl. auch über die zu erwartende Wandrauhigkeit gemacht werden kann, aber eine sinnvolle allgemeingültige Aussage nicht getroffen werden kann. Aus diesem Grund wird der Massenstrom durch einen Riss in erster Näherung unter Verwendung einer Ausflussziffer abgeschätzt.

Leck in einer Rohrleitung

Bei einer im Verhältnis zum Rohrquerschnitt kleinen Ausströmöffnung wird die Strömung im Prinzip auch durch die Hauptströmung im Rohr beeinflusst, da die Ausströmöffnung nicht mehr in der Hauptströmungsrichtung des Fluids liegt. Da die Fluidgeschwindigkeit im Rohr im Vergleich zu der in der Ausströmöffnung nur gering ist, kann für die Berechnung der Quellraten in erster Näherung von einem Ruhezustand des Fluids vor der Ausströmöffnung ausgegangen werden. Damit liegen dann ähnliche Bedingungen vor wie bei einem Leck in einem Behälter.

Bei einem Rohrabriss hingegen, ist mit einer großen Strömungsgeschwindigkeit und damit verbundenem Druckverlust in der Rohrleitung zu rechnen. Die dadurch verursachte Verringerung des Massenstroms gegenüber dem durch eine ideale Düse wird bei den Berechnungen mittels eines Strömungswiderstandsbeiwerts berücksichtigt.

3.2 Modellierung

3.2.1 Vereinfachungen

Stationäre Ausströmvorgänge

Das Ausströmen durch eine Ausströmöffnung in der Wand eines Behälters ist prinzipiell immer ein instationärer Vorgang, weil sich mit fortlaufender Zeit der Behälterdruck und damit das treibende Druckgefälle ändern. Ein Berechnungsmodell für Quellraten müsste also auch den transienten Verlauf des durch die Öffnung hervorgerufenen Druckentlastungsvorgangs als Eingabegröße beinhalten. Dies ist aber aufwändig, weil dann zusätzlich die Kenntnis des transienten Druckverlaufs im Behälter erforderlich wäre, der im Extremfall wiederum vom Aufwallen der Flüssigkeit bzw. dem Druckwiederanstieg durch Verdampfung, Gasentlösung oder gar Gasfreisetzung durch eine chemische Reaktion abhängt. Bei der Bestimmung der Quellraten soll deshalb von der im Hinblick auf die Größe der Quellrate konservativen Annahme eines während der gesamten Ausströmzeit konstanten Stagnationsdrucks bzw. Behälterinnendrucks vor der Ausströmöffnung ausgegangen werden. Die so berechneten Quellraten sind dann immer größer als die tatsächlich auftretenden, da der Druck im Behälter durch die ausströmende Quellrate stetig abnehmen würde.

Stoffeigenschaften

Das betrachtete Fluid soll aus einem (reinen) Stoff bestehen, dass heißt die Stoffeigenschaften vor der Ausströmöffnung sind konstant. In der Ausströmöffnung können sich die Stoffwerte und der Dampfgehalt entsprechend dem Druckabfall ändern. Grundsätzlich werden chemische Reaktionen, die während der Freisetzung längs des Strömungswegs auftreten könnten, nicht betrachtet. Die Gleichungen können auch angewendet, wenn bei Systemen aus mehreren Komponenten, die Stoffwerte in einen fiktiven Reinstoff umgewandelt werden. Insbesondere bei verdampfenden oder gasentlösenden Systemen sind aber Phasengleichgewichte zu beachten. Eine höhere Viskosität (>100 mPa s) der Flüssigkeit führt zu einer Verringerung des Massenstroms und wird bei den folgenden Betrachtungen nicht berücksichtigt.

Die beschriebenen Modelle wurden unter folgenden Annahmen hergeleitet und sollten bei Abweichungen von diesen Annahmen nur unter größter Vorsicht angewendet werden:

- bei Zweiphasenströmung mit verdampfender Flüssigphase unterhalb der kritischen Temperatur und des kritischen Druckes T / T_{kr} < 0,9 und p / p_{kr} < 0,5.
- unter der Voraussetzung eines idealen Gasverhaltens.
- für Newtonsche Flüssigkeiten mit nicht zu hohen Viskositäten (< 100 mPa·s)
- keine Reaktionen längs des Strömungswegs (wenn durch die Reaktion der Gasgehalt oder die Eigenschaften des Fluids nicht signifikant geändert werden, sind Reaktionen zulässig)
- keine Wärmezufuhr oder Wärmeverluste über die Rohr/Behälterwand
- für eindimensionale Strömung (z.B. mittlere Geschwindigkeit über Rohrquerschnitt)
- keine Entlösung von Gasen.

3.2.2 Physikalische/Chemische Modellierung und mathematische Beschreibung

Die hier beschriebenen Berechnungsmethoden können die komplexen Vorgänge beim Ausströmen eines Fluids nur näherungsweise beschreiben. Es muss daher darauf geachtet werden, dass der zu betrachtende ungünstigste Fall für die Auswirkungsbetrachtung durch das Modell konservativ abgeschätzt wird. So kann es z. B. auch bei einer Freisetzung im Gasraum eines Behälters durch das Aufschäumen der Flüssigkeit zu einem Austritt eines Zweiphasengemisches kommen. Wenn die Flüssigphase durch einen geringen Dampfdruck ein geringes Gefährdungspotential hat, ist die Betrachtung einer reinen Gasphasenströmung eine konservative Abschätzung. Für die verschiedenen Ausströmszenarien (Freisetzung aus dem Gasraum / Flüssigkeitsraum) und Ausströmgeometrien (Rohrleitung oder düsenartig bzw. Riss) werden die in der folgenden Tabelle aufgeführten Berechnungsmethoden empfohlen.

	Ausströmöffnung im	Gasraum	Ausströmöffnung im Flüssigkeitsraum		
	Gasströmung	Zweiphasenströmung	Flüssigkeit	Zweiphasenströmung	
	Kompressible,	Homogenes	Bernoulli –	Homogenes	
Rohrleitung	reibungsbehaftete Gleichgewichtsmodell		Gleichung mit	Gleichgewichtsmodell	
	Gasströmung mit Druckverlusten		Druckverlusten	mit Druckverlusten	
		(DIERS)		(DIERS)	
	(3.2.2.2)	(3.2.2.3)	(3.2.2.6)	(3.2.2.3)	
Düse,	Ideales	Homogenes	Bernoulli-	Homogenes	
"kurzes"	Ausströmen,	Ungleichgewichts-	Gleichung mit	Ungleichgewichts-	
Leck	Korrektur mit	modell nach Diener -	Ausflussbeiwert	modell nach Diener -	
	Ausflussbeiwert	Schmidt		Schmidt	
	(3.2.2.1)	(3.2.2.4)	(3.2.2.5)	(3.2.2.4)	

3.2.2.1 Gasförmige Strömung durch eine Düse / Riss

Die allgemeine Ausgangsgleichung für die Berechnung des gasförmigen Massenstroms lautet:

$$\dot{\mathbf{m}}_{g} = \boldsymbol{\alpha}_{g} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{G}_{g} \tag{3.3}$$

Die Massenstromdichte G_g beschreibt den auf die Ausströmfläche bezogenen Massenstrom durch eine reibungsfreie, ideale Düse und hängt im Wesentlichen von den Prozessparametern Druck und Temperatur sowie den Stoffwerten ab, während die durch die Geometrie der Ausströmöffnung bedingten Effekte in der Ausflussziffer α_g berücksichtigt werden.

Der gasförmige Massenstrom \dot{m}_g aus einem unter Überdruck p_0 stehenden Druckgerät durch eine Öffnung ins Freie (Index 1) lässt sich nach den z. B. in der ISO 4126-7 angegebenen Beziehungen berechnen. Eine kritische Strömung tritt auf, wenn:

$$\frac{p_1}{p_0} \le \left(\frac{2}{\kappa+1}\right)^{\frac{\kappa}{\kappa-1}}$$
(3.4a)

und eine unterkritische Strömung tritt auf, wenn

v

$$\frac{p_1}{p_0} > \left(\frac{2}{\kappa+1}\right)^{\frac{\kappa}{\kappa-1}}$$
(3.4b)

Der Massenstromdichte bei kritischer Strömung berechnet sich nach

$$G_{g} = \frac{3,948*10^{6} \cdot p_{0}}{3600} \sqrt{\kappa \left(\frac{2}{\kappa+1}\right)^{\frac{\kappa+1}{\kappa-1}}} \sqrt{\frac{M}{z T_{0}}}$$
(3.5)

Der Massenstromdichte bei unterkritischer Strömung berechnet sich nach

$$G_{g} = \frac{p_{0}*10^{6}}{3600} \sqrt{\frac{\frac{2\kappa}{\kappa-1} \left[\left(\frac{p_{1}}{p_{0}}\right)^{\frac{2}{\kappa}} - \left(\frac{p_{1}}{p_{0}}\right)^{\frac{\kappa+1}{\kappa}} \right]}{\kappa \left(\frac{2}{\kappa+1}\right)^{\frac{\kappa+1}{\kappa-1}}}} \sqrt{\frac{M}{z T_{0}}}$$
(3.6)

3.2.2.2 Gasförmige Strömung mit Druckverlust

Ein Verfahren zur Berechnung des Druckverlustes in einer Rohrleitung ist z. B. in [3.4] beschrieben. Zur Berechnung der Druckverluste wird das Rohrleitungssystem zunächst in einsträngige Rohrleitungsabschnitte mit konstantem Durchmesser und in Übergangsstücke wie Rohrquerschnittsänderungen und T-Stücke aufgeteilt. Die Zustandsgrößen am Anfang und am Ende dieser Abschnitte werden dann aus den Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie bestimmt. Hierbei werden die Betriebsbedingungen am Eintritt in die Rohrleitung als konstant zum Zeitpunkt der Entlastung vorausgesetzt. Darüber hinaus wird eine stationäre Strömung ohne Wärmeaustausch mit der Umgebung angenommen und die Wärmekapazität des Gases zumindest abschnittsweise als konstant angesetzt.

Unter diesen Voraussetzungen ist es möglich die Mach-Zahlen (Verhältnis der lokalen Geschwindigkeit zur Schallgeschwindigkeit) am Anfang und am Ende einzelner Rohrleitungsabschnitte zu bestimmen. Aus der Mach-Zahl lassen sich dann wiederum die Zustandsgrößen in dem jeweiligen Strömungsquerschnitt ermitteln:

$$T = \frac{T_0}{\left(1 + \frac{\kappa - 1}{2} Ma^2\right)}$$
(3.7)

$$p = \frac{p_0}{\left(1 + \frac{\kappa - 1}{2} \operatorname{Ma}^2\right)^{\frac{\kappa}{(\kappa - 1)}}}$$
(3.8)

$$\rho = \frac{\rho_0}{\left(1 + \frac{\kappa - 1}{2} \operatorname{Ma}^2\right)^{\frac{1}{(\kappa - 1)}}} \quad \rho_0 = \frac{p_0}{\operatorname{R} \operatorname{T}_0}$$
(3.9)

$$w = \frac{w_0 Ma}{\sqrt{1 + \frac{\kappa - 1}{2} Ma^2}} \quad w_0 = \sqrt{\kappa R T_0}$$
(3.10)

Bei der Berechnung des gasförmigen Massenstroms durch die Rohrleitung wird zunächst als Gegendruck der Umgebungsdruck angenommen. Mit diesem Massenstrom wird die Mach-Zahl am Austritt einer Rohrleitung nach

$$\dot{\mathbf{m}}_{g} = \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha}_{g} \cdot \mathbf{A} \cdot \sqrt{\frac{\kappa}{\mathbf{R}_{Gas} \mathbf{T}_{0} \cdot \mathbf{Z}} \left(1 + \frac{\kappa - 1}{2} \cdot \mathbf{M} \mathbf{a}^{2}\right)}$$
(3.11)

berechnet. Als Nebenbedingung ist zu beachten, dass in einer Rohrleitung die Mach-Zahl den Wert 1 nicht überschreiten kann. Daraus ergeben sich die folgenden Möglichkeiten:

- Der Druck am Ende der Rohrleitung ist gleich dem Umgebungsdruck und die Machzahl ist < 1 (unterkritische Strömung).
- Die Machzahl im Austritt beträgt 1. Es liegt eine kritische Strömung vor und der dazugehörige Druck wird berechnet.

Der Druckverlust der Rohrleitung wird aufbauend auf den Zustandsgrößen und der Strömungsgeschwindigkeit am Ende der Rohrleitung entgegen der Strömungsrichtung berechnet. Hierzu gibt es zwei Verfahren:

Druckverlustberechnung über die Strömungsgeschwindigkeit.

Aus der Mach-Zahl wird die Strömungsgeschwindigkeit berechnet. Für jedes Rohrleitungselement, wie Rohrleitung, Rohrbogen, T-Stück usw., wird der Druckverlust in Abhängigkeit von der (lokalen) Strömungsgeschwindigkeit berechnet. Der Druck am Eintritt des Rohrleitungselementes ergibt sich durch Addition des Druckverlustes und des Drucks am Austritt des Elementes: Die Mach-Zahl am Eintritt des Rohrleitungselementes lässt sich aus der oben genannten Beziehung für den Massenstrom in Abhängigkeit vom Druck berechnen. Ist der Druckverlust von der Geschwindigkeit am Eintritt des Rohrleitungselementes abhängig, so muss die Berechnung iterativ durchgeführt werden. Mit diesem Berechnungsverfahren werden für alle Rohrleitungselemente die Druckverluste und Strömungsgeschwindigkeiten berechnet. Hieraus ergibt sich der Druck am Eintritt des ersten Rohrleitungselementes. Formeln zur Berechnung der Druckverluste von Rohrleitungselementen in Abhängigkeit von der Strömungsgeschwindigkeit können z. B. [3.5] entnommen werden.

Druckverlustberechnung über die Mach-Zahl

Ausgehend von der Mach-Zahl am Ende der Rohrleitung kann die Mach-Zahl am Eintritt der Rohrleitung aus folgender Beziehung berechnet werden:

$$\zeta_{\text{Ges}} = \lambda \frac{1}{d} + \zeta_{\text{Einbauten}} = \frac{1}{\kappa} \left(\frac{1}{Ma_1^2} - \frac{1}{Ma_2^2} \right) + \frac{\kappa + 1}{2\kappa} \ln \left| \frac{2 + (\kappa - 1) Ma_2^2}{2 + (\kappa - 1) Ma_1^2} \left(\frac{Ma_2}{Ma_1} \right)^2 \right|$$
(3.13)

Der Index 1 bezieht sich auf den Eintritt in die Rohrleitung und der Index 2 auf den Austritt. Diese Beziehung gilt nur für einen Rohrleitungsabschnitt mit konstantem Durchmesser. Auf die Bestimmung der Rohrreibungszahl λ und der Widerstandsbeiwerte von Rohrleitungselementen $\zeta_{Einbauten}$ wird im Kapitel 3.2.2.7 näher eingegangen.

Verändert sich der Durchmesser eines Rohrleitungsabschnittes, so kann die Mach-Zahl am Eintritt der Rohrerweiterung oder –verengung aus folgenden Beziehungen berechnet werden:

$$\frac{Ma_{2}\sqrt{2+(\kappa-1)Ma_{2}^{2}}}{1+\kappa Ma_{2}^{2}} = \frac{Ma_{1}\sqrt{2+(\kappa-1)Ma_{1}^{2}}}{\left(1+\kappa Ma_{1}^{2}\right)+\left(\frac{p^{*}}{p_{1}}\right)\left(\frac{1-\frac{A_{1}}{A_{2}}}{\frac{A_{1}}{A_{2}}}\right)} \text{ mit } \frac{p^{*}}{p_{1}} = 1 \text{ für } Ma_{1} \le 1$$
(3.14)

Randbedingungen: $Ma_1 < Ma_{1, max}$ Rohrerweiterung: $Ma_{1, max} = 1$

(3.15)

Bei einer Rohrverengung wird die Strömung bis auf einen engsten Strömungsquerschnitt (vena contracta) eingeschnürt. Die Berechnung dieser Einschnürung ist – wie bei der Durchströmung von Blenden – sehr komplex, da der Durchmesser der vena contracta u.a. wesentlich vom Druckverhältnis p_1/p_2 abhängt. Auch ist es möglich, dass sich in der vena contracta Ma =1 einstellt. Für kleine Druckänderungen lässt sich Ma_{i,max} aus folgender Gleichung berechnen:

$$Ma_{1, \max} = \frac{A_2}{A_1} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\kappa + 1}{2} \right)^{\frac{1}{\kappa - 1}} \left(1 - \frac{A_2}{A_1} \right) + \frac{A_2}{A_1} \right] \left(\frac{2 + (\kappa - 1) Ma_1^2}{\kappa - 1} \right)^{\frac{\kappa + 1}{2(\kappa - 1)}}$$
(3.16)

Der Index 1 bezieht sich auf den Eintritt in die Rohrerweiterung oder -verengung und der Index 2 auf den Austritt.

Aus der Mach-Zahl am Eintritt in die Abblaseleitung Ma₁ und dem Druck am Austritt der Abblaseleitung p_{aus} wird der Druck des Sicherheitsventils berechnet.

$$p_{gegen} = \frac{p_0}{\left(\frac{2}{\kappa+1}\right)^{\frac{\kappa}{\kappa-1}} \left(1 + \frac{\kappa-1}{2} M a_1^2\right)^{\frac{\kappa}{\kappa-1}}} + p_{aus} - \frac{p_u}{\left(\frac{2}{\kappa+1}\right)^{\frac{\kappa}{\kappa-1}}}$$
(3.16a)

3.2.2.3 Homogenes Gleichgewichtsmodell mit Druckverlusten

Für die Berechnung des Massenstroms bzw. Druckverlustes in Rohrleitungen bei Gas-Flüssigkeits-Strömungen kann ein Ansatz von Leung/Grolmes [3.6] verwendet werden, der in [3.7] dargestellt ist.

Als Abkürzungen werden eingeführt:

$$\eta_{a} = \frac{p_{a}}{p_{0}} \eta_{2} = \frac{p_{2}}{p_{0}} \eta_{u} = \frac{p_{U}}{p_{0}}$$
(3.17, 3.18, 3.19)

Die Indices bedeuten hierbei:

- u: Umgebung
- a: Zustand am Eintritt in die Rohrleitung
- 0: Ruhezustand im Behälter
- 2: Zustand am Austritt der Rohrleitung

Der Kompressibilitätsfaktor wird aus folgenden Beziehungen berechnet:

$$\omega = \dot{x}_{0} + (1 - \dot{x}_{0}) \cdot \left[\frac{v_{g,0} - v_{f,0}}{\Delta h_{v,0}}\right]^{2} \cdot \frac{c_{pf,0} \cdot p_{0} \cdot T_{0}}{v_{0}}$$
(3.20)

$$v_{0} = \dot{x}_{0} \cdot v_{g,0} + (1 - \dot{x}_{0}) \cdot v_{f,0}$$
(3.21)

Der zweiphasige Massenstrom \dot{m}_{gf} , der durch die Rohrleitung strömt, wird mit dem im Kapitel 3.2.2.4 beschriebenen Verfahren bestimmt und dann wie folgt normiert:

$$m_{a}^{*} = \frac{\dot{m}_{gf}}{A_{a}\sqrt{p_{0}/v_{0}}}$$
(3.22)

Für das Druckverhältnis im Austrittsquerschnitt der Leitung gilt

$$\begin{split} \eta_{u} > \eta_{krit} & \Rightarrow \eta_{2} = \eta_{u} & \text{unterkritische Strömung} \\ \eta_{u} \leq \eta_{krit} & \Rightarrow \eta_{2} = \eta_{krit} & \text{kritische Strömung} \\ \text{mit } \eta_{krit} = \mathbf{m}_{a}^{*} \cdot \sqrt{\omega} & (3.23) \end{split}$$

Die Berechnung des Gegendruckverhältnisses η_a erfolgt für einen vorgegebenen Massenstrom iterativ mit:

$$\sum \left(\lambda \cdot \frac{1}{d}\Big|_{i} + \zeta_{i}\right) = 2 \cdot \ln \left\{\frac{(1-\omega)\eta_{a} + \omega}{(1-\omega)\eta_{2} + \omega} \cdot \frac{\eta_{2}}{\eta_{a}}\right\} + 2 \cdot \left(\frac{1}{m_{a}}^{*}\right)^{2} \cdot \left[\frac{\eta_{a} - \eta_{2}}{(1-\omega)} - \frac{\omega}{(1-\omega)^{2}} \cdot \ln \left\{\frac{(1-\omega)\cdot\eta_{a} + \omega}{(1-\omega)\cdot\eta_{2} + \omega}\right\}\right]$$
(3.24)

Prinzipiell lassen sich die angegebenen Gleichungen auch für ein druckverflüssigtes Gas anwenden, das am Eintritt in die Rohrleitung gerade im Gleichgewichtszustand vorliegt. Bei unterkühlten Flüssigkeiten am Eintritt in die Rohrleitung würde es zu einer Verdampfung längs des Strömungswegs kommen. Die Stelle, an der die Flüssigkeit verdampft, hängt dabei vom Grad der Unterkühlung, einem eventuell auftretenden Siedeverzug, der Strömungsgeometrie und der Strömungsgeschwindigkeit ab. Diese Stelle und der sich einstellende Massenstrom lassen sich deshalb mit den angegeben Gleichungen nicht berechnen..

3.2.2.4 Zweiphasenströmung mit dem Diener-Schmidt-Modell

Das einfachste Modell zur Berechnung der Massenstromdichte G für eine Zweiphasenströmung in einer Düse oder einer kurzen Ausströmöffnung stellt das sogenannte homogene Gleichgewichtsmodell dar. Dieses Modell wird z.B. in der sog. DIERS-Methode (z.B. API-RP 520) herangezogen, um den über ein Sicherheitsventil oder eine Berstscheibe abführbaren Massenstrom zu berechnen. Mit dem Modell ergeben sich deutlich geringere Mengenströme als in der Realität auftreten, so dass dieses Modell für die Auslegung der mindestens erforderlichen Entlastungsöffnung von Sicherheitsventilen konservativ ist [3.15].

Für die Berechnung der Quellraten werden jedoch konservative, obere Abschätzungen der maximalen Mengenströme benötigt. Effekte, wie Siedeverzug und Schlupf zwischen den Phasen führen in der Realität zu einer Vergrößerung der Zweiphasenmengenströme gegenüber den nach dem homogenen Gleichgewichtsmodell berechneten. Dies wirkt sich insbesondere bei leicht unterkühlter oder gerade siedender Flüssigkeit bzw. bei Zweiphasengemischen mit niedrigen Dampfgehalten vor der Ausströmöffnung aus. In zahlreichen Veröffentlichungen (z.B. Sozzi & Sutherland [3.8]) wurde gezeigt, dass je nach Art der Ausströmöffnung bis zu 5 mal größere Zweiphasenmengenströme auftreten können als nach dem homogenen Gleichgewichtsmodell berechnet.

In [3.9] beschreiben die Autoren eine Berechnungsmethode für den Zweiphasenmengenstrom, die auf der DIERS-Methode basiert und in der der Siedeverzug bei der Durchströmung von Düsen, Blenden, Sicherheitsventilen und Regelventilen berücksichtigt wird. Diese Methode lässt sich auch auf die Quellratenberechnung anwenden und führt zu realistischeren (weil größeren) Mengenströmen als das homogene Gleichgewichtsmodell. Die Methode wird auch in der Norm ISO 4126-10 [3.1] zur Auslegung von Sicherheitsventilen bei Zweiphasenströmung verwendet.

Der Parameter $\boldsymbol{\omega}$ wird wie folgt berechnet:

$$\omega = \frac{\dot{x}_0 v_{g,0}}{\kappa v_0} + \frac{c_{pf,0} T_0 p_0}{v_0} \left(\frac{v_{g,0} - v_{f,0}}{\Delta h_{v,0}} \right)^2 N$$
(3.25)

Das mittlere spezifische Volumen v_0 des Zweiphasengemisches wird in Abhängigkeit vom Strömungsmassengasanteil \dot{x}_0 und den spezifischen Volumina der Flüssigphase $v_{f,0}$ und der Gasphase $v_{g,0}$ berechnet:

$$v_0 = \dot{x}_0 \cdot v_{g,0} + \left(1 - \dot{x}_0\right) \cdot v_{f,0}$$
 (3.26)

Hierbei wird der Siedeverzugsfaktor N aus folgender Beziehung bestimmt:

$$\mathbf{N} = \left[\dot{\mathbf{x}}_{0} + \mathbf{c}_{\text{pf0}} \cdot \mathbf{T}_{0} \cdot \mathbf{p}_{0} \cdot \left(\frac{\mathbf{v}_{\text{g,o}} - \mathbf{v}_{\text{f,0}}}{\Delta \mathbf{h}_{\text{v,0}}^{2}} \right) \cdot \ln \left(\frac{1}{\eta_{\text{krit}}} \right) \right]^{a}$$
(3.27)

Der Exponent a wird in Abhängigkeit von der Freisetzungsart bzw. dem durchströmten Anlageteil festgelegt:

a = 0,6Leck, Regelventil, kurze Düsea = 0,4Sicherheitsventil

Das kritische Druckverhältnis

$$\eta_{krit} = \frac{p_{krit}}{p_0}$$
(3.28)

wird iterativ aus folgenden Beziehungen ermittelt:

$$ω≥2: η_{krit} = 0.55 + 0.217 \cdot \ln ω - 0.046 \cdot (\ln ω)^2 + 0.004 \cdot (\ln ω)^3$$
(3.29)

$$\omega < 2: \quad \eta_{krit}^2 + \left(\omega^2 - 2\omega\right) \cdot \left(1 - \eta_{krit}\right)^2 + 2 \cdot \omega^2 \cdot \ln\left(\eta_{krit}\right) + 2 \cdot \omega^2 \left(1 - \eta_{krit}\right) = 0 \tag{3.30}$$

Die Massenstromdichte G_{gf} und der zweiphasige Massenstrom \dot{m}_{gf} berechnen sich wie folgt

$$G_{gf} = \frac{\sqrt{\omega \cdot \ln\left(\frac{1}{\eta}\right) - (\omega - 1) \cdot (1 - \eta)}}{\left[\omega \cdot \left(\frac{1}{\eta} - 1\right) + 1\right]} \sqrt{\frac{2 \cdot p_0}{v_0}}$$
(3.31)

$$\dot{m}_{\rm gf} = \alpha_{\rm gf} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{G}_{\rm gf}$$
(3.32)

wobei das Druckverhältnis $\,\eta\,$ im Vergleich mit dem Gegendruckverhältnis

$$\eta_a = \frac{p_a}{p_0} \tag{3.33}$$

$$\eta_{a} \leq \eta_{krit} \Longrightarrow \eta = \eta_{krit}$$
(3.34)

$$\eta_{a} > \eta_{krit} \Longrightarrow \eta = \eta_{a} \tag{3.35}$$

festgelegt wird.

Die Gleichungen in diesem Abschnitt gelten für Zweiphasengemische oder gerade siedende Flüssigkeit vor der Ausströmöffnung. Bei unterkühlten Flüssigkeiten am Eintritt in die Ausströmöffnung, die längs des Strömungswegs verdampfen, kann das Verfahren nach J. Schmidt [3.16] angewendet werden, das hier nicht näher beschrieben wird. In [3.18] beschreibt J.Schmidt die Erweiterung der Methode auf nicht-verdampfende Zweiphasen-Gemische, z.B. Luft/Wasser, wobei der Schlupf bzw. unterschiedliche Geschwindigkeiten zwischen den Phasen berücksichtigt werden.

3.2.2.5 Bernoulli-Gleichung

Die Ausgangsgleichung für die Berechnung des flüssigen Massenstroms lautet:

$$\dot{\mathbf{m}}_{\mathrm{f}} = \boldsymbol{\alpha}_{\mathrm{f}} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{G}_{\mathrm{f}} \tag{3.36}$$

Die Massenstromdichte G_f beschreibt den auf die Ausströmfläche bezogenen Massenstrom durch eine reibungsfreie, ideale Düse und hängt im Wesentlichen von den Prozessparametern Druck und Dichte ab, während die durch die Geometrie der Ausströmöffnung bedingten Effekte in der Ausflussziffer α_f berücksichtigt werden.

Bei stark unterkühlter, nicht-verdampfender Flüssigkeit kann die aus einer Öffnung in die Umgebung austretende Massenstromdichte wie folgt berechnet werden [3.10]:

$$G_{f} = \sqrt{2 \cdot \rho_{f} \cdot \left(p_{0} - p_{u}\right)}$$
(3.37)

Hierbei wird die Druckdifferenz zwischen dem Druck vor der Öffnung (Ruhedruck im Behälter) und der Umgebung betrachtet.

3.2.2.6 Bernoulli-Gleichung mit Druckverlust

Wird eine stark unterkühlte, nicht-verdampfender Flüssigkeit über eine längere Rohrleitung ggf. mit Einbauten freigesetzt, so ist der Druckverlust bei der Berechnung der Quellrate zu berücksichtigen. Die Quellrate lässt sich aus der Bernoulli Gleichung mit Verlustglied [3.11] berechnen:

$$\frac{\rho \cdot w_1^2}{2} + \rho \cdot g \cdot h_1 + p_1 = \frac{\rho \cdot w_2^2}{2} + \rho \cdot g \cdot h_2 + p_2 + \Delta p$$
(3.38)

Diese Beziehung gilt für Rohrleitungen mit konstantem Durchmesser und muss daher ggf. für verschiedene Rohrleitungsabschnitte getrennt berechnet werden. Der Druckverlust teilt sich auf in den Druckverlust der geraden Leitungsabschnitte

$$\Delta p = \lambda \cdot \frac{L}{d} \cdot \rho_{f} \cdot \frac{w^{2}}{2}$$
(3.39)

Und dem Druckverlust, der aus der Durchströmung von Rohrleitungseinbauten, wie Krümmer, Abzweigstücken, Querschnittsveränderungen und Armaturen.

$$\Delta p = \zeta \cdot \rho_{\rm f} \cdot \frac{{\rm w}^2}{2} \tag{3.40}$$

Die Rohrreibungszahl λ und die Widerstandsbeiwerte ζ der Rohrleitungseinbauten werden im Kapitel 3.2.2.7.2 diskutiert.

3.2.2.7 Bestimmung der Ausflussziffer und des Strömungswiderstandsbeiwertes

In den vorherigen Abschnitten wird zur Berechnung des Massenstroms in den verschiedenen Gleichungen entweder eine Ausflussziffer (für kurze Ausströmöffnungen) oder ein Strömungswiderstandsbeiwert (für längere Rohre) benötigt. In den folgenden Abschnitten werden Hinweise zur Abschätzung dieser Werte gegeben.

3.2.2.7.1 Ausflussziffer

Für ein abgerissenes Rohr oder ein scharfkatiges Leck kann von einer Ausflussziffer von 0,62 ausgegangen werden [3.12]. Bei kleineren Lecks wie einem Wanddurchriss mit (äquivalenten kreisrunden) Durchmessern kleiner als 1 mm, kann die Ausflussziffer kleiner z.B. 0,5 gewählt werden. Bei schlitzförmigen Wanddurchrissen kann sie deutlich geringer sein [3.2].

Bei den in [3.19] betrachteten Flanschleckagen liegt aufgrund der Leckgeometrie (sehr schmales, im Verhältnis zur Breite aber langes Leck) eine strömungstechnisch ungünstige Austrittsöffnung vor. Die Ausflussziffer liegt für vergleichbare Spaltströmungen im Bereich von 0,17 bis 0,38. Im Sinne einer konservativen Abschätzung sollte der Wert 0,38 verwendet werden.

Bei Sicherheitsventilen sind die Ausflussziffern für Gase und Flüssigkeiten in Abhängigkeit vom Verhältnis Ansprechdruck p_0 zu Gegendruck p_1 in der Regel aus der Bauteilprüfung bekannt. Die dort angegebene zuerkannte Ausflussziffer muss allerdings um den Faktor 0,9 zurückkorrigiert werden, um den tatsächlichen maximalen Massenstrom durch das Sicherheitsventil zu erhalten.

Bei einer Zweiphasenströmung hängt die Ausflussziffer nicht nur von der Art der Ausströmöffnung, sondern auch von der Strömungsform ab. Nach [3.1] berechnet sich die Ausflussziffer aus den zuerkannten Ausflussziffern für Flüssig- und Gasphase in Abhängigkeit vom Gasanteil im engsten Strömungsquerschnitt.

3.2.2.7.2 Rohrreibungszahl und Widerstandsbeiwerte von Einbauten

Für eine laminare Rohrströmung ist die Rohrreibungszahl λ nur von der Reynoldszahl abhängig:

$$\lambda = \frac{64}{\text{Re}_{d}} ; \text{Re}_{d} = \frac{\text{wd}}{\nu} ; \text{ für } \text{Re}_{d} \le 2320$$
(3.43)

Die für turbulente Rohrströmungen $Re_d > 2320$ kann die Rohrreibungszahl λ z. B. durch die Formel von Prandtl-Colebrook

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} = -2\lg\left(\frac{2.51}{\operatorname{Re}_{d}\sqrt{\lambda}} + \frac{k}{3.71\,\mathrm{d}}\right)$$
(3.44)

berechnen. Alternativ wird auch die Gleichung von Chen [3.13] verwendet:

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} = -\lg \left[\frac{k}{3,7065 \,d} - \frac{5,0452}{Re_{dc}} \lg \left(\frac{1}{2,8257} \left(\frac{k}{d} \right)^{1,1098} + \frac{5,8506}{Re_{dc}^{0,8981}} \right) \right]$$

$$Re_{dc} = \frac{\dot{m}_{g} \,d}{0,25 \,\pi \,d^{2} \,\eta}$$
(3.45)

Im VDI-Wärmeatlas [3.14] werden folgende Rauigkeitswerte k für verschiedene Materialien angegeben:

Тур	Beschreibung	Rauigkeitswert
Glas-, Blei-, Kupfer,		0 - 0,0015 mm
Messingrohre gezogen		
Stahlrohre gezogen	neu	0,04 mm
		(0,02 - 0,1 mm)
	nach längerem Gebrauch gereinigt	0,15 - 0,2 mm
	mäßig verrostet oder leichte	bis 0,4 mm
	Verkrustungen	
	starke Verkrustungen	bis 3 mm
Stahlrohre verzinkt	normal galvanisiert	0,15 mm
Stahlrohre geschweißt	neu	0,05 - 0,1 mm
	neu, bitumiert	0,05
	gebraucht, gereinigt	0,15 - 0,2 mm
	gleichmäßig verrostet	bis 0,4 mm
	leichte Verkrustung	1 - 1,5 mm
	starke Verkrustung	2 - 4 mm
Gußrohre	neu	0,26 (bis 1 mm)
	neu, bitumiert	0,1 bis 0,15 mm
	angerostet	1 - 1,5 mm
	verkrustet	1,5 - 4 mm
Betonrohre	Glattstrich	0,3 (bis 0,8 mm)
	rauh	1,2 (bis 3 mm)
Asbest-Zement-Rohre	(Eternit, Toschi)	0,05 - 0,1 mm

Im AD-Merkblatt A2 "Sicherheitseinrichtungen gegen Drucküberschreitung - Sicherheitsventile –" wird als Richtwert für die Rohrrauhigkeit 0,07 mm verwendet. In [3.7] wird für eine turbulente Strömung die Verwendung einer konstanten Rohrreibungszahl von λ =0,02 empfohlen. Widerstandsbeiwerte von Rohrleitungselementen ζ können z. B. [3.14] entnommen werden. Im Folgenden einige in [3.7] zusammengestellte Werte:

Rohrleitungskomponente	Parameter		Widerstandsbeiwert
90° Rohrbogen	Verhältnis	1,5	0,38
	Radius des Rohrbogens zu	3,0	0,23
	Rohrdurchmesser	6,0	0,17
Rohr-Verengung	Verhältnis	0,3	0,3
	Rohrdurchmesser Austritt zu	0,5	0,2
	Rohrdurchmesser Eintritt	0,8	0,1
Rohr-Erweiterung	Verhältnis	0,4	0,36
	Rohrdurchmesser Eintritt zu	0,8	0,04
	Rohrdurchmesser Austritt		
Einlauf			0,5
T-Stück (gesamter Massen-			0,6
strom wird umgeleitet)			

Für den Fall, dass der Freisetzungsmengenstrom durch eine Armatur, z.B. ein Regelventil begrenzt wird, lässt sich der Widerstandsbeiwert aus dem meistens bekannten K_{vs}-Wert der Armatur berechnen. Die Gleichung dazu lautet:

$$\zeta = \frac{d^4}{628, 2 \cdot K_{\rm VS}^2} \tag{3.46}$$

mit d in mm und K_{VS} in m³/h

3.3 Beispiele

3.3.1 Leck in der gasraumseitigen Entnahmeleitung eines Ammoniak-Verdampfers

Aus einem Verdampfer wird Ammoniak über eine gasraumseitige Entnahmeleitung in einen Reaktor gespeist. Die Temperatur im Verdampfer beträgt 20 °C, was einem Dampfdruck des Ammoniaks von 8,55 bar abs. entspricht. Die Entnahmeleitung DN10 (Innendurchmesser 10 mm) ist bis zur angenommenen Leckstelle 30 m lang. Als Leck wird der vollständige Abriss der Leitung unterstellt, so dass sich ein Öffnungsquerschnitt von 78 mm² ergibt.

Für die Berechnung des Freisetzungsmengenstroms wird davon ausgegangen, dass der Druck im Verdampfer konstant bleibt. Das Auftreten einer Zweiphasenströmung wird nicht angenommen, da der Verdampfer nur teilweise gefüllt ist und durch die Anordnung des Dampfdoms eine zuverlässige Abscheidung von Tropfen, die bei der Verdampfung entstehen, gewährleistet ist. Es kann also von einer reinen Ammoniak-Dampfströmung über die Entnahmeleitung ausgegangen werden.

Für die Berechnung des Mengenstroms können die Gleichungen für die kompressible, reibungsbehaftete Gasströmung aus dem Abschnitt 3.2.2.2 herangezogen werden, wobei der Mengenstrom im Wesentlichen durch den Rohrreibungsdruckverlust der 30 m langen Leitung DN 10 beeinflusst wird.

Für den Fall, dass der Verdampfer bei höheren Füllgraden betrieben würde, könnte es durch das Aufwallen der Flüssigkeit auch zu einer Zweiphasenströmung aus Dampf und mitgerissener Flüssigkeit durch die Entnahmeleitung kommen. In diesem Fall müssten die Freisetzungsmengenströme mit den Gleichungen aus Abschnitt 3.2.2.3 berechnet werden.

3.3.2 Leck in einer Flüssig-Propanleitung

In einem Lagertank wird flüssiges Propan bei Umgebungstemperatur (25 °C) gelagert. Der Druck im Tank entspricht dem Dampfdruck von 9,5 bar abs. Das flüssige Propan wird aus einer bodenseitigen Entnahmeleitung DN15 in ein Verteilsystem gedrückt.

Als Leck wird ein vollständiger Abriss der Leitung angenommen. Die Rohrleitungslänge bis zur Leckstelle soll 20 m betragen.

Für die Berechnung des Mengenstroms können die in Abschnitt 3.2.2.3 beschriebenen Gleichungen für das homogene Gleichgewichtsmodell benutzt werden. Der Zustand am Eintritt in die Entnahmeleitung ist gerade siedende Flüssigkeit. Infolge des Druckabfalls bis zur Leckstelle kommt es längs des Strömungswegs durch die Verdampfung zu einer Zweiphasenströmung mit ständig zunehmendem Dampfgehalt.

3.3.3 Ansprechen eines Sicherheitsventils auf einem Methan-Speicherbehälter

In einem Speicherbehälter ist Methan bei einem Betriebsdruck von 6 bar abs. bei Umgebungstemperatur gespeichert. Durch einen Fehler (z.B. Versagen der Kompressor-Regelung) steigt der Druck im Behälter auf den Ansprechdruck des Sicherheitsventils von 10 bar abs. an. Das Sicherheitsventil ist ein Vollhub-Feder-Sicherheitsventil mit einem engsten Durchmesser von $d_0 = 46$ mm und einer Ausflussziffer für Gas/Dämpfe von $\alpha_D = 0,7$. Der Freisetzungsmengenstrom aus dem Sicherheitsventil kann mit den Gleichungen aus Abschnitt 3.2.2.1 berechnet werden.

3.3.4 Ansprechen einer Berstscheibe auf einem Polymerisationsreaktor

In einem 10 m³ fassenden Reaktor wird ein Monomer im Lösemittel Methanol polymerisiert. In erster Näherung können die Stoffwerte des Reaktionssystems durch die von Methanol beschrieben werden. Der Reaktor wird drucklos betrieben; die freiwerdende Polymerisationswärme wird über einen Rückflusskühler abgeführt. Bei einem Ausfall des Kühlwassers am Rückflusskühler kommt es zu einem sich selbst beschleunigenden Druckund Temperaturanstieg im Reaktor. Der Druck steigt auf den Ansprechdruck der Berstscheibe von 3 bar abs. an. Die Berstscheibe DN 100 ist in einer kurzen (< 3 m) langen Leitung DN 300 eingebaut, so dass der Druckverlust in der Rohrleitung gegenüber dem Druckabfall über die Berstscheibe in erster Näherung vernachlässigt werden kann. Der Mengenstrom durch die Berstscheibe kann dann mit den Gleichungen für eine Düse mit Korrektur durch einen Ausflussbeiwert ($\alpha = 0.8$) berechnet werden.

Der Reaktor ist zu 80 % gefüllt. Das Reaktionsgemisch neigt zum Schäumen, so dass von einem homogenen Aufwallen des Behälterinhalts ausgegangen werden muss. Der volumetrische Dampfgehalt am Eintritt in die Abblaseleitung beträgt dann 20 % (Gl. 3.1). Mit den Stoffwerten für Methanol:

- Siedetemperatur bei 3 bar abs.: 95 °C,
- Flüssigkeitsdichte: 716 kg/m³,
- Dampfdichte: 3,14 kg/m³

ergibt sich aus Gleichung 3.2 ein Massendampfgehalt von 0,11 %. Der Mengenstrom durch die Berstscheibe kann dann nach den Gleichungen im Abschnitt 3.2.2.4 berechnet werden. Hier liegt also schon vor der Berstscheibe eine Zweiphasenströmung vor, deren Dampfgehalt infolge des Druckabfalls über die Berstscheibe zunimmt.

Für den Fall, dass die Entlastungsöffnung im Flüssigkeitsraum des Reaktors liegt, würde vor der Öffnung eine gerade siedende Flüssigphase vorliegen, die dann durch die Verdampfung längs des Ausströmwegs zu einer Zweiphasenströmung führt. Auch in diesem Fall kann der Mengenstrom mit den in Abschnitt 3.2.2.4 angegebenen Gleichungen berechnet werden.

3.3.5 Leck in einem Wärmetauscher

Der Fall, dass es in einem Wärmeübertrager zu einem Leck kommt und Fluid von der Hochdruck- auf die Niederdruckseite des Übertragers strömt, wird von J. Schmidt [3.17] mit Zahlenwertbeispielen beschrieben. Dabei werden vollständige Rohrleitungsabrisse und kleine Leckagen (Durchmesser 5 mm) diskutiert.

Symbol	Beschreibung
А	Austrittsfläche [m ²]
C _{pf}	Spezifische Wärmekapazität der Flüssigphase [J/(kg K)]
C _{pg}	Spezifische Wärmekapazität der Gasphase [J/(kg K)]
d	Rohrdurchmesser [m]
G _g	Massenstromdichte gasförmig [kg/(m ² s)]
h _v	Verdampfungsenthalpie [J/kg]
k	Rauhigkeitswert [m]
L	Länge der Rohrleitung [m]
, m _g	Massenstrom gasförmig [kg/s]
m _{gf}	Massenstrom zweiphasig [kg/s]
Ма	Mach-Zahl [-]
р	Druck [Pa]
p ₀	Ruhedruck [Pa]
p _c	Kritischer Druck [Pa]
pv	Sättigungsdampfdruck [Pa]
pu	Umgebungsdruck [Pa]
Δp	Druckdifferenz [Pa]
Т	Temperatur [K]
T _{kr}	Kritische Temperatur [K]
Ts	Siedetemperatur [K]
T _{Sch}	Schmelztemperatur [K]
T ₀	Ruhetemperatur [K]
R	Spez. Gaskonstante [J/(kg K)]
V	Spezifisches Volumen [m³/kg]
V _{Behälter}	Behältervolumen [m ³]

3.4 Symbolverzeichnis

V _{Gasraum}	Volumen der Gasphase in einem Behälter [m³]
X 0	Massengasgehalt [-]t
× ₀	Strömungsmassengasanteil [-]
w	Geschwindigkeit des Gases [m/s]
W ₀	Ruhe-Schallgeschwindigkeit des Gases [m/s]
α_{g}	Ausflussziffer für Gasströmung [-]
ρ₀	Ruhedichte gasförmig [kg/m ³]
ρ _f	Flüssigkeitsdichte [kg/m ³]
ρ _g	Dichte der Gasphase [kg/m ³]
3	Anteil der Gasphase am Behältervolumen [-]
Ψ	Ausflussfunktion [-]
κ	Isentropenexponent [-]
λ	Rohrreibungszahl [-]
v	kinematische Viskosität [m²/s]
ζ	Widerstandsbeiwert von Rohrleitungselementen []
η	dynamische Viskosität [Ns/m²]
ω	Kompressibilitätsfaktor [-]

3.5 Quellenverzeichnis

- [3.1] ISO 4126-10: Safety devices for protection against excessive pressure Part
 10: Sizing of safety valves for gas/liquid two-phase flow
- [3.2] Westphal, F.: Berechnungsmodell für die Leckraten aus Rissen in Wänden druckführender Apparate und Rohrleitungen. Dissertation Dortmund 1991.
- [3.3] DIN EN ISO 4126-7: Sicherheitseinrichtungen gegen unzulässigen Überdruck Teil 7: Allgemeine Daten (ISO/DIS 4126-7:2009); Deutsche Fassung prEN ISO 4126-7:2009, Beuth Verlag GmbH, Berlin
- [3.4] Friedel, L., Schmidt, J.: Auslegung langer gasdurchströmter Sicherheitsventil-Abblaseleitungen. TÜ Bd. 33 (1992) Nr. 5 165-171
- [3.5] E. Fried, I. E. Idelchik; Flow Resistance: A Design Guide For Engineers;Hemisphere Publishing Corporation; 1989
- [3.6] Leung, J.C., Grolmes, M.A., AICHE J. 33 (1987) Nr. 3, 524-527
- [3.7] Schmidt, J., Westphal, F. : Praxisbezogenes Vorgehen bei der Auslegung von Sicherheitsventilen und deren Abblaseleitungen für die Durchströmung mit

Dampf/Flüssigkeits-Gemischen – Teil 2. Chem.-Ing.Tech. 69 (1997), S 1074-1091

- [3.8] G.L. Sozzi, W.A. Sutherland: Critical flow of saturated and subcooled water at high pressure. General Electric Report NEDO-13418, July 1975.
- [3.9] R. Diener, J. Schmidt: Sizing of throttling device for gas/liquid two-phase flow.
 Part 1: Safety valves. Process Safety Progress 23 (2004) 4, 335-344.
 Part 2: Control valves, orifices and nozzles. Process Safety Progress 24 (2005) 1, 29-37.
- [3.10] L. Friedel; Grundlagen der Druckentlastung/Stand der Erkenntnisse. Vortrag im Seminar "Druckentlastung-Rückhaltung gefährlicher Stoffe" (TAA); BPU, 01.12. -02.12.1994
- [3.11] Böswirth, L.: Technische Strömungslehre. Vieweg Verlag, 1993
- [3.12] Kuchling; Taschenbuch der Physik; Fachbuchverlag Leipzig-Köln, 1994
- [3.13] Chen, N.H.: An explicit equation for friction factor in pipe. Ind. Eng. Chem. Fundam. 18 (1979) 3, 296-297.
- [3.14] VDI-Wärmeatlas. Springer Verlag Berlin Heidelberg.
- [3.15] Schmidt, J., Egan, S.: Case studies of sizing pressure relief valves for two-phase flow. Chem. Eng. Technol. 32 (2009) 2, 263-272.
- [3.16] Schmidt, J.: Sizing of nozzles, venturis, orifices and safety valves for initially sub-cooled gas/liquid two-phase flow the HNE-DS-method. Forsch. Ingenieurwes. 71 (2007), 47-58.
- [3.17] Schmidt, J.: Auslegung von Schutzeinrichtungen für wärmeübertragende Apparate. Chem.-Ing.-Techn. 81 (2009), 1-2, 79-95.
- [3.18] Schmidt, J.: Auslegung von Sicherheitsventilen bei einer Druckentlastung von Gas/Flüssigkeitsmischen nach ISO 4126-10. Techn. Sicherheit 1 (2011) 6, 37-45.
- [3.19] Bussenius, Austritt brennbarer Gase und Dämpfe aus Anlagen und ihreAusbreitung in Betriebsräumen, Chem. Techn., 38 (1986), Heft 6, S. 264 266

4 Flash-Verdampfung und Spray-Modelle

4.1 Einführung

Wenn Auswirkungen von Leckagen betrachtet werden, sind Leckagen aus der Flüssigphase von besonderem Interesse. Der Massenstrom ist größer als bei Leckagen aus der Gasphase. Bei der Freisetzung der Flüssigkeit bildet sich in Abhängigkeit vom Betriebsdruck ein Flüssigkeitsstrahl aus (Abbildung 4.1). Der Beschaffenheit des Flüssigkeitsstrahls ist abhängig von der Temperatur der Flüssigkeit. Im Rahmen der folgenden Betrachtungen werden zwei Zustände unterschieden:

- unterkühlte Flüssigkeit: Flüssigkeitstemperatur < Siedetemperatur
- überhitzte Flüssigkeit: Flüssigkeitstemperatur ≥ Siedetemperatur

Bei unterkühlten Flüssigkeiten zerfällt der Strahl durch aerodynamische Kräfte nach einer gewissen Strecke in Tropfen. Aus diesen Tropfen verdunstet Flüssigkeit in die Umgebung, die Tropfen kühlen ab. Bei diesen Vorgängen entstehen Tropfen unterschiedlicher Größe, die sich in der Flugbahn und dem Ausmaß der Verdunstung unterscheiden. Für das Dampf/Luft-Gemisch stellt sich eine Mischtemperatur ein, die von der momentanen Flüssigkeitstemperatur, der Verdampfungsenthalpie und der Menge der eingemischten Luft abhängt.

In Abhängigkeit von der Höhe der Leckstelle über dem Boden, der Austrittsrichtung, dem Stoff und der Tropfengröße können Tropfen verdunsten, bevor sie auf den Boden auftreffen. Die Tropfen, die auf den Boden auftreffen, bilden eine Lache, aus der zeitlich verzögert ein weiterer Anteil verdunstet.

Bei der Freisetzung von überhitzten Flüssigkeiten kommt es dagegen zu einer Spontanverdampfung (Flash) und Blasenbildung. Die Dampfblasen bewirken ein schnelles und heftiges Aufreißen des Flüssigkeitsstrahls. Die Flüssigkeitstropfen sind in diesem Fall feiner als bei einem Zerfall durch aerodynamische Kräfte. Dadurch verdunstet/verdampft ein größerer Anteil als bei unterkühlten Flüssigkeiten. Zusammen mit dem Anteil der Spontanverdampfung führt dies zu einem größeren luftgetragenen Quellstrom für die Ausbreitungsberechnung. Ein Ausregnen (Rainout) von Tropfen ist geringer oder findet gar nicht statt.



Abb. 4.1: Vorgänge bei einer Flüssigkeitsfreisetzung

4.2 Experimentelle Untersuchungen

Die Anzahl der experimentellen Untersuchungen, die sich mit Freistrahlfreisetzungen von Flüssigkeiten im Freien und dem Ausregnen befassen, ist gering. Zu nennen wären insbesondere die Experimente des

- Center for Chemical Process Safety (CCPS), 1989 1991, untersuchte Stoffe: Wasser, Trichlorfluormethan, Chlor, Monomethylamin, Cyclohexan
- Rohm and Haas, 1990, untersuchter Stoff; Methylamin
- STEP-Programms der EU, 1997, untersuchte Stoffe: Propan
- FLIE-Projekt, 2001 2004, untersuchte Stoffe: R314A, Propan, Butan
- Ecole Nationale Superieure des Mines St. Etienne (ENSM-SE), 2005, untersuchte Stoffe: Wasser, Butan
- Joint Industrial Project (JIP), Cardiff University, INERIS, Health and Safety Laboratory (HSL), 2002 – 2013, untersuchte Stoffe: Wasser, Cyclohexan, Benzin, Butan, Propan, Xylol.

Diese experimentellen Untersuchungen werden im Folgenden vorgestellt.

4.2.1 Experimente des CCPS

Das Center for Chemical Process Safety (CCPS) startete 1989 ein Versuchsprogramm zur Untersuchung der Freisetzung von Flüssigkeitsfreistrahlen. In der Phase 1 wurden 49 Freisetzungen von überhitztem Wasser und 15 Freisetzungen von überhitztem Trichlorfluormethan (CFC-11) untersucht. In der Phase 2 (1991) wurden 22 Freisetzungen mit überhitztem Chlor, 18 mit Methylamin und 20 mit Cyclohexan durchgeführt. Die Flüssigkeiten wurden unter Stickstoffdruck gehalten. Um ein Sieden in der Leitung zu vermeiden, wurde die Leitung vom Behälter zur Düse kurz ausgeführt. Die Flüssigkeiten wurden horizontal in einer Höhe von 1,22 m freigesetzt. Folgende Tabelle fasst die Versuchsparameter zusammen:

Stoff	Wasser	CFC-11	Chlor	Methyl-	Cyclohexan
				amin	
Siedetemperatur T _s [K]	372	296	237	264	350
Lagertemperatur T [K]	378,4 - 488,2	289,6 -	245 - 289	270 - 296	338 - 398
		355,0			
Überhitzung (T-T _s) [K]	6,7 - 116,1	0 - 59,3	9 - 53	6 - 31	0 - 48
Druck an	26,7 - 31,0	161,8 -	147 - 979	171 - 560	140 - 556
Freisetzungsstelle [kPa]		554,1			
Düsendurchmesser	3,2; 6,35;	6,35	6,35	6,35; 12,7	6,35
[mm]	12,7				

Tab. 4.1: CCPS – Versuchsparameter (entnommen aus [4.1])

Bei den experimentellen Untersuchungen wurden der Massenstrom aus der Düse und die Auffangrate an Flüssigkeit ermittelt. Der ausgeregnete Anteil an Flüssigkeit wurde in Wannen aufgefangen. Da die Siedetemperatur von Chlor und Methylamin niedriger ist als die Umgebungstemperatur, wurde die Verdampfung ihrer ausgeregneten Anteile in den Auffangwannen durch chemische Reaktionen verhindert. Zur Verhinderung einer Verdampfung von Cyclohexan in den Auffangwannen wurden die Wannen mit Wasser gekühlt.

Die experimentell ermittelten Rainout-Anteile für Chlor, Methylamin und Cyclohexan wurden in einem weiteren Schritt korrigiert, um der Verdampfung der Tropfen vor der Reaktion mit der Auffanglösung (Chlor und Methylamin) und der Verdampfung durch die Auffangwannen (Cyclohexan) Rechnung zu tragen (vgl. S. 25 [4.2]). Die korrigierten und nicht-korrigierten Versuchsergebnisse sind in [4.2] tabelliert.

Aus den Versuchsergebnissen zeigte sich, dass der ausgeregnete Anteil mit zunehmender Überhitzung und zunehmendem Überdruck abnimmt. Dies ist nach [4.1] konsistent mit einer höheren Freisetzungsgeschwindigkeit, die kleinere Tropfen zur Folge hat. Folgende Rainout-Anteile wurden ermittelt:

Stoff	Rainout-Anteile [Ma%]		
	nicht-korrigiert	korrigiert	
Wasser	43,0 - 97,0	_	
CFC-11	0,0 - 62,0	_	
Chlor	1,3 – 23,4	3,8 – 66,1	
Methylamin	17,9 – 54,8	20,0 - 61,3	
Cyclohexan	9,5 – 71,0	7,4 - 66,5	

Tab. 4.2: CCPS – Versuchsergebnisse (entnommen aus [4.2])

Bei den Versuchen mit Wasser und CFC-11 wurde in einigen Experimenten die Verteilung der Tropfengröße bestimmt. Im Wesentlichen konnte aus den Versuchsergebnissen festgehalten werden, dass die absolute Tropfengrößenverteilung dem axialen Abstand zum Freisetzungsort umgekehrt proportional ist und kleinere Düsendurchmesser zu kleineren Tropfengrößenverteilungen führen, da die Tropfen feiner verteilt werden. Für die übrigen Flüssigkeiten wurde die Tropfengrößenverteilung nicht gemessen. Die experimentellen Ergebnisse und das entwickelte Rainout-Modell sind in [4.2] ausführlich beschrieben.

4.2.2 Experimente von Rohm and Haas

Durch das amerikanische Chemieunternehmen Rohm and Haas wurden experimentelle Untersuchungen mit Monomethylamin durchgeführt. Die Testbedingungen und Ergebnisse sind in [Lantzy, 4.34] ausführlich dargestellt.

Das Monomethylamin wurde aus einer horizontalen Leitung mit einem Durchmesser von 6,3°mm in einer Höhe von 1,73 m freigesetzt. Gemessen wurde der Rainout-Anteil in Abhängigkeit der Lagertemperatur. Der ausgeregnete Anteil wurde in einer Wanne mit einem Gemisch aus Wasser Schwefelsäure aufgefangen, um das ausgeregnete Methylamin zu binden. Um die Temperatur während der Freisetzung konstant zu halten, wurde die Dampfphase im Behälter mit Sticksoff überlagert. In der folgenden Tabelle sind die Versuchsbedingungen und Ergebnisse zusammengefasst.

Parameter	Test 1	Test 2	Test 3	Test 4	Test 5	Test 6	Test 7	Test 8	Test 9	Test 10
Windgeschw.	7,9	8,4	10,0	8,1	6,7	6,5	7,4	6,5	6,1	5,5
[m/s]										
Massenstrom	28,27	20,87	22,23	40,0	28,73	25,08	26,21	21,42	26,33	31,75
10 ⁻² [kg/s]										
Flüssigkeits-	12,38	7,84	3,29	16,32	0,27	-3,72	3,92	5,76	-0,47	1,81
temperatur [°C]										
Überdruck [kPa]	310	207	186	406	172	154	248	241	248	290
Rainout-Anteil	6	35	76	5	42	81	45	29	68	46
[%]										

Tab. 4.3: Rohm and Haas – Versuchsbedingungen und Ergebnisse (entnommen aus[4.34])

4.2.3 Experimente im Rahmen des STEP-Programms der EU

1991 startete die EU-Kommission verschiedene EU-Projekte mit dem Ziel, chemische Gefahren besser zu verstehen. Im Rahmen des Projektes "Flashing flow through and out of a breach of a pressurized vessel containing liquefied gas" [4.4] wurden Versuche mit hochreinem Propan (99,5% Propan, 0,5% Butan) am "Commissariat a l'Energie Atomique Direction des Reacteurs Nucleaires, Departement de Thermohydraulique et Physique, Service de Thermohydraulique pour les Applications Industrielles" durchgeführt.

Das Propan wurde unter Sättigungsdruck in einem Vorratsgefäß gelagert und über eine senkrecht nach unten gerichtete Leitung (Länge 0,66 m, Durchmesser 12 mm) in einen evakuierten Expansionsbehälter entspannt. Die Größe des Expansionsbehälters war so bemessen, dass der Druck im Innern nicht über 1 bar_{abs} anstieg. Am Eintritt der Leitung in den Expansionsbehälter wurde der Propan-Freistrahl mit einer Hochgeschwindigkeitskamera (100 Bilder/s) aufgenommen und die Tropfengeschwindigkeit und –größenverteilung mit einem Phase-Doppler-Particle-Analyzer (PDPA) gemessen. Die Messungen wurden auf der Achse des Freistrahls in einem Abstand x von 30, 60 und 95 mm von der Düse vorgenommen. Die Experimente wurden mit Düsendurchmessern d von 2, 5 und 8 mm und Anfangsdrücken p im Behälter von 5, 11 und 17 bar durchgeführt.

In den folgenden Tabellen sind die Versuchsergebnisse für die Düsendurchmesser von 2 und 5 mm für die verschiedenen Anfangsdrücke und Messungen dargestellt. In den Tabellen ist " v_m " die mittlere Geschwindigkeit der Tropfen, " D_{32} " der Sauter-Durchmesser und " D_{10} " der arithmetische Mittelwert des Durchmessers und "R" der radiale Abstand von der Mittelachse.

p₁ [bar]		5			11			17	
x [mm]	30	60	95	30	60	95	30	60	95
V _m [m/s]	41,85	25,87	17,25	34,39	16,15	25,36	-	23,52	24,24
D ₃₂ [µm]	49,5	38,5	35,8	-	30,2	25,2	-	26,6	23,7
D ₁₀ [µm]	34,8	26,7	24,6	-	23,7	16,4	-	18,8	17,1

Tab. 4.4: STEP - Messungen auf Achse, d = 2 mm [4.3]

Tab. 4.5: STEP - Messungen auf Achse, d = 5 mm [4.3]

p₁ [bar]		5			11			17	
x [mm]	30	60	95	30	60	95	30	60	95
V _m [m/s]	36,71	35,81	29,03	31,91	26,02	31,84	-	-	24,51
D ₃₂ [µm]	-	48,5	52,8	-	31,2	27,0	-	-	29,8
D ₁₀ [µm]	-	37,4	41,7	-	25,0	18,5	-	-	22,5

Tab. 4.6: STEP - Messungen neben der Achse, d = 2 mm, p = 11 bar [4.3]

x [mm]		60			95	
R [mm]	0	9	14	0	10	20
V _m [m/s]	26,15	30,92	20,00	25,36	30,15	18,45
D ₃₂ [µm]	30,2	28,6	24,7	25,2	24,9	23,8
D ₁₀ [µm]	23,7	22,2	17,6	16,4	15,9	14,1

Bei hohen Drücken und größeren Düsendurchmessern waren die Messungen wegen der hohen Konzentration an Tropfen teilweise nicht möglich ("dichter" Freistrahl).

Aus den Versuchsergebnissen zeigte sich, dass mit steigendem Druck die Spontanverdampfung größer und infolgedessen das Aufbrechen des Freistrahls stärker wird, was zu einem größeren Freistrahldurchmesser führt. Mit höherem Anfangsdruck bildeten sich kleinere Tropfengrößen. Die mittleren Tropfengrößen lagen zwischen 42 und 16 µm. Höhere Anfangsdrücke führten zu höheren Strömungsraten und damit zu höheren Tropfengeschwindigkeiten mit mittleren Geschwindigkeiten zwischen 15 und 45 m/s. Bei größeren Düsendurchmessern wurden höhere Tropfengeschwindigkeiten und größere Tropfendurchmesser gemessen. Weiterhin zeigte sich, dass mit zunehmender Entfernung von der Düse und mit radialem Abstand von der Freistrahlachse die Tropfengröße und -geschwindigkeit abnahmen. In unmittelbarer Nähe der Düse wurden Tropfen mit Durchmessern kleiner als 80 µm gemessen. Auch konnte festgestellt werden, dass die Verdampfung entlang der Freistrahlsachse in Strömungsrichtung stattfindet. Bei allen durchgeführten Versuchen wurden Freistrahllängen größer als 200 mm gemessen.

4.2.4 Experimente im Rahmen des FLIE-Projektes

Das FLIE-Projekt (Flashing Liquids in Industrial Environments) wurde in dem Zeitraum von 2001 bis 2004 durchgeführt. Das Ziel des Projektes war es, das Verständnis für spontanverdampfende Freisetzungen zu verbessern und Modelle für deren Abschätzung zu entwickeln [4.5]. Die Projektpartner waren GexCon (Norwegen), von Karman Institute for Fluid Dynamics (VKI, Belgien), Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques (INERIS, Frankreich) und University of Hertfordshire (UHerts, England).

Im Rahmen des Projektes wurden experimentelle Untersuchungen mit R134A im Labormaßstab durch das VKI und im Großmaßstab mit Propan und Butan durch INERIS durchgeführt. Die Modellentwicklungen wurden durch das VKI und GexCon durchgeführt. Uherts war an dem Design der Experimente im Großmaßstab beteiligt und führte die Validierung des entwickelten Modells durch. Die entsprechenden Ergebnisse des FLIE-Projektes sind in [4.6], [4.7] und [4.8] ausführlich beschrieben. Im Folgenden werden die experimentellen Ergebnisse zusammenfassend dargestellt.

4.2.4.1 Experimente mit R134A

Am von Karman Institute for Fluid Dynamics (VKI) wurde im Labormaßstab die Freisetzung von druckverflüssigtem R134A aus einem 20 I Behälter untersucht. Der Einfluss verschiedener Anfangsdrücke, -temperaturen und Düsendurchmesser auf das Aufbrechen sowie die Tropfengröße und die Geschwindigkeitsverteilung des R134A-Freistrahls entlang der radialen und axialen Richtung wurden ermittelt. Über Thermoelemente wurde die Temperaturentwicklung in dem spontanverdampfendem Freistrahl gemessen.

Nach [4.6] zeigte sich, dass bei gleichen Anfangsbedingungen bei größeren Düsendurchmes-sern D ein stärkeres Aufbrechen des Freistrahls beobachtet werden konnte als bei kleineren Düsendurchmessern. Das Aufbrechen erfolgte in einem kürzeren Abstand von der Düse und es zeigten sich größere Tropfendurchmesser. Beispielhaft wird in [4.6] angegeben, dass das Volumen der Tropfen größer als 200 μ m in einem Abstand von x/D = 6 von der Düsenöff-nung 90 % umfasste, in einem Abstand von x/D = 46 nur noch 40 %. Im Rahmen der Experimente wurden Tropfengrößen zwischen 21,5 μ m und 753 μ m gemessen.

Über die High-Speed-Aufnahmen und das Phase-Doppler-Anemometer (PDA) konnte gezeigt werden, dass die Tropfengrößen und –geschwindigkeiten im Zentrum größer sind und zu den Seiten abnehmen. Die mittleren Tropfengrößen und –geschwindigkeiten wurden im größeren Abstand von der Düse aufgrund der Verdampfung kleiner und der Freistrahl breiter. Größere Düsendurchmesser führten im Nahbereich zu geringfügig größeren mittleren Tropfendurchmessern ohne einen Einfluss auf die Geschwindigkeit zu haben. PDA-Messungen in größeren Entfernungen von der Düse zeigten, dass die Tropfendurchmesser auf der Mittelachse des Freistrahls mit steigender Überhitzung bei gleichem Anfangsdruck kleiner wurden. Eine signifikante Änderung der Geschwindigkeit in Abhängigkeit der Überhitzung konnte bei gleichem Anfangsdruck nicht festgestellt werden. Bei gleicher Überhitzung aber unterschiedlichen Anfangsdrücken wurden die Tropfengrößen mit steigendem Druck kleiner, wobei der Einfluss auf der Mittelachse größer war als in der Peripherie.

Weiterhin wurde festgestellt, dass das Aufbrechen des Freistrahls bei größeren Düsendurchmessern an der Düsenöffnung stattfindet mit einem schnelleren Temperaturabfall und einer plötzlichen Erhöhung der Temperatur nach einem Abstand von 0,6m. Dies wird in [4.6] auf die Einmischung von Luft und/oder eine Akkumulation von R134A-Dampf im Freistrahl zurückgeführt. Die Thermographie Messungen zeigten weiterhin, dass der Flüssigkeitskern einen schnellen Temperaturrückgang auf die Siedetemperatur bei Umgebungsdruck erfährt ohne erkennbare Tropfenbildung.

4.2.4.2 Experimente mit Butan und Propan

Im Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques (INERIS) wurde experimentelle Untersuchungen mit Propan und Butan im Großmaßstab durchgeführt, um industrielle Bedingungen abzubilden [4.7], [4.9]. Die Untersuchungen umfassten auch Experimente mit Hindernissen in Richtung des Freistrahls. Die Versuchsbedingungen sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst:

Parameter	Beschreibung
Stoff	Propan, Butan
Lagerdruck	Sättigungsdampfdruck
	Sättigungsdampfdruck mit zusätzlichem Druck (1 bar; 3 bar;
	6 bar)
Art des Freistrahls	frei; auftreffend
Abstand des Hindernisses	0,8 m; 1,6 m; 2,6 m
Form und Größe der	kreisförmig: Durchmesser d = 10 mm; 15 mm; 20 mm; 25 mm
Freisetzungsöffnung	rechteckig: Fläche A = 9x9 mm ² ; 6x18 mm ² ; 3,2x25 mm ²

Tab. 4.7: Versuchsbedingungen [4.7], [4.9]

Während der Freisetzung wurden folgende Parameter erfasst:

- Umgebungsbedingungen: Windrichtung und- geschwindigkeit, Temperatur, Luftfeuchte, Umgebungsdruck
- Freisetzungsbehälter: Druck, Temperatur in verschiedenen Behälterhöhen und an der Grenzfläche Flüssigkeit/Dampf, Gewicht des Behälter, um den Massenstrom zu ermitteln
- Freisetzungsort: Druck und Temperatur vor der Freisetzungsstelle
- Freistrahl: Geschwindigkeit und Größe der Tropfen an verschiedenen Positionen im Freistrahl durch ein Dual-Phase-Doppler-Anemometer (PDA)
- Rainout: Gewichtsmessungen in sechs Auffangbehältern
- Hindernis: Temperatur über sechs Thermoelemente

Freistrahl ohne Hindernisse in der Freistrahlachse:

Bei den Freisetzungen ohne Hindernisse konnten nach [4.9] nur für die Experimente mit Butan Rainout-Anteile gemessen werden. Dies wird mit der niedrigeren Siedetemperatur von Propan (- 42°C) im Vergleich zu Butan (- 0,5°C) und dem höheren Sättigungsdampfdruck von Propan bei Umgebungstemperatur (8,3 bar bei 20°C) im Vergleich zu Butan (2,1 bar bei 20°C) erklärt. In der folgenden Tabelle sind die Ergebnisse zusammengefasst:

	Position des Mittelpunkts der Auffangwannen [m]						Total
Lagerdruck	2,6	3,9	5,1	6,4	7,5	8,3	Rainout
[bar]	Ma% Rainout in jeder Auffangwanne						[Ma%]
2,6	1,6	3,5	5,2	1,6	0,0	0,0	11,8
3,8	0,0	0,0	1,4	3,7	2,7	0,5	8,2
5,6	0,0	0,0	0,9	1,1	0,8	1,5	4,3

Tab. 4.8: Rainout-Anteil für Butan-Experimente [4.9]

Aus den Ergebnissen ist erkennbar, dass der Rainout-Anteil mit steigendem An-fangsdruck kleiner wird. In [4.9] wird darauf verwiese, dass der Rainout-Anteil größer als 12 % sein könnte, da nicht alles an ausgeregneter Flüssigkeit aufgefangen werden konnte. Auch würde der Rainout-Anteil von der Freisetzungshöhe abhängen. Bei geringeren Höhen wären die Rainout-Anteile größer. Die Freisetzungshöhe in diesen Experimenten betrug 1,5 m.

Freistrahl mit Hindernissen in der Freistrahlachse:

Bei Freistrahlen, die auf Hindernisse treffen, konnte auch für Propan ein Ausregnen beobachtet werden. Die Rainout-Anteile für Butan waren höher, wie für den Fall ohne Hindernisse bereits erläutert. Folgende Rainout-Anteile wurden gemessen:

Stoff	Hindernis-Abstand [m]				
	0,83	1,6	2,6		
Propan	~14 %	~1 %	-		
Butan	~44 %	~33 %	~22 %		

Tab. 4.9: Rainout-Anteil für Experimente mit Hindernissen [4.9]

Nach [4.9] zeigten die Ergebnisse die Tendenz, dass je größer der Abstand des Hindernisses ist, desto geringer ist der Rainout-Anteil. Dies wird damit erklärt, dass je später der Aufprall des Freistrahls auf das Hindernis erfolgt, desto mehr Zeit verbleibt den Tropfen zu verdampfen. Es wurde beobachtet, dass während der ersten Minute der Freisetzung alle Tropfen im Kontakt mit dem Hindernis verdampften und dass nach der ersten Minute das Hindernis soweit abgekühlt war, dass die Tropfen von dem Hindernis "aufgefangen" wurden und ausregneten. Es wurde auch eine Eisbildung auf dem Hindernis wie auch in den Auffangwannen beobachtet. Die Eigenschaften des Eises wurden nicht untersucht.

4.2.5 Experimente an der Ecole des Mines St. Etienne

An der Ecole des Mines St. Etienne wurden Experimente mit Wasser und Butan durchgeführt. Mit einem Laser-Doppler-Anemometer (PLDA) wurden die Verteilungen der Tropfengrößen und -geschwindigkeit bestimmt. Genaue Angaben zu den Versuchen finden sich in [4.4], [4.10], [4.11] und [4.12]. In den folgenden Kapiteln werden die Ergebnisse der Experimente zusammenfassend dargestellt.

4.2.5.1 Experimente mit Wasser

In [4.10] wurden Freistrahlfreisetzungen mit Wasser untersucht. Das Wasser wurde aus einer Düse mit einem Durchmesser von 1,8 mm bei einer Höhe über dem Boden von 1,5 m freigesetzt. Die Versuche wurden bei Drücken von 1 bis 13 bar und Temperaturen von 40°C bis 180°C durchgeführt. Die ausgeregneten Anteile der freigesetzten Flüssigkeit wurden in zwölf Wannen aufgefangen, die in einer Entfernung bis 10 m von der Düse angeordnet waren. Bei den durchgeführten Versuchen wurden drei typische Freistrahlformen (a, b, c) in Abhängigkeit der Anfangsdrücke beobachtet.

Typ a Freistrahl:

Bei diesem Freistrahltyp wurde ein Freistrahl in Form eines überhitzten Flüssigkeitszylinders über die gesamte "Freistrahlbahn" beobachtet. Ein Aufbrechen und eine Dispersion des Freistrahls traten nahezu nicht auf. Die Temperatur der Flüssigkeit im Behälter und am Ende des Freistrahls nahm daher nur gering ab (25 – 50 K), weil die Wärmeaustauschfläche klein war. In einem Abstand von ca. 5,5 m und 6,5 m von der Düse wurden Rainout-Anteile von ca. 83 Gew.% und 17 Gew.-% gemessen. Abbildung 4.4 zeigt ein Beispiel einer Freistrahlfreisetzung von Typ a.

Typ b Freistrahl:

Bei diesem Freistrahltyp wurde beobachtet, dass der flüssige Kern des Freistrahls zunehmend in Tropfen zerfällt, die ausregnen. Es waren leichte Dampfschwaden sichtbar. Das Zentrum des Auftreffens der ausgeregneten Anteile war wegen des höheren Drucks und der höheren Austrittsgeschwindigkeit mit 6 – 8 m weiter von der Düse entfernt als bei Typ a. In einer Entfernung von ca. 7,5 m von der Düse wurde der max. ausgeregnete Anteil mit ca. 33 Gew.-% gemessen. Der Strahl kühlte um 50 – 85 K ab. Der Übergang von Typ a zu Typ b erfolgte fließend.

Der Typ b scheint nach [4.10] für einen Zerfall durch Impulsaustausch mit der Umgebungsluft typisch zu sein. Abbildung 4.5 zeigt ein Beispiel einer Freistrahlfreisetzung vom Typ b.


Abb. 4.4: Strahl Typ a: Beispiel bei 110,25°C, 1,8 bar, Abbildung aus [4.10]



Abb. 4.5: Strahl Typ b: Beispiel bei 110,45°C, 4,8 bar, Abbildung aus [4.10]



Abb. 4.6: Strahl Typ c: Beispiel bei 170,45°C, 8,2 bar, Abbildung aus [4.10]

Typ c Freistrahl:

Bei diesem Freistrahltyp war kein flüssiger Kern zu sehen. Der Strahl zerfiel sofort beim Austritt in sehr feine Tropfen und sah aus wie Nebel mit einem feinen Nieselregen darunter. Der max. ausgeregnete Anteil wurde in einer Entfernung von ca. 2,5 m mit ca. 26 Gew.-% gemessen. Nach [4.10] scheinen die Eigenschaften des Type c Freistrahls typisch für den thermischen Zerfall zu sein. Es wurde davon ausgegangen, dass ein mechanischer Zerfall nicht mehr auftreten konnte, da die Tropfen so klein waren, dass sie mechanisch stabil waren. Abbildung 4.6 zeigt ein Beispiel einer Freistrahlfreisetzung vom Typ c.

Aus den Versuchsergebnissen zeigte sich, dass der ausgeregnete Anteil mit steigender Anfangstemperatur im Freisetzungsbehälter abfällt. Der Einfluss des Anfangsdrucks auf den ausgeregneten Anteil war gering. Für die Unterscheidung der drei Freistrahltypen wurden die Weber-Zahl We und die sog. Wachstumsrate C der Blase herangezogen. Die Wachstumsrate einer Blase charakterisiert den Massenanteil, der beim Entspannen auf Umgebungsdruck verdampft sowie die Volumenzunahme beim Verdampfen und das Maß des Wärmeübergangs von der Flüssigkeit in Dampf. Die Weber-Zahl We und die Wachstumsrate C der Blase werden wie folgt bestimmt:

$$We = \frac{\rho_{Luft} \cdot u^2 \cdot d}{2 \cdot \sigma}$$
(4.1)

$$C\left[m s^{-0.5}\right] = \frac{c_{pl} \cdot \left(T_0 - T_s\right)}{h_{vl}} \cdot \frac{\rho_l}{\rho_v} \cdot \sqrt{\pi \cdot a}$$
(4.2)

Hinweis: üblicherweise wird die Weber-Zahl We definiert als: $We = \frac{\rho_{Luft} \cdot u^2 \cdot d}{\sigma}$)

Hierbei bedeuten

ρ _{Luft} [kg/m³]	Dichte der Umgebungsluft
u [m/s]	Strahlgeschwindigkeit
d [m]	Durchmesser des Strahls
σ [N/m]	Oberflächenspannung der Flüssigkeit
c _{pl} [J/(kg⋅K)]	spezifische Wärmekapazität der Flüssigkeit
T ₀ [k]	Ruhetemperatur
T _s [k]	Siedetemperatur bei Umgebungsdruck
h _{vl} [J/kg]	Verdampfungsenthalpie
ρ _l [kg/m³]	Dichte der Flüssigkeit
ρ _v [kg/m³]	Dichte des Dampfs
a [m²/s]	Temperaturleitfähigkeit der Flüssigkeit

Nach [4.10] kann Folgendes zusammengefast werden:

- Stabile Flüssigkeitsstrahlen (Typ a) existieren bis zu einer Weber-Zahl von We = 7.
- Bei We > 9 zerfallen die Strahlen in größerem Abstand von der Düse (Typ b).
- Bei C > 0,088 (T₀ T_S > 40 K) zerfallen die Strahlen unmittelbar an der Düse (Typ c).

Nach [4.10] weichen diese Ergebnisse von den Ergebnissen von Brown und York [4.13] ab, bei denen ein Zerfall bei Weber-Zahlen zwischen We = 8 - 24 auftritt. Bei der Auftragung der Wachstumsrate C der Blase über der Weber-Zahl ist zu erkennen, dass die verschiedenen Strahltypen in unterschiedlichen Gebieten existieren [4.10]. Weitere Freistrahlfreisetzungen mit Wasser wurden in [4.11] und [4.12] untersucht. Gemessen wurden die Tropfengröße, Temperatur und der Rainout-Anteil. Die Versuche in [4.11] wurden mit einem 2 m³ Wassertank durchgeführt (Versuchsbedingungen: Temperatur: 130 - 170°C, Druck: 1 - 20 bar). Die Freisetzungen erfolgten aus einer Düse (d = 2mm) und einer Rohrleitung (d = 2 mm, I = 100 mm). Die Versuche in [4.12] wurden mit einem mit 150 I Wasser gefüllten Vorratsbehälter (Volumen 233 I, Durchmesser 0,257 m, Höhe 4,5 m) durchgeführt. Der Druck im Behälter wurde mit Stickstoff eingestellt und durch eine Regelung konstant gehalten. Das Wasser wurde durch Düsen mit Durchmessern d von 2, 5 und 8 mm mit jeweils zugehörigen Rohrleitungslängen I von 100, 250 und 400 mm bei einer Höhe h über dem Boden von 1,5 m entspannt (Versuchsbedingungen: Drücke bis zu 11 bar, Temperaturen bis zu 170 °C).

Folgende Ergebnisse wurden ermittelt:

Die meisten Tropfen wiesen eine Größe < 200 μ m auf. Nur einige Tropfen waren wesentlich größer (200 - 600 μ m) und machten ca. 85% der ausgeregneten Masse aus. Daher wurden die Verteilungsfunktionen gewichtet nach der Masse aufgetragen. Aus dieser Darstellung konnten bei ca. 250 μ m, ca. 450 μ m und ca. 600 μ m drei Maxima für die Tropfendurchmesser ermittelt werden. Die Tropfengrößenverteilung zeigte, wie bei den STEP-Experimenten, eine logarithmische Normalverteilungsform und war unabhängig von der Freisetzungsgeometrie (Düse oder Rohr).

Die gemessenen Rainout-Anteile waren teilweise sehr hoch, z.B. 76 Ma.-% bei 148°C, 0,79 MPa. Diese regneten in wenigen Metern im Abstand zum Freisetzungsort aus. Das Ausregnen der Tropfen mit Tropfengrößen <200 µm konnte in [4.11] nicht erklärt werden. Für alle untersuchten Versuchsbedingungen (zwischen 136°C und 176°C und 0,8 MPa und 1,04 MPa) wurden große Tropfen in der Größenordnung von 500 µm beobachtet.

4.2.5.2 Experimente mit Butan

Die Versuche mit Butan [4.11] wurden aus Druckflaschen unter Sättigungsbedingungen bei 24°C und 2 bar durchführt. Die Flüssigkeit wurde durch eine kurze Düse mit 5 mm Durchmesser oder durch ein Rohr mit 1,65 mm Innendurchmesser und 100 mm Länge entspannt.

Die experimentellen Ergebnisse zeigten unabhängig von der Freisetzungsgeometrie (Düse, Rohr) und der Messposition mittlere Sauter-Durchmesser zwischen 50 µm und 130 µm. Mit zunehmendem Abstand von der Austrittsstelle wurde dieser Durchmesser größer. Eine mögliche Erklärung hierfür kann sein, dass bei kleineren Tropfen die Oberfläche im Verhältnis zur Masse größer ist, was die Verdunstung begünstigt. Die kleineren Tropfen verdunsten schneller längs des Weges und größere Tropfen bleiben übrig.

4.2.6 Experimente im Rahmen eines Joint Industrial Projektes

Im Rahmen eines Joint Industrial Projects (JIP) wurden in der Zeit von 2002 bis 2013 in vier Phasen verschiedene Untersuchungen zu der Freisetzung von Flüssigkeitsfreistrahlen durchgeführt [4.14] bis [4.21]:

<u>Phase I</u> des JIP [4.19] umfasste eine Literaturrecherche zu den sog. "flashing liquids" (spontanverdampfenden Flüssigkeiten) und der Ausbreitung von Tropfen.

In <u>Phase II</u> und <u>Phase III</u> [4.14] bis [4.18] wurden experimentelle Untersuchungen zur Ermittlung der Strömungsrate und der Tropfengrößenverteilung durchgeführt. Die Arbeiten umfassten experimentelle Untersuchungen durch die Cardiff University für eine große Anzahl an Freisetzungen mit Wasser, Cyclohexan, Butan, Propan und Benzin (Tabelle 4.10). Ergänzend wurden bei INERIS Experimente mit Butan in einem größeren Maßstab durchgeführt, um durch realistischere Szenarien die ermittelten Tropfengrößen abzusichern (Tabelle 4.11).

Stoff	Zustand	Temperatur [°C]	Düsendurch- messer [mm]	Länge (Düse, Rohr) / Düsen- durchmesser	Überdruck [bar]
Wasser	unterkühlt	17	1; 2	1,01; 0,505	6; 10; 14
Cyclohexan	unterkühlt	17	0,75; 1; 2	1,4; 1,01; 0,505	6; 8; 10; 12; 14
Benzin	unterkühlt	17	0,75; 1	4,53; 3,4	6; 8; 10; 12; 14
Wasser	überhitzt	185	0,75; 1	4,5; 3,54	10
Cyclohexan	überhitzt	180	1; 2	1,01; 0,505	7,5; 10
Butan	überhitzt	18	0,75; 1; 2	1,4; 1,01; 0,5	9,5; 8; 7,5
Propan	überhitzt	18	1; 2	1,01; 0,5	6,5; 7,5
Benzin	überhitzt	180	1	1,01	10

Tab. 4.10: Test-Matrix für die Experimente an der Cardiff University [4.17]

Düsendurch-	Druck	Temperatur	Messabstand
messer [mm]	[bar ü]	[°C]	[cm]
5	6	15 – 26	60
10	5,8	26 – 27	60, 85
10	9,8	19 – 22	60, 85
15	5	17 – 21	60, 85
10	5,8	9 – 10	40, 60, 85
10	2	7 - 9	40, 60, 85

Tab. 4.11: Test-Matrix für die Experimente mit Butan bei INERIS [4.17]

In den Messreihen ergaben sich maximale Tropfendurchmesser zwischen 700 – 800 µm.

Aus den Versuchsergebnissen wurde eine Funktion für den Sauter-Durchmesser d_{32} abgeleitet. Dabei werden drei Bereiche unterschieden (Abbildung 4.7):

- Unterkühlt (bis Punkt A)
- Übergangsbereich (zwischen Punkt A und B)
- Verdampfend (nach Punkt B)



Abb. 4.7: Tropfengrößenverteilung nach JIP

Die Übergangspunkte A und B werden in [4.17[und [4.18] wie folgt definiert: Punkt A: $Ja \cdot \phi = 48 \cdot We_v^{-1/7}$ (4.3)

Punkt B:
$$Ja \cdot \phi = 108 \cdot We_v^{-1/7}$$
 (4.4)

$$\varphi = 1 - \exp\left[-2300 \cdot \frac{\rho_v}{\rho_1}\right] \tag{4.5}$$

Die Weber-Zahl Wev für die Dampfphase und die Jacob-Zahl Ja sind wie folgt definiert:

$$We_{v} = \frac{\rho_{v} \cdot u_{0}^{2} \cdot d_{0}}{\sigma_{0}}$$
(4.6)

$$Ja = \frac{c_{pl} \cdot (T_0 - T_s)}{h_{vl}} \cdot \frac{\rho_v}{\rho_l}$$
(4.7)

Der Sauter-Durchmesser d32 für den unterkühlten Bereich bis Punkt A berechnet sich wie folgt:

$$\frac{d_{32}}{d_0} = 74 \cdot We_{10}^{-0.85} \cdot Re_{10}^{0.44} \cdot \left(\frac{L}{d_0}\right)^{0.114} \cdot \left(\frac{\mu_{10}}{\mu_{Wasser,N}}\right)^{0.97} \cdot \left(\frac{\sigma_{10}}{\sigma_{Wasser,N}}\right)^{-0.37} \cdot \left(\frac{\rho_{10}}{\rho_{Wasser,N}}\right)^{-0.11}$$
(4.8)

Für das Verhältnis L/d₀ werden folgende Werte angenommen:

- $L/d_0 < 0,1$: $L/d_0 = 0,1$
- $L/d_0 < 50$: $L/d_0 = 50$.

Re₁₀ und We₁₀ werden mit den Bedingungen in der Düse gebildet. Der Index "Wasser,N" bezieht sich auf Wasser bei Normbedingungen (0°C 1,013 bar_{abs}).

Es wird angenommen, dass der Bereich der Spontanverdampfung (nach Punkt B) ab einem Sauter-Durchmesser von $d_{32} = 80 \,\mu m$ eintritt und der Sauter-Durchmesser sich mit wachsender Überhitzung mit einer konstanten Rate von 0,1 $\mu m/K$ auf $d_{32} = 10 \,\mu m$ verringert. Dieser Wert wird als Mindestwert konstant gehalten.

Aus den Gleichungen (4.3) und (4.4) wird die Überhitzung bzw. die Ruhetemperatur für die Punkte A und B berechnet. Der Sauter-Durchmesser d32 wird zwischen beiden Punkten linear interpoliert. Für die Tropfengrößenverteilung wird die Rosin-Rammler-Tropfengrößenverteilung angenommen. Dies wird in Form des Massenanteils an Tropfen v(D) mit einem Durchmesser kleiner als D angegeben mit folgenden aus den Experimenten angepassten Werten für die Koeffizienten a_{RR} und b_{RR}:

bis Punkt A:	$a_{RR} = 0,4; \ b_{RR} = 2,0$
Übergangsbereich:	linearer Übergang
nach Punkt B:	a _{RR} = 0,79; b _{RR} = 0,97

Hierbei bedeuten

u ₀ [m/s]	Geschwindigkeit in der Düse
d ₀ [m]	Durchmesser der Düse
σ ₀ [N/m]	Oberflächenspannung bei Düsentemperatur T ₀
c _{pl} [J/(kg⋅K)]	spez. Wärmekapazität der Flüssigkeit bei T_0
T ₀ [K]	Temperatur der Flüssigkeit in der Düse
T _S [K]	Siedetemperatur bei Umgebungsdruck
h _{vl} [J/kg]	Verdampfungsenthalpie bei Düsentemperatur T ₀
ρ _l [kg/m³]	Dichte der Flüssigkeit bei Düsentemperatur T ₀
ρ _ν [kg/m³]	Dichte des Dampfs bei Düsentemperatur T ₀
L [m]	Länge der Düse
µ[Pa s]	dynamische Viskosität der Flüssigkeit bei Düsentemperatur T_0
D [m]	Tropfendurchmesser
d ₃₂ [m]	Sauter-Durchmesser, $\Sigma D^3 / \Sigma D^2$

Das Ziel in Phase IV des JIP war es, experimentelle Daten für nicht-verdampfende (nonflashing) Rainout-Experimente zu ermitteln, um die in Phase III entwickelten Modelle weiter zu validieren und evtl. erforderliche Verbesserungen vorzunehmen. In der Phase IV wurden zunächst Indoor-Experimente mit Wasser und Xylol durch das Health and Safety Laboratory (HSL) durchgeführt. Die Experimente umfassten horizontale Freisetzungen für unterkühlte Flüssigkeiten aus verschiedenen Düsendurchmessern und bei verschiedenen Behälterdrücken aus 1 m Freisetzungshöhe. Gemessen wurden die Freisetzungsraten, die Tropfengrößenverteilung am Anfang sowie die Rainout-, Konzentrations- und die Temperaturverteilung. Die wesentlichen Versuchsbedingungen und die gemessenen Rainout-Anteile für Xylol sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst. Für die ausführliche Ergebnisdarstellung wird auf [4.20], [4.21] verwiesen.

Tab. 4.12: HSL-Experimente mit Xylol	 Versuchsbedingungen 	und Ergebnisse	(entnommen
aus [4.20])			

Düsendurchmesser	Behälterdruck	Temperatur	Rainout-Anteil
[mm]	[barg]	[°C]	[%]
2,5	4,2	11	96,8
	8,0		91,4
	10,3		90,4
	15,8		82,1
5	4,0	11	94,3
	7,7		89,9
	8,5	2	95,3
	13,1	5	85,2

In [4.20] wird zusammenfassend dargestellt, dass aus der Validierung (für alle Methoden und Experimente) geschlossen werden kann, dass die modifizierte CCPS-Korrelation für die Tropfengrößenverteilung die beste Vorhersage der Rainout-Anteile wiedergibt, und die Korrelation für die Tropfengröße aus der Phase III des JIP (typischerweise resultierenden größeren Tropfengrößen und größerem Rainout) die beste Abschätzung für die Anfangstropfengröße darstellt. Als Ergebnis wurde eine modifizierte CCPS-Korrelation für die Tropfengrößenverteilung in die Software-Pakete Phast Version 6.7 und Phast Risk als Standard und die Korrelation der Phase III des JIP als zusätzliche Abschätzungsmethode integriert.

Die modifizierte CCPS-Korrelation für die Tropfengrößenverteilung wird in [4.20] nicht konkret genannt. Es wird erläutert, dass sie auf dem CCPS-Kriterium für die Tropfengröße bei Spontanverdampfung d_f basiert und aus einer Anpassung an die korrigierten CCPS-Daten ermittelt worden wäre. Das originale CCPS-Kriterium für die Tropfengröße d_f bei Spontanverdampfung d_f lautet wie folgt [4.17]:

$$d_{f} = 0.833 \cdot 10^{-3} - 0.0734 \cdot 10^{-3} \ln(E_{p})$$
(4.10)

$$\begin{split} E_{P} &= -\Delta h_{v} - \left(P_{st} - P_{a}\right)v_{st} & \text{für } P_{v}^{sat}(T_{0}) \ge P_{st} \\ &= -\Delta h_{v} - \left(P_{v}^{sat}(T_{0}) - P_{a}\right)v_{st} - \left(P_{st} - P_{v}^{sat}(T_{0})\right)v_{st} & \text{für } P_{a} < P_{v}^{sat}(T_{0}) < P_{st} \\ &= \left(P_{st} - P_{a}\right)v_{st} & \text{für } P_{v}^{sat}(T_{0}) < P_{st} ; P_{v}^{sat}(T_{0}) \le P_{a} \end{split}$$
(4.11)

Hierbei bedeuten

d _f [M]	Tropfengröße bei Spontanverdampfung	
E _P [J/kg]	partielle Expansionsenergie	
Δh _v [J/kg]	spezifische Verdampfungsenthalpie	
T ₀ [k]	Ruhetemperatur	
v _{st} [m ³ /kg]	spezifisches Volumen bei Ruhebedingung	
P _{st} [N/m ²]	Ruhedruck	
P _a [N/m ²]	Umgebungsdruck	
P _v ^{sat} [N/m ²]	Sättigungsdampfdruck	

4.3 Flash-Verdampfung

Werden Stoffe bei einer Temperatur oberhalb der Siedetemperatur freigesetzt, so wird ein Teil der austretenden Flüssigkeit schlagartig durch Entspannungsverdampfung gasförmig freigesetzt. Die für diese Flash-Verdampfung benötigte Verdampfungsenergie wird dem Wärmeinhalt der Flüssigphase entzogen. Durch die Flash-Verdampfung kühlt sich der nicht verdampfende Anteil auf Siedetemperatur ab und bildet eine Flüssigkeitslache, aus der im weiteren Verlauf eine zusätzliche gasförmige Emission durch Verdunstung erfolgt.

In der Literatur werden die beiden folgenden Beziehungen zur Berechnung des durch die Flash-Verdampfung freiwerdenden Massenanteils angegeben [4.22], [4.43], [4.25]:

$$\Phi_{\rm F1} = \frac{m_{\rm F}}{m_0} = 1 - Exp \left[-\frac{c_{\rm pl} \left(T_0 - T_{\rm S} \right)}{h_{\rm v}} \right]$$
(4.12)

$$\Phi_{F2} = \frac{m_F}{m_0} = \frac{c_{pl} \left(T_0 - T_S \right)}{h_v}$$
(4.12a)

In den meisten Literaturstellen ist kein Hinweis vorhanden, ob die Stoffwerte bei der Austrittstemperatur oder der Siedetemperatur bestimmt oder über den Temperaturbereich gemittelt werden sollen [4.25]. In der Abbildung 4.8 ist der Flash-Anteil für eine Freisetzung von Ammoniak mit unterschiedlichen Temperaturen mit den Gleichungen 4.12 und 4.12a in folgenden Variationen berechnet worden:

- 1. Gleichung 4.12 und mittlere Stoffwerte
- 2. Gleichung 4.12a und mittlere Stoffwerte
- 3. Gleichung 4.12a und Stoffwerte bei der Freisetzungstemperatur
- 4. Gleichung 4.12a und Stoffwerte bei der Siedetemperatur



Abb. 4.8: Berechneter Flash-Anteil bei einer Ammoniak Freisetzung

In [4.25] ist ein Messwert für die Freisetzungstemperatur 20°C angegeben. Im Vergleich zu den Berechnungsergebnissen liegt Gleichung (4.12) mit mittleren Stoffwerten und Gleichung 4.12a mit Stoffwerten bei der Siedetemperatur in guter Übereinstimmung. Die Abweichung zwischen den Ergebnissen der Gleichung (4.12) und (4.12a) bei mittleren Stoffwerten beträgt bei 20°C ca. 10%.

T ₀ [K]	Austrittstemperatur
T _s [K]	Siedetemperatur bei Umgebungsdruck
h _v [J/kg]	spez. Verdampfungsenthalpie
c _{pl} [J/(kg⋅K)]	spez. Wärmekapazität der Flüssigkeit
m _F [kg]	Masse der Flash-Verdampfung
m ₀ [kg]	Masse der Flüssigkeit

Die Formelzeichen I	bedeuten
---------------------	----------

4.4 Spray-Modelle

Es gibt eine Vielzahl von Modellen zur Abschätzung des Rainout-Anteils bzw. des ausgeregneten Anteils bei Flüssigkeitsfreisetzungen. Die Modelle reichen von einfachen Korrelationsgleichungen bis hin zu komplexen Modellen, die die Flugbahn, die Temperatur im Tropfen und das Verdunsten eines Tropfens über die Lösung der Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie und Impuls berechnen. Das obere Ende der Skala wird durch kommerzielle Programme markiert, in denen die einzelnen Punkte vom Freisetzungsmassenstrom bis zu den Auswirkungen in Teilprogrammen abgeschätzt werden. Häufig berechnen diese Programme auch die Ausbreitung des zweiphasigen Freistrahls bis hin zur Ausbreitung der Gaswolke im Fernfeld. Im Folgenden werden einige einfache Korrelationsgleichungen und komplexere Modelle vorgestellt.

4.4.1 Einfache Korrelationen

4.4.1.1 Berechnung der adiabaten Sättigungstemperatur

In den im Folgenden dargestellten Modellen von DeVaull und King und von Fauske wird die adiabate Sättigungstemperatur (bei Fauske auch Gleichgewichtstemperatur genannt) verwendet. Es werden hierzu folgende Beziehungen angegeben:

DeVaull und King [4.28]:

$$(c_{p,Luft} + X_{\infty} c_{p})(T_{u} - T_{as}) = (X_{as} - X_{\infty})h_{v}$$
 (4.13)

Der Masseanteil des Stoffs bei Sättigungstemperatur kann nach folgender Beziehung berechnet werden:

$$X_{as} = \frac{p(T_{as})M}{P_{u}\left(\frac{p(T_{as})}{P_{u}}M + \left(1 - \frac{p(T_{as})}{P_{u}}\right)M_{Luft}\right)}$$
(4.14)

Der Masseanteil des Stoffs in der Umgebung ist im Allgemeinen Null. Bei Vergleichsrechnungen für Wasser ist die Luftfeuchtigkeit der Umgebungsluft zu berücksichtigen [4.42]:

$$p_{w} = 6.1 X_{Lf} * 10^{\frac{7.45(T_{u} - 273)}{T_{u} - 38}}$$
(4.15)

$$X_{\infty} = \frac{18p_{w}}{P_{u}\left(\frac{18p_{w}}{P_{u}} + \left(1 - \frac{p_{w}}{P_{u}}\right)M_{Luft}\right)}$$
(4.16)

Fauske [4.29]:

$$\frac{c_{p,Luft}(T_u - T_{as})}{h_v} = \frac{p(T_{as}) - p_w}{p_u - p(T_{as})}$$
(4.17)

In [4.28] sind einige experimentell ermittelte adiabate Sättigungstemperaturen zusammengestellt worden, die als Vergleichswerte für die oben genannten Beziehungen herangezogen werden. Da für Wasser keine Angaben zur Luftfeuchtigkeit vorliegen, ist ein Wert von 50% festgelegt worden. Aus der folgenden Tabelle ist zu entnehmen, dass der Ansatz von DeVaull und King die bessere Übereinstimmung mit den Messungen ergibt.

Tab. 4.13: Adiabate Sättigungstemperaturen nach DeVaull und King und Fauske

Stoff	T _{as} [°C]	T _u [°C]	T _{as} [°C] [4.28]	T _{as} [°C] [4.29]
Wasser	16,8	29,8	21,9	20,9
Cyclohexan	-2,4	36,2	-1,6	9,6
Fluorwasserstoff	-18,0	36,0	-16,7	-24,3
Methylamin	-50,2	30,6	-50,5	-50,8
Ammoniak	-68,9	31,4	-69,6	-76,2
Chlor	-71,9	30,1	-68,2	-62,3
Summe der			10,1	39,9
Abweichungen				

Die Formelzeichen bedeuten

Τ _υ [K]	Temperatur der Umgebung
T _{as} [K]	adiabate Sättigungstemperatur
h _v [J/kg]	spez. Verdampfungsenthalpie
c _p [J/(kg⋅K)]	spez. Wärmekapazität der Gasphase des Stoffs
c _{pLuft} [J/(kg⋅K)]	spez. Wärmekapazität der Luft
X _{as} [kg/kg]	Masseanteil des Stoffs bei Sättigungstemperatur
${\rm X}_{_\infty}$ [kg/kg]	Masseanteil des Stoffs in der Umgebung
X _{Lf} [%]	Luftfeuchtigkeit
p _u [Pa]	Umgebungsdruck
p _w [Pa]	Wasserdampfdruck
p [Pa]	Dampfdruck des Stoffs
M [g/mol]	Molare Masse

4.4.1.2 Abschätzung

Bei der Flashverdampfung können Flüssigkeitströpfchen mitgerissen werden, die bei kleinen Tröpfchendurchmessern als Aerosol ohne merkliche Sinkgeschwindigkeit dispergiert bleiben und/oder rasch verdampfen bzw. verdunsten und sich somit ebenfalls luftgetragen ausbreiten können. Dieser nicht zum Boden absinkende Aerosolanteil kann durch einen Zuschlag auf den Flash-Anteil berücksichtigt werden. Für die durch Flash- und Aerosolfreisetzung insgesamt luftgetragen emittierte Masse ergibt sich damit:

$$\mathbf{m}_{\mathrm{F}} + \mathbf{m}_{\mathrm{A}} = \mathbf{m}_{0} \cdot \left(\Phi_{\mathrm{F}} + \Phi_{\mathrm{A}} \Phi_{\mathrm{F}} \right) \cdot \tag{4.18}$$

Φ_A ist der Aerosolanteil, bezogen auf den Flashanteil und wird wie folgt abgeschätzt:

nach [4.22]:	$\Phi_A = 0.5$
nach [4.23]:	Φ_A = 1 für Stoffe mit einem Flashanteil 5%< Φ_F < 50%
	Φ_A = 3 für Stoffe mit einem Flashanteil Φ_F < 5%
nach [4.24]:	Φ_A = 1 für Stoffe mit einem Flashanteil 5%< Φ_F < 50%
	Φ_A = 2 - 3 für Stoffe mit einem Flashanteil Φ_F < 5%
nach [4.25]:	Φ_A = 2 für Stoffe, die viele Aerosole bilden (z.B. Ammoniak)

4.4.1.3 Kletz

Nach [4.26] kann der Rainout-Anteil x_R über den spontan verdampfenden Flash-Anteil Φ_{F2} nach Gleichung (4.12a) abgeschätzt werden:

$$x_{R} = 1 - 2\Phi_{F2}$$
 (4.19)

4.4.1.4 DeVaull und King

Auf Basis der CCPS-Experimente haben DeVaull und King zwei einfache Korrelationsgleichungen für die Abschätzung des Rainout-Anteils entwickelt. Die von ihnen entwickelten Modellgleichungen beruhen auf den Transportmechanismen in der Grenzschicht zwischen der Flüssig- und Dampfphase und berücksichtigen die Wärmeleitung in der Flüssigphase sowie den Wärmeübergang in die Dampfphase und die Diffusion in der Dampfphase. Die Modellgleichungen sind in [4.28] ausführlich beschrieben.

DeVaull und King unterscheiden für die Freisetzung von Flüssigkeiten zwischen "flüchtigen" und "nicht flüchtigen Fluiden". "Flüchtige Fluide" erfüllen danach folgende Bedingung:

$$\frac{T_{\rm U} - T_{\rm as}}{T_{\rm U}} \ge 0,14 \tag{4.20}$$

Nach diesem Kriterium sind die in den CCPS-Experimenten verwendeten Stoffe Wasser und Cyclohexan "nicht-flüchtig", Chlor, Methylamin und Trichlorfluormethan (CFC-11) "flüchtig".

Nicht-flüchtige Fluide:

$$x_{R} = \frac{\dot{m}_{R}}{\dot{m}} = 1 - \frac{c_{pl} \cdot (T_{0} - T_{as})}{h_{v}}$$
(4.21)

Flüchtige Fluide:

$$\frac{x_{R}}{x_{*}} = 1 - \left[\frac{\Phi_{F2}}{0,145}\right]^{1,8} , \text{ für } \Phi_{F2} < 0,145;$$
(4.22)

$$\frac{X_R}{X_*} = 0$$
, für $\Phi_{F2} \ge 0,145$ (4.23)

$$x_{*} = 1 - 2,33 \cdot \left(\frac{T_{U} - T_{as}}{T_{U}}\right)$$
 (4.24)

Hierbei bedeuten

Τ _υ [K]	Temperatur der Umgebung
T _{as} [K]	adiabate Sättigungstemperatur
T ₀	Temperatur im Behälter
h _v [J/kg]	spez. Verdampfungsenthalpie
c _{pl} [J/(kg⋅K)]	spez. Wärmekapazität der Flüssigkeit
x _R [-]	Anteil der ausgeregneten Flüssigkeitsmenge
Φ _{F2} [-]	adiabater Flashanteil nach Gleichung (4.12a)

4.4.1.5 Fauske

Fauske [4.29] hat ein einfaches Modell zur Abschätzung des Rainout-Anteils für Flüssigkeits-Freistrahlfreisetzungen entwickelt. Das Modell wurde mit den CCPS-Messergebnissen verglichen. Die Formeln in [4.29] enthalten einige Schreibfehler, die durch Bezug auf den Artikel [4.30] gelöst werden konnten. Verwendet wurden die Formeln 24, 25 und 26 auf Seite 1030 in dieser Veröffentlichung.

Nach dem Modell von Fauske kann die Länge L des intakten (nicht aufgebrochenen) Freistrahls wie folgt berechnet werden:

$$\mathbf{L} = 6,25 \cdot \mathbf{D}_0 \cdot \left[\frac{\rho_1}{\rho_{\text{Luft}}}\right]^{1/2}$$
(4.25)

Die Länge Z der sich nach dem Aufbrechen des Freistrahls bildenden Aerosol-Wolke berechnet sich aus folgender Gleichung:

$$\left[\frac{2\cdot s}{g}\right]^{1/2} = \frac{Z}{u_j} + 0.16 \cdot \left[\frac{\rho_{\text{Luft}}}{\rho_1}\right]^{1/2} \cdot \frac{Z^2}{D_0 \cdot u_j}$$
(4.26)

$$u_{J} = \frac{0.6\sqrt{2(p-p_{u})\rho_{l}}}{\rho_{l}}$$
(4.27)

Durch die Einmischung von Luft in die Aerosol-Wolke verringert sich der Dampfdruck des Gemisches. Dies führt zu einer weiteren Abkühlung der Flüssigkeitstropfen durch die Verdunstung. Die Flüssigkeit kühlt sich dabei soweit ab, bis die von der eingesaugten Luft eingebrachte Wärme der durch die Verdunstung abgeführten Wärme entspricht. In Abhängigkeit von der Siedetemperatur T_s der Flüssigkeit wird sich eine

Gleichgewichtstemperatur T_{as} einstellen, die nach [4.31] berechnet werden kann (siehe oben).

Der Verdunstungsanteil x_v durch Einmischen von Umgebungsluft in den Strahl wird berechnet über:

$$x_{v} = 0,32 \cdot \sqrt{\frac{\rho_{Luft}}{\rho_{l}}} \cdot \frac{c_{p,Luft} \cdot (T_{v} - T_{as})}{h_{v}} \cdot \frac{Z}{D_{0}}$$

$$(4.28)$$

Der Rainout-Anteil bzw. der aufgefangene Flüssigkeitsanteil (liquid capture) wird wie folgt berechnet:

$$x_{R} = 1 - x_{v} - \Phi_{F2}$$
(4.29)

Hierbei bedeuten

D ₀ [m]	Durchmesser der Freisetzungsfläche
L [m]	Länge L des intakten Freistrahls
ρ _{Luft} [kg/m ³]	Dichte der Umgebungsluft
ρ _l [kg/m ³]	Dichte der Flüssigkeit
A [m ²]	Freisetzungsfläche
s [m]	Höhe der Freisetzungsfläche über dem Boden
u _j [m/s]	Austrittsgeschwindigkeit des Freistrahls
g [m/s²]	Erdbeschleunigung
p [Pa]	Druck am Freisetzungsquerschnitt
p _u [Pa]	Umgebungsdruck
u _s [m/s]	Strahlgeschwindigkeit bei Umgebungsbedingungen
Z [m]	Länge der sich bildenden Aerosol-Wolke
c _{p,Luft} [J/(kgK)]	spezifische Wärmekapazität der Luft
Τ _υ [K]	Umgebungstemperatur
T _{as} [K]	Gleichgewichtstemperatur
h _v [J/kg]	Verdampfungsenthalpie
Φ _{F2} [-]	adiabater Flashanteil nach Gleichung (4.12a)

4.4.1.6 Lautkaski

Auf Basis der korrigierten Daten aus den CCPS-Experimenten hat Lautkaski neue Korrelationsgleichungen für die Abschätzung des Rainout-Anteils veröffentlicht [4.32]. Im

Gegensatz zu den Korrelationsgleichungen von DeVaull und King [4.28] gelten diese Gleichungen für "flüchtige" wie auch für "nicht-flüchtige" Flüssigkeiten. Lautkaski fand heraus, dass die korrigierten CCPS-Daten keine Abhängigkeit von dem von DeVaull und King definierten Verhältnis (($T_U - T_{as}$)/ T_U) $\ge 0,14$) zur Differenzierung der Flüchtigkeit zeigten.

Nach Lautkaski wird der Rainout-Anteil nach folgender Korrelationsgleichung berechnet:

$$\frac{x_{R}}{0,6} = 1 - \left(\frac{\Phi_{F2}}{0,355}\right)^{0.9} \text{ für: } \Phi_{F2} > 0,333$$
(4.30)

$$\frac{x_{R}}{0,6} = 1 - 3 \cdot \Phi_{F2}, \quad \text{für: } \Phi_{F2} \le 0,333$$
(4.31)

Eine bessere Übereinstimmung mit den korrigierten Messergebnissen des CCPS fand Lautkaski durch die Korrelation des Rainout-Anteils mit der Jakob-Zahl Ja:

$$\frac{\mathbf{x}_{R}}{0,6} = 1 - \left(\frac{Ja}{93}\right)^{1,36}, \text{ (gültig für: } Ja \le 93\text{)}$$

$$Ja = \frac{c_{pl} \cdot \left(T_{0} - T_{s}\right)}{h_{v}} \cdot \frac{\rho_{1}}{\rho_{v}}$$
(4.32)

Hierbei bedeuten

X _R [-]	Anteil der ausgeregneten Flüssigkeitsmenge
Ja [-]	Jakob-Zahl
c _{pl} [J/(kgK)]	Spezifische Wärmekapazität der Flüssigkeit
T ₀ [K]	Temperatur im Behälter
Т _s [K]	Siedetemperatur
h _v [J/kg]	Verdampfungsenthalpie
ρ _ι [kg/m ³]	Dichte der Flüssigkeit bei Umgebungsbedingungen
ρ _ν [kg/m ³]	Dichte der Gasphase bei Umgebungsbedingungen
Φ _{F2} [-]	adiabater Flashanteil nach Gleichung (4.12a)
Ja	Jakob-Zahl

4.4.1.7 Tickle

Eine neue Korrelationsgleichung zur Abschätzung des Rainout-Anteils auf Basis der nichtkorrigierten CCPS-Messergebnisse ist in [4.27] angegeben. Das Heranziehen der nichtkorrigierten CCPS-Daten zur Ableitung der neuen Gleichung wird damit begründet, dass die gemessenen Rainout-Anteile für Chlor, MMA und Cyclohexan geringer sind und damit der luftgetragene Anteil der Stoffe größer ist. Dies wäre nach [4.27] im Sinne einer konservativen Abschätzung vorteilhafter für Ausbreitungsmodelle, die die Effekte des Ausregnens nicht betrachten.

Für diese neuen Korrelationsgleichungen wird nach dem Kriterium von DeVaull und King zwischen "gering-flüchtigen" und "flüchtigen" Fluiden unterschieden.

Für <u>gering-flüchtige Fluide</u> $((T_U - T_{as})/T_U \le 0,14))$ wird der Rainout-Anteil x_R nach der Gleichung (4.21) von DeVaull und King berechnet:

$$x_{R} = 1 - \frac{c_{pl} \cdot (T_{0} - T_{as})}{h_{v}}$$
(4.34)

Für <u>flüchtige Fluide</u> $((T_U - T_{as})/T_U \ge 0,14))$ wird für den Rainout-Anteil x_R eine neue Korrelationsgleichung über die Jakob-Zahl Ja angegeben:

$$\frac{\mathbf{X}_{\mathsf{R}}}{\mathbf{X}_{*}} = 1 - \left(\frac{\mathsf{J}\mathbf{a}}{\mathsf{75}}\right)^{3} \tag{4.35}$$

$$x_* = 1 - 2,33 \cdot \left(\frac{T_U - T_{as}}{T_U}\right)$$
 (4.36)

Hierbei bedeuten

Т _U [K]	Temperatur der Umgebung
T _{as} [K]	adiabate Sättigungstemperatur
T ₀	Temperatur im Behälter
h _v [J/kg]	spez. Verdampfungsenthalpie
c _{pl} [J/(kg⋅K)]	spez. Wärmekapazität der Flüssigkeit
X _R [-]	Anteil der ausgeregneten Flüssigkeitsmenge
Ja	Jakob-Zahl

4.4.2 Modellgleichungen

4.4.2.1 Yellow Book

Das im Yellow Book [4.35] empfohlene Modell zur Beschreibung der Freistrahlfreisetzung basiert auf konventionellen Bilanzgleichungen:

Massenbilanz:

$$\rho_e u_e A_e = \rho_f u_f A_f \tag{4.37}$$

Enthalpiebilanz:

$$H_{e} + \frac{1}{2} u_{e}^{2} = H_{f} + \frac{1}{2} u_{f}^{2}$$
(4.38)

Impulsbilanz:

/

$$\rho_{e} u_{e}^{2} A_{e} + A_{e} (p_{e} - p_{U}) = \rho_{f} u_{f}^{2} A_{f} , \qquad (4.39)$$

$$p_{\rm U} = p_{\rm v}(T_{\rm B}) \tag{4.40}$$

Die Indizes "e" und "f" beziehen sich auf die Freisetzungsbedingungen am Anfang und nach der Spontanverdampfung.

Das Yellow-Book-Modell ist in vier Berechnungsschritte aufgeteilt:

- 1. Bedingungen in dem Freistrahl nach der Spontanverdampfung
- 2. Tropfendurchmessers nach der Spontanverdampfung
- 3. Tropfen-Verdunstung und Ausregnen auf den Boden
- 4. Bedingungen in dem Freistrahl nach Verdunstung aller luftgetragenen Tropfen

<u>1. Schritt</u>: Berechnung der Bedingungen in dem Freistrahl nach der Spontanverdampfung Die Dichte des Fluids am Freisetzungsquerschnitt ρ_e wird über den Masseanteil an Dampf x_e (kg Dampf pro kg Zweiphasengemisch) berechnet:

$$\frac{1}{\rho_{\rm e}} = \frac{(1 - x_{\rm e})}{\rho_{\rm l,e}} + \frac{x_{\rm e}}{\rho_{\rm v,e}}$$
(4.41)

Die Geschwindigkeit des Freistrahls uf nach der Entspannung wird wie folgt abgeschätzt:

$$u_{f} = \frac{\left(p_{e} - p_{U}\right)A_{e}}{\dot{m}_{e}} + \frac{\dot{m}_{e}}{\rho_{e}A_{e}} \quad ; \qquad p_{e} \ge p_{u}$$

$$u_{f} = \frac{\dot{m}_{e}}{\rho_{e}A_{e}} \quad ; \qquad p_{e} < p_{u} \quad (4.42)$$

Der Masseanteil an Dampf x_e nach der Spontanverdampfung wird berechnet mit:

$$x_{f} = 1 - \frac{H_{v,f} - H_{v,e} + (1 - x_{e})h_{v,e} + 0,5(u_{f}^{2} - u_{e}^{2})}{h_{v,f}}$$

$$H_{v,f} - H_{v,e} = \int_{T_{B}}^{T_{f}} c_{p}(T) dT$$
(4.43)

Die wachsende Querschnittsfläche A_f und der Radius r_f des Freistrahls oder der Wolke lassen sich wie folgt abschätzen:

$$\frac{1}{\rho_{\rm f}} = \frac{(1 - x_{\rm f})}{\rho_{\rm l,f}} + \frac{x_{\rm f}}{\rho_{\rm v,f}}$$
(4.44)

$$A_{f} = \frac{\rho_{e}u_{e}}{\rho_{f}u_{f}}A_{e}; \quad r_{f} = \sqrt{\frac{A_{f}}{\pi}}$$
(4.45)

2. Schritt: Berechnung des Tropfendurchmessers nach der Spontanverdampfung

Das empfohlene Modell für den Tropfendurchmesser basiert auf den Arbeiten von Appleton [4.36], die von Wheatley [4.37] vorgestellt wurden. Der Tropfendurchmesser d_d wird danach wie folgt bestimmt:

$$d_d = 3,78 \sqrt{1 + 3 \frac{We_f^{0.5}}{Re_f}}$$
, für We_f < 10⁶ Re_f^{-0,45} und T_e < 1,11 T_B (4.46)

Für die anderen Fälle berechnet sich der Tropfendurchmesser iterativ aus

$$d_{d} = C_{ds} \frac{\sigma_{s}}{u_{d}^{2} \rho_{a}}$$
(4.47)

mit der Fallgeschwindigkeit des Tropfens u_d nach GI. (4.49) und mit der Reynolds-Zahl Re und der Weber-Zahl We,

$$Re_{f} = \frac{2r_{f}u_{f}}{v_{l}}, We_{f} = \frac{2r_{f}u_{f}^{2}\rho_{l,f}}{\sigma_{s}}$$
(4.48), (4.49)

Nach [4.35] variiert die Konstante C_{ds} in Gleichung (4.47) in der Literatur zwischen 10 und 20. Im Yellow Book wird C_{ds} = 15 empfohlen.

<u>3. Schritt</u>: Berechnung der Tropfen-Verdunstung und des Ausregnens auf den Boden Es wird angenommen, dass alle Tropfen den gleichen Durchmesser haben.

Für die Geschwindigkeit der Tropfen u_d wird die Geschwindigkeit des freien Falls angenommen:

$$u_{d} = \frac{\rho_{1,f}g}{18\nu_{a}\rho_{a}}d_{d}^{2}$$
(4.50)

Für die Berechnung der Tropfenverdunstung wird zunächst ein Koeffizient k_B definiert, mit dem die Verdunstung des Tropfens an der Oberfläche bestimmt wird:

$$k_{\rm B} = -\frac{4 \,{\rm M} \,{\rm D} \,{\rm p}_{\rm a}}{\rho_{\rm l,f} \,{\rm R} \,{\rm T}_{\rm a}} \ln \left(1 - \frac{{\rm p}_{\rm v}({\rm T}_{\rm d})}{{\rm p}_{\rm a}}\right) \tag{4.51}$$

Die Temperatur des Tropfens wird wie folgt berechnet:

$$T_{d} = T_{a} - \frac{h_{d} k_{B} \rho_{l,f} \left(1 + 0,28 R e_{d}^{1/2} S c^{1/3}\right)}{4 \lambda \left(\left(1 + 0,28 R e_{d}^{1/2} P r^{1/3}\right)\right)}$$
(4.52)

$$Re_{d} = \frac{u_{d}d_{d}}{v_{a}}; Sc = \frac{v_{a}}{D}; Pr = \frac{c_{p}\rho_{a}v_{a}}{\lambda_{a}} = 0,71$$
(4.53), (4.54), (4.55)

Bei unbekanntem Diffusionskoeffizient kann nach [4.35] Sc = 0,7 gewählt werden.

Der maximale Durchmesser des Tropfens d_{max} , der aus einer Freisetzungshöhe h_s ausregnen kann, wird wie folgt ermittelt:

$$d_{max} = 2 \left[\frac{9\rho_{a}v_{a}k_{B}h_{s}}{2\rho_{l,f}g} \left(1 - 0,204Sc^{1/3} \left(\frac{\rho_{l,f}g}{18\rho_{a}v_{a}^{2}} \right)^{1/2} \left(\frac{72\rho_{a}v_{a}k_{B}h_{s}}{\rho_{l,f}g} \right)^{3/8} \right)^{-1} \right]^{1/4}$$
(4.56)

gültig für Re_d (basierend auf d_{max}) < 4.

Für $d_d > d_{max}$ oder $Re_d > 4$ müssen die Masse, die ausregnet und in der Luft verbleibt, berechnet werden. Die Verringerung des Tropfendurchmessers infolge der Verdunstung und die Position (Höhe über dem Boden) werden dann wie folgt berechnet:

$$\frac{d}{dt}d_{d} = -\frac{k_{B}}{d_{d}}\left(1+0,28\,\mathrm{Re}_{d}^{1/2}\,\mathrm{Sc}^{1/3}\right)$$
(4.57)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\mathbf{h} = -\mathbf{u}_{\mathrm{d}} \tag{4.58}$$

Re_d und u_d sind hierbei abhängig von dem Tropfendurchmesser.

Es wird von einer horizontalen Freisetzung ausgegangen und angenommen, dass am Anfang keine Geschwindigkeitskomponente in vertikaler Richtung vorhanden ist.

Die Integration wird solange durchgeführt bis der Tropfen den Boden trifft, d.h. h(t₀)=0 oder der Tropfendurchmesser einen minimalen Grenzwert (z.B. 1*10⁻⁵ m) unterschreitet.

Der aus dem Freistrahl verdunstende Anteil berechnet sich wie folgt: 2)

1

.

$$\dot{m}_{V,Luft} = x_{f} \cdot \dot{m}_{e} + (1 - x_{f}) \left(1 - \left(\frac{d_{0}}{d_{d}} \right)^{3} \right) \dot{m}_{e}$$
(4.59)

Der erste Term bezieht sich auf den am Anfang vorhandenen Anteil des Dampfes im Freistrahl, der zweite Term auf den verdunstenden Anteil während der Tropfen auf den Boden fällt. Das Letztere führt zu einer Abkühlung der sich in die Aerosolwolke einmischenden Luft. Dies wird im nächsten Schritt beschrieben. Hierfür ist eine Neudefinition des Masseanteils an Dampf xf und der geometrischen Abmessungen des Freistrahls Af und rf nach der Spontanverdampfung für den Fall, dass ein Ausregnen stattfindet, notwendig:

$$x_{f,rainout} = \frac{x_f}{x_f + (1 - x_f) \left(1 - \left(\frac{d_0}{d_d}\right)^3 \right)}$$
(4.60)

$$A_{f,rainout} = A_f \frac{m_{v,Luft}}{\dot{m}_e}$$
(4.61)

$$\mathbf{r}_{\mathrm{f,rainout}} = \sqrt{\frac{\mathbf{A}_{\mathrm{f,rainout}}}{\pi}} \tag{4.62}$$

Für den Fall eines Rainout sind im folgenden Abschnitt die Größen xe, Af und rf durch die Größen x_{f,rainout}, A_{f,rainout} und r_{f,rainout} zu ersetzen.

<u>4. Schritt</u>: Berechnung der Bedingungen in dem Freistrahl nach der Verdunstung aller luftgetragenen Tropfen

In diesem Schritt wird eine Vorgehensweise zur Berechnung der Abkühlung des Freistrahls nachdem alle luftgetragenen Tropfen verdunstet sind vorgestellt. Damit kann eine Ausbreitungsmodellierung unter Anwendung von Ausbreitungsmodellen, die keine Zweiphasen-Effekte in der Wolke unterstützen, durchgeführt werden.

Nach dieser Vorgehensweise gilt für die Änderung der Enthalpie infolge Temperaturänderung, Verdampfung und Verdunstung der Aerosole oder die Kondensation der Umgebungsfeuchtigkeit:

$$\Delta(\mathbf{H}_{\text{chemical}}) + \Delta(\mathbf{H}_{\text{Luft,trocken}}) + \Delta(\mathbf{H}_{\text{Wasserdampf}}) = 0$$
(4.63)

Für die einzelnen Terme werden folgenden Beziehungen angegeben:

$$\Delta(\mathbf{H}_{\text{chemical}}) = c_{j} \mu_{s} \left(-(1 - x_{e}) \mathbf{h}_{v,f} + \mathbf{H}_{f} - \mathbf{H}_{j} \right)$$
(4.64)

$$\Delta(\mathbf{H}_{\text{Luft,trocken}}) = \frac{1 - c_{j}}{1 + c_{wv}} c_{p} \boldsymbol{\mu}_{a} (\mathbf{T}_{a} - \mathbf{T}_{j})$$
(4.65)

$$\Delta(\mathbf{H}_{\text{Wasserdampf}}) = \frac{1 - c_{j}}{1 + c_{wv}} \mu_{w} \left(c_{p,w} (\mathbf{T}_{a} - \mathbf{T}_{j}) \right)$$
(4.66)

mit dem Molanteil von Dampf im Freistrahl $c_j = \frac{p_v(T_j)}{p_a}$ (4.67)

Für den Masseanteil von Wasserdampf (W) in trockener Luft (a) gilt:

$$\frac{m_{\rm W}}{m_{\rm da}} = \frac{RH_{\rm a}p_{\rm v,W}(T_{\rm a})}{(R/\mu_{\rm W})T_{\rm a}\rho_{\rm a}}$$
(4.68)

Für den verbleibenden Anteil Dampf gilt:

$$\frac{m_{Wv}}{m_{da}} = \frac{T_a p_{v,W}(T_j)}{RH_a T_j p_{v,W}(T_a)}$$
(4.69)

Für den Molanteil von Wasserdampf zu trockener Luft bei Umgebungs- und Freistrahltemperatur gilt:

$$c_{\rm W} = \frac{m_{\rm W}\mu_{\rm a}}{m_{\rm da}\mu_{\rm W}} , \quad c_{\rm wv} = \frac{m_{\rm Wv}\mu_{\rm a}}{m_{\rm da}\mu_{\rm W}}$$
(4.70), (4.71)

mit $\mu_a = 28,96 \ 10^{-3} \ kg/mol$, $\mu_W = 18,02 \ 10^{-3} \ kg/mol$)

Für die Dichte ρ_j des Freistrahls werden folgende Beziehungen angegeben:

$$\rho_{j} = \frac{1 - c_{j,1}}{\frac{1}{\rho_{j,d}} + \frac{c_{j,1}}{\rho_{W,1}(T_{j})}}$$
(4.72)

$$c_{jl} = \frac{(1 - c_j)}{(1 + c_{Wv})} (c_W - c_{Wv}) \frac{\mu_W}{u_{jd}}$$
(4.73)

$$\rho_{j,d} = \frac{p_a - \mu_{jd}}{R T_j}$$
(4.74)

$$\mu_{jd} = c_{j}\mu_{s} + \frac{(1-c_{j})}{(1+c_{wv})}(\mu_{a} + c_{wv}\mu_{W})$$
(4.75)

Für jedes anzuwendende Freistrahl- oder Ausbreitungsmodell wird eine einphasige Quelle mit folgender Geschwindigkeit u_j definiert:

$$u_{j} = \frac{u_{f}}{1 + \frac{(1 - c_{j})}{c_{j}(T_{j})} \frac{\mu_{a}}{\mu_{s}}}$$
(4.76)

Die Querschnittsfläche A_j und der Radius r_j des Freistrahls nach der Verdunstung der Tropfen werden wie folgt ermittelt:

$$A_{j} = \frac{\rho_{f} u_{f}}{\rho_{j} u_{j}} A_{f}, \quad r_{j} = \sqrt{\frac{A_{j}}{\pi}}$$
(4.77), (4.78)

Die Formelzeichen bedeuten

ρ _e [kg/m ³]	Dichte am Freisetzungsquerschnitt
u _e [m/s]	Geschwindigkeit am Freisetzungsquerschnitt
A _e [m ²]	Freisetzungsquerschnitt
ρ _f [kg/m ³]	Dichte nach der Spontanverdampfung
u _f [m/s]	Geschwindigkeit des Freistrahls nach der Spontanverdampfung
A _f [m ²]	Querschnittsfläche des Freistrahls nach der Spontanverdampfung
H _e [J/kg]	Spezifische Enthalpie bei Austrittsbedingungen
H _f [J/kg]	Spezifische Enthalpie bei Siedetemperatur
p _e [N/m ²]	Druck am Austritt
$p_a[N/m^2]$	Umgebungsdruck
p _v [N/m ²]	Sättigungsdampfdruck
Т _в [K]	Siedetemperatur
x _e [kg/kg]	Masseanteil an Dampf
ρ _{l,e} [kg/m ³]	Dichte der Flüssigkeit
ρ _{l,e} [kg/m ³]	Dichte des Dampfes
^m [kg/s]	Massenstrom am Freisetzungsquerschnitt
x _f [kg/kg]	Masseanteil an Dampf nach der Spontanverdampfung
H _v [J/kg]	spezifische Enthalpie des Dampfes
h _v [J/kg]	spezifische Verdampfungsenthalpie
A _f [m ²]	Querschnittsfläche des Freistrahls
r _f [m]	Radius des Freistrahls oder der Wolke nach der Spontanverdampfung
d _d [m]	Durchmesser des Tropfens
C _{ds} [-9	Konstante (= 15 im Yellow Book)
Re [-]	Reynolds-Zahl
We [-]	Weber-Zahl
σ _s [N/m]	Oberflächenspannung
ρ _a [kg/m ³]	Dichte Umgebungsluft
v ₁ [m²/s]	kinematische Viskosität der Flüssigkeit
u _d [m/s]	Tropfengeschwindigkeit im freien Fall
ρ _{l,f} [kg/m ³]	Dichte des Tropfens bei Siedetemperatur
g [m/s²]	Erdbeschleunigung
v _a [m²/s]	kinematische Viskosität der Luft
k _B [m²/s]	Verdampfungskoeffizient des Tropfens
M [kg/mol]	molare Masse des freigesetzten Stoffes

D [m²/s]	Diffusionskoeffizient
R [J/(mol·K)]	universelle Gaskonstante(= 8,314 J/(mol·K))
T _a [K]	Umgebungstemperatur
T _d [K]	Temperatur des Tropfens
h _d [J/kg]	spezifische Verdampfungsenthalpie des Tropfens
Sc [-9	Schmidt-Zahl
λ [J/m₊s₊K]	Wärmeleitfähigkeit
Pr [-]	Prandtl-Zahl
d _{max} [m]	maximale Durchmesser des Tropfens
h _s [m]	Freisetzungshöhe
h [m]	Höhe des Tropfens über dem Boden
t [s]	Zeit
t ₀ [s]	Zeit bis der Tropfen den Boden erreicht
m _{v.Luft} [kg/s]	aus dem Freistrahl verdunstender Massenstrom
d ₀ [m]	Durchmesser des Tropfens auf Bodenniveau
C _j [-]	Molanteil von Dampf im Freistrahl
μ _s [kg/mol]	Molmasse des freigesetzten Stoffes
H _j	spezifische Enthalpie bei Freistrahltemperatur
c [-]	Molanteil
c _p [J(kg₊K]	spezifische Wärmekapazität
Т _ј [К]	Temperatur des Freistrahls
A _j [m ²]	Querschnittsfläche des Freistrahls nach der
	Verdampfung/Verdunstung der Tropfen
r _j [m]	Radius des Freistrahls nach der Verdampfung/Verdunstung der
	Tropfen

4.4.2.2 Modell von Papadourakis, Caram und Barner

In dem Modell von Papadourakis et al. [4.33] werden auf Basis der Lösung der Differentialgleichungen für die Massen-, Energie- und Impulsbilanz die Flugbahn, die Abkühlung und die Verdunstung eines kugelförmigen Tropfens berechnet. Für die Verdunstung wird eine obere und untere Grenze ermittelt. Für die Ermittlung der oberen Grenze wird angenommen, dass sich der Tropfen in Luft mit einer Relativgeschwindigkeit zur Windgeschwindigkeit bewegt. Dies wird über das *Droplet Evaporation Model* beschrieben. Für die Bestimmung der unteren Grenze wird angenommen, dass der Tropfen mit der

Gasphase mitgetragen wird und keine Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und Gasphase vorliegt. Dieses wird im *Jet-Model* abgebildet. Im Weiteren wird nur das *Droplet Evaporation Model* beschrieben, da dieses die konservative Abschätzung des gasförmigen Anteils des Sprays ergibt.

Das in [4.33] entwickelte Modell für den Tropfen kann für ruhende oder sich mit einer Relativgeschwindigkeit bewegende Tropfen angewendet werden. Das den Tropfen umgebende Medium kann entweder die Umgebungsluft (für den Fall eines verdampfenden Tropfens, das sich in der Umgebungsluft bewegt) oder ein Gemisch aus Luft und Dampf (für den Fall eines Tropfens, das in einem zweiphasigen Freistrahl verdampft) sein. Für beide Fälle wird das umgebende Medium mit "Gas" bezeichnet.

Massenbilanz:

Die Massenbilanz für den Tropfen lautet nach diesem Modell wie folgt:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{m}_{\mathrm{d}}}{\mathrm{d}\mathbf{t}} = -\pi \cdot \mathrm{d}^{2} \cdot \frac{\mathrm{Sh} \cdot \mathrm{D}}{\mathrm{d}} \cdot \frac{\tilde{\mathrm{M}} \cdot \mathrm{p}_{\mathrm{U}}}{\mathrm{R} \cdot \mathrm{T}_{\mathrm{g}}} \cdot \ln\left(\frac{1 - \mathrm{y}_{\mathrm{g}}}{1 - \mathrm{y}_{\mathrm{s}}}\right)$$
(4.79)

Für y_s wird angenommen, dass dies die Gleichgewichtskonzentration bei der Temperatur des Tropfens ist. Wenn der Tropfen in reiner Luft verdunstet, ist $y_g = 0$.

Für die Sherwood-Zahl Sh von verdunstenden Tropfen gibt es verschiedene empirische Beziehungen. Die allgemeine Form der meisten Beziehungen lautet:

$$Sh = a + b \cdot Re^{1/2} Sc^{1/3}$$
 (4.80)

$$Re = \frac{du}{v_{Luft}}, Sc = \frac{v_{Luft}}{D}$$
(4.81), (4.82)

In diesem Modell werden die empirische Konstanten a = 2 und b = 0.6 gesetzt.

Energiebilanz:

Unter der Annahme, dass keine kinetische Energie in Wärme umgewandelt wird, ist die zeitliche Änderung der Enthalpie des Tropfens gleich der Wärmeverluste durch Konvektion, Verdunstung und Strahlung [4.33]. Unter Vernachlässigung der Strahlung folgt somit für die Energiebilanz des Tropfens:

$$\frac{dT_{d}}{dt} = \frac{\pi \cdot d \, \operatorname{Nu} \cdot \lambda \cdot (T_{g} - T_{d}) + \frac{dm_{d}}{dt} h_{vl}}{m_{d} \cdot c_{pl}}$$
(4.83)

Die Nusselt-Zahl Nu kann wegen der Analogie von Wärme- und Stoffübergang in der gleichen empirischen Form berechnet werden wie die Sherwood-Zahl Sh:

$$Nu = a + b \cdot Re^{1/2} Pr^{1/3}$$
(4.84)

$$\Pr = \frac{c_p \rho_a v_a}{\lambda_a} = 0,71$$
(4.85)

In diesem Modell werden die empirische Konstanten a = 2 und b = 0,6 gesetzt.

Impulsbilanz in horizontaler Richtung:

Die zeitliche Änderung des Impulses des Tropfens in horizontaler Richtung resultiert nach [4.21] aus dem Verlust von Masse durch Verdunstung und durch Widerstandskräfte. Für die Impulsbilanz des Tropfens in x-Richtung folgt damit:

$$\frac{\mathbf{u}_{\mathrm{x}}}{\mathrm{dt}} = \frac{-\mathbf{C}_{\mathrm{D}} \cdot \left(\frac{\pi \mathrm{d}^{2}}{4}\right) \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot \boldsymbol{\rho}_{\mathrm{g}} \cdot \mathbf{u}_{\mathrm{x}} \cdot \mathbf{u}\right)}{\mathbf{m}_{\mathrm{d}}}$$
(4.86)

$$\mathbf{u} = \sqrt{\mathbf{u}_{\mathrm{x}}^2 + \mathbf{u}_{\mathrm{y}}^2} \tag{4.87}$$

$$C_{\rm D} = \frac{24}{\text{Re}} \cdot (1 + 0.15 \cdot \text{Re}^{0.687}) \quad \text{für Re} < 989$$
 (4.88)

$$C_D = 0,44$$
 für Re ≥ 989 (4.89)

Impulsbilanz in vertikaler Richtung:

Die zeitliche Änderung des Impulses des Tropfens in vertikaler Richtung ergibt sich nach [4.219 aus dem Verlust von Masse durch Verdunstung und dem Verlust durch Kräfte, die auf den Tropfen wirken (Auftrieb, Gewicht und Widerstand). Für die Impulsbilanz des Tropfens in y-Richtung folgt damit:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{u}_{y}}{\mathrm{d}t} = \frac{g \cdot \left(\frac{\rho_{g}}{\rho_{1}} - 1\right) \cdot \mathbf{m}_{d} - \mathbf{C}_{\mathrm{D}} \cdot \left(\frac{\pi \mathrm{d}^{2}}{4}\right) \cdot \left[\frac{1}{2} \cdot \rho_{g} \cdot \mathbf{u}_{y} \cdot \mathbf{u}\right]}{\mathbf{m}_{d}}$$
(4.90)

Der Widerstandsbeiwert C_D und die Geschwindigkeit zwischen dem Tropfen und der Gasphase werden nach den Gleichungen für die Impulsbilanz in horizontaler Richtung berechnet.

Flugbahn des Tropfens:

Die Gleichungen für die Flugbahn des Tropfens werden wie folgt angegeben: $\frac{dx}{dt} = u_x + u_w$ (4.91)

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = u_{y} \tag{4.92}$$

Es wird angenommen, dass der Wind in horizontaler Richtung weht.

Berechnung des Tropfendurchmessers:

Die Tropfengröße wird aus einer kritischen Weber-Zahl von 12 berechnet. Es wird von einer einheitlichen Tropfengröße ausgegangen und angenommen, dass die Konzentration, Geschwindigkeit und Temperatur über dem Radius des Freistrahls konstant sind.

$$We_{Krit} = 12 = \frac{\rho_{Luft} u_{dif}^2 d}{\sigma}$$
(4.93)

 u_{dif} ist hierbei die Geschwindigkeitsdifferenz zwischen dem Strahl und der Windgeschwindigkeit. In [4.33] ist nicht angegeben, wie die Strahlgeschwindigkeit u_f zu berechnen ist. Hier kann im Prinzip auf den Ansatz im Yellow Book nach Gleichung (4.42) zurückgegriffen werden.

$$\mathbf{u}_{\rm dif} = \mathbf{u}_{\rm f} - \mathbf{u}_{\rm w} \tag{4.94}$$

$$u_{f} = \frac{(p_{e} - p_{U})A_{e}}{\dot{m}_{e}} + \frac{\dot{m}_{e}}{\rho_{e}A_{e}} ; \qquad p_{e} \ge p_{u}$$
$$u_{f} = \frac{\dot{m}_{e}}{\rho_{e}A_{e}} ; \qquad p_{e} < p_{u}$$

Die Formelzeichen bedeuten

m _d [kg]	Masse des Tropfens
d [m]	Durchmesser des Tropfens
D [m²/s]	Diffusionskoeffizient
p _u [Pa]	Umgebungsdruck
$ ilde{M}$ [kg/mol]	molare Masse
R [J/(mol·K)]	universelle Gaskonstante = 8,314
T _g [K]	Umgebungstemperatur
T _d [K]	Temperatur des Tropfens
y _g [mol/mol]	Konzentration des Stoffes im Gas
y _s [mol/mol]	Konzentration des Stoffes an der Oberfläche des Tropfens
λ [W/(m·K)]	Wärmeleitfähigkeit des Dampfes
h _{vl} [J/kg]	Verdampfungsenthalpie
Re [-]	Reynolds-Zahl
Sc [-]	Schmidt-Zahl
Nu [-]	Nusselt-Zahl
c _{pv} [J/(kg₊K)	spezifische Wärmekapazität des Dampfes
c _{pl} [J/(kg₊K)	spezifische Wärmekapazität der Flüssigkeit
T _r [K]	Referenztemperatur
α [J/(m²₊s₊K)]	Wärmeübergangskoeffizient
Pr [-]	Prandtl-Zahl
Sc [-]	Sherwood-Zahl
u [m/s]	Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und Gas
C _D [-]	Widerstandskoeffizient
ρ _g [kg/m ³]	Dichte des Gases
ρ _{g,f} [kg/m ³]	Dichte des Gases bei Siedetemperatur und Umgebungsdruck
ρ _l [kg/m ³]	Dichte der Flüssigkeit
ρ _{l,f} [kg/m ³]	Dichte der Flüssigkeit bei Siedetemperatur und
	Umgebungsdruck
x	x-Koordinate
У	y-Koordinate
u _w [m/s]	Windgeschwindigkeit
p _v [N/m ²]	Sättigungsdampfdruck

4.4.2.3 Release

Zur Abschätzung des Rainout-Anteils wird im Release-Modell [4.38] eine mittlere Tropfengröße, die sich während der Freisetzung bildet, ermittelt und ein minimaler Tropfendurchmesser bestimmt, der auf den Boden fällt (kritischer Durchmesser). Durch Integration der Tropfengrößenverteilung wird die Masse der Flüssigkeit über und unter dem kritischen Durchmesser ermittelt, um den Rainout-Anteil zu bestimmen.

Der mittlere Tropfendurchmesser dave wird über die Weberzahl We bestimmt:

$$We = \frac{\rho_v d_{ave} u_{rel}^2}{\sigma_1} \quad \text{mit We} = 10 \text{ bis } 14$$
(4.95)

Es wird angenommen, dass der Flüssigkeitsfreistrahl bei der Freisetzung aufgebrochen wird, entweder

- a) durch Widerstandskräfte zwischen Flüssigkeit und Umgebungsluft oder
- b) durch Expansion und Beschleunigung der Flüssigkeit, wenn die Flüssigkeit nach Freisetzung spontan verdampft.

Für Fall a) wird die relative Geschwindigkeit u_{rel} wie folgt bestimmt:

$$\mathbf{u}_{\rm rel} = \mathbf{u}_{\rm d} - \mathbf{u}_{\rm Luft} \tag{4.96}$$

Obige Gleichung geht, davon aus, dass die Vektoren der Flüssigkeit und des Windes in gleicher Richtung zeigen. Ist das nicht der Fall, sollte die Komponente des Flüssigkeitsvektors in horizontaler Richtung gewählt werden.

Für Fall b) wird die relative Geschwindigkeit wie folgt bestimmt:

$$u_{\rm rel} = \left(u_{\rm exp}^2 + u_{\rm acc}^2\right) \tag{4.97}$$

Angaben zur Berechnung der Expansionsgeschwindigkeit und der Beschleunigungsgeschwindigkeit sind in [4.38] nicht enthalten. Für die Berechnung des mittleren Tropfendurchmessers wird die kleinere der Geschwindigkeiten aus Gleichung (4.96) oder (4.97) eingesetzt. Um abzuschätzen, welche Tropfen ausregnen und welche Tropfen in der Wolke verbleiben, wird eine kritische Geschwindigkeit u_{crit} bestimmt:

$$u_{crit} = u_{rel} \cdot \tan(\beta) \quad \text{mit } \beta = 2,385 \tag{4.98}$$

Seite 99

Für die Ermittlung des kritischen Durchmessers werden folgende Gleichungen iterativ gelöst:

$$\frac{\pi}{6} d_{ave} \left(\rho_{1} - \rho_{v} \right) g = \frac{C_{D} \rho_{v} u_{crit}^{2}}{2}$$
(4.99)

$$C_{\rm D} = \frac{24}{\rm Re} + \frac{6}{(1+\sqrt{\rm Re})} + 0.4 \tag{4.100}$$

$$Re = \frac{d_{ave} u_{crit} \rho_v}{\mu_v}$$
(4.101)

Für die Ermittlung der Tropfengröße wird von einer logarithmischen Normalverteilung ausgegangen:

$$p(m) = \frac{\frac{\pi}{6}\rho_1}{\sqrt{2\pi}\ln(\sigma_g)} d^3 \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln\left(\frac{d}{d_{ave}}\right)}{\ln(\sigma_g)}\right)^2\right\}$$
(4.102)

Die Standardabweichung σ_g wird zwischen 1,4 und 2,0 angenommen. Für alle Berechnungen mit Release wurde nach [4.1] σ_g = 1,8 gewählt; lanello et al. [4.39] empfehlen σ_g = 1,4.

Der Rainout-Anteil wird dann wie folgt berechnet:

$$RO = 1 - \frac{\int_{0}^{d_{erit}} d^{3} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln\left(\frac{d}{d_{ave}}\right)}{\ln\left(\sigma_{g}\right)}\right)^{2}\right\} d \cdot \ln(d)}{\int_{0}^{\infty} d^{3} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln\left(\frac{d}{d_{ave}}\right)}{\ln\left(\sigma_{g}\right)}\right)^{2}\right\} d \cdot \ln(d)}$$

$$(4.103)$$

In [4.38] wird zusätzlich ein Modell zur Berücksichtigung der Verdunstung von Tropfen vorgestellt, während die Tropfen auf den Boden fallen. Es wird davon ausgegangen, dass die Verdampfung der Tropfen eine Funktion der Tropfengröße, des Partialdrucks des Fluids im Tropfen und der Zeit t des Tropfens in der Luft ist. Bei der Flugbahn des Tropfens wird für

das Modell die vertikale Geschwindigkeitskomponente berücksichtigt. Folgende Gleichungen werden zugrunde gelegt:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{u}_{y}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{a}_{y} - \mathbf{g}$$

$$\mathbf{u}_{y} = \mathbf{u}_{y} \sin(\alpha)$$

$$(4.104)$$

$$u_{y} = u \cdot \sin(\alpha) \tag{4.105}$$

$$a_{y} = \frac{6C_{D}(u_{y} - u_{Luft,y})}{8d\rho_{1}}$$
(4.106)

$$C_{\rm D} = \frac{24}{\rm Re} + \frac{6}{(1+\sqrt{\rm Re})} + 0.4 \tag{4.107}$$

Für eine nach unten gerichtete vertikale Freisetzung gilt für den Freisetzungswinkel α = -90°, für eine horizontale Freisetzung α = 0. Für die vertikale Geschwindigkeitskomponente u_{ay} des umgebenden Dampfs wird ein kleiner Wert bzw. "0" angenommen. Die Flugzeit wird durch Integration der Gleichung (4.104) ermittelt.

Mit den obigen Gleichungen wird das Tropfen-Verdunstungsmodell für den Rainout-Anteil RO_E beschrieben. Das Modell berücksichtigt nur die Flugzeit t_f des Tropfens mit d_{ave} bis er den Boden erreicht und den Dampfdruck des Fluids vor der Freisetzung (p_{vp} bei Lagertemperatur). Das Modell lautet wie folgt:

$$RO_{E} = 0, 6 \cdot F_{1} \cdot F_{2} \cdot RO$$
(4.108)

$$\mathbf{F}_{1} = \left(\frac{\mathbf{t}_{\mathrm{f}}}{\mathbf{t}_{4}}\right)^{\mathrm{n}} \tag{4.109}$$

$$F_2 = \left(\frac{p_{vp}}{p_U}\right)^n$$
, $F_2 \le 1,0$ (4.110)

Der Faktor F_1 schätzt die zusätzliche Verdampfung des Tropfens für andere Freisetzungshöhen als 4 ft ab. Der Faktor F_2 berücksichtigt die Freisetzung unterkühlter Flüssigkeiten, bei denen eine geringere Verdampfung erwartet wird.

Die Formelzeichen bedeuten

We [-]	Weber-Zahl
ρ _v [kg/m ³]	Dichte des Dampfes
d _{ave} [m]	mittlerer Tropfendurchmesser
u _{rel} [m/s]	relative Geschwindigkeit
σ _I [N/m]	Oberflächenspannung der Flüssigkeit
u _d [m/s]	Tropfengeschwindigkeit
u _{Luft} [m/s]	Luftgeschwindigkeit
u _{fsh} [m/s]	relative Geschwindigkeit aufgrund der Spontanverdampfung der
	Flüssigkeit
u _{exp} [m/s]	Expansionsgeschwindigkeit
u _{acc} [m/s]	Beschleunigungsgeschwindigkeit
u _{crit} [m/s]	kritische Absetzgeschwindigkeit
β [°]	Ausbreitungswinkel des Freisetzungsstroms
ρ _ι [kg/m³]	Dichte der Flüssigkeit
g [m/s²]	Erdbeschleunigung
C _D [-]	Widerstandskoeffizient
Re [-]	Reynolds-Zahl
μ _v [Pa/s]	Viskosität des Dampfes
p(m) [-]	korrigierte logarithmische Normalverteilung
p(d) [-]	logarithmische Normalverteilung
m [kg]	Masse des Tropfens
σ _g [-]	geometrische Ausbreitung der logarithmischen Normalverteilung
d [m]	Durchmesser
RO [%]	Rainout-Anteil
u _y [m/s]	Komponente der Geschwindigkeit in vertikaler Richtung
a _y [m/s ²]	vertikale Widerstandkraft auf den Tropfen
α [°]	Freisetzungswinkel
u _{Luft,y} [m/s]	vertikale Komponente der Windgeschwindigkeit
u _y *	vertikale Geschwindigkeit der freigesetzten Flüssigkeit am Anfang
t [s]	Zeit
RO _E [%]	Rainout-Anteil mit Verdampfung
RO _R [%]	Rainout-Anteil ohne Verdampfung
F ₁ [-]	Faktor zur Bestimmung der Flugzeit des Flüssigkeitstropfens
F ₂ [-]	Faktor zur Berücksichtigung der Freisetzung unterkühlter

	Flüssigkeiten
t ₄ [s]	Zeit bis ein aus 4 ft freigesetzter Tropfen den Boden erreicht
p _{vp} [Pa]	Dampfdruck bei Lagertemperatur
р _∪ [Ра]	Umgebungsdruck

4.4.2.4 Modell von Al Rabadi et al.

•

In [4.40] und [4.41] wird ein Modell für die Vorhersage der axialen und radialen Tropfengeschwindigkeit und des Rainout-Anteils in einem horizontalen Zweiphasen-Freistrahl vorgestellt. Das Modell wurde an Messwerte aus experimentellen Untersuchungen am Institut für Strömungsmechanik der TU Hamburg-Harburg mit einem Zweiphasengemisch aus Luft und Wasser sowie Luft und Glukosesirup als viskose flüssige Phase angepasst.

Nach diesem Modell wird die Tropfengeschwindigkeit auf der Freistrahlachse wie folgt ermittelt:

$$\mathbf{u}_{d,\text{centerline}} = \mathbf{u}_{\text{expansion,air}} \left[\left(1 + \left(1 - \exp\left(-A\sqrt{\frac{s}{d_{\text{Nozzle}}} - \frac{s_{\text{vitual}}^2}{d_{\text{Nozzle}}^2}} \right) \right) \right) \cdot \exp\left(-0.158 \right) \sqrt{\frac{s}{d_{\text{Nozzle}}} - \frac{s_{\text{vitual}}^2}{d_{\text{Nozzle}}^2}} \right]$$
(4.111)

$$u_{\text{expansion,air}} = u_{\text{Nozzle}} + \frac{(p_{\text{outlet}} - p_{\text{U}}) \cdot A_{\text{Nozzle}}}{\dot{m}_{\text{total(Nozzle)}}}$$
(4.112)

$$u_{\text{Nozzle}} = \frac{m_{\text{total}(\text{Nozzle})}}{\rho_{\text{Nozzle}} \cdot A_{\text{Nozzle}}}$$
(4.113)

$$A = \frac{22,5}{Re_{Nozzle}} \cdot \frac{\eta_{air}(p_U)}{\eta_{liq}} \cdot \sqrt{\frac{\rho_{liq}}{\rho_{air}(p_U)}}$$
(4.114)

$$\frac{s_{\text{virtual}}}{d_{\text{Nozzle}}} = 1,92 \cdot \ln(\text{Re}_{\text{Nozzle}}) - 23.1$$

für Re_{Nozzle} > 0 (4.115)

$$Re_{Nozzle} = \frac{4 \dot{m}_{total(Nozzle)}}{\pi d_{Nozzle} \cdot \eta_{Nozzle}}$$
(4.116)

$$\eta_{\text{Nozzle}} = 1 / \left(\frac{\dot{x}_{\text{air}(\text{Nozzle})}}{\eta_{\text{air}}(p_{\text{U}})} + \frac{1 - \dot{x}_{\text{air}(\text{Nozzle})}}{\eta_{\text{liq}}} \right)$$
(4.131)
$$\dot{x}_{air(Nozzle)} = \frac{\dot{m}_{air(Nozzle)}}{\dot{m}_{total(Nozzle)}} > 0.$$
(4.132)

Die mittlere radiale Tropfengeschwindigkeit wird wie folgt berechnet:

$$\frac{u_{d}(s,r)}{u_{d,centerline}} = \exp\left(-0,693\frac{r}{C_{Entrainment}(s)\cdot(s-s_{virtual})}\right)$$
(4.117)

$$C_{\text{Entrainment}}(s) = 0,11 - \frac{0,02}{1 - \dot{x}_{air(Nozzle)}} \sqrt{\frac{\rho_{air}(p_{U})}{\rho_{jet,hom}(s)}} \quad 0 < \dot{x}_{air(Nozzle)} < 1$$

$$C_{\text{Entrainment}}(s) = 0,11 \qquad \dot{x}_{air(Nozzle)} = 0 \quad (4.118), (4.119)$$

$$\rho_{\text{jet,hom}}(s) = 1 / \left(\frac{\dot{x}_{\text{air}}(s)}{\rho_{\text{air}}(p_{\text{U}})} + \frac{1 - \dot{x}_{\text{air}}(s)}{\rho_{\text{liq}}} \right)$$
(4.120)

$$\dot{x}_{air}(s) = \frac{\dot{m}_{air} + \dot{m}_{Entrainment}(s)}{\dot{m}_{total}(s)}$$
(4.121)

Der Rainout-Anteil wird über folgende Beziehung abgeschätzt:

$$x_{R,cum|s/dNozzle} = \frac{\arctan(u(s,r)/u_{d,centerline})}{\sum \arctan(u(s,r)/u_{d,centerline})|s/d_{Nozzle}}$$
bzw. (4.122)

$$x_{R,cum|s/dNozzle} = \frac{\dot{m}_{liq(Rainout)}}{\sum \dot{m}_{liq(Rainout)|s/d_{Nozzle}}}$$
(4.123)

Nach [4.40] liefert das Modell genaue Vorhersagen der experimentellen Ergebnisse. Nach [4.41] sind die Messungen zur Validierung der Untermodelle fast ausschließlich mit Gemischen aus Luft und Wasser durchgeführt worden. Daher seien die Ergebnisse nicht auf andere Stoffe, die in der industriellen Praxis eingesetzt werden, verlässlich extrapolierbar.

Die Formelzeichen bedeuten

u _{d,centerline} [m/s]	mittlereTropfengeschwindigkeit auf der Freistrahlachse
u _{expansion,air} [m/s]	mittlereTropfengeschwindigkeit des aufgeweiteten Freistrahls
s [mm]	axialer Abstand
r [mm]	radialer Abstand
d _{Nozzle} [mm]	Düsendurchmesser
S _{virtual} [mm]	virtueller Ursprung des Freistrahls
u _{nozzle} [m/s]	Mittlere Geschwindigkeit des Freistrahls am Düsenaustritt
p _{outlet} [Pa]	Druck
р _∪ [Ра]	Umgebungsruck
A _{Nozzle} [m]	Düsenfläche
m _{total(Nozzle)} [kg/s]	Massenstrom
ρ _{Nozzle} [kg/m ³]	Dichte des Freistrahls
Re [-]	Reynolds-Zahl
η _{air} [m₊Pa₊s]	dynamische Viskosität der Luft
η _{liq} [m₊Pa₊s]	dynamische Viskosität der Flüssigkeit
ρ _{liq} [kg/m³]	Dichte der Flüssigkeit
ρ _{air} [kg/m³]	Dichte der Luft
u _d (s,r) [m/s]	Mittlere radiale Tropfengeschwindigkeit
C _{Entrainment} [-]	Entrainmentkoeffizient
ρ _{jet,hom} [kg/m ³]	Dichte der des Freistrahls
X _{R,cum} s/d _{Nozzle} [-]	Rainout-Anteil

4.5 Beispielrechnungen

Als Vergleichsdaten werden die CCPS-Experimente [4.2] für die Stoffe Chlor, Cyclohexan, Methylamin und Wasser herangezogen. Weiterhin werden die Daten aus den HSL-Experimenten [4.20] für Xylol im Rahmen des JIP-Projektes Phase IV und die Daten von Rohm and Haas [4.34] für Methylamin verwendet.

Als Eingabedaten für die Berechnungen werden die folgenden Größen aus den Experimenten verwendet:

- Druck und Temperatur der Flüssigkeit vor der Düse,
- Massenstrom,
- Umgebungstemperatur und Windgeschwindigkeit.

4.5.1 Einfache Korrelationen

In den folgenden Diagrammen sind mit Lautkaski 1 die Berechnungsergebnisse gemäß Gleichungen 4.30 und 4.31 und mit Lautkaski 2 die mit der Jacobs-Zahl nach Gleichung 4.32 dargestellt. Tickle gibt die Berechnungsergebnisse nach Kapitel 4.4.1.7 wieder. In den Abbildungen 4.9 bis 4.14 sind die CCPS-Experimente, in den Abbildungen 4.15 bis 4.16 die Daten aus den HSL-Experimenten und in der Abbildung 4.17 die Daten von Rohm and Haas als Vergleichsdaten herangezogen.

Der Vergleich der Berechnungsergebnisse zu den Messungen des CCPS ergibt mit Ausnahme von Wasser für die Varianten des Modells von Lautkaski die besten Übereinstimmungen, wobei das Modell von Tickle den Verlauf der Messergebnisse am besten wiedergibt. Die Modelle von DeVaull-King und Fauske ergeben geringe Rainout-Anteile und damit große Gasphasenanteile für die Ausbreitungsberechnung. Die mit dem Modell von Kletz berechneten Rainout-Anteile sind im Vergleich zu den Experimenten deutlich zu hoch. Die untersuchten Modelle können die Experimente mit Wasser nicht zufriedenstellend wiedergeben.



Abb. 4.9: Chlor, Düsendurchmesser: 6,35 mm



Abb. 4.10: Cylohexan, Düsendurchmesser: 6,35 mm



Abb. 4.11: Methylamin, Düsendurchmesser: 6,35 mm





Abb. 4.12: Wasser, Düsendurchmesser: 3,2 mm



Abb. 4.13: Wasser, Düsendurchmesser: 6,35 mm

Exp.



 DeVaull-King — == Fauske •••••• Kletz -•-•• Lautkaski 2 -•••• Lautkaski 1 ••• Tickle

Abb. 4.14: CFC-11, Düsendurchmesser: 6,35 mm

In den Experimenten des HSL wurde Xylol aus einem Düsendurchmesser von 2,5 mm bei unterschiedlichen Drücken und bei gleicher Temperatur freigesetzt. Wie aus der Abbildung 4.15 zu erkennen ist, kann der Effekt des zunehmenden Druckes von allen Modellen nur unbefriedigend berücksichtigt werden.

Aus Abbildung 4.16 ist zu entnehmen, dass die Varianten des Lautkaski Modells und des Modells von Tickle bei stark unterkühlten Flüssigkeiten einen zu geringen Rainout-Anteil berechnen.

In der Abbildung 4.17 sind die Experimente von Rohm and Haas für Monomethylamin mit den Berechnungsergebnissen dargestellt. Im Vergleich zu den CCPS-Experimenten ist ein abweichender Kurvenverlauf festzustellen. Dementsprechend weichen auch die Berechnungsergebnisse ab, was bestätigt, dass die Modelle an die CCPS-Experimente angepasst worden sind.



Abb. 4.15: Xylol, Düsendurchmesser: 2,5 mm, Temperatur: 11 °C



Abb. 4.16: Xylol, Düsendurchmesser: 5 mm



Abb. 4.17: Methylamin, Düsendurchmesser: 6,35 mm

4.5.2 Modellgleichungen

Die wesentlichen Einflussgrößen auf den Rainout-Anteil sind

- der Behälterdruck,
- die Überhitzung der Flüssigkeit (Differenz zwischen Flüssigkeitstemperatur und Siedetemperatur),
- der Freisetzungsdurchmesser,
- der Tropfendurchmesser, abhängig von den o.g. Freisetzungsbedingungen,
- die Tropfengrößenverteilung sowie
- die Umgebungsbedingungen Temperatur und Windgeschwindigkeit.

Bei den einfachen Modellen werden nur wenige dieser Parameter berücksichtigt. Dies führt bei einer Auftragung über die Überhitzung zu relativ glatten Kurvenverläufen. Die Rainout-Modelle dagegen berücksichtigen alle wesentlichen Einflussparameter. Da in den folgenden Diagrammen Messungen bei gleichen Überhitzungen und z.B. unterschiedlichen Drücken dargestellt sind, ergeben sich daher keine glatten Kurvenverläufe.

In den folgenden Diagrammen sind mit Papadourakis 1 die Berechnungsergebnisse mit der Formulierung für die Geschwindigkeit gemäß Gleichung 4.94 dargestellt. Um den Einfluss des Ansatzes für den Tropfendurchmesser darzustellen, sind die als Papadourakis 2 bezeichneten Berechnungen durchgeführt worden, bei dem die Weber-Zahl nicht mit der Geschwindigkeitsdifferenz, sondern mit der Austrittsgeschwindigkeit gebildet worden ist. Mit diesem Ansatz ergibt sich eine geringere Größe des Tropfens.

Das Release-Modell ist in der vorliegenden Literatur nicht vollständig dargestellt und wurde daher nicht berücksichtigt. Das Modell von Al Rabadi et al. ist nur für Wasser und Glukosesirup validiert worden und daher für Auswirkungsbetrachtungen von industriellen Gefahrstoffen nicht geeignet.

In den Abbildungen 4.18 bis 4.23 sind die CCPS-Experimente für die Stoffe Chlor, Cyclohexan, Methylamin und Wasser, in den Abbildungen 4.24 und 4.25 die Daten aus den HSL-Experimenten für Xylol im Rahmen des JIP-Projektes Phase IV und in der Abbildung 4.26 die Daten von Rohm and Haas für Methylamin als Vergleichsdaten herangezogen.

Der Vergleich der Berechnungsergebnisse zu den Messungen ergibt, dass mit dem Modell vom Yellow-Book zu große Rainout-Anteile berechnet werden. Das Modell von Papadourakis ergibt für geringe Überhitzungen eine gute Übereinstimmung mit den Messungen. Bei größeren Überhitzungen wird ein zu kleiner Tropfendurchmesser berechnet und der Rainout-Anteil ist dann deutlich zu gering. Der Einfluss des Tropfendurchmessers auf die Berechnungen durch die geänderte Definition der Weberzahl ist deutlich sichtbar.



Abb. 4.18: Chlor, Düsendurchmesser: 6,35 mm



Abb. 4.19: Cylohexan, Düsendurchmesser: 6,35 mm



Abb. 4.20: Methylamin, Düsendurchmesser: 6,35 mm



Abb. 4.21: Wasser, Düsendurchmesser: 3,2 mm



Abb. 4.22: Wasser, Düsendurchmesser: 6,35 mm







Abb. 4.24: Xylol, Düsendurchmesser: 2,5 mm, Temperatur: 11 °C



Abb. 4.25: Xylol, Düsendurchmesser: 5 mm; Temperatur: 5°C bis 11 °C



Abb. 4.26: Methylamin, Rohm and Haas , Düsendurchmesser: 6,35 mm

4.6 Quellenverzeichnis

- [4.1] Review of RELEASE rainout model and the Center for Chemical Process Safety (CCPS) data prepared by AEA Technology plc (Susan A Ramsdale, Graham A Tickle) for the Health and Safety Executive, Contract Research Report 277/2000
- [4.2] Johnson, D. W., Woodward, J. L.: RELEASE: A Model with Data to Predict Aerosol Rainout in Accidental Releases, AIChE CCPS, 1999
- [4.3] Hervieu, E.; Veneau, T.: Experimental determination of the droplet size and velocity distributions at the exit of the bottom discharge pipe of a liquefied propane storage tank during a sudden blowdown, J. Loss Prev. Process Ind., Vol. 9, No. 6, pp. 413 425, 1996
- [4.4] Touil, Abdellah: Modelisation des jets diphasigues liquide vapeur et du "Rain-out"
 Dissertation, Ecole Nationale superieure des Mines Saint-Etienne 2005 n° d'ordre: 348 CD
- [4.5] Storvik, I.E., Yildiz, D., van Beek, J., Bonnet, P., Holdo, A.E., Calay, R. K.: FLIE Final Report, EC project number EVG1-2000-22022, Project home page: <u>http://www.gexcon.com/projects/flie</u>, GexCon AS, 2005
- [4.6] Yildiz, D., Rambaud, P., Vanbeeck, J. Buchlin, J.-M.: A Study on the Dynamics of a Flashing Jet, Final Contract Research Report, EAR0030/2002
- [4.7] Bonnet, P., Bricout, P., Jamois, D., Meunier, P.: Description of experimental large scale two-phase release jets- FLIE project, Report N° 41508, 2005
- [4.8] Holdø, A.E., Calay, R.K.: CFD Modelling of flashing jet dispersion, Fluid Mechanics Research Group, University Of Hertfordshire, UK, FLIE Report 2005
- [4.9] Bonnet, P., Lacome, J.-M.: Experimental study of accidental industrial LPG releases, 40. Annual loss prevention Symposium, Apr 2006, Orlando, United States, American Institute of Chemical Engineers (AIChE), New York, pp.453-462
- [4.10] Adrian, J.C.; Lerible, R.; Marchand, V.; Hocquet, J.; Bigot, J.-P.: Loss of containment: experimental aerosol rain-out assessment, Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries, 10th International Symposium; Stockholm 2001; pp. 1043 – 1049
- [4.11] Touil, A.; Bigot, J.-P.; Bonnet, P.; Lacome, J.-M.; Duplantier, S.: Rainout Prediction: Inital Droplet Diameter Experimental Determination, Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries, 11th International Symposium 2004, Praha, Full text 0923, pp. 3201 – 3209
- [4.12] Bigot, J.-P., Touil, A., Bonnet, P., Lacôme, J.-M.: Rain-out investigation; Initial droplet size measurement, Journal of Loss Prevention in the Process Industries 18 (2005), pp. 433-442

- [4.13] Brown, R.; York, J.L.: Sprays formed by Flashing Liquid Jets, AIChE Journal, Vol.8, pp. 149-153 (1962)
- [4.14] Cleary, V.; Bowen, P.; Witlox, H.: Flashing liquid jets and two-phase droplet dispersion I. Experiments for derivation of droplet atomisation correlations, Journal of Hazardous Materials 142 (2007) pp. 786 796
- [4.15] Witlox, H.; Harper, M.; Bowen, P.; Cleary, V.: Flashing liquid jets and two-phase droplet dispersion II. Comparison and validation of droplet size and rainout formulations, Journal of Hazardous Materials 142 (2007) pp. 797 809
- [4.16] Witlox, H.W.M.; Harper, M.; Oke, A.; Bowen, P.J.; Kay, P.; Jamois, D.; Proust, C.: Two-phase jet releases and droplet dispersion: Scaled and large-scale experiments, droplet-size correlation development and model validation, IChemE Symposium series No. 155, Hazards XXI (2009), pp. 615 – 623
- [4.17] Witlox, H.W.M.; Harper, M.; Oke, A.; Bowen, P.J.; Kay, P.: Sub-cooled and flashing liquid jets and droplet dispersion, I. Overview and model implementation/validation. J. Loss. Prev. Process Ind. Vol. 23, pp. 831 – 842 (2010)
- [4.18] Kay, P.; Bowen, P.J; Witlox, H.W.M.: Sub-cooled and flashing liquid jets and droplet dispersion, II. Scaled experiments and derivation of droplet size correlations, J. Loss. Prev. Process Ind. Vol. 23, pp. 849 856 (2010)
- [4.19] Witlox, H. W. M., Bowen, P.: Flashing liquid jets and two-phase dispersion A review, Contract 41003600 for HSE, Exxon-Mobil and ICI Eutech, HSE Books, Contract research report 403/2002, (2002)
- [4.20] Witlox, H. W. M., & Harper, M.: Two-phase jet releases, droplet dispersion and rainout, I. Overview and model validation. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 26(3), 453-461, (2013)
- [4.21] Bettis, R., Jagger, S., Witlox, H. W. M., & Harper, M.: Two-phase jet releases, droplet dispersion and rainout, II. Rainout experiments. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 26(3), 462-467, (2013)
- [4.22] LIS-Bericht Nr. 115: Ermittlung des Gefährdungspotentials ereignisbezogener Stofffreisetzungen unter dem Aspekt der Störfall-Verordnung, Landesanstalt für Immissionsschutz Nordrhein-Westfalen, (1994)
- [4.23] UBA-Forschungsbericht 204 09 228: Ermittlung und Berechnung von Störfallablaufszenarien nach Maßgabe der 3. Störfallverwaltungsvorschrift, Oktober 1999 (TÜV Anlagentechnik GmbH, TU Berlin)
- [4.24] VDI-Richtlinie 3783, Blatt 4, VDI-Verlag, Düsseldorf
- [4.25] Lees: Loss Prevention in the Process Industrie, Vol. 1, 1980, ISBN 0 408 10697 2

- [4.26] Kletz, T. A.: Unconfined vapour cloud explosions, AIChE Loss Prevention, vol. 11, p. 50, (1977)
- [4.27] Tickle, G.: Rainout Correlations for Continuous Releases, GTS/HSE/R003, Issue2, 11 March 2015
- [4.28] De Vaull, G.E.; King, J.A.: Similarity scaling of droplet evaporation and liquid rainout following the release of superheated flashing liquid to the environment 85th Annual Meeting, Air and Waste Management Assoc., Kansas (1992)
- [4.29] Fauske, H.K. Modeling Liquid Rainout from Superheated Jet Releases, FAI Process Safety News, Fall/Winter (1997)
- [4.30] Epstein, M., Fauske, H.K: The Three Mile Island Unit 2 Core Relocation Heat Transfer and Mechanism, Nuclear Technology, Vol. 87, Dec. 1989, pp. 1021 – 1035
- [4.31] Fauske, H. K., Epstein, M.: Source Term Considerations in Connection with Chemical Accidents and Vapour Cloud Modeling. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 1, 75 (1988)
- [4.32] Lautkaski, R.: Experimental correlations for the estimation of the rainout of flashing liquid releases – Revisited, J. Loss. Prev. Process Ind. Vol. 21, pp. 506 – 511 (2008)
- [4.33] Papadourakis, A.; Caram, H. S.; Barner, C. L.: Upper and lower bounds of droplet evaporation in two-phase jets, J. Loss Prev. Process Ind., Vol. 4, No. 2, pp. 93-101 (1991)
- [4.34] Lantzy, R.J., Myers, R.D., Pfenning, D.B., Millsap, S.B.: Atmospheric release tests of monomethylamine, J. Loss. Prev. Process Ind. Vol. 3, pp. 77 81 (1990)
- [4.35] CPR 14E; Methods for calculation of physical effects (Yellow Book); Committee for the Prevention of Disasters, The Hague (2005)
- [4.36] Appleton, P.R.: A study of axi-symmetric two-phase flashing jets, SRD report R303, U.K. A.E.A., Culcheth, Warrington, Cheshire, U.K. (1984)
- [4.37] Wheatley, C.J.: Discharge of liquid ammonia to moist atmospheres survey of experimental data and model for estimating initial conditions for dispersion calculations, SRD, Culcheth, Cheshire, U.K. (1987), Report SRD/HSE/R 410
- [4.38] Johnson, D. W.: RELEASE: An Aerosol Model with Potential, in International Conference and Workshop on Modelling Consequences of Accidental Releases of Hazardous Materials, San Francisco, California, Sept. 28-Oct 1, 1999 (1999)
- [4.39] Iannello, V., Wallis, G. B. and Rothe, P. H.: Technical Memorandum, Liquid Release, Final Report, CREARE, Inc., for CCPS, TM-1274 Rev. B, Project 7230, (1988)

- [4.40] Al Rabadi, S., Friedel, L., Surma, R.: Prediction of Droplet Velocities and Rain out in Horizontal Isothermal Free Jet Flows of Air and Viscous Liquid in Stagnant Ambient Air, Chem. Eng. Technol., 30, No. 11, 1546–1563 (2007)
- [4.41] Friedel, L., Al Rabadi, S.: FKZ 2476: Ausbreitung und Ausregnen im Fall von Zweiphasen-Freistrahlen aus Gas und Flüssigkeit in ruhender Luft, 18/01/2007 zweiphasen-freistrahlen.ps UID: sm1ak
- [4.42] Etling, D.: Theoretische Meteorologie. Springer Verlag Berlin Heidelberg New York (2002)

5 Verdunstung und Verdampfung aus einer Lache

Bei einer Freisetzung von Flüssigphase kommt es in Abhängigkeit von den Freisetzungsbedingungen und der Siedetemperatur der Flüssigkeit ggf. zu einer Flash-Verdampfung und zu einer Spraybildung mit der Verdunstung der Tröpfchen. Die restliche ausgeregnete Flüssigkeit bildet auf dem Boden eine Lache. Die Lache breitet sich solange aus, bis eine minimale Schichtdicke erreicht worden ist, oder Hindernisse die Lachengröße begrenzen.

Liegt die Siedetemperatur der Flüssigkeit oberhalb der Umgebungstemperatur, so wird sich die Flüssigkeit durch Abgabe von Wärme an die Umgebung abkühlen und es tritt ein Verdunstungsprozess ein. Liegt dagegen die Siedetemperatur der Flüssigkeit unterhalb der Umgebungstemperatur, so wird es durch die Wärmezufuhr, vor allem durch den Boden, über eine gewisse Zeit bei gleichbleibender Flüssigkeitstemperatur zu einer Verdampfung kommen. Durch die Abkühlung des Bodens verringert sich in kurzer Zeit aber die Wärmezufuhr so stark, dass es zu einer Unterkühlung der Flüssigkeit unterhalb der Siedetemperatur aufgrund der Verdunstung kommt.

Bei einer Verdunstung ist der Sättigungsdampfdruck über der Flüssigkeitsoberfläche geringer als der Umgebungsdruck und der daraus resultierende Massenstrom kleiner als bei einer Verdampfung. Die treibende Kraft für die Verdunstung ist im Wesentlichen das Dampfdruckgefälle zwischen dem Sättigungsdampfdruck an der Flüssigkeitsoberfläche und dem Partialdruck in der Umgebungsluft, während bei der Verdampfung nur die zugeführte Wärmemenge für den Massenstrom ausschlaggebend ist.

Die folgenden Ausführungen zur Berechnung des Verdampfungs- bzw. Verdunstungsmassenstroms beziehen sich auf einen Reinstoff. Bei Flüssigkeitsgemischen muss der Dampfdruck und die Gasphasenzusammensetzung mit thermodynamischen Modellen berechnet werden. Bei einer zeitabhängigen Berechnung müssen zusätzliche Massenbilanzen für die Komponenten gelöst werden, da sich die Zusammensetzung der Flüssigkeit zeitlich ändert. Da die einfachen thermodynamischen Modelle nicht für alle Gemische vorliegen und dann mittels Spezialprogrammen berechnet werden müssen, wird im Allgemeinen von der Verdampfung bzw. Verdunstung von Referenzstoffen des Gemisches ausgegangen.

5.1 Energiebilanz für die Lache

Aus der Energiebilanz zwischen zugeführter und abgeführter Wärme aus der Umgebung und der für die Verdunstung erforderlichen Energie ergibt sich die zeitliche Änderung der Flüssigkeitstemperatur, die natürlich auch eine Veränderung des Dampfdrucks und somit auch des verdunsteten Massenstroms zur Folge hat. In Abbildung 5.1 sind die relevanten Wärmeströme einer Energiebilanz um die Lache dargestellt.



Abb. 5.1: Energiebilanz um die Flüssigkeitslache

Aus der Energiebilanz um die Flüssigkeitslache lässt sich die folgende Differentialgleichung für die Temperaturänderung ableiten:

$$m c_{p,fl} \frac{d T_{fl}}{d t} = \dot{Q}_{B} + \dot{Q}_{U} + \dot{Q}_{Str} - \dot{Q}_{vu} - \dot{Q}_{va} + \dot{m}_{0} c_{p,0} (T_{0} - T_{fl})$$

$$p_{A} \ge p_{u} : \dot{Q}_{va} = \dot{m}_{va} h_{v} ; \dot{Q}_{vu} = 0$$

$$p_{A} < p_{u} : \dot{Q}_{va} = 0; \ \dot{Q}_{vu} = \dot{m}_{vu} h_{v}$$
(5.1)

Hierbei bedeuten:

m៉ ₀ [kg/s]	Massenstrom in die Lache
m _{va} [kg/s]	Verdampfungsmassenstrom
m _{vu} [kg/s]	Verdunstungsmassenstrom
m [kg]	Masse der Flüssigkeit in der Lache
T₀[K]	Temperatur der ausströmenden Flüssigkeit
T _{fl} [K]	Flüssigkeitstemperatur
c _p [J/(kg K)]	Wärmekapazität (Index 0: der austretenden Flüssigkeit)
h _v [J/kg]	Verdampfungsenthalpie
Q _B [W]	Wärmestrom aus dem Boden
Q̃ _∪ [W]	Wärmestrom durch Wärmeübertragung aus der Luft
Q _{Str} [W]	Wärmestrom durch Strahlung
Q _{vu} [W]	Wärmestrom infolge Verdunstung
Q _{va} [W]	Wärmestrom infolge Verdampfung
p _u [Pa]	Umgebungsdruck
p _A [Pa]	Dampfdruck der Flüssigkeit

5.1.1 Konvektiver Wärmestrom zwischen Luft und Flüssigkeit

Der Wärmestrom zwischen Luft und Flüssigkeitslache berechnet sich aus dem Wärmeübergangskoeffizienten α und der Temperaturdifferenz zwischen Luft und Flüssigkeit.

$$\dot{Q}_{\rm U} = \alpha \left(T_{\rm Luft} - T_{\rm fl} \right) A_{\rm Lache}$$
(5.2)

Der Wärmeübergangskoeffizient wird aus dem Ansatz für eine mittlere Nusselt Zahl bei einer längs angeströmten ebenen Platte in Abhängigkeit von der Windgeschwindigkeit w berechnet [5.1]:

$$Nu = \frac{\alpha L}{\lambda}; Pr = \frac{\eta c_{p}}{\lambda}; Re = \frac{w L}{v}$$

$$Nu = \sqrt{Nu_{lam}^{2} + Nu_{turb}^{2}}$$

$$Nu_{lam} = 0,664 \sqrt{Re} \sqrt[3]{Pr}$$

$$Nu_{turb} = \frac{0,037 Re^{0.8} Pr}{1 + 2,443 Re^{-0.1} (Pr^{\frac{2}{3}} - 1)}$$
(5.3)

Für die Überströmlänge L wird bei einer runden Lache der Lachendurchmesser angesetzt.

Nu [-]	Nusselt Zahl
Pr [-]	Prandtl Zahl
Re [-]	Reynolds-Zahl
w [m/s]	Windgeschwindigkeit
L [m]	Überströmlänge
λ [W/(m K)]	Wärmeleitfähigkeit der Luft
η [Pa s]	Dyn. Viskosität der Luft
c _p [kJ/(kg K)]	Wärmekapazität der Luft
ν [m²/s]	kinematische Viskosität der Luft
α [W/(m² K)]	Wärmeübergangskoeffizient
T _{Luft} [K]	Lufttemperatur
T _{fl} [K]	Lachentemperatur
A _{Lache} [m²]	Lachenfläche

Hierbei bedeuten:

5.1.2 Wärmestrom aus dem Boden

Als Lösung der eindimensionalen Wärmeleitungsgleichung erhält man für den Wärmestrom aus oder in den Boden wie bei Lebuser, Schecker [5.2] und Wörsdörfer [5.3] dargestellt:

$$\dot{Q}_{B} = \frac{\lambda_{B}}{\sqrt{\frac{\lambda_{B}}{\rho_{B} c_{p,B}} \pi t}} \left(T_{B} - T_{fl}\right) A_{Lache}$$
(5.4)

Der Wärmestrom ist von der Zeitdauer abhängig, die die Flüssigkeit mit dem Boden Kontakt hat. Der Bereich, der zuerst mit der Flüssigkeit Kontakt hatte, ist schon abgekühlt / erwärmt und kann nur noch wenig Wärme austauschen, während der Außenbereich der sich ausbreitenden Lache auf einen Boden bei Umgebungstemperatur trifft.

Es wird daher eine kreisförmige Lache vorausgesetzt, die in Kreisringe (äußerer Radius r_i, innerer Radius r_{i-1}) unterteilt wird. Für jeden Kreisring wird die Zeit seit der Beaufschlagung (t - t*) mit Flüssigkeit betrachtet und dementsprechend der Wärmestrom berechnet. Durch Summation aller Kreisringe wird anschließend der gesamte Wärmestrom zum Zeitpunkt t ermittelt:

$$\dot{Q}_{B} = \frac{\lambda_{B}}{\sqrt{\pi \frac{\lambda_{B}}{\rho_{B} c_{p,B}}}} \left(T_{B} - T_{fi} \right) \sum_{i=2}^{n} \frac{\pi \left(r_{i}^{2} - r_{i-1}^{2} \right)}{\sqrt{t - t_{i}^{*}}}$$
(5.5)

Hierbei bedeuten:

λ _B [W/(m² K)]	Wärmeleitfähigkeit des Bodens
ρ _B [kg/m³]	Dichte des Bodens
c _{p,B} [J/(kg K)]	Wärmekapazität des Bodens
Т _в [K]	Temperatur des Bodens
r [m]	Radius der Lache
A _{Lache} [m ²]	Lachenfläche

5.1.3 Wärmestrahlung

Eine umfassende Berücksichtigung der Wärmeübertragung durch Strahlung müssen nach Lebuser [5.4] die folgenden Anteile beinhalten:

- Sonneneinstrahlung + Hintergrundstrahlung
- Strahlung der Atmosphäre
- Abstrahlung der Flüssigkeit und
- Reflektion an der Flüssigkeitsoberfläche

Unter Berücksichtigung der entsprechenden Emissionskoeffizienten führt diese Betrachtung zu folgender Energiebilanz:

$$\dot{Q}_{Str} = \left(0,86\dot{Q}_{Sonne} - 0,9\sigma T_{fl}^{4} + 0,46\sigma \left(T_{Luft}^{4} - T_{fl}^{4}\right)\right) A_{Lache}$$
(5.6)

Für die solare Einstrahlung Q_{Sonne} werden an wolkenlosen Sommertagen Werte von 0,9 bis 1,4 kW/m² (meistens 1 kW/m²) angegeben. Die Stefan-Boltzmann-Konstante σ hat einen Wert von 5,67051*10⁻⁸ W/(m² K⁴).

5.1.4 Wärmestrom durch Verdampfung oder Verdunstung

5.1.4.1 Verdampfung aus einer Flüssigkeitslache

Ist die Siedetemperatur der Flüssigkeit kleiner als die Umgebungstemperatur, so ist als Lachentemperatur am Anfang der Freisetzung die Siedetemperatur anzusetzen. Die gesamte der Lache zugeführte Wärme wird zur Verdampfung der Flüssigkeit verwendet und die Lachentemperatur bleibt konstant. Die oben genannte Energiebilanz vereinfacht sich dann zu

$$\dot{m}_{va} = \frac{\dot{Q}_{B} + \dot{Q}_{U} + \dot{Q}_{Str}}{h_{v}}$$
(5.7)

Der maßgebliche Wärmeeintrag in die Lache erfolgt durch den Boden, der aber mit der Zeit abnimmt. Der Verdampfungsmassenstrom verringert sich damit ebenfalls. Liegt eine Luftströmung vor, so wird durch Konvektion nach einer gewissen Zeit mehr Masse abtransportiert, als durch die Verdampfung nachgeliefert werden kann. Ab diesem Zeitpunkt verringert sich die Lachentemperatur und es tritt eine Verdunstung ein.

5.2 Verdunstungsmodelle

5.2.1 Empirische Modelle für die Verdunstung eines Stoffes

Viele empirische Modelle zur Berechnung des Verdunstungsmassenstroms basieren auf den Arbeiten von Sutton [5.5] und Pasquill [5.6]. Basierend auf der Lösung der Stofftransportgleichung in einer turbulenten Strömung, entwickelte Sutton eine Gleichung, die den Massenstrom in Abhängigkeit der überströmten Länge, der Strömungsgeschwindigkeit, der Lachengröße sowie des Dampfdruckes und der kinematischen Viskosität berechnet. Aufgrund von Windkanaluntersuchungen konnte Pasquill zeigen, dass die Verwendung des Diffusionskoeffizienten des Stoffes in Luft anstatt der kinematischen Viskosität bessere Berechnungsergebnisse liefert.

In der Literatur sind mehrere Formulierungen des Modells zu finden. Die Originalformulierung von Pasquill, mit einer Korrektur von K₂ gemäß Sutton lautet:

rechteckige Lache: $\dot{m}_{vu} = 0,001 \,\mathrm{K}_1 \,\mathrm{u}_1^{\frac{2-n}{2+n}} \,\mathrm{x}^{\frac{2}{2+n}} \,\mathrm{y}$ kreisförmige Lache: $\dot{m}_{vu} = 0,001 \,\mathrm{K}_2 \,\mathrm{u}_1^{\frac{2-n}{2+n}} \,\mathrm{r}^{\frac{4+n}{2+n}}$ (5-8)

$$K_{1} = c_{0} \left(\frac{2+n}{2-n}\right)^{\frac{2-n}{2+n}} \left(\frac{2+n}{2\pi}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{2+n}\right) \Gamma\left(\frac{2}{2+n}\right) a^{\frac{2}{2+n}} z_{1}^{\frac{-n^{2}}{4-n^{2}}}$$

$$K_{2} = \frac{2^{\frac{2}{2+n}} \sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{3+n}{2+n}\right)}{\Gamma\left(\frac{8+3n}{4+2n}\right)} K_{1}$$

$$r \left(\frac{8+3n}{4+2n}\right) K_{1}$$

$$a = \frac{\left(0,5\pi k^{2}\right)^{1-n} \left(2-n\right)^{1-n} n^{1-n}}{\left(1-n\right) \left|2n-2\right|^{2-2n}} D_{AB}^{n} z_{1}^{\frac{n^{2}-n}{2-n}}$$

$$c_{0} = 10^{-6} \frac{P_{A}}{RT_{fi}}$$
(5-9)

Hierbei wird ein Geschwindigkeitsprofil in folgender Form vorausgesetzt:

$$\frac{\mathbf{u}}{\mathbf{u}_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^{\frac{n}{2-n}}$$
(5-10)

Zur Berechnung der Gamma-Funktion kann z. B. die Lanczos Approximation verwendet werden:

$$\Gamma(g) = \left[\frac{\sqrt{2\pi}}{g} \left(p_0 + \sum_{i=1\dots 6} \frac{p_i}{g+i}\right)\right] \left(g+5,5\right)^{g+0,5} e^{-(g+5,5)}$$
(5-11)

 $p_0 = 1.000000001900149$ p₁ = 76.180091729471457 p₂ = -86.505320329416776 p₃ = 24.014098240830911 $p_4 = -1.231739572450155$

 $p_6 = -0.000005395239384953$

 $p_5 = 0.001208650973866179$

Die Formelzeichen bedeuten:

D _{AB} [cm²/s]	Diffusionskoeffizient des Stoffes in Luft
R [kJ/kg/K]	Spez. Gaskonstante
p _A [Pa]	Dampfdruck
T _{fl} [K]	Flüssigkeitstemperatur
u ₁ [cm/s]	Windgeschwindigkeit in der Höhe z ₁
x [cm]	Lachenabmessung in Windrichtung
y [cm]	Lachenabmessung quer zur Windrichtung
r [cm]	Lachenradius
z ₁ [cm]	Anemometerhöhe
c ₀ [g/cm ³]	Konzentration
n [-]	Parameter des Geschwindigkeitsprofils = 0,25
k [-]	Kármán-Konstante = 0,4

Im Lees [5.9] ist eine alternative Formulierung zu finden, die aber im Vergleich zu den Angaben von Pasquill ca. 20% größere Werte für die Parameter K_1 und K_2 und damit einen entsprechend größeren Massenstrom ergibt. Formulierungen in SI-Einheiten werden von Habib [3.30] angeben:

Rechteckige Lache:

$$\dot{m}_{vu} = 3,94*10^{-3} u^{0,78} x^{0,89} y \frac{p_A}{R T_{fl}} \left(\frac{D_{AB}}{1,47*10^{-5}}\right)^{0,22}$$
 (5-12)

Kreisförmige Lache:

$$\dot{m}_{vu} = 3,16*10^{-3} \ u^{0,78} \ d^{1,89} \ \frac{p_A}{R \ T_{fl}} \left(\frac{D_{AB}}{1,47*10^{-5}}\right)^{0,22}$$
(5-13)

und für eine kreisförmige Lache von Lebuser [5.4] angegeben:

$$\dot{m}_{vu} = \frac{\pi}{4} 1,84*10^{-3} \ u^{0.78} \ d^{1.89} \ \frac{p_A}{R \ T_{fl}} \left(\frac{D_{AB}}{1,47*10^{-5}}\right)^{0.22}$$
(5-14)

Lebuser setzt bei seiner Formulierung eine Anemometerhöhe von 10 m und einen Parameter des Geschwindigkeitsprofils von n=0,25 voraus. Bei Habib liegen keine Angaben vor. Vergleichsrechnungen zeigen, dass die Ergebnisse mit der Formulierung von Lebuser im Bereich der Ergebnisse von Pasquill liegen, während die Formulierung von Habib zu große Werte liefert.

Nach dem LIS-Bericht Nr. 115 [5.7] können zur einfachen Abschätzung des aus einer Lache verdunsteten Massenstroms im Rahmen von Störfallauswirkungsbetrachtungen z. B. die Berechnungsgleichungen von Clancey [5.8], wie sie in Lees [5.9] angegeben sind, herangezogen werden:

Rechteckige Lache:

$$\dot{m}_{vu} = 2,63*10^{-7} \cdot u^{0.78} x^{0.89} y \frac{M p_A}{T_{fl}}$$
 (5.15)

Kreisförmige Lache:

$$\dot{m}_{vu} = 2,55*10^{-7} u^{0.78} d^{1.89} \frac{M p_A}{T_{fl}}$$
 (5.16)

Mackay und Matsugu [5.10] führten experimentelle Untersuchungen der Lachenverdunstung von Wasser, Benzin und Benzol auf einem Hochhausdach und in einem Hafenbecken durch. Durch die Feldversuche sollte der Einfluss der Umgebungsbebauung auf die Turbulenz und somit auch auf die Windprofile untersucht werden. Der Profilexponent der Geschwindigkeitsprofile wurde für beide Versuchsorte bestimmt und für die Anwendung auf durchschnittliche atmosphärische Bedingungen gemittelt. Als Ergebnis wurde folgende Gleichung für die Berechnung des Verdunstungsmassenstroms entwickelt:

$$\dot{m}_{vu} = \frac{0,00482}{1000} u^{0.78} L_{c}^{-0.11} \left(\frac{v}{D_{AB}}\right)^{-0.67} \frac{A}{R T_{fl}} \left(p_{A} - p_{A,\infty}\right)$$
(5.17)

Für die charakteristische Länge L_c wird entweder der Durchmesser der Lache oder bei einer rechteckigen Lache die Länge in Windrichtung angesetzt. Im Leitfaden KAS-18 [5.22] wird

entsprechend der Formulierung von Deutsch [5.11] ein logarithmischer (konservativer) Ansatz für den Druckterm verwendet:

$$\dot{m}_{vu} = \frac{0,00482}{1000} u_{MM}^{0,78} L_c^{-0,11} \left(\frac{v}{D_{AB}}\right)^{-0,67} \frac{A p_u}{R T_{fl}} \ln\left[\frac{p_u}{p_u - p_A}\right]$$
(5.18)

Deutsch [5.11] führte experimentelle Untersuchungen im Windkanal und im Freien durch, die leider nicht ausreichend dokumentiert worden sind, um als Grundlage für Vergleichsrechnungen zu dienen. Aus den Ergebnissen seiner Untersuchungen wurde ein Verdunstungsmodell abgeleitet, das über den Exponenten des Windgeschwindigkeitsprofils den Einfluss der Turbulenz auf die Verdunstung mit berücksichtigt. Wie auch in der VDI 3783, Blatt 1 [5.12] wird davon ausgegangen, dass das Windgeschwindigkeitsprofil als Potenzansatz dargestellt werden kann.

$$u(z) = u(z_A) \left(\frac{z}{z_A}\right)^m$$
(5.19)

Für die Profilexponenten m gibt Deutsch folgende Werte an:

Profilexponent m	Geländetyp
0,08 - 0,12	glatt: Eis, Schnee, Wasserflächen
0,13 - 0,18	mäßig rau: Grasland, Ackerflächen
0,20 - 0,24	rau: Waldgebiete, Vorstadt
0,28 - 0,40	sehr rau: Innenstadtbereiche

Tabelle 5.1:Profilexponenten nach Deutsch

Der Verdunstungsmassenstrom berechnet sich dann nach folgender Beziehung:

/

$$\dot{m}_{vu} = \frac{0,077}{1000} m^{0.156} Re^{0.76} Sc^{0.19} \frac{D_{AB} A p_{u}}{R T_{fl} L_{c}} ln \left(\frac{p_{u}}{p_{u} - p_{A}}\right)$$

$$Re = \frac{u L_{c}}{v} ; Sc = \frac{v}{D_{AB}}$$
(5.20)

In [5.13], Anhang 1 wird vom TÜV Rheinland (im Weiteren kurz als TÜV-Modell bezeichnet) folgendes Modell zur Berechnung des Verdunstungsmassenstroms eingesetzt:

$$\dot{m}_{vu} = -0,0259 \cdot \frac{u^{0.78} \,\mathrm{MA}}{d^{0.11} \,\mathrm{T_{fl}}} \ln \left(1 - \frac{p_{\mathrm{A}}}{1,01325 * 10^5} \right)$$
(5.21)

Meurer [5.14] schlägt für die Berechnung des Verdunstungsmassenstroms aus einer rechteckigen Lache eine Kombination aus dem Modell von Clancey [5.8] und einem Modell von Lebuser, Schecker [5.15] vor:

$$\dot{m}_{1} = 2,63*10^{-4} \ u^{0.78} x^{0.89} y \frac{M p_{A}}{T_{fl}}$$
$$\dot{m}_{2} = 8,0*10^{-2} M \ u^{0.78} (x y)^{0.945} \ln \left(1 + \frac{p_{A}}{p_{u} - p_{A}}\right)$$
(5.22)

 $\dot{m}_{vu} = 0,5(\dot{m}_1 + \dot{m}_2)$

Für eine kreisförmige Lache wird für die Berechnungen mit dem Modell von Meurer davon ausgegangen, dass es sich um eine quadratische Lache mit gleicher Fläche handelt.

Im LIS-Bericht Nr. 115 [5.7] werden für die konservative Abschätzung des Verdunstungsmassenstroms aus einer Lache die von Brötz [5.16] aus der Analogie von Wärme- und Stofftransport entwickelte Zahlenwertgleichung angegeben. Der Stoffübergangskoeffizient β wird aus der Windgeschwindigkeit berechnet, wobei bei Windstille ein minimaler Wert von 2 m/s vorausgesetzt wird.

$$\dot{m}_{vu} = \frac{A\beta p_A M}{8,064*10^6}$$

$$\beta = 11 u^{0.8} ; \quad \beta_{min} = 2 m/s$$
(5.23)

Khajehnajafi [5.28] hat das Modell von Churchill für den Wärmetransport an einer ebenen Platte [5.29] für die Stofftransportproblematik angepasst. Der Verdunstungsmassenstrom wird wie folgt berechnet:

$$\dot{m}_{vu} = \beta \frac{1.013 \text{ A}}{1000 \text{ RT } p_{Korr}} (p_{A} - p_{A,\infty})$$

$$\beta = \frac{\overline{Sh} \cdot D_{ab}}{L_{c}}$$

$$\overline{Sh} = \left[1 + \left(\frac{\phi_{m}}{12.500} \right)^{3/5} / \left(1 + \left[\frac{300.000}{\phi_{m}} \right]^{7/2} \right)^{2/5} \right]^{1/2} \cdot 0,6774\phi_{m}^{-1/2} + 0,45$$

$$\phi_{m} = \text{ReSc}^{2/3} / \left[1 + \left(\frac{0,0468}{\text{Sc}} \right)^{2/3} \right]^{1/2}$$

$$p_{Korr} = \frac{\frac{p_{A}}{p_{U}}}{\ln\left(\frac{p_{U}}{p_{U} - p_{A}}\right)}$$
(5.26)

Vergleicht man die vorgestellten Modellansätze miteinander, so ergibt sich folgende allgemeine Formulierung der Verdunstungsmodelle:

$$\dot{m} = \frac{\beta A}{R T} p^*$$
(5.27)

Als maßgeblicher Unterschied (abgesehen von den modellspezifischen Formulierungen des Stoffübergangskoeffizienten β) ergibt sich die Behandlung des Druckterms p*. In einigen Modellen wird eine lineare Abhängigkeit des Verdunstungsmassenstroms vom Dampfdruck der Flüssigkeit vorausgesetzt, in anderen Modellen unterschiedliche logarithmischen Ansätze:

$$p^* = p_A - p_{A,\infty}$$
(5.28)

$$p^* = p_u \ln\left(\frac{p_u - p_{A,\infty}}{p_u - p_A}\right)$$
(5.29)

$$p^* = -\ln\left(\frac{p_u - p_A}{p_u}\right) \tag{5.30}$$

Bei Temperaturen in der Nähe des Siedepunktes ergeben die logarithmischen Ansätze einen unendlichen Massenstrom, während der lineare Ansatz einen Wert liefert [5.30]. Eine weitere Anwendungsgrenze der vorgestellten Verdunstungsmodelle ergibt sich für den Fall der Verdunstung ohne Wind, bzw. bei sehr geringen Windgeschwindigkeiten. Bis auf das Modell von Brötz, welches diesen Fall berücksichtigt (Gleichung 5.23), gehen alle Verdunstungsmodelle von einer Proportionalität des Verdunstungsmassenstroms zur Strömungsgeschwindigkeit aus, so dass für den theoretischen Fall der Verdunstung in ruhender Umgebung kein Stoffübergang mehr berechnet wird.

Auf der Grundlage von experimentellen Untersuchungen in geschlossenen Räumen und unter Freilandbedingungen wurde von Habib/Schalau ein Ansatz für die Berechnung des Verdunstungsmassenstroms entwickelt, bei dem diese Probleme berücksichtigt worden sind [5.31]:

$$\dot{m} = 0.1\beta \frac{A}{RT} (p_A - p_{A,\infty})^{1.2}$$
 (5.31)

$$\beta = \max\left(\frac{D_{AB}}{2,5}; 5,6*10^{-6} \frac{u^{0.78}}{L_c^{0.11} \text{ Sc}^{0.67}}\right)$$
(5.32)

Habib und Schalau verwenden in ihrem Modellansatz, entsprechend der Empfehlungen aus [5.32] und [5.33], als Bezugstemperatur zur Berechnung der Stoffdaten der Gasphase eine mittlere Temperatur in der Grenzschicht oberhalb der Lache:

$$T_{\rm b} = 0.58 T_{\rm fl} + 0.42 T_{\rm u} \tag{5.33}$$

Hierbei bedeuten:

p _u [Pa]	Umgebungsdruck
p _A [Pa]	Dampfdruck der Flüssigkeit
$p_{A,\infty}$ [Pa]	Dampfdruck des Stoffes in der Umgebung
T _{fl} [K]	Flüssigkeitstemperatur
T _b [K]	Bezugstemperatur für die Stoffwerte in der Gssphase
T _u [K]	Umgebungstemperatur
R [J/(kg K)]	spezifische Gaskonstante
M [g/mol]	molare Masse
u [m/s]	Windgeschwindigkeit
u _{MM} [m/Std]	Windgeschwindigkeit bei Mackay / Matsugu
A [m²]	Lachenfläche
x [m]	Lachenabmessung in Windrichtung
y [m]	Lachenabmessung quer zur Windrichtung
z [m]	Höhe über den Erdboden
z _a [m]	Anemometerhöhe (10 m)
L _c [m]	charakteristische Lachenabmessung in Windrichtung
d [m]	Lachendurchmesser
v [m²/s]	kinematische Viskosität der Luft
D _{AB} [m²/s]	Binärer Diffusionskoeffizient des Stoffes in Luft
β [m/s]	Stoffübergangskoeffizient
m _{vu [kg/s]}	Verdunstungsmassenstrom

5.2.2 Grenzschichtverfahren

Bisher werden für die Abschätzung des Verdunstungsmassenstroms hauptsächlich empirische Modelle eingesetzt, die dann mit Ausbreitungsmodellen, wie z. B. der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1, zur Berechnung der toxischen Auswirkungen gekoppelt werden. Bei Lachen brennbarer Flüssigkeiten sind aber auch Angaben zur Größe des explosionsgefährdeten Bereiches und zur darin enthaltenen explosionsfähigen Masse erforderlich. Dieser Nahbereich hinter der Lache lässt sich durch die VDI Richtlinie 3783 Blatt 1 nur ungenau berechnen bzw. Blatt 2 setzt eine Schwergaswolke voraus. Mit dem Grenzschichtverfahren wird diese Lücke geschlossen, da der Konzentrationsverlauf oberhalb und in Lee der Lache berechnet wird, so dass entsprechende Aussagen getroffen werden können.

Zur Berechnung der Verdunstung aus einer Flüssigkeitslache werden die instationären Grenzschichtgleichungen für eine turbulente Strömung in folgender Formulierung gelöst [5.17]:

Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) = 0$$
(5.34)

Impulsbilanz:

$$\rho\left(\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y}\right) = -\frac{dp_u}{dx} + \frac{\partial}{\partial y}\left(\eta\left(1 + v_t^+\right)\frac{\partial u}{\partial y}\right)$$
(5.35)

Energiebilanz:

$$\rho c_{p} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \frac{\partial \sigma}{\partial y} \left[\eta \frac{c_{p}}{Pr} \left(1 + v_{t}^{+} \frac{Pr}{Pr_{t}} \right) \frac{\partial T}{\partial y} \right] + \left\{ \left[\eta \frac{c_{p1}}{Sc_{1}} \left(1 + v_{t}^{+} \frac{Sc_{1}}{Sc_{t}} \right) - \eta \frac{c_{p2}}{Sc_{2}} \left(1 + v_{t}^{+} \frac{Sc_{2}}{Sc_{t}} \right) \right] \frac{\partial c_{1}}{\partial y} \right\} \frac{\partial T}{\partial y}$$

$$(5.36)$$

Stoffbilanz:

$$\rho\left(\frac{\partial c_{1}}{\partial t} + u\frac{\partial c_{1}}{\partial x} + v\frac{\partial c_{1}}{\partial y}\right) = \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\eta}{Sc_{1}}\left(1 + v_{t}^{+}\frac{Sc_{1}}{Sc_{t}}\right)\frac{\partial c_{1}}{\partial y}\right)$$

$$c_{1} + c_{2} \stackrel{!}{=} 1$$
(5.37)

Über die ideale Gasgleichung wird die Dichte berechnet:

$$\rho = \frac{p\tilde{M}}{RT}; \; \tilde{M} = \frac{1}{\frac{1}{(1-c_1)M_2} + \frac{c_1}{M_1}}$$
(5.38)

Für die Berechnung der turbulenten Scheinzähigkeit v_t^+ ist der Einsatz eines Turbulenzmodells erforderlich. Da es sich um ein einfaches zweidimensionales Strömungsproblem handelt, können Null- oder Eingleichungsmodelle eingesetzt werden. Für die Lachenverdunstung hat sich das Nullgleichungsmodell von Cebeci-Smith [5.18] als geeignet erwiesen [5.17]. Die gekoppelten Differentialgleichungen einschließlich des Turbulenzmodells und der Energiebilanz um die Lache werden numerisch gelöst.

Hierbei bedeuten:

_u [m/s]	Geschwindigkeit in Strömungsrichtung
v [m/s]	Geschwindigkeit senkrecht zur Strömungsrichtung
C ₁ [-]	Konzentration des Stoffes in Luft = ρ_1 / ρ
C ₂ [-]	Konzentration der Luft
t [s]	Zeit
T [K]	Temperatur
p _u [Pa]	Umgebungsdruck
x [m]	Koordinate in Strömungsrichtung
y [m]	Koordinate senkrecht zur Strömungsrichtung
η [Pa s]	Dynamische Viskosität
v_t^+ [-]	Turbulente Scheinzähigkeit
c _p [J/(Kg K)]	Spezifische Wärmekapazität des Stoff/Luft-Gemisches
Pr [-]	Prandtl Zahl
Sc [-]	Schmidt-ZahlSc = $\frac{\mu}{\varrho D}$

5.3 Berechnung der Lachengröße

Wird die Ausbreitung der Lache nicht durch Umrandungen (Auffangwanne) begrenzt, so breitet sie sich unter der Einwirkung der Schwerkraft durch unterschiedliche Schichtdicken und gehemmt durch Oberflächenkräfte und Bodenreibung aus, bis eine minimale Schichtdicke erreicht wird. Als einfachste und konservative Abschätzung kann die Lachenfläche aus dem insgesamt freigesetzten Flüssigkeitsvolumen und der minimale Schichtdicke berechnet werden. Hierbei wird dann die zeitliche Entwicklung der Lachenfläche, die vom zugeführten und verdunsteten/verdampften Massenstrom abhängig ist, nicht berücksichtigt.

5.3.1 Berechnung der maximalen Lachenfläche

Für Flüssigkeiten, die ungehindert, d.h. ohne Flächenbegrenzung, auf einen ebenen, horizontalen Untergrund auslaufen, kann die maximale Fläche der Lache über die minimale Schichtdicke h_{min} abgeschätzt werden.

$$A_{Lache} = \frac{V}{h_{min}}$$
(5.39)

Als unterer Grenzwert ist die Schichtdicke zu sehen, die sich im Gleichgewichtszustand zwischen der Oberflächenspannung und den Gravitationskräften ergibt. Diese Dicke h_c berechnet sich für eine Flüssigkeit auf glatter Oberfläche nach [5.19] wie folgt:

$$h_{c} = \sqrt{\frac{\sigma}{g \cdot \rho_{fl}}}$$
(5.40)

Bei realen Freisetzungen auf einem Untergrund mit einer gewissen Oberflächenrauhigkeit ist eine größere Schichtdicke anzusetzen. In [5.19] sind die in der Tabelle 5.2 dargestellten Werte für die minimale Schichtdicke angegeben.

Untergrund	h _{min}
ruhiges Wasser	1,8 mm
Beton, Stein	5 mm
ebener Sand, Kies	10 mm
Farm-, Weideland	20 mm
unebener, sandiger Boden	25 mm

Tabelle 5.2: Minimale Schichtdicke [5.19]

Hierbei bedeuten:

h _c [m]	Minimale Schichtdicke bei sehr glatter Oberfläche
h _{min} [m]	Minimale Schichtdicke
σ [N/m]	Oberflächenspannung
g [m/s²]	Erdbeschleunigung
ρ _{fl} [kg/m³]	Flüssigkeitsdichte
V [m³]	Flüssigkeitsvolumen

5.3.2 Zeitliche Entwicklung der Lachenfläche

Briscoe und Shaw [5.20] betrachten die Flüssigkeitslache als zylindrischen Körper mit einer konstanten Höhe. Aus dem Gleichgewicht der Massenträgheit und der Gravitation leiten sie eine gewöhnliche Differentialgleichung für das Lachenwachstum ab. Viskositätsterme oder eine Begrenzung auf eine minimale Schichtdicke werden nicht berücksichtigt, da davon ausgegangen wird, dass bei tiefkalten, verdampfenden Flüssigkeiten der Verdampfungsvorgang so schnell ist, dass diese Einflussfaktoren vernachlässigbar sind. Für die beiden Spezialfälle einer kontinuierlichen und einer spontanen Freisetzung unter Vernachlässigung der Lachenverdampfung wurden die folgenden Beziehungen abgeleitet:

kontinuierliche Freisetzung:

$$\mathbf{R}(t) = \left(\frac{32\,\mathrm{g}\,\dot{\mathrm{V}}}{9\,\pi}\right)^{0.25} t^{0.75} \tag{5.41}$$

spontane Freisetzung:

$$\mathbf{R}(t) = \left[\mathbf{R}_{0}^{2} + \left(\frac{8 \, \mathrm{g} \, \mathrm{V}}{\pi} \right)^{0.5} \, \mathrm{t} \right]^{0.5}$$
(5.42)

Bei beiden Formulierungen steigt der Lachenradius mit der Zeit an und kann beliebig groß werden. Bei der Formulierung zur kontinuierlichen Freisetzung ist zu berücksichtigen, dass bei einem Rückgang des Volumenstroms, z. B. durch Absinken der Füllhöhe in einem auslaufenden Behälter, der Radius auf Null zurückgeht. Daher erscheint der Ansatz von Briscoe und Shaw nur sinnvoll für einen konstanten Volumenstrom, der für eine bestimmte Auslaufdauer freigesetzt wird. Anschließend daran kann dann die Formulierung für eine spontane Freisetzung verwendet werden, wobei für R₀ der Radius am Ende der kontinuierlichen Freisetzung eingesetzt wird.

Schalau hat den Ansatz von Briscoe und Shaw für eine spontane Freisetzung erweitert, sodass auch die zeitliche Abhängigkeit des zugeführten Volumenstroms berücksichtigt werden kann [5.21], [5.22]. Hierbei wird das Flüssigkeitsvolumen in der Lache aus dem zugeführten Massenstrom und dem verdampften/verdunsteten Massenstrom berechnet. Hierdurch erhält man zu jedem Zeitpunkt das Flüssigkeitsvolumen, das aufgrund der Schwerkraft verteilt wird:
$$\mathbf{V}(t) = \int_{0}^{t} \left(\dot{\mathbf{V}} - \frac{\dot{\mathbf{m}}}{\rho_{\rm fl}} \right) dt$$
(5.43)

Unter der Voraussetzung, dass zum Zeitpunkt t=0 keine Lache vorhanden ist (R_0 =0), ergibt sich aus der Formel von Briscoe und Shaw folgende Beziehung für den Lachenradius:

$$\mathbf{R}(t) = \sqrt{\left(\frac{8 \text{ g}}{\pi} \int_{0}^{t} \left(\dot{\mathbf{V}} - \frac{\dot{\mathbf{m}}}{\rho_{\mathrm{fl}}}\right) dt\right)^{0.5} t}$$
(5.44)

Die Ausbreitung der Lache wird durch die minimale Schichtdicke begrenzt. Sobald diese erreicht wird, berechnet sich der Lachenradius wie folgt:

$$R(t) = \sqrt{\frac{m(t)}{\rho_{\rm fl} \pi h_{\rm min}}}$$
(5.45)

Modell von Wu und Schroy:

In [5.23] wird zur Bestimmung der Lachengröße das Modell von Wu und Schroy [5.24] vorgestellt. Für die Berechnung des Lachenradius bei einer kontinuierlichen Freisetzung werden die folgenden Gleichungen angegeben:

$$R(t) = \left(\frac{6 t^{3} g}{C^{3} \pi^{2}} \frac{\rho_{fl} \dot{V}^{2}}{\eta_{fl}} \cos \gamma \sin \gamma\right)^{0.2}$$

$$C = 2 \quad \text{für } \text{Re} > 25; \quad C = 5 \quad \text{für } \text{Re} \le 25$$

$$Re = \frac{2 \dot{V} \rho_{fl}}{\pi R \eta_{fl}}$$
(5.46)

Der Winkel zwischen der Pool-Oberfläche und der Senkrechten zum Boden berechnet sich nach folgender Zahlenwertgleichung:

$$\gamma = \arctan \sqrt{\sqrt{0,25 + \frac{6,8546 \cdot R^4 \cdot \rho_{fl}}{\dot{V} \cdot \eta_{fl}}} - 0,5$$
(5.47)

Da die Gleichung 5.46 für den Lachenradius R(t) nicht direkt lösbar ist, muss ein iteratives Lösungsverfahren verwendet werden.

Webber [5.25] berücksichtigt bei der Aufstellung der Differentialgleichungen zur Berechnung des Lachenwachstums im Gegensatz zu Briscoe und Shaw auch die Reibungskräfte infolge der Viskosität der Flüssigkeit. Webber teilt die Lachendicke in einem dynamischen und in einen statischen Teil auf. Die Dicke des statischen Teils entspricht der minimalen Schichtdicke, während der dynamische Anteil H für die zeitliche Änderung des Lachenradius sorgt und durch die folgenden Gleichungen beschrieben wird:

$$\frac{dR}{dt} = U \left(1 - \frac{gh_{min} \left(\sqrt{1 + \frac{8U^2}{gh_{min}}} - 1 \right)}{4U^2} \right)$$
$$\frac{dU}{dt} = \frac{4gH(1-s)}{R} - F$$
$$s = \frac{h_{min} \left(\sqrt{1 + \frac{8U^2}{gh_{min}}} - 1 \right)}{2H}$$

 $H = \frac{m}{\rho_{fi} \pi R^2} - h_{min}$ $F = max \left(\left| \frac{7,59 \eta_{fi} U}{\rho_{fi} H^2} \right|; \left| \frac{0,007184 U^2}{H} \right| \right)$

Nachdem die Lache die maximale Ausdehnung bei der minimalen Schichtdicke erreicht hat $(\frac{dR}{dt}=0)$, wird der Lachenradius in Abhängigkeit von der in der Lache vorhandenen Masse, die durch die Verdunstung immer weiter abnimmt, berechnet:

$$R = \sqrt{\frac{m}{\rho_{\rm fl} \pi (H + h_{\rm min})}}$$
(5.49)

Die Lösung der beiden gekoppelten gewöhnlichen Differentialgleichungen $\frac{dR}{dt}$ und $\frac{dU}{dt}$ kann z. B. mit einem Runge-Kutta-Verfahren erfolgen.

Die verwendeten Formelzeichen bedeuten:

A [m ²]	Lachenfläche
V [m ³]	Volumen der freigesetzten Flüssigkeit
	Volumenstrom der freigesetzten Flüssigkeit
R [m]	Lachenradius
R ₀ [m]	Lachenradius zum Beginn der Freisetzung
t [s]	Zeit
U [m/s]	Radiale Ausbreitungsgeschwindigkeit der Lache
H [m]	Mittlere Schichtdicke oberhalb der minimalen Schichtdicke
g [m/s²]	Erdbeschleunigung
s [-]	Formfaktor
h _{min} [m]	Minimale Schichtdicke
m [kg]	Masse in der Lache
ρ _{fl} [kg/m³]	Flüssigkeitsdichte
η _{fl} [Pa s]	Dynamische Viskosität der Flüssigkeit
σ [N/m²]	Oberflächenspannung
F [m/s ²]	Wiederstandterm

5.3.3 Geneigter Untergrund

Tritt eine Flüssigkeit auf eine geneigte Fläche aus, so wird sich eine geringere Lachenfläche mit einer höheren Strömungsgeschwindigkeit ergeben. In [5.26] ist ein Ansatz entwickelt worden, um die Lachenfläche konservativ abzuschätzen. Hierbei wird eine Rinnenströmung mit einer Fließgeschwindigkeit nach Manning-Strickler angesetzt:

$$v_{\rm r} = \sqrt{r_{\rm h}^{1,33} \, k_{\rm s}^2 \, \tan \phi}$$
(5.50)

Der hydraulische Radius r_h (durchflossene Fläche / benetzter Umfang) berechnet sich wie folgt:

$$r_{h} = \frac{A_{q}}{U_{q}} = \frac{bh_{min}}{2(b+h_{min})} \cong \frac{bh_{min}}{2b} = \frac{h_{min}}{2}$$
(5.51)

Die maximale Breite der ablaufenden Lache für einen Volumenstrom \dot{V} ergibt sich dann zu

$$b = \frac{\dot{V}}{0.63 k_{s} h_{\min}^{1.66} \sqrt{\tan \phi}}$$
(5.52)

Die Manning-Strickler Rauhigkeitsbeiwerte k_s können der Literatur u.a. [5.27] entnommen werden:

Bodenart	k _s [m ^{1/3} / s]
Glatt verputzter Beton	90
Stampfbeton	65
Grobe Betonauskleidung, alter Beton	50
Asphalt	70
Geschweißtes Blech	85
Feiner Kies	50
Grober Kies	35
Schotter	30
Erdkanäle und Gräben, stark bewachsen	20

Als Lachenlänge kann die Entfernung vom Freisetzungsort bis zu einem Ablauf oder einer Sammelrinne angenommen werden. Da sich die maximale Breite erst nach einer gewissen Strömungslänge einstellt, ist diese Abschätzung der Lachenfläche konservativ.

Die Formelzeichen bedeuten:

r _h [m]	hydraulische Radius
k _s [m ^{1/3} /s]	Manning-Strickler Rauhigkeitsbeiwert
U _q [m]	benetzter Umfang der Lache
A _q [m]	durchflossene Fläche = b h _{min}
b [m]	Maximale Breite der ablaufenden Lache
Φ [°]	Winkel des geneigten Untergrunds zur Horizontalen
	Volumenstrom

5.4 Vergleichsrechnungen

5.4.1 Empirische Verdunstungsmodelle

In der BAM wurden in den letzten Jahren mehrere Versuchsreihen zur Lachenverdunstung durchgeführt [5.17], [5.31]. Hierbei wurden unterschiedliche Lachengrössen (von 0,5 m bis 1 m Durchmesser), verschiedene Stoffe (Ethanol, Cyclohexan, Wasser, Aceton) und unterschiedliche Dampfdruckbereiche (bis zu einem maximalen Dampfdruck von 0,8 bar_{abs}, entsprechend 92°C für Wasser und 0,94 bar_{abs}, entsprechend 54°C für Aceton) untersucht. Weiterhin wurde die Freisetzung im Freien, sowie in geschlossenen Räumen untersucht. Letztere wurden in einem Lagerraum und einer Lagerhalle (L x B x H: 22 m x 12 m x 6,75 m) durchgeführt, wobei Wasser bei einem maximalen Dampfdruck von 0,7 bar_{abs} (entspricht 89°C Flüssigkeitstemperatur) verwendet wurde.

Die Freilandversuche wurden alle unter atmosphärischen Bedingungen durchgeführt, so dass von einer turbulenten Strömung auszugehen ist, was auch durch die gemessenen Schwankungsgrößen der Anströmung belegt ist. Die Freilandversuche wurden zudem in Geländen mit unterschiedlicher Topografie durchgeführt, um den postulierten Einfluss der Bebauung / Bodenrauigkeit auf die Turbulenz und somit den Verdunstungsmassenstrom zu überprüfen. Dieser Effekt wurde ganz besonders in der Arbeit von Deutsch hervorgehoben und ausgearbeitet. In Abbildung 5.2 sind die Messergebnisse für eine Ethanollache bei 30°C und einem Lachendurchmesser von 0,74 m in sehr rauem (Stadtgebiet) und in glattem Gelände (ebenes Versuchsgelände ohne Bewuchs oder Bebauung) im Vergleich zu den Berechnungen mit dem Modell von Deutsch dargestellt. Für die Vergleichsrechnungen wurden Profilexponenten von 0,15 für ebenes Gelände und 0,33 für städtische Bebauung angenommen.



Abb. 5.2: Vergleich der berechneten Werte mit dem Modell von Deutsch für sehr raues und glattes Gelände mit den Messwerten von Ethanol

Die mit dem Modell von Deutsch berechneten Massenströme für die beiden Geländestrukturen weichen nur um rund 10 % voneinander ab. Dies entspricht zwar dem zu erwartenden Effekt aufgrund des postulierten Bodenrauigkeitseinflusses, jedoch ist dieser wiederum in den Messwerten kaum feststellbar. Da zudem beide Einstellungen des Modells von Deutsch zu einer deutlichen Überschätzung der Messwerte führen, wird bei weiteren Betrachtungen die dieses Modell verwenden nur noch die Einstellung für glattes Gelände gewählt, da diese näher an den Messwerten liegt. Eine Berücksichtigung der Topografie bei der Abschätzung des Massenstroms scheint aufgrund der experimentellen Beobachtungen somit keinen relevanten Einfluss zu haben.

In den Abbildungen 5.3 und 5.4 sind die gemessenen Massenströme für eine Ethanol- und eine Cyclohexanlache, im Vergleich mit den berechneten Massenstromverläufen aus den empirischen Modellen aufgetragen. In Abbildung 5.3 ist weiterhin der gemessene Massenstrom für eine Ethanollache bei sehr geringer Windgeschwindigkeit von ca. 0,04 m/s aufgetragen. Während der Ansatz von Habib/Schalau eine konservative Abschätzung des Massenstroms liefert, unterschätzt das Modell vom Brötz den Verdunstungsmassenstrom bei geringer Windgeschwindigkeit.



Abb. 5.3: Vergleich der Modelle mit den Messwerten für eine 0,74 m Ethanollache bei 30 °C



Abb. 5.4: Vergleich der Modelle mit den Messwerten für eine 0,74 m Cyclohexanlache bei 30 °C

Die Modelle von Meurer, Clancey und dem TÜV ergeben für beide Stoffe die besten Übereinstimmungen mit den Messwerten. Die relativen Abweichungen der Modelle untereinander und zu den Messwerten sind aber von den Stoffeigenschaften abhängig. Insbesondere die Modelle von Meurer, Clancey und dem TÜV, die für Ethanol eine gute Approximation mit einer maximalen Abweichung um ca. 20 % liefern, weichen bei Cyclohexan viel deutlicher, im Schnitt um ca. 55 %, von den Messwerten ab. Dies sind die Modelle die als einzigen Stoffwert die Molmasse berücksichtigen. Die Modelle mit mehr Stoffwerten (wie z.B. kinematische Viskosität und Diffusionskoeffizient) zeigen bei unterschiedlichen Stoffen ein tendenziell ähnliches Verhalten. Interessant ist in diesem Zusammenhang das Verhalten des Modells Churchill. Während alle anderen Modelle von ein gleichbleibendes Krümmungsverhalten aufweisen, zeigt die Kurve nach Churchill mehrere Wendepunkte.

Im Allgemeinen kann festgestellt werden, dass der Ansatz nach Mackay/Matsugu die obere Grenze und der Ansatz des TÜV Rheinland die untere Grenze der Vorhersagebandbreite der empirischen Modelle darstellt.

Um den Einfluss des Dampfdruckes bei gleichbleibender molaren Masse zu untersuchen, wurden die berechneten Massenströme für unterschiedliche Dampfdrücke, also bei unterschiedlichen Lachentemperaturen, in Relation zu den Messwerten in Abbildung 5.5 für eine Ethanollache und in Abbildung 5.6 für eine Wasserlache aufgetragen. Für die Ethanollache ist festzustellen, dass in dem durch Messwerte abgedeckten Bereich bis 0,3 bar_{abs} praktisch kein Einfluss des Dampfdruckes auf die Verhältnisse der einzelnen Modelle zueinander feststellbar ist, wohingegen in Abbildung 5.6 deutlich zu sehen ist, dass für Wasser schon bei geringen Dampfdrücken nur die Modelle von Mackay-Matsugu, Deutsch und Habib/Schalau konservative Abschätzungen liefern.

Weiterhin ist in der Abbildung 5.6 der Bereich höherer Dampfdrücke durch die Messwerte abgedeckt und zeigt (ähnliche Beobachtungen wurden mit Aceton gemacht), dass weder der lineare, noch der logarithmische Ansatz des Druckterms eine korrekte Abschätzung des Massenstromes ermöglichen. Obwohl das Modell von Churchill einen linearen Druckterm aufweist, ist das Verhalten den logarithmischen Ansätzen ähnlich. Dies liegt an der Druckkorrektur die bei Churchill berücksichtigt wird, und bei hohen Dampfdrücken immer stärker das Ergebnis beeinflusst. Lediglich das Modell von Habib/Schalau, das explizit für hohe Dampfdrücke entwickelt wurde, liefert hier eine fast durchgängig konservative Abschätzung mit guter Näherung zu den Messwerten.



Abb. 5.5: Vergleich der Modelle mit den Messwerten für eine 0,74 m Ethanollache bei einer Windgeschwindigkeit von 2,8 m/s und verschiedenen Dampfdrücken



Abb. 5.6: Vergleich der Modelle mit den Messwerten für eine 0,88 m Wasserlache bei einer Windgeschwindigkeit von 1,9 m/s und verschiedenen Dampfdrücken

Für den Fall der Verdunstung in geschlossenen Räumen wurden Messreihen in einem Lagerraum und einer Lagerhalle herangezogen [5.31]. Abbildung 5.7 zeigt die Messwerte für eine 0,88 m Lache Wasser im Vergleich zum Modell von Brötz und dem Modell von Habib/ Schalau.



Abb. 5.7: Verdunstungsmassenstrom in einem Raum mit geringer Strömungsgeschwindigkeit

Die mit dem Ansatz nach Habib/Schalau berechneten Massenströme für die Verdunstung in geschlossenen Räumen stellen über den gesamten Druckbereich eine konservative Abschätzung für die in der Praxis zu erwartenden Strömungsgeschwindigkeiten in einem geschlossenen Lager dar. Der Ansatz von Brötz hingegen ergibt deutlich zu geringe Verdunstungsmassenströme und sollte daher nicht verwendet werden.

5.4.2 Grenzschichtverfahren

In der Abbildung 5.8 sind die Berechnungen mit dem Grenzschichtverfahren (GSV) unter Verwendung des Turbulenzmodells von Cebeci-Smith im Vergleich zu den experimentellen Untersuchungen von Habib dargestellt. Die berechneten Werte des Grenzschichtverfahrens sind bei beiden Stoffen etwas größer als die Messwerte und somit eine konservative Abschätzung. Als Einsatzgrenze des Modells ist ein maximaler Dampfdruck der Flüssigkeit von ca. 0,8 bar zu nennen.



Abb. 5.8: Verdunstungsmassenströme bei einer Lachentemperatur von 30 °C im Vergleich zu den Ergebnissen des Grenzschichtverfahrens



Abb. 5.9: Berechnete Konzentrationsprofile an der Hinterkante einer Ethanollache

In der Abbildung 5.9 sind die mit dem Grenzschichtverfahren berechneten Konzentrationsprofile an der Hinterkante einer Ethanollache und im Lee der Lache dargestellt. Durch Integration des Konzentrationsprofils über die Grenzschichtdicke und die Lachenbreite kann die explosionsfähige Masse berechnet werden.

In der Abbildung 5.10 ist die untere Explosionsgrenze von Ethanol (3,1 Vol.-%) über einer Lache mit einem Durchmesser von 10 m und einer Temperatur von 60 °C sowie im Nachlauf der Lache dargestellt. Es ist festzustellen, dass die vertikale Ausdehnung von maximal ca. 15 cm des Gefährdungsbereiches gering ist. Dies gilt ebenso für den Bereich in dem die Gemischdichte deutlich höher als die der Luft ist und somit ein Schwergaseffekt zu erwarten ist.

Die Durchführung einer Schwergasberechnung für eine Lachenverdunstung ist daher als sehr konservativ anzusehen.



Abb. 5.10: Untere Explosionsgrenze von Ethanol über einer Lache (Durchmesser: 10 m) und deren Nachlauf

5.4.3 Modelle zur Lachenausbreitung

In der Abbildung 5.11 ist die mit verschiedenen Modellen berechnete zeitliche Entwicklung des Lachenradius für die Freisetzung von Ethanol mit einem Massenstrom von 1 kg/s für 600 s auf Betonboden dargestellt. Bei den Berechnungen ist davon ausgegangen worden, dass keine Verdunstung stattfindet. Beim Modell von Briscoe und Shaw ist während der Freisetzungsdauer die Beziehung für die kontinuierliche Freisetzung und anschließend (ab 600 s) die Beziehung für die spontane Freisetzung verwendet worden. Es ist zu erkennen, dass das Lachenwachstum sehr schnell ist und eine beliebig große Lache mit einer sehr kleinen Schichtdicke berechnet wird.

Der Ansatz von Schalau berechnet ein geringeres Lachenwachstum, was auf die Berücksichtigung der minimalen Schichtdicke zurückzuführen ist. Nach einer kurzen Freisetzungsdauer wird durch den starken Anstieg des Lachenradius nach Briscoe und Shaw die minimale Schichtdicke unterschritten. Danach wird der Lachenradius nur noch aus der vorhandenen Masse der Lache und der minimalen Schichtdicke berechnet. Nach 600 s ergibt sich daher ein konstanter Lachenradius.



Abb. 5.11: Zeitliche Entwicklung des Lachenradius für verschiedene Modelle

Das Lachenwachstum wird bei Webber mit einer noch geringeren Ausbreitungsgeschwindigkeit berechnet. Auffällig ist, dass die minimale Schichtdicke im Berechnungszeitraum von 1800 s nicht erreicht wird. Dies erscheint bei einer Flüssigkeit wie Ethanol nicht plausibel. Beim Modell von Wu-Schroy wurde das Lachenwachstum während der Freisetzungsdauer nach der angegeben Beziehung berechnet und anschließend (> 600 s) als konstant vorausgesetzt. Nach ca. 1700 s wird die minimale Schichtdicke erreicht und der Lachenradius bleibt danach konstant.

Der Einfluss der Modellierung des Lachenwachstums auf den Verdunstungsmassenstrom ist in den Abbildungen 5.12 und 5.13 dargestellt. Mit dem Modell von Mackay-Matsugu wurde die Verdunstung von Ethanol bei einer Windgeschwindigkeit von 3 m/s berechnet, wobei die Freisetzung eines Massenstroms von 1 kg/s für 600 s auf Betonboden unterstellt worden ist. Das Modell von Schalau erreicht die größte Lachenausdehnung, die sich nach dem Ende der Freisetzung sofort verringert, da die minimale Schichtdicke schon erreicht worden ist. Dieser Effekt ist auch bei dem Modell von Wu-Schroy zu erkennen, wobei aber der maximale Lachenradius erst nach sehr langer Zeit erreicht wird. Das Modell von Webber hingegen berechnet auch nach 1800 s noch ein geringes Lachenwachstum.

Wie aus Abbildung 5.13 zu entnehmen ist, sind die Auswirkungen der Modellierung des Lachenwachstums auf den Verdunstungsmassenstrom erheblich. Die Unterschiede zwischen den Berechnungsergebnissen liegen bei diesem Testfall in der Größenordnung, die sich auch zwischen den untersuchten Verdunstungsmodellen ergeben hat.



Abb. 5.12: Zeitliche Entwicklung des Lachenradius mit Verdunstung





Abb. 5.13: Zeitliche Entwicklung des Verdunstungsmassenstroms

5.5 Quellenverzeichnis

- [5.1] VDI-Wärmeatlas, 10. Auflage, Springer Verlag, (2006)
- [5.2] Lebuser, U.; Schecker, H.-G.: Verdampfung von Flüssigkeiten aus offenen Lachen, Dechema-Monographien Band 107, (1987)
- [5.3] Wörsdörfer, K.: Beschreibung der thermodynamischen Vorgänge und Wechselwirkungen bei der Freisetzung von Ammoniak. Dissertation Bergische Universität Gesamthochschule Wuppertal; (1994)
- [5.4] Lebuser, U.: Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Verdunstung aus Flüssigkeitslachen. Dissertation Uni. Dortmund (1989)
- [5.5] Sutton, O.G.:Wind structure and evaporation in a turbulent atmosphere, Proceedings of the royal society of London, Series A146, (1934)
- [5.6] Pasquill, F.: Evaporation from a plane, free liquid surface into a turbulent air Stream, Proceedings of the royal society of London, Series A182.
- [5.7] LIS-Bericht Nr. 115: Ermittlung des Gefährdungspotentials ereignisbezogener Stofffreisetzungen unter dem Aspekt der Störfall-Verordnung, Landesanstalt für Immissionsschutz Nordrhein-Westfalen, (1994)
- [5.8] Clancey, V.J.: The Evaporation and Dispersion of flammable liquid spillages.Chemical Process Hazards V, 80-98. (1974)

- [5.9] Lees, Loss Prevention in the Process Industrie, 2005, ISBN 0-7506-7555-1
- [5.10] Mackay, Matsugu: Evaporation Rates of Liquid Hydrcarbon Spills on Land and Water, The Canadian Journal of Chemical Engineering, 51. 434-439. (1973)
- [5.11] Deutsch, S.: Verdunstung aus Flüssigkeitslachen unter atmosphärischen Bedingungen. Dissertation Uni. Dortmund. (1995)
- [5.12] VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1; Ausbreitung von störfallbedingten Freisetzungen -Sicherheitsanalyse, Beuth Verlag GmbH
- [5.13] TÜV Anlagentechnik GmbH, TU Berlin: UBA-Forschungsbericht 204 09 228:
 Ermittlung und Berechnung von Störfallablaufszenarien nach Maßgabe der 3.
 Störfallverwaltungsvorschrift. (1999)
- [5.14] Meurer, P.: Festlegung einiger Quellparameter für eine Ausbreitungsrechnung zur Sicherheitsanalyse. Staub – Reinhaltung der Luft, 51. 373-378. (1991)
- [5.15] Lebuser, U.; Schecker, H.-G.: Vapourization rates of liquids and liquified gases.5. Intern. Symposium "Loss prevention in the process industries", Cannes (1986.)
- [5.16] Brötz, W.: Sicherheit von Chemieanlagen im Hinblick auf den Nachbarschaftsschutz, Gutachten im Auftrag des Ministers für Arbeit, Gesundheit und Soziales des Landes Nordrhein-Westfalen, (1979)
- [5.17] Habib, A.: Instationäre Berechnung der Lachenverdunstung mittels eines Grenzschichtverfahrens. Dissertation, TU Berlin (2010)
- [5.18] Cebeci, T-; Smith, A.M.O.; Analysis of turbulent boundary layers. Academic Press, New York. (1974)
- [5.19] CPR 14E; Methods for calculation of physical effects (Yellow Book); Committee for the Prevention of Disasters, The Hague. (2005)
- [5.20] F. Briscoe, P. Shaw; Prog. Energy Comb. Sci.. (1980)
- [5.21] Programm zur numerischen Störfallsimulation *ProNuSs9*. www.pronuss.de
- [5.22] KAS-18 Leitfaden: Empfehlungen f
 ür Abst
 ände zwischen Betriebsbereichen nach der St
 örfall-Verordnung und schutzbed
 ürftigen Gebieten im Rahmen der Bauleitplanung - Umsetzung
 § 50 BImSchG. (2010)
- [5.23] Guidelines for Chemical Process Quantative Risk Analysis, Second Edition, Center for Chemical Process Safety (CCPS), AIChE, New York. (2000)
- [5.24] Wu, J. M., Schroy, J.M.: Emissions from Spills, Proc. APCA Specirilty Conference on Control of Specific(Toxic) Pollutants, Gainesville, FL, 377-393. (1979)
- [5.25] Webber, D.M.: Source Terms. J. Loss Prev. Process Ind.. Vol. 4. 5-15. (1991)
- [5.26] Arnold, D.: Berechnung von Verdunstungs- und Verdampfungsvorgängen in Flüssigkeitslachen, Studienarbeit an der Technischen Universität Magdeburg, Institut für Sicherheitstechnik. (1993)

- [5.27] Jirka, G.H.: Einführung in die Hydromechanik. Universitätsverlag Karlsruhe (2007). ISBN: 978-3-86644-158-3
- [5.28] Khajehnajafi, S., Pourdarvish, R.: Korrelations for Mass Transfer from a Liquid Spill: Comparisons and Recommendations, Progress Safety Process Vol. 30, No 2, 178-184 (2011)
- [5.29] Churchill, S.W.: A comprehensive correlating equation for forced convection from flat plates. AIChE J. 22, 264-268 (1976)
- [5.30] Habib, K.; Schalau, B.; Zeps, R.; Frank, S.: Vergleich von Modellen zur Simulation einer Lachenverdunstung. TÜ Bd.51 (2010) Nr. I/2
- [5.31] Habib,K.; Schalau, B.: Erweiterung der empirischen Modellierung der Lachenverdunstung für geringe Windgeschwindigkeiten und hohe Dampfdrücke,
 12. Fachtagung Anlagen-, Arbeits- und Umweltsicherheit, Köthen, 2015
- [5.32] H. Brauer: Stoffaustausch einschließlich chemischer Reaktionen. Verlag Sauerländer, Aarau und Frankfurt am Main (1971)

6 Gasausbreitung

In Industrie, Wirtschaft und Forschung, also praktisch jedem menschlichen Tätigkeitsfeld, findet man Bereiche, wo mit chemischen Verbindungen gearbeitet wird, die im Fall einer Freisetzung als Schadstoff in der Atmosphäre mittransportiert werden und sich in dieser ausbreiten. Aufgrund unterschiedlicher Ausbreitungsmechanismen muss zwischen der impulsbehafteten¹ und der impulsarmen bzw. impulsfreien Freisetzung und Ausbreitung unterschieden werden.

Bei der impulsbehafteten Freisetzung zum Beispiel als Freistrahl oder Schwergaswolke werden durch die Einmischung von Umgebungsluft die Geschwindigkeitsdifferenz zur Umgebung und die Konzentration im Strahl bzw. in der Wolke mit zunehmendem Abstand vom Freisetzungsort verringert. Handelt es sich hierbei um brennbare Gase, so ist die Entfernung, in der die untere Explosionsgrenze unterschritten wird, für das Explosionsschutzkonzept interessant. Bei impulsbehafteter Freisetzung toxischer Gase ist vor allem der Ort bzw. die Höhe über Erdgleiche relevant, die durch den Freistrahl erreicht wird, bevor die Geschwindigkeit sich weitgehend der Umgebungsgeschwindigkeit angenähert hat und die Gaswolke passiv mit der Umgebungsluft weiter transportiert wird. Umgangssprachlich wird dieser Vorgang auch als "Abbau des Eigenimpulses" bezeichnet.

Bei Auftriebsstrahlen werden im Vergleich zur Luft leichtere Gase z. B. aus Schornsteinen oder bei Bränden freigesetzt. Die Strahlströmung entsteht hierbei weniger aus dem Austrittsimpuls am Freisetzungsort, als durch den Auftrieb des Gases, welcher die vertikale Komponente des Impulsstroms im Freistrahl mit zunehmender Strahllänge erhöht.

Die impulsbehaftete oder impulsfreie Ausbreitung von Gefahrstoffen in der Atmosphäre wird durch in Raum und Zeit variable Stoffkonzentrationen beschrieben. Aus den sich einstellenden Immissionsverteilungen kann die Wirkung eines Ausbreitungsvorganges auf Mensch und Umwelt, zum Beispiel im Rahmen einer Gefährdungsbeurteilung, Depositionsabschätzung oder Geruchsbewertung, abgeschätzt werden. Die für die Ausbreitungssimulation verwendeten Modelle müssen neben dem chemischen und physikalischen Verhalten des freigesetzten Gefahrstoffes (chemische Reaktionen, Phasenübergänge, Schwereeinflüsse o.ä.) den windgetriebenen Transport und die Wirkung von atmosphärischer Turbulenz auf den Ausbreitungsvorgang geeignet abbilden.

¹ Vereinfachend wird hier von "Impuls" des Strahls auch dann gesprochen, wenn strenggenommen der "Impulsstrom" (mit der Dimension einer Kraft) gemeint ist.

In praktischen Anwendungen werden die für ein chemisch und physikalisch vollständiges Modell, das versucht möglichst alle denkbaren Einflüsse zu berücksichtigen, benötigten Daten und Informationen in der Regel nicht vorliegen. Ein solches Modell wäre zudem vom mathematisch-physikalischen und ggf. numerischen Standpunkt aus außerordentlich umfangreich und für zahlreiche praktische Fragestellungen unzweckmäßig komplex. Daher haben sich für spezifische, wiederkehrende Problemstellungen spezielle Modellansätze etabliert, die mit für praktische Zwecke hinreichender Genauigkeit das Konzentrationsfeld bestimmen können. Die verschiedenen Modellansätze reichen von vergleichsweise einfachen analytischen Zusammenhängen bis hin zu aufwändigen numerischen Simulationen. Die mit einem bestimmten Modelltyp erreichbare Prognosegüte muss im Rahmen einer anwendungsbezogenen Modellvalidierung bestimmt werden.

In dem folgenden Abschnitt 6.1 werden zunächst die für eine Freisetzung bzw. Ausbreitung mit Strahlcharakter anwendbaren Modelltypen vorgestellt.

Abschnitt 6.2 beschreibt im Überblick die Modellierung der Ausbreitung schwerer Gase und der Ausbreitung passiver Luftbeimengungen. Nahezu alle Freisetzungen mit Strahlcharakter gehen in mehr oder weniger großem Abstand vom Freisetzungsort in einen passiven Ausbreitungsvorgang über. Der Abstand vom Quellort, ab dem ein Schadstoff passiv der atmosphärischen Luftbewegung folgt, hängt von den Stoffeigenschaften, der Freisetzungsart, der Freisetzungsmenge und den Umgebungsbedingungen in der Atmosphäre ab und kann in praktisch relevanten Ausbreitungsszenarien wenige Zentimeter oder auch mehrere 100 m betragen.

6.1 Freistrahl eines Gases

Gase werden im Allgemeinen in Anlagen unter Druck gehandhabt. Bei einem Versagen der Umschließung (Leck, Riss) oder dem Ansprechen von Druckentlastungseinrichtungen kommt es zu einem impulsbehafteten Austritt als Freistrahl. Für die Berechnung des Freistrahls werden unterschiedlich komplexe Modellierungen eingesetzt:

- 1. Empirische Modelle basieren auf dimensionsanalytischen Betrachtungen und erfordern im Allgemeinen eine Anpassung an experimentelle Daten.
- 2. Integralmodelle basieren auf der Vereinfachung prozessbeschreibender, partieller Differentialgleichungen für die Erhaltung von Masse, Impuls und Energie. Durch Mittelung, Symmetrieannahmen oder zum Beispiel die Annahme isotroper Turbulenz kann ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen abgeleitet und dieses anschließend in der Regel numerisch gelöst werden.
- CFD-Modelle basieren ebenfalls auf den prozessbeschreibenden Erhaltungsgleichungen f
 ür Masse, Impuls und Energie. Die partiellen Differentialgleichungen werden mit Bezug auf entsprechende Anfangs- und Randbedingungen als strömungsdynamisches Problem numerisch gelöst (CFD: Computational Fluid Dynamics).

In den folgenden Kapiteln werden einige empirische Modelle und ein Modell mit vereinfachten Differentialgleichungen (Integralmodell) vorgestellt. Durch die Bewertung der Einsatzmöglichkeiten der empirischen Modelle soll die Möglichkeit eröffnet werden, mit einfachen Mitteln Aussagen über die Abmessungen des Freistrahls zu erhalten.

Physikalisch fundierte Integralmodelle nehmen bezüglich des Aufwandes eine Zwischenstellung zwischen den empirischen und den CFD-Modellen ein. Sie sind aber i.d.R. bereits so aufwändig, dass eine numerische Lösung mit einem entsprechenden Berechnungsprogramm notwendig ist. CFD-Modelle zur Ausbreitungsberechnung stellen zwar den Stand der Wissenschaft dar, werden aber bei Auswirkungsbetrachtungen auf Grund des Rechenaufwandes im Verhältnis zur geforderten Genauigkeit bisher nur wenig eingesetzt.

Bei den empirischen Modellen und den Integralmodellen für den impulsbehafteten Freistrahl wird in der Regel davon ausgegangen, dass die Freisetzungsöffnung kreisförmig ist und der Freistrahl sich ungestört (ohne Strömungshindernisse) ausbreiten kann. Von der Kreisform abweichende Freisetzungsflächen zeigen einen kürzeren Strahlbereich, daher führt die Annahme kreisförmiger Austrittsöffnungen zu einer konservativen Abschätzung des Freistrahlbereiches. Die genannten Modelltypen setzen zudem voraus, dass die Austrittsgeschwindigkeit des impulsbehafteten Freistrahls deutlich größer als die Windgeschwindigkeit in der Umgebung ist.

senkrechter Freistrahl in ruhender Umgebung

dichteneutrales oder leichtes Gas
 schweres Gas







senkrechter Freistrahl mit Seitenwind

Abb. 6.2 : Freistrahlkonfigurationen bei einer Gasfreisetzung mit Windeinfluss

In den Abbildungen 6.1 und 6.2 sind vier Freistrahlkonfigurationen für eine senkrechte Gasfreisetzung, zum Beispiel aus einem Rohrstutzen, dargestellt. Es ist hierbei zu unterscheiden

- ob eine Freisetzung in ruhende Umgebung erfolgt oder Windeinfluss zu berücksichtigen ist und
- ob es sich um ein im Vergleich zu Luft schwereres, dichteneutrales oder leichtes Gas handelt.
- ob in unmittelbarer Quellumgebung signifikante Abweichungen von der Freistrahlausbreitung auftreten (z.B. "downwash"²)

Bei einer Freisetzung in ruhende Umgebung verdünnt sich ein leichtes oder dichteneutrales Gas mit zunehmender Entfernung vom Freisetzungsort. Bei einem Schwergas wird eine maximale Höhe erreicht, nach der die vertikale Komponente des Austrittsimpulses bis auf null zurückgegangen ist. Durch die Schwerkraft strömt das Gas dann im weiteren Verlauf des Freistrahls in Richtung Boden. Im Rahmen von Worst-Case Betrachtungen können diese Szenarien relevant werden, wenn z. B. die maximalen Abmessungen der unteren Zünddistanz gefragt sind, da bei einer Freisetzung in eine Windströmung die maximal erreichte Höhe geringer sein wird. Bei Gasfreisetzungen von Schwergasen ist als Besonderheit zu erwähnen, dass bei hohen Massenströmen signifikante Konzentrationen auch unterhalb der Freisetzungshöhe auftreten können. In diesen Fällen ist dann ggf. eine nachfolgende Schwergasausbreitungsrechnung durchzuführen.

Sinngemäß kann das beschriebene Strahl- und Ausbreitungsverhalten auch auf horizontale Freistrahlen bzw. auf den allgemeinen Fall eines geneigten Freistrahls übertragen werden. Zu beachten ist, dass sich aus der möglichen Überlagerung des (horizontalen) Austrittsimpulses und dem horizontalen Windeinfluss ggf. erheblich verlängerte oder verkürzte Freisetzungsbereiche mit Strahlcharakter ergeben können wenn der Strahlaustritt in Richtung des mittleren Windes oder gegen den Wind erfolgt.

6.1.1 Empirische Modelle

6.1.1.1 Chen und Rodi

Chen und Rodi [6.1] haben eine Vielzahl von experimentellen Untersuchungen und die daraus resultierenden Modelle für senkrechte Freistrahlen (siehe Abbildung 6.3) in <u>ruhende</u> <u>Umgebung</u> mit Austrittsgeschwindigkeiten <u>unterhalb der Schallgeschwindigkeit</u> ausgewertet.

² "Downwash" bezeichnet den abwärts gerichteten Transport im Nachlauf- bzw. Sogbereich eines windangeströmten Bauwerks, z. B. eines Kamins.



Abb. 6.3 : Koordinatensystem beim Freistrahlmodell von Chen, Rodi

Für einen rotationssymmetrischen Freistrahl eines <u>dichteneutralen bis leichten Gases</u> werden die folgenden Beziehungen angegeben:

für
$$\frac{1}{\sqrt{\text{Fr}}} \left(\frac{\rho_{\infty}}{\rho_{0}}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{y}{D} < 0,5:$$

 $\frac{u_{c}}{u_{0}} = 6, 2\sqrt{\frac{\rho_{0}}{\rho_{\infty}}} \frac{D}{y} ; c^{*} = 5\sqrt{\frac{\rho_{\infty}}{\rho_{0}}} \frac{D}{y}$
(6.1)

$$\begin{aligned} & \text{für } 0,5 \leq \frac{1}{\sqrt{\text{Fr}}} \left(\frac{\rho_{\infty}}{\rho_{0}}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{y}{D} \leq 5: \\ & \frac{u_{c}}{u_{0}} = \frac{7,26}{\text{Fr}^{\frac{1}{10}}} \left(\frac{\rho_{0}}{\rho_{\infty}}\right)^{\frac{9}{20}} \left(\frac{D}{y}\right)^{\frac{4}{5}} ; c^{*} = 4,4 \text{ Fr}^{\frac{1}{8}} \left(\frac{\rho_{\infty}}{\rho_{0}}\right)^{\frac{7}{16}} \left(\frac{D}{y}\right)^{\frac{5}{4}} \end{aligned}$$

$$(6.2)$$

$$\begin{aligned} & \text{für } \frac{1}{\sqrt{\text{Fr}}} \left(\frac{\rho_{\infty}}{\rho_{0}}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{y}{\text{D}} > 5: \\ & \frac{u_{c}}{u_{0}} = \frac{3.5}{\text{Fr}^{\frac{1}{3}}} \left(\frac{\rho_{0}}{\rho_{\infty}}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{D}{y}\right)^{\frac{1}{3}} ; c^{*} = 9,35 \text{ Fr}^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\rho_{\infty}}{\rho_{0}}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{D}{y}\right)^{\frac{5}{3}} \end{aligned}$$

$$(6.3)$$

$$Fr = \frac{u_0^2}{g D(\rho_{\infty} - \rho_0) / \rho_0}$$

Hierbei bedeuten

Fr [-]	Froude-Zahl
^ρ [kg/m³]	Dichte
y [m]	Senkrechter Abstand vom Austritt
D [m]	Durchmesser des Austritts
g [m/s²]	Erdbeschleunigung = 9,81 m/s ²
u [m/s]	Geschwindigkeit
C* [-]	Dimensionslose Konzentration bzw.
	Temperatur
	$\mathbf{c}^{\star} = \frac{\mathbf{T}_{\mathbf{c}} - \mathbf{T}_{\infty}}{\mathbf{T}_{0} - \mathbf{T}_{\infty}} \text{oder} \mathbf{c}^{\star} = \frac{\mathbf{c}_{\mathbf{c}} - \mathbf{c}_{\infty}}{\mathbf{c}_{0} - \mathbf{c}_{\infty}}$
T [K]	Temperatur
c [kg/m³]	Konzentration
Indizes	
0	Werte am Austritt
С	Werte in der Strahlmitte
8	Werte der Umgebungsluft

Für einen senkrechten Freistrahl eines Schwergases in ruhende Umgebung wird nur eine Beziehung für die maximale Freistrahlhöhe angegeben:

$$y_m = 1,85 D \sqrt{|Fr|} \tag{6.4}$$

6.1.1.2 Giesbrecht, Seifert und Leuckel

Giesbrecht, Seifert und Leuckel [6.2] haben ebenfalls eine Beziehung für die maximale Freistrahlhöhe des senkrechten Freistrahls eines Schwergases <u>in ruhende Umgebung</u> entwickelt:

$$\frac{\mathbf{y}_{m}}{\mathbf{d}_{eq}} = 1,56\sqrt{|\mathbf{F}\mathbf{r}_{eq}|}$$

$$\frac{1}{\mathbf{c}_{c,m}} = \frac{8}{3}\sqrt{\frac{0,12}{15\sqrt{\ln 2}}}\sqrt{|\mathbf{F}\mathbf{r}_{eq}|}$$

$$\mathbf{F}\mathbf{r}_{eq} = \frac{\rho_{\infty} u_{eq}^{2}}{g(\rho - \rho_{\infty}) d_{eq}}$$

$$\mathbf{d}_{eq} = \sqrt{\frac{4}{\pi}}\frac{\dot{\mathbf{m}}_{0}}{\rho_{\infty} u_{eq}}$$

$$\mathbf{u}_{eq} = \frac{\dot{\mathbf{l}}_{0}}{\dot{\mathbf{M}}_{0}}$$

$$\dot{\mathbf{l}}_{0} = \dot{\mathbf{M}}_{0} u_{0} + (\mathbf{p}_{0} - \mathbf{p}_{\infty}) \mathbf{A}_{0}$$

Hierbei bedeuten

Fr _{eq} [-]	Froude-Zahl
^ρ [kg/m³]	Dichte des Gases
$ ho_{\infty}$ [kg/m³]	Dichte der Luft
y _m [m]	Maximale Freistrahlhöhe
d _{eq} [m]	Äquivalenter Durchmesser
A ₀ [m ²]	Austrittsfläche
g [m/s²]	Erdbeschleunigung = 9,81 m/s ²
u ₀ [m/s]	Geschwindigkeit am Austritt
u _{eq} [m/s]	Äquivalente Geschwindigkeit
C _{c,m} [-]	Dimensionslose Konzentration (Massenanteil) auf der
	Freistrahlmitte in maximaler Freistrahlhöhe
М ₀ [kg/s]	Massenstrom am Austritt
İ ₀ [N]	Impuls am Austritt
p ₀ [N/m ²]	Druck am Austritt
p_{∞} [N/m²]	Umgebungsdruck

6.1.1.3

(6.5)

6.1.1.4 Hoehne und Luce

Hoehne und Luce [6.3] haben senkrechte Freistrahlen mit Methan, Ethan, Butan und Heptan in <u>queranströmende Luft</u> eingeleitet und die Konzentrationsprofile vermessen. Unter den beiden Randbedingungen

$$\operatorname{Re}_{0} > 15400 \frac{\rho_{0}}{\rho_{\infty}} \quad \operatorname{mit} \quad \operatorname{Re}_{0} = \frac{\rho_{0} \, u_{0} \, D}{\mu_{0}}; \quad \rho_{0} = \frac{p_{\infty} \, M}{\tilde{R} \, T_{0}}$$

$$110 \ge \frac{u_{0}}{u_{\infty}} \ge 8$$

$$(6.6)$$

ist das folgende Modell entwickelt worden:

$$c^* = c \frac{M}{M_{\infty}} \frac{u_0}{u_{\infty}}$$

Für $T_0 > 366 \text{ K}$:

$$s^{*} = \left(\frac{4,37}{c^{*}}\right)^{0.625} \text{ für } c^{*} > 0,595$$

$$s^{*} = \left(\frac{2,0}{c^{*}}\right)^{\frac{1}{0.97}} \text{ für } c^{*} \le 0,595$$
(6.7)

$$s^{*} = \left(\frac{4,95}{c^{*}}\right)^{0.625} \quad \text{für } c^{*} > 0,595$$

$$s^{*} = \left(\frac{2,15}{c^{*}}\right)^{\frac{1}{0.97}} \quad \text{für } c^{*} \le 0,595$$
(6.8)

Die Abstände vom Freisetzungsort berechnen sich aus

$$y=1,63 \text{ s}*R \text{ D} \quad \text{für s} > 2,08$$

$$y=s*R \text{ D} \quad \text{für s} \le 2,08 \quad (6.9)$$

$$x=R \text{ D} \left(\frac{y^{*}}{2,05}\right)^{\frac{1}{0,28}}$$

wobei das in Abbildung 6.1 dargestellte Koordinatensystem verwendet wird. Weiterhin werden die folgenden dimensionslosen Größen eingeführt:

$$s^* = \frac{s}{RD} ; x^* = \frac{x}{RD} ; y^* = \frac{y}{RD}$$
$$R = \frac{u_0}{u_\infty} \sqrt{\frac{\rho_0}{\rho_\infty}}$$

(6.10)

Hierbei bedeuten

M [kg/kmol]	Molare Masse
^ρ [kg/m³]	Dichte
s [m]	Abstand vom Austritt entlang der Freistrahlmittellinie
x [m]	Abstand vom Austritt in Windrichtung
y [m]	Abstand vom Austritt quer zur Windrichtung
D [m]	Durchmesser des Austritts
u [m/s]	Geschwindigkeit
C* [-]	Dimensionslose Konzentration
T [K]	Temperatur
c [kg/m³]	Konzentration
p [Pa]	Druck
R̃ [J/(mol K)]	molare Gaskonstante = 8,314472 J/(mol K)
R [-]	Modellfaktor
Re [-]	Reynolds-Zahl
μ [kg/(s m)]	dynamische Viskosität
Indizes	
0	Werte am Austritt
8	Werte der Umgebungsluft

6.1.1.5 Hoot, Meroney und Peterka

Hoot, Meroney und Peterka [6.4] haben bei den durchgeführten Experimenten <u>schwere Gase</u> unterschiedlicher Dichte als <u>aufwärtsgerichtete senkrechte Freistrahle mit Queranströmung</u> untersucht. Es wurden die Aufschlagpunkte der Schwergase auf dem Boden, die maximale Steighöhe und die Konzentrationen an diesen beiden Punkten ermittelt. Daraus wurde das folgende Modell entwickelt (Formulierung nach [6.29]):

Maximale Steighöhe:

$$\frac{y_{s}}{D} = 1,32 \operatorname{Fr}^{\frac{2}{3}} \left(\frac{\rho_{0}}{\rho_{\infty}}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{u_{0}}{u_{\infty}}\right)^{\frac{1}{3}} \text{ mit } \operatorname{Fr} = \left(\frac{\rho_{0} u_{0}^{2}}{g D(\rho_{0} - \rho_{\infty})}\right)^{\frac{1}{2}}$$
(6.11)

Horizontale Entfernung des maximalen Steigpunktes von der Quelle:

$$\frac{\mathbf{x}_{s}}{\mathsf{D}} = \mathsf{Fr}^{2} \left(\frac{\mathsf{u}_{\infty}}{\mathsf{u}_{0}} \right)$$
(6.12)

Die Konzentration am maximalen Steigpunkt beträgt:

$$\frac{c_{s}}{c_{0}} = 1,69 \frac{u_{0}}{u_{\infty}} \left(\frac{D}{y_{s}}\right)^{1,85}$$
(6.13)

Entfernung des Aufschlagpunktes von der Quelle:

$$\frac{\mathbf{x}_{a}}{\mathbf{D}} = 0,56 \,\mathrm{Fr} \left(\frac{\rho_{0}}{\rho_{\infty}}\right)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\mathbf{u}_{0}}{\mathbf{u}_{\infty}}\right)^{-\frac{2}{3}} \left\{ \left(\frac{\mathbf{y}_{s}}{\mathbf{D}}\right)^{3} \left[\left(2 + \frac{\mathbf{y}_{0}}{\mathbf{y}_{s}}\right)^{3} - 1 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} + \frac{\mathbf{y}_{s}}{\mathbf{D}}$$
(6.14)

Die Konzentration am Aufschlagpunkt berechnet sich nach

$$\frac{c_{a}}{c_{0}} = 2,43 \frac{u_{0}}{u_{\infty}} \left(2 \frac{y_{s}}{D} + \frac{y_{0}}{D} \right)^{-1.95}$$
(6.15)

Hierbei bedeuten

^ρ [kg/m³]	Dichte
x [m]	Abstand vom Austritt in Windrichtung
y [m]	Abstand vom Austritt quer zur Windrichtung
h [m]	Höhe
D [m]	Durchmesser des Austritts
u [m/s]	Geschwindigkeit
c [kg/m³]	Konzentration
Fr [-]	Froude-Zahl
g [m/s²]	Erdbeschleunigung = 9,81 m/s ²
Indizes	
0	Werte am Austritt
00	Werte der Umgebungsluft
S	Werte am maximalen Steigpunkt
А	Werte am Aufschlagpunkt

6.1.1.6 Briggs

VDI 3782/3 bzw. Briggs [6.5] hat verschiedene Modelle zur Berechnung von Auftriebsstrahlen unter Windeinfluss zusammengestellt und im Vergleich zu experimentellen Daten bewertet. Es werden die folgenden Beziehungen zur Berechnung der Überhöhung des Auftriebsstrahls empfohlen.

Neutrale und labile Temperaturschichtung:

$$\Delta h = 1, 6 \frac{F^{\frac{1}{3}} x^{\frac{2}{3}}}{u} \quad x \le x_{s}$$

$$\Delta h = 1, 6 \frac{F^{\frac{1}{2}} x_{s}^{\frac{2}{3}}}{u} \left[\frac{2}{5} + \frac{16x}{25x_{s}} + \frac{11}{5} \left(\frac{x}{x_{s}} \right)^{2} \right] \left(1 + \frac{4x}{5x_{s}} \right)^{-2} \quad x > x_{s}$$

$$x_{s} = 0,52 \left[\frac{s^{\frac{6}{5}}}{ft^{\frac{6}{5}}} \right] F^{\frac{2}{5}} h^{\frac{3}{5}}_{s} \quad h_{s} < 1000 \, ft \qquad (6.16)$$

$$x_{s} = 33 \left[\frac{s^{\frac{6}{5}}}{ft^{\frac{3}{5}}} \right] F^{\frac{2}{5}} \quad h_{s} \ge 1000 \, \text{ft}$$
$$F = \frac{g \dot{Q}_{H}}{\pi c_{p} \rho T} = 4,310^{-3} \left[\frac{ft^{4}}{cal \, s^{2}} \right] \dot{Q}_{H}$$

Stabile Temperaturschichtung:

$$\Delta h = 1, 6 \frac{F^{\frac{1}{3}} x^{\frac{2}{3}}}{u} \quad x \le 2, 4 \frac{u}{\sqrt{s}}$$

$$\Delta h = 2, 9 \sqrt{\frac{F}{u s}} \quad x > 2, 4 \frac{u}{\sqrt{s}}$$

$$s = \frac{g}{T} \frac{\partial \Theta}{\partial y}$$
(6.17)

Hierbei bedeuten

x [ft]	Abstand vom Austritt in Windrichtung
x _s [ft]	Spez. Abstand vom Austritt in Windrichtung
h _s [ft]	Austrittshöhe
Δh [ft]	Höhe über der Austrittshöhe
s [1/s²]	Stabilitätsparameter
u [ft/s]	Windgeschwindigkeit in Austrittshöhe
$\frac{\partial \Theta}{\partial y} [K/ft]$	Gradient der potenziellen Temperatur der Atmosphäre
g [ft/s²]	Erdbeschleunigung = 32,17 ft/s ²
\dot{Q}_{H} [cal/s]	Wärmeemission
F [ft ⁴ / s ³]	Auftriebsparameter
T [K]	Temperatur der Luft

mit 1 ft = 0,3048 m und 1 cal = 4,1868 J

6.1.1.7 VDI Richtlinie 3783 Blatt 1

Nach der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1 [6.6] sind zurzeit, die Richtlinie befindet sich in der Überarbeitung, für die Überhöhung auftriebsbehafteter Fahnen im Rahmen der Ausbreitungsberechnung von störfallbedingten Stofffreisetzungen nur äquivalente Wärmeemissionen größer 6 MW zu berücksichtigen. Die Überhöhung über die Freisetzungshöhe hängt vom Stabilitätszustand der Atmosphäre bzw. der Temperaturschichtung ab. Für labile, indifferente und stabile Schichtungen werden die folgenden Gleichungen angegeben.

labile Temperaturschichtung:

$$\Delta h = 3,34 \frac{\dot{Q}_{H}^{0,333} x^{0,667}}{u}$$

$$\Delta h_{max} = 146 \frac{\dot{Q}_{H}^{0,6}}{u}$$

$$\Delta h + h_{s} \le 1100 \,\text{m}$$
(6.18)

indifferente Temperaturschichtung:

$$\Delta h = 2,84 \frac{\dot{Q}_{H}^{0,333} x^{0.667}}{u}$$

$$\Delta h_{max} = 102 \frac{\dot{Q}_{H}^{0,6}}{u}$$

$$\Delta h + h_{s} \le 800 \,\text{m}$$
(6.19)

stabile Temperaturschichtung:

$$\Delta h = 3,34 \frac{\dot{Q}_{H}^{0,333} x^{0.667}}{u}$$

$$\Delta h_{max} = 74,4 \frac{\dot{Q}_{H}^{0,333}}{u^{0.333}}$$
(6.20)

Hierbei darf die Überhöhung bei stabiler Schichtung die Überhöhung bei indifferenter Schichtung nicht überschreiten.

Die Wärmeemission berechnet sich nach

$$\dot{Q}_{H} = c_{p} \dot{V} (T_{Gas} - T_{u})$$

$$\dot{Q}_{H} = c_{p} \dot{V} \left(1,22*10^{4} \frac{M}{\rho} - T_{u} \right)$$
(6.21)

Hierbei bedeuten

Δh [m]	Überhöhung
Q _н [MW]	Äquivalente Wärmeemission
x [m]	Abstand vom Freisetzungsort
u [m/s]	Geschwindigkeit in Freisetzungshöhe
h _s [m]	Freisetzungshöhe
c _p [MWs/m ³]	Spezifische Wärmekapazität
^ρ [kg/m³]	Dichte
	Volumenstrom am Austritt
M [kg/mol]	Molare Masse
T _{Gas} [K]	Gastemperatur
T _u [K]	Umgebungstemperatur = 293 K

6.1.2 Integralmodelle

6.1.2.1 Schatzmann

Schatzmann [6.7] hat ein Modell zur Berechnung von Freistrahlen entwickelt, das sowohl für im Vergleich zur Luft dichteneutraler und leichter Gase [6.8] als auch für schwere Gase (z. B. Propan) [6.9] eingesetzt worden ist. In der Abbildung 6.4 ist das im Modell verwendete Koordinatensystem dargestellt.





Das Berechnungsmodell für einen axialsymmetrischen Freistrahl wurde aus den Reynolds-Gleichungen und den Transportgleichungen für Temperatur und Konzentration hergeleitet. Hierbei wurden verschiedene Vereinfachungen, wie zum Beispiel die Annahme einer voll turbulenten Strömung, eines axialsymmetrischen selbstähnlichen Freistrahls, einer Gauß-Verteilung der Größen innerhalb des Freistrahls und konstante Anströmgeschwindigkeit eingeführt. Daraus resultiert ein Satz von 5 gewöhnlichen gekoppelten Differentialgleichungen:

Massenbilanz

$$\frac{d}{ds} \left(\rho_{\infty} u^* b^2 \right) + 2b^2 u_{\infty} \cos \Phi \frac{d\rho_{\infty}}{ds} + \lambda^2 \frac{d}{ds} \left(u_{\infty} \cos \Phi \rho^* b^2 \right) + \frac{\lambda^2}{\lambda^2 + 1} \frac{d}{ds} \left(\rho^* u^* b^2 \right) = 2\rho_{\infty} E$$
(6.22)

Impulsbilanz in s-Richtung

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{ds}} \left\{ \mathbf{u}^* \mathbf{b}^2 \left[\mathbf{u}^* \left(0, 5\rho_{\infty} + \frac{\lambda^2}{2\lambda^2 + 1}\rho^* \right) + \mathbf{u}_{\infty} \cos \Phi \left(\rho_{\infty} + \frac{\lambda^2}{\lambda^2 + 1}\rho^* \right) \right] \right\} = -\lambda^2 \mathbf{b}^2 \rho^* \mathbf{g} \sin \Phi$$
(6.23)

Gleichung für den Winkel Φ

$$\frac{d\Phi}{ds} = \frac{\lambda^2 b^2 \rho^* g \cos\Phi + u_{\infty} \rho_{\infty} E \sin\Phi + \frac{\sqrt{2}}{\pi} c_D \rho_{\infty} b u_{\infty}^2 |\sin\Phi| \sin\Phi}{b^2 u^{*2} \left(0,5 \rho_{\infty} + \frac{\lambda^2}{2\lambda^2 + 1} \rho^*\right) + b^2 u^* u_{\infty} \cos\Phi \left(\rho_{\infty} + \frac{\lambda^2}{\lambda^2 + 1} \rho^*\right)}$$
(6.24)

Komponentenbilanz

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{ds}} \left[\lambda^{2} \mathrm{b}^{2} \left(\mathrm{u}_{\infty} \cos \Phi \rho_{\infty} \mathrm{c}^{*} + 0, 5 \, \mathrm{u}_{\infty} \cos \Phi \rho^{*} \mathrm{c}^{*} + \frac{1}{\lambda^{2} + 1} \mathrm{u}^{*} \rho_{\infty} \mathrm{c}^{*} + \frac{1}{\lambda^{2} + 2} \mathrm{u}^{*} \rho^{*} \mathrm{c}^{*} \right) \right] = -\frac{\mathrm{d}\mathrm{c}_{\infty}}{\mathrm{d}\mathrm{s}} \mathrm{b}^{2} \left(2 \mathrm{u}_{\infty} \cos \Phi \rho_{\infty} + \lambda^{2} \mathrm{u}_{\infty} \cos \Phi \rho^{*} + \mathrm{u}^{*} \rho_{\infty} + \frac{\lambda^{2}}{\lambda^{2} + 1} \mathrm{u}^{*} \rho^{*} \right)$$

$$(6.25)$$

Energiebilanz

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} \left[\lambda^2 b^2 \left(u_{\infty} \cos \Phi \rho_{\infty} T^* + 0, 5 u_{\infty} \cos \Phi \rho^* T^* + \frac{1}{\lambda^2 + 1} u^* \rho_{\infty} T^* + \frac{1}{\lambda^2 + 2} u^* \rho^* T^* \right) \right] = -\frac{\mathrm{d}T_{\infty}}{\mathrm{d}s} b^2 \left(2u_{\infty} \cos \Phi \rho_{\infty} + \lambda^2 u_{\infty} \cos \Phi \rho^* + u^* \rho_{\infty} + \frac{\lambda^2}{\lambda^2 + 1} u^* \rho^* \right)$$
(6.26)

Die Aufweitung des Freistrahls mit zunehmender Lauflänge s wird durch eine sogenannte Entrainment-Funktion E beschrieben. Hier sind mehrere Ansätze bekannt. Schatzmann verwendet

$$E = u * b \frac{0,057 - 0,67 \frac{\rho * g b \sin \Phi}{u^{*2} \rho_{\infty}}}{1 + 5 \frac{u_{\infty}}{u^{*}} \cos \Phi} \left(1 + 2 \frac{u_{\infty}}{u^{*}} \sin \Phi\right)$$
(6.27)

Teixeira-Miranda [6.10] haben den folgenden Ansatz entwickelt, der gegenüber der Formulierung von Schatzmann in einigen Fällen Vorteile bringen soll [6.11]:

$$\begin{split} E &= u^* b \varepsilon \\ \varepsilon &= \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3}{\varepsilon_n} \\ \varepsilon_1 &= -\left[\left(\lambda^2 - 0.5 + (4\lambda^2 + 1) \frac{u_\infty}{u^*} \cos \Phi \right) \frac{1}{\lambda^2 + 1} + 3 \frac{u_\infty^2}{u^{*2}} \cos^2 \Phi \right] \frac{\lambda^2 \sin \Phi}{Fr^2} \\ \varepsilon_2 &= -\left(1.25 + 1.5 \frac{u_\infty}{u^*} \cos \Phi \right) \frac{c_d \sqrt{2} u_\infty^3}{\pi u^{*3}} \sin^2 \Phi |\sin \Phi| \\ \varepsilon_3 &= \frac{3K}{b u^*} \left(0.5 + \frac{u_\infty}{u^*} \cos \Phi \right) \\ K &= 0.019 b u^* \left(1 + 4.5 \frac{u_\infty}{u^*} |\sin \Phi| \right) \\ \varepsilon_n &= \left(1 + \frac{u_\infty}{u^*} \cos \Phi \right) \left(1 + 3 \frac{u_\infty}{u^*} \cos \Phi \right) \left(0.5 + \frac{u_\infty}{u^*} \cos \Phi \right) + \left(1.25 + 1.5 \frac{u_\infty}{u^*} \cos \Phi \right) \frac{u_\infty^2}{u^{*2}} \sin^2 \Phi \end{split}$$
(6.28)

Die Anfangsgeschwindigkeit u_j des Freistrahls an der Austrittstelle mit der Fläche A_e wird unter Berücksichtigung der Massen- und Impulserhaltung nach Entspannung auf Umgebungsdruck berechnet. Der Massenstrom \dot{m}_j und der Druck im Austrittsquerschnitt p_e berechnet sich aus den Beziehungen zur Massenstromberechnung bei Gasen.

$$\dot{I}_{j} = \dot{m}_{j} u_{e} + A_{e} (p_{e} - p_{\infty})$$

 $u_{j} = \frac{\dot{I}_{j}}{\dot{m}_{j}}$
(6.29)

Aus der Bernoullischen Gleichung lassen sich dann die Dichte und damit der Durchmesser am Anfang des Freistrahls berechnen:

$$\rho_{j} = \frac{2 \kappa p_{\infty}}{2 \kappa \tilde{R} T - (\kappa - 1) u_{j}^{2}}$$

$$d_{j} = \sqrt{\frac{4 \dot{m}_{j}}{\pi \rho_{j} u_{j}}}$$
(6.30)

Das Freistrahlmodell ist als so genanntes Einstoff-System formuliert, wobei die Temperatur des äquivalenten Kalt- oder Warmluftstrahls mit der individuellen Gaskonstante für Luft R_L berechnet wird.

$$T_{j} = \frac{p_{\infty}}{\rho_{j} \tilde{R}_{L}}$$
(6.31)

Um die gewöhnlichen Differentialgleichungen mit einem Runge-Kutta-Verfahren lösen zu können, müssen die Anfangswerte am Ende der Kernzone (Punkt s₀) bekannt sein. Die Kernzone ist das Strömungsgebiet direkt nach dem Austrittspunkt, in dem z. B. eine Expansion der Strömung auf Umgebungsdruck stattfindet. Die Länge der Kernzone wurde empirisch bestimmt [6.7]:

$$s_0 = D\left(6, 2 - 20\frac{u_\infty}{u_j^*}\right)$$
(6.32)

Die benötigten Startwerte werden wie folgt berechnet [6.7]:

$$b_{0} = D \sqrt{\frac{u_{j}^{*} + u_{\infty} \cos \Phi}{2(u_{j}^{*} + 2u_{\infty} \cos \Phi)}}$$
$$u_{0}^{*} = u_{j}^{*}$$
$$c_{0}^{*} = c_{j}^{*} \frac{\lambda^{2} + 1}{2\lambda^{2}} \frac{u_{j}^{*} + 2u_{\infty} \cos \Phi}{u_{j}^{*} + (\lambda^{2} + 1) u_{\infty} \cos \Phi}$$

$$T_{0}^{*} = T_{j}^{*} \frac{\lambda^{2} + 1}{2\lambda^{2}} \frac{u_{j}^{*} + 2u_{\infty} \cos \Phi}{u_{j}^{*} + (\lambda^{2} + 1) u_{\infty} \cos \Phi}$$

$$\Phi_{0} = \Phi_{j} \left(1 - 1, 22 \frac{u_{\infty}}{u_{j}^{*}}\right) \quad .$$
(6.33)

Nachdem die Differentialgleichungen in Strömungsrichtung integriert worden sind, ist die Lage der Freistrahlmittellinie, die Geschwindigkeit, die Temperatur und Konzentration entlang der Linie bekannt. Über die vorausgesetzte Gauß-Verteilung der Größen innerhalb des Freistrahls können die Werte senkrecht zur Freistrahlmittellinie berechnet werden:

$$u - u_{\infty} = u * e^{-\left(\frac{r}{b}\right)^{2}}$$

$$T - T_{\infty} = T * e^{-\left(\frac{r}{\lambda b}\right)^{2}}$$

$$c - c_{\infty} = c * e^{-\left(\frac{r}{\lambda b}\right)^{2}}$$
(6.34)

Das Modell von Schatzmann kann für die Berechnung von Freistrahlen in ruhender und bewegter Atmosphäre (Windgeschwindigkeit > 0) eingesetzt werden. Es wird aber davon ausgegangen, dass die Windgeschwindigkeit konstant ist und die Turbulenz der Außenströmung keinen Einfluss auf den Freistrahl hat.

Φ [°]	Winkel zwischen Strahlmittellinie und der Waagerechten		
u [m/s]	Geschwindigkeit		
c [kg/m³]	Konzentration		
Т [К]	Temperatur		
b [m]	Breitenmaß des Freistrahls		
r [m]	Radius		
İ [kg m/s²]	Impulsänderung		
m [kg/s]	Massenstrom		
A _e [m ²]	Austrittsfläche		
p _e [Pa]	Druck im Austrittsquerschnitt		
к[-]	Isentropenexponent		
	Individuelle Gaskonstante		
d _j [m]	Durchmesser am Anfang des Freistrahls		
s ₀ [m]	Länge der Kernzone		
D [m]	Austrittsdurchmesser		
g [m/s²]	Erdbeschleunigung = 9,81 m/s ²		
() _j	Werte an der Austrittsstelle		
c *, u *, T *, ρ*	c-c _{∞} ; u-u _{∞} ; T - T _{∞} ; ρ - ρ_{∞}		
λ	Verhältnis von Massen- zu Impulsausbreitung = 1,16		
CD	Widerstandsbeiwert = 2,5		

Die verwendeten Variablen und Indizes bedeuten:

6.1.2.2 Weitere Integralmodelle

In Deutschland werden noch andere Integralmodelle verwendet, die in Programmpakten wie AEROPLUME, PHAST oder EFFECTS integriert sind. Die aktuell verwendeten Gleichungssysteme für AEROPLUME und PHAST sind nicht veröffentlicht worden und können daher nicht dargestellt werden. Die Beschreibung älterer Versionen von AEROPLUME der Firma HGSystem und TECJET von DNV sind [6.12] und [6.13] zu entnehmen. In der Programmbeschreibung von EFFECTS wird auf das Yellow Book [6.29] verwiesen, in dem aber mehrere Modelle diskutiert werden, so dass eine eindeutige Zuordnung nicht möglich ist.

Mit dem Programmpaket FRED wurden in einer Veröffentlichung des DVGW [6.14] die explosionsgefährdeten Bereiche an Ausblasöffnungen von Leitungen zur Atmosphäre an Gasanlagen berechnet.

6.1.3 Vergleich mit experimentellen Untersuchungen

Bei den im Folgenden dargestellten experimentellen Untersuchungen handelt es sich ausschließlich um Messungen unter Laborbedingungen in Windkanälen.

6.1.3.1 Senkrechter Freistrahl in ruhender Umgebung

Birch u.a. [6.15] haben aufwärtsgerichtete senkrechte Freistrahle in ruhender Umgebung vermessen. Es wurden die folgenden Randbedingungen angegeben:

Gas:	Erdgas
Molare Masse:	17,32 g/mol
$\frac{\rho_0}{\rho_\infty}$ mit ρ_∞ bei 15°C, 1,013 bar	0,5991
κ	1,35
Durchmesser	2,7 mm
Druck Fall 1	1,14 bar _{abs}
Druck Fall 2	3,5 bar _{abs}
Ausflussziffer	0,85
Für die Berechnung verwendete Größen:	
Gastemperatur:	268 K
Umgebungstemperatur:	288 K
Massenstrom bei 1,14 bar:	0,000684 kg/s
Massenstrom bei 3,5 bar:	0,004 kg/s

Für die Berechnungen können bei der Unterschallströmung des Testfalls 1 die Modelle von Rodi und Schatzmann eingesetzt werden. Die Berechnung der Überschallströmung (Testfall 2) kann aufgrund der Einschränkung des Gültigkeitsbereiches des empirischen Modells nur noch mit dem Modell von Schatzmann durchgeführt werden. In den folgenden beiden Abbildungen 6.5 und 6.6 sind die gemessenen Konzentrationen (Volumenanteile) der Freistrahle für die beiden Fälle im Vergleich zu den Berechnungen dargestellt.



Abb. 6.5: Testfall 1 Unterschallströmung



Abb. 6.6: Testfall 2 Überschallströmung

Keagy und Weller [6.16] haben aufwärtsgerichtete senkrechte Freistrahle mit Stickstoff, Kohlendioxid und Helium in ruhender Umgebung unter folgenden Randbedingungen vermessen:

Gase:	Helium, Stickstoff, Kohlendioxid	
Molare Masse:		
Helium	4 g/mol	
Stickstoff	28 g/mol	
Kohlendioxid	44 g/mol	
Austrittsgeschwindigkeit:	122 m/s	
Durchmesser	3,14 mm	
Für die Berechnung verwendete Größen:		
Gastemperatur:	288 K	
Umgebungstemperatur:	288 K	
Massenströme:		
Helium:	0,00016 kg/s	
Stickstoff:	0,00112 kg/s	
Kohlendioxid:	0,00176 kg/s	

In den folgenden Abbildungen 6.7 bis 6.9 sind die Konzentrationen der Freistrahle für die drei Stoffe dargestellt. Bei Helium und Stickstoff können die Modelle von Rodi und Schatzmann eingesetzt werden. Kohlendioxid hat eine etwas größere Dichte als Luft und daher kann das empirische Modell hier nicht angewendet werden.

Beim Helium-Freistrahl überschätzt das Modell von Rodi die Konzentration deutlich, während beim Stickstoff-Strahl eine gute Übereinstimmung erzielt wird. Daraus kann geschlossen werden, dass das Modell eher für dichteneutrale Gase eingesetzt werden sollte, aber immer eine konservative Abschätzung ergibt. Die Ergebnisse des Integralmodells von Schatzmann ergibt in allen drei Fällen eine gute Übereinstimmung.



Abb. 6.7: Senkrechter Helium Freistrahl ohne Queranströmung



Abb. 6.8: Senkrechter Stickstoff Freistrahl ohne Queranströmung



Abb. 6.9: Senkrechter Kohlendioxid-Freistrahl ohne Queranströmung

6.1.3.2 Waagerechter Freistrahl mit turbulenter Außenströmung

Fink [6.17] hat einen waagerechten Luft-Strahl in eine turbulente Luftströmung gleicher Richtung strömen lassen, wobei der Turbulenzgrad der Außenströmung variiert worden ist. Es wurde die Geschwindigkeit des Freistrahls in Abhängigkeit von der Strömungslänge gemessen.

Luft
7 m/s
3,1
1 % und 4 %
6 mm
288 K
288 K
0,0007 kg/s

Für die Experimente sind die folgenden Randbedingungen angegeben worden:

Da es sich bei diesem Testfall um einen waagerechten Freistrahl in eine parallele Außenströmung handelt, können die empirischen Modelle von Rodi bzw. Hoehne und Luce nicht eingesetzt werden. In der Abbildung 6.10 sind die Messungen der Geschwindigkeit auf der Freistrahlmittellinie für zwei Turbulenzgrade der Außenströmung im Vergleich zu Berechnungen mit dem Schatzmann Modell dargestellt. Die Berechnungen liefern im Vergleich zu den Messungen eher konservative Ergebnisse. Da im Schatzmann-Modell die Turbulenz der Außenströmung nicht berücksichtigt wird, wird im Vergleich zu den Messungen mit größerem Turbulenzgrad eine zu geringe Einmischung von Luft in den Strahl und damit eine geringere Geschwindigkeitsabnahme berechnet. Bei der Verwendung der Entrainment-Funktion von Teixeira-Miranda ist die Einmischung in den Strahl zu gering. In den bisher durchgeführten Berechnungen ergaben sich vernachlässigbare Unterschiede zwischen den beiden Entrainment-Modellen. Im vorliegenden Fall ist der Schatzmann-Ansatz vorzuziehen und wird daher auch für die weiteren Berechnungen verwendet.



Abb. 6.10: Freistrahlgeschwindigkeit bezogen auf die Austrittsgeschwindigkeit

6.1.3.3 Senkrechter Freistrahl mit Seitenwind

Hoehne und Luce [6.3] haben aufwärtsgerichtete senkrechte Freistrahle mit Seitenwind für verschiedene Kohlenwasserstoffe vermessen. Das Verhältnis der Austrittsgeschwindigkeit zur Windgeschwindigkeit wurde hierbei in einem weiten Bereich variiert, wobei die Austrittsgeschwindigkeit maximal die Schallgeschwindigkeit erreicht hat. Für Butan und Methan werden im Folgenden Vergleichsrechnungen durchgeführt.

Gas:	Butan			
Molare Masse:	58.12 g/mol			
Verhältnis Austrittsgeschwindigkeit V zur	24,3			
Windgeschwindigkeit U				
Durchmesser	3,18 mm			
Gastemperaturen (Cold Jet, für $T_0 \le 366$ K)	2 °C – 22°C			
Dichteverhältnisse zur Umgebungsluft	2.02 – 2.15			
Für die Berechnung verwendete Größen:				
Gastemperatur:	293 K			
Umgebungstemperatur:	288 K			
Windgeschwindigkeit U _u :	5 m/s			
Massenstrom:	0,00242 kg/s			

In der Abbildung 6.11 ist der Verlauf der Strahlmittellinie und in der darauf folgenden Abbildung 6.12 die Konzentrationsverteilung (Volumenanteil) der maximalen Freistrahlkonzentration für das empirische Modell von Hoehne / Luce und für das Integralmodell von Schatzmann dargestellt.

Das Modell von Hoehne / Luce zeigt erwartungsgemäß eine gute Übereinstimmung mit den Messungen im Nahfeld der Freisetzung, da es an diese angepasst worden ist. Es ist aber festzustellen, dass die Fahnenüberhöhung des Freistrahls überschätzt wird, was im Zusammenhang mit einer nachfolgenden, impulsfreien Ausbreitungsberechnung für toxische Gase keine konservative Abschätzung ist. Das Integralmodell von Schatzmann ergibt eher konservative Ergebnisse mit etwas zu großen Konzentrationen und einer geringeren Überhöhung.



Abb. 6.11: Mittellinie des Butan-Freistrahls





Abb. 6.12: Konzentrationsverteilung auf der Mittellinie des Freistrahls

Für Methan sind von Hoehne und Luce nur die normierten Messergebnisse c* über s* und y* über s* aus mehreren Messreihen veröffentlicht worden. In den Messreihen wurden das Verhältnis Austrittsgeschwindigkeit zu Windgeschwindigkeit, die Gastemperatur, der Durchmesser der Düse und die Gastemperatur variiert (siehe folgenden Tabelle).

Gas:	Methan	
Molare Masse:	16,04 g/mol	
Verhältnis Austrittsgeschwindigkeit V zu	13 – 71	
Windgeschwindigkeit U		
Durchmesser	3,18 mm	
Gastemperaturen (Cold Jet, für T ₀ <u>≤</u> 366 K)	-14 °C – 17°C	
Dichteverhältnisse zur Umgebungsluft	0,56 – 0,62	
Für die Berechnung verwendete Größen:		
Gastemperatur:	273 K	
Umgebungstemperatur:	288 K	
Windgeschwindigkeit U _u :	3 m/s	
Massenströme:		
Fall 1: V/U = 13	0,00022 kg/s	
Fall 2: V/U = 71	0,00122 kg/s	

Für die in der Tabelle aufgeführten Berechnungsparameter, die sich in den gemessenen Bereichen befinden, sind die in den folgenden beiden Abbildungen 6.13 und 6.14 dargestellten Berechnungen durchgeführt worden. Hierbei wurde festgestellt, dass auch mit dem Modell von Schatzmann bei Berechnungen mit unterschiedlichen Verhältnissen der Austrittsgeschwindigkeit zur Windgeschwindigkeit aufgrund der normierten Auftragung die Berechnungsergebnisse zusammenfallen.



Abb. 6.13: Verlauf der Strahlmittellinie beim senkrechten Methan Freistrahl



Abb. 6.14: Verlauf der Konzentration auf der Strahlmittellinie beim senkrechten Methan Freistrahl

Bei dem Freistrahl mit einem leichten Gas wird der Verlauf der Strahlmittellinie beim empirischen Modell von von Hoehne / Luce besser getroffen als bei Butan. Das Schatzmann Modell liefert wieder etwas zu geringe Höhen im Vergleich zu den Messungen. Während beim Butan Freistrahl das Schatzmann Modell über die gesamte Freistrahllänge zu hohe Konzentrationen berechnet hat, liegt bei Methan für größere Entfernungen eine gute Übereinstimmung mit dem Messungen vor.

6.1.3.4 Schwergasfreistrahl mit Seitenwind

Donat [6.18] hat Freistrahle mit Seitenwind für verschiedene Gasgemische, die schwerer als Luft sind, vermessen. Hierbei wurden unter anderem die Dichte der Gase und der Austrittswinkel variiert. Durch den Einbau von Rauhigkeitselementen in den Windkanal wurden drei Grenzschichtströmungen mit unterschiedlichen Geschwindigkeitsprofilen erzeugt. Die Geschwindigkeitsprofile wurden an das Potenzgesetz (vergl. auch Abschnitt 6.2.1.1) angepasst:

$$\frac{u}{u(z_s)} = \left(\frac{z}{z_s}\right)^n$$
(6.35)

Hierbei bedeuten

z [m]	Höhe über dem Boden
z _s [m]	Referenzhöhe (Anemometerhöhe)
u [m/s]	Windgeschwindigkeit
n [-]	Profilexponent

Es wurden Profilexponenten n für ebenes Grasland (n=0,16), für vorstädtisches Gelände (n=0,21) und für städtische Bebauung (n=0,28) realisiert.

Die Experimente 1 und 2 wurden mit Kohlendioxid unter den in der folgenden Tabelle aufgeführten Randbedingungen durchgeführt. Es wurden Konzentrationsprofile und der Konzentrationsverlauf in Bodennähe in einer Höhe von 5,8 mm (Labormaßstab) gemessen.

Gas:	Kohlendioxid
Molare Masse:	44,01 g/mol
Austrittshöhe h _s	70 mm
Durchmesser	5,8 mm
Austrittsgeschwindigkeit	4,38 m/s
Windgeschwindigkeit an der Austrittsstelle u(h _s)	0,84 m/s
Gasdichte	1,88 kg/m³
Dichte der Luft	1,20 kg/m³
Verhältnis Gasdichte zur Luftdichte	1,56
Exponent des Geschwindigkeitsprofils n	
Experiment 1:	0.16
Experiment 2:	0,28
Austrittsrichtung	90° (senkrecht
	nach oben)
Für die Berechnung verwendete Größen:	
Gastemperatur:	298 K
Umgebungstemperatur:	298 K
Massenstrom:	0,00021 kg/s

In den Abbildungen 6.15 und 6.16 sind die gemessenen Verläufe der Freistrahlmittellinie und der Konzentration (Volumenanteil) im Vergleich zum Schatzmann-Modell dargestellt. Das Modell berechnet wie auch schon im Testfall Hoehne / Luce eine zu geringe Steighöhe des Freistrahls. Nach Erreichen der maximalen Steighöhe fällt der Freistrahl in Richtung Boden. Dies ist darauf zurückzuführen, dass in diesem Modell die Außenturbulenz nicht berücksichtigt wird und dass im Modell bei den in diesem Fall vorliegenden geringen Geschwindigkeitsdifferenzen kaum noch eine Verdünnung des Freistrahls stattfindet. Der Aufschlagpunkt auf den Boden liegt in der Nähe der Messwerte, aber die Konzentration ist um ein vielfaches zu hoch.



Abb. 6.15: Verlauf der Strahlmittellinie beim senkrechten CO₂ Freistrahl



Abb. 6.16: Verlauf der Konzentration auf der Strahlmittellinie beim senkrechten CO₂ Freistrahl

Eine etwas bessere Übereinstimmung mit den Messwerten ergibt eine Erweiterung des Schatzmann-Modells nach [6.19].

In der folgenden Tabelle sind die Messungen von Donat im Vergleich zu den Berechnungen mit dem empirischen Modell von Hoot, Meroney und Perterka (HMP) eingetragen. Dieses Modell berechnet eine etwas zu geringe maximale Steighöhe und eine etwas zu große Entfernung des Maximums vom Freisetzungsort. Gravierender ist aber die im Vergleich zu den Messwerten deutlich zu hohe Konzentration im Scheitelpunkt der Freistrahlmittellinie.

	Ys / D [-]	Xs / D [-]	Cs / Cj [Vol%]	Xa / D [-]	Ca / Cj [Vol%]
Experiment 1	34	158	0,67	582	0,17
Experiment 2	32	158	0,48	371	0,14
HMP	26	180	2,1	751	0,38
Schatzmann	26	40	6,4	340	2,7

Tabelle 6.1: Vergleich der Berechnungen mit den Experimenten von Donat

6.2 Impulsfreie Freisetzung

Zusätzlich zu der im Abschnitt 6.1 beschriebenen impulsbehafteten Freisetzung und Ausbreitung von Gefahrstoffen sind impulsarme bzw. impulsfreie Freisetzungs- und Ausbreitungsprozesse praktisch relevant. Als impulsfrei wird eine Freisetzung bezeichnet, wenn der Anfangs- bzw. Freisetzungsimpuls im Vergleich zur Dynamik des Ausbreitungsvorganges vernachlässigbar ist. Der Ausbreitungsvorgang wird als passiv bezeichnet, wenn Schwere- bzw. Dichteeffekte die Ausbreitung eines Stoffes in der Atmosphäre nicht signifikant beeinflussen.

Auch wenn die überwiegende Mehrzahl von Gefahrstoffen eine andere Dichte/Schwere als die Umgebungsluft aufweisen, lässt sich bei jedem Freisetzungsvorgang in mehr oder weniger großer Entfernung vom Freisetzungsort ein Quellabstand definieren, ab dem der durch Vermischung eingetretene Ausgleich von Geschwindigkeits- und Dichteunterschieden im weiteren Verlauf die Annahme passiver Ausbreitung rechtfertigt.

Im Folgenden wird zunächst eine einfache Klassifizierung der am häufigsten im Zusammenhang mit (passiven) Ausbreitungsvorgängen verwendeten Modelltypen vorgestellt. Die Spezifika der Modelltypen und die daraus ableitbaren Möglichkeiten und Grenzen werden dargestellt. Abschließend erfolgt eine kurze Beschreibung zu bestehenden

Modelladaptionen in numerischen Programmpaketen, die in Deutschland häufig Anwendung finden.

6.2.1 Windfeldmodelle

Die einen Ausbreitungsvorgang in den bodennahen Luftschichten der Atmosphäre bestimmenden Wind- und Turbulenzfelder werden wesentlich durch die Geländeform, die aerodynamische Rauigkeit der vom Wind überströmten Oberfläche, durch Strömungshindernisse wie zum Beispiel Gebäude oder Bewuchs und durch Strahlung bzw. thermische Schichtung der Atmosphäre beeinflusst. Dabei hängt die Relevanz der Einflussfaktoren im Einzelfall vom Ausbreitungs- und Betrachtungsmaßstab und der Charakteristik der Freisetzung und Ausbreitung ab.

6.2.1.1 1D-Windfeldmodelle

Die für die Simulation des advektiven Transportes erforderlichen Windinformationen bzw. felder werden mit Hilfe sogenannter Windfeldmodelle bereitgestellt. Die einfachste Form eines solchen Modells sind sogenannte **'uniform flow models'**, bei denen alle Wind- und Turbulenzgrößen im gesamten Strömungsraum den gleichen Wert besitzen. Derartige Modelle bilden die Grundlage einfacher Ausbreitungsabschätzungen oder werden häufig in einfachen Ausbreitungsmodellen (z. B. sog. Gaußmodellen) verwendet.

Für horizontal homogenes Gelände ohne einen Ausbreitungsvorgang signifikant beeinflussende Einzelhindernisse werden **1D-Windfeldmodelle** in Form von Windprofilen verwendet. Windprofile beschreiben die vertikale Verteilung von Strömungs- und Turbulenzeigenschaften innerhalb der Windgrenzschicht. Als Windgrenzschicht wird der bodennahe Bereich Atmosphäre bezeichnet, in dem die Windgeschwindigkeit von dem vom Gleichgewicht aus Druck- und Corioliskraft bestimmten Wert in der freien Atmosphäre auf den Wert Null an der Erdoberfläche (sog. Haftbedingung) abgebremst wird. Die Luftströmung in Bodennähe wird durch Bebauung und Bodenunebenheiten beeinflusst. Abbildung 6.17 zeigt in vereinfachter Form Vertikalprofile der mittleren Windgeschwindigkeit über verschieden raue Geländeoberflächen.



Abb. 6.17: Vertikalprofile der mittleren Windgeschwindigkeit über verschieden rauen Geländeoberflächen (n: Windprofilexponent, z₀: Rauhigkeitslänge, d: Versatzhöhe des Windprofils, h: mittlere Höhe der Gebäude oder des Bewuchses)

Die Dicke der Windgrenzschicht hängt von der aerodynamischen Rauigkeit des Geländes und von der Länge der vom Wind überstrichenen Fläche ab und reicht typischerweise von wenigen 100 m bis zu einigen Kilometern. Eine umfassendere Darstellung der Windverhältnisse in der bodennahen Atmosphäre gibt u.a. Kraus [6.28].

Das Vertikalprofil der mittleren Windgeschwindigkeit wird häufig in vereinfachter Form für die gesamte Windgrenzschicht mit Hilfe eines Potenzansatzes (Gl. 6.35) angenähert. Der Profilexponent n in Gl. 6.35 ist von der atmosphärischen Stabilität und der aerodynamischen Rauigkeit des überströmten Geländes abhängig. Speziell für die von der Oberflächen-rauigkeit direkt beeinflussten bodennahen 10% der Windgrenzschicht (sog. Prandtl-Schicht) lässt sich zeigen, dass die Zunahme der Windgeschwindigkeit mit der Höhe vom Logarithmus der Höhe entsprechend (6.36) abhängig ist.

$$u(z) = \frac{u^*}{k} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right)$$
(6.36)

Für GI. 6.36 wird angenommen, dass in der bodennahen Windgrenzschicht mechanisch, d.h. durch Windscherung erzeugte Turbulenz dominiert und der longitudinale Druckgradient Seite 194

gegen Null geht. In Gl. 6.36 ist z_0 die sogenannte Rauhigkeitslänge, die ein Maß für die effektive aerodynamische Rauigkeit der überströmten Hindernisse darstellt. Weiterhin sind u* die Schubspannungsgeschwindigkeit und k die von-Kármán Konstante. Mit Hilfe von Ähnlichkeitsbetrachtungen kann gezeigt werden, dass sich eine allgemeinere, auch für durch thermische Schichtung beeinflusste Windgrenzschichten gültige Form von Gl. 6.35 finden lässt. Im Rahmen der Monin-Obukhov-Theorie wird das logarithmische Windprofil verallgemeinert zu:

$$\frac{k}{u^*}\frac{\partial u}{\partial z} = f\left(\frac{z}{L}\right)$$
(6.37)

wobei f(z/L) eine universelle, nur von der den Schichtungszustand der Atmosphäre charakterisierenden Obukhov-Länge L und von der Höhe z abhängige Funktion ist. Für eine neutral geschichtete Atmosphäre ist f(z/L) = 1 und man erhält mit GI. 6.37 das Windprofil der GI. 6.36. Für nichtneutrale atmosphärische Schichtungen sind angepasste Ansätze für die Funktion f(z/L) zu wählen [6.33], die modifizierte Profilfunktionen liefern.

In praxisrelevanten Freisetzungsszenarien innerhalb dichter Bebauung oder in Industrieanlagen und bei signifikanter Luftbewegung ist bodennah ein Schichtungseinfluss nicht zu erwarten. Um die bei dicht angeordneter Oberflächenrauigkeit (komplexe Industrieanlagen, städtische Bebauung, Waldflächen o.ä.) beobachtete vertikale Verschiebung des mittleren Windprofils berücksichtigen zu können, wird in beiden Profilansätzen zusätzlich eine Versatzhöhe d definiert und als Höhenkoordinate entsprechend z-d verwendet (vergl. Abbildung 6.17).

In der praktischen Ausbreitungsrechnung verwendete Vertikalprofile der Wind- und Turbulenzeigenschaften werden u.a. in VDI 3783/8 [6.20] bzw. ESDU [6.21] bereitgestellt. Eindimensionale Windfeldmodelle / Windprofile gelten für horizontal homogene Wind- und Ausbreitungsszenarien bzw. horizontal homogene Geländeeigenschaften und bilden die natürlichen Verhältnisse im langzeitlichen Mittel ab. Für nicht-neutrale, temperaturgeschichtete Atmosphäre werden die Windprofile in modifizierter, schichtungsabhängiger Form, wie zum Beispiel in Gleichung 6.37 angegeben. Bei starker orographischer Gliederung der überströmten Oberfläche oder signifikantem Einfluss von Einzelhindernissen auf das Strömungsfeld werden auch im zeitlichen Mittel erhebliche Abweichungen von den idealisierten Profilformen beobachtet.

6.2.1.2 Diagnostische Windfeldmodelle

Mit Hilfe von auf physikalischen Erhaltungsgleichungen beruhenden 2D/3D Windfeldmodellen können die für die Ausbreitungsrechnung erforderlichen Windinformationen auch in komplex gegliedertem Gelände oder für bebautes Gebiet bereitgestellt werden. In Abhängigkeit von den verwendeten Erhaltungsgleichungen werden diagnostische und prognostische Windfeldmodelle unterschieden.

Diagnostische Windfeldmodelle basieren auf der Massenerhaltungsgleichung. Aus einem 'intelligent geschätzten' oder gemessenen Initialwindfeld wird für meist konstante Randbedingungen mittels vergleichsweise einfacher Variationsrechnungen ein massenkonsistentes / divergenzfreies Windfeld bestimmt. Das Verfahren wurde unter anderem für die Simulation von zeitgemittelten Windfeldern in komplexer Stadtbebauung verwendet [6.22] und ist mit TALdia [6.23] Bestandteil des im Bereich Umweltmeteorologie etablierten Ausbreitungsmodells AUSTAL2000. Die Ergebnisgüte eines diagnostischen Windfeldmodells hängt wesentlich vom verwendeten Initialwindfeld, der Komplexität der umströmten Geometrie und der Wirkung von Trägheitskräften im Strömungsraum ab.

6.2.1.3 Prognostische Windfeldmodelle

Auf den, im physikalischen Sinne vollständigen, prognostischen Transport- und Erhaltungsgleichungen für Impuls, Energie und Masse basieren sogenannte **prognostische Windfeldmodelle**. Zur Berechnung des turbulenten Strömungsfeldes müssen die Impulserhaltungsgleichungen (Navier-Stokes-Gleichungen) gelöst werden. Die Gleichungen werden meist für ein ortsfestes Bezugssystem formuliert, was als Euler'sche Darstellung bezeichnet wird. Das System partieller nichtlinearer Differentialgleichungen wird geeignet diskretisiert und mit Hilfe numerischer Verfahren in einem diskreten Berechnungsgitter für quasi-stationäre oder variable meteorologische Randbedingungen gelöst.

Strömungsrelevante Hindernisse können im numerischen Rechengitter entsprechend berücksichtigt werden. Prognostische Windfeldmodelle sind in den meisten Fällen numerisch aufwändiger als diagnostische Windfeldmodelle, sie können jedoch prinzipiell lokal genauere Windinformationen bereitstellen. Die Anwendungsfelder stimmen mit denen der diagnostischen Windfeldmodelle überein. Für eine detaillierte Darstellung der auch als 'computational fluid dynamics' / CFD bezeichneten Modelle sei auf weiterführende Literatur z.B. [6.24] verwiesen.

Wesentlich für Ausbreitungssimulationen in den bodennahen Luftschichten der Atmosphäre ist, dass prognostische Modelle aus Gründen der verfügbaren Rechnerkapazität nicht in der Lage sind, die für Ausbreitungssimulationen relevanten Strömungsstrukturen in Raum und Zeit vollständig aufzulösen (direkte numerische Simulation - DNS). Es werden daher die Erhaltungsgleichungen in modifizierter Form verwendet und entweder Strömungsphänomene im zeitlichen Mittel simuliert (Reynolds Averaged Navier-Stokes / RANS-Modelle) oder die Grobstruktur turbulenter Strömungsbewegungen wird explizit durch die Verwendung gefilterter Transportgleichungen abgebildet (Large Eddy Simulation / LES-Modelle).

RANS-Modelle gelten sowohl in der meteorologischen Modellierung, als auch in der Simulation technischer Strömungen als etabliert und sind auch mit durchschnittlicher Rechnerkapazität handhabbar (siehe Abbildung 6.18, Beispielwindfelder in bebauter Struktur). Im Ergebnis steht allerdings wiederum nur ein Windfeld im zeitlichen Mittel zur Verfügung, dass sich in der Natur nicht oder nur bei Mittelung über Zeiträume von mehreren Stunden für quasi-stationäre meteorologische Randbedingungen beobachten lässt.



Abb. 6.18: Mit RANS-Modellen simulierte bodennahe Horizontalwindfelder.
(a) Strömungs- und Ausbreitungsmodell MISKAM, Ver. 6.3; mit freundlicher Genehmigung des Ingenieurbüro Lohmeyer
(b) ANSYS Fluent Version 16.2; mit freundlicher Genehmigung von Dr. A.J. Rakai



Abb. 6.19: Mit einem LES-Modell simulierte momentane Windströmung in einer bebauten Struktur (Quelle: Fast3D-CT, mit freundlicher Genehmigung von Dr. G. Patnaik, US Naval Research Laboratory)

LES-basierte Windfeldmodelle sind mit Blick auf die Simulation störfallartiger Gefahrstofffreisetzungen zu bevorzugen, da sie ein in Raum und Zeit variables Windfeld erzeugen (Beispiel Abbildung 6.19, momentanes Vektorfeld in komplexer Geometrie). In Abhängigkeit von der raum-zeitlichen Auflösung des Modells ist der Berechnungsaufwand jedoch deutlich größer als bei RANS Modellen (typisch Faktor 10...100). Zu berücksichtigen ist weiterhin, dass eine hinreichend lange Simulation der in Raum und Zeit variablen Windfelder realisiert werden muss, um im Zuge der Ausbreitungssimulation verlässliche Aussagen zu mittleren Konzentrationsverteilungen oder gar zu möglichen Extrema der Immissionsbelastung machen zu können.

Zur Verdeutlichung der Unterschiede zwischen den von verschiedenen Modelltypen erzeugten Ergebnissen zeigt Abbildung 6.20 exemplarisch den zeitlichen Verlauf des Betrags der bodennahen Windgeschwindigkeit, wie dieser mit einem DNS-, LES- und einem RANS-Modell für quasi-stationäre Randbedingungen vorhergesagt wird. Direkte numerische Simulationen sind auf typischen Zeit- und Längenskalen bodennaher atmosphärischer Seite 198 Ausbreitungsprobleme wegen des extrem hohen Rechenaufwandes, wenn überhaupt, nur für stark vereinfachte Ausbreitungsszenarien realisierbar. Mittels LES- und RANS-Simulationen können auch Hinderniseinflüsse und Bauwerksdurch- und Gebäudeumströmungen angemessen berücksichtigt werden. Wirbelauflösende Simulationen mit einem LES-Modell lassen erfahrungsgemäß auch im zeitlichen Mittel qualitativ bessere Ergebnisse als ein RANS-Modell erwarten.



Abb. 6.20: Illustration der Unterschiede zwischen DNS, RANS und LES in Bezug auf die zeitliche Auflösung der Fluktuationen einer Strömungsgröße.

6.2.2 Ausbreitungsmodelle

Die für die Ausbreitungssimulation in einem Strömungs- bzw. Windfeld verwendeten Modelltypen können in ähnlicher Form wie die Windfeldmodelle klassifiziert werden. Es werden dimensionsanalytische Modelle, Gaußmodelle, Largange'sche Modelle und Euler'sche Ausbreitungsmodelle unterschieden.

6.2.2.1 Dimensionsanalytische Modelle

Modellansätze auf der Grundlage der Dimensionsanalyse können verwendet werden, um einen funktionalen mathematischen Zusammenhang physikalischer Größen bei Naturphänomenen zu bestimmen, ohne die dem physikalischen Vorgang zugrundeliegenden exakten Gesetzmäßigkeiten zu kennen. Hierbei wird lediglich ausgenutzt, dass jede physikalische Größe eine definierte physikalische Dimension hat und ein funktionaler Zusammenhang bezüglich der Dimension homogen sein muss. Eine mathematische Beschreibung dieser Zusammenhänge ist durch das PI-Theorem (z.B. in Görtler [6.25]) gegeben.

Hat man eine (physikalisch) sinnvolle Vermutung über die Einflussgrößen eines physikalischen Problems, so liefert die Dimensionsanalyse Fundamentalzusammenhänge der in den Gleichungen enthaltenen Variablen, welche anschließend mit Hilfe experimenteller Daten quantifiziert werden. Die auf dimensionsanalytische Weise ermittelten, meist einfachen funktionalen Zusammenhänge werden als **dimensionsanalytische Modelle** bezeichnet.

Vorteilhaft ist, dass in der Regel nur sehr wenige Eingangsgrößen für eine Ausbreitungssimulation benötigt werden. Die Modelle gelten als einfach handhabbar und robust. Als Nachteilig erweist sich, dass die Modelle in der Regel nicht universell verwendet werden können, da die im Rahmen der Dimensionsanalyse zu treffenden Annahmen die Anwendung auf spezifische Ausbreitungsszenarien (z.B. Schwergasausbreitung) beschränken. Typische Implementierungen dimensionsanalytischer Modelle stellen das Schwergasausbreitungsmodell nach Britter-McQuaid [6.26] bzw. VDI 3782 Blatt 2 [6.27] dar.

6.2.2.2 Gaußmodelle

Gaußmodelle basieren auf der allgemeinen Advektions-Diffusions-Gleichung und beschreiben atmosphärische Ausbreitungsvorgänge in stark vereinfachter, idealisierter Form. Es wird von horizontal homogenen Ausbreitungsverhältnissen ausgegangen und die die Ausbreitung beeinflussenden atmosphärischen Prozesse und Phänomene werden nur in Form vertikaler und lateraler Ausbreitungsparameter (Aufweitung einer Gefahrstofffahne oder -wolke) im Modell berücksichtig.

Die in der Regel empirisch bestimmten Ausbreitungsparameter hängen im Wesentlichen von der aerodynamischen Rauigkeit des überströmten Geländes bzw. dem Geländetyp und vom Schichtungszustand der Atmosphäre ab. Die mittlere Konzentration über den Querschnitt einer sich ausbreitenden Konzentrationsfahne oder - wolke sind unter diesen Annahmen gaussförmig verteilt. Die Aufweitung ist dann eine Funktion des Quellabstandes und wird in vertikaler und lateraler Richtung in der Regel verschieden angenommen.

Ein Gaußfahnenmodell beschreibt die impulsfreie stationäre Freisetzung aus einer punktförmigen Quelle. Ein möglicher Austrittsimpuls bzw. Auftriebseffekte können mit einem der Ausbreitungsrechnung vorgeschaltetem Fahnenüberhöhungsmodell abgebildet werden. Komplexe Quellgeometrien werden durch Überlagerung mehrerer Punktquellen angenähert. Spontanfreisetzungen oder variable Emissionsmassenströme können mit einem Gaußwolkenmodell näherungsweise abgebildet werden. Bei variabler Freisetzungsrate wird der Freisetzungsvorgang durch eine Serie von Einzelfreisetzungen mit unterschiedlicher angenähert Immissionsmuster der sich Quellstärke und die ausbreitenden Einzelfreisetzungen werden in Raum und Zeit überlagert (siehe Abb. 6.22). Weiterführende Erläuterungen zu Gaußschen Gasausbreitungsmodellen können de Vischer [6.33] entnommen werden.



Abb. 6.22: Illustration zur Gauß'schen Schadstoffausbreitung (Gaußfahnenmodell).

Gaußwolkenmodelle sind prinzipiell in der Lage, die Ausbreitung z.B. in heterogenen, durch Orographie und wetterbedingte Windrichtungs- und Windstärkewechsel beeinflussten Strömungsfeldern abzubilden. Allerdings gilt die Ableitung entsprechender Ausbreitungsparameter als sehr unsicher und Vorhersagen als entsprechend ungenau. Als Folge der vereinfachten, semi-empirischen Beschreibung der Mischungsprozesse stark im bodennahen Windfeld liefern Gaußmodelle zeitgemittelte Imissionskonzentrationen für idealisierte mittlere, quasi-stationäre Ausbreitungsszenarien. Aufgrund der einfachen Implementierung wird dieser Modelltyp dennoch häufig für eine erste abschätzende Bewertung von Ausbreitungsvorgängen verwendet. Vorteilhaft ist zudem, dass nicht zwingend ein Windfeld für die Ausbreitungssimulation zur Verfügung stehen muss. Implementierungen für praktische Ausbreitungsrechnungen im Bereich Umweltmeteorologie

werden in den VDI-Richtlinien 3782 Blatt 3 [6.27] und VDI 3945 Blatt 1 [6.34] sowie für den Bereich Störfallsimulationen in der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1 [6.6] beschrieben.

6.2.2.3 Largange'sche Modelle

Lagrange'sche Ausbreitungsmodelle modellieren atmosphärische Ausbreitungsvorgänge mit Hilfe von Bewegungstrajektorien einzelner 'Partikel' eines hinreichend großen Partikelensembles, das sich in einem (turbulenten) Strömungsfeld ausbreitet. Ein Partikel steht stellvertretend für ein sehr kleines, aber noch makroskopisches Volumen eines Gases oder einzelne Teilchen wie z. B. Stäube oder Aerosole. Zur Anwendung des Modelles werden meteorologische Eingangsgrößen (mittleres Windfeld, Windfluktuationen und Diffusionskoeffizienten), Emissionsdaten (zeitabhängiges Quellverhalten) und orographische Informationen (Geländedaten, Hinderniskataster) benötigt.

Die Modellierung des Einflusses der Turbulenz auf den Ausbreitungsvorgang erfolgt durch Überlagerung einer zusätzlichen stochastischen Zufallsbewegung mit normalverteilten, unabhängigen Zuwächsen. Die Güte der Modellergebnisse wird wesentlich durch das verwendete mittlere Windfeld und die Simulation der turbulenten Schwankungsbewegungen beeinflusst.

Für große Zeitskalen im Vergleich zu den charakteristischen Zeitmaßen der Zufallsbewegung (sog. Lagrange'sche Korrelationszeiten) breitet sich eine im Modell freigesetzte Partikelwolke in einer zur klassischen Diffusionsgleichung analogen Form aus. Für physikalisch sicher interpretierbare Ergebnisse sind Mindest-Ausbreitungszeiten (Reisezeit eines Partikels) bzw. Mindest-Ausbreitungswege erforderlich, die ein Vielfaches der Korrelationszeiten bzw. Korrelationslängenmaße betragen. Die Lagrange'schen Korrelationsmaße sind dabei vom Turbulenzverhalten der Strömung, also letztendlich vom Ausbreitungsumfeld (Bebauung, Geländestruktur, Bewuchs etc.) abhängig.

Immissionskonzentrationen werden durch Auszählen der Partikel in einem Bilanzvolumen innerhalb des Ausbreitungsraums bestimmt. Der Auszählvorgang ist grundsätzlich mit einem Stichprobenfehler behaftet, der von der Anzahl der im Rahmen der Simulation freigesetzten Partikel und von der Immissionscharakteristik am Ort des Bilanzvolumens abhängt. Im Vergleich zu einem Gaußwolkenmodell ist bei einem Lagrange'schen Modell die berechnete Konzentrationsverteilung von der Anzahl der freigesetzten Partikel, dem Rechengitter (Bilanzvolumen) und unter Umständen von der Implementierung des stochastischen Modells abhängig. Mit einem Lagrange'schen Modell können durch verteilte Partikelfreisetzungen auch komplexe Quellformen simuliert werden. Schwere-Effekte, chemische Umwandlungen und Deposition können durch entsprechende Anpassung der Partikeleigenschaften abgebildet werden. Als Vorteilhaft erweist sich, dass Partikelmodelle prinzipiell masseerhaltend sind. Eine typische Implementierung eines Lagrange'schen Ausbreitungsmodells für Ausbreitungsberechnungen wird in VDI 3945 Blatt 3 [6.35] vorgestellt.

6.2.2.4 Euler'sche Ausbreitungsmodelle

Bei Euler'scher Ausbreitungsmodellierung wird die vollständige Transportgleichung für Stoffbeimengungen auf einem diskreten Berechnungsgitter mit numerischen Verfahren gelöst. Da die Transportgleichungen für Impuls, Energie und Stoff/Masse für Newton'sche Fluide einen grundsätzlich ähnlichen Aufbau zeigen, ist die Euler'sche Ausbreitungsmodellierung im Allgemeinen integraler Bestandteil eines prognostischen Strömungsmodells bzw. CFD-Modells. Es wird lediglich eine zusätzliche prognostische Gleichung für den Stofftransport numerisch approximiert.

Mit Euler'schen Ausbreitungsmodellen können nahezu beliebige Freisetzungs- bzw. Ausbreitungsvorgänge physikalisch konsistent modelliert werden. Der Simulationsaufwand und die Güte der Näherungslösung hängen wie bei der Strömungssimulation von der verwendeten Diskretisierung und vom verwendeten numerischen Lösungs- bzw. Approximationsverfahren ab.

Typische Vertreter Euler'scher Strömungs- und Ausbreitungsmodelle sind zum Beispiel das mikroskalige Klima- und Ausbreitungsmodell MISKAM [6.30], ANSYS Fluent [6.31] oder entsprechende Implementierungen der open source Software OpenFOAM [6.32].

6.2.3 Anwendungsbereiche, -grenzen der Modelltypen

Dimensionsanalytische Gasausbreitungsmodelle:

- Berücksichtigt bzw. implementierbar: Windgeschwindigkeit und einfache Orographie/Hindernisse
- Anwendungsgrenzen: anwendungs- und/oder hindernisspezifische Modelle f
 ür vereinfachte Szenarien (z.B. wenige Hindernisgeometrien, in der Regel Punktquelle); nur eingeschränkt übertragbar auf komplexere reale Situationen; nicht geeignet in komplexen Hindernisstrukturen; Orographie und bei wechselndem Ausbreitungs-

verhalten wie zum Beispiel dem Übergang von Schwergasausbreitung zu neutraler Gasausbreitung; Modelle liefern in der Regel nur konservative Mittelwerte.

Gaußmodelle:

- Berücksichtigt bzw. implementierbar: Windgeschwindigkeit; einfache Windprofile; atmosphärische Stabilität und Temperaturinversionen; Quellüberhöhung; Deposition; instantane Freisetzungen und oder wechselnde Windverhältnisse (Gauß-Wolkenmodelle)
- Anwendungsgrenzen: kann keine unmittelbar strömungsbeeinflussende Hindernisstrukturen (Gebäude/Orographie) und nur bedingt heterogene Ausbreitungsumgebung (z.B. Rauigkeitswechsel) abbilden; durch Vergleich mit Naturmessungen abgesicherte Ausbreitungsparameter nur für quasi-stationäre Freisetzung verfügbar, guellnaher Bereich (bis zu 100m nach VDI RL 3783/1) und große Entfernungen zur Quelle nicht angemessen abbildbar; Schwergas/Leichtgas-Ausbreitung nur mit vorgeschaltetem, separatem Modell abbildbar

Lagrange'sche Ausbreitungsmodelle

- Berücksichtigt bzw. implementierbar: komplexe Hindernisstrukturen / Orographie sowie wechselnde Strömungsrandbedingungen mittels geeigneter Windfeldmodelle implementierbar; Quellüberhöhung; Deposition; instantane Freisetzungen abbildbar
- Anwendungsgrenzen: höherer Rechenaufwand als bei Gaußmodellen, Ergebnisqualität limitiert durch die Güte des zugrunde gelegten Strömungsfeldes; Repräsentativität des Ergebnisses ggf. von der Anzahl der simulierten Partikel und der Implementierung des stochastischen Modells abhängig; Schwergaseffekte nicht explizit abbildbar; bei impulsbehafteter Freisetzung aussagefähig erst in einem Mindestabstand vom Freisetzungsort

Euler'sche Ausbreitungsmodelle

 Berücksichtigt bzw. implementierbar:: genauere Strömungs- und Ausbreitungsmodellierung basierend auf den relevanten Erhaltungsgleichungen für Energie, Masse und Impuls; Berücksichtigung von Phasen, Phasenübergängen, chemischen Reaktionen; Hindernisse und Orographie können mit hoher Detailtreue modelliert werden, Ausbreitungsvorgänge können ohne Separation von Schwergas/Leichtgas-Bereich und neutralem Ausbreitungsbereich physikalisch konsistent modelliert werden. • Anwendungsgrenzen: numerisch sehr aufwändig, verlangt vom Anwender fundierte Kenntnisse der zugrundeliegenden Mathematik, Physik, Chemie und in der Modellanwendung, adäquate Modelleingabedaten häufig nicht verfügbar

6.2.4 Besondere Fragestellungen

Im Folgenden werden weitere, grundsätzliche Fragen und Probleme erörtert, die häufig auftreten und nicht spezifisch im Zusammenhang mit einem konkreten Modell stehen.

Überlegungen zur Ausgangssituation einer Simulation

Wie bereits in der Einleitung zum Kapitel 6.2 ausgeführt, ist die Auswahl eines Modells eng verbunden mit der betrachteten Problemstellung. Es wird daher im Allgemeinen ein Modell gewählt, dessen Aussagegüte hinreichend ist, um die Problemstellung zu lösen. Mit wachsender Modellgüte nehmen jedoch auch der Umfang der Anfangs- und Randbedingungen (Modellparameter) und der numerische Aufwand zu, so dass in vielen Situationen ein Modell zwar prinzipiell vorhanden ist, leider aber nicht alle Modellparameter und/oder die notwendige Rechenzeit zur Verfügung stehen. Häufig fehlen z. B. explizit zeitabhängige Parameter des Ausbreitungsvorganges. Bei einer störungsbedingten Freisetzung kann die Freisetzungsdauer im Sekunden- bis Stundenbereich liegen. Die Freisetzung kann nahezu stationär erfolgen oder zum Beispiel selbst zeitabhängig sein.

Zielrichtung der Ausbreitungssimulation

Prinzipiell muss unterschieden werden zwischen

- der Nachrechnung eines realen Einzelereignisses und
- Berechnungen für die Ermittlung von Gefährdungsbereichen.

Die Aussagekraft der Nachrechnung eines realen Ereignisses wird in der Regel begrenzt durch die Kenntnisse über die zeitliche Entwicklung des Emissionsverlaufs und die zur Verfügung stehenden meteorologischen Daten. Vom Deutschen Wetterdienst können z.B. meteorologische Messwerte zur Verfügung gestellt werden, die mindestens über 10 Minuten gemittelt worden sind. Die Übertragbarkeit der Messungen von der Messstation auf einen Standort im Ausbreitungsgebiet wird durch den räumlichen und zeitlichen Abstand zwischen beiden und die unterschiedliche örtliche Lage bzw. Umgebung weiter eingeschränkt. Messungen der Meteorologie am Freisetzungsstandort können Anhaltswerte zur Überprüfung eines Windfeldmodells liefern und unter Umständen zu einer besseren Abschätzung der Konzentrationsverteilung beitragen. Dies ist jedoch in der Regel mit der Anwendung Seite 205 eines Lagrange- oder Euler-Modells und damit auch größerem numerischen Berechnungsaufwand verbunden.

Berechnungen für die Ermittlung von Gefährdungsbereichen werden für innerbetriebliche Planungen, für Genehmigungsverfahren und für die Flächennutzungsplanung durchgeführt. In diesen Fällen wird der Berechnung eine über einen repräsentativen Zeitraum gemittelte Meteorologie zugrunde gelegt. Über Variantenrechnungen werden Gefährdungsbereiche für verschiedene Windrichtungen ermittelt. Die Auswahl des Modells richtet sich bei innerbetrieblichen Planungen nach dem Realitätsanspruch und bei Genehmigungen oft auch nach behördlichen Vorgaben. Ziel ist dabei nicht unbedingt ein "richtiges" Ergebnis, sondern eine belastbare Planungsgrundlage.

Modellierung eines zeitlich variablen Massestromes

Ein zeitabhängiger Emissionsmassenstrom entsteht z.B. bei der Berücksichtigung des Druckabfalls bei einem Leck in einem Druckgerät oder bei einer Lachenverdunstung. Bei Gauß- oder Lagrange'schen Modellen kann der zeitabhängige Emissionsmassenstrom in Zeitintervallen von mehreren Minuten bis unter Umständen in den Sekundenbereich aufgelöst werden. Bei Emissionsverläufen mit ausgeprägtem Maximum führt die Mittelung innerhalb eines nicht explizit aufgelösten Zeitintervalls zu relevanten Änderungen im Gefährdungsbereich beim Vergleich mit entsprechenden Grenzwerten (AEGL- oder ERPG-Wert; siehe Kapitel 9). Bei Euler'schen Ausbreitungsmodellen kann aufgrund für ein stabiles Lösungsverhalten ohnehin erforderlichen geringen Zeitschrittweiten von einer ausreichend guten Auflösung eines zeitabhängigen Emissionsmassenstroms ausgegangen werden.

Eine Sonderrolle nehmen plötzliche Freisetzungen ein. Unter Umständen können diese als Volumenquelle aufgefasst werden, deren Stoffe sich dann (instationär) ausbreiten. Sollten plötzliche Freisetzungen aus Prozessen stammen, welche die lokalen Eigenschaften der transportierenden Luft stark beeinflussen (Explosionen, hohe Freisetzungsenergie/-impuls), so sind gesonderte Betrachtungen erforderlich.

Partikelzahl in Lagrange'schen Ausbreitungsmodellen

Die Konzentrationsverteilung eines Stoffes wird bei einem Lagrange schen Partikelmodell als räumlicher und zeitlicher Mittelwert über das Volumenelement eines dreidimensionalen Bilanzgitters und eines Zeitintervalls berechnet. Das Rechengitter muss entsprechend dem zu erwartenden Konzentrationsgradienten im interessierenden Entfernungsbereich angepasst werden. Im Nahbereich der Quelle sind wegen starker Konzentrationsgradienten kleinere Volumina zu wählen, als in größerer Entfernung, in der eine größere Schrittweite in Strömungsrichtung aufgrund der größeren Fahnen- oder Wolkenabmessungen bei der Konzentrationsmittelung über das Volumen keinen großen Mittelungsfehler ergibt.

Bei einem Lagrange schen Partikelmodell werden Zufallszahlen z. B. für die Berechnung der turbulenten Schwankungsgrößen verwendet. Wenn man die gleiche Rechnung mit unterschiedlichen Zufallszahlen wiederholt, ist festzustellen, dass die Anzahl der Simulationspartikel in einem Volumenelement und damit auch der für diese Zelle bestimmte Konzentrationswert zufälligen Schwankungen unterliegen. Damit ist das Ergebnis der Ausbreitungsrechnung immer mit einer gewissen Unsicherheit, dem Stichprobenfehler (statistische Unsicherheit), behaftet. Der Stichprobenfehler kann durch die Erhöhung der Partikelzahl gesenkt werden, allerdings erhöht sich damit auch die benötigte Rechenzeit. Alternativ kann das zur Bilanzierung verwendete Volumenelement vergrößert werden, was aber zu einer geringeren räumlichen Auflösung des Konzentrationsverlaufs mit der Entfernung zur Quelle führt.

Gemäß VDI-Richtlinie 3783 Blatt 13 [6.40] gibt die statistische Unsicherheit, berechnet als statistische Streuung des berechneten Immissionskennwertes, den um den berechneten Wert zentrierten Wertebereich an, innerhalb dessen der tatsächliche Modellwert zu erwarten ist. Eine Unsicherheit von 20 % beispielsweise besagt, dass der tatsächliche Wert mit einer Wahrscheinlichkeit von 68 % im Bereich \pm 20 % und mit einer Wahrscheinlichkeit von 95 % im Bereich \pm 40 % um den berechneten Wert (Erwartungswert) zu erwarten ist.

Gitterabhängigkeit in CFD-Rechnungen:

Die Auswahl eines geeigneten Rechengitters ist eine Aufgabe, die Erfahrung im Umgang mit dem Simulationstool und/oder eine systematische Analyse der Gitterabhängigkeit von Berechnungsergebnissen erfordert. Oft existieren Einschränkungen bei der prinzipiellen Gitterstruktur (strukturiert, unstrukturiert) und die Gitterwahl ist von der numerischen Abbildung (Diskretisierung) des korrespondierenden Gleichungssystems abhängig. Das Ergebnis einer numerischen Simulation sollte bei einer Verfeinerungen des Berechnungsgitters keine signifikanten Änderungen zeigen. Allerdings ist die Annahme, dass bei beliebiger Verfeinerung der Gitterweite die Ergebnisse gegen exakte Ergebniswerte konvergieren numerisch für nichtlineare Systeme oft nicht erfüllt. Deshalb sind der Nachweis eines zweckmäßig gewählten Berechnungsgitters, zum Beispiel mittels Richardson-Extrapolation, und eine kritische Interpretation der Ergebnisse von CFD-Rechnungen unabdingbar.

Einfluss von Orographie und Oberflächenrauigkeit auf die Ausbreitung:

Orographie und Oberflächenrauigkeit bestimmen maßgeblich das Turbulenz- und Strömungsverhalten in den bodennahen Luftschichten, in denen die Ausbreitung erfolgt. Wie stark dies in einem Modell zu berücksichtigen ist, hängt von der Problemstellung ab. Hinreichend oberhalb von Strömungshindernissen sind Turbulenz und Strömungsgeschwindigkeit weniger ortsabhängig als innerhalb der Hindernisschicht.

Es ist daher im Einzelfall zu prüfen, ob die unter Abschnitt 6.2.1.1 beschriebenen 1D Windfeldmodelle den Genauigkeitsanforderungen an die Ausbreitungsrechnung genügen. Soll zum Beispiel bodennahe Ausbreitungen in einem Industriegebiet oder städtisch gegliedertem Raum oder mit hoher Auflösung nahe markanter Einzelhindernisse ermittelt werden, so muss das korrespondierende Windfeld (siehe Abschnitt 6.2.1.2 und 6.2.1.3) für eine verlässliche Ausbreitungsrechnung bereitgestellt werden.

Verfügbarkeit von Modelleingabedaten / erforderliche Anfangs- und Randbedingungen

Eine weitere Schwierigkeit bei der Simulation störungsbedingter Freisetzungen resultiert aus den für verschiedene Modelltypen erforderlichen Eingabedaten. Insbesondere für instantane Freisetzungen sind realistische Rand- und Anfangsbedingungen in der Regel nicht verfügbar und nur bedingt sinnvoll abschätzbar. Das Problem verschärft sich mit zunehmender Komplexität der Modelle, da aufwändigere Berechnungen im Allgemeinen eine vollständigere Beschreibung der Rand- und Anfangsbedingungen des Ausbreitungsvorganges erfordern und sich Unsicherheiten in Modelleingangsdaten unter Umständen noch gravierender auf die Simulationsergebnisse auswirken, als bei einfacheren Simulationswerkzeugen. Sind die Freisetzungs- und Ausbreitungsbedingungen nicht hinreichend genau bekannt, so kann zunächst im Rahmen einer Sensitivitätsanalyse geprüft werden, wie sich Zielgrößen der Simulation bei sinnvoller Variation der Eingabegrößen eines Modells ändern.

6.2.5 Modellimplementierung / Software

6.2.5.1 Dimensionsanalytische Modelle

6.2.5.1.1 VDI 3783 Blatt 2

In der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 2 "Ausbreitung von störfallbedingten Freisetzungen schwerer Gase - Sicherheitsanalyse" [6.27] wird ein Modell für die Ausbreitung von, im Vergleich zu Luft, schweren Gasen beschrieben. Im Kapitel 2 "Anwendungsbereich" der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 2 wird festgelegt, welche Gase als schwer im Sinne der Richtlinie anzusehen sind. Danach sind Gase "schwer", wenn sie folgende Kriterien erfüllen:

 Die Dichte des Gases am Freisetzungsort ist größer als die Luftdichte, die in der Richtlinie mit 1,2 kg/m³ angesetzt wird:

$$\frac{\rho_{\text{Gas}} - \rho_{\text{Luft}}}{\rho_{\text{Luft}}} > 0,16 \tag{6.38}$$

• Bei spontaner Freisetzung ist das Quellvolumen V₀ > 0,1 m³ bzw. bei kontinuierlicher Freisetzung der Quellvolumenstrom \dot{V}_0 > 1 10⁻³ m³/s.

Für die Bestimmung der Gasdichte werden folgende Fälle unterschieden:

Fallgruppe	Gasdichte am Freisetzungsort
gasförmige Gase	Dichte des Gases bei Prozesstemperatur und
	Umgebungsdruck
drucklos verflüssigte Gase	Dichte des Gases bei Prozesstemperatur (maximal
	Siedetemperatur) und Umgebungsdruck
unter Druck verflüssigte Gase	Dichte des Gases bei Siedetemperatur
unter Druck verflüssigtes Ammoniak	Dichte = 1,4 kg/m ³
und sich ähnlich verhaltende Gase	

Das Quellvolumen bzw. der Quellvolumenstrom werden aus der freigesetzten Masse bzw. bei kontinuierlicher Freisetzung aus dem Massenstrom und der Gasdichte <u>bei 15 °C</u> berechnet. Wird das Gas schlagartig freigesetzt, so handelt es sich um eine spontane Freisetzung. Mit kontinuierlich wird eine Freisetzung bezeichnet, bei der ein konstanter Volumenstrom über eine sehr lange Zeit emittiert.

Schwere Gase werden nicht wie leichte oder dichteneutrale Gase durch die Bewegung der Luft weiter getragen und verteilt, sondern besitzen als Schwergaswolke oder -fahne eine ausgeprägte Eigendynamik. Durch den Dichtesprung am Rand der Gaswolke wird die turbulente Vermischung mit der Umgebungsluft und damit die Auflösung der Gaswolke vermindert.

Bedingt durch negative Auftriebskräfte breitet sich die Schwergaswolke in einer flachen, bodennahen Schicht aus. In der Regel befinden sich in dieser bodennahen Schicht komplex strukturierte Hindernisse (Gebäude, Industrieanlagen), die zumindest im Nahbereich der Freisetzung nicht als Rauigkeiten, wie in der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1, parametrisiert werden dürfen, sondern als Einzelhindernisse zu betrachten sind. Einfache analytische oder numerische Modelle können in diesen Fällen nicht angewendet werden.

Die VDI-Richtlinie 3783 Blatt 2 basiert daher auf Ergebnissen, die in systematisch durchgeführten Windkanalversuchen gewonnen worden sind. Durch Anwendung dimensionsanalytischer Zusammenhänge können die im kleinskaligen Modell gewonnenen Erkenntnisse auf die in der Realität interessierenden Freisetzungsmengen und Umgebungsbedingungen übertragen werden. Weitere Informationen zu der Dimensionsanalyse, den getroffenen Annahmen und Vereinfachungen sind der VDI-Richtlinie zu entnehmen. Die für die Umrechnung benötigten charakteristischen Größen sind wie folgt definiert:

Spontane Freisetzung

Kontinuierliche Freisetzung

$$\begin{split} \mathbf{L}_{ci}\left[\mathbf{m}\right] = \left(\mathbf{V}_{0}\right)^{\frac{1}{2}} \\ \mathbf{T}_{ci}\left[\mathbf{s}\right] = \left(\frac{\mathbf{L}_{ci}}{\mathbf{g}'}\right)^{\frac{1}{2}} \\ \mathbf{U}_{ci}\left[\mathbf{m} / \mathbf{s}\right] = \left(\mathbf{L}_{ci} \mathbf{g}'\right)^{\frac{1}{2}} \\ \mathbf{g}' = \mathbf{g} \frac{\rho_{Gas} - \rho_{Luft}}{\rho_{Luft}} \end{split}$$

 $L_{cc} [m] = \left(\frac{\dot{V}_0^2}{g'}\right)^{\frac{1}{5}}$ $T_{cc} [s] = \left(\frac{\dot{V}_0}{{g'}^3}\right)^{\frac{1}{5}}$ $U_{cc} [m/s] = \left(\dot{V}_0 {g'}^2\right)^{\frac{1}{5}}$

In den in der Richtlinie aufgeführten Ausbreitungsgebieten werden die charakteristischen Längen zur Bestimmung von Abständen der Quelle zu Strömungshindernissen und den Abmessungen der Strömungshindernisse verwendet.

Die Maximalkonzentrationen wurden bei den Experimenten bei der Windgeschwindigkeit U_{ci} bzw. U_{cc} festgestellt, wobei diese Geschwindigkeit in der Höhe der charakteristischen Länge (L_{cc} oder L_{ci}) gemessen worden ist. Da die Zielsetzung der Experimente die (konservative) Bestimmung des explosionsgefährdeten Bereiches bei der Freisetzung eines brennbaren Gases war, wurden eine geringe Bodenrauigkeit und eine indifferente Temperaturschichtung im Windkanalversuch realisiert. Die Konzentrationsmessungen wurden dann mit der charakteristischen Windgeschwindigkeit durchgeführt.

Die Windkanalergebnisse decken das quellnahe Ausbreitungsgebiet ab, in dem die Gaskonzentration durch die Vermischung mit der Umgebungsluft bis auf etwa 1% der Quellkonzentration abgesunken ist. Bei der weiteren Ausbreitung wird davon ausgegangen (siehe auch VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1 [6.6]), dass der Schwergascharakter nicht weiter berücksichtigt werden muss und die weitere Ausbreitungsberechnung mit der VDI Richtlinie 3783 Blatt 1 für leichte und dichteneutrale Gase durchgeführt werden kann.

Wie in Marotzke [6.36] dargestellt, wird in der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 2 das explosionsfähige Volumen bei einer kontinuierlichen Freisetzung aus der oberen und unteren Zünddistanz und charakteristischen Größen abgeschätzt:

$$V_{\text{Ex mittel}} = \frac{\dot{V}_{0}}{U_{cc}} (UZD_{\text{mittel}} - OZD_{\text{mittel}})$$

$$V_{\text{EX ung}} = \frac{\dot{V}_{0}}{U_{cc}} (UZD_{\text{ung}} - (2OZD_{\text{mittel}} - OZD_{\text{ung}}))$$
(6.38)

Bei einer spontanen Freisetzung wird konservativ die gesamte freigesetzte Masse als explosionsfähig angenommen, da nicht ausgeschlossen werden kann, dass das Innere der Gaswolke gerade die obere Explosionsgrenze und der äußere Rand die untere Explosionsgrenze erreicht hat. Die explosionsfähige Masse ergibt sich dann durch Multiplikation mit der Gasdichte bei einer Temperatur von 15 °C:

$$m_{\text{EXmittel/ung}} = V_{\text{Exmittel/ung}} \rho(T = 15^{\circ}\text{C})$$
(6.39)

Dieser konservative Ansatz, die gesamte freigesetzte Masse wird als explosionsfähig angenommen, führt jedoch zu der nicht plausiblen Situation, dass sich bei einem gleich bleibenden Massenstrom beim Übergang von spontaner zur kontinuierlichen Freisetzung die explosionsfähige Masse auf ca. 20% des Wertes für eine spontane Freisetzung reduziert.
Bei einer Lachenverdampfung von tiefkalten Gasen wie z. B. LNG ist der Massenstrom von der Zeit abhängig und hat ein ausgeprägtes Maximum wenn die maximale Lachenfläche erreicht wird. Entsprechend Abschnitt 4.3 der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 2 wird die zeitliche Entwicklung des Massenstroms durch zeitliche Abschnitte mit konstantem Massenstrom (Treppenfunktion) angenähert. In Abhängigkeit von den gewählten Zeitintervallen ergeben sich hierbei unterschiedliche Mittelwerte und insbesondere verschiedene Maximalwerte.

Nach VDI-Richtlinie 3783 Blatt 2 wird bei einem instationären Massenstrom

- die untere Zünddistanz bei einer spontanen Freisetzung der gesamten freigesetzten Masse mit der
- unteren Zünddistanz bei einer kontinuierlichen Freisetzung des maximalen Massenstroms über die gesamte Freisetzungsdauer

verglichen. Der geringere der beiden Entfernungswerte entscheidet dann über die Verwendung eines spontanen oder kontinuierlichen Freisetzungsszenarios, welches wie oben beschrieben zur Berechnung der explosionsfähigen Masse führt.

Bei einer Lachenverdampfung mit ausgeprägtem Maximum des Massenstroms führt diese Vorgehensweise allerdings zum unrealistischen Ergebnis, dass es sich um eine spontane Freisetzung handeln soll und die gesamte freigesetzte Masse als explosionsfähig angenommen wird. Um eine plausiblere Abschätzung zu erhalten, wird empfohlen die Berechnung mit einem zeitlich gemittelten Massenstrom durchzuführen.

6.2.5.1.2 Britter-McQuaid

Das Britter-McQuaid Modell [6.26] wurde aus einer Dimensionsanalyse heraus entwickelt, in welcher bereits existierende Daten zu sich ausbreitenden Schwergaswolken untersucht wurden. Das Modell ist gut geeignet, wenn plötzliche oder auch kontinuierliche Freisetzungen nahe der Bodenoberfläche erfolgen. Auch zeigen Vergleiche von theoretischer Vorhersage aus dem Modell mit korrespondierenden Messwerten aus Experimenten, das Abschätzungen aus dem Britter-McQuaid-Modell konservativ sind, d.h. sie überschätzen Gefährdungen. Zur Verwendung des Modells sind folgende physikalische Größen relevant:

- Anfangsvolumen: V₀ in m³
- Anfangsvolumenstrom: q₀ in m³/s
- Freisetzungszeitraum: R_d in s
- Anfangsdichte: ρ₀ in kg/m³
- Windgeschwindigkeit in einer Höhe von 10m: u in m/s
- Bezugsentfernung in Windrichtung: x in m
- Dichte der Umgebungsluft: ρ_a in kg/m³.

Die Größen werden allerdings nicht alle simultan benötigt, da im Modell zwischen kontinuierlicher und plötzlicher Ausbreitung unterschieden wird:

Grundgleichungen und Approximationen

Im Modell kann aus der Größe verschiedener Kennzahlen abgeleitet werden, ob man sich noch Gültigkeitsbereich des Modells befindet. Die Arbeitsschritte bei der Verwendung des Modells sollen hier in Form einer Aufzählung präsentiert werden.

Zur Bestimmung des Auftriebsfaktors wird aus den Dichten der involvierten Gase (verdichtetes Gas, Ausbreitungsmedium) zunächst ein Auftriebsfaktor berechnet:

$$g_0 = \frac{g(\rho_0 - \rho_a)}{\rho_a}$$
(6.40)

In (6.40) ist ρ_0 die Anfangsdichte des freigesetzten Gases (kg/m³), ρ_a die Anfangsdichte des Ausbreitungsmediums (z. B. Luft) (kg/m³), g = 9.81 m/s² die Erdfallbeschleunigung und g₀ der Auftriebsfaktor (m/s²), der g₀ > 0 erfüllen muss.

Kontinuierliche oder spontane Freisetzung

Anschließend muss eine charakteristische Quellendimension abgeschätzt werden, wobei zwischen kontinuierlicher und spontane Freisetzung unterschieden wird:

Kontinuierliche Freisetzung:
$$D_c = \sqrt{\frac{q_0}{u}}$$
 (6.41)
Spontane Freisetzung: $D_i = \sqrt[3]{V_0}$

In (6.41) sind D_c und D_i die Quelldimensionen für kontinuierliche bzw. für plötzliche Freisetzungen, q_0 der Anfangsvolumenstrom (m³/s), u die Windgeschwindigkeit (m/s) in einer Höhe von 10 m und V₀ das Anfangsvolumen (m³) des verdichteten Gases. Damit lassen sich nun die Kriterien definieren, ob eine Freisetzung verdichteter Gase nun durch das Britter-Mc-Quaid-Modell beschrieben werden kann:

Kontinuierliche Freisetzung:

$$\sqrt[3]{\frac{g_{0} q_{0}}{u^{3} D_{c}}} \ge 0,15$$

$$\sqrt[3]{\frac{g_{0} V_{0}}{u D_{i}}} \ge 0,2$$
(6.42)

Spontane Freisetzung:

Ein nützliches Kriterium zur Abschätzung, ob eine kontinuierliche oder eine spontane Freisetzung vorliegt, gibt die Größe:

$$W = \frac{u R_d}{x}$$
(6.43)

wobei R_d die Freisetzungszeit (s), u die Windgeschwindigkeit (m/s) in einer Höhe von 10 m und x die Entfernung von der Quelle (m) in Windrichtung ist. Gilt W > 2.5 so wird das kontinuierliche Modell empfohlen, für W < 0.6 die Variante der spontanen Freisetzung. Im intermediären Bereich W \in [0.6, 2.5] verwendet man beide Modelle, nutzt allerdings die für die Praxis ungünstigere Prognose.

Wenn (6.42) bzw. (6.43) erfüllt ist, dann können aus entsprechenden Diagrammen je nach gegebener Fragestellung Konzentrationen in Abhängigkeit der Entfernung oder die Entfernung bis zu einer Grenzkonzentration abgeschätzt werden. Hierzu müssen lediglich dimensionslose Kennzahlen an den Achsen des Definitionsbereichs bestimmt werden.

Als Alternative zum Ablesen von Zielwerten aus den Referenzdiagrammen des Modells existieren Approximationen an die Kurvenverläufe, welche in der Tabelle 6.2 angegeben sind.

Tabelle 6.2: Übersicht über die Koeffizienten α und β zur Approximation der Kurvenverläufe des Britter-McQuaid-Modells für kontinuierliche und für plötzliche Freisetzung, Abhängig von der Konzentration c_m (die Konzentration des unverdünnten Gases sei $c_0 = 1$).

plötzliche Freisetzung		
Konzentrationsverhältnis $\frac{c_m}{c_0}$	$\alpha = \log_{10} \left(\frac{q_0 g_0^2}{u^5} \right)$	$\beta = \log_{10} \left(\frac{x}{\sqrt[3]{V_0}} \right)$
0.1	$\alpha \le -0.44$	0.70
	$\alpha \in (-0.44, 0.43]$	$0.26\alpha + 0.81$
	$\alpha \in (0.43, 1.00]$	0.93
0.05	$\alpha \leq -0.56$	0.85
	$\alpha \in (-0.56, 0.31]$	$0.26\alpha + 1.00$
	$\alpha \in (0.31, 1.00]$	$-0.12\alpha + 1.12$
0.02	$\alpha \leq -0.66$	0.95
	$\alpha \in (-0.66, 0.32]$	$0.36\alpha + 1.19$
	$\alpha \in (0.32, 1.00]$	$-0.26\alpha+1.38$
0.01	$\alpha \le -0.71$	1.15
	$\alpha \in (-0.71, 0.37]$	$0.34\alpha + 1.39$
	$\alpha \in (0.37, 1.00]$	$-0.38\alpha + 1.66$
0.005	$\alpha \le -0.52$	1.48
	$\alpha \in (-0.52, 0.24]$	$0.26\alpha + 1.62$
	$\alpha \in (-0.24, 1.00]$	$-0.30\alpha + 1.75$
0.002	$\alpha \le 0.27$	1.83
	$\alpha \in (0.27, 1]$	$-0.32\alpha + 1.92$

kontinuierliche Freisetzung		
Konzentrationsverhältnis $\frac{c_m}{c_0}$	$\alpha = \log_{10} \left(\frac{q_0 g_0^2}{u^5} \right)$	$\beta = \log_{10} \left(\frac{x}{\sqrt{\frac{q_0}{u}}} \right)$
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	$\alpha \le -0.68$	1.92
	$\alpha \in (-0.68, -0.29]$	$0.36\alpha + 2.16$
	$\alpha \in (-0.29, -0.18]$	2.06
	$\alpha \in (-0.18, 1.00]$	$-0.56\alpha+1.96$
0.02	$\alpha \le -0.69$	2.08
	$\alpha \in (-0.69, -0.31]$	$0.45\alpha + 2.39$
	$\alpha \in (-0.31, -0.16]$	2.25
	$\alpha \in (-0.16, 1.00]$	$-0.54\alpha + 2.16$
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
	$\alpha \in (-0.20, 1.00]$	$-0.52\alpha + 2.35$
0.005	$\alpha \le -0.67$	2.40
	$\alpha \in (-0.67, -0.28]$	$0.59\alpha + 2.80$
	$\alpha \in (-0.28, -0.15]$	2.63
	$\alpha \in (-0.15, 1.00]$	$-0.49\alpha + 2.56$
0.002	$\alpha \le -0.69$	2.60
	$\alpha \in (-0.69, -0.25]$	$0.39\alpha + 2.872$
	$\alpha \in (-0.25, -0.13]$	2.77
	$\alpha \in (-0.13, 1]$	$-0.50\alpha + 2.71$

Modellgrenzen und nichtisotherme Freisetzung

Analysen zeigen, dass der Schichtungszustand der Atmosphäre wenig Einfluss auf die Qualität der Modellergebnisse hat, wobei die verwendeten empirischen Daten aus Untersuchungen im ländlichen Raum und damit aus Ausbreitungen über ebenem Gelände stammen. Für die Anwendung in städtischer Bebauung oder Industriegebieten sowie in orographisch gegliedertem Gelände ist das Modell nicht geeignet. Chemische und physikalischen Besonderheiten (chemische Reaktionen, Phasenübergänge) der Gase werden im Modell nicht berücksichtigt, ebenso wenig können Windprofile verwendet oder orographische Sonderfälle behandelt werden.

Es kann eine Anpassung für nichtisotherme Freisetzungen vorgenommen werden, wenn sich die Freisetzungstemperatur T_0 des Schwergases und die Umgebungstemperatur T_u nennenswert unterscheiden. Bezeichnet c* die für die Bewertung der Ausbreitung relevante Konzentration unter der Annahme, das Gas und die Umgebung die gleiche Temperatur

haben, so wird zur Beurteilung der nichtisothermen Situation eine effektive Ablesekonzentration c_{eff}

$$c_{\rm eff} = \frac{c^*}{c^* + (1 - c^*) \frac{T_u}{T_0}}$$
(6.44)

verwendet.

6.2.5.1.3 UDM-Modell (PHAST)

Der prinzipielle Ansatz des Unified Dispersion Models (UDM) ist in [6.37] beschrieben. Ausgehend von einem Freistrahl wird die Freistrahlmittellinie durch ein Integralverfahren, wie es für das Freistrahlmodell von Schatzmann beschrieben worden ist (siehe Kap. 6.1.2.1), berechnet. Für die Querverteilung der Konzentration im Strahl wird ein empirischer Ansatz verwendet, der sich mit zunehmender Entfernung vom Freisetzungsort einer Gaußverteilung annähert. Handelt es sich bei dem freigesetzt Gas um ein Schwergas, kann der Strahl den Boden berühren. In diesem Fall wird im UDM-Modell mit veränderten Entrainment-Funktionen und einem geänderten Ansatz für die Querverteilung der Konzentration weiter gerechnet. Eine Kopplung zwischen einem Freistrahlmodell und der impulsfreien Gasausbreitung nach der VDI-Richtlinie 3783 ist somit nicht erforderlich. Der Einfluss von Gebäuden auf die Schwergasausbreitung kann allerdings nicht berücksichtigt werden.

Durch weitere Stoffbilanzen können die Verdunstung/Verdampfung von Tröpfchen und der Wasserdampfgehalt in der Gaswolke berechnet werden.

6.2.5.1.4 EFFECTS-Modell

Für die Ausbreitungsberechnung einer Schwergaswolke wird das Modell von Ermak [6.38] im Programm SLAB verwendet. Wie in [6.29] Kapitel 4.5.5.2 dargestellt, wird aus den Erhaltungsgleichungen ein Satz von gewöhnlichen Differentialgleichungen für die Ausbreitung in Strömungsrichtung hergeleitet. Die Konzentrationsverteilung quer zur Strömungsrichtung wird mit einem Gauß-Ansatz berechnet. Der Einfluss von Gebäuden auf die Schwergasausbreitung kann auch in diesem Modell nicht explizit berücksichtigt werden.

6.2.5.2 Gaußmodelle

6.2.5.2.1 VDI 3783 Blatt 1

Für die Ausbreitungsberechnung von, im Vergleich zu Luft, dichteneutralen bis leichten Gasen kann die VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1 "Ausbreitung von störfallbedingten Freisetzungen - Sicherheitsanalyse" [6.6] herangezogen werden. Die Berechnungsgrundlage ist ein Gauß'sches Ausbreitungsmodell. Es wird die Freisetzung einer Gaswolke in einer Höhe h über dem Erdboden angenommen, deren Mittelpunkt mit konstanter Windgeschwindigkeit fortbewegt wird.

Durch die Zumischung von Luft wird die Wolke laufend verdünnt, wobei ihr Gesamtvolumen wächst. Dieser Ausbreitungs- und Verdünnungsprozess der Wolke infolge der turbulenten Diffusion wird im Gaußmodell durch die "Streuung" wiedergegeben. Da die Streuungen aus experimentellen Untersuchungen in einem Bereich von 100 m bis 10.000 m bestimmt worden sind, ist bei Berechnungen außerhalb dieses Bereiches mit größeren Ungenauigkeiten zu rechnen.

Es werden jeweils für eine ungünstigste und eine mittlere Ausbreitungssituation Konzentrationen bzw. Dosen berechnet. Die Maximalwerte werden separat ausgegeben. Ungünstigste bzw. mittlere Ausbreitungssituationen entstehen durch unterschiedliche

- Temperaturschichtungen in der Atmosphäre,
- Windgeschwindigkeiten,
- effektive Quellhöhen und
- Bodenrauigkeiten.

In der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1 wird bei einer mittleren Ausbreitungssituation eine indifferente Temperaturschichtung ohne Inversion vorausgesetzt. Bei einer ungünstigen Ausbreitungssituation wird der ungünstigste Fall durch Variation der Temperaturschichtungen und unter Berücksichtigung einer Inversionsschicht ausgewählt.

Die Berechnungen mit der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1 können für Windgeschwindigkeiten zwischen 1 m/s und 10 m/s durchgeführt werden. Bei einer Windgeschwindigkeit von 1 m/s ist in der Regel die Konzentration am größten, d. h. es ist die ungünstigste Ausbreitungssituation bezüglich der Windgeschwindigkeit. Ist eine Quellüberhöhung, z. B. bei einem sehr leichten Gas zu berücksichtigen, können auch andere Windgeschwindigkeiten die ungünstigste Ausbreitungssituation ergeben. Die Windgeschwindigkeit für eine mittlere

Ausbreitungssituation ist die häufigste Windgeschwindigkeit für indifferente Temperaturschichtung an einer repräsentativen Messstation.

Wird ein Gas freigesetzt, dessen Dichte geringer als die Luftdichte (1,2 kg/m³) ist, oder treten Brandgase mit einer hohen Temperatur und somit geringer Dichte aus, so steigen diese Gase in der Atmosphäre auf. Die Gaswolke befindet sich dann oberhalb des Freisetzungsortes. Die effektive Quellhöhe setzt sich aus der Höhe des Freisetzungsortes und dieser Überhöhung zusammen und ist vom Abstand zum Freisetzungsort, der Temperaturschichtung und von der äquivalenten Wärmeemission abhängig.

Die Bebauungshöhe ist entsprechend der Höhe der umgebenden Gebäude abzuschätzen, wobei bei mehreren Gebäuden der Mittelwert zu bilden ist. Die Bebauungshöhe wirkt sich auf die Inversionshöhe und damit direkt auf die Konzentrationen bei einer ungünstigen Ausbreitungssituation aus. Die Inversionshöhe wird gleich der mittleren Bebauungshöhe und mindestens 20 m gesetzt.

Über die Bodenrauigkeit wird der Einfluss des Geländes auf die Turbulenz der Atmosphäre und somit auf die Verteilung der Gaswolke berücksichtigt. Es werden hierbei 5 effektive Rauhigkeitslängen z_0 im Bereich von 0,02 m bis 1,2 m für verschiedene Geländetypen festgelegt. Die Strömungsbedingungen im bebauten Gelände (Stadtgebiet) wird maßgeblich durch die Anordnung der Gebäude bestimmt und kann durch die VDI 3783 Blatt 1 nicht erfasst werden.

6.2.5.2.2 EFFECTS-Modell

Für die Berechnung der Ausbreitung dichteneutraler Gase wird in EFFECTS das im Yellow Book [6.29] Kapitel 4.5.3 dargestellte Gauß-Modell verwendet. Es sind Modellparameter für kontinuierliche und spontane Freisetzungen und verschiedene Quellkonfigurationen angegeben.

6.2.5.3 Lagrange'sche Ausbreitungsmodelle

6.2.5.3.1 AUSTAL2000

Das Programmsystem AUSTAL2000 [6.23] berechnet die Ausbreitung von dichteneutralen und leichten Schadstoffen und Geruchsstoffen in der Atmosphäre und ist eine Umsetzung des Anhangs 3 der TA Luft. Das dem Programm zu Grunde liegende Lagrange'schen Partikelmodell ist in der Richtlinie VDI 3945 Blatt 3 [6.35] beschrieben. Durch die Verwendung des Lagrange'schen Partikelmodells kann mit AUSTAL2000 im Gegensatz zur VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1 die Gasausbreitung auch im näheren Umfeld einer Quelle berechnet und die Umströmung von Gebäuden oder anderen Ausbreitungshindernissen berücksichtigt werden.

Für Berechnungen ohne Gebäude werden die für die Ausbreitungssimulation erforderlichen Windfelder aus Grenzschichtprofilen für die Geschwindigkeit und die Turbulenz entsprechend der VDI Richtlinie 3783 Blatt 8 [6.39] abgeleitet. Um die Umströmung von Gebäuden berücksichtigen zu können, wird im Programmsystem AUSTAL2000 das diagnostische Windfeldmodell TALdia angeboten, dass die benötigten Wind- und Turbulenz-felder bereitstellt. Zusätzlich können mit komplexeren Strömungsmodellen berechnete mittlere Wind- und Turbulenzfelder in AUSTAL importiert werden.

Entsprechend den Vorgaben der TA Luft werden in AUSTAL2000 sechs Stabilitätsklassen nach Klug/Manier für die atmosphärische Temperaturschichtung und acht Bodenrauigkeitsklassen verwendet.

Im Gegensatz zum Gauß-Modell der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1 wird beim Lagrange'schen Partikelmodell ein Rechengitter benötigt. Die Konzentrationsverteilung eines Stoffes wird als räumlicher und zeitlicher Mittelwert über das Volumenelement eines dreidimensionalen Gitters und eines Zeitintervalls berechnet. Hierzu wird ausgezählt, wie viele Partikel sich während des Zeitintervalls in einem Volumenelement befinden. Die von den Partikeln repräsentierten Massen werden mit der Aufenthaltsdauer in dem Volumenelement multipliziert und aufaddiert. Anschließend wird durch das Volumen und die Dauer des Zeitintervalls dividiert.

Das Rechengitter muss entsprechend dem zu erwartenden Konzentrationsgradienten im interessierenden Entfernungsbereich angepasst werden. Im Nahbereich der Quelle sind kleinere Volumina zu wählen, als in größerer Entfernung, in der eine größere Schrittweite in Strömungsrichtung bei der Konzentrationsmittelung über das Volumen keinen größeren Mittelungsfehler ergibt. Wird eine Gebäudeumströmung betrachtet, so sollten die Gitterweiten möglichst gering sein, um die Gebäudegeometrie bzw. deren lokalen Einfluss auf das Ausbreitungsmuster hinreichend auflösen zu können. Im Windfeldmodell TALdia ist die minimale Gitterweite zurzeit auf 1 m begrenzt.

6.2.5.4 Euler'sche Ausbreitungsmodelle

6.2.5.4.1 CFX, Fluent

Die Firma ANSYS vertreibt als Computational Fluid Dynamics (CFD) Softwarepaket zur numerischen Strömungssimulation ANSYS CFD [6.31]. Hierin enthalten sind zwei CFD-Löser. Diese beiden Löser sind ANSYS CFX und ANSYS FLUENT. Basierend auf der Finite Volumen Methode werden dreidimensionale Strömungsprobleme zeitabhängig gelöst. Hierbei können Geometrien entweder direkt in ANSYS erzeugt oder von externen Formaten importiert werden. Zur Erzeugung des zur Berechnung benötigten Rechengitters liefert ANSYS verschiedene Netzgeneratoren mit.

ANSYS CFD beinhaltet Modelle für eine Vielzahl von Strömungs- und Ausbreitungsproblemen. Für den Bereich der turbulenten Strömungen sind in ANSYS CFD diverse Turbulenzmodelle unterschiedlicher Komplexität implementiert.

Als numerische Methoden stehen diverse Verfahren zur Verfügung, so z.B. Euler/Euler für die Simulation von Fluiden die eine kontinuierliche Phase bilden, aber auch Euler/Lagrange Methoden zur Simulation der Ausbreitung von Partikeln. Ebenso stehen diverse Ansätze zur Verbrennungsmodellierung zur Verfügung. Während im einfachsten Fall das Eddy Dissipation Modell genannt werden sollte, stehen weitere Ansätze zur Verfügung, um anhand von Reaktionskinetiken die Verbrennung realitätsnah abbilden zu können.

6.2.5.4.2 Miskam

Das Modell MISKAM (Mikroskaliges Klima- und Ausbreitungsmodell) ist ein physikalisch anspruchsvoller Vertreter von mikroskaliger Strömungs- und Ausbreitungsmodelle. Es wurde am Institut für Physik der Atmosphäre der Universität Mainz entwickelt. Der Aufgabenbereich von MISKAM liegt im Bereich kleinräumiger, mikroskaliger Ausbreitungsprozesse.

MISKAM ist ein dreidimensionales nicht-hydrostatisches numerisches Strömungs- und Ausbreitungsmodell zur kleinsträumigen Prognose von Windverteilungen und Immissionskonzentrationen in Straßen bis hin zu Stadtteilen mit typischen Modellausdehnungen von einigen 100 m [6.30]. MISKAM ermöglicht die Berücksichtigung von Gebäuden in Form von rechtwinkligen Blockstrukturen auf einem nicht-äquidistanten kartesischen Rechengitter, so dass die Besonderheiten des Strömungsgeschehens in der Umgebung von Gebäuden modelliert werden können. Die physikalische Grundlage bilden die vollständigen dreidimensionalen Bewegungsgleichungen (sog. primitive Gleichungen) zur Simulation der Strömungsverhältnisse, sowie die Advektions-Diffusions-Gleichung zur darauf aufbauenden Ausbreitungsberechnung für dichteneutrale Substanzen. Es werden die Reynoldsgemittelten Erhaltungsgleichungen (RANS-Modell) gelöst, entsprechend liefert das Modell mittlere Strömungs- und Ausbreitungsfelder. Zu Parametrisierung der vom Modell nicht explizit aufgelösten Turbulenz wird ein sogenannter E-ε-Schließungsansatz verwendet.

MISKAM hat eine Schnittstelle zu AUSTAL2000. Vergleichsrechnungen mit Windkanalmessungen ergaben, dass durch die Übernahme der mit MISKAM berechneten Strömungsund Turbulenzgrößen in AUSTAL2000 in der Nähe von Gebäuden gegenüber den Berechnungen mit dem diagnostischen Windfeldmodell TALDIA bessere Übereinstimmungen mit den Messergebnissen erzielt wurden [6.41].

6.2.5.4.3 OpenFOAM

Bei OpenFOAM handelt es sich um eine Werkzeugsammlung zur Simulation von Strömungen (in)kompressibler Fluide, von Wärmetransport- und von Verbrennungsprozessen, Mehrphasenströmungen und weiteren zugeordneten Problemen. Das Programmpaket beinhaltet Software zur Gittergenerierung, zur numerischen Lösung gekoppelter partieller Differentialgleichungssysteme und Software zur Auswertung und Visualisierung der Berechnungsergebnisse. OpenFOAM ist eine frei verfügbare, quelloffene, nicht kommerzielle Sammlung von C++-Programmen, so dass jeder Anwender zur Weiterentwicklung beitragen und auch spezifische Quellcodeanpassungen vornehmen kann.

Die zahlreichen, bereits implementierten Solver (Lösungsalgorithmen für spezifische Problemstellungen) sind in der Regel evaluiert bzw. validiert und ermöglichen die Verwendung von Parallelrechner-Architekturen. Nachteile gegenüber vergleichbaren Simulationswerkzeugen werden gelegentlich darin gesehen, dass nicht alle Probleme mit Hilfe einer graphischen Benutzeroberfläche bearbeitet werden können, und ggf. fundierte Programmierkenntnisse erforderlich sind.

Die sichere Verwendung der bereitgestellten Werkzeuge zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen setzt voraus, dass der Anwender die dem jeweiligen Problem zugrunde liegenden physikalischen Prozesse und die numerische Mathematik hinreichend versteht, da man unmittelbar mit dem Steuercode arbeitet und diesen selten als Black-Box-Modell nutzen kann. Aus der Perspektive von versierten Anwendern ist es sicher vorteilhaft, dass die numerische Umsetzung der Algorithmen unmittelbar analysiert und modifiziert werden kann. Zudem erlaubt die Lizenzfreiheit eine kostengünstige Möglichkeit dreidimensionale Strömungsprobleme mit den Euler-Gleichungen zu berechnen.

6.3 Quellenverzeichnis

- [6.1] Chen, C.J. and Rodi, W.: Vertical turbulent buoyant jets a review of experimental data. The Science and Applications of Heat and Mass Transfer; Pergamon Press; Vol.4, (1980)
- [6.2] Giesbrecht, H., Seifert, H., Leuckel, W.: Dispersion of vertical free jets. Heavy Gas and Risk Assessment – II, (Herausgeber: Hartwig, S.), 103-106 (1983)
- V.O. Hoehne, R.C. Luce: The Effects of Velocity, Temperature and Molecular Weight on Flammability Limits in Wind-Blown Jets of Hydrocarbon gases. 35th Midyear Meeting of the American Petroleum Institute's Division of Refining. Vol. 50, 1057-1081 (1970).
- [6.4] Hoot, G.T.; Meroney, R.N.; Peterka, J.A.. Wind tunnel tests of negatively buoyant plumes. Meteorology Laboratory EPA-650/3-74-003. (1973)
- [6.5] Briggs, G.A.; Plume Rise. TID 25075, Clearinghouse of fedaral Scientific and Technical Information, Springfield, Virginia (1969)
- [6.6] VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1; Ausbreitung von störfallbedingten Freisetzungen -Sicherheitsanalyse, Beuth Verlag GmbH
- [6.7] M. Schatzmann; Auftriebsstrahlen in natürlichen Strömungen Entwicklung eines mathematischen Modells; Dissertation Uni. Karlsruhe, (1976)
- [6.8] M. Schatzmann; Ausbreitung von Propangas Freistrahlen aus innenliegenden
 1"-Sicherheitsventilen von Behältern nach DIN 4680 / 4681; Gutachten im Auftrag des DVFG; (1990)
- [6.9] M. Schatzmann; An Integral Model of Plume Rise; Atmospheric Environment Vol. 13, 721-731(1979)
- [6.10] Teixeira, M. Miranda, P.: On the Entrainment Assumption in Schatzmann's Integral Plume Model. Applied Scientific Research 57. 15-42 (1997)
- [6.11] Schatzmann, M.: persönliche Mitteilung

[6.12] Userguide AEROPLUME, HGSystem,

www.hgsystem.com/user_guide/aeroplum.html

- [6.13] Havens, J.; Spicer, T. TECJET: An Atmospheric Dispersion Model. Risk Analysis 10, Nr. 3, 459-460.
- [6.14] DVGW Hinweis G 442, Explosionsgefährdete Bereiche an Ausblaseöffnungen von Leitungen zur Atmosphäre an Gasanlagen, (2006).
- [6.15] A.D. Birch D.R. Brown, M.G. Dodson, F. Swaffield: The structure an conzentration Decay of High Pressure Jets of Natural Gas. In: Combustion Science and Technology 36, 249-261, (1984)
- [6.16] Keagy, W.R., Weller, A.E.: A Study of Freely Expanding Inhomogeneos Jets. In: Heat Transfer and Fluid Mech. Inst., Vol 2, 89-98, (1949)
- [6.17] Fink, L.: Der axialsymmetrische Strahl in einer turbulenten Grundströmung.
 Sonderforschungsbereich 80 Ausbreitungs- und Transportvorgänge in
 Strömungen, Universität Karlsruhe, Bericht: SFB 80/ET/21, (1974).
- [6.18] Donat, J.: Windkanalexperimente zur Ausbreitung von Schwergasstrahlen.Dissertation Universität Hamburg (1996).
- [6.19] Schalau, B.; Grätz, R.: Vergleich von Freistrahlmodellen. TÜ Bd. 51 (2010) Nr.20. 29-35
- [6.20] VDI-Richtlinie 3783 Blatt 8; Messwertgestützte Turbulenzparametrisierung für Ausbreitungsmodelle, Beuth Verlag GmbH
- [6.21] ESDU : Engineering Science Data Unit, Series Wind Engineering, https://www.esdu.com
- [6.22] Röckle, R. Diagnostisches Mikroskaliges Windfeldmodell, Handbuch zum Programm gemäß Richtlinie VDI 3783 Blatt 10. 2001.
 [6.22] Ingeneurbürg Japika Windfeldmedell in AUSTAL 2000, 2014 url

[6.23] Ingeneurbüro Janike. Windfeldmodell in AUSTAL2000. 2014. url: http://www.austal2000.de/de/downloads.html.

- [6.24]: Paschedag, A. R.: CFD in der Verfahrenstechnik. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co.KGaA, Weinheim, 2004
- [6.25] H. Görtler. Dimensionsanalyse. 1. Aufl. Berlin/Heidelberg: Springer Verlag, 1975, ISBN 3-540-06937-2
- [6.26]: R. E. Britter und J. McQuaid. *Worbook on the dispersion of dense gases*. HSE Books, (1989).
- [6.27]: VDI Richtlinie 3783 Blatt 2 Umweltmeteorologie; Ausbreitung von störfallbedingten Freisetzungen schwerer Gase - Sicherheitsanalyse, Beuth Verlag GmbH, (1987)

- [6.28] H. Kraus: Die Atmosphäre der Erde: Eine Einführung in die Meteorologie. 3.
 erweiterte und aktualisierte Auflage, ISBN: 3-540-20656-6, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, (2004)
- [6.29] CPR 14E; Methods for calculation of physical effects (Yellow Book); Committee for the Prevention of Disasters, The Hague (2005)
- [6.30] Eichhorn, J., 1989: Entwicklung und Anwendung eines dreidimensionalen mikroskaligen Stadtklima-Modells. Dissertation Universität Mainz, 1989
- [6.31] http://www.ansys.com
- [6.32] http://www.openfoam.com
- [6.33] A. De Vischer. Air Dispersion Modeling. 1. Aufl. Hoboken, New Jersey: Wiley Verlag, (2014)
- [6.34] VDI Richtlinie 3945 Blatt 1: Umweltmeteorologie AtmosphärischeAusbreitungsmodelle Gauß-Wolken-Modell. Beuth Verlag GmbH, (2016).
- [6.35] VDI Richtlinie 3945 Blatt 3 Umweltmeteorologie; Atmosphärische Ausbreitungsmodelle; Partikelmodell. Beuth Verlag GmbH, (1987).
- [6.36] Marotzke,K.. Physikalische Modellierung der Ausbreitung störfallartig freigesetzter schwerer Gase zur Abschätzung von Gefahrenbereichen im bebauten Gelände. Dissertation TU Hamburg, (1993).
- [6.37] Witlox, H.W.M., Holt, A., 1999. A unified model for jet, heavy andpassive dispersion including droplet rainout andre-evaporation. In: International Conference and Workshopon Modelling the Consequences of Accidental Releases ofHazardous Materials, CCPS, San Francisco, California, September 28–October 1, pp. 315–344.
- [6.38] Ermak, D.L.: User's manual for SLAP: an atmospheric dispersion model for denser-than-air releases. Lawrence Livermore National Laboratory. (1990)
- [6.39] VDI Richtlinie 3783 Blatt 8: Umweltmeteorologie Messwertgestützte Turbulenzparametrisierung für Ausbreitungsmodelle Beuth Verlag GmbH, (2002)
- [6.40] VDI-Richtlinie 3783 Blatt 13: Umweltmeteorologie Qualitätssicherung in der Immissionsprognose - Anlagenbezogener Immissionsschutz -Ausbreitungsrechnung gemäß TA Luft. Beuth Verlag GmbH, (2010)
- [6.41] M.O. Letzel, T. Flassak, D. Angel: Verbesserung der AUSTAL2000-Ergebnisse durch Strömungs- und Turbulenzübernahme aus MISKAM. Gefahrstoffe – Reinhaltung der Luft 72 Nr. 7/8 S. 329, (2012)

7 Brände

In den folgenden Kapiteln werden die *Schlüsselgrößen* zur Berechnung der Quellterme Brennstoffmassenstrom $\dot{m}_{f} = A_{p} \dot{m}_{f}''$, Brandproduktmassenstrom (Bildungsrate) $\dot{m}_{p} = y_{p} \dot{m}_{f} = y_{p} \dot{Q}_{c} / (-\Delta h_{c})$, gesamter Massenstrom \dot{m}_{pl} in der Plumezone und gesamter Wärmestrom \dot{Q}_{top} an der Flammenspitze von Bränden (Schadenfeuern) dargestellt. Hierzu sind die folgenden Schlüsselgrößen eines Feuers zu bestimmen bzw. müssen bekannt sein, wie insbesondere der Basisdurchmesser d, die Abbrandgeschwindigkeit v_{a} , die Massenabbrandrate \dot{m}_{f}'' , die sichtbare Flammenlänge H, die Höhe H_{cl} der klaren Verbrennungszone, der Flammenneigungswinkel Θ , das Flammendrag d_w, der Entrainment-Massenstrom \dot{m}_{ent} der Umgebungsluft, der konvektive Wärmestrom \dot{Q}_{conv} in der Plumezone, die Branddauer, die Brandfläche sowie die spezifische Ausstrahlung (*S*urface *Emissive P*ower) SEP der Flamme.

Die von den Bränden emittierte thermische Energie wird teils durch Wärmestrahlung und teils, wie auch die freigesetzten Schadstoffe, konvektiv mit den Brandgasen in die Umgebung transportiert, wodurch dort insbesondere eine direkte thermische Schadenswirkung auf Personen sowie auch auf Bauteile, bzw. benachbarte verfahrenstechnische Anlagen auftreten kann. Bei den als Gas oder Aerosol freigesetzten Schadstoffen handelt es sich um Verbrennungs- (bzw. Brand-) und Pyrolyseprodukte sowie teilweise auch um unverbranntes bzw. unzersetztes Brandgut (Gase, Flüssigkeiten oder Feststoffe, z.B. Rußpartikel). Zusätzlich können die Schadstoffe toxisch sein.

Bei *Gasen* und *Flüssigkeiten* bildet sich nach Zündung eine meist rußende Flamme (häufig ein Poolfeuer), während bei *Feststoffen zusätzlich* Schwelbrände mit einer intensiven Rauchentwicklung entstehen können.

Brände von (toxischen) Flüssigkeiten, Gasen und Feststoffen können grundsätzlich im *Freien* (d.h. frei bzw. offen brennend) oder in *Gebäuden* (d.h. eingeschlossen brennend) auftreten.

Insbesondere wegen der Fülle von Phänomenen erfolgt eine separate Beschreibung von offenen Bränden flüssiger und gasförmiger Brennstoffe (Kap. 7.3) sowie von Bränden in Gebäuden bzw. Räumen mit festen Brennstoffen (Kap. 7.4). Die Bildung (toxischer) Schadstoffe sowie die Abschätzung von deren Bildungsraten bei Feststoffbränden werden

ebenfalls in Kap. 7.4 behandelt. Einige Phänomene bei offenen Bränden sind auch für eingeschlossene Brände und umgekehrt, von Bedeutung.

Zum besseren Verständnis und Einordnung der in diesem Kapitel dargelegten Zusammenhänge werden ergänzend zu den jeweiligen Kapiteln kurz einige Grundlagen erläutert.

7.1 Voraussetzungen für Verbrennungsvorgänge

Als Verbrennung bezeichnet man eine exotherme, oxidative Reaktion zwischen einem Brennstoff und einem Oxidationsmittel. Üblicherweise handelt es sich hierbei um Luftsauerstoff. Aber auch andere Oxidationsmittel wie Chlor oder auch Fluor sind möglich. Grundsätzlich müssen für einen Brand bzw. Explosion drei Voraussetzungen gleichzeitig erfüllt sein. Hierzu zählen ein Brennstoff, ein Oxidationsmittel und eine wirksame Zündquelle.

Damit es tatsächlich zu einer Verbrennungsreaktion kommt, müssen der Brennstoff (Gase, Dämpfe von Flüssigkeiten, Stäube) und der Oxidator (hier: Luftsauerstoff) in einem zündfähigen Konzentrationsverhältnis, d.h. innerhalb seiner Zündgrenzen, vorliegen und die Zündquelle muss die für das Gemisch notwendige Zündenergie aufbringen. Dieser Sachverhalt wird qualitativ durch das sogenannte Zünddreieck dargestellt.



Abb. 7.1: Feuer-/ Explosionsdreieck

Im Gegensatz zu einem Brand, bei dem Brennstoff und Oxidationsmittel (hier: Luftsauerstoff) im Vorfeld getrennt vorliegen und durch Diffusions- und Konvektionsprozesse miteinander vermischt werden, liegen beide Komponenten vor Zündung vermischt vor. Dadurch bedingt, kommt es im Falle einer Zündung zu einer sehr schnellen Verbrennungsreaktion, die durch signifikant erhöhte Temperatur- und Druckanstiege die Gefährdung im Gegensatz zu einem Brand erhöht.

7.2 Brände von Flüssigkeiten und Gasen

Flüssigkeiten werden primär anhand ihres Flammpunktes bewertet. Anhand dieses Wertes kann die Brand- und Explosionsgefahr beurteilt werden. Der Flammpunkt kennzeichnet die Temperatur, bei der sich über der Flüssigkeitsoberfläche eine ausreichende Menge an Dampf entwickelt, so dass ein durch eine externe Zündquelle zündfähiges Gas-Luft-Gemisch entstehen kann. Die Besonderheit des Flammpunktes, im Gegensatz zum Brennpunkt, liegt darin, dass die Zündung der Gas-Luft-Atmosphäre nicht selbstunterhaltend ist, d.h. die Flamme erlischt nach erfolgter Reaktion.

Zündfähige Dampf-Luft-Gemische existieren nur im Bereich zwischen der unteren und oberen Explosionsgrenze. Dieser Bereich wird auch als Zündbereich bezeichnet. Liegt die Dampfkonzentration unterhalb der unteren Explosionsgrenze, so kann das Gemisch nicht entzündet werden, da zu wenig Brennstoff (Mangelkomponente: Brennstoff) vorhanden ist. Überschreitet die Konzentration des Dampfes die obere Explosionsgrenze, so kann auch hier keine Zündung erfolgen, da hier der nicht ausreichend Sauerstoff für die Verbrennungsreaktion vorliegt.

Somit ist die niedrigste Konzentration eines Dampfes in einem durch Fremdzündung zündbaren Dampf-Luft-Gemisch gleichbedeutend mit der unteren Explosionsgrenze. Der Zusammenhang zwischen Dampfdruck einer Flüssigkeit und dem Flammpunkt wird durch die nachfolgende Grafik veranschaulicht.



Abb. 7.2: Zusammenhang zwischen Dampfdruck, Explosionsgrenzen und Explosionspunkte einer Flüssigkeit [7.88]

Die Temperatur, bei der die Sättigungskonzentration und die untere Explosionsgrenze zusammenfallen (\Rightarrow Gleichgewichtszustand), wird als unterer Explosionspunkt beschrieben. Analoges gilt auch für den oberen Explosionspunkt.

7.2.1 Typen offener Feuer und ihre störungsbedingten Freisetzungsszenarien

Bei einer störungsbedingten Freisetzung brennbarer Flüssigkeiten bzw. Tröpfchen [Spray] und/oder brennbarer Gase bzw. Aerosole können die folgenden Typen offener Feuer entstehen (siehe Abbildung 7.3), abhängig von Freisetzungsart und Rand-bedingungen: Pool- und Lachenfeuer; Tankfeuer; Boilover-Feuer; Fackelflammen, Strahlflammen; Gaswolken-Feuer; UVCE; BLEVE; Feuerball. Umgekehrt durchlaufen Freisetzungsszenarien, z.B. in Chemieanlagen, die in Abbildung 7.3 dargestellten möglichen Wege oder Teilwege davon. Diese Typen von Feuern, die ein erhebliches Gefährdungspotential insbes. infolge der Wärmestrahlung und -konvektion sowie der freigesetzten Brandprodukte [z.B. Rußpartikel] besitzen, lassen sich wie folgt charakterisieren [7.1-7.3]:

a. Poolfeuer:

Der brennbare Stoff, meist eine Flüssigkeit oder auch ein Feststoff befindet sich in einer relativ dünnen Schicht auf der Oberfläche eines Wasserpools (bei in Wasser nicht - bzw. schwerlöslichen Flüssigkeiten) oder in einem Pool bzw. in einer Auffangtasse, die allein mit der Flüssigkeit gefüllt ist. Ein Poolfeuer weist also eine Berandung auf. Die folgenden Typen von Feuern lassen sich vom Typ Poolfeuer ableiten:

i. Lachenfeuer

Durch Leckagen oder Verschüttung verteilt sich die brennbare Flüssigkeit als Lache auf einer Oberfläche [insbes. auf dem Erdboden bzw. Anlagengelände oder auf Wasser] ohne geometrische Begrenzung. Ein Lachenfeuer weist *keine* Berandung auf.

ii. Tankfeuer

Der brennbare Stoff, meist eine Flüssigkeit befindet sich in Behältern, z.B. in Einzeltanks, Tanklagern oder chemischen Reaktoren, Kolonnen, Vorrats- bzw. Zwischenbehältern.

iii. Boilover-Feuer

Es handelt sich um ein heftig verlaufendes Tankfeuer. Die brennbare Flüssigkeit befindet sich über einer Schicht von relativ niedrig siedenden Flüssigkeiten in einem Tank bzw. Behälter [z.B. Rohöl über Wasserschichten (Wasserlinsen) im Sumpf eines Lagertanks]. Durch spontane Verdampfung der niedrig siedenden Flüssigkeit, infolge einer vom darüber liegenden Tankfeuer gebildeten Wärmezone in der brennbaren Flüssigkeit werden große Mengen an brennbarer Flüssigkeit unter Bildung eines *Feuerballs* (s. Punkt (d)) aus dem Tank bzw. Behälter geschleudert.

iv. Multiple (Pool-) Feuer

Neue Untersuchungen [7.64] haben gezeigt, dass mehrere gleichzeitig brennende Einzel-Feuer, sog. multiple Feuer, die z.B. bei Bränden in Tanklagern häufig vorkommen, eine intensive Wechselwirkung aufweisen. Dabei wird diese Wechselwirkung vorwiegend durch thermische Strahlung und Luftentrainment dominiert und hängt insbesondere ab vom Abstand zwischen den Feuern und der Anzahl wechselwirkender Flammen. Die multiplen Feuer erlangen zunehmend an Bedeutung.

b. Fackelflammen, Strahlflammen (Jet-Flammen)

Hier tritt die brennbare Flüssigkeit oder ein brennbares Gas(gemisch) mit großem *Anfangsimpuls* als Strahl bzw. Jet in die Atmosphäre ein. Im Fall eines *Fackelfeuers* erfolgt die Freisetzung über einen Kamin bzw. eine Fackel.

c. UVCE, VCE, Gaswolken-Feuer und BLEVE

Infolge z.B. einer Leckage bildet sich eine brennbare Gas/Luft- bzw. Dampf/Luft-Gemischwolke, die sich eine bestimmte Zeitdauer ausbreitet und vergrößert, bevor sie zündet. Als Folge kann sich entweder eine unverdämmte oder (teil-) verdämmte Gaswolkenexplosion [*UVCE*, *U*nconfined Vapor Cloud *E*xplosion; VCE, Confined Vapor Cloud *E*xplosion] oder ein deflagrativ brennendes Gaswolken-Feuer bzw. Flashfeuer (*UVCF U*nconfined Vapor Cloud Fire) ausbilden. Kommt es zur Erhitzung [z.B. infolge der Wärmestrahlung eines benachbarten Feuers] eines Tanks bzw. Behälters, der eine unter Druck stehende, brennbare Flüssigkeit bzw. ein brennbares, verflüssigtes Gas enthält, kann ein *BLEVE*-Ereignis [*B*oiling *L*iquid *E*xpanding Vapor *E*xplosion] mit i.A. intensiver Druckwelle entstehen, wobei sich der Tank bzw. Behälter in einzelne Teile (Bruchstücke) zerlegt, so dass zusätzlich ein *Trümmerflug* auftritt.

d. Feuerball

Durch Zündung einer Gaswolke aus brennbaren Dampf/Luft-Gemischen in Form einer instationären, turbulenten nicht vorgemischten Flamme, meist mit einer ausgeprägten Druckwelle, entsteht ein *Feuerball*.

Die Möglichkeiten und Konsequenzen, die nach der Freisetzung einer entzündbaren Flüssigkeit bestehen, sind anhand des nachfolgenden Ereignisbmms zusammenfassend dargestellt.



Abb. 7.3: Beispiele von Typen gefährlicher Feuer infolge störungsbedingter Freisetzungsszenarien brennbarer Flüssigkeiten und Gase/Aerosole [7.4]

7.2.2 Typen von Modellen

7.2.2.1 Semi-empirische Modelle

Die semi-empirischen Modelle sind weit verbreitet und werden im Folgenden hauptsächlich behandelt. Es sind relativ einfache, häufig stationäre Modelle, die im Wesentlichen die Flammengeometrie und die Wärmestrahlung von Pool-/ Tank- und Lachenfeuern sowie von Fackel-, Strahlflammen, Gaswolkenfeuern und Feuerbällen vorhersagen und i.A. mehrere empirische Parameter enthalten.

7.2.2.1.1 Zonenmodelle

Die Zonenmodelle basieren auf den differentiellen Erhaltungsgleichungen für die Gesamtmasse und die Energie. Die Flamme wird in bestimmte Zonen der Anzahl \approx 2 bis 20 eingeteilt. Die Rechenzeiten sind i.A. kurz.

7.2.2.1.2 Feldmodelle

Die Feldmodelle sind grundsätzlich stationär und basieren auf der Lösung der zeitlichgemittelten *Navier-Stokes-Differentialgleichungen* (partielle DGLs) mit häufig auch empirischen Submodellen. Diese Modelle [sog. *kalte* Modelle] sind meist für die Vorhersage nicht-reaktiver Strömungen geeignet. Aufgrund ihrer mathematischen Komplexität benötigen diese Modelle jedoch große Rechenzeiten.

7.2.2.1.3 Integralmodelle

Die Integralmodelle stellen einen Kompromiss zwischen den semi-empirischen Modellen und den Feldmodellen dar. Diese Integralmodelle basieren zunächst auf den gleichen Differentialgleichungen wie die Feldmodelle, enthalten jedoch Sub-modelle für die Turbulenz, Verbrennungsreaktionen und Wärmeübertragungs-prozesse. Infolge vereinfachender Annahmen reduzieren sich die partiellen DGLs zu gewöhnlichen DGLs, so dass die Rechenzeiten deutlich kleiner als bei den Feldmodellen werden. Dennoch existiert bis heute kein Integralmodell, das die Auswirkungen [Konsequenzen] unfallbedingter Feuer angemessen vorhersagt.

7.2.2.1.4 CFD-Modelle

Die CFD [Computational Fluid Dynamics] Modelle sind grundsätzlich *instationär* (transient) und basieren auf den differentiellen Erhaltungsgleichungen für Gesamtmasse, Speziesmassen, Impuls und Energie sowie den zahlreichen Submodellen für Turbulenz, Reaktionsmechanismen, Rußbildung und thermischer Strahlung. Die Rechenzeiten sind i.A. relativ groß, können jedoch durch Einsatz von Parallelrechnern (Rechencluster) deutlich verkürzt werden. Die CFD-Modellierung bzw. CFD-Simulation von Feuern befindet sich in einer sehr erfolgsversprechenden Entwicklung.

7.2.3 Poolfeuer

In diesem werden Pool-, Tank-, Lachen- und Rinnenfeuer behandelt, die bei Störungen in verfahrenstechnischen Anlagen der Prozessindustrie am häufigsten auftreten. Bei Poolfeuern, beispielhaft in der folgenden Abbildung dargestellt, handelt es sich um turbulente nicht vorgemischte Flammen, die über einem horizontalen Pool brennen, der einen brennbaren verdunstenden /verdampfenden Stoff enthält, dessen Dampf mit sehr geringem Anfangsimpuls (s. Abb. 7.5) nach oben strömt.



Abb. 7.4: n-Pentan-Poolfeuer (d = 25 m)

Es existieren die folgenden Modelltypen:

- (Semi)-empirische Modelle
 - o Punktquellen-Strahlungsmodell (PSM), bzw. API 521 Modell
 - Oberflächen-Strahlungsmodelle (z.B. SFM, MSFM nach Mudan, Raj und Fay)
 - OSRAMO II/ III
- Feldmodelle sind mathematisch anspruchsvoll und benötigen relativ lange CPU-Zeiten
- Integralmodelle: z.Zt. liegen keine brauchbaren Konsequenzmodelle vor
- Transiente Modelle, d.h. CFD-Modelle

7.2.3.1 Beschreibung der physikalischen Vorgänge

Am Beispiel eines Pool-, Lachen- oder Tankfeuers sind die wesentlichen physikalischen Vorgänge in Abb. 7.5 dargestellt. Es handelt sich um frei brennende, i. A. turbulente, nicht - vorgemischte und auf-triebsbestimmte Flammen meist flüssiger oder auch fester Brennstoffe, die einen *sehr geringen* Anfangsimpulsstrom des aufsteigenden Brennstoffdampfes aufweisen [7.3, 7.5, 7.6, 7.57]. Mit zunehmendem Durchmesser d verändern sich die Anteile der unterschiedlichen Flammenbereiche ("Zonen"), wobei zwei bis drei *nicht*kontinuierliche Bereiche ("Zonen") angenommen werden, deren Höhen bzw. Längen bisher nicht bzw. nur mit großen Unsicherheiten berechenbar sind.

Der *unterste* Bereich (Länge \overline{H}_{cl} in Abb. 7.5) des auftriebsbestimmten Feuers wird auch als klare Verbrennungszone bezeichnet, die meist nicht mit schwarzem Ruß bedeckt ist und bei Seite 234

großen Durchmessern d eine optisch dicke Schicht darstellt und neben den hot spots die SEP^{ma} eines maximale, spezifische Ausstrahlung Feuers mit einer hohen Emissionstemperatur aufweist. In diesen Bereich hinein findet auch eine intensive Ansaugung von Umgebungsluft (Luftentrainment) statt, die infolge der selbst erzeugten Turbulenz sowie verstärkt durch die Windturbulenz in verschiedene innere Gebiete des Feuers verteilt wird. Im Bereich der klaren Verbrennungszone existiert eine brennstoffreiche Phase, die von einer sichtbaren (gelb leuchtenden) Flammenzone umgeben ist. Innerhalb der Höhe H_{cl} findet eine vollständige Verbrennung zu den (Verbrennungs)Produkten statt, wobei die vertikale Strömungsgeschwindigkeit stark zunimmt, ebenso wie die vertikalen Flüsse von Masse, Impuls und thermischer Energie. Diese Produkte mischen sich anschließend mit angesaugter Umgebungsluft und steigen weiter nach oben, wie in einem thermischen Plume.



Abb. 7.5: Physikalische Vorgänge in adiabatischen Pool-, Lachen- und Tankfeuern, bei flüssigen und teilweise bei festen Brennstoffen

Im *nächst höheren* Bereich (Länge \overline{H}_{pul} der Pulsationszone in Abb. 7.5) sind die Flammenfronten zwar mit der Flammenbasis noch verbunden, es liegt jedoch die weniger effiziente Verbrennungszone eines großen Feuers vor mit radialen und axialen Pulsationen infolge der großskaligen Wirbel der angesaugten Luft. Die Ursachen sind die interne Mischung der unverbrannten und der *partiell* verbrannten Flammengase (infolge eines Sauerstoffmangels in Achsennähe des Feuers) aus Bereich 1 sowie auftriebsbedingte Zirkulationsströmungen. Innerhalb dieser Pulsationszone wird die intermittierende Bildung von *schwarzem* Ruß beobachtet, der das heiße Flammeninnere zu verdunkeln beginnt. Im oberen Teil der Pulsationszone erfolgt ein *nicht*-kontinuierliches Brennen der Flammengase in Ballen, und die Erzeugung/Akkumulation bedeutender Rußmengen wird beobachtet.

Im obersten Bereich (Länge \overline{H}_{pl} der *Plume*zone in Abb. 7.2) bzw. im *Intermittenz*bereich des Feuers liegt eine *nicht*-kontinuierliche, segregierte Flamme aus statistisch verteilten, unregelmäßigen Ballen kleiner Brennstoffmengen vor. Auch infolge einer fortgesetzten Lufteinmischung, die zu einer Abnahme von Temperatur, axialer Strömungsgeschwindigkeit sowie der Spezieskonzentration führt, tritt eine *Verminderung* der thermischen Strahlung auf.

Die *Gesamt*-Energiebilanz (Leistungsbilanz) für das Bilanzgebiet I zwischen Flamme und Plume sowie Pool/Tank/Lache [s. Abb. 7.6] lässt sich wie folgt formulieren, wenn näherungsweise $\overline{\dot{Q}}_{verl} \approx 0$ und $\dot{Q}_{sen} \approx 0$ gilt [7.7]:

$$\bar{\dot{Q}}_{c} \approx \bar{\dot{Q}}_{a} + \bar{\dot{Q}}_{top} + \bar{\dot{Q}}_{ba,tot}$$
 (7.1a)

$$\bar{\dot{\mathbf{Q}}}_{c} \equiv \bar{\dot{\mathbf{q}}}_{f}^{"} \mathbf{A}_{P} = \bar{\mathbf{m}}_{f_{max}}^{"} \mathbf{A}_{P} \left(-\Delta \bar{\mathbf{h}}_{c}\right)$$
(7.1b)

$$\overline{\dot{Q}}_{top} = \overline{\dot{Q}}_{conv} + \overline{A}_{top} \overline{SEP}^{ma}$$
(7.1c)

Mit

 $\overline{\mathbf{e}} \equiv \overline{\mathbf{A}}_{\mathrm{top}} / \mathbf{A}_{\mathrm{P}} \implies \overline{\mathbf{A}}_{\mathrm{top}} \approx \overline{\mathbf{e}} \mathbf{A}_{\mathrm{P}}$ (7.1d)

Sowie \dot{Q}_{conv} nach Gl. (7.15d), näherungsweise aus Gl. (7.15e).





- Abb. 7.6: Zur Gesamt-Energiebilanz für Abb. das Bilanzgebiet I zwischen Plume und Flamme sowie Pool/ Tank/Lache
- Abb. 7.7: Zur Energiebilanz an der *Phasengrenzfläche* für das Bilanzgebiet II zwischen klarer Verbrennungszone und Flüssigkeitsoberfläche

Für die Energiebilanz (Energie-Rückkopplungsmechanismus) an der *Phasengrenz-fläche* für Bilanzgebiet II [s. Abb. 7.7] zwischen klarer Verbrennungszone und Flüssigkeitsoberfläche in Pool/Tank/Lache resultiert [7.7]:

$$\bar{\hat{\tau}}_{\text{fp}}\,\bar{\dot{Q}}_{\text{ba,tot}}=\bar{\dot{Q}}_{\text{f,ges}}+\bar{\dot{Q}}_{\text{verl}} \tag{7.2a}$$

worin für die Wärmeströme $\dot{Q}_{\text{f,ges}}$ und $\dot{Q}_{\text{ba,tot}}$ gilt:

$$\overline{\dot{Q}}_{f,ges} = \overline{\dot{Q}}_{v} + \overline{\dot{Q}}_{\Delta T} + \overline{\dot{Q}}_{\lambda,f}$$
(7.2b)

$$\overline{\hat{\tau}}_{fp} \, \overline{\dot{Q}}_{ba,tot} \equiv \overline{\dot{Q}}_{ba,rad} + \overline{\dot{Q}}_{ba,\alpha} + \overline{\dot{Q}}_{ba,\lambda}$$
(7.2c)

Bemerkungen zu Gln. (7.2a-c):

a. Die Gleichungen beschreiben den die Flamme selbsterhaltenden Rückkopplungsmechanismus infolge des Wärmestroms $\overline{\dot{Q}}_{ba,tot}$ von der Flamme zur Flüssigkeit. Es wird hier angenommen, dass $\overline{\dot{Q}}_{ba,tot}$ von den Brennstoff- und Pyrolysegas-Ballen (s. Abb. 7.5) *nicht* absorbiert wird, d.h. es gilt demnach $\overline{\hat{\tau}}_{fp} = 1$. Außerdem wird $\overline{\dot{Q}}_{verl} \approx 0$ angenommen.

b. Bei *adiabatischen* Poolflammen ist \overline{v}_a oder $\overline{\dot{m}_f''}$ allein vom Wärmerückstrom ($\overline{\dot{Q}}_{ba,tot}$) zwischen Flamme und Flüssigkeitsoberfläche bestimmt. *Nicht*-adiabatische Poolflammen (z.B. von allen verflüssigten, kalten Gasen auf Wasser oder Land) weisen einen *zusätzlichen* Wärmestrom auf zwischen einem Substrat (z.B. Wasser- oder Landoberfläche) und der Flüssigkeit.

7.2.3.2 Lachengröße bzw. Lachendurchmesser

Bei Zündung einer sich störungsbedingt ausbreitenden Flüssigkeit hängt der Durchmesser d des entstehenden Lachenfeuers ab von den *Freisetzungsszenarien* (3 Kategorien), der *Verschüttungsrate* $\dot{V}_{rf} \equiv \dot{V}_{rf} / t_s$ und der *Abbrandgeschwindigkeit* v_a .

Bei der Kategorie 1 handelt es sich um die *kontinuierliche* Verschüttung (bei endlicher Rate \dot{V}_{rf} über längere Zeit t_s), bei der Kategorie 2 um die *momentane* bzw. *instationäre* Verschüttung (gesamtes V_{rf} in sehr kurzer Zeit t_s bzw. für $\dot{V}_{rf} \rightarrow \infty$) und schließlich bei der Kategorie 3 um die *quasi-kontinuierliche* Verschüttung (bestimmtes V_{rf} wird über eine bestimmte Zeitdauer t_s mit einer endlichen Rate $\dot{V}_{rf}(t)$ verschüttet). Für die am häufigsten auftretende Kategorie 3 gibt es bisher *keine* analytischen Beziehungen.

7.2.3.2.1 Kontinuierliche Freisetzung

Bei der kontinuierlichen Freisetzung (Verschüttung) von Flüssigkeit mit $\dot{V}_{rf} \equiv V_{rf} / t_s$, die schnell zündet berechnet sich der Durchmesser d_e der *stationär* brennenden Lache nach [7.2, 7.8, 7.9]:

$$\overline{d}_{e} = 2 \left(\frac{\dot{V}_{f}}{\pi \overline{v}_{a}}\right)^{1/2}$$
(7.3)

Im stationären Fall, wenn die Abbrandgeschwindigkeit v_a gleich groß ist wie die flächenbezogene Verschüttungsrate $\dot{V}_{rf} / \frac{\pi d_e^2}{4}$, ist die laterale Ausbreitung der Lachenflüssigkeit beendet, so dass hieraus ein stationäres Lachenfeuer resultiert, solange die Freisetzung noch andauert.

Bemerkungen zu Gl. (7.3):

Die Berechnungsformel für d_e gilt unter den folgenden Annahmen und für die folgenden Brennstoffe:

- a. Der dominierende Wärmetransport ($\overline{\dot{Q}}_{ba,tot}$) zur Lachenflüssigkeit erfolgt durch die Flamme.
- b. $\overline{V}_a = \text{const.}$
- c. zutreffend für alle *flüssigen* KWs mit $T_s > T_a$
- d. Für *nicht*-adiabatische Lachen- und Poolfeuer gültig, wenn der Wärmeübergang vom Substrat auf die Lachenflüssigkeit zeitlich konstant ($\alpha = \text{const.}$) ist, was jedoch zu einem höheren \overline{v}_a führt. *Näherungsweise* zutreffend für LNG, LPG auf *Wasser*, *nicht* gültig für verflüssigte KW auf *Land*, da hier der Wärmeübergang mit zunehmender Zeit abnimmt, was in Gl. (7.3) *nicht* berücksichtigt ist.
- e. Die Brennstoffoberfläche ist eben und glatt.
- f. Die Masse der Lachenflüssigkeit bleibt während der Verbrennung konstant, d.h. ein Flüssigkeits*verlust* infolge Perkolation durch den Boden oder infolge einer Teillöslichkeit in Wasser wird nicht berücksichtigt. Allerdings sind die Geschwindigkeiten dieser Effekte für die meisten KW i.A. *relativ klein* im Vergleich zur Abbrandgeschwindigkeit \overline{v}_a .

Der stationäre (Gleichgewichts-) Durchmesser d_e wird innerhalb der Zeit

$$t_{e} = 0.564 \frac{d_{e}}{\sqrt[3]{g_{eff} \ \overline{v}_{a} \ d_{e}}} \ \text{ erreicht, mit der } \text{ effektiven Beschleunigung } g_{eff} = g(1 - \rho_{f} \big/ \rho_{H_{2}O}) \ \text{bei}$$

Verschüttung auf Wasser und $g_{eff} = g$ bei Verschüttung auf Land.

Für kleinere Verschüttungszeiten t < t_e ist \overline{d} < d_e. Ist der stationäre Lachendurchmesser noch *nicht* erreicht, gilt eine dimensionslose Zeit-Durchmesser-Beziehung [7.8, 7.10]:

$$\tau = \left(\frac{2}{3}\right)^{\frac{1}{3}} B\left(\frac{2}{3}, \frac{2}{3}\right) B_{\xi^2/2}\left(\frac{2}{3}, \frac{2}{3}\right)$$
(7.4)

mit

 $\tau \equiv t/t_{ch}$: dimensionslose Zeit; t_{ch} : charakteristische Zeit

B : vollständige Eulersche Betafunktion

 $B_{_{F^2/2}}$: unvollständige *Eulersche* Betafunktion

$$\xi \equiv \overline{d} / d_{e}$$

$$t_{ch} = (1.587)^{-1} d_e / (g_{eff} \overline{v}_a d_e)^{1/3}$$

Für $\xi = 1$ gilt: \overline{d} / d_e , $t = t_e$ und $\tau \approx 0.9$

7.2.3.2.2 Momentane Freisetzung

Eine *momentane* bzw. *instationäre* Freisetzung (Verschüttung) führt zu einer *instationären* Lache und für den Ausbreitungsdurchmesser d(t) einer Flüssigkeit gilt [7.8, 7.9]:

$$\left(\frac{d(t)}{d_{max}}\right)^{2} = \frac{\sqrt{3}}{2} \left(\frac{t}{t_{max}}\right) \left(1 + \left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1\right) \left(\frac{t}{t_{max}}\right)^{2}\right)$$
(7.5)

Innerhalb der Zeit t_{max} wird ein maximaler Durchmesser d_{max} des Feuers erreicht, wobei die folgenden Beziehungen gelten:

$$t_{max} = 0.6743 \left(V_{ff} / \left(g_{eff} \overline{v}_{a}^{2} \right) \right)^{1/4}$$
(7.6a)

$$d_{max} = 2 \left(V_{ff}^3 \frac{g_{eff}}{\overline{v}_a^2} \right)^{no}$$
(7.6b)

Bemerkungen zu Gln. (7.5, 7.6a,b):

- a. Die momentane Freisetzung erfolgt bis zur Gleichheit von gravitativer Ausbreitungskraft und Trägheits- bzw. Widerstandskraft bei Berücksichtigung der Abnahme der Brennstoffmasse infolge Verbrennung während der gesamten Freisetzung.
- b. Ein momentanes instationäres Lachenfeuer nimmt in seinem Durchmesser d zu, bis der gesamte Brennstoff infolge Verbrennung verbraucht oder eine Barriere erreicht ist. Deshalb existiert d_{max} nur für sehr kurze Zeit. Dies bedeutet, dass die Berechnung von d_{max} sehr *konservativ* ist.
- c. Ein zeitlich gemittelter Lachendurchmesser \overline{d} kann durch Integration erhalten werden:

$$\overline{d} = \frac{1}{t_{\text{max}}} \int_{0}^{t_{\text{max}}} d(t) dt$$
(7.6c)

d. Es gelten ansonsten die gleichen Annahmen, wie in den Bemerkungen von Gl. (7.3) dargestellt.

Die Verwendung von \overline{d} führt zu einer besseren Abschätzung der Bestrahlungsstärke \overline{E} (*außerhalb* der Flamme) als die Benutzung von d_{max}. Allerdings werden durch \overline{d} die kurzzeitig größeren Gefahrenpotentiale infolge einer erhöhten thermischen Strahlung in den späteren Stadien des Feuers auf Objekte *innerhalb* des Feuers *unter*schätzt.

7.2.3.3 Abbrandgeschwindigkeit

Nach *Hottel* [7.11] gilt für die Abbrandgeschwindigkeit (burning velocity) allgemein nach Gln. (7.2b, c) bei Vernachlässigung der folgenden Wärmeströme, d.h. für $\dot{Q}_{\lambda,f} \rightarrow 0$, $\dot{Q}_{verl} \rightarrow 0$:

$$v_{a}(d, fuel, t, (-\Delta h_{c})/\Delta h_{v}, u_{w}, Poolrandeffekte) = \frac{\dot{Q}_{ba,tot}(d, fuel, t, (-\Delta h_{c}), u_{w})}{A \rho_{f}(\Delta h_{v} + c_{p,v}T_{f,bp} - c_{p,f}T_{f,a})}$$
(7.8a)

Relativ gut untersucht ist die Abhängigkeit von d, für die näherungsweise gilt [7.12]:

$$\overline{v}_{a}(d) = \overline{v}_{a,max}(1 - e^{-k\beta d}) \equiv \overline{v}_{a,max}(\phi_{F,f}) 2\varepsilon_{F,f} \text{ für } 0.4 \text{ cm} < d < 3000 \text{ cm}$$
(7.8b)

Bemerkungen zu Gln. (7.8a,b):

- a. Entsprechend GI.(7.2c) gilt für den ersten Term $\overline{\dot{Q}}_{ba,rad}$ auf der rechten Seite $\overline{\dot{Q}}_{ba,tot}(d) / A \approx \overline{\dot{Q}}_{ba,rad}(d) / A \sim \phi_{F,f} 2 \varepsilon_{F,f}(d)$, der nach *Hertzberg* [7.15] oder nach *Werthenbach* [7.13, 7.14] näherungsweise berechnet werden kann. Der schwierig *abschätzbare* Strahlungswärmerückstrom $\overline{\dot{Q}}_{ba,rad}$ wird teilweise von den Brennstoff- und Pyrolysegas-Ballen absorbiert (s. Abb. 7.2), d.h. es ist zu berücksichtigen, dass $\overline{\hat{\tau}}_{fp} < 1$ gilt; s. auch Bemerkung (a) zu GI. (7.10a).
- *b*. Die Einstrahlzahl $\varphi_{F,f}$ zwischen Flamme (F) und Flüssigkeitsoberfläche (f) wird als konstant angenommen und ist in $\overline{v}_{a,max}(\varphi_{F,f})$ enthalten.
- c. Die Gültigkeit insbesondere für: Benzin, Diesel, Kerosin, Transformatorenöl, Petroleum (Messungen von *Blinov* [7.16]).

- d. Gültig für d \gtrsim 1 m und windstille Bedingungen.
- e. Gültig für *adiabatische* (Wärmeübertragung zwischen Substrat und Brennstoff) Lachenund Poolfeuer sowie Tankfeuer. Für *nicht*-adiabatische Poolfeuer erhöht sich V
 _a um einen additiven Term, der z.B. in [7.5] hergeleitet wird.
- f. Gemessene Abbrandgeschwindigkeiten $\overline{v}_{a,max}$ in Abhängigkeit von Brennstoff sind in Tab. A7.1 zusammengestellt. Der Index "max" bezieht sich allein auf d, nämlich d $\rightarrow \infty$.

Die Abbrandgeschwindigkeit v_a bzw. die Massenabbrandrate \dot{m}_{f}'' (s. Kap. 7.2.3.4) sind fundamentale *Schlüsselgrößen* zum physikalisch-chemischen Verständnis eines Pool-, Lachen- und Tankfeuers.

Nach *Burgess* [7.17] gilt für $\overline{v}_{a,max}$ näherungsweise (*Vernachlässigung* von Wärme*leitungs*und Wärmek*onvektions*termen bei großen offenen Feuern) die *Zahlenwert*gleichung:

$$\overline{v}_{a,max} = 1.27 \cdot 10^{-6} \left(-\Delta h_{c,i} \right) / \Delta h_{v,i} , d \gtrsim 1 \text{ m}$$
(7.8c)

Bemerkungen zu Gl. (7.8c):

- a. Gültigkeit insbesondere für i = Methanol, H_{2, liquid}, LNG (auf Land), Butan, Hexan, Benzol, Xylole.
- b. Es findet keine externe Brennstoffzufuhr statt.
- $\text{c. Es gilt} \ (\overline{c}_{p,v} T_{f,bp} \overline{c}_{p,f} T_{f,a}) \!\ll\! \Delta h_v \,.$

Für die maximale Abbrandgeschwindigkeit $\overline{v}_{a,max}$ von Flüssigkeits*gemischen* (aus i Komponenten) gilt für $\overline{c}_{p,v} \approx \overline{c}_{p,f}$ [7.18]:

$$\overline{v}_{a,max} = 1.27 \cdot 10^{-6} \frac{\sum_{i} \tilde{y}_{i} (-\Delta h_{c,i})}{\sum_{i} \tilde{y}_{i} \Delta h_{v,i} + \sum_{i} \tilde{x}_{i} \int_{T_{f,a}}^{T_{f,b}} \overline{c}_{p,i}(T) dT}$$
(7.8d)

oder näherungsweise für $(-\Delta h_{c,i}) \approx \text{const.}, (-\Delta h_{v,i}) \approx \text{const.}$, jeweils für alle i, und $\overline{y}_i \approx \overline{x}_i$ [z.B. für Benzin mit den Komponenten i]:

$$\overline{\mathbf{v}}_{a,max} \approx \sum_{i} \overline{\mathbf{y}}_{i} \, \overline{\mathbf{v}}_{a,i}$$
 (7.8e)

Bemerkungen zu Gln. (7.8d,e):

- a. Gemische, insbesondere mit Komponenten i, deren Flüchtigkeiten weit auseinander liegen, brennen mit einer zeitabhängigen v_a(t): zu Beginn wird v_a bestimmt durch die am leichtesten flüchtige Komponente i; zur Hälfte der Brenndauer muss die weniger flüchtige Komponente noch bis zum Siedepunkt erwärmt werden; in der Endphase der Verbrennung wird v_a durch die höher siedende Fraktion bestimmt.
- b. Beziehung (7.8d) basiert auf umfangreichen experimentellen Untersuchungen von Gemischen aus Unsymmetrischen Dimethyl-Hydrazon (UDMH) und Diethyltriamin (DETA). $\vartheta_{S,UDMH} \approx 63 \text{ °C}, \vartheta_{S,DETA} \approx 207 \text{ °C}.$
- c. Beide Gleichungen (7.8.d,e) geben eine gute Abschätzung von $\overline{v}_{a,max}$, wenn die Komponenten weit auseinander liegende Siedepunkte aufweisen.
- d. Die Korrelation (7.8d) ist eine recht gute N\u00e4herung f\u00fcr alle fl\u00fcssigen KW, ausgenommen sind die verfl\u00fcssigten Gase [z.B. LNG, LPG, LEG], deren \u00e7_{a,max} meist um den Faktor 2 gr\u00f6\u00e9 ist.
- e. In [7.24] sind Gleichungen angegeben für die Berechnung von v_{a,max} in großen Lachenund Poolfeuern, basierend auf *groß-skaligen* Experimenten. Zuverlässige Messungen liegen jedoch nur für m^{''}_{f,max} vor (s. Gl. (7.10a)).Für 5 m < d < 10 m nimmt v_{a,max}(d) bzw. m^{''}_{f,max}(d) etwas ab. Ursachen sind eine schlechtere Durchmischung mit Luft, wodurch eine zunehmend *größere kalte* Brennstoffdampfzone entsteht, sowie niedrigere Flammentemperaturen T und kältere Rußballen [Ruß-Blockierungseffekt] auftreten können (s. auch Bemerkungen zu Gl. (7.10a)).

7.2.3.4 Massenabbrandrate bei Einzel- und multiplen Feuern

Für die fundamentale Schlüsselgröße Massenabbrandrate [mass burning rate] $\overline{\dot{m}_{f}}^{"}$ eines *Einzel-* Lachen-, Pool- und Tankfeuers gilt nach *Burgess* [7.12, 7.78] die folgende empirische *Zahlenwert*gleichung, wenn $\overline{\dot{m}_{f.max}}^{"}$ [s. Gl. (7.10a)] *nicht* vorliegt:

$$\bar{\dot{m}}_{f}'' \equiv \bar{\dot{m}}_{f} / A = \frac{10^{-3} (-\Delta h_{c,i})}{\Delta h_{v,i} + c_{p,f} (T_{f,bp} - T_{f,a})}$$
(7.9)

Bemerkungen zu Gl. (7.9):

- a. Gültig für viele Einzel-Komponenten (insbesondere Butan, Hexan, Benzin, JP-4, Methanol, Aceton, Benzol, Xylole, LNG, LPG, LEG) bei Umgebungsedingungen ohne Windeinfluss; beste Abschätzung, wenn m^{*}_{f,max} nicht vorliegt.
- b. Gültig allein für *adiabatische* Lachen- und Poolfeuer sowie für Tankfeuer (siehe auch Bemerkung (e) zu Gln. (7.8.a,b).
- c. Gültig für $C_{p,v} \approx C_{p,f}$.

Nach [7.12] sowie nach [7.24, 7.54] gilt für $\dot{\vec{m}}_{f}'(d)$, entsprechend GI.(7.8b) wenn $\dot{\vec{m}}_{f,max}''$ vorliegt (z.B. Tab. A7.1):

$$\overline{\dot{m}}_{f}''(d) = \overline{\dot{m}}_{f,\max}''(1 - e^{-k\beta d}) \equiv \overline{\dot{m}}_{f,\max}'' 2\varepsilon_{F,f}(d)$$
(7.10a)

Bemerkungen zu Gl. (7.10a):

 $(1 - e^{-k\beta d} \equiv 2\varepsilon_{F,f}(d) = \varepsilon_F$, worin $\varepsilon_{F,f}$ der effektive Emissionsgrad zwischen Flamme (F) und Flüssigkeit (f) ist [7.15, 7.17]; es gilt für den *strahlungs*bestimmten Grenzfall (s. (d)) der Zusammenhang:

$$\varepsilon_{F,f}(d) = \frac{0.5 \varepsilon_f \varepsilon_F(d)}{\varepsilon_f + (1 - \varepsilon_f) \varepsilon_F(d)} = 0.5 \varepsilon_F(d), \quad \text{für } \varepsilon_f = 1$$
(7.10b)

Die Gln. (7.10a,b) stellen eine Methode zur Bestimmung von $\varepsilon_{F}(d)$ aus gemessenen Massenabbrandraten $\overline{\dot{m}}_{f}''(d)$ und $\overline{\dot{m}}_{f,max}''$ dar.

Die bedeutendste Größe in GI. (7.10d) ist die *maximale* Massenabbrandrate (siehe Tab. A7.1) für d $\rightarrow \infty$, die sich mit $\overline{v}_{a,max}$ entsprechend GI. (7.8c) berechnet nach der *Zahlenwert*gleichung:

$$\overline{\dot{m}_{f,\text{max}}''} = \rho_f \overline{v}_{a,\text{max}} \approx 1.27 \cdot 10^{-6} \rho_f (-\Delta h_{c,i} / \Delta h_{v,i})$$
(7.10c)

oder mit guter Näherung mit der Zahlenwertgleichung GI. (7.9). Mit GI. (7.8d) für brennbare Flüssigkeits*gemische* gilt:

$$\overline{\dot{m}}_{f,max}'' = \rho_f \overline{v}_{a,max} = 1.27 \cdot 10^{-6} \frac{\rho_f \sum_i \tilde{y}_i (-\Delta h_{c,i})}{\sum_i \tilde{y}_i \Delta h_{v,i} + \sum_i \tilde{x}_j \int_{T_{f,a}}^{T_{f,b}} \overline{c}_{p,f,i}(T) dT}$$
(7.10d)

oder näherungsweise analog zu Gl.(7.8e):

$$\overline{\dot{m}}_{f,max}'' \approx \rho_f \sum_i \tilde{y}_i \, \overline{v}_{a,i}$$
(7.10e)

Im Falle unfallbedingter Poolfeuer ist $\overline{\dot{m}_{f,max}}^{"}$ ein Maß für die Verbrennungsgeschwindigkeit. Die GI. (7.10d) korreliert die experimentellen Daten nicht ganz so gut wie die GI. (7.8d), deckt jedoch einen weiten Bereich von Brennstoffen ab, z.B. werden auch die verflüssigten Gase relativ gut beschrieben.

Neuere Messung [7.24] haben gezeigt, dass die Massenabbrandraten $\dot{m}'_{f}(d)$ nicht bereits bei $d' \gtrsim 1 \text{ m}$ [7.11] oder $d \approx 5 \text{ m}$ [7.24] einen etwa konstanten (Grenz-) Wert ($\dot{m}''_{f,max}$) erreichen, sondern erst bei $d' \approx 9 \text{ m}$ (für Diesel-, Lachen und Poolfeuer [7.26], aus gemessenen Bestrahlungsstärken E]) oder bei $d' \approx 20 \text{ m}$ (für crude oil (Rohöl)-Poolfeuer) [7.25]. Aus Gl. (7.10a) folgt, dass der etwa konstante Grenzwert ($\dot{m}''_{f,max}$) bei umso *größerem* Lachen- und Pooldurchmesser d' erreicht wird, je *kleiner* das Produkt (k x β) des brennbaren Stoffes ist. Experimentell wurde gezeigt, dass Kohlenwasserstoffgemische mit einem *breiten* Flüchtigkeitsbereich *kleine* (k β) -Werte aufweisen.

Nach [7.24, 7.54] werden bei Lachen- und Poolfeuern die folgenden Grenzfälle unterschieden:

- konvektiv, laminar (d < 0.05 m);
- konvektiv, turbulent (d < 0.2 m);
- strahlungsbestimmt, optisch dünn (0.2 m < d < 1.0 m) und
- strahlungsbestimmt, optisch dick (d > 1.0 m).

Die optische Dicke (bzw. optische Tiefe) einer Flamme ist als kL_b oder p_gL_b bzw. $k\beta d$ oder $k\beta H$ definiert [7.1, 7.15, 7.60, 7.79] und bewirkt eine Extinktion (Schwächung infolge Absorption und Streuung) der Strahlungsintensität $L_{\lambda}(s)$ bzw. L(s) durch die transparente ($\tau_F > 0$) Flamme[7.1, 7.79]. Es gilt $\alpha_F + \tau_F = \varepsilon_F + \tau_F = 1$ bzw. $\tau_F = 1 - \varepsilon_F$, wenn die Strahlung näherungsweise weder gestreut noch reflektiert wird. Für optisch dünne Flammen ($kL_b \le 0.02$, $\tau_F \approx 0.98$ oder $p_gL_b \rightarrow 0$) gilt $L_b = 4 V_F/A_F$. Für optisch dicke Flammen ($kL_b > 4.5$, $\tau_F \approx 0.01$) ist $L_b = b_{bl} 4 V_F/A_F$. Der Windeinfluss auf $\overline{\dot{m}_{f}'}$ ist zu berücksichtigen, wenn z.B. \overline{H}/d oder d berechnet werden sollen [7.26]. Es gilt nach [7.24] die folgende Abhängigkeit von u_w:

$$\frac{\overline{\dot{m}_{f}''}_{w}(u_{w})}{\overline{\dot{m}_{f}''}} = 1 + \frac{a_{2}u_{w}}{d}, \text{ für } u_{w} \leq 5 \text{ m/s}$$

$$(7.11)$$

Die GI.(7.11) ist die z. Zt. beste verfügbare Formel zur Berechnung des Windeinflusses auf die Massenabbrandrate $\overline{\dot{m}_{f}'}$, jedoch nicht anwendbar für Alkohole sowie für $u_{w} \gtrsim 5$ m/s, weil unter diesen Bedingungen das Feuer ausgeblasen werden kann.

Ein detaillierter Überblick über Abbrandgeschwindigkeiten, abhängig vom Brennstoff, von Brennstoffgemischen, von Brennstoff-Wassergemischen, von der Temperatur der Brennstoffoberfläche, von der Temperaturverteilung im Brennstoff, von d, von $\dot{Q}_{ba,tot}$ und von \bar{u}_w ist in [7.55] zu finden. Messungen haben gezeigt [7.64], dass z.B. bei *multiplen* Tankfeuern eine Zunahme der Massenabbrandrate \bar{m}_{f} des *Einzel*-Feuers um den Faktor 2 bis 4 eintritt. Die Ursache ist die Einwirkung der thermischen Strahlung benachbarter Feuer auf die Brennstoffoberfläche des betrachteten Feuers, wodurch sich die Verdampfungsrate des flüssigen Brennstoffes deutlich erhöht. Berechnungsgleichungen hierfür gibt es noch nicht.

7.2.3.5 Sichtbare Flammenlänge und Länge der klaren Verbrennungszone

Für die Berechnung der grundsätzlich zeitabhängigen Flammenform (Flammenlänge \overline{H} , Flammenneigung θ , Flammen-Drag d_w), werden insbesondere bei Windeinfluss häufig die folgenden drei Poolfeuer-Geometrien als Näherung verwendet [7.2] :

a. (geneigte) zylindrische
Flamme
b. (geneigte) konische Flamme
c. (geneigte) zylindrische
Flamme mit verlängertem

Flammenbasisdurchmesser

 $d_w > d$

$$\theta$$
 (c)
(c)
 $d_{W} > d$

Abb. 7.8: Flammenmodelle für die sichtbare Flammenlänge unter Einflußnahme des Windes [7.2]

d

Die Definition der Flammenlänge ist insbesondere bei *rußenden* Flammen und instationären (Lachen-)Feuern nicht einfach. Als zweckmäßiges Kriterium für die Flammenlänge *nicht*-rußender Flammen kann z.B. das *Intermittenz-Kriterium* nach [7.59] herangezogen werden. Die dimensionslose *zeitlich gemittelte* (\overline{H}/d) und *maximale* $((H/d)_{max})$ sichtbare Flammen-länge eines stationären Einzel-Feuers lassen sich, abhängig von Fr_f (0.003 < Fr_f < 0.05) sowie von \overline{u}_{w}^{*} , mit den folgenden Korrelationen berechnen:

$$\overline{H}/d = a \operatorname{Fr}_{f}^{b} \overline{u}_{w}^{*c} \text{ und } (H/d)_{max} = a \operatorname{Fr}_{f}^{b} \overline{u}_{w}^{*c}$$
(7.12a)

sowie mit der skalierten Windgeschwindigkeit \overline{u}_{w}^{*} :

$$\overline{u}_{w}^{*} = \overline{u}_{w} / \overline{u}_{ch} \quad \text{oder} \quad \overline{u}_{w}^{*}(10) \equiv \overline{u}_{w}(10m) / \overline{u}_{ch}$$

$$(7.12b)$$

worin für \overline{u}_{ch} gilt:

$$\bar{u}_{ch} = (g\bar{m}_{f}'' d / \rho_{v})^{1/3} \approx (g\bar{m}_{f}'' d / \rho_{a})^{1/3}$$
(7.12c)

Es gibt eine relativ große Anzahl von häufig benutzten Korrelationen mit jeweils unterschiedlichen Parametern a, b, c die in Tab. 7.1 zusammengestellt sind.
Tabelle 7.1:Wichtige empirische Korrelationen zur Abschätzung der dimensionslosen
sichtbaren Flammenlängen \overline{H}/d nach Gl. (7.12a), mit Hinweisen zu den
Gültigkeitsbereichen; (H/d_{max}) : relative maximale sichtbare Flammenlänge;
 \overline{H}/d : relative zeitlich gemittelte sichtbare Flammenlänge

Name der Korrelation	а	b	с	Bemerkungen	Quelle
Thomas 1	42	0,61	0	gemessen an Holzgitterfeuern; \overline{H}/d ; kein Windeinfluss	[7.28]
Thomas 2	55	0,67	-0,21	gemessen an Holzgitterfeuern; (H/d) _{max} ; mit Windeinfluss	[7.28]
Moorhouse 1	6,2	0,254	-0,044	gemessen an großen zylindrischen LNG-Poolfeuern; (H/d) _{max} ; $\overline{u}_{w}^{*} = \overline{u}_{w}^{*}(10)$	[7.29]
Moorhouse 2	4.7	0.21	-0.114	gemessen an großen konischen LNG- Poolfeuern; (H/d) _{max} ; $\overline{u}_{w}^{*} = \overline{u}_{w}^{*}(10)$	[7.29]
AGA	1,0	-0.19	0.06	gemessen an LNG-Poolfeuern	[7.32]
Mangialavori und Rubino	31.6	0,58	0	gemessen an Heptan-, Hexan- und Isobuten-Poolfeuer; kein Windeinfluss (H/d) _{max} ; 1 m < d < 6 m	[7.30]
Pritchard und Binding	10.615	0.305	-0.03	gemessen an KW-Poolfeuern, insbesondere LNG; (H/d) _{max} ; 6 m < d < 22 m	[7.31]
Muñoz	8.44		-0.126	gemessen an Benzin- und Diesel- Poolfeuern; $(H/d)_{max}$; d [m] = 1.5, 3, 4, 5 und 6	[7.26]
Muñoz	7.74	0.375	-0.096	gemessen an Benzin- und Diesel- Poolfeuern; (\overline{H}/d) ; d [m] = 1.5, 3, 4, 5 und 6	[7.26]
Muñoz	11.76	0.375	-0.096	gemessen an Benzin- und Diesel- Poolfeuern; $(H/d)_{max}$ und $(H/d)_{max} =$ 1.52 (\overline{H}/d)	[7.26]

Zu erwähnen ist noch die häufig zitierte *Heskestad*-Korrelation [7.27], die aus Daten im Labormaßstab hergeleitet wurde, jedoch für einen weiten Bereich an Brennstoffen gültig ist [7.26]:

$$H/d = -1.02 + 3.7 Q^{*2/5}$$
 (7.12d)

$$Q^{\star} = \frac{\dot{Q}_{c}}{\rho_{a}c_{p,f}T_{a}d^{2}\sqrt{gd}}$$
(7.12e)

Es ist zu bemerken, dass bei allen Flammenlängen-Korrelationen für *stationäre* Feuer die *maximalen* sichtbaren Flammenlängen $(H/d)_{max}$ etwas besser vorhergesagt werden als die *zeitlich gemittelten* sichtbaren Flammenlängen \overline{H}/d .

Häufig werden in der Literatur die *Moorhouse* 1- und auch die *Thomas* 2- Korrelationen zur Berechnung von \overline{H}/d empfohlen, wenn keine Messungen vorliegen.

Für eine große *Benzin*-Tankflamme (d = 23 m) wurde $(\overline{H}/d)_{exp} \approx 1.7$ gemessen [7.16]. Als eine besonders wichtige Größe erweist sich die Länge \overline{H}_{cl} der klaren Verbrennungszone, die sich von der Pooloberfläche (x = 0) bis zu der Höhe erstreckt, in der (x = \overline{H}_{cl}) mit guter Näherung der gesamte eingesetzte Brennstoff verbrannt ist.

Die Länge $\overline{H}_{cl}(d)$ [siehe Abb. 7.5] lässt sich mit empirischen Korrelationen [7.5, 7.6] in Abhängigkeit von Fr_f berechnen. So gilt für die Länge $\overline{H}_{cl}(d)$ der klaren Verbrennungszone, die eine *lokale maximale* axiale Temperatur T_{max} und folglich auch eine *maximale* spezifische Ausstrahlung \overline{SEP}_{max} [s. Kap. 7.3.9] des Feuers aufweist, die Beziehung [7.5]:

$$\overline{H}_{cl}(d)/d = (13.8 \pm 2.15) Fr_{f}^{2/3}$$
 (7.12f)

Eine andere Korrelation für $\overline{H}_{cl}(d)$ ist [7.6]:

$$\frac{H_{cl}(d)}{\overline{H}(d)} = 0.75 + \log_{10} Fr_{f}^{1/4}$$
(7.12g)

Bemerkungen zu Gln. (7.12f,g):

- a. Gl. (7.12f) basiert auf Messungen an adiabatischen Heptan-Poolfeuern mit 0.3 m \leq d \leq 6 m, $8 * 10^{\Box 3}$ < Fr_f < $11 * 10^{\Box 3}$, $0.45 < \overline{H}_{cl} / d < 0.75$.
- b. Gl. (7.12g) basiert auf Messungen an LNG-Poolfeuern (d = 35 m) [7.6]. Allgemein gilt demnach: $0.15 \le \overline{H}_{cl} / \overline{H} \le 0.25$.

Die folgende Korrelation für $\overline{H}_{d}(d)/d$ berücksichtigt auch den Einfluss der Art des Brennstoffs (für KW-Brennstoff) [7.31] : $\overline{H}_{cl}(d)/d = 11.404 \ Fr_{f}^{1.13} \ \overline{u}_{w}^{*}(C/H)^{-2.49}$

Für eine grobe Abschätzung von \overline{H}_{cl} und \overline{H}_{Pul} gelten auch die folgenden Annahmen:

$$\bar{H}_{_{\text{cl}}}\approx 0.1\;\bar{H}\;,\;\; 0.1\;\bar{H}\lesssim \bar{H}_{_{\text{pul}}}\lesssim 0.4\;\bar{H}$$

Für die Höhe (bzw. Länge) H_{pl} der Intermittenzzone (Zone 3, s. Abb. 7.2) existiert die folgende empirische Korrelation [7.33], basierend auf Messdaten von Heskestad [7.33]: $\overline{H}_{ol} / \overline{H} = 0.167 - \log_{10} Fr_{f}^{1/4}$, (7.12i) für 7.5 * 10^{-4} < Fr_f < 2.5 * 10^{-1}

Im Rahmen des validierten Strahlungsmodells OSRAMO II [s. Kap. 0] gilt für die Berechnung der Länge der heißen, klaren Verbrennungszone die Zahlenwertgleichung [7.63]:

$$\overline{H}_{cl}^{II}/d \approx 1.39 \cdot 10^{-3} \overline{f}_{rad,cl}^{II}(d) \dot{m}_{f,max}^{\prime\prime} \left(-\Delta h_{c}\right)$$

$$(7.12j)$$

mit dem Strahlungsanteil der klaren Verbrennungszone:

$$\overline{f}_{rad,cl}^{II}(d) \approx \frac{\left(1 + 4 \,\overline{H}/d\right) \overline{SEP}_{cl}^{ma}}{3.24 \cdot 10^3 \,T_{fb} \sqrt{d}}$$
(7.12k)

und der Annahme:

$$\overline{\text{SEP}}_{cl}^{ma} \approx \overline{\text{SEP}}_{cl}^{ll} \equiv \overline{\text{SEP}}_{hs}^{ma} = 180 \text{ kW/m}^2$$
(7.12l)

Mit GI. (7.12I) wird angenommen, dass die unbekannte spezifische Ausstrahlung \overline{SEP}_{cl}^{ma} der klaren, heißen Verbrennungszone im Rahmen des validierten Strahlungsmodells OSRAMO II abgeschätzt wird mit der spezifischen Ausstrahlung $\overline{\text{SEP}}_{hs}^{ma}$ der hot spots (hs).

(7.12h)

Neue Messungen [7.64] haben gezeigt, dass bei multiplen Feuern in Folge einer deutlichen Zunahme der Massenabbrandrate $\overline{\dot{m}_{f}}^{"}$ die relative maximale Flammenlänge (H/d)_{max} eines individuellen Feuers deutlich größer ist als die relative Flammenlänge (H/d)_{max} eines *Einzel*-Feuers des gleichen Durchmessers wie der Durchmesser der gesamten Matrix des multiplen Feuers.

7.2.3.6 Flammenneigungswinkel

Zur Abschätzung von zeitlich gemittelten Flammenneigungswinkeln $\overline{\theta}$, die stark streuen, existieren die folgenden *zwei* Typen von Korrelationen, die in Tab. 7.2 zusammengestellt sind:

sowie als	$\Theta(Fr_{w},Re_{w})$	
$\frac{\tan\overline{\theta}}{\cos\overline{\theta}} =$	= c ₁ Fr ^{d₁} _w Re ^{e₁} _w	(7.13c)

Name der Korrelation	a ₁	b ₁	C ₁	d ₁	e ₁	Bemerkungen	Quelle
AGA	1	-0,5				gemessen an LNG Poolfeuern	[7.8]
Thomas	0.7	-0,49				gemessen an Holzgitterfeuern	[7.28]
Moorhouse	0.86	-0.25				gemessen an großen zylindrischen LNG-Poolfeuern; $\overline{u}_{w}^{*} = \overline{u}_{w}^{*}(10)$	[7.29]
Muñoz	0.96	-0.26				gemessen an Benzin- und Diesel-Poolfeuern	[7.26]
Johnson			0.7	0.428	0.109		[7.34]
Pritchard und Binding			0.666	0.333	0.177		[7.31]
Rew und Hulbert			3.13	0.431	0	$\overline{\theta}$ wird für kleine Fr_w überschätzt, da für $Fr_w \rightarrow 0$ bzw. $u_w \rightarrow 0$ die unphysikalische Bedingung $d\sin\theta / dFr_w \rightarrow \infty$ vorliegt	[7.34]
Moorhouse			1.9	0.339	0.05	gemessen an zylindrischen LNG-Poolfeuern	[7.29]

Tabelle 7.2: wichtige empirische Korrelationen zur Abschätzung des *mittleren* Flammenneigungswinkels $\overline{\theta}$ nach Gln. (7.13a,b,c)

Aus zeitabhängigen Messungen von $\theta(t,u_w)$ resultiert, dass der Flammenneigungswinkel θ sehr empfindlich (die Flamme ist z.B. *instabil* und ist *nicht* ständig in Windrichtung geneigt) gegenüber *kleinen* Windgeschwindigkeiten (für Fr_w $\ll 0.2$ bzw. bzw. $\overline{u}_w^* < 1$) ist. Gegenüber *höheren* Windgeschwindigkeiten (für Fr_w $\gg 0.2$ bzw. bzw. $\overline{u}_w^* \ge 1$) ist die Flammenneigung dagegen unempfindlich.

Ein Nachteil der Korrelationen (7.13 a,b) ist, dass bei *kleinen* Windgeschwindigkeiten der Flammenneigungswinkel $\overline{\theta} = 0^{\circ}$ sein sollte, während experimentell [7.26] $\overline{\theta} \approx 15^{\circ}$ gefunden wurde ($\cos \overline{\theta} \approx 0.96$), was am besten mit der *Moorhouse*-Korrelation (Tab. 7.1) übereinstimmt.

Die Korrelationen (7.13c) sind für Flammen bei höheren Windgeschwindigkeiten ermittelt worden und sind deshalb bei Anwendung auf geringe Windgeschwindigkeiten – dies ist jedoch grundsätzlich möglich – nicht besonders genau.

7.2.3.7 Flammendrag

Infolge des Windeinflusses neigt sich die Flamme und *überschreitet* die Berandung (im Lee) des Pools oder Tanks. Folglich nähert sich die Flammenoberfläche den leewärts benachbarten Objekten unter Zunahme des übertragenen Wärmestroms, wie in der folgenden Prinzipskizze zu sehen ist.



Abb. 7.9: Modellvorstellung zur Bewertung der Flammenneigung unter Windeinfluss
 [7.29]. Dieser Effekt kann bei größeren Windgeschwindigkeiten auch zum Aufprallen der Flamme auf z.B. einen Nachbartank führen.

Nach *Moorhouse* [7.29] gilt die folgende Korrelation, die auf Messungen an *zylindrischen* LNG-Poolfeuern basiert:

$$\frac{d_{w}}{d} = 1.5 \text{ Fr}_{w}^{0.069} \text{, mit } \overline{d}_{w} > d$$
(7.14)

7.2.3.8 Entrainment - Massenströme der Umgebungsluft

Nach Zündung der Flüssigkeitsoberfläche kommt es sowohl im Bereich der klaren Verbrennungszone (Höhe \overline{H}_{cl} , siehe Abb. 7.2) als auch im Bereich der Plumezone (Höhe \overline{H}_{pl} ; siehe Abb. 7.2) zu einem auftriebsbestimmten Entrainment (Einmischung) von Umgebungsluft. Der gesamte Massen- oder Volumenstrom in der Plumezone besteht

vorwiegend aus der in geringeren Höhen der Flamme eingemischten Luft und nur zu einem kleinen Anteil aus Brandgasen und Rußteilchen sowie aus Schwebstoffen. Die lokale Konzentration der Brandprodukte wird bis zu deren Freisetzung aus der Plumezone (Höhe in der die atmosphärischen Strömungs-verhältnisse den konvektiven Transport und die Dispersion der Brandprodukte dominieren) von der Lufteinmischung bestimmt. Es ist daher bedeutend, den in der Plumezone vorliegenden Massenstrom $\dot{m}_{ent}(x)$ infolge des Luftentrainments zu berechnen.

Nach [7.35] gelten für Feuer-Plumezonen im Fall von *Einzel*-Feuern bei normalen atmosphärischen Bedingungen und typischen Brennstoffen die folgenden Massenströme $\dot{m}_{ent}(x)$ [kg/s] in den verschiedenen Höhen x:

$$\begin{aligned} & f \ddot{u} \quad x > \bar{H} \\ & \overline{\dot{m}}_{ent}(x) = 0.071 \ \dot{Q}_{conv}^{1/3}(x - x_o)^{5/3} \Big[1 + 0.0027 \ \dot{Q}_{conv}^{2/3}(x - x_o)^{-5/3} \Big] \end{aligned} \tag{7.15a} \\ & f \ddot{u} \quad x = \bar{H} \\ & \overline{\dot{m}}_{ent}(x = \bar{H}) = 0.0056 \ \dot{\bar{Q}}_{conv} \end{aligned} \tag{7.15b} \\ & f \ddot{u} \quad x \le \bar{H} \\ & \overline{\dot{m}}_{ent}(x) = 0.0056 \ \dot{\bar{Q}}_{conv} \ x / \bar{H} \end{aligned} \tag{7.15c}$$

Der in den Gln. (7. 15a - 15c) auftretende *konvektive* Wärmestrom \dot{Q}_{conv} [kW], der in der Plumezone abgeführt wird, berechnet sich nach:

$$\dot{Q}_{conv} = \rho \ \overline{u}_{ax} \ \pi \ \overline{r}_{pl}^2 \ \overline{c}_{p,pl} \left(\overline{T}_{pl} - T_a\right) = \pi \ \overline{u}_{ax} \ \overline{r}_{pl}^2 \ \overline{c}_{p,pl} \left(\rho_a - \overline{\rho}_{pl}\right) T_a$$
(7.15d)

oder näherungsweise [7.35]:

$$\overline{\dot{Q}}_{conv} \simeq 0.7 \, \overline{\dot{Q}}_{c}$$
(7.15e)
Methanol: $\overline{\dot{Q}}_{conv} \simeq 0.8 \, \overline{\dot{Q}}_{c}$

7.2.3.9 Konventionelle und modifizierte Zylinderflammen-Strahlungsmodelle

7.2.3.9.1 Konventionelles Zylinderflammen-Strahlungsmodell (SFM)

Nach dem konventionellen [7.36] Zylinderflammen-Strahlungsmodell (SFM: Solid Flame *M*odel), bei dem es sich um eine Art von *Ein*-Zonen-Strahlungsmodell (*ohne* Rußzone) handelt (siehe Abb. 7.10), gilt für die maximale spezifische Ausstrahlung eines Pool- oder Tankfeuers entsprechend dem modifizierten Stefan-Boltzmann Gesetz:

$$\overline{\mathsf{SEP}}_{\mathsf{SFM}}^{\mathsf{ma}} = \overline{\epsilon}_{\mathsf{F}} \,\sigma \Big(\overline{\mathsf{T}}^4 - \overline{\mathsf{T}}_{\mathsf{a}}^4\Big) \tag{7.16a}$$

Mit den Annahmen $\varepsilon_F = 0.95$ (d.h. *graue* Flamme) und Emissionstemperatur $\overline{T} = 1173 \text{ K}$ (900°C) an der Flammenoberfläche folgt aus Gl. (7.16a) die konstante mittlere spezifische Ausstrahlung:

$$\overline{SEP}_{SFM}^{ma} = 100 \text{ kW} / \text{m}^2 \neq f(d, f)$$
(7.16b)



Abb. 7.10: Modellvorstellung zur Zylinder-Strahlungsmodell [7.36]

Bemerkungen zu Gln. (7.16a,b):

a. Der Emissionsgrad ε_F ist eine sehr schwierig abzuschätzende Größe, da er aus den Emissionsgraden der Verbrennungsprodukte Ruß, Wasserdampf, CO₂ zusammengesetzt ist, sowie von der Weglänge durch das Feuer und der Wellenlänge λ der emittierten Strahlung abhängig ist. Erst für größere Poolfeuer, die bei den meisten Kohlenwasserstoffen optisch dick (d > 3 m) sind, gilt für den Emissionsgrad mit guter Näherung $\varepsilon_F = 1$, obwohl derartige Poolfeuer im Prinzip keine Schwarzen Strahler darstellen.

- b. Die Flammentemperatur ist sowohl experimentell als auch theoretisch schwierig zu bestimmen, insbes. bereits deshalb weil die Flammentemperatur der Flammenoberfläche nicht homogen ist und die Flamme i.A. kein Schwarzer Strahler ist.
- c. Die physikalisch plausible mittlere spezifische Ausstrahlung SEP ist als eine typisch "abgeleitete" Größe sowohl theoretisch als experimentell (s. z.B. auf der Basis von Gl. (7.26) aus gemessenen Bestrahlungsstärken E) ziemlich schwierig zu ermitteln, insbesondere infolge der Abhängigkeit von der nicht einfach zu messenden Flammen*oberfläche* A_F bzw. Flammen*länge* H, s. Gln.(7.16c-f). Dies bedeutet also, dass der Zahlenwert der SEP entscheidend von der Fläche A_F bzw. der Länge H bestimmt ist.
- d. Aus den Bemerkungen (a) bis (c) folgt, dass die GI. (7.16a), die auf dem Stefan-Boltzmann-Gesetz bei Berücksichtigung des Strahlungsaustausches zwischen Flamme
 (T) und Umgebung (T_a) basiert, zur Ermittlung der SEP^{ma}_{SFM} – in der Praxis – nur von begrenztem Nutzen ist.
- e. Das SFM wird bisher häufig für *scheinbar* konservative Vorhersagen benutzt, obwohl die Gln. (7.16a,b) auch neuere Messungen [7.39, 7.41] von $\overline{\text{SEP}}_{act}(d,f)$ *nicht* vorhersagen.
- f. Die Gln. (7.16a,b) gelten allein für *Einzel*-Feuer. Bei *multiplen* Feuern wird sich die spezifische Ausstrahlung $\overline{\text{SEP}}^{\text{ma}}$ deutlich erhöhen.

7.2.3.9.2 Modifizierte Zylinderflammen - Strahlungsmodelle (MSFM)

Allgemein berechnet sich die *maximale* (d.h. *ohne* Bedeckung mit schwarzem Ruß) mittlere spezifische Ausstrahlung eines Lachen-, Pool- oder Tankfeuers in Abhängigkeit vom Durchmesser d sowie von der Art des Brennstoffs f nach [7.2]:

$$\overline{\mathsf{SEP}}^{\mathsf{ma}}(\mathsf{d},\mathsf{f},\mathsf{A}_{\mathsf{F}}) \equiv \frac{\overline{\dot{\mathsf{Q}}}_{\mathsf{rad}}^{\mathsf{ma}}}{\overline{\mathsf{A}}_{\mathsf{F}}} = \overline{\mathsf{f}}_{\mathsf{rad}}(\mathsf{d},\mathsf{f})\frac{\overline{\dot{\mathsf{Q}}}_{\mathsf{c}}}{\overline{\mathsf{A}}_{\mathsf{F}}}$$
(7.16c)

$$\overline{\dot{Q}}_{c} = \overline{\dot{m}}_{f,max}''(-\Delta h_{c})A_{P} \equiv \overline{\dot{q}}_{f}''A_{P}$$
(7.16d)

Aus Gln. (7.16c, d) folgt mit $\overline{A}_F = \pi d \overline{H}(d) + \pi d^2/4$ für eine als zylinderförmig angenommene Flammenoberfläche für die mittlere spezifische Ausstrahlung:

$$\overline{\text{SEP}}^{\text{ma}}(d,f) = \overline{f}_{\text{rad}}(d) \ \overline{\dot{m}}_{f,\text{max}}''(-\Delta h_c) A_P / A_F = \frac{\overline{f}_{\text{rad}}(d,f) \ \overline{\dot{m}}_{f,\text{max}}''(-\Delta h_c)}{4 \ \overline{H}(d) / d + 1}$$
(7.16e)

$$A_{P}/\bar{A}_{F} = \frac{\pi d^{2}/4}{\pi d \bar{H}(d) + \pi d^{2}/4} = \frac{1}{4 \bar{H}(d)/d + 1}$$
(7.16f)

Seite 256

Aus den Gln. (7.16c-f) folgt also, dass \overline{SEP}^{ma} insbesondere auch von der Flammenoberfläche \overline{A}_{F} bzw. von der dimensionslosen Flammenlänge $\overline{H}(d)/d$ abhängig ist, wobei vor Allem A_{F} und \overline{A}_{F} schwierig zu messende, unsichere Größen sind.

Der Strahlungsanteil \overline{f}_{rad} eines *Einzel*-Feuers ist der Anteil der thermischen Strahlung am totalen (Verbrennungs-) Wärmestrom, bei Abwesenheit schwarzer Rußschichten, im Wellenlängenbereich 0.3 µm $\leq \lambda \leq 50$ µm und ist definiert als:

$$\overline{f}_{rad} \equiv \overline{\dot{Q}}_{rad}^{ma} / \overline{\dot{Q}}_{c} = \frac{\overline{\dot{Q}}_{rad}^{ma}}{\overline{\dot{q}}_{f}^{"} A_{p}}$$
(7.16g)

wobei ein Verbrennungswirkungsgrad von eins angenommen wird.

Es existieren zwar mehrere Modellansätze und *empirische* Korrelationen für ein gemitteltes $\overline{f}_{rad}(d)$, [z.B. 7.2, 7.9, 7.19]: $\overline{f}_{rad}^{exp}(d) \equiv \overline{f}_{rad,max} e^{-k_1 d}$ (7.16h) $\overline{f}_{rad,max} = 0.35$; $k_1 = 0.05 \text{ m}^{-1}$

Jedoch bleibt eine Berechnung des Anteils $\overline{f}_{rad}(d,f)$, die große Unsicherheiten aufweist, bisher schwierig. Ein erfolgversprechender neuer Modellansatz für ist durch die GI. (7.21a) gegeben.

In Tab. A7.2 (Anhang) sind zahlreiche gemessene, mittlere Strahlungsanteile $\overline{f}_{rad}(d)$ für verschiedene Brennstoffe und Durchmesser d zusammengestellt. Es ist zu erkennen, dass die *mittleren* $\overline{f}_{rad}(d)$ mit dem Durchmesser d meist merklich abnehmen (s. auch Abb. 7.6). Bei größeren Feuern ist der mittlere Strahlungsanteil $\overline{f}_{rad,cl} > \overline{f}_{rad}$ [s. Gl. (7.21a)] der klaren Verbrennungszone zu berücksichtigen. Für $\overline{f}_{rad,cl}$ liegen bisher keine Messungen vor.



Abb. 7.11: Modellvorstellung zum modifzierten Zylinder-Strahlungsmodell

Das *modifizierte* Zylinderflammen-Strahlungsmodell (MSFM), wie in der vorherigen Abbildung zu sehen, ist im Prinzip ein *Ein*-Zonen-Strahlungsmodell und resultiert aus GI. (7.16e) für $\overline{A}_F = \pi d \overline{H}(d)$ so dass sich die maximale spezifische Ausstrahlung $\overline{SEP}_{MSFM}^{ma}$ berechnet nach [7.2]:

$$\overline{\text{SEP}}_{\text{MSFM}}^{\text{ma}}(d,f) = \frac{\overline{f}_{\text{rad}}(d,f)\overline{\dot{m}}_{f}''(-\Delta h_{c})}{4\overline{H}(d)/d}$$
(7.17a)

Nach GI. (7.17a) bedeutet das "*M*odifizierte *S*olid *F*lame *M*odell" (MSFM) also, dass der Strahlungsanteil $\overline{f}_{rad}(d)$ nach GI. (7.16g) über die sichtbare Flammen*oberfläche* \overline{A}_{F} (bzw. LZ) emittiert wird [s. auch Bemerkungen zu Gln. (7.17a-h).

Wie aus GI. (7.17a) folgt lässt sich für $\overline{\text{SEP}}_{MSFM}^{ma} \equiv \overline{\text{SEP}}_{cl}^{ma} \equiv 100 \text{ kW/m}^2$ sowie für $\overline{f}_{rad} \equiv \overline{f}_{rad,cl}$ die Höhe $\overline{H}(d) \equiv \overline{H}_{cl}(d)$ der gelb leuchtenden heißen (Verbrennungs-) Zone für rußende *Einzel*-Feuer (insbes. Benzin- und Kerosin-Feuer) berechnen nach [7.19]:

$$\overline{H}_{cl}(d) / d = \frac{\overline{f}_{rad,cl}(d) \dot{m}_{f,max}''(-\Delta h_c)}{4 \overline{SEP}_{cl}^{ma}}$$
(7.17b)

In GI. (7.17b) bezieht sich der mittlere Strahlungsanteil $\overline{f}_{rad,cl} > \overline{f}_{rad}$ auf die klare (leuchtende) Verbrennungszone und *nicht* auf die gesamte Flamme. Nach dem MSFM wird \overline{H}_{cl} aus GI. (7.17b) berechnet, wenn dort nach GI. (7.16h):

$$\overline{\mathbf{f}}_{\text{rad,cl}}(\mathbf{d}) \equiv \overline{\mathbf{f}}_{\text{rad}}^{\text{exp}}(\mathbf{d}) = 0.35 \cdot e^{-0.05 \, \text{d}} \text{ sowie } \overline{\text{SEP}}_{\text{cl}}^{\text{ma}} = 100 \, \text{kW/m}^2$$
(7.17c)

eingesetzt werden, so dass die folgende *Zahlenwert*gleichung für die Höhe der klaren Verbrennungszone resultiert:

$$\overline{H}_{cl}^{MSFM}/d = 2.5 \cdot 10^{-3} \overline{f}_{rad}^{exp}(d) \overline{\dot{m}}_{f,max}^{"}(-\Delta h_c)$$
(7.17d)

Eine *Variante* des MSFM ist ein *Zwei*-Zonen - Strahlungsmodell mit einer unteren, heißen, klaren Verbrennungszone (LZ) mit \overline{SEP}_{cl}^{ma} und einer *oberen* (upper) schwarzen Rußzone (SZ) mit \overline{SEP}_{u} . Die beiden Zonen lassen sich berechnen nach (z.B. in [7.34]):

$$\overline{\text{SEP}}_{cl}^{ma}(d) = \overline{\text{SEP}}_{max}\left(1 - e^{-kd}\right)$$
(7.17e)

und

$$\overline{SEP}_{u} = (1 - \overline{a}_{SZ})\overline{SEP}_{cl}^{ma} + \overline{a}_{SZ}\overline{SEP}_{SZ}$$
(7.17f)

Für z.B. ein Benzin-Poolfeuer (d = 10 m) mit
$$\overline{a}_{SZ} = 0.98$$
, SEP_{max} = 130 kW/m² und
 $\overline{SEP}_{SZ} = 20 \text{ kW/m}^2$ folgt aus Gln. (7.17e,f) näherungsweise (für k = 2.0):
 $\overline{SEP}_{cl}^{ma} \approx 130(1 - e^{-20}) \text{ kW / m}^2 \approx 130 \text{ kW / m}^2$, und
 $\overline{SEP}_{u} \approx 0.02 \cdot 130 \text{ kW / m}^2 + 0.98 \cdot 20 \text{ kW / m}^2 \approx 22.2 \text{ kW / m}^2$ (7.17h)

Bemerkungen zu Gln. (7.17a - h):

a. Es ist zu betonen, dass größere z.B. Poolfeuer nicht wirklich die theoretische Strahlung allein von ihrer Oberfläche \overline{A}_{F} emittieren. Vielmehr sind die Poolfeuer *keine Flächen*strahler, sondern *Volumen*strahler [7.37], d.h. die emittierte thermische Strahlung variiert auch mit der Weglänge entlang der eine Emission erfolgt. Deshalb ist die Verwendung von SEPs eine zweidimensionale Vereinfachung bzw. Näherung eines sehr komplexen drei-dimensionalen Wärmestrahlungsphänomens [7.38]. Tatsächlich stammt die durch die äußere Flammenoberfläche \overline{A}_{F} emittierte thermische Strahlung von gasförmigen Verbrennungsprodukten (insbes. H₂O-Dampf und CO₂), heißem Brennstoffdampf und insbes. glühenden Rußpartikeln (bei rußenden, größeren Feuern), die sich jeweils in einer gewissen Tiefe im Inneren der Flamme befinden.

Für die in Gl. (7.17f) auftretenden Flächenanteile $\bar{a}_{sz}(d)$ der Rußzonen liegen empirisch ermittelte Werte vor, die von Pooldurchmesser - Klassen und vom Brennstofftyp abhängig sind (Tab. A7.3 im Anhang) [7.31, 7.34].

b. Für *nicht*-KW-Poolfeuer sowie für Poolfeuer mit $M_{KW} < 33$ kg/kmol lässt sich mit einem *Ein*-Zonen-Strahlungsmodell die mittlere \overline{SEP}_{act} berechnen nachfolgender TNO-Korrelation [7.2 (1980), 7.34], in Analogie zu Gl. (7.17a) und basierend auf Messungen an LNG- und LPG-Poolfeuern:

$$\overline{\mathsf{SEP}}_{\mathsf{act}} = \frac{0.35 \,\overline{\dot{\mathsf{m}}_{\mathsf{f}}^{\prime\prime}} \left(-\Delta \overline{\mathsf{h}}_{\mathsf{c}}\right)}{10^{3} \left[72 \,\overline{\dot{\mathsf{m}}_{\mathsf{f}}^{\prime\prime}}^{0.61} + 1\right]} \tag{7.18}$$

c. Für Poolfeuer mit $\overline{\text{SEP}} \gtrsim 25 \text{ kW} / \text{m}^2$ wird die Flamme in die folgenden drei Zonen eingeteilt [7.34] (siehe auch Abb. 7.5)

<i>Basis</i> zone	\overline{H}_{cl}	$\overline{\text{SEP}}^{\text{ma}} \approx 140 \text{ kW}/\text{m}^2$	(7.18b)
Zentrum	\overline{H}_{pul}	$\overline{\text{SEP}}_{\text{act}} \approx 40 \text{ kW}/\text{m}^2$	(7.18c)
(Mittel-)Zone			
<i>Top</i> zone	\overline{H}_{pl}	$\overline{\text{SEP}}_{\text{act}} \approx 10 \text{ kW}/\text{m}^2$	(7.18d)

- Nach [7.34] wird für *große* Poolfeuer (mit längerkettigen KWs) für d ≥ 50 m mit SEP_{act} < 25 kW / m² die Basiszone als eliminiert betrachtet und es werden nur noch die beiden restlichen Zonen (Zentrum-, Topzone) berücksichtigt.
- e. Ein *Mehr*zonen-Strahlungsmodell und insbesondere OSRAMO II (s.Gln. 7.21a c) erlaubt im *Nah*feld der Flamme eine genauere Vorhersage der Bestrahlungsstärke E, insbesondere in Windrichtung als das Ein-Zonen-Strahlungsmodell, das E im *Nah*bereich deutlich unterschätzt.
- f. Die Gln. (7.17a,h) gelten allein für *Einzel*-Feuer. Bei multiplen Feuern werden sich die spezifischen Ausstrahlungen $\overline{\text{SEP}}_{MSFM}^{ma}$, $\overline{\text{SEP}}_{cl}^{ma}$ deutlich erhöhen.

7.2.3.10 Thermische Strahlungsmodelle, die leuchtende spots und schwarze Rußzonen berücksichtigen



Abb. 7.12: Modellvorstellung zum thermischen Strahlungsmodell mit leuchtenden Spots und entsprechenden Rußzonen

Mit einem empirischen Strahlungsmodell nach *Mudan* und Beyler [7.8, 7.9], das leuchtende spots (LS)mit $\overline{SEP}_{LS} = 140 \text{ kW/m}^2 \neq f(d)$ und schwarze Rußflächen (SA) mit $\overline{SEP}_{SA} = 20 \text{ kW/m}^2 \neq f(d)$. Berücksichtigt, lässt sich eine über die gesamte Flammenoberfläche konstante mittlere aktuelle $\overline{SEP}_{act}(d)$ berechnen, basierend auf experimentellen Daten von Benzin-, Kerosin- und JP-5-*Einzel*-Feuern:

$$\overline{\text{SEP}}_{\text{act}}(d) = 140 \cdot e^{-0.12 \, d} + 20 \, (1 - e^{-0.12 \, d}) \tag{7.19a}$$

Die aktuelle SEP_{act} für rußende Einzel-Poolfeuer lässt sich allgemein berechnen nach [7.2]:

$$\overline{SEP}_{act}(d) = \overline{SEP}_{LS}^{ma} \overline{a}_{LS}(d) + \overline{SEP}_{SA} (1 - \overline{a}_{LS}(d))$$
(7.19b)

$$\operatorname{mit} \,\overline{a}_{SA} \equiv A_{SA} \,/\, A_{F} \tag{7.19c}$$

$$\overline{a}_{LS} \equiv \overline{A}_{LS} / \overline{A}_{F} \equiv 1 - \overline{a}_{SA} = e^{-sd}$$
(7.19d)

Aus Gln. (7.19 a,b) folgt, dass $\overline{SEP}_{LS}^{ma} = 140 \text{ kW/m}^2 \neq f(d,f)$ sowie $\overline{SEP}_{SZ} = 20 \text{ kW/m}^2 \neq f(d,f)$ gilt.

Außerdem folgt aus Gl. (7.19a):

$$\overline{SEP}_{act}(d) \approx 20 (1 - e^{-0.12d}) \text{ für } d \ge 20 \text{ m}$$
 (7.19e)

so dass für größere Feuer die heißen, leuchtenden spots (Term 1 in Gln. (7.19 a,b)) *eliminiert* werden.

Bemerkungen zu Gln. (7.19a,b):

- a. Die Bemerkung (a) in Kap. 7.3.10 ist ebenfalls zutreffend.
- b. Entsprechend Gln. (7.19a,b,d) gilt: s = 0.12 1/m .
- c. Für längerkettige KWs mit M_{KW} < 60 kg/kmol sowie für rußende Flammen mit M_{KW} > 60 kg/kmol gilt bei Anwendung von Gln. (7.19a,b) [7.34]:

$$\overline{\text{SEP}}_{\text{act}} \approx 100 \text{ kW}/\text{m}^2$$
 (7.19f)

7.2.3.11 Thermische Strahlungsmodelle, die organisierte Strukturen berücksichtigen

Die ("Organisierte Strukturen")- Strahlungsmodelle [Organized Structure RAdiation Models] lassen sich zwischen den semi-empirischen und Feldmodellen einordnen und berücksichtigen die spezifischen Ausstrahlungen von hot spots (hs) $\overline{SEP}_{hs}(d,f)$ und Rußballen (sp) $\overline{SEP}_{sp}(d,f)$ [7.3, 7.7, 7.39].

Es wird näherungsweise angenommen, dass die hot spots, Rußballen sowie die effektiven Reaktions- bzw. Flammenzone (re) und die Brennstoff-Ballen (fp) [s. auch Abb. 7.5] homogene Gebilde mit den charakterisierten Längen I_i (i = hs, sp, re, fp) darstellen. Zur Verdeutlichung der Strahlungsanteile, sind diese an einem Realfeuer nachfolgend dargestellt.



Abb. 7.13: Poolfeuer mit unterschiedlichen Strahlungszonen (leuchtenden hot spots und schwarzen Rußballen), sowie Abgrenzung der sichtbaren Flammenhöhe H_{cl}

Diese organisierten (dissipativen) Strukturen i [7.3, 7.39, 7.49] werden als *graue* Strahler betrachtet und können die thermische Strahlung teilweise emittieren, absorbieren und transmittieren. Es wird weiter angenommen, dass diese Strukturen i jeweils unterschiedliche, jedoch konstante, mittlere Temperaturen $\overline{T}_{hs} \neq \overline{T}_{sp} \neq \overline{T}_{re} \neq \overline{T}_{fp}$ sowie mittlere modifizierte effektive Absorptionskoeffizienten $\overline{\hat{\varpi}}_{hs} \neq \overline{\hat{\varpi}}_{sp} \neq \overline{\hat{\varpi}}_{re} \neq \overline{\hat{\varpi}}_{fp}$ aufweisen [7.7]. Außerdem wird angenommen, dass die hot spots und Rußballen mit durchmesserabhängigen Flächenanteilen $\overline{a}_{hs}(d) = 1 - \overline{a}_{sp}(d)$ an der Flammenoberfläche statistisch verteilt, auftreten. In den Modellen OSRAMO II, III wird also erstmals das sehr komplexe dreidimensionale Wärmestrahlungsphänomen angemessen berücksichtigt.

7.2.3.11.1 OSRAMO II

Mit OSRAMO II berechnet sich die mittlere *aktuelle* spezifische Ausstrahlung $\bigotimes \overline{SEP}_{act}^{II}(d)$, basierend auf den experimentellen Daten großer JP-4-*Einzel*-Poolfeuer, nach [7.3, 7.7, 7.39]:

$$\overline{\mathsf{SEP}}_{\mathsf{act}}^{\mathsf{II}}(\mathsf{d}) = \overline{\mathsf{a}}_{\mathsf{hs}}(\mathsf{d}) \ \overline{\mathsf{SEP}}_{\mathsf{hs}}^{\mathsf{ma}}(\mathsf{d}) \ + \ \overline{\mathsf{a}}_{\mathsf{sp}}(\mathsf{d}) \ \overline{\mathsf{SEP}}_{\mathsf{sp}}(\mathsf{d})$$
(7.20a)

mit den spezifischen Ausstrahlungen der dissipativen Strukturen i = hs, sp:

$$\overline{\text{SEP}}_{i}(d) = \left(1 - \overline{\hat{\tau}}_{i}(d)\right) \sigma\left(\overline{T}_{i}^{4} - \overline{T}_{a}^{4}\right) + \overline{\hat{\tau}}_{i}(d)\left(1 - \overline{\hat{\tau}}_{re}(d)\right) \sigma\left(\overline{T}_{re}^{4} - \overline{T}_{a}^{4}\right)$$
(7.20b)

den modifizierten, effektiven Durchlass- bzw. Transmissionsgraden der Strukturen i = re, hs, sp:

$$1 - \overline{\hat{\tau}}_{i}(d) = \overline{\hat{\epsilon}}_{eff,i}(d) = 1 - \exp(-\overline{\hat{a}}_{eff,i}d)$$
(7.20c)

den modifizierten, effektiven Absorptionskoeffizienten der Strukturen i = re, hs, sp:

$$\overline{\hat{\varpi}}_{\text{eff},i}(T_i) = \overline{\varpi}_{\text{eff},i}(T_i)b_i = 1.81 \cdot 10^3 \,\overline{f}_v \, b_i \,\overline{T}_i \approx 1.12 \cdot 10^{-3} \, b_i \,\overline{T}_i \tag{7.20d}$$

den charakteristischen Längen der Strukturen i = re, hs, sp:

$$\overline{I}_{i}(d) = \frac{\hat{a}_{eff,i}}{\overline{a}_{eff,i}} d = b_{i} d$$
(7.20e)

sowie den Flächenanteilen der Strukturen hot spots (hs) und Rußballen (sp):

$$\bar{a}_{hs}(d) = 1 - \bar{a}_{sp}(d) = 1 - \exp\left[-(d_o/d)^{a_3}\right]$$
(7.20f)

Eine multiple, nichtlineare Regression bezüglich der gemessenen $\overline{SEP}_{exp}(d)$ -Kurve für den Brennstoff JP-4 ergab die folgenden Temperaturen \overline{T}_i und modifizierten effektiven Absorptionskoeffizienten $\overline{\hat{a}}_{eff,i}$ der Strukturelemente i = re, hs, sp sowie die zwei Parameter [7.7, 7.40, 7.41]:

$$T_{re} = 1413 \text{ K} (1140^{\circ}\text{C})$$
 $\hat{\mathcal{B}}_{eff,re} = 0.380 \text{ m}^{-1}$ $d_o = 3.260 \text{ m}$ $\overline{T}_{hs} = 1329 \text{ K} (1056^{\circ}\text{C})$ $\hat{\overline{\mathcal{B}}}_{eff,hs} = 0.404 \text{ m}^{-1}$ $a_3 = 1.104$ (7.20g) $\overline{T}_{sp} = 632 \text{ K} (359^{\circ}\text{C})$ $\hat{\overline{\mathcal{B}}}_{eff,sp} = 1.035 \text{ m}^{-1}$ $\hat{\overline{\mathcal{A}}}_{sp} = 1.035 \text{ m}^{-1}$

Mit den *physikalischen* Parametern T_i , $\hat{\bar{æ}}_{eff,i}$ und den beiden *empirischen* Parametern d_o , a_3 in Gl. (7.20g) resultieren aus den Gln. (7.20 a-f) die in Abb. 7.5 dargestellten $\overline{SEP}_{hs}(d)$ -, $\overline{SEP}_{sp}(d)$ - und $\overline{SEP}_{act}(d)$ -Kurven für die hot spots (hs), Rußballen (sp) sowie für beide Strukturelemente i = hs, sp zusammen, d.h. die $\overline{SEP}_{act}^{II}(d)$ -Kurve für die gesamte Flamme.

In Abb. 7.14 ist die Abhängigkeit der spezifischen Ausstrahlungen von hot spots (\overline{SEP}_{hs}^{ma}) und Rußballen (\overline{SEP}_{sp}) zu erkennen, die jeweils nach Überschreiten eines Maximums *konstante* \overline{SEP} -Werte $\overline{SEP}_{hs}(d \gtrsim 6m) \approx 180 \text{ kW}/m^2$ und $\overline{SEP}_{sp}(d \gtrsim 1m) \approx 9 \text{ kW}/m^2$ erreichen. Es zeigt sich, dass die *hot spots* eine um den Faktor ≈ 6 höhere maximale \overline{SEP} aufweisen als die Rußballen. Die nach GI.(7.20a) stetige Abnahme der spezifischen Ausstrahlung $\overline{SEP}_{act}^{II}(d)$ der *gesamten* Flamme resultiert aus den stark durchmesserabhängigen Flächenanteilen $a_{sp}(d)$ der Rußballen nach GI.(7.20f), die mit größerem Pooldurchmesser d exponentiell *zu*nehmen.

Mit den aus Gln. (7.20d, g) berechenbaren Konstanten b_i resultieren aus Gl. (7.20e) die charakteristischen Längen $\overline{l}_i(d) = b_i d$ der organisierten Strukturen i = re, hs, sp zu:

$$\bar{l}_{re}(d) = 0.240 \text{ d}$$

 $\bar{l}_{hs}(d) = 0.271 \text{ d}$ (7.20h)
 $\bar{l}_{sp}(d) = 1.462 \text{ d}$



Abb. 7.14: Mit dem validierten Strahlungsmodell OSRAMO II berechnete SEP(d)-Kurven

Das validierte Strahlungsmodell OSRAMO II ermöglicht weiterhin eine Berechnung der Strahlungsanteile $\overline{f}_{rad}^{II}(d)$ [7.7]:

$$f_{rad}^{II}(d) \approx \frac{(1+4\overline{H}/d)\overline{SEP}_{act}^{II}(d)}{3.24 \cdot 10^3 T_{f,bp} \sqrt{d}}$$
 für 0,1 m ≤ d ≤ 100 m (7.21a)

Die Ergebnisse dieser Berechnung sind in der folgenden Grafik in Abhängigkeit des Pooldurchmessers d dargestellt.



Abb. 7.15: Mit dem validiert Strahlungsmodell OSRAMO II berechnete und ermittelte Strahlungsanteile $\overline{f}_{rad}^{II}(d)$ nach GI. (7.21a), $\overline{f}_{rad,cl}^{II}(d)$ nach GI.(7.21b) und $\overline{f}_{rad}^{exp}(d)$ nach GI.(7.17c) sowie gemessene Zahlenwerte für *Einzel-*Poolfeuer unterschiedlicher Brennstoffe.

Für größere Feuer (d $\gtrsim 5$ m) spielt die, mit einer großen Wahrscheinlichkeit wenig rußbedeckte heiße, klare *Verbrennungszone* [7.63], die eine mittlere Höhe von $\overline{H}_{cl}(d)$ und einen relativ hohen Strahlungsanteil $\overline{f}_{rad,cl}^{II}(d)$ aufweist, eine *dominante* Rolle, wie eine erste Auswertung des Buncefield-Ereignisses [7.63] gezeigt hat.

Im Rahmen des validierten Modells OSRAMO II resultiert anstelle von $\overline{SEP}_{act}^{II}(d)$ mit \overline{SEP}_{cl}^{ma} die folgende Beziehung [7.63]:

$$\overline{f}_{rad,cl}(d) \equiv \overline{f}_{rad,cl}^{II}(d) \approx \frac{(1+4\overline{H}/d)\overline{SEP}_{act}^{II}(d)}{3.24 \cdot 10^3 T_{f,bp} \sqrt{d}} \quad \text{für 3 m} \le d \le 100 \text{ m}$$
(7.21b)

worin gilt:

$$\overline{\text{SEP}}_{cl}^{ma} \equiv \overline{\text{SEP}}_{cl}^{ll} \equiv \overline{\text{SEP}}_{hs}^{ma} \approx 180 \text{ kW} / \text{m}^2$$
(7.21c)

Anstelle der empirischen Korrelation GI.(7.17c) sollten die GIn.(7.21a) oder (7.21b) verwendet werden, die im Rahmen des validierten Modells OSRAMO II abgeleitet wurden und die Messungen tendenziell besser wiedergeben als die Korrelation GI. (7.17c).

Aus Gln. (7.17b, 7.21a,b) resultiert die neue Zahlenwertgleichung für \overline{H}_{cl}^{II}/d :

$$\overline{H}_{cl}^{II}/d \approx 1.39 \cdot 10^{-3} \ \overline{f}_{rad,cl}^{II}(d) \ \overline{\dot{m}}_{f,max}^{\prime\prime}(-\Delta h_{c})$$
(7.21d)

7.2.3.11.2 OSRAMO III

Mit dem *stochastischen* Strahlungsmodell OSRAMO III berechnet sich die mittlere spezifische Ausstrahlung $\overline{SEP}_{act}^{III}(d,f)$, basierend auf den experimentellen Daten großer JP-4-*Einzel*-Poolfeuer, nach [7.7, 7.41,7.63]:

$$\overline{SEP}_{act}^{III}(d,f) = \int_{\overline{SEP}} g(\overline{SEP}(d,f)) \ \overline{SEP} \ d\overline{SEP}$$
für $d \ge 1 \text{ m}$
(7.22a)

oder:

$$\approx \int_{41.5}^{430} g(\overline{\text{SEP}}_{hs}(d,f)) \overline{\text{SEP}}_{hs} d\overline{\text{SEP}}_{hs} + \int_{6}^{41.5} g(\overline{\text{SEP}}_{sp}(d,f)) \overline{\text{SEP}}_{sp} d\overline{\text{SEP}}_{sp}$$
(7.22b)

oder:

$$= \overline{a}_{hs}(d,f) < \overline{SEP}_{hs}(d,f) > + \overline{a}_{sp}(d,f) < \overline{SEP}_{sp}(d,f) >$$
(7.22c)

mit den Beziehungen:

$$\overline{a}_{hs}(d,f) = \int_{41.5}^{430} g(\overline{SEP}_{hs}(d,f)) d\overline{SEP}_{hs}$$
(7.22d)

und

$$\overline{a}_{sp}(d,f) = \int_{6}^{41.5} g(\overline{SEP}_{sp}(d,f)) d\overline{SEP}_{sp}$$
(7.22e)

Die Integrationsgrenzen in den Gln. (7.22 b,d,e) resultieren aus den Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen $g(\overline{SEP})$ von hs und sp aus der folgenden Abbildung



Abb. 7.16: Histogramm h_{SEP} und log - normale PDF g(\overline{SEP}) eines JP-4-*Einzel*-Poolfeuers (d = 16m)

Mit OSRAMO III lassen sich aus der empirisch ermittelten (bisher nicht vorhersagbaren) lognormalen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF) $g(\overline{SEP}(d,f))$ die Bereiche $\overline{SEP}_{hs}(f)$, $\overline{SEP}_{sp}(f)$ der hot spots und Rußballen bestimmen [7.7, 7.40, 7.41, 7.63]; z.B. gelten für schwarz rußende *Einzel*-Poolfeuer (d = 16 m, JP-4) die Bereiche:

$$33 \text{ kW/m}^2 \le \overline{\text{SEP}}_{hs}(f) \le 430 \text{ kW/m}^2$$

$$6 \text{ kW/m}^2 \le \overline{\text{SEP}}_{sp}(f) \le 50 \text{ kW/m}^2$$
(7.22f)

In der Tabelle A7.4 im Anhang sind gemessene \overline{SEP}_{act} -Werte in Abhängigkeit zahlreicher Brennstoffe und vom Pooldurchmesser d, die gemessenen (Strahlungs)Temperaturen T und gemessenen dimensionslosen Flammenlängen \overline{H}/d zusammengestellt.

7.2.3.12 Lokale aktuelle spezifische Ausstrahlung nach Raj und Fay

Alle \overline{SEP} -Werte in den Gln. (7.20, 7.22) sind sowohl über die Zeit als auch über die äußere Flammenoberfläche \overline{A}_F gemittelt. Tatsächlich weist eine Poolflamme eine stark inhomogene Temperaturverteilung auf und ist ein typischer Volumenstrahler [s. Bemerkungen zu Gln. (7.17a, 7.18 a,b,d)]. Dies bedeutet, dass auch die \overline{SEP}_{act} -Werte charakteristisch *ortsabhängig* sind, d.h. es liegen *lokale* $\overline{SEP}_{act}(x,y)$ auf der Flammenoberfläche \overline{A}_F vor. Beispielsweise ist \overline{SEP}_{act} an den Flammenrändern bzw. -konturen geringer infolge der kürzeren Weglänge durch die Flamme. Außerdem sind die \overline{SEP}_{hs} -Werte der auf der Oberfläche \overline{A}_F stochastisch auftretenden hot spots (hs) deutlich höher als die \overline{SEP}_{sp} -Werte der stochastisch auftretenden Rußballen (sp), in Übereinstimmung mit Messungen.

Für jeden Höhenbereich (s. Abb. 7.5) sollte ein unterschiedlicher \overline{SEP} -Wert betrachtet werden [7.33]. Eine *experimentelle* Ermittlung von jeweils *lokalen* $\overline{SEP}_{hs}(x,y)$ und $\overline{SEP}_{sp}(x,y)$ auf der Flammenoberfläche \overline{A}_{F} kann durch Auswertung der Thermogramme von Poolfeuern erfolgen [7.41, 7.43].

Eine Berechnung von *lokalen* $\overline{SEP}(x,y)$ ist grundsätzlich mit CFD-Modellen [7.43] möglich. Eine Abschätzung der Abhängigkeit $\overline{SEP}_{act}(x)$ von der Höhe x über dem Poolrand kann auch mit semi-empirischen Modellen [7.6, 7.5] erfolgen (s. Gln. (7.23a,b)).

Das semi-empirische Strahlungsmodell für *Einzel-*Poolfeuer nach *Raj* [7.6] beschreibt die *axiale* Abhängigkeit der spezifischen Ausstrahlung, d.h. die lokale $\overline{\text{SEP}}$ (x) mit den folgenden Beziehungen:

$$\overline{SEP}_{act}(x) = \overline{SEP}_{cl}, \text{ für } 0 \le x/\overline{H} \le \overline{H}_{cl}/\overline{H}$$

$$(7.23a)$$

$$und \text{ für } \overline{H}_{cl}/\overline{H} < x/\overline{H} \le 1$$

$$\overline{SEP}_{act}(x) = p(x/\overline{H}) \overline{SEP}_{cl} + (1-p(x/\overline{H})) \overline{SEP}_{eff,s}(x)$$

$$(7.23b)$$

In GI. (7.23b) ist die Wahrscheinlichkeit $p(x/\overline{H})$ für das Auftreten eines maximalen SEP -Wertes definiert als:

$$p(x/\overline{H}) = 1 \text{ für } 0 \le x/\overline{H} \le \overline{H}_{cl}/\overline{H}$$
 (7.23c)

und

$$p(x/\overline{H}) = \left(\frac{1-x/\overline{H}}{1-\overline{H}_{cl}/\overline{H}}\right)^{a_2} \quad \text{für } \overline{H}_{cl}/\overline{H} \le x/\overline{H} \le 1$$
(7.23d)

Die $\overline{\text{SEP}}_{cl}$ in Gl. (7.23a) hängt von der Größe (Durchmesser) d des Feuers ab nach:

$$\overline{\text{SEP}}_{cl}(d) = \overline{\text{SEP}}_{max}(1 - e^{-d/d_{opt}}) = \overline{\text{SEP}}_{max} \epsilon_{F}$$
(7.23e)

mit dem *empirischen* Zahlenwert $\overline{SEP}_{max} = 325 \text{ kW} / \text{m}^2$ aus Radiometermessungen an LNG-Poolfeuern (d = 35 m) [7.6] und der optischen Eindringtiefe d_{opt} = 1/k = 13.81 m für LNG-Poolfeuer (d = 13 m).

Schließlich berechnet sich mit dem Strahlungsmodell nach *Raj* [7.6] die effektive, spezifische Ausstrahlung der Rußzone wie folgt:

$$\overline{\mathsf{SEP}}_{\mathsf{eff},\mathsf{s}} = \overline{\tau}_{\mathsf{s}} \overline{\mathsf{SEP}}_{\mathsf{cl}} \tag{7.24a}$$

mit

$$\overline{\tau}_{s}(d) = e^{-k_{s}\overline{c}_{s}L_{b}} \approx e^{-k_{s}\overline{c}_{s}0,73d}$$
(7.24b)

Nach dem semi-empirischen (Grau-Gas-Annahme) Poolfeuer-Strahlungsmodell für *Einzel*-Poolfeuer von *Fay* [7.5] berechnet sich die lokale $\overline{SEP}(x)$ wie folgt:

$$\frac{\mathsf{SEP}(\mathsf{x})}{\gamma \sigma \mathsf{T}_{\mathsf{max}}^4} = \mathfrak{B}_1 \mathsf{x} \cdot \mathsf{e}^{-\mathfrak{B}_1 \mathsf{x}}$$
(7.25a)

Nach GI. (7.25a) erreicht die *lokale* \overline{SEP} eines großen *Einzel*-Poolfeuers bei $\mathfrak{B}_1 x = 1$, d.h. in der Höhe x = 1/ \mathfrak{B}_1 ein *Maximum* von:

$$\overline{\text{SEP}}_{\max}(x = 1/\varpi_1)/(\gamma \sigma \overline{T}_{\max}^4)$$
(7.25b)

In *Fay* [7.5] werden, basierend auf Feld-Messungen an LNG-*Einzel*-Poolfeuer (d = 35 m) die folgenden Zahlenwerte der Parameter in den Gln. (7.25 a,b) angenommen:

$$a_1 = 0.0233 \ 1/m \gamma \sigma \overline{T}_{max}^4 = 563 \ kW/m^2$$
 (7.25c)

Für den Zahlenwert des skalierten Absorptionskoeffizienten æ₁ bezüglich Flammenzone bestehen noch große Unsicherheiten, da für *Methan*-Poolfeuer mit wesentlich kleinerer

(Anfangs-) Reynolds-Zahl um den Faktor 100 [7.44] größere $æ_1$ -Werte gefunden wurden als bei den LNG-Poolfeuern (Feldversuche). Es ist wahrscheinlich, dass die $æ_1$ -Werte bedeutend von der (Anfangs-) Reynolds-Zahl des Poolfeuers abhängen.

Im OSRAMO II-Modell (siehe 7.2.3.11.1) entspricht der Absorptionskoeffizient $\overline{\hat{\varpi}}_{eff,re} = 0.380 \text{ m}^{-1}$ der Flammenzonen dem skalierten Absorptionskoeffizienten \mathfrak{Z}_1 , wobei $\overline{\hat{\mathfrak{Z}}}_{eff,re}$ (JP-4) $\geq 16\mathfrak{Z}_1$ (LNG) ist. Es wird im Strahlungsmodell GI. (7.25a) das Vorliegen einer Temperaturspitze innerhalb der Flammenzone angenommen, so dass für T = T_{ad} $\approx 2300 \text{ K}$ der Anteil $\gamma = 0.36$ beträgt. Als Grenzwert für den emittierten Wärmestrom pro Einheitslänge des Poolumfangs wird angegeben [7.5]:

$$\gamma \sigma \overline{T}_{max}^{4} / \varpi_{1} = 24.2 \text{ MW} / \text{m}$$
 (7.25d)

Aus den Gln. (7.25 b,c) folgt, dass in der Höhe x = 42.9 m bzw. bei $\overline{H}/d = 1.23$ des LNG-*Einzel*-Poolfeuers (d = 35 m) die lokale $\overline{SEP}(x)$ einen maximalen Wert von $\overline{SEP}_{max} = 207 \text{ kW} / \text{m}^2$ erreichen sollte.

7.2.3.13 Bestrahlungsstärke

7.2.3.13.1 Einstrahlzahl

Ein homogenes, isotropes und stationär brennendes adiabatisches *Einzel*-Poolfeuer mit der aktuellen spezifischen Ausstrahlung (*average Surface Emissive Power*) $\overline{SEP}_{j}(d)$ an der Feueroberfläche \overline{A}_{F} und der Einstrahlzahl $\phi_{E,F}$ erzeugt an einem beliebig in seiner Umgebung liegenden (Empfänger) Flächenelement im horizontalen Abstand Δy vom Poolrand die mittlere Bestrahlungsstärke $\overline{E}_{j}(\Delta y/d)$:

$$\overline{\mathsf{E}}_{j}(\Delta y / \mathsf{d}, \mathsf{d}) = \tau_{\mathsf{at}} \ \alpha_{\mathsf{E}} \ \phi_{\mathsf{E},\mathsf{F}} \ (\Delta y / \mathsf{d}) \ \overline{\mathsf{SEP}}_{j}(\mathsf{d}) \tag{7.26}$$

Die Ermittlung von Einstrahlzahlen $\varphi_{E,F}$ erfolgt nach der grundlegenden Beziehung [7.2, 7.9, 7.45] :

$$\varphi_{E,F} = f(\overline{A}_F, \Delta y/d, \text{ relative Orientierung } \beta_F, \beta_E)$$
 (7.27a)

$$= \frac{1}{\pi \Delta \overline{A}_{E}} \int_{A_{E}} \int_{A_{F}} \frac{\cos \beta_{F} \cos \beta_{E}}{d^{2} (\Delta y / d)^{2}} d\overline{A}_{F} d\overline{A}_{E}$$

Bei der näherungsweisen Betrachtung der Flammenoberfläche als senkrechter Kreiszylinder:



Abb. 7.17: Modellvorstellung zur Einwirkung der Wärmestrahlung eines Feuers auf einen Empfänger in einer definierten Entfernung zum Feuer

folgt durch Berechnung des Doppelintegrals GI. (7.27a) für die Einstrahlzahlen $\phi_{E,F,h}$, $\phi_{E,F,v}$, $\phi_{E,F,max}$ (s. Abb. 7.8):

$$\varphi_{\text{E,F,h}} = \frac{1}{\pi} \left(\arctan \sqrt{\frac{b+1}{b-1}} - \left(\frac{b^2 - 1 + a^2}{\sqrt{AB}} \right) \arctan \sqrt{\frac{(b-1)A}{(b+1)B}} \right)$$
(7.27b)

$$\varphi_{\mathsf{E},\mathsf{F},\mathsf{v}} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{b} \arctan \frac{a}{\sqrt{b^2 - 1}} + \frac{a(A - 2b)}{b\sqrt{AB}} \arctan \sqrt{\frac{(b - 1)A}{(b + 1)B}} - \frac{a}{b} \arctan \sqrt{\frac{b - 1}{b + 1}} \right)$$
(7.27c)

$$\phi_{\mathsf{E},\mathsf{F},\mathsf{max}} = \sqrt{\phi_{\mathsf{E},\mathsf{F},\mathsf{h}}^2 + \phi_{\mathsf{E},\mathsf{F},\mathsf{v}}^2} \tag{7.27d}$$

Entsprechend kompliziertere Beziehungen für die Einstrahlzahlen gelten für den *schrägen* (bei Windeinfluss) *Kreis*zylinder als Flammenoberfläche sowie für Tankfeuer und sind z.B. in [7.2, 7.9] dargestellt. Die Berechnung der Einstrahlzahl bei Feuern mit teilweiser Rußbedeckung wird in [7.1] erwähnt.

Eine in der Praxis sehr nützliche *vereinfachte* Berechnung der Einstrahlzahl $\varphi_{E,F}$ lässt sich durchführen, wenn die *Kreis*zylindermanteloberfläche der Flamme durch eine entsprechende *Rechteck*fläche ersetzt wird [7.45, 7.46].

Die Annahme eines geneigten *elliptischen* Zylinders, der die reale Flammenkontur realistischer als ein Kreiszylinder beschreibt sowie die zugehörigen komplizierteren Berechnungen werden in [7.34] diskutiert.



Abb. 7.18: Einstrahlzahlen, $\phi_{E,F,max}$ nach den Gln. (7.27b-d) in Abhängigkeit vom horizontalen Abstand $\Delta y/d$ sowie von der relativen Flammenlänge $\overline{H}/d = a/2$

Die Beziehung GI. (7.26) lässt sich auch zur Ermittlung der wichtigen Größe SEP verwenden, wenn aus Radiometermessungen die Bestrahlungsstärken $\overline{E}(\Delta y / d, d)$ vorliegen. Hiebei ist aber zu beachten, dass die Einstrahlzahl $\phi_{E,F}$ und vor Allem \overline{SEP}_{j} insbesondere von A_F bzw. H abhängig sind (s. auch Kap. 0).

Ein weiterer Einflußfaktor für den Wärmestrom zwischen Strahler und Empfänger ist die Wärmeabsorption der Luft, insbesondere durch die Absorption des Wasserdampfes und Kohlendioxids verursacht. Die sogenannte atmospherische Durchlässigkeit τ_{at} oder auch Transmissitivät ist wie folgt definiert:

$$\tau_{\rm at} = \left(1 - \alpha_{\rm w} - \alpha_{\rm c}\right) \tag{7.27e}$$

Die Bestimmung der beiden Absorptionsgrade α_w , α_c der beiden Gase kann gemäß [7.2] aus den folgenden Diagramme direkt bestimmt werden. Dort sind die Absorptionsgrade α_w , α_c in Abhängigkeit des Produktes aus Dampfdruck des Wasserdampfes p_w bzw. Kohlendioxid p_c in Luft und Abstand L zwischen Flammenoberfläche und bestrahltem Objekt für verschiedene Flammentemperaturen T_f dargestellt.



Abb. 7.19: Absorptionsgrade für Wasserdampf und Kohlendioxid in Abhängigkeit von der Entfernung zwischen Geometrische Verhältnisse bei der Berechnung der Freistrahl – Flamme [7.2]

Für den Partialdruck von Kohlendioxid kann ein Wert von 30 N/m² [7.2] verwendet werden. Sofern keine Flammentemperatur berechnet werden kann, kann eine Temperatur von 1200 K angewendet werden [7.2].

Alternativ kann nach [7.95, 7.96] auch der folgende Ansatz verwendet werden.

$$\tau_{at} = 0,4343 \cdot \ln\left(14,1 \cdot \varphi^{-0,108} \cdot (x-r)^{-0,13}\right) \text{ für } \varphi \ge 20 \%.$$
(7.27e)

Hierbei ist die relative Luftfeuchtigkeit φ in % und x der Abstand zwischen dem Flammenmittelpunkt (Radius r [m]) und dem Empfänger.

7.2.3.13.2 Berechnung mit dem Punktquellen-Strahlungsmodell



Abb. 7.20: Modellvorstellung zum Punktquellen-Strahlungsmodell

Im Rahmen des Punktquellen-Strahlungsmodells bzw. API-521 Modell (Point Source Model (PSM)) berechnet sich die mittlere Bestrahlungsstärke (thermischer Strahlungsfluss) \overline{E}_{PSM} aus den folgenden Beziehungen [7.2, 7.62]:

$$\bar{\dot{Q}}_{rad} = 4 \pi \Delta y^2 \bar{E}_{PSM} \quad \text{für } \Delta y/d > 4$$
(7.28a)

und entsprechend Gln. (7.16e, 7.1b, 7.10a) für den totalen Strahlungswärmestrom:

$$\begin{aligned} \bar{\dot{Q}}_{rad} &= \bar{f}_{rad} \bar{\dot{Q}}_{c} = \bar{f}_{rad} A_{P} (-\Delta h_{c}) \overline{\dot{m}}_{f}^{"} \end{aligned} \tag{7.28b} \\ &= \bar{f}_{rad} A_{P} (-\Delta h_{c}) \overline{\dot{m}}_{f,max}^{"} \left(1 - e^{-k\beta d}\right) \end{aligned}$$

Aus den Gln. (7.28 a,b) folgt also für das *Fern*feld ($\Delta y/d > 4$) :

$$\overline{\mathsf{E}}_{\mathsf{PSM}}(\Delta y \,/\, \mathsf{d}) = \frac{\overline{\mathsf{f}}_{\mathsf{rad}}(-\Delta \mathsf{h}_{\mathsf{c}})\,\overline{\dot{\mathsf{m}}_{\mathsf{f},\mathsf{max}}^{\prime\prime}\left(1 - e^{-k\beta \mathsf{d}}\right)}}{16\left(\Delta y \,/\, \mathsf{d}\right)^2} \tag{7.28c}$$

Für das Nahfeld (0.5 < $\Delta y/d$ < 4) berechnet sich \overline{E}_{PSM} nach:

$$\overline{E}_{PSM} = \phi_N 0.131 \ \overline{f}_{rad}(-\Delta h_c) \overline{\dot{m}_{f,max}'}(1 - e^{-k\beta d})$$
(7.29a)

mit

$$\phi_{\rm N} \approx \frac{\overline{\rm H}/\rm d}{\pi (\Delta y/\rm d)^2}$$
(7.29b)

Das PSM hat jedoch einen nur sehr eingeschränkten Gültigkeitsbereich. Es ist mit großen Unsicherheiten behaftet und kann näherungsweise für Gas-Poolfeuer sowie für (Flüssigkeits-) Lachen-, Pool- und Tankfeuer im *Fern*feld angewendet werden.

7.2.3.13.3 Berechnung mit dem Strahlungsmodell OSRAMO II

Für die Einwirkung der thermischen Strahlung bei großen schwarz rußenden (smoky) *Einzel*-Tankfeuern und entsprechend bei großen *Einzel*-Pool- und Lachenfeuern auf benachbarte Objekte (z. B. Tankfeuer, nicht gezündeter Tank) oder Personen ist *nicht* die gesamte Feueroberfläche maßgebend, sondern die spezifische Ausstrahlung (SEP_{cl}) der heißen *klaren* (nicht schwarz rußenden) *Verbrennungszone* mit der relativen Länge \overline{H}_{cl} / d (s. Abb. 7.5). Die relative *Länge* \overline{H}_{cl} / d lässt sich allgemein nach GI. (7.17b) ermitteln und sollte im Rahmen von OSRAMO II mit der neuen GI. (7.21c) abgeschätzt werden.

Bei Unfällen in Tanklagern treten häufig *multiple* Tankfeuer auf, wodurch sich infolge einer Flammenwechselwirkung die Massenabbrandrate $\overline{\dot{m}_{f}}$ um den Faktor 2 bis 4 erhöht [7.64]. Dadurch erhöht sich wegen $\overline{\text{SEP}}_{cl}^{ma} \sim \overline{f}_{rad,cl} \overline{\dot{m}_{f,max}} / (\overline{H}_{cl}(d)/d)$ entsprechend Gl. (7.17b) auch die spezifische Ausstrahlung $\overline{\text{SEP}}_{cl}^{ma}$ der klaren Verbrennungszone um einen noch nicht gemessenen Faktor.

Bei Berücksichtigung z.B. einer *Verdoppelung* von $\overline{\dot{m}_{f}}^{"}$ gilt möglicherweise $\overline{SEP}_{cl}^{II} \ge 2 \times 180$ kW/m wenn für ein *Einzel*-Poolfeuer $\overline{SEP}_{cl}^{II} = 180$ kW / m² nach GI. (7.21b) angenommen wird.

Es ist folglich eine deutliche Zunahme von $\overline{E}(\Delta y/d)$ zu erwarten, wenn die relative Länge \overline{H}_{cl}/d der *klaren Verbrennungszone* sowie multiple Feuer betrachtet werden.

Die für $j \triangleq OSRAMO$ II aus Gln. (7.26, 7.27d) mit $\overline{H}/d = 1.7$ und $\overline{H}_{cl}/d = 1.0$ sowie mit $\tau_a = 1$, $\alpha_E = 1$ berechneten Bestrahlungsstärken $\overline{E}_{act}^{II}(\Delta y/d,d)$, $\overline{E}_{cl}^{II}(\Delta y/d)$ sind am Beispiel von *Einzel*-Diesel- und Kerosin-Poolfeuer (d = 25 m) in Abb. 7.9 dargestellt. Die berechnete Kurve 3 gilt für ein multiples Tankfeuer mit $\overline{H}_{cl}/d = 2.0$.



Abb. 7.21: Mit OSRAMO II *berechnete* Abhängigkeit der Bestrahlungsstärke $E(\Delta y/d)$ sowie *Messungen* für (schwarz rußende *Einzel*-Poolfeuer, am Beispiel von Diesel- und Kerosin-Poolfeuer (d = 25 m)). Mit eingezeichnet sind ebenfalls die relativen, kritischen thermischen Abstände $\Delta y_{cr}/d = 2.7, 5.6, 11.6.$

7.2.3.14 Lachenfeuer auf Land

Es wird brennbare Flüssigkeit infolge z.B. einer *Leckage* freigesetzt, z.B. aus einem Lagertank oder einer Rohrleitung. Dadurch kommt es zunächst zu einer Zunahme des *Lachendurchmessers* d und auch – nach Zündung – zu einer Zunahme der *Massenabbrandrate* $\overline{\dot{m}_{f}}$. Es stellt sich bei konstanter Leckagerate \dot{V}_{rf} ein maximaler Lachendurchmesser $\overline{d}_{L,max}$ ein, der zur Berechnung der Flammenlänge \overline{H}_{L} benutzt werden kann.

Das Modell von *Cline* [7.48] ist nur validiert an *Labor*experimenten. Es wird das transiente Wachstum eines unbegrenzten Lachenfeuers für zwei Szenarien betrachtet:

- Lache brennt von Anfang an,
- Lache zündet mit Verzögerung.

Demnach werden die folgenden Größen abgeschätzt oder meist aus Testversuchen ermittelt [7.2]:

 $\overline{d}_{L,max} \text{ bei } t = t_{max}, \ \overline{H}_L/d, \ \theta_{L,} \ d_{w,L}/d, \ \overline{SEP}_L \ , \ \overline{E}_L \ .$

7.2.3.15 Lachenfeuer auf Wasser

Die Untersuchungen und Modellierung von derartigen *nicht*-adiabatischen Lachenfeuern wurden primär durchgeführt im Zusammenhang mit der Sicherheitsbeurteilung beim Transport und Lagerung brennbarer Flüssiggase. Neuere Untersuchungen befassen sich mit der Berechnung des Abbrands von Verschüttungen größerer Mengen an z.B. Rohöl und KW auf Wasser.

Für die Berechnung des Poolfeuerdurchmessers d auf Wasser gibt es das Modell von *Cline* [7.48]. Die Massenabbrandrate $\overline{\dot{m}_{f}}$ der *nicht* adiabatischen *Lachen*feuern auf Wasser ist infolge des *zusätzlichen* Wärmeeintrags vom Wasser auf den Brennstoff deutlich höher als bei Lachen- oder Poolfeuern auf Land. Im Allgemeinen breitet sich die Lache auf Wasser aus. Messungen von $\overline{\dot{m}_{f}}$ für z.B. LPG, LNG, Benzin, Rohöl, Diesel, jeweils auf Wasser, liegen vor:

$$\overline{\dot{m}''}_{LPG}(H_2O) \approx 2 \,\overline{\dot{m}''}_{LPG}(Land)_{,} \,\overline{\dot{m}''}_{LNG}(H_2O) \approx 3 \,\overline{\dot{m}''}_{LNG}(Land)$$
(7.30)

$$\overline{\dot{m}''}_{\text{Benzin}}(H_2O) \approx \overline{\dot{m}''}_{\text{Benzin}}(\text{Land}), \quad \overline{\dot{m}''}_{\text{Rohöl}}(H_2O) \approx \overline{\dot{m}''}_{\text{Rohöl}}(\text{Land})$$
(7.31)

Nach der Petty-Korrelation [7.2, 7.61] gilt:

$$\overline{\dot{\mathbf{m}}}_{f}''(\mathbf{H}_{2}\mathbf{O}) = \overline{\dot{\mathbf{Q}}}_{ba,rad} / (\mathbf{A} \Delta \mathbf{h}_{v} \ln(\mathbf{B}_{conv} + 1)) + \alpha / \mathbf{c}_{p,f} \ln(\mathbf{B}_{conv} + 1)$$
(7.32)

mit der Zahlenwertgleichung

 $B_{\text{conv}} \approx 3000 \, / \, \Delta h_{_V} \, \text{ oder mit } 10 < B_{\text{conv}} < 15 \text{ bzw. } \text{ln}(B_{\text{conv}} + 1) \approx 2.6.$

Für die Berechnung der Flammenform, z.B. für H/d eines Lachenfeuers lässt sich die Formel für ein Poolfeuer auf Land anwenden.

Die Berechnung von \overline{SEP} und \overline{E} erfolgt analog zu den Modellen für Poolfeuer auf Land.

7.2.3.16 Tankfeuer

Tankfeuer können insbesondere in Tanklagern auftreten und werden gewöhnlich als Poolfeuer behandelt. Die wesentlichen *Unterschiede* eines Tankfeuers im Vergleich zu einem Poolfeuer sind:

- a. Das Flüssigkeitsniveau und folglich die Flammenbasis sind erhöht. Der flüssige Brennstoff ist von einer Metallwand und einem Metallboden umgeben.
- b. Als Schutzobjekte sind i. A. auch *benachbarte* Tanks, d.h. Empfängerflächenelemente zu betrachten, die sich in geringer Entfernung vom Feuer und insbesondere auch oberhalb der Grundfläche (z.B. Erdboden) befinden. Folglich spielen als Wärmeübertragungsprozesse nicht allein die thermische Strahlung, sondern auch die Wärmekonvektion oder -leitung eine Rolle.
- c. Bei der Berechnung von Einstrahlzahlen φ nach der allgemeinen Gleichung Gl. (7.27a) ist zu beachten [7.1], dass im Fall eines Tankfeuers die Flamme nicht in der Höhe x = 0 [wie in den Berechnungsformeln Gln. (7.27b,c) angenommen] beginnt, sondern erst in der Höhe h über der Grundfläche.
- d. Die Anwendung von Poolfeuer-Modellen auf Tankfeuer wird in [7.49], die Wechselwirkung eines Tankfeuers mit einem benachbarten, ungezündeten Tank in [7.58] und der Windeinfluss (Windkanalexperimente) auf eine Reihe hintereinander angeordneter Tankfeuer (Tanks sind in einer Zeile angeordnet) in [7.50] untersucht.
- e. Bei einem Tankfeuer tritt am Tankrand eine Flammenabsenkung auf, die als die maximale vertikale Entfernung (Eindringtiefe) \overline{H}_{Ab} definiert ist, die die Flamme (Flammenkontur, -einhüllende) vom oberen Tankrand in Richtung Brennstoffoberfläche hat. Aus experimentellen Untersuchungen (Isohexan-Tankfeuer, d = 52 m) hat *Lautkaski* [7.51] für \overline{H}_{Ab} die folgende empirische Korrelation gefunden:

$$\overline{H}_{Ab} / d = \frac{1}{3} \left(\frac{d_w}{d} - 1 \right)$$
(7.33)

Am Beispiel des Isohexan-Tankfeuers (d = 52 m) gilt: 2.6 m < \overline{H}_{Ab} < 6.8 m.

f. Wenn sich das Flüssigkeitsniveau unterhalb des oberen Tankrands befindet, wird \overline{v}_{a} oder $\overline{\dot{m}_{f}''}$ von Wärmeströmen (z.B. infolge thermischer Strahlung) zwischen Tankwand und Flüssigkeitsoberfläche beinflusst.

Es ist zu beachten, dass in Tanklagern häufig multiple Tankfeuer auftreten, deren Gefährdungspotential deutlich höher ist, als das von *Einzel*-Tankfeuern.

7.2.3.17 Boil-Over

Boil-Over repräsentieren extrem heftige Tankbrände, wie bereits in Kapitel 7.2.1 erwähnt. Insbesondere bei der Lagerung von Rohöl treten diese sehr schwerwiegende Unglücksfälle auf. Aufgrund der sehr hohen Lagerkapazitäten ist eine schnelle Bekämpfung derartiger Brände äußerst schwierig, sobald die gesamte Oberfläche des Tanks betroffen ist. Man spricht dann auch von einem sogenannten "Full surface fire".

Die größte Gefahr, die von dem Brand eines Rohöllagertanks ausgeht, ist der Auswurf brennenden Materials aus dem Tankbehälter und die damit einhergehende Miteinbeziehung der Umgebung. Dieser Materialaustrag bzw. –auswurf ist bedingt durch die spontane Verdampfung einer zweiten im Tank vorliegenden Phase, welche meist aus Wasser besteht [7.80]. Es werden grundlegend drei Formen des Auswurfes (siehe Abb. 7.22) unterschieden. Bei einem Slopover handelt es sich um einen diskontinuierlichen Auswurf durch ein Überschäumen des Brennstoffes, ausgelöst durch eingebrachtes Löschwasser. Der Frothover beschreibt einen kontinuierlichen Auswurf auf mehreren Seiten des Tanks. Er bildet eine Mischung aus den anderen beiden Auswurfformen hinsichtlich Intensität und Gefährdungspotential [7.83].



Abb. 7.22: Formen des Brennstoffauswurfes bei Tankbränden [7.83]

Die größte Gefahr geht von einem so genannten Boilover aus, bei dem es zu sehr heftigen Auswürfen und extremen Flammenverlängerungen kommt, wodurch sich die Belastung für Einsatzkräfte der Feuerwehr und umstehender Anlagen drastisch erhöht. Bei derartigen Unglücken kam es Anfang der 80er Jahre in Milford Haven (siehe Abb. 7.23), Wales zu 40 Verletzen und in Tacoa, Venezuela zu über 150 Toten. Die Schwere des Unglücks in Venezuela beruhte dabei vor allem auf dem, durch den Boilover verursachten Auslauf brennenden Öls aus dem Tank. Dieses konnte durch die vorhandenen Deiche nicht zurückgehalten werden und führte letztendlich zu der Katastrophe [7.83].



Abb. 7.23: Boilover in Milford Haven [7.83]

Die Gefahr eines Boilover besteht bei Tanks, in denen zwei Phasen vorliegen, von denen die eine Phase eine höhere Dichte, aber einen niedrigeren Siedepunkt aufweist. Dabei ist die Zusammensetzung des Brennstoffs nicht unbedingt als ausschlaggebend anzusehen. Es ist jedoch zu beobachten, dass Brennstoffe mit einer breiten Siedepunktsverteilung zu wesentlich heftigeren Auswürfen neigen. Diese Brennstoffe bilden eine so genannte Wärmezone aus [7.83].

Diese Wärmezone entsteht durch eine fraktionelle Destillation des Brennstoffes, ausgelöst durch die rückstrahlende Hitze des Brandes. Die höhersiedenden Komponenten bleiben dabei im Tank zurück, während die leichterflüchtigen verdampfen und oberhalb der Flüssigkeitsoberfläche verbrennen. Aufgrund der hohen Temperaturen der Wärmezone erfolgt an der Grenze zu den unteren Brennstoffschichten ein Wärmeübergang, der dort wiederum zu einer entsprechenden fraktionellen Destillation führt. Durch aufsteigende Gasblasen der verdampfenden Leichtersieder wird die Grenzfläche zwischen Wärmezone und kaltem Öl in Schwingungen versetzt, wodurch kalter Brennstoff in die Wärmezone gerissen wird und dort wiederum teilweise verdampft. Durch den erstmals von Hasegawa [7.84] beschriebenen Mechanismus kommt es zu einer Ausbreitung der Wärmezone von der Flüssigkeitsoberfläche in Richtung des Tankbodens. Durch die aufsteigenden Gasblasen erfährt der Brennstoff in der Wärmezone eine starke Durchmischung, was zu einer homogenen Temperaturverteilung innerhalb der Zone führt.

Im Folgenden sind die Mechanismen, die bei einem Tankbrand zu einem Boilover führen, schematisch dargestellt und erläutert [7.81].



(A) Die obere, im Tank vorliegende Phase besteht aus Rohöl mit emulgiertem Wasser.

(B) Am Tankboden sammelt sich im Laufe der Lagerzeit Wasser an, welches als freies oder emulgiertes Wasser im Rohöl vorlag.



Durch einen Brand an der Flüssigkeitsoberfläche bildet sich die Verdampfungszone (C), in der ein Dampf/Flüssigkeitsgemisch durch eine Teilverdampfung der leichtersiedenden Komponenten entsteht. Durch die Rückstrahlwirkung der Flamme werden die Komponenten des Rohöls bis zu ihrem Siedepunkt aufgeheizt. Dabei ändert sich die Zusammensetzung mit der Zeit, da immer mehr Komponenten verdampfen und verbrennen.

Zwischen Zone (C) und (D) kommt es aufgrund des Dichte- und Temperaturunterschiedes zu einem konvektiven Fließen. Dabei werden vor allem leichtersiedende Komponenten aus der Zone (D) in die Verdampfungszone transportiert, während Schwersieder zurückbleiben, bzw. aus Zone (C) absinken.


Die Temperatur in Zone (E) steigt durch die Veränderung der Brennstoffzusammensetzung an (E). Mit steigender Höhe über dem Originalbrennstoff (Rohöl) nimmt die Konzentration der leichtersiedenden Komponenten ab.

In Zone (F) sammeln sich die Flüssigkeitskomponenten an, die aufgrund ihres hohen Siedepunktes nicht verdampfen. Zone F wird aufgrund ihrer homogenen Zusammensetzung und Temperatur als Wärmezone bezeichnet. Die Dicke der Zone nimmt mit derWärmezonenausbreitungsgeschwindigkeit zu. Diese ist größer als die Abbrandgeschwindigkeit der Zone (E). Daher nähert sich die Wärmezone schneller dem Tankboden als die brennende Flüssigkeitsoberfläche. Die Wärmezone wächst.

Wenn die Wärmezone den Tankboden erreicht kommt es zu einem Boilover.

Die brennende Flüssigkeitsoberfläche (G) ist in den Tank abgesunken, wodurch es zu einer Hitzestauung innerhalb der Tankwände kommt. Die Rückstrahlung der Hitze in die Flüssigkeit steigt an.

In der Verdampfungszone (H) kommt es durch die höheren Temperaturen zu einer Verdampfung schwerersiedender Komponenten

Die Temperatur der Wärmezone (I) steigt auf 200 bis 300 °C.

Das in Zone (J) abgelagerte Wasser verdampft aufgrund der hohen Temperaturen schlagartig. Das Volumen vergrößert sich auf das über 1600fache und reißt die Schichten oberhalb aus dem Tank heraus.

Beispielhaft sei hier die Ausbreitung der Wärmezone bei einem Abbrand von Arabian Light dargestellt. Hierbei wurden von Broeckmann [7.83] Ausbreitungsgeschwindigkeiten bis zu 16 mm/min (0,96 m/h) gemessen (siehe Abb. 7.24). Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Wärmezone ist stark von der Zusammensetzung des Brennstoffes abhängig.





Abb. 7.24: Temperaturverläufe in Abhängigkeit von der Position und der Zeit für Arabian Light [7.83]

Der Zeitraum zwischen dem Beginn eines Tankbrandes und der Bildung eines Boilover hängt somit von der Füllhöhe des Tanks, den Schichtdicken von Wasser- und Ölphase, wie auch von der Art des Brennstoffes ab³ [7.85].

Wenn die Wärmezonengrenze das am Tankboden vorhandene Wasser erreicht, führen die hohen Temperaturen (bis zu 140°C) zu einer schlagartigen Verdampfung des Wassers. Dabei kommt es zu einer Volumenvergrößerung, die das Ausgangsvolumen um den Faktor 1600 übersteigt. Durch die Volumenvergrößerung und das Aufsteigen des Wasserdampfes wird aufgeheiztes Öl mitgerissen, welches durchzündet und zu Flammenhöhen von mehreren hundert Metern führt. Gleichzeitig schäumt das Öl auf und fließt über die Tankwand, was zu einer weiteren Gefährdung der Umgebung führt.

Nach experimentellen Studien folgerte Koseki [7.85], dass im Rohöl emulgiertes Wasser sogar zu einer Verringerung der Zeitspanne bis zum Eintreten eines Boilover führt. Er führte Brandversuche in einem Tank mit 1,9 m Durchmesser und Temperaturmessung durch. Er beobachtete, dass emulgiertes Wasser durch kontinuierliche Verdampfung eine Wärmezonentemperatur erzeugt, die nur unwesentlich höher als die Siedetemperatur von Wasser liegt.

³ Bei Brennstoffen mit einem höheren Anteil an Leichtersiedern kommt es zu einer beschleunigten fraktionellen Destillation, wodurch die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Wärmezone steigt.

Gleichzeitig führt die Verdampfung zu einer besseren Durchmischung und schnelleren Ausbreitung der Wärmezone. Nachdem das emulgierte Wasser verdampft war, kam es zu einem rapiden Anstieg der Wärmezonentemperatur und zu einem Boilover.

Die Vermeidung eines Boil-Overs bzw. die Minimierung der Auswirkungen war bzw. ist Gegenstand vieler Forschungsprojekte.

Bereits in frühren Arbeiten wurde der Einsatz von Zusatzstoffen als Hilfsmittel bei der Bekämpfung eines Boilovers näher untersucht. So wurden beispielsweise als Maßnahme zur Verhinderung eines Boilover bei Tankbränden von Broeckmann [7.83] keramische Partikel eingesetzt. Sie wirkten als Siedesteine und führten zu einer deutlichen Verringerung der Auswurfeffekte. Hierbei ist anzuführen, dass ein Absinken der Keramikpartikel nur dann stattfand, sofern die Keramikpartikel im Vorfeld des Einsatzes im Tank mit Wasser benetzt wurden.

Eine andere Möglichkeit besteht darin, Zusatzstoffen zu verwenden, die in das heteroazeotrope Siedeverhalten der bereits bestehende Wasser/ Rohöl-Emulsion (\rightarrow Ausbildung der Wärmezone durch fraktionelle Destillation) eingreifen.

Ein konventioneller Ölbrand zeichnet sich durch eine konstante Abbrandgeschwindigkeit aus. Im Vergleich dazu kommt es bei einem Öl-Wasser-Gemisch im Tank zu dem bereits beschriebenen Phänomen des Boilovers. Die Zugabe eines Additivs bewirkt eine deutliche, zeitliche Verzögerung bis zum Eintritt des Auswurfes [7.82]. Da Abbrandverhalten (⇒ Abbrandgeschwindigkeit) wie auch der Mechanismus der Wärmeeinbringung vom Feuer in die Flüssigkeit signifikant vom Tankdurchmesser abhängen, wurden weiterführende Versuche mit Behälterdurchmessern von 300 mm und 2400 mm Durchmesser durchgeführt. Untersuchungen bestätigen Ergebnisse Die die der zuvor durchgeführten Laboruntersuchungen. Die folgenden Bilder zeigen Versuche in Behältern mit einem Durchmesser von 2400 mm [7.87].



a Rohöl mit 4 Gew.-% Wasserzusatz

b Rohöl mit 4 Gew.-% Wasserzusatz + Additivzugabe von oben

Abb. 7.25: Boilovertests (Ø3 = 2400 mm) [7.87]

Der Einsatz von Zusatzstoffen führt zu deutlich kleineren Temperaturgradienten innerhalb des Brennstoffes. Die Hauptwirkung bzw. Haupteffektivität erzielt das hinzugefügte Additiv in einer Brennstoffschicht zwischen Wärmezone und Flüssigphase am Tankboden. Es hat sich gezeigt, dass bereits geringe Mengen des Zusatzstoffes ausreichen, um eine Minimierung des Gefahrenpotentiales "Boilover" zu erreichen. Neben der zeitlichen Verzögerung des Auftretens eines Boilovers, ist die Wärmeproduktion des Feuers deutlich reduziert. Die grundsätzliche Übertragbarkeit der Ergebnisse auf andere Öltypen ist ohne Zweifel, allerdings hängt die Effektivität des verwendeten Zusatzstoffes stark von der Zusammensetzung und Typ des Rohöls ab [7.82, 7.87].

Hinsichtlich der Auswirkungen können Boil-Over wie Tankbrände (siehe Kapitel 7.2.3.16) betrachtet werden und sind analog zu behandeln.

7.2.3.18 Rinnenfeuer

Ein anderer Typ von Poolfeuer ist ein *Rinnen-, Schlitz-* bzw. *Kanal*feuer, das infolge eines unfallbedingten Auslaufens bzw. einer Verschüttung von brennbarer Flüssigkeit entstehen kann, die in eine Rinne oder einen Kanal eintritt [7.1]. Eine charakteristische Eigenschaft derartiger Feuer ist ein großes *Seitenverhältnis* I/w.

In [7.29] werden derartige Rinnenfeuer als eine Serie von *Einzel*-Poolfeuer näherungsweise modelliert, in Übereinstimmung mit kleinskaligen Experimenten [7.52].

Die gemessenen Abbrandgeschwindigkeiten \overline{v}_a von rußbedeckten JP-5-Rinnen-Feuern mit einem Seitenverhältnis von I/w > 2 [7.1] sind in Übereinstimmung mit den \overline{v}_a -Werten bei kreisförmigen Poolfeuern. Auf der Basis experimenteller LNG-Rinnenfeuern mit I/ $w \leq 30$ [7.53, 7.56] wurden die folgenden Korrelationen für die sichtbare Flammenlänge \overline{H} , den Neigungswinkel θ sowie für das Flammendrag entwickelt:

$\overline{H}/w = 2.2$	für $Fr_1 \ge 0.25$	(7.34a)
$\bar{H}/w = 0.88 Fr_1^{-0.65}$	für 0.10 < Fr ₁ < 0.25	(7.34b)
$\overline{H}/w = 4.0$	für Fr ₁ < 0.1	(7.34c)
$\cos \theta = 0.56$	für Fr ₁ > 0.25	(7.35a)
$\cos \theta = 0.36 Fr_1^{-0.32}$	für 0.042 < Fr ₁ < 0.25	(7.35b)
$\cos \theta = 1$	für Fr ₁ < 0.042	(7.35c)
$w_1 / w = 3.5$	Fr ₁ > 0.25	(7.36a)
$w_1 / w = 23.3 Fr_1^{1.37}$	0.10 < Fr ₁ < 0.25	(7.36b)
$w_{1} / w = 1$	Fr ₁ < 0.1	(7.36c)

Bemerkungen zu Gln. (7.34 - 7.36):

- a. Für windstille Bedingungen ($u_w \approx 0$) ist Fr₁ < 0.1, so dass die Geometrie eines Rinnenfeuers allein von der Breite w abhängig ist.
- b. Für Fr_1 $\,\lesssim\,$ 0.25 nimmt mit wachsender Windgeschwindigkeit u_w die sichtbare

Flammenlänge H ab, der Flammenneigungswinkel θ und das Flammendrag dagegen zu.

- c. Für $Fr_1 > 0.25$ ist die Flammengeometrie unabhängig von u_w .
- d. Für Windrichtungen etwa *parallel* zur Achse (Länge I) der Rinne sind diese Korrelationen nicht streng gültig.
- e. Die Anwendung dieser Korrelationen auf andere Brennstoffe als LNG ist unsicher.

7.2.3.19 Freistrahl-Flamme

Tritt ein brennbares Gas aus einem Leck oder einer Abblaseleitung aus, so bildet sich in dem Freistrahl durch die eingemischte Luft ein zündfähiger Bereich zwischen der oberen und unteren Zündgrenze. Durch eine ausreichend starke Zündquelle kann das Gas-Luft-Gemisch in Brand gesetzt werden und als Freistrahl-Flamme (jet-fire) abbrennen. In Abhängigkeit von der Ausströmgeschwindigkeit des Gases brennt die Flamme in einem Abstand vom Freisetzungsort und kann bei zu hoher Geschwindigkeit abheben und ausgeblasen werden.

7.2.3.19.1 Chamberlain

Im Yellow Book" [7.2] wird zur Berechnung der strahlenden Fläche das Modell von Chamberlain [7.89] herangezogen, wobei die dort angegeben Formeln nicht mit dem Originalmodell übereinstimmen. Die folgenden Gleichungen beschreiben das Originalmodell aus [7.89].

Die Machzahl des expandierten Freistrahls im überkritischen Fall $(p_1 > p_u)$ berechnet sich aus

$$\mathsf{T}_1 = \frac{2\,\mathsf{T}_0}{1+\kappa} \tag{7.37a}$$

$$p_1 = 3,6233 \frac{\dot{m}}{d_0^2} \sqrt{\frac{T_1}{\kappa M}}$$
 (7.37b)

$$M_{j} = \sqrt{\frac{\left(\kappa + 1\right)\left(\frac{p_{1}}{p_{u}}\right)^{\left(\frac{\kappa-1}{\kappa}\right)} - 2}{\kappa - 1}}$$
(7.37c)

Bei einem unterkritischen Ausströmen werden die folgenden Beziehungen verwendet:

$$F = 3,6233^{*} 10^{-5} \frac{\dot{m}}{d_{0}^{2}} \sqrt{\frac{T_{0}}{\kappa M}}$$
(7.38a)
$$M_{j} = \sqrt{\frac{\sqrt{1 + 2(\kappa - 1)F^{2}} - 1}{\kappa - 1}}$$
(7.38b)

Die Ausströmgeschwindigkeit des Freistrahls und das Verhältnis zur Windgeschwindigkeit ergeben sich dann aus der Machzahl:

$$T_{j} = \frac{2T_{1}}{2 + (\kappa - 1)M_{j}^{2}}$$

$$\rho_{j} = \rho_{N} \frac{27315}{T_{j}}$$
(7.39a)

$$u_{j} = M_{j} \sqrt{\kappa R T_{j}}$$
(7.39b)

$$\mathsf{R}_{\mathsf{w}} = \frac{\mathsf{u}_{\mathsf{w}}}{\mathsf{u}_{\mathsf{j}}} \tag{7.39c}$$

Folgende Beziehungen werden zur Berechnung des effektiven Strahldurchmessers D_s verwendet:

Überkritisches Ausströmen:

$$D_{s} = d_{0} \sqrt{\frac{\rho_{j}}{\rho_{Luft}}}$$
(7.40a)

 $d_{j} = \sqrt{\frac{4 \dot{m}}{\pi \rho_{j} u_{j}}}$ $D_{s} = d_{j} \sqrt{\frac{\rho_{j}}{\rho_{Luft}}}$ (7.40b)

Unterkritischen Ausströmen:

Die Flammenlänge bei Windstille L_{b0} wird aus folgenden Gleichungen ermittelt:

$$W = \frac{M}{15,816 \text{ M} + 0,0395}$$

0,2 $L_{b0}^{2/3} + 0,024 \sqrt[3]{\frac{g}{D_s^2 u_j^2}} L_{b0}^{5/3} - \left(\frac{D_s \beta}{W}\right)^{2/3} = 0$ (7.41)

Der Parameter β kann wie folgt abgeschätzt werden [7.89]:

Kohlenmonoxid:	$\beta = 2.64$
Wasserstoff:	$\beta = 3.10$
Kohlenwasserstoffe:	$\beta = 2.85$

Der Faktor W ist der Massenanteil brennbares Gas in einem stöchiometrischen Gemisch mit Luft. Die angegebene Beziehung gilt für Kohlenwasserstoffe mit der molaren Masse M.

Die Länge vom Freisetzungsort bis zum Ende der Flamme bei einer Windgeschwindigkeit u_w (Höhe: Freisetzungshöhe + 0,5*L_{b0}) und einem Austrittswinkel des Freistrahls θ j berechnet sich darauf aufbauend wie folgt:

$$L_{b} = L_{b0} \left((0,51e^{-0.4u_{w}} + 0,49) \cdot (1,0-6,07 \cdot 10^{-3} (\Theta_{j} - 90^{\circ})) \right)$$
(7.42)

Die strahlende Fläche der Flamme kann als Zylinder approximiert werden, der durch Windeinfluss oder durch den Austrittswinkel des Freistrahls gegenüber dem Boden geneigt sein kann. Im Abb. 7.26 sind die geometrischen Verhältnisse dargestellt. Die Abblaseleitung befindet sich in einer Höhe z_1 über Erdgleiche und der Freistrahl tritt unter dem Austrittswinkel θ_j aus.



Abb. 7.26: Geometrische Verhältnisse bei der Berechnung der Freistrahl - Flamme

Der Winkel α zwischen dem Austrittswinkel und dem Winkel der Flammenachse berechnet sich wie folgt:

$$R_{w} = \frac{u_{w}}{u_{j}}$$
(7.42a)

$$R_{w} \le 0.05$$
: $\alpha = (\Theta_{j} - 90^{\circ}) \cdot (1 - e^{-25.6R_{w}}) + 8000 \frac{R_{w}}{\text{Ri}(L_{b0})}$ (7.42b)

$$R_{w} > 0.05: \alpha = (\Theta_{j} - 90^{\circ}) \cdot (1 - e^{-25.6R_{w}}) + (134 + 1726 \cdot \sqrt{R_{w} - 0.026}) / Ri(L_{b0})$$
(7.42c)

$$Ri(L_{b0}) \!=\! L_{b0} \left(\frac{g}{D_s^2 \, u_j^2} \right)^{\frac{1}{3}}$$

Der Abstand b der Flamme von der Austrittsstelle und die Flammenlänge L_f werden nach folgenden empirischen Formeln berechnet:

$$K = 0.185e^{-20R_{w}} + 0.015$$

$$b = \frac{\sin(K\alpha)}{\sin(\alpha)} L_{b} \quad \text{für } \alpha > 0 \quad (7.43a)$$

$$b = 0.2 L_{B} \qquad \text{für } \alpha = 0$$

$$L_{f} = \sqrt{L_{b}^{2} - b^{2} \sin^{2}(\alpha)} - b \cdot \cos(\alpha) \quad (7.43b)$$

Nach dem Modell von Chamberlain hat die Flamme die Form eines Kegelstumpfes mit den beiden Radien r_1 und r_2 .

$$\begin{split} & \frac{\rho_{L}}{\rho_{j}} = \frac{T_{j}M_{L}}{T_{u}M} \\ & \mathsf{Ri} = \left(\frac{g}{\mathsf{D}_{s}^{2}\mathsf{u}_{j}^{2}}\right)^{\frac{1}{3}}\mathsf{D}_{s} \\ & \mathsf{C}' = 1\,000\mathsf{e}^{-100\mathsf{R}_{w}} + 0.8 \\ & \mathsf{r}_{1} = 0.5\,\mathsf{D}_{s}\left(1\,3.5\,\mathsf{e}^{-6\mathsf{R}_{w}} + 1.5\right) \left(1 - \frac{1}{15}\sqrt{1 - \frac{\rho_{L}}{\rho_{j}}}\right)\mathsf{e}^{-70\mathsf{Ri}^{\,\mathsf{C'Rw}}} \\ & \mathsf{r}_{2} = 0.5\,\mathsf{L}_{b}\left(0.1\,8\,\mathsf{e}^{-1.5\mathsf{Rw}} + 0.3\,1\right) \left(1 - 0.47\,\mathsf{e}^{-25\mathsf{Rw}}\right) \end{split}$$
(7.44)

Die Oberfläche des Kegelstumpfes berechnet sich hierbei nach

$$A_{\kappa} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)\pi\sqrt{(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)^2 + \mathbf{L}_{f}^2 + \pi(\mathbf{r}_1^2 + \mathbf{r}_2^2)}$$
(7.45)

Die durch die Flamme abgegebene Wärmestrahlung wird aus der freigesetzten Energie und der Flammenoberfläche bestimmt:

$$\dot{Q}_{Str,fl} = \frac{\dot{m} H_c}{A_K} F_s \left(1 - \zeta\right) + \dot{Q}_R \zeta$$
(7.46)

Der Faktor F_s ist abhängig von der Art des Brandes (Lachenbrand, Freistrahlflamme oder BLEVE) und dem Brennstoff. Für die Freistrahlflamme wird folgende Beziehung angegeben /5-4/:

$$F_{s} = 0,21e^{-0,00323 u_{j}} + 0,11$$
(7.47)

Mit zunehmendem Kohlenstoffgehalt des Brennstoffes ist mit einer stärkeren Rußentwicklung zu rechnen. Durch den Rauch wird die Flamme abgedeckt und nur eine verringerte Wärmestrahlung freigesetzt. Dies wird im Faktor ζ berücksichtigt, wobei die Wärmestrahlung des Rußes \dot{Q}_R mit 20 kJ/(m² s) angesetzt wird. Bei den niedermolekularen Gasen wie z. B. Methan, Propan und Butan sollte konservativ von einem Faktor $\zeta=0$ ausgegangen werden.

Die Bestrahlungsstärke beim Empfänger ist abhängig von der Einstrahlzahl und der Wärmeabsorption der Luft zwischen Strahler und Empfänger.

$$\dot{Q}_{Str}(x) = \dot{Q}_{Str,fl} \phi_{12} \varepsilon_u \tau_a$$
(7.48)

Die Einstrahlzahl und die atmospherische Transmissivität wird gemäß Kapitel 7.2.3.13.1 bestimmt. Da für einen Kegelstumpf zurzeit keine einfache analytische Beziehung bekannt ist, wird von einer Zylindrischen Flamme mit einem mittleren Zylinderradius aus r_1 und r_2 ausgegangen.

Das Modell von Chamberlain ist entwickelt und überprüft worden für senkrechte Freistrahlflammen. Nach bisherigen Erfahrungen kann es in einem Winkelbereich von 45° - 90° gegenüber der Horizontalen eingesetzt werden. Für kleinere Winkel wird als konservative Abschätzung das Modell von Johnson [7.93] empfohlen [7.94].

Vergleichsrechnung

Chamberlain hat verschiedene Messreihen durchgeführt, von denen nachfolgend einige Ergebnisse sowie vergleichende Berechnungen dargestellt sind.

Tabelle 7.3: Ergebnisse der Versuchsreihen (Windgeschwindigkeit von 6 m/s (keine Angabe über die Messhöhe und Temperaturschichtung); molarer Masse des Gases: 16,9 kg/kmol; Massenstrom: 10,7 kg/s)

	Durchmesser: 305 mm	Durchmesser: 203 mm	Durchmesser: 152 mm
Flammenlänge	22,2 m	19,3 m	19,2 m
Flammendurchmesser W ₂	11,7 m	9,6 m	7,3 m
Flammenwinkel α	34°	29°	14°
SEP	201 kW/m ²	223 kW/m ²	208 kW/m ²

Tabelle 7.4:Berechnungen mit Methan (molare Masse: 16,4 kg/kmol; Freisetzungshöhe:10 m; indifferente Temperaturschichtung.

	Durchmesser: 305 mm	Durchmesser: 203 mm	Durchmesser: 152 mm
Flammenlänge	23,8 m	19,4 m	18,6 m
Flammendurchmesser W ₂	10,4 m	7,7 m	7,2 m
Flammenwinkel α	44°	28°	25°
SEP	233 kW/m ²	353 kW/m²	367 kW/m²

7.2.3.19.2 Johnson

Johnson u.a. [7.93] haben experimentelle Untersuchungen an waagerechten Methan Freistrahlflamme durchgeführt und ein Modell in Anlehnung an das von Chamberlain entwickelt.

Bei Johnson wird die Richardson-Zahl wie folgt berechnet:

$$Ri = \left[\frac{\pi \rho_{Luft} g}{4G}\right]^{\frac{1}{3}} L_{bo}$$

$$G = \frac{\pi \rho_{j} u_{j}^{2} d_{j}^{2}}{4}$$
(7.48)

Die Startwerte des Strahls werden analog zum Modell von Chamberlain (siehe Kapitel 7.2.3.19.1) berechnet. Die Flammenlänge in ruhender Luft L_{bo} wird aus folgender Gleichung berechnet.

$$\left[\frac{2,85 \,\mathrm{D_s}}{\mathrm{L_{bo}}\,\mathrm{W}}\right]^{\frac{2}{3}} = 0,2+0,02 \,\mathrm{Ri}$$
(7.49a)

$$\mathsf{D}_{\mathsf{s}} = \mathsf{d}_0 \sqrt{\frac{\rho_j}{\rho_{\mathsf{Luft}}}} \tag{7.49b}$$

$$W = \frac{M}{15,816 M + 0,0395}$$
(7.49c)

Die horizontale Entfernung vom Freisetzungsort bis zum Ende der Flamme berechnet sich nach:

$$\begin{split} &\frac{L_{x}}{L_{bo}} = F_{\zeta} \left(1 + R_{\zeta} \, \Omega_{x} \right) \\ &F_{\zeta} = 0,55 + 0,45 \, e^{-0.168 \text{Ri}} & \text{für } \text{Ri} \le 5,11 \\ &F_{\zeta} = 0,55 + 0,45 \, e^{-0.168 \text{Ri} - 0.3 \left(\text{Ri} - 5,11 \right)^{2}} & \text{für } \text{Ri} > 5,11 \\ &R_{\zeta} = 0 & \text{für } \text{Ri} \le 3,3 \\ &R_{\zeta} = 0,082 \left(1 - e^{-0.5 \left(\text{Ri} - 3,3 \right)} \right) & \text{für } \text{Ri} > 3,3 \\ &\Omega_{x} = \sqrt{\frac{\pi \rho_{\text{Luft}}}{4 \, \text{G}}} \, L_{\text{bo}} \, u_{w} \end{split}$$

$$(7.49d)$$

Die Höhe des Mittelpunkts der Endfläche der Flamme über dem Freisetzungsort wird ebenfalls aus der Flammenlänge bei Windstille L_{bo} berechnet:

$$\frac{L_{y}}{L_{bo}} = \frac{1 - 0.02 \text{ Ri } \Omega_{x}}{\left(1 + \frac{1}{\text{Ri}}\right)^{8.78}}$$
(7.50)

Die sichtbare Flamme hat einen Abstand b zum Freisetzungsort und einen Durchmesser W1:

$$b = 0.14 \sqrt{G \rho_{\text{Luft}}}$$
(7.51a)

$$\frac{W_1}{b} = -0,18 + 0,081 \text{ Ri}$$
(7.51b)

Der Durchmesser am Ende der Flamme W2 muss mindestens so groß sein wie W1 und wird aus folgender Beziehung berechnet:

$$\frac{W_2}{\sqrt{L_x^2 + L_y^2}} = -0,004 + 0,0396 \text{Ri} - \Omega_x \left(0,0094 + 9,5*10^{-7} \text{Ri}^5\right)$$
(7.51c)

Die durch die Flamme abgegebene Wärmestrahlung wird aus der freigesetzten Energie und der Flammenoberfläche bestimmt:

$$\dot{\mathbf{Q}}_{\mathrm{Str,fi}} = \frac{\dot{\mathbf{m}} \, \mathbf{H}_{\mathrm{c}}}{\mathbf{A}_{\mathrm{K}}} \left(1 - \mathbf{e}^{-0.4 \,\mathrm{L}} \right) \mathbf{F}_{\mathrm{s}} \left(1 - \varsigma \right) + \dot{\mathbf{Q}}_{\mathrm{R}} \,\varsigma \tag{7.52}$$

L ist eine charakteristische Länge und wird für die Strahlung über den Zylindermantel mit W₂ und über die Kreisfläche mit $R_1 = \sqrt{(L_x - b)^2 + L_y^2}$ angesetzt.

Für den Faktor F_s verwendet Johnson eine geringfügig andere Beziehung:

$$F_{s} = 0,21e^{-0,00323 u_{j}} + 0,14$$
(7.53)

Die Bestrahlungsstärke beim Empfänger wird analog zu Kapitel 7.2.3.19.1 mit Gl. (7.48) und den Aussagen zur Einstrahlzahl und atmospherischen Transmissivität in Kapitel 7.2.3.13.1 bestimmt.

Vergleichsrechnung

Johnson hat mehrere Konfigurationen untersucht, die in der folgenden Tabelle zusammengefasst sind:

Tabelle 7.5: Ergebnisse der Versuchsreiehen (Windgeschwindigkeit von 6 m/s (keine Angabe über die Messhöhe und Temperaturschichtung); molarer Masse des Gases: 16,9 kg/kmol; Massenstrom: 10,7 kg/s)

Flammentyp	Durchmesser	Betriebsüberdruck	Massenstrom	Windgeschwindigkeit
В	152 mm	0,2 – 0,3 bar	2,3 – 2,8 kg/s	1,4 – 3,0 m/s
С	152 mm	2,0 – 2,3 bar	7,8–9,0 kg/s	0,3 – 10,9 m/s
D	75 mm	11,1 – 12,2 bar	7,9 – 9,5 kg/s	1,3 – 3,9 m/s
E	20 mm	60,5 – 66,1 bar	3,6 – 3,8 kg/s	1,3 – 6,9 m/s

Für den Flammentyp B mit einem Betriebsüberdruck von 0,3 bar, einem Massenstrom von 2,8 kg/s und einer Windgeschwindigkeit von 3 m/s in Ausströmrichtung berechnet das Modell eine Flammenlänge von 18 m und einen Abstand Austrittsstelle-Flamme von 3,8 m und einen mittleren Flammendurchmesser von 2,4 m. Diese Ergebnisse passen recht gut mit dem Messungen von Johnson überein, die in der folgenden Abbildung dargestellt sind.



Abb. 7.27: Gemessene Flammenkontur [7.93]

7.2.3.19.3 Wasserstoffflamme

Für Wasserstoff ergeben sich mit dem Modell von Chamberlain (siehe Kapitel 7.2.3.19.1) deutlich zu große Flammenlängen im Vergleich zu den Angaben in [7.90 – 7.92] Daher wird für Wasserstoffflammen die folgende Beziehung aus [7.92] für die Flammenlänge in ruhender Luft verwendet:

$$L_{B0} = 54 (\dot{m} d_0)^{0.312}$$
(7.54)

Der Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die Flammenlänge und der Winkel der Flamme gegenüber dem Boden wird mit dem Ansatz von Chamberlain (siehe Kapitel 7.2.3.19.1) berücksichtigt. Nach dem Modell von Saffer/Molkov [7.92] hat die Flamme die Form eines Zylinders mit einem mittleren Durchmesser D_{H2} :

$$D_{H2} = 0.17 L_f$$
 (7.55)

In [7.91] wird aus Messungen eine Flammentemperatur von 2318 K und ein Emissionsgrad $\epsilon_{\rm fl}$ von 0,03 für die Wasserstoffflamme abgeleitet. Die Wärmestrahlung der Flamme kann dann wie folgt bestimmt werden:

$$\dot{Q}_{Str,fl} = 0.03 \sigma \left(T_{fl}^4 - T_u^4 \right)$$
 (7.56)

Die Bestrahlungsstärke beim Empfänger wird analog zu Kapitel 7.2.3.19.1 mit Gl. (7.48) und den Aussagen zur Einstrahlzahl und atmospherischen Transmissivität in Kapitel 7.2.3.13.1 bestimmt.

A [m²]	(Querschnitts-)Fläche; A kann z.B. A_P oder A_L sein
A _{cl} [m ²]	Oberfläche der klaren, nicht rußbedeckten Flamme
A _F [m ²]	Flammenoberfläche
$A_L[m^2]$	Querschnittsfläche, Brenstoffoberfläche bzw. Brandfläche der Lache
A _{LS} [m ²]	Oberfläche der Leuchtenden Spots
$A_P[m^2]$	Querschnittsfläche, Brenstoffoberfläche bzw. Brandfläche des Pools
	oder Tanks
A _{SA} [m ²]	Oberfläche der schwarzen Rußflächen
A _{top} [m ²]	Flammenquerschnittsfläche an der Flammenspitze (Zylinderflamme)
A _{SZ} [m ²]	Oberfläche der Rußzonen (SZ)

7.2.4 Formelzeichen zu Kapitel 7.2

A _{B,e} [m ²]	stationäre (Gleichgewichts-)Poolfläche; $A_{B,e} = \pi d_{B,e}^2 / 4$
a _{hs} [-]	Flächenanteil der hot spots
a _{sp} [-]	Flächenanteil der Rußballen
a _{SA} [-]	gemessener Flächenanteil der Rußflächen, verteilt über die gesamte
	Flamme
a _{LS} [-]	Flächenanteil der leuchtenden (nicht rußbedeckten) spots (LS), verteilt
	über die gesamte Flamme
a _{sz} [–]	Flächenanteil der Rußzone
a ₂ [s]	Konstante; $a_2 = 0.15$ s
a ₃ [–]	empirischer Exponent, $a_3 = 3$ für LNG-Poolfeuer (d = 35 m) [7.23]
b _i [–]	dimensionsloser Längenparameter des Strukturelements i definiert in
	GI. (7.20e); $b_i \equiv l_i/d$
b _{bl} [—]	Korrektur <i>faktor</i> bezüglich L _b [7.1,7.60]
B _{conv} [–]	konvektive Spaldingsche Massentransferzahl
c _{p,i} [J/(kg K)]	spezifische Wärmekapazität des Brennstoffs (z.B. Flüssigkeit) $i \equiv f$
c _{p,pl} [J/(kg K)]	spezifische Wärmekapazität des gesamten Flammengasgemisches im
	Bereich der Plumezone
c _s [kg/m ³]	Massenkonzentration von Rußpartikeln in der Flamme
C/H [–]	Kohlenstoff zu Wasserstoff-Atomverhältnis in KW-Brennstoffen
d [m]	Durchmesser eines Lachen-, Pool- oder Tankfeuers; Lachen-, Pool-
	oder Tankdurchmesser
ď [m]	Durchmesser bei dem $\dot{m}''_{f,max}$ erreicht wird
d _{opt} [m]	(optische) Eindringtiefe bzw. mittlere Reichweite der Strahlung,
	Beispiel: für LNG-Poolfeuer (d = 13 m) resultiert d_{opt} = 1/k ≈ 13.81 m
	[7.6], d.h. ein Extinktionskoeffizient von k = 0.0724 1/m
d _w [m]	infolge des Flammendrags maximaler (vergrößerter) Pooldurchmesser
	in Windrichtung
E [kW/m ²]	Bestrahlungsstärke in einem bestimmten Abstand Δy vom Rand eines
	Lachen-, Pool- oder Tankfeuers
E _{PSM} [W/m ²]	Bestrahlungsstärke bezüglich des Punktquellen-Strahlungsmodells
f ₁ [—]	Faktor, definiert als Flächenanteil der nicht rußbedeckten Flamme
f _v [–]	Rußvolumenanteil; f_v (Isooctan) = $0.62 \cdot 10^{-6}$ [7.65]
f _{rad} [–]	Strahlungsanteil ("Abstrahlungsfaktor") der Flamme
g [m/s²]	Erdbeschleunigung
g(SEP) [m²/kW]	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF) bezüglich SEP

h [m]	Höhe des kreiszylinderförmigen Tanks mit dem Durchmesser d
–Δh _{c,i} [kJ/kg]	spezifische Verbrennungsenthalpie (unterer Heizwert) der Komponente
	i
$\Delta h_{v,i}$ [kJ/kg]	spezifische Verdampfungsenthalpie bei T _{f,b} der Komponente i
H [m]	sichtbare Flammenlänge, d.h. Länge (Höhe) der sichtbaren Flamme; s.
	Abb. 7.5
H _{Ab} [m]	Flammenabsenkung (Eindringtiefe), d.h. maximale, vertikale Entfernung
	der Flamme vom oberen Tankrand in RichtungBrennstoffoberfläche
H _∟ [m]	sichtbare Flammenlänge einer Lache
H _{cl} [m]	Länge (Höhe) der (weitgehend) nicht mit schwarzen
	bedeckten Verbrennungszone (clear burning zone), Basiszone
H _{pl} [m]	Länge (Höhe) der Plumezone bzw. der Intermittenzzone
H _{pul} [m]	Länge (Höhe) der Pulsationszone
k [1/m]	Extinktionskoeffizient der Flamme oder reziproker Weg; oft gilt: $k \approx \hat{x}_{eff}$
k ₁ [1/m]	Abschwächungsfaktor bezüglich des Strahlungsanteils frad(d)
k _s [m²/kg]	spezifische Rußextinktionsfläche
kL _b [–]	optische Dicke bzw. optische Tiefe einer Flamme; s. auch Bemerkung
	(d) zu Gl. (7.10a)
l _i [m]	charakteristische Länge des fluiddynamischen Strukturelements^i
l [m]	Länge einer Rinne, eines Schlitzes oder eines Kanals
L _b [m]	mittlere Strahllänge bzw. Weglänge [7.1] für zylindrische Feuer:
	$\overline{L}_{b} = 0.63 \text{ d} [7.6] \text{ bzw. } \overline{L}_{b} = 0.73 \text{ d} [7.1,7.60]$
ṁ _{pl} [kg/s]	gesamter Massenstrom im Bereich der Plumezone; $\dot{m}_{pl} = \dot{m}_{ent} + \dot{m}_{p}$
m _{ent} [kg/s]	Massenstrom infolge Luftentrainment
ḿ _P [kg/s]	Massenstrom (Bildungsrate) der Brandprodukte (P); Berechnung s.
	Kap. Feststoffbrände
ṁ _f [kg/s]	Brennstoff-Massenstrom
ṁ '' _{f,w} [kg (s m²)]	Brennstoff-Massen <i>abbrand</i> rate (Brennstoff-Massen <i>verdampfungs</i> rate)
.,	<i>mit</i> Windeinfluss
ḿ′′ [kg (s m²)]	Brennstoff-Massen <i>abbrand</i> rate (Brennstoff-Massen <i>verdampfungs</i> rate)
	ohne Windeinfluss
\dot{m}_{fmax}'' [kg (s m ²)]	maximale Brennstoff-Massenabbrandrate (Brennstoff-
	Massenverdampfungsrate) ohne Windeinfluss
ĨM _{ĸw} [kg∕kmol]	molare Masse eines KW-Brennstoffs

p(x/H) [–]	Wahrscheinlichkeit dafür, dass zu irgendeinem Zeitpunkt das Innere
	des Feuers ohne Rußbedeckung in der Höhe x auftritt bzw. dafür, dass
	ein maximales SEP vorliegt; $0 \le p \le 1$
p _g [Pa]	Partialdruck des strahlenden Flammengases
ġ _f ″ [kW/m²]	Wärmefreisetzungsrate pro Poolfläche; $\dot{q}''_{f} = \dot{m}''_{f,max}(-\Delta h_{c})$
Q* [–]	Froude-Zahl ähnliche charakteristische (Flammen- bzw.
	Verbrennungs-) Zahl bzw. dimensionsloser Wärmestrom
Q _{a.rad} [kW]	Wärmestrom infolge thermischer Strahlung von der Flamme in die
_,	Umgebung
Q _{ba,rad} [kW]	Wärmerückstrom infolge thermischer Strahlung von der Poolflamme zur
	Brennstoffoberfläche; $\dot{Q}_{ba,rad} = \phi_{F,f} (1 - e^{-k\beta d}) A \sigma (T_F^4 - T_{f,b}^4)$
ἀ _{ba α} [kW]	Wärmerückstrom infolge Wärmeübergang von der Flamme zur
50,0	Brennstoffoberfläche; $\dot{Q}_{ba,\alpha} = \alpha A_{P}(T - T_{f,b})$
ἀ _{ba λ} [kW]	Wärmerückstrom infolge Wärmeleitung zwischen Poolrand und
50,7	flüssigem Brennstoff; $\dot{Q}_{ba,\lambda} = \lambda \pi d (T - T_{f,b})$
, Q _{ba,tot} [kW]	totaler Wärmerückstrom in Richtung Brennstoffoberfläche nach GI.(7.2)
Q _{λ,f} [kW]	Wärmeleitungsstrom in der brennbaren Flüssigkeit
	totale Wärmefreisetzungsrate (Brandleistung) des Feuers bzw. totaler
	Wärmestrom infolge der spezifischen Verbrennungsenthalpie $(-\Delta h_{c,i})$;
	$\dot{Q}_{_{C}}\equiv\dot{q}_{_{f}}^{\prime\prime}A_{_{P}}$, wenn ein Verbrennungswirkungsgrad von eins
	angenommen wird
Q_ [kW]	totaler Wärmestrom von der Flamme in die Umgebung: infolge
a	thermischer <i>Strahlung</i> ($\dot{Q}_{a,rad}$), Wärme <i>übergang</i> ($\dot{Q}_{a,\alpha}$) und
	$\text{Wärme} \textit{leitung} (\dot{\textbf{Q}}_{a,\lambda}); \ \dot{\textbf{Q}}_{a} = (\textbf{A}_{F} - \textbf{A}_{top}) \textbf{SEP}^{ma} + \dot{\textbf{Q}}_{a,\alpha} + \dot{\textbf{Q}}_{a,\lambda}$
Q _{conv} [kW]	konvektiver Wärmestrom infolge Auftrieb und Luftentrainment in der
	Plumezone; s. auch Gln. (7.15d,e)
, Q _{f,ges} [kW]	gesamter, erforderlicher Wärmestrom zur Verdampfung (\dot{Q}_v),
	<i>Erwärmung</i> $(\dot{Q}_{_{\Delta T}})$ des Brennstoffs inklusive Wärmeleitung $(\dot{Q}_{_{\lambda,f}})$
	innerhalb des flüssigen Brennstoffs
, Q _{top} [kW]	maximaler gesamter Wärmestrom an der Flammenspitze infolge von
	Konvektion (\dot{Q}_{conv}) und thermischer Strahlung

	$(\dot{Q}_{top,rad} = A_{top} SEP^{ma}), nach GI. (7.1c)$
Q _{sen} [kW]	Wärmestrom für die Enthalpiezunahme der Flammengase von T _{bp} auf
	Flammentemperatur T; eine Berechnungformel für \dot{Q}_{sen} ist in [7.7]
	angeben, i.A. ist Q _{sen} vernachlässigbar.
, [kW]	Wärmestrom zur Verdampfung der brennbaren Flüssigkeit;
	$\dot{\mathbf{Q}}_{v} = \dot{\mathbf{m}}_{f}'' \mathbf{A}_{P} \Delta \mathbf{h}_{v}$
Q _{AT} [kW]	Wärmestrom zur Erwärmung der brennbaren Flüssigkeit (f) von T _a
	auf Siedetemperatur $T_{f,bp}$; $\dot{Q}_{\Delta T} = \dot{m}_{f}'' A_{P} c_{p,f} (T_{f,bp} - T_{f,a})$
Q _{verl} [kW]	Verlust-Wärmestrom infolge der Absorption des Wärmerückstroms
	$\dot{Q}_{_{ba,rad}}$ durch den aufsteigenden Dampf (Brennstoffballen in Abb. 7.5)
	der brennbaren Flüssigkeit
r _{pl} [m]	Radius der Plumezone; $r_{pl}(x) = \frac{6}{5} \alpha_{ent} x$
SEP [kW/m ²]	Surface Emissive Power bzw. spezifische Ausstrahlung der Flamme
SEP _{cl} [kW/m ²]	SEP im Bereich der am stärksten strahlenden klaren
	Verbrennungszone der Höhe H_{cl} , d.h. in der Nähe der Flammenbasis
	(s. Abb. 7.5)
SEP _s [kW/m ²]	SEP einer Smoke- bzw. Rußzone
SEP _{max} [kW/m ²]	maximale SEP bei der Temperatur T _{cl} im Bereich der Flammenbasis
	bzw. innerhalb der Höhe H _{cl}
SEP ^{ma} [kW/m ²]	maximale SEP einer klaren Flamme bzw. von leuchtenden spots, d.h.
	jeweils ohne Bedeckung mit schwarzem Ruß
SEP _{act} [kW/m ²]	aktuelle SEP mit Berücksichtigung einer teilweisen Bedeckung der
	Flamme mit schwarzem Ruß
t _{ch} [—]	charakteristische Zeit
t _{max} [s]	Zeit bis zum Erreichen des maximalen Durchmessers d _{max}
t _s [s]	Freisetzungsdauer, Dauer der Verschüttung
Т [К]	Flammen- bzw. Strahlungstemperatur; Emissionstemperatur an der
	Flammenoberfläche
T _{cl} [K]	Emissionstemperatur an der Oberfläche der klaren im Bereich der Höhe
	H _{cl}
T _{fp} [K]	Emissionstemperatur der Brennstoffballen
T _{hs} [K]	Emissionstemperatur der hot spots
T _{max} [K]	maximale Emissionstemperatur (peak temperature) an der Oberfläche

	der klaren Verbrennungszone [7.5]
T _{sp} [K]	Emissionstemperatur der Rußballen
T _{top} [K]	Flammen- bzw. Emissionstemperatur an der Flammenspitze
u _{ax} [m/s]	axiale Strömungsgeschwindigkeit des gesamten
	Flammengasgemisches (inklusive Luftentrainment) im Bereich der
	Plumezone
u _{ch} [m/s]	charakteristische Geschwindigkeit (s. Gl. (7.12c))
u _f [m/s]	Strömungsgeschwindigkeit des aufsteigenden Brennstoffdampfes
u _F [m/s]	Geschwindigkeit der Flammenfront (Flammengeschwindigkeit bzw.
	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit)
u _w * [–]	dimensionslose (skalierte) Windgeschwindigkeit (s. Gl. (7.12b))
u _w [m/s]	Windgeschwindigkeit
u _w (10) [–]	dimensionslose Windgeschwindigkeit in x = 10 m Höhe
u _w (10) [m/s]	Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe
V _{rf} [m³/s]	Verschüttungsrate, Leckagerate oder Ausströmvolumenstrom des
	Brennstoffs (Flüssigkeit) bei der Bildung einer Lache (L)
v _a [m/s]	Abbrandgeschwindigkeit des Brennstoffs (Flüssigkeit)
v _{a,max} [m/s]	maximale Abbrandgeschwindigkeit für einen Pool mit $d \rightarrow \infty$
V _F [m ³]	Volumen der Flamme
V _{rf} [m ³]	insgesamt freigesetztes Flüssigkeitsvolumen
w [m]	Breite einer Rinne, eines Schlitzes oder eines Kanals
w ₁ [m]	maximal (vergrößerte) Breite w in Windrichtung
x[m], y[m], z[m]	kartesische Koordinaten; x: in (axialer) Strömungsrichtung
x _o [m]	Höhe des virtuellen Ursprungs der Feuer-Plumezone; 0.16 m \lesssim $ { m x_{_0}} $ \lesssim
	2.4 m
- Υ̃ _i , x̃ _i [–]	Stoffmengenanteile der Komponente i in Dampfphase,
	Flüssigkeitsphase
У _Р [—]	Ausbeute eines Reaktionsproduktes in Masse Brandprodukt (P)
	bezogen auf die umgesetzte Masse Brandgut, s. Kap. 7.3
α [W/(m² K)]	Wärmeübergangskoeffizient
$lpha_{ent}$ [–]	Entrainmentkoeffizient; $\alpha_{ent} \approx 0.1$
α _E [–]	Absorptionsgrad des Empfängerflächenelements
α _{H2O} [–],	Absorptionsgrade von Wasserdampf, Kohlenstoffdioxid zwischen
α [–]	Flamme und bestrahltem Objekt
~CO ₂ L J	

β [–]	brennstoffabhängiger Korrektor (s. Tab. A7.1) der mittleren Strahllänge
	bzw. Weglänge L_{b} des Feuers, s. auch Bemerkungen (zu Gl. (7.10a)
β _E [°]	Orientierungswinkel zwischen der Normalen der Flammenoberfläche
	und der Verbindungslinie der Flächenelemente dA _F , dA _E
β _F [°]	Orientierungswinkel zwischen der Normalen der Empfängerober-
	fläche und der Verbindungslinie
γ [-]	ein (kleiner) Anteil (Bruchteil) der Dicke δ_{F} der Flammenzone
ε _F [–]	effektiver Emissionsgrad der grauen Flamme, (also unabhängig von λ),
	gesehen von Umgebung
ε _{F,f} [–]	effektiver Emissionsgrad zwischen Flamme (F) und
	Brennstoffoberfläche (f), d.h. gesehen vom absorbierenden
	Brennstoffreservoir
ε _i [–]	Emissionsgrad (gesehen von Umgebung) des Strukturelements i
θ[°]	Flammenneigung
$\hat{\boldsymbol{\varpi}}_{_{eff,i}}$ [1/m]	modifizierter, effektiver Absorptionskoeffizient des Strukturelements i;
	$\hat{\boldsymbol{\varpi}}_{\mathrm{eff},i} \equiv \boldsymbol{b}_i \boldsymbol{\varpi}_{\mathrm{eff},i}$
æ _i [1/m]	Absorptionskoeffizient des Strukturelements i
æ ₁ [1/m]	<i>skalierter</i> (Grau-Gas-)Absorptionskoeffizient; $\mathbf{æ}_1 = \mathbf{k} \delta_F / \mathbf{x}$
λ _i [W/(m K)]	Wärmeleitfähigkeit des Stoffes i bzw. Fluids i ; $\lambda_i \equiv \lambda$
λ [nm]	Wellenlänge
ν [m²/s]	kinematische Viskosität des Fluids
ν _P [–]	stöchiometrischer Koeffizient der Reaktionskomponente P
σ [W/(m ² K ⁴)]	Stefan-Boltzmann-Konstante; $\sigma = 5.67 \cdot 10^{-8} \text{ W/(m}^2\text{K}^4)$
$ ho_{a} \ [kg/m^{3}]$	Dichte der umgebenden Luft
ρ _{pl} [kg/m³]	Dichte in der Plumezone
ρ _v [kg/m ³]	Dichte des Dampfes der brennbaren Flüssigkeit
τ _{at} [—]	atmosphärischer Transmissionsgrad zwischen Flamme und
	benachbartem Objekt; τ_{at} = 1 – $\alpha_{H_{2}O}$ – $\alpha_{CO_{2}}$
τ _{fp} [–]	Durchlassgrad der Brennstoffballen, die sich über der
	Flüssigkeitsoberfläche befinden (s. Abb. 7.5)
τ _i [—]	Durchlass- bzw. Transmissionsgrad des Strukturelements i; Opazität
	(Maß für die Lichtundurchlässigkeit bzw. Undurchsichtigkeit) ist
	definiert als $O_i \equiv 1/\tau_i$

τ _s [–]	Durchlassgrad der Smoke- bzw. Rußzone; $\tau_s = e^{-kL_B}$
φ _{E,F,h} [–]	Einstrahlzahl für ein horizontales Empfängerflächenelement ΔA_E
φ _{Ε,F,ν} [–]	Einstrahlzahl für ein vertikales Empfängerflächenelement ΔA_E
φ _{E,F,max} [–]	maximale Einstrahlzahl am Ort des Empfängerflächenelements ΔA_E
φ _N [–]	Einstrahlzahl im Nahfeld N des Poolfeuers (beim Punktquellen-
	Strahlungsmodell)
$Fr_{w} = \frac{u_{w}^{2}}{\sqrt{gd}} [-]$	(Wind-) <i>Froude</i> -Zahl
$Fr_1 = \frac{u_w^2}{2\sqrt{gd}} [-]$	modifizierte (Wind-) <i>Froude</i> -Zahl
$Fr_{f} \equiv \frac{\dot{m}_{f}''}{\rho_{a}\sqrt{gd}} \ [-]$	Verbrennungs- bzw. <i>Brennstoff-Froude</i> -Zahl bzw. dimensionslose Massenabbrandrate
$Re_{w} \equiv \frac{u_{w}d}{v_{a}} [-]$	(Wind-) <i>Reynolds</i> -Zahl
Indices	
а	Umgebung
act	aktuell, d.h. mit Berücksichtigung einer teilweisen Bedeckung der
	Flamme mit schwarzem Ruß
ах	axial
bp	Siedezustand
ba	Rückstrom von Flamme zur Brennstoffoberfläche
В	Schwarzer Körper
В	Überschuss-Komponente der chemischen Reaktion $A + B \rightarrow v_P P$
С	Verbrennung (combustion)
ch	charakteristisch
cl	klare Verbrennungszone (clear burning zone), s. Abb. 7.2
е	stationär bzw. im Gleichgewicht
eff	effektiv
ent	Entrainment (Einmischung, Mitreißung) von Umgebungsluft
exp	experimentell
E	Empfängerflächenelement
f	Brennstoff (fuel) oder brennbare Flüssigkeit

fp	Strukturelement Brennstoffballen (fuel parcel)
F	Flamme
h	horizontal
hs	Strukturelement hot spot
i	Stoffkomponente (Spezies);fluiddynamisches (i = re, oder hs, oder sp,
	oder fp)
j	Modelle SFM, MSFM, Strahlungsmodell nach Mudan (s. Gl. (7.26)),
	OSRAMO II, OSRAMO III
KW	Kohlenwasserstoffe
L	Lache
LS	Leuchtende Spots
LZ	(Gelb) leuchtende, heiße (Verbrennungs) Zone
ma	maximal, d.h. ohne Bedeckung mit schwarzem Ruß
max	Maximum bzw. maximaler Wert einer Größe
pl	Plumezone
pul	Pulsationszone
Р	Pool; Brandprodukt (im Zusammenhang mit Massenstrom $\dot{m}_{_{P}}$ an
	Brandprodukten
rad	thermische Strahlung
re	Strukturelement Reaktions- bzw. Flammenzone
rf	freigesetzte (verschüttete) Flüssigkeit (bzw. Brennstoff)
S	schwarze Rußschicht bzwzone (smoke)
sp	Strukturelement schwarze Rußballen (smoke parcel)
SA	schwarze Rußflächen
SZ	schwarze Rußzone (Soot Zone)
top	Flammenspitze
tot	gesamt
v	Verdampfung bzw. Brennstoffdampf; vertikal (in Gl. (7.27c))
w	Wind
<>	1. Moment von g(SEP)
(-)	zeitlicher Mittelwert
(^)	modifizierte Größe
(~)	molare Größe

	berechnet mit OSRAMO II
$\begin{pmatrix} H \end{pmatrix}$	auf die Flächeneinheit bezogene Größe
	berechnet mit OSRAMO III
MSFM	Modifiziertes SFM (<i>M</i> odified Solid Flame Model)
OSRAMO	Organisiertes Strukturen-Strahlungsmodell (Organized Structure
	RAdiation MOdel)
SFM	Konventionelles Zylinderflammen-Strahlungsmodell (Solid Flame
	<i>M</i> odel)
UDMH	unsymmetrisches Dimethyl-Hydrazon

7.3 Feststoffbrände

In diesem Kapitel werden die bei der Verbrennung von Feststoffen auftretenden Quellterme bezüglich der Freisetzung von Stoffen und Energie behandelt. Es werden Hinweise zur Abschätzung der Freisetzungsrate von Brandprodukten gegeben und Besonderheiten von Bränden in umschlossenen Strukturen (z.B. in Gebäuden) angesprochen.

7.3.1 Verbrennungsformen und zeitlicher Ablauf bei Feststoffbränden

Feststoffbrände sind im Vergleich zu Gas- und Flüssigkeitsbränden durch eine größere Zahl möglicher Verbrennungsformen und durch eine erheblich langsamere Ausbreitung des Verbrennungsprozesses auf das offene Brandgut geprägt.

7.3.1.1 Verbrennungsformen

Als wesentliche Verbrennungsformen bei Feststoffbränden zu nennen sind

- offene Brände (Flammenbrände), englisch "flaming combustion",
- Schwel- und Glimmbrände, engl. "smouldering combustion", und
- Glutbrände, engl. "glowing combustion".

<u>Offene Feststoffbrände (Flammenbrände)</u> sind vom Erscheinungsbild her den offenen Gasund Flüssigkeitsbränden vergleichbar; in diesem Fall erfolgt in der Flammenzone die Verbrennung von Gasen und Dämpfen, die aus dem aufgeheizten und thermisch zersetzten Feststoff entweichen. Nur wenige Feststoffe wie z.B. Polymethylmethacrylat (PMMA) verbrennen auf nahezu gleiche Weise wie (verdampfende) Flüssigkeiten, indem die Wärmeübertragung aus der Flamme an die Feststoffoberfläche zur Spaltung der Polymerkette und somit zur Freisetzung vorwiegend des Monomerdampfes führt. Bei den meisten offen brennenden Feststoffen tritt hingegen zunächst eine erhebliche thermische Zersetzung des Feststoffs auf, so dass es sich bei dem gasförmigen Brennstoff, der in die Flammenzone eintritt, bereits um ein komplexes Stoffgemisch handelt [7.97].

Die Situation bei der Verbrennung von Holz ist schematisch in der folgenden Darstellung skizziert.



Abb. 7.28: Schematische Darstellung der Vorgänge beim Abbrand von Holz

Unter der Flammeneinwirkung tritt eine Verkohlung der äußeren Schicht des festen Brennstoffs ein; gleichzeitig werden brennbare Pyrolysegase freigesetzt, die in der Flammenzone unter Lufteinmischung offen verbrennen. Nach dem vollständigen Austreiben der Pyrolysegase aus dem Brandgut verbrennt der verkohlte feste Rückstand in Form eines Glutbrandes.

<u>Schwel- und Glimmbrände</u> treten in porösen Materialien (Haufwerken, Schüttgütern etc.) auf. Eine Voraussetzung für diese Verbrennungsform ist, dass die Materialien bei ihrer Erhitzung eine poröse Verkohlungszone ausbilden und nicht schmelzen. Die für die thermische Zersetzung und Schwelgasbildung benötigte Wärme wird im Falle eines sich selbst unterhaltenden Schwelbrands durch Oberflächenoxidation in der verkohlten Zone erzeugt [7.98]. Schwelbrände sind durch niedrige Temperatur und durch Sauerstoffmangel in der Zersetzungszone gekennzeichnet, so dass die freigesetzten Zersetzungsprodukte nicht zur Zündung gelangen und keine offene Flamme auftritt.

Schwel- bzw. Glimmbrände können sowohl durch eine Erhitzung der äußeren Oberfläche des Feststoffs als auch in Folge einer Selbstentzündung im Inneren eines reaktiven Haufwerks entstehen. Ein Schwelbrand kann in einen offenen Flammenbrand übergehen, wenn die gebildeten, brennbaren Schwelgase an der Oberfläche des Feststoffs entzündet werden. Viele Schadenfeuer entwickeln sich mit einer anfänglichen Schwelbrandphase [7.97].

Die Verwendung der Begriffe "Glimmen" und "Schwelen" erfolgt in der Praxis uneinheitlich. In der Richtlinie VDI 2263 Blatt 1 [7.99] wird im Zusammenhang mit der Brennzahlbestimmung brennbarer Stäube das Durchglühen einer Staubschüttung (ohne Funkenwurf) als "Glimmbrand" bezeichnet, im Unterschied zur Verbrennung mit Funkenwurf oder Flammenerscheinung ("offene Verbrennung"). Eine andere Definition verbindet den Begriff des Glimmbrands mit der glühenden Verbrennung eines Stoffs ohne sichtbare Flamme. Die bei der Selbstentzündung eines Haufwerks entstehenden, heißen Reaktionszonen im Haufwerksinneren werden zudem oft als "Glimmnester" bezeichnet.

Als <u>Glutbrand</u> wird eine Feststoffverbrennung bezeichnet, die ohne Schwelgasbildung und ohne Flammen als oxidative Oberflächenreaktion des Feststoffs abläuft und typischerweise bei der Verbrennung kohlenstoffreicher Feststoffe oder verkohlter Rückstände auftritt. Ein Beispiel hierfür ist die Verbrennung von Holzkohle.

Bei der Feststoffverbrennung in einem realen Schadenfeuer finden die beschriebenen Formen der Verbrennung meistens sowohl nacheinander (bezogen auf eine einzelne Stelle des Brandguts) als auch gleichzeitig an verschiedenen Stellen des Brandguts statt. Die größte Quellstärke in Bezug auf den Wärmestrom und den Quellmassenstrom atmosphärisch freigesetzter Brandprodukte tritt in einem Schadenfeuer generell beim offenen Flammenbrand auf⁴, der aus diesem Grunde den Schwerpunkt der hier vorliegenden Betrachtung bildet.

7.3.1.2 Brandphasen bei Feststoffbränden

Schadenfeuer, bei denen feste Brandstoffe beteiligt sind, lassen sich in verschiedene Brandphasen einteilen. Einem Vorschlag von Schneider [7.100] folgend sind dies im einfachsten Fall die Phasen des Entwicklungsbrands (Entzündung und Schwelen) und des Vollbrands (Ausbreitung und Abklingen), wobei Löschmaßnahmen nicht berücksichtigt sind, wie im Folgenden dargestellt:

⁴ Eine Ausnahme bilden Feststoffbrände in umschlossenen Strukturen mit stark eingeschränkter Luftzufuhr, z. B. Brände in Silos und in Deponiekörpern, bei denen die Umschließung der Schwelbzw. Glimmbrandzone über die gesamte Branddauer weitgehend erhalten bleibt. Die freiwerdenden, nicht entzündeten Schwelgase stellen in diesem Fall den für die atmosphärische Ausbreitung relevanten Quellstrom dar.



Zeit

Abb. 7.29: Vereinfachter zeitlicher Verlauf eines natürlichen Brandes [7.118]

Eine differenziertere Einteilung, angelehnt an die VDI-Richtlinie 6019 Blatt 1 [7.101], berücksichtigt folgende Phasen:

- 1. Brandentstehungsphase: nach Entzündung linear mit der Zeit zunehmende Brandleistung
- 2. Fortentwickelte Brandphase: quadratische Zunahme der Brandleistung mit der Zeit
- 3. Konstante Brandphase (bei lokal begrenzten Bränden): konstante Brandfläche und konstante Brandleistung
- Kontrollierte Brandphase: konstante bzw. abnehmende Brandfläche und Brandleistung nach Auslösung automatischer Löschanlagen (Sprinkleranlagen)
- 5. Brandbekämpfung durch die Feuerwehr: linear auf Null zurück gehende Brandleistung

Die folgende Darstellung zeigt den schematischen Verlauf für einen niedrigenergetischen bzw. für einen hoch energetischen Brennstoff. Niedrig bzw hoch energetisch bezieht sich hierbei auf die mögliche frei werdende Reaktionswärme im Falle der Verbrennung.



Abb. 7.30: detaillierter, zeitlicher Verlauf eines natürlichen Brandes [7.101]

Zur Ermittlung eines Quellterms für die atmosphärische Ausbreitung werden diejenigen chemischen Reaktionen im Nahbereich des Brandherdes berücksichtigt, die an der Flammenoberfläche abgeschlossen sind. Folgereaktionen auf dem weiteren Ausbreitungsweg (z. B. Weiterreaktion der Brandgase mit Luftfeuchtigkeit), Agglomerations- und Sedimentationsvorgänge (z. B. von Rußpartikeln) sowie eine mögliche Auswaschung von Stoffen (z. B. durch Regen) wirken sich als Teilvorgänge der atmosphärischen Ausbreitung aus und sind daher nicht Gegenstand der Quelltermbeschreibung.

Zur Ermittlung der brandbedingten Quellterme bei Feststoffbränden bietet sich folgende Vorgehensweise an:

- 1. Ermittlung der brandrelevanten Kenndaten des Brandguts,
- Beschreibung des zeitabhängigen Brandverlaufs (Brandfläche und/oder Brandleistung),
- Beschreibung der korrespondierenden zeitabhängigen Emissionsrate der Brandprodukte.

Im Hinblick auf die Brandproduktentstehung werden Löschmaßnahmen im Allgemeinen nur insoweit berücksichtigt, als diese Maßnahmen die Dauer des Brandes begrenzen und sich auf die zeitabhängige Größe der Brandfläche und die zeitabhängige Brandleistung auswirken. Die Veränderung des Brandproduktspektrums in der Löschphase wird hingegen nicht berücksichtigt.

7.3.1.3 Abgrenzung zwischen Quelle und Ausbreitungsweg

Bei Feststoffbränden in Räumen oder umschlossenen Bereichen kommt es zur Übertragung eines Teils der Konvektions- und Strahlungswärme an Umfassungsbauteile sowie ggf. zur Ausbildung einer heißen Rauchschicht, die durch Wärmestrahlung ebenfalls zur Aufheizung von weiterem Brandgut beiträgt, wodurch schließlich ein Flash-Over eintreten kann (spontane Entzündung des gesamten Brandguts im Brandraum). Gleichzeitig begrenzt die Umschließung die Luftzufuhr zum Brandherd, so dass im Verlauf der Brandentwicklung trotz offener Verbrennung ein Sauerstoffmangel eintreten kann. Die Umschließung hat somit erheblichen Einfluss auf den Brandverlauf.

Die Ausbreitung von Brandrauch innerhalb des Brandraums und in Räumen, die in offener Verbindung zum Brandraum stehen, wird durch die auftriebsbedingte Eigendynamik des Rauchs sowie durch überlagerte äußere Einflüsse (Gebäudelüftung, Windeffekte) bestimmt. Die Anordnung und Größe von Zuström- und Abströmöffnungen zur Umgebung sowie die Leistung ggf. vorhandener Zuluft- oder Absauganlagen wirken sich ebenfalls auf die Rauchund Wärmeausbreitung innerhalb des Gebäudes aus. Zur Modellierung dieser Phänomene eignen sich z. B. Mehrzonenmodelle, in denen Energie- und Stofftransportbeziehungen simultan gelöst werden, und CFD-Codes.

Für die atmosphärische Ausbreitung des Brandrauches sind in diesem Fall die Abströmöffnungen zur Atmosphäre als relevante Grenzflächen zu betrachten.

7.3.1.4 Quellterm für freigesetzte Stoffe

Als Quellterm für die Berechnung der atmosphärischen Ausbreitung von Brandprodukten, die als Gas oder als Aerosol frei werden, ist der zeitabhängige Massenstrom $\dot{m}_i(t)$ des jeweiligen Stoffes *i* anzugeben.

Der "Volumenstrom der Brandgase" ist ein auch in der Fachliteratur gelegentlich verwendeter Begriff zur Beschreibung der Brandproduktbildung. Damit werden allerdings in der Praxis unterschiedliche Größen bezeichnet, vgl. nachstehende Tabelle 7.6

Tabelle 7.6:Gebräuchliche Angaben zur Beschreibung des Brandgas- bzw.Rauchvolumenstroms

Größe	charakteristische Werte (beispielhaft)	
Luftverbrauch (auf Normbedingungen	8 m ³ /s Luft je 1 kg/s Abbrandrate ^{*)}	
umgerechnet) für eine theoretisch vollständige		
Verbrennung des Brandguts entsprechend der		
momentanen Abbrandrate, z. B. [8.19]		
Volumenstrom (real) der Brandgase einschließ-	100 m ³ /s je 1 kg/s Abbrandrate ^{*)}	
lich eingemischter Luft durch einen beliebigen		
Bezugsquerschnitt, z. B. in Höhe der Flam-	(bei 500 °C Rauchtemperatur	
menspitzen, in Höhe der Rauchschichtunter-	und 30% Strahlungsanteil)	
grenze oder durch Rauchabzugsöffnungen ins		
Freie		
Volumenstrom (rechnerisch), bei dem der frei-	10 ³ 2·10 ⁴ m ³ /s je 1 kg/s Abbrandrate	
gesetzte Brandgasstrom nach Vermischung mit		
Umgebungsluft eine bestimmte Konzentration	(Grenze der Sichtbeeinträchtigung	
oder optische Dichte annehmen würde	bei stark rußbildenden Brandgütern)	

^{*)} bei einem angenommenen unteren Heizwert des Brandguts von 30 MJ/kg

Die Angabe eines Brandgas- oder Rauchvolumenstroms ist daher als Beschreibung des Quellterms der Stofffreisetzung nur bedingt geeignet und erfordert die gleichzeitige Angabe eines Bezugszustands oder Bezugsquerschnitts sowie die zusätzliche Angabe der Konzentration des jeweiligen Stoffs.

7.3.2 Modellansätze für Teilaspekte der offenen Verbrennung

In diesem Abschnitt werden Ansätze zur Beschreibung von Teilaspekten der offenen Verbrennung zusammengestellt, und zwar für die flächenbezogene Abbrandrate, für die zeitabhängige Brandfläche und Brandleistung und für die Bildung von Brandprodukten aus den Ausgangsstoffen.

Diese Ansätze basieren größtenteils auf empirischen Untersuchungen. Soweit in den Modellansätzen auf brandbezogene Stoffkenngrößen Bezug genommen wird, ist zu beachten, dass diese Kenngrößen auf bestimmte Brand- oder Prüfszenarien bezogen sind. Eine Veränderung z. B. der geometrischen Anordnung des Brandguts (vertikale statt horizontale Brandausbreitung) oder der Ventilationsbedingungen kann signifikante Änderungen der Brandkenngrößen zur Folge haben (vgl. [7.102]).

Die vorliegende Betrachtung orientiert sich an einer makroskopischen Beschreibung des Verbrennungsvorgangs, welche als Zielgrößen die (zeitabhängige) Wärmefreisetzungsrate und die damit verbundenen Massenströme atmosphärisch freigesetzter Verbrennungsprodukte ergibt.

Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass Modelle zur detaillierten Beschreibung der lokalen Wärme- und Stofftransportvorgänge und der chemischen Reaktionen der Feststoffverbrennung in der Literatur beschrieben und auch bereits für die numerische Verbrennungssimulation (z.B. mit Hilfe von CFD-Modellen) verfügbar gemacht worden sind. Da die Ermittlung störungsbedingter Quellterme bei Feststoffbränden in den meisten Fällen auf vergleichsweise groben Angaben bezüglich der Geometrie und Stoffeigenschaften der Brandlast beruht, wird die detaillierte Verbrennungsmodellierung für Feststoffbrände hier nicht näher betrachtet.

7.3.2.1 Flächenbezogene Abbrandraten bei offenen Feststoffbränden

Die Abbrandrate eines flächigen Brandgutes wie z. B. einer offenen Feststoffschüttung wird in der Phase des fortentwickelten Brandes – ähnlich wie bei Flüssigkeitsbränden – dadurch bestimmt, dass ein Teil der aus den Flammen emittierten Wärmestrahlung zur Aufheizung und thermischen Zersetzung bzw. zum Schmelzen und zur Verdampfung des Brandguts beiträgt, wobei sich ein dynamisches Gleichgewicht ausbildet.

Das Schema der hierfür relevanten Vorgänge sieht folgendermaßen aus [7.97]:





Aus der Flamme und ggf. zusätzlich aus der heißen Umgebung wird Strahlungswärme an die Oberfläche des festen Brandguts übertragen. Dieser Wärmestrom bewirkt teilweise die Verdampfung bzw. Pyrolyse des Brandguts und erzeugt einen entsprechenden Brennstoffstrom in die Flammenzone.

Die flächenbezogene Abbrandrate (Massenabbrandrate) $\dot{m}_{f}^{"}$ in kg/(m² s), die als "Brennstoffmassenstromdichte" an der Feststoffoberfläche in Erscheinung tritt, stellt sich aufgrund des verbleibenden Überschusses der flächenbezogenen Wärmeeinstrahlung $\dot{q}_{F}^{"}$ (in kW/m²) aus der Flammenzone (und ggf. aus der Umgebung) über die flächenbezogenen Wärmeverluste $\dot{q}_{verl}^{"}$ ein, wobei Δh_{V} (in kJ/kg) die spezifische Enthalpie zur Verdampfung bzw. Pyrolyse des Brennstoffs ist:

$$\dot{m}_{\rm f}^{\prime\prime} = \frac{\dot{q}_{\rm F}^{\prime\prime} - \dot{q}_{\rm verl}^{\prime\prime}}{\Delta h_{\rm V}} \tag{7.56}$$

Diese Gleichung beschreibt den prinzipiellen Zusammenhang der auftretenden Phänomene. Die Brandleistung \dot{Q}_{c} eines flächenhaften Brandes errechnet sich als Produkt aus der flächenbezogenen Abbrandrate $\dot{m}_{f}^{"}$, der Brandfläche *A* und der spezifischen Verbrennungsenthalpie Δh_{c} , deren Zahlenwert mit dem unteren Heizwert H_{U} des Feststoffs übereinstimmt: $\dot{Q}_{c} = \dot{m}_{f}^{"} \cdot A \cdot |\Delta h_{c}|$ (7.57)

In [7.103] und [7.104] werden folgende Größenordnungen für die flächenbezogene Abbrandrate $\dot{m}^{"}$ angegeben:

 $\begin{array}{lll} Synthetische Materialien & 0,005 \ldots 0,025 \ kg/(m^2 \cdot s) \\ \\ Pflanzenschutzmittel & 0,02 \ kg/(m^2 \cdot s) \end{array}$

7.3.2.2 Zeitabhängige Entwicklung der Brandfläche und Brandleistung

Im Brandschutzingenieurwesen werden für Zwecke des Brandschutzdesigns so genannte Bemessungsbrandszenarien (design fires) herangezogen, d. h. empirische Beschreibungen realer Brandverläufe.

Zur Bemessung von Anlagen zur Beherrschung der brandbedingt freigesetzten Wärme und des Rauches werden vor allem zeitabhängige Brandleistungskurven benutzt. Diese beruhen beispielsweise auf der flächenbezogene Wärmefreisetzungsrate \dot{q}'' in kW/m² und der

zeitabhängigen Brandfläche A(t). Unter der empirisch begründeten Annahme einer konstanten Geschwindigkeit v, mit der sich der Radius der brennenden Fläche mit der Zeit auf einem näherungsweise ebenen Brandgut vergrößert, ergibt sich ein quadratischen Zusammenhang zwischen Brandleistung und Branddauer ("t²-Brand"). Somit gilt für die fortentwickelte Brandphase:

$$A = \frac{\pi}{4} \left(d_0 + 2 \cdot \mathbf{v} \cdot t \right)^2 \tag{7.58}$$

und

$$\dot{\mathbf{Q}}_{\mathbf{C}} = \dot{\boldsymbol{q}}_{\mathbf{C}}' \cdot \boldsymbol{A} \tag{7.59}$$

Zur Bemessung von Rauchabzugsanlagen nach DIN 18232 Teil 2 [7.106] werden beispielsweise eine flächenbezogene Wärmefreisetzungsrate von 300 kW/m² und eine Brandausbreitungsgeschwindigkeit von 2,5 mm/s (besonders klein), 4,2 mm/s (mittel) oder 7,5 mm/s (besonders groß) als Parameter zugrunde gelegt.

Zum Vergleich: Bei Lachen von Flüssigkeiten, deren Temperatur die Flammpunkttemperatur überschreitet, liegt die horizontale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit selbst bei ruhender Umgebung in der Größenordnung der (laminaren) Flammengeschwindigkeit des betreffenden Dampf-Luft-Gemisches und somit um zwei Zehnerpotenzen höher als die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit auf Feststoffen, so dass bei Flüssigkeitsbränden praktisch in den meisten Fällen eine sehr schnelle Brandausbreitung auf die gesamte Oberfläche des Brandguts angenommen werden kann.

Die quadratische Zunahme der Brandwärmeleistung mit der Zeit in der Phase des fortentwickelten Brandes wurde empirisch auch für Anordnungen bestätigt, in denen keine flächige geometrische Brandausbreitung im vorbeschriebenen Sinn auftritt. In diesem Fall beschreibt der Brandintensitätskoeffizient α (in kW/s²) den Zusammenhang zwischen Branddauer und Wärmeleistung:

$$\dot{\mathbf{Q}} = \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{t}^2 \tag{7.60}$$

Bei Bränden in Chemikalienlägern wurden in experimentellen Untersuchungen [7.116] Brandentwicklungen beobachtet, die durch Brandintensitätskoeffizienten der Klassen "langsam" bis "sehr schnell" charakterisiert werden konnten. Dabei wurden folgende Abgrenzungen der Brandentwicklungsklassen zugrunde gelegt:

Brandentwicklungsklasse	Wertebereich des Brandintensitätskoeffizienten
	lpha (in kW/s²)
sehr langsam	< 0,0029
langsam	0,0029 0,0117
mittel	0,0117 0,0469
schnell	0,0469 0,188
sehr schnell	> 0,188

Tabelle 7.7: Gebräuchliche Brandintensitätskoeffizienten, nach [7.116]

Zur Beschreibung der zeitabhängigen Wärmefreisetzungsrate bei Entstehungsbränden in Gebäuden wird in der Fachliteratur [7.107] auch ein exponentieller Brandverlauf in der Form $\dot{Q} = \dot{Q}_0 \cdot \exp\{c \cdot (t - t_0)\}$ (7.61a)

angegeben, wobei \dot{Q}_0 die Wärmefreisetzungsrate zum Zeitpunkt t_0 bezeichnet und *c* eine Konstante ist. Ein charakteristisches Maß des exponentiellen Brandverlaufsmodells ist die Zeit Δt , in der sich die Wärmeleistung verdoppelt. Zwischen Δt und der Konstanten c in Gleichung (6a) besteht der folgende Zusammenhang:

$$c = \frac{\ln(2)}{\Delta t} \tag{7.61b}$$

Der Zusammenhang zwischen der Wärmefreisetzungsrate \hat{Q} und der Abbrandrate des Brennstoffs \dot{m}_{f} ergibt sich durch den Betrag der spezifischen Verbrennungsenthalpie Δh_{C} (siehe Gl. 7.63 a,b).

Die vorstehenden Beziehungen gelten bei Bränden in Bauwerken nur, solange es nicht zum sogenannten "Flashover" kommt, d. h. einer schnellen Flammenausbreitung auf sämtliche im Brandraum befindlichen festen Brandstoffe. Dieser Effekt markiert den schlagartigen Übergang zum Vollbrand und kann nach hinreichender Aufheizung und thermischer Aufbereitung der Brandlasten durch Wärmestrahlung insbesondere aus einer heißen, deckennahen Rauchschicht eintreten. Zeitlich fällt ein Flashover gemäß experimenteller Beobachtung häufig mit dem Erreichen einer Temperatur von 500 bis 600 °C in der Rauchschicht zusammen [7.107] und ist mit einem schlagartigen Anstieg der Temparatur im gesamten Brandraum bis zur Flammentemperatur verbunden.

7.3.2.3 Bildung von (toxischen) Brandprodukten

Die Art der entstehenden Brandprodukte und deren Bildungsrate sind hauptsächlich abhängig von der chemischen Zusammensetzung des Brandguts, von der Temperatur der Verbrennung und vom (lokalen) Sauerstoffangebot, welches bei Realbränden durch die Ventilationsverhältnisse bestimmt wird.

Grundlegende Erkenntnisse über die Art und Zusammensetzung der Produkte, die bei der Verbrennung eines definierten Ausgangsmaterials entstehen, lassen sich durch Laborversuche in Mikroverbrennungsapparaturen gewinnen [7.108], in denen die Verbrennungsbedingungen sowohl hinsichtlich der Temperatur als auch des Sauerstoffangebots gezielt eingestellt werden können. Experimentelle Untersuchungen zur Brandproduktbildung werden auch in größeren Versuchsapparaturen durchgeführt, die von Verbrennungskalorimetern bis hin zu Brandprüfständen reichen.

Im Unterschied zu solchen kleinskaligen Laboruntersuchungen zur Brandproduktbildung, bei denen nahezu homogene Bedingungen bezüglich der Haupteinflussgrößen eingestellt werden können, liegen bei Realbränden fester Stoffe in der Regel heterogene Bedingungen vor. Dies hat zur Folge, dass für die Entstehungsrate der meisten Brandprodukte im Realbrandfall nur grobe Abschätzungen möglich sind.

Die weiteren Betrachtungen basieren, soweit nicht anders ausgeführt, auf der Annahme, dass das Brandgut Kohlenstoff und Wasserstoff enthält. Dies trifft für fast alle organischen Verbindungen sowie für brennbare Verpackungsmaterialien zu.

Bei der Verbrennung von kohlenstoffhaltigem Material entstehen grundsätzlich Kohlendioxid (CO₂), Kohlenmonoxid (CO) und Ruß, wobei die Ausbeute dieser Brandprodukte vom lokalen Sauerstoffangebot und somit von den Ventilationsbedingungen abhängt. Wasserstoff reagiert zu Wasser. Die Heteroatome Schwefel und Phosphor werden zu den entsprechenden Oxiden umgesetzt.

Aus stickstoffhaltigen Brandgütern können, abhängig von den lokalen Ventilationsbedingungen, Stickoxide (NO_x), Ammoniak (NH_3) und Blausäure (HCN) entstehen (mit absteigenden Anteilen). Bei hohen Verbrennungstemperaturen entstehen Stickoxide auch durch die Reaktion von Luftstickstoff mit Sauerstoff ("thermisches NO_x ").

Halogene (F, Cl, Br) im Brandgut reagieren zum jeweiligen Halogenwasserstoff, zusätzlich in geringen Anteilen zu den Halogenen. Chlor reagiert in geringem Umgang zu COCl₂

(Phosgen). Bei Anwesenheit von Chlor oder Brom ist in Spuren die Bildung polyhalogenierter Dibenzodioxine und Dibenzofurane möglich.

Anhand stöchiometrischer Betrachtungen kann aus der Elementarzusammensetzung des Brandguts für eine vollständige Verbrennung mit hoher Temperatur und ausreichendem Sauerstoffangebot die Bildungsrate der Hauptprodukte bezogen auf das umgesetzte Brandgut berechnet werden. Bei niedriger Temperatur und/oder unzureichendem Sauerstoffangebot sind außerdem die Produkte von Vergasungs- oder Pyrolysereaktionen relevant, in denen thermische Abbauprodukte des Brandguts entstehen. Aus den primären Pyrolyseprodukten (bei kohlenwasserstoffhaltigem Brandgut z. B. ungesättigte C_n -Verbindungen mit n = 2, 3, ...) können in Folgeschritten sekundäre und tertiäre Pyrolyseprodukte hoher thermischer Stabilität entstehen (z.B. polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe, PAK) [7.108].

Die nachstehenden Angaben zur Brandproduktbildung basieren auf Ergebnissen experimenteller Untersuchungen im Kleinmaßstab und veranschaulichen sowohl die Größenordnung als auch die Bandbreite der Bildungsrate charakteristischer Brandprodukte.

Nach Angaben aus [7.112] ist bei Bränden von Pflanzenschutzmitteln mit einer Brandproduktbildung entsprechend der nachstehenden Tabelle 7.8 zu rechnen. Die Angaben beziehen sich auf Klein- bzw. Entstehungsbrände. Soweit zutreffend, sind die Bedingungen angegeben, unter denen die betreffenden Stoffe bei kleinskaligen Untersuchungen in den Brandgasen gefunden wurden.

Chemisch gebundene	Brandprodukt	Brandproduktbildung	Bedingungen
Ausgangskomponente		bzw. –ausbeute	
bzw. Ausgangsstoff		(maximal)	
Kohlenstoff	Kohlenmonoxid,	Mol-Verhältnis CO:CO ₂	Schwelbrand (O ₂ -
	Kohlendioxid	maximal 30:70	Mangel, T < 600 °C)
Fluor	Fluorwasserstoff	praktisch vollständige	
		Umsetzung	
Chlor	Chlorwasserstoff	praktisch vollständige	
		Umsetzung	
Brom	Bromwasserstoff	praktisch vollständige	
		Umsetzung	

Tabelle 7.8:	Brandproduktbildung bei Bränden von Pflanzenschutzmitteln, nac	h [7.112]	
--------------	--	-----------	
Schwefel	Schwefeloxide		
------------------------	-------------------------------	---------------------------------	--------------
	(v.a.	praktisch vollständige	
	Schwefeldioxid)	Umsetzung	
Stickstoff (in	Cyanwasserstoff	50 g je kg verbranntes	600 °C (VCI-
Aminotriazol mit 54%		Produkt	Apparatur)
Stickstoffgehalt)			
			950 °C (VCI-
		nicht nachweisbar	Apparatur)
	Stickoxide (NO _X)	0,2 g je kg verbranntes	600 °C (VCI-
		Produkt	Apparatur)
		5 g je kg verbranntes	950 °C (VCI-
		Produkt	Apparatur)
Methylharnstoffe,	Methylisocyanat	30 g je kg verbranntes	600 °C (VCI-
Methylcarbamate		Produkt	Apparatur)
			950 °C (VCI-
		nicht nachweisbar	Apparatur)
halogenierte Pflanzen-	chlorierte	0,2*10 ⁻⁶ g TE je kg	Verbrennung
schutzmittel (25%	Dibenzo-p-	verbranntes Material	bei 800 °C
Chlorgehalt)	dioxine und	und je % Chlorgehalt	
	-furane		

Für Kleinbrände von Pflanzenschutzmitteln wird in [7.116] folgende maximale Ausbeute ("Bildungsrate") für charakteristische Brandprodukte angegeben:

Tabelle 7.9:Maximale Brandproduktausbeute bei Kleinbränden von
Pflanzenschutzmitteln, nach [7.116]

Brandprodukt	Maximale Ausbeute
Kohlenmonoxid	490 mg/g
Cyanwasserstoff	25 mg/g
Stickstoffdioxid	5 mg/g
Chlorwasserstoff	257 mg/g
Bromwasserstoff	177 mg/g
Fluorwasserstoff	52 mg/g
Schwefeldioxid	800 mg/g
Methylisocyanat	30 mg/g
Chlorierte Dibenzodioxine und –furane (TE)	0,000005 mg/g

Wenn für einzelne chemische Elemente im Brandgut eine praktisch vollständige Umsetzung zu einem bestimmten Reaktionsprodukt angenommen werden kann, ergibt sich die rechnerische Ausbeute *y* dieses Reaktionsprodukts (= Produktmasse bezogen auf die umgesetzte Brandgutmasse) nach den folgenden Beziehungen.

Die angenommene Reaktion eines Elements (A) aus dem Brandgut mit einer weiteren, im Überschuss vorhandenen Komponente (X) zum charakteristischen Brandprodukt (P) folgt der Gleichung

$$A + X \rightarrow v \cdot P \tag{7.62a}$$

Hier bezeichnet v den (ggf. von 1 verschiedenen) Stöchiometriefaktor der Reaktion.

Die Ausbeute y_P des Brandprodukts P ergibt sich nach der Beziehung

$$y_{\rm P} = x_{\rm A} \cdot v \cdot \frac{M_{\rm P}}{M_{\rm A}} \tag{7.62b}$$

Dabei ist x_A der Massenanteil des Elements A im Brandgut (in kg/kg); M_A und M_P sind die Molmassen der jeweiligen Stoffe (in kg/mol).

Die Bildungsrate $\dot{m}_{\rm P}$ des Brandprodukts ist dann unmittelbar aus der Abbrandrate $\dot{m}_{\rm f}$ des Brennstoffs oder der Wärmefreisetzungsrate $\dot{Q}_{\rm C}$ zu berechnen als

$$\dot{m}_{\rm P} = y_{\rm P} \cdot \dot{m}_{\rm f} \tag{7.63a}$$

$$\dot{m}_{\rm P} = y_{\rm P} \cdot \frac{\dot{Q}_{\rm C}}{\left|\Delta h_{\rm C}\right|} \tag{7.63b}$$

Für einzelne Brandprodukte, die im Zuge einer unvollständigen Verbrennungsreaktion entstehen, findet man in der Literatur (z. B. in [7.113]) brandgutspezifische Ausbeutefaktoren y und deren Abhängigkeit von den Ventilationsbedingungen, die durch Experimente in Verbrennungsapparaturen ermittelt wurden.

Für die Rußbildung unter den Bedingungen eines Brandes mit hohem Luftüberschuss ("well ventilated") werden in [7.113] folgende Ausbeutefaktoren angegeben:



Abb. 7.32: Rußausbeute bei einer Verbrennung mit hohem Luftüberschuss, nach [7.113]

Die Rußausbeute der Mehrzahl der aufgeführten Stoffe bei einer Verbrennung mit hohem Luftüberschuss liegt zwischen 0,01 und 0,2.

Der Einfluss der Ventilationsbedingungen auf die Rußbildung kann anhand des Äquivalenzverhältnisses ("equivalent ratio") Φ näherungsweise durch folgende Gleichung beschrieben werden [8.17]:

$$y_{\rm VC} = y_{\rm WV} \cdot \left(1 + \frac{\alpha}{\exp\{2, 5 \cdot \Phi^{-\xi}\}}\right)$$
(7.64)

In dieser Gleichung bezeichnet y_{VC} die Rußausbeute bei eingeschränkter Luftzufuhr ("ventilation controlled") und y_{WV} die Rußausbeute bei einem Brand mit hohem Luftüberschuss ("well ventilated"). Die Koeffizienten α und ξ sind vom Brandgut abhängig. Das Äquivalenzverhältnis Φ repräsentiert das Verhältnis zwischen dem Luftstrom, welcher zur stöchiometrischen Verbrennung des Brandguts bei der jeweiligen Abbrandrate des Brandguts benötigt wird, und dem tatsächlich im Brandversuch zugeführten Luftstrom. Ein Äquivalenzverhältnis $\Phi > 1$ entspricht somit unterstöchiometrischer Luftzufuhr, $\Phi < 1$ entspricht überstöchiometrischer Luftzufuhr; bei $\Phi << 1$ liegt ein gut ventilierter Brand vor. Der Wert $\Phi = 4$ markiert die Grenze zur flammenlosen thermischen Zersetzung des Brandguts.

Für Holz und für einige Kunststoffe werden bezüglich der Ventilationsabhängigkeit der Rußausbeute in der Literatur folgende Koeffizienten angegeben:

Material	α	بخ
Holz	2,5	1,2
Nylon	1,7	0,8
PE, PP	2,2	1,0
PMMA	1,6	0,6
PS	2,8	1,3
PVC	2,8	1,3

Tabelle 7.10: Koeffizienten für die Ventilationsabhängigkeit der Rußausbeute, nach [7.113]



Abb. 7.33: Ventilationsabhängigkeit der Rußausbeute (nach [7.113])

Bei einer Verbrennung der aufgeführten Stoffe steigt die Rußausbeute demnach auf das 1,5bis Dreifache, wenn die Luftzufuhr, ausgehend von einem gut ventilierten Brand, bis an die Grenze der flammenlosen Zersetzung reduziert wird.

Umfangreiche Angaben zur Brandproduktausbeute bei Kunststoffbränden lassen sich einer Veröffentlichung von Ortner und Hensler [7.86] aus dem Jahr 1995 entnehmen; die darin berichtete Bandbreite experimentell gefundenerWerte erstreckt sich für einzelne Brandprodukte bei gleichem Ausgangsmaterial teilweise über mehr als eine Zehnerpotenz.

Neben der Entstehung chemischer Reaktionsprodukte aus dem Brandgut ist bei einem Schadenfeuer grundsätzlich auch mit der thermischen Freisetzung eines Teils des Brandguts in unverbrannter Form zu rechnen, sofern dieses eine ausreichend hohe Flüchtigkeit besitzt. Gemäß [7.112] geht bei einem Brand von Pflanzenschutzmitteln bis zu 1% des Brandguts in unverbrannter Form in das Brandgas über (d.h. 10 mg/g umgesetztes/verbranntes Produkt). In [7.103] und [7.104] wird der unverbrannt freigesetzte Anteil des Brandguts für Substanzen mit hohem Siedepunkt auf 1 bis 2 %, für solche mit niedrigem Siedepunkt (bzw. Flammpunkt < 100 °C) auf bis zu 10 % geschätzt.

7.3.2.4 Lufteinmischung in die Rauchfahne

Sowohl in der Flammenzone als auch in der Rauchfahne oberhalb der Flammenzone findet eine Einmischung von Umgebungsluft statt. Der gesamte Volumen- bzw. Massenstrom der Rauchfahne besteht im Wesentlichen aus eingemischter Luft und nur zu einem kleinen Teil aus brandbedingt gebildeten Gasen und Schwebstoffen. Bis zu der Stelle in der Rauchfahne, an der die Strömungsverhältnisse in der Atmosphäre für den weiteren Transport und die Dispersion des Brandrauches bestimmend werden, wird die lokale Konzentration der Brandprodukte in der Rauchfahne durch die auftriebsbedingte Lufteinmischung dominiert.

Bei lokal begrenzten Bränden innerhalb geschlossener Räume (z. B. Lagerhallen) sammelt sich der Rauch in einer Schicht unter der Decke. Zusammensetzung und Temperatur dieser Rauchschicht hängen maßgeblich von der Aufstiegshöhe des Rauches bis zur Untergrenze der Rauchschicht ab. Eine Übersicht über die Modellierung brandbedingter Raumströmungen ist [7.124] zu entnehmen.

Zur Beschreibung der Lufteinmischung in die Flammenzone und in die Rauchfahne (Plume) bei näherungsweise ruhender Umgebung wurden auf der Grundlage theoretischer Betrachtungen und empirischer Untersuchungen unterschiedliche Plumeformeln abgeleitet. Eine Übersicht über im Brandschutzingenieurwesen verwendete Plumeformeln innerhalb von Gebäuden und deren Gültigkeitsbereich gibt Brein [7.114].

Geometrie	Axialsymmetrie,	Kleine Brandfläche, auch
	Lachenbrand, kleine	von Axiasymmetrie
	Brandfläche, kein	abweichend, kein
	Windeinfluss	Windeinfluss
Sonstige Bedingungen.	D≤0,1z	Länge= 3*Breite (bezogen
Gültigkeitsbereich	z >> z ₀	auf die Grundfläche)
Formel	$\dot{m}_{e} = 0.071 \sqrt[3]{Q_{P}} (z - z_{0})^{\frac{5}{3}}$	$\dot{m}_{e} = 0,071 \sqrt[3]{Q_{P}} z^{\frac{5}{3}}$
Grenzwerte von β nach BSI	0,7- 1,5	keine Angabe
DD 240:part 2:1997		
Kommentar	Einfluss der	Vereinfachung ohne
	Umgebungsturbulenz:	virtuellen Ursprung
	+20% bis +50%	

Geometrie	An ebener Wand anliegende	An Wandecke anliegende
	Strömung	Strömung
Sonstige Bedingungen.	D≤0,1z	D≤0,1z
Gültigkeitsbereich	$z \gg z_0$	z >> z ₀
Formel	$\dot{m}_{e} = 0.044 \sqrt[3]{Q_{P}} (z - z_{0})^{\frac{5}{3}}$	$\dot{m}_{e} = 0,028 \sqrt[3]{Q_{P}} z^{\frac{5}{3}}$
Grenzwerte von β nach BSI	0,6 – 1,6	0,5 – 2,0
DD 240:part 2:1997		
Kommentar	Einfluss der	Einfluss der
	Umgebungsturbulenz:	Umgebungsturbulenz:
	+20% bis +50%	+20% bis +50%

Geometrie	Axialsymmetrische Rauchgassäule, große Brandfläche,	
	rund oder quadratisch	
Sonstige Bedingungen.	$D{\leq}0{,}1z$ (d.h. bis zu begrenzenden Aufstiegshöhen)	
Gültigkeitsbereich	z < 2,5 U	
	$200 < q * < 750 [kw / m^2]$	
Formel	$\dot{m}_{e} = 0.188 z^{1.5} U$	
	(Gl. 31 DD 240:part 1:1997)	
	$\dot{m}_{e} = 0,337 z^{1.5} U$	
	(kleine Räume, prEN 12101-5)	
Grenzwerte von β nach BSI	0,75 – 1,15	
DD 240:part 2:1997		
Kommentar		

In diesen Tabellen ist \dot{m}_{e} der Massenstrom der eingemischten Luft in kg/s, \dot{Q}_{p} der konvektiv im Plume abgeführte Wärmestrom in kW, *D* der Durchmesser und *U* der Umfang der Brandfläche, *z* die vertikale Längenkoordinate in m und z_{0} die Höhe des (virtuellen) Strahlursprungs, der zumeist in der Nähe der Brandgutebene liegt; z_{fl} bezeichnet die Flammenhöhe.

Bei einer Überlagerung von (turbulenten) Strömungen der Umgebungsluft erhöht sich die Einmischung in den Rauchplume.

Die angegebenen Beziehungen für die Lufteinmischung sind bei der Formulierung der Anfangsbedingungen für die atmosphärische Freisetzung zu berücksichtigen, wenn der Brand in einem geschlossenen Geäude (z. B. Lagerhalle) stattfindet und die Verdünnung und Abkühlung der Brandgase durch Lufteinmischung zwischen der Flammenzone und der Abzugsöffnung im Dach des Gebäudes (= Quellfläche der atmosphärischen Ausbreitung) relevant wird.

7.3.2.5 Brandverlauf bei einem geschlossenen Gebäude

Wie bereits in Kapitel 7.3.1 beschrieben, sind bei einem Brand in einem Gebäude verschiedene Brandphasen zu unterscheiden, wobei der Wirkung von (automatischen) Löschanlagen und der Brandbekämpfung durch die Feuerwehr besondere Bedeutung zukommt.

Bei einem "nahezu dichten" Gebäude ist davon auszugehen, dass in der fortentwickelten Brandphase (quadratische Zunahme der Wärmeleistung mit der Zeit) die thermische Gasausdehnung infolge der Aufheizung der Gase im Brandraum eine Zufuhr von Umgebungsluft und somit von Sauerstoff in den Brandraum verhindert. Da ein Gebäude jedoch üblicherweise nicht gasdicht ausgeführt ist⁵, kann in dieser Phase ein Austrag von Brandprodukten entsprechend der thermischen Gasverdrängung und der Brandproduktkonzentration im Brandraum angenommen werden.

Bei lokal begrenzten Bränden innerhalb geschlossener Räume (z. B. Lagerhallen) sammelt sich der Rauch zunächst in einer Schicht unter der Decke. Zusammensetzung und Temperatur dieser Rauchschicht hängen maßgeblich von der Aufstiegshöhe des Rauches bis zur Untergrenze der Rauchschicht ab. Je nachdem, ob die thermische Gasverdrängung ins Freie über boden- oder deckennahe Undichtigkeiten stattfindet, gelangen somit in unterschiedlichem Maße Brandprodukte ins Freie.

Eine stark vereinfachende Betrachtung ist möglich, indem eine vollständige Gasvermischung im Brandraum angenommen wird. Die Zusatzannahme eines konstanten Anteils *f* der freigesetzten Wärme, der effektiv zur Gasaufheizung beiträgt, führt im Fall der quadratisch mit *t* zunehmenden Wärmeleistung auf folgende Beziehungen für die Masse m_B eines im Gas des Brandraums enthaltenen Brandprodukts sowie für dessen Massenstrom, der durch die Gasverdrängung abgeführt wird:

⁵ Andernfalls müsste das Gebäude dem thermisch bedingten Druckanstieg widerstehen können.

$$m_{\rm B} = y_{\rm B} \cdot \frac{p \cdot V_{\rm R} \cdot M \cdot c_{\rm p}}{f \cdot R \cdot |\Delta h_{\rm C}|} \cdot \left(1 - \exp\left\{ -\frac{f \cdot \alpha \cdot R \cdot t^3}{3 \cdot p \cdot V_{\rm R} \cdot M \cdot c_{\rm p}} \right\} \right)$$
(7.64)

$$\dot{m}_{\rm B,ab} = y_{\rm B} \cdot \frac{\alpha \cdot t^2}{|\Delta h_{\rm C}|} \cdot \left(1 - \exp\left\{ -\frac{f \cdot \alpha \cdot R \cdot t^3}{3 \cdot p \cdot V_{\rm R} \cdot M \cdot c_{\rm p}} \right\} \right)$$
(7.65)

Darin ist *p* der (absolute) Druck im Brandraum (in Pa), V_R das Gasvolumen des Brandraums (in m³), *M* die Molmasse des Gases (in kg/mol), c_p die spezifische Wärmekapazität des Gases (in J/(kg K)) und R die universelle Gaskonstante (in J/(mol K)).

Näherungsweise können für das Gas die betreffenden Kennwerte der Umgebungsluft eingesetzt werden. Der Faktor *f* kann mit 0,6 als Näherungswert eingesetzt werden [7.117].

Der Brandverlauf gemäß vorstehender Beziehungen endet theoretisch, wenn der Sauerstoffgehalt einen erforderlichen Mindestwert unterschreitet oder der Brennstoff aufgezehrt ist. Im Falle eines Flash-Over (vgl. Kapitel 7.3.1) wäre hingegen kurzfristig eine erhebliche Steigerung der Abbrandrate und der Brandproduktfreisetzung zu erwarten. Bei industriellen Lägern für Gefahrstoffe in größerer Menge ist aufgrund des geforderten Sicherheitsstandards davon auszugehen, dass vor dem Erreichen dieser Bedingungen automatische Löschanlagen wirksam werden oder Brandbekämpfungsmaßnahmen der Feuerwehr einsetzen.

Nach der Aktivierung von automatischen Wasserlöschanlagen (z. B. Sprinkler- oder Sprühwasserlöschanlagen) kann konservativ angenommen werden, dass die Wärmefreisetzungsrate nicht weiter ansteigt und dass die Temperatur im Brandraum konstant bleibt. Hierdurch geht rechnerisch (bei weiterhin geschlossenem Brandraum) die atmosphärische Freisetzung von Brandprodukten vorübergehend auf Null zurück.

Wenn Rauch- und Wärmeabzugsanlagen aktiviert werden, stellt sich eine Abströmung brandprodukthaltiger Gase aus dem Brandraum bei gleichzeitiger Zuströmung von Umgebungsluft ein. Im Fall des natürlichen Rauchabzugs (ohne maschinelle Zu- oder Abluft) ergibt sich der Zuluft- und Abgasstrom infolge der dichtebedingten Druckdifferenz zwischen den heißen Gasen im Brandraum und der Umgebungsluft, die über den Höhenunterschied zwischen Zuluft- und Rauchabzugsöffnungen wirksam wird. Zu- und Abströmung stellen sich so ein, dass die treibende Druckdifferenz der Summe der Strömungsdruckverluste an den Zuluft- und Abluftöffnungen entspricht. Bei maschineller Zu- oder Abluft wird der Gasvolumenstrom hingegen primär durch die Leistung der Ventilatoren bestimmt.

Ab dem Beginn der Brandbekämpfung durch die Feuerwehr ist ein linearer Rückgang der Wärmefreisetzungsrate bis auf Null zum Ende der Löschdauer anzunehmen. In der Phase der Brandbekämpfung durch die Feuerwehr werden Rauch und Wärme abgeführt und somit auch Brandprodukte in die Atmosphäre freigesetzt.

Sofern eine automatische Kohlendioxid-Gaslöschanlage zum Einsatz kommt, findet während des Flutungsvorgangs eine Verdrängung brandprodukthaltiger Gase ins Freie statt. Der in dieser Phase freigesetzte Brandprodukt-Massenstrom kann aus dem zugeführten Volumenstrom des Löschgases und der Konzentration des betreffenden Brandprodukts im Gas des Brandraums berechnet werden. Eine weitere, zeitlich steuerbare Freisetzung brandprodukthaltiger Gase tritt in diesem Fall auf, wenn der Brandraum kontrolliert belüftet wird.

Eine ausführliche Darstellung des Berechnungsverfahrens mit Hinweisen zur Ermittlung der einzusetzenden Parameter (Brandintensitätskoeffizient, Auslösezeitpunkt der Sprinkleranlage, Löschdauer) und Beispielen für die zeitliche Entwicklung des freigesetzten Brandgutmassenstroms ist [7.117] zu entnehmen.

<i>A</i> [m ²]	Brandfläche
<i>c</i> [1/s]	Konstante
<i>d</i> [m]	Durchmesser der Brandfläche
H _U [kJ/kg]	unterer Heizwert
⊿h _C [kJ/kg]	spezifische Verbrennungsenthalpie
$\Delta h_{\rm V}$ [kJ/kg]	spezifische Enthalpie zur Verdampfung bzw. Pyrolyse des Brennstoffs
<i>M</i> [kg/mol]	molare Masse
m _e [kg/s]	Massenstrom der eingemischten Luft
<i>m</i> _i [kg/s]	Massenstrom der Komponente i
<i>m</i> _f [kg/(m ² s)]	flächenbezogene Abbrandrate (Massenabbrandrate)
॑Q _c [k₩]	Wärmefreisetzungsrate des Brandes (Brandleistung)
, Q _{conv} [kW]	konvektiver Wärmestrom im Rauchstrom (Plume)
<i>ġ</i> ″ _c [kW/m²]	flächenbezogene Wärmefreisetzungsrate
<i>ġ</i> _F [kW/m²]	flächenbezogenen Wärmeeinstrahlung aus der Flamme

7.3.3 Formelzeichen zu Kapitel 7.3

\dot{q}_{verl}'' [kW/m ²]	flächenbezogener Verlustwärmestrom
<i>T</i> [K]	Temperatur
<i>t</i> [s]	Zeit
<i>u</i> [m]	Umfang des Brandherdes
<i>v</i> [m/s]	Brandausbreitungsgeschwindigkeit
x _A [kg/kg]	Massenanteil des Elements A im Brandgut
<i>y</i> [kg/kg]	Ausbeute
<i>z</i> [m]	vertikale Längenkoordinate
<i>z</i> ₀ [m]	Höhe des (virtuellen) Strahlursprungs
<i>z</i> _F [m]	Höhe der Flammenzone
α [–]	Koeffizient für die Ventilationsabhängigkeit der Ausbeute
β[-]	Multiplikator für die Grenze des Vertrauensintervalls (80% der
	Messwerte)
ξ[-]	Koeffizient für die Ventilationsabhängigkeit der Ausbeute
Φ[-]	Äquivalenzverhältnis
Indices	
0	Anfangszustand
С	Verbrennung (combustion)
f	Brennstoff (fuel)
F	Flamme
i	Laufvariable; Komponente
Р	Brandprodukt
S	Ruß (soot)
VC	unter Luftmangel (ventilation controlled)
WV	unter Luftüberschuss (well ventilated)

7.4 Anwendungs- und Berechnungsbeispiele

Im Folgenden sind verschiedene Beispiele aufgeführt, die die Anwendung der in diesem Kapitel dargelegten Theorien und Ansätzen veranschaulichen sollen. Die Beispiele erheben keinen Anspruch auf Vollständigkeit. Sie sollen lediglich einen Eindruck vermitteln, die einzelnen Gleichungen einzusetzen, um das geschilderte Problem zu lösen.

7.4.1 Bestimmung der Quellterme am Beispiel eines Benzin-Poolfeuers

Es soll Bezin in einer Menge freigesetzt werden, dass es zu einem Pollfeuer mit einem Durchmesser von 20 m kommt. Die Verbrennung soll so erfolgen dann die Ausbeite von CO₂ 1800 mg/g und von CO 23 mg/g beträgt.

Es soll keine Absorption von $\overline{\dot{Q}}_{ba,rad}$ zwischen Plume/Flamme und Brennstoffoberfläche vorhanden sein.

Weitere Parameter sind:

$$A_{p} = 314 \text{ m}^{2}$$

$$\overline{\dot{m}}_{f}^{"} \approx 0,083 \text{ kg} / (\text{m}^{2}\text{s})$$

$$\overline{S}\overline{E}\overline{P}^{\text{ma}} \approx 50 \text{ kW} / \text{m}^{2}$$

$$\frac{\overline{H}}{d} \approx 1,7$$

$$-\Delta h_{c} \approx 43700 \text{ kJ} / \text{ kg}$$

$$\overline{\dot{q}}_{f}^{"} \approx 3627 \text{ kW} / \text{m}^{2}$$

$$\overline{\hat{\tau}}_{fp} = 1$$

Berechnung des Benzinmassenstroms, der erforderlich ist, ein Poolfeuer mit einem Durchmesser von 20 m aufrecht zu erhalten.

$$\overline{\dot{m}}_{f} = \overline{\dot{m}}_{f}'' A_{P} \approx (0.083 \cdot 314) \text{ kg/s} \approx 26 \text{ kg/s}$$

Berechnung der totalen Wärmefreisetzungsrate (Brandleistung) $\overline{\dot{Q}}_{c}$:

$$\bar{\dot{Q}}_{_{c}}=\bar{\dot{q}}_{_{f}}^{\prime\prime}\,A_{_{P}}=(3627\cdot314)\,kW\approx1.1\,GW$$

Berechnung des konvektiven Wärmestroms Q_{conv} nach (Gl. 7.15e):

$$\bar{\dot{Q}}_{\text{conv}} = 0.7 \, \bar{\dot{Q}}_{\text{c}} \approx 0.7 (1.139 \cdot 10^3) \, \text{MW} \approx 0.8 \; \text{GW}$$

Berechnung des *Wärmestroms* $\dot{\bar{Q}}_{top,rad}$ an der *Flammenspitze* und des *Wärmerückstroms* $\bar{\bar{Q}}_{ba,rad}$ jeweils infolge thermischer *Strahlung:*

es gilt $\overline{A}_{top} = \overline{e} A_{p}$ für $\overline{e} = 1$ ist (siehe Gl. (7.1d)): $\overline{\dot{Q}}_{top,rad} = \overline{\dot{Q}}_{ba,rad} \approx A_{p} \overline{SEP}^{ma} \approx (314 \cdot 50) \text{ kW} \approx 15.7 \text{ MW}$

Berechnung des gesamten *Wärmestroms* $\dot{\bar{Q}}_{top}$ an der *Flammenspitze* $\bar{\bar{Q}}_{top} = \bar{\bar{Q}}_{conv} + \bar{\bar{Q}}_{top,rad} \approx (800 + 15.7) \text{ MW} \approx 0.82 \text{ GW}$

Näherungsweise Berechnung der Flammenoberfläche \overline{A}_{F}

$$\bar{A}_{F} \approx \pi d \bar{H} + 0,25 \pi d^{2} \approx 2450 m^{2}$$

Berechnung des Strahlungswärmestroms $\overline{\dot{Q}}_{a,rad}$ von der Flammenoberfläche an die Umgebung:

$$\overline{\dot{Q}}_{a,rad} = \overline{\text{SEP}}^{ma} (\overline{A}_F - \overline{A}_{top}) \approx 50(2450 - 314) \text{ kW} \approx 107 \text{ MW}$$

Bilanz bezüglich der totalen Wärmefreisetzungsrate $\overline{\dot{Q}}_{c}$:

$$\bar{\dot{Q}}_{c} \approx \bar{\dot{Q}}_{top} + \bar{\dot{Q}}_{a,rad} + \bar{\dot{Q}}_{ba,rad} \approx (820 + 107 + 15.7) \text{ MW} \approx 1 \text{ GW}.$$

Produktmassenströme:

Massenstrom an CO₂

$$\dot{m}_{CO_2} = y_{CO_2} \dot{Q}_c / (-\Delta h_c) \approx 1.8 \cdot 1.1 \cdot 19^9 / 4.37 \cdot 10^{-7} \text{ kg/s} \approx 45 \text{ kg/s}$$

Massenstrom an CO

$$\dot{m}_{\rm CO} = y_{\rm CO} \dot{Q}_{\rm c} / (-\Delta h_{\rm c}) \approx 2.3 \cdot 10^{-2} \cdot 1.1 \cdot 19^9 / 4.37 \cdot 10^{-7} \text{ kg/s}$$

 $\approx 0.6 \text{ kg/s}$

7.4.2 Bestimmung der Brandproduktausbeute

Im Folgenden wird die Verbrennung eines Stoffs mit der in Tabelle 7.11 angegebenen Zusammensetzung im Vollbrand betrachtet [7.112].

Element	Massenanteil im Brandgut
Schwefel	5 %
Chlor	5 %
Stickstoff	5 %
Kohlenstoff	50 %
Sauerstoff	10 %
Wasserstoff	5 %
Sonstige	20 %

Tabelle 7.11: Zusammensetzung des Brandguts im Berechnungsbeispiel

Angenommen werden die (nahezu) vollständige Umsetzung des Schwefels zu SO₂ und von Chlor zu HCI sowie die Bildung von TCDD-Toxizitätsäquivalenten (TE) entsprechend der in Abschnitt 7.3.2.3 genannten Ausbeute ($0,2*10^{-6}$ g TE je kg verbranntes Material und je % Chlorgehalt).

Für die Entstehung von CO und CO₂ wird aufgrund guter Ventilation das Stoffmengenverhältnis 2:98 angenommen. Aus Laboruntersuchungen ist für das Brandgut bekannt, dass 3 % des im Produkt enthaltenen Stickstoffs zu Stickstoffdioxid und 0,2 % zu HCN reagieren.

Mit diesen Angaben errechnet sich anhand der Gln. (7.62 a,b) die Brandproduktausbeute wie nachstehend aufgeführt.

Brandprodukt	Ausbeute
Schwefeldioxid	100 mg/g
Chlorwasserstoff	51 mg/g
TCDD-TE	1 · 10 ⁻⁶ mg/g
Kohlendioxid	1800 mg/g
Kohlenmonoxid	23 mg/g
Stickstoffdioxid	5 mg/g
Cyanwasserstoff	0,2 mg/g

Tabelle 7.12: Brandproduktausbeute des Berechnungsbeispiels

7.4.3 Bewertung von Leckagen und Ihren thermischen Auswirkungen [7.123]

Im Rahmen der Betrachtung soll geklärt werden, wie stark eine Person durch eine Verpuffung nach den Austritt einer brennbaren Flüssigkeit aus einer Förderleitung im Umkreis der Austrittsstelle verletzt werden könnte. Die folgende Grafik verdeutlicht die Situation.



Abb. 7.34: Schematische Darstellung des Szenarios: Bildung einer Flüssigkeitslache durch eine Leckage

Die Person nähert sich bis auf eine Entfernung von 1 - 2 m an die Austrittsstelle, bis spätestens dann sein Gaswarngerät anspricht, was die Person veranlasst, sich sofort aus dem Gefahrenbereich zurückzuziehen.

Zielsetzung hierbei ist eine Bewertung, inwieweit Personen Verletzungen davon tragen, ihre Handlungsfähigkeit durch die thermische Einwirkung der entzündeten Atmosphäre beeinträchtigt wird und welche Schutzwirkung von Kleidung ausgeht.

Als grundlegendes Szenario werden folgende Randparameter zu Grunde gelegt. Aus einer Flanschverbindung (hier: Messstutzen) treten bis zu 12 l/h an brennbarer Flüssigkeit aus, die mit 1 Tropfen/ Sekunde aus einer Fallhöhe von 1 m auf einen Betonuntergrund treffen, wie in der folgenden Abbildung beispielhaft dargestellt.

Über die Einmischung von Luft entwickelt sich ein brennbares Gas-Luft-Gemisch, das sich verzögert entzündet (\Rightarrow Vapor cloud (Flash) fire, siehe auch Abbildung 7.3).

Die nachfolgenden Fotos sollen bespielhaft das angenommene Szenario verdeutlichen.





Abb. 7.35: Beispiel einer ausgebildeten Flüssigkeitslache (linkes Bild) auf Beton (Flüssigkeitsvolumen: 0,6 L Benzin) und Entzündung (rechtes Bild)

Innerhalb kürzester Zeit ist die gesamte Lachenfläche durch den Brand erfasst. Die Flammenhöhe betrug ca. 1,2 bis 1,5 m. Nach ca. 45 Sekunden verlosch der Brand selbstständig.

Zur Beurteilung der thermischen Auswirkungen auf Mensch und Umgebung und den entsprechenden Maßnahmen zur Gefahrenabwehr sind Angaben und Annahmen über die Auswirkungen von Bränden auf die Umgebung notwendig. Falls die ungeschützte menschliche Haut Bestrahlungen, hervorgerufen z.B. durch Brände, ausgesetzt ist, können unterschiedlich schwere Verletzungen (Verbrennungen) bis zum Tode hin eintreten [7.119]. Die Abhängigkeit der Zeitdauer bis zum Erreichen der Schmerzgrenze ist dabei von der Bestrahlungsstärke abhängig (siehe Kapitel 9.2)

Zur Quantifizierung der vom Feuer ausgehenden Strahlungswärme, werden die folgenden Gleichungen verwendet. Als Modellsubstanz diente Benzin.

Dichte des Brennstoffes, flüssig	740 kg/m³
Abbrandrate für eine unendliche ausgedehnte Lache	0,055 kg/(m² x s)
Massenabbrandrate	Gl. 7.10a
Maximal sichtbare Flammenlänge	GI. 7.12 und Koeffizienten nach Tabelle 7.1, Modell nach

Tabelle 7.13: Berechnungsgrundlagen für das Berechnungsbeispiel

(Windgeschwindigkeit u = 3m/s)	Thomas
	Gl. 7.13 und Koeffizienten nach
Naigungowinkal dar Flomma	Tabelle 7.2
	Modell nach Pritchard und
	Binding
Einstrahlzahl	Gl. 7.27c
Durchlässigkeit der Atmosphäre	Gl. 7.27e
Strahlungsstärke	Gl. 7.19a

Basierend auf den verwendeten Gleichungen sind die wichtigsten Ergebnisse in der folgenden Grafik eingetragen.



Abb. 7.36: Ergebnisse der thermischen Auswirkungen

Die nachfolgende Darstellung zeigt die Wärmestrahlung des Feuers auf ein Objekt bzw. eine Person in Abhängigkeit des Abstandes. Zum besseren Überblick sind auch die Grenzwerte von 1,6 bzw. 10,5 kW/m² eingezeichnet. Nach [7.119] wird ein Grenzwert von 1,6 kW/m² als

Beginn der nachteiligen Wirkung für Menschen definiert (Beeinträchtigung einer großen Anzahl von Menschen).

Eine Bestrahlungsstärke von 10,5 kW/m² und eine Expositionsdauer von 40 s repräsentiert den Grenzwert für die Schwelle der lebensbedrohenden gesundheitlichen Auswirkungen, maßgeblich für einen einzelnen Menschen.



Abb. 7.37: kritische Bestrahlungsstärke des Poolfeuers in Abhängigkeit vom Objektabstand für einen Lachenradius von 0,6 m

Die nachfolgende Tabelle gibt einen Überblick über die Abstände, die bei den genannten Strahlungswerten von 1,6 bzw. 10,5 kW/m² gelten.

Tabelle 7.14:	Zusammenfassung der Ergebnisse der thermischen Auswirkungen eines
	Benzin-Poolfeuers

Daten	Ergebnis
Radius der Lache	0,6 m
Fläche der Lache	1,1 m²
Wärmestrahlung der Flamme	121 kW/m²
Abstand krit. Strahlung 1,6 kW/m ²	7,8 m
Abstand krit. Strahlung 10,5 kW/m ²	4,1 m

Die bisherigen Aussagen liegen ohne einen konkreten zeitlichen Bezug, d.h. ohne eine konkrete Expositionszeit, vor. Allerdings ist die zeitliche Einwirkdauer der Wärmestrahlung auf den menschlichen Organismus entscheidend für die jeweiligen Auswirkungen (siehe Kapitel 9.2). Hinsichtlich der zeitlichen Einwirkdauer sind sowohl die individuellen Reaktionszeiten eines Menschen wie auch seine persönliche Mobilität in Betracht zu ziehen [7.120]. Allgemein kann die Reaktionszeit eines Menschen mit 5 s angesetzt werden [7.103], [7.120]. Gemäß [7.120] kann eine durchschnittliche Expositionszeit von 8-10 s angesetzt werden. Als weiterer wichtiger Aspekt ist die Schutzwirkung von Kleidung anzuführen. Sie kann die in Tabelle 7.14 errechneten Abstände signifikant reduzieren [7.119], [7.122] (vgl.-Kapitel 9.2)

7.5 Quellenverzeichnis

- [7.1] M. S. Mannan, Lees' Loss Prevention in the Process Industries, Vol. 1-3, Elsevier Butterworth-Heinemann, Oxford, 3. Aufl. (2005)
- [7.2] Methods for the calculation of physical effects. 'Yellow Book', Commitee for the Prevention of Disasters, Third edition 2005, Sdu Uitgevers.
- [7.3] Ch. Balluff, W. Brötz, D. Göck, N Schieß, A. Schönbucher, Chem.-Ing.-Tech. 57 (1985) 823
- [7.4] A. Schönbucher, in: S. Hartwig (Hrsg.): Schwere Gase und Sicherheitsanalyse IX, Battelle-Eigenverlag, Frankfurt am Main, (1992)
- [7.5] J.A. Fay, J. Hazard. Mater. B 136 (2006) 219
- [7.6] P.K. Raj, J. Hazard. Mater. 140 (2007) 280
- [7.7] R. Fiala, D. Göck, X. Zhang, A. Schönbucher, Chem.-Ing.-Tech. 63 (1991)
 760 761, vollständiges Manuskript als MS 1966/91, 1 78

- K.S. Mudan, Prog. Energy Combust. Sci. 10 (1984) 59; K.S. Mudan, P.A. Croce,
 in: P.J. DiNenno et al. (Eds.), SFPE Handbook of Protection Engineering.
 National Fire Protection Association, Quincy, MA, Section 3, chap. 11, 3-197 bis
 3-240, 2. Aufl. (1995)
- [7.9] C.L. Beyler, in: P.J. DiNenno et al. (Eds.), SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. National Fire Protection Association, Quincy, MA, Section 3, chap.
 11, 3-268 bis 3-314, 3. Aufl. (2002)
- [7.10] P.K. Raj, J. Hazard. Mater. 5 (1981) 111
- [7.11] H.C. Hottel, Fire Res. Abstr. Rev. 1 (1959) 41
- [7.12] D.S. Burgess, M.G. Zabetakis, Fire and Explosion Hazards Associated with LNG, US Bureau of Mines Report 6099 (1962)
- [7.13] H.G. Werthenbach, VDI Z. 115 (1973) 383
- [7.14] H.G. Werthenbach, Z. Forschung Technik Brandschutz 25 (1976) 57
- [7.15] M. Hertzberg, Combust. Flame 21 (1973) 195
- [7.16] V.I. Blinov, G.N. Khudiakov, Academiia Nauk, SSSR Doklady (1957), 1094
- [7.17] D.S. Burgess, A. Strasser, J. Grumer, Fire Res. Abstr. Rev. 3 (1961) 177
- [7.18] J. Grumer, A. Strasser, T.A. Kubala, D.S. Burgess, Fire Res. Abstr. Rev. 3 (1961) 159
- [7.19] K.B. Mc Grattan, H.R. Baum, A. Hamins; NISTIR 6546, Fire Safety Engineering Division Building and Fire Research Laboratory, U.S. Department of Commerce (2000)
- [7.20] A. Luketa Hanlin, J. Hazard. Mater. A 132 (2006) 119
- [7.21] U.S.CG China Lake Tests, in [7.20], p. 129
- [7.22] Maplin Sands, in [7.20], p. 129
- [7.23] Montoir, in [7.20], p. 129
- [7.24] V. Babrauskas, Fire Technol. 19 (1983) 251
- [7.25] H. Koseki, Y. Iwata, Fire Technol. 36 (2000) 24
- [7.26] M. Muñoz, J. Arnaldos, J. Casal, E. Planas, Combust. Flame 139 (2004) 263
- [7.27] G. Heskestad, Fire Saf. J. 5 (1983) 103
- [7.28] P.H. Thomas, 9 th Symp. on Combust. (1963) 844
- [7.29] J. Moorhouse, M.J. Pritchard, Int. Chem. E. Symp. Ser. 71 (1982) 165
- [7.30] G. Mangialavori, F. Rubino, in: 7th Int. Symp. on loss Prevention and Safety Promotion in Process Industries (1992), vol. 2, 83 - 1
- [7.31] M.J. Pritchard, T.M. Binding, in: Symp. on Mayor Hazards Onshore and Offshore (1992) 491
- [7.32] American Gas Association (1973). LNG Information Book, Arlington, VA: Nat. Tech. Inf. Service

- [7.33] P.K. Raj, Process Safety Progress 24 (2005) 192
- [7.34] P.J. Rew, W.G. Hulbert, Development of Pool-Fire Thermal Radiation Model,
 HSE Contract Research Report No. 96 / 1996, ISBN 0717610845; P.J. Rew,
 W.G. Hulbert, D.M. Deaves; Trans. Int. Chem. Eng. 75 (1997), Part B, 81
- [7.35] G. Heskestad, in: P.J. DiNenno et al. (Eds.), SFPE Handbook of Fire
 Protection Engineering. National Fire Protection Association, Quincy, MA,
 Section 2, chap. 1, 2-1 bis 2-17, 3. Aufl. (2002)
- [7.36] P.G. Seeger, Z. VFDB 20 (1971) 74
- [7.37] F. Henning, H. Moser, Temperaturmessung, Springer-Verlag, Berlin, 1977
- [7.38] L.T. Cowley, A.D. Johnson (1991), in [7.2]
- [7.39] R. Fiala, D. Göck, X. Zhang, A. Schönbucher, TÜ 33 (1992) 137 (Teil 1)
- [7.40] K.-D. Paul, A. Schönbucher, Praxis der Sicherheitstechnik 7, 175, DECHEMA, Frankfurt, (2006)
- [7.41] A. Schönbucher, Modelle der thermischen Strahlung großer Feuer Bedeutung für Industriestandorte, ProcessNet, Jahrestagung 2007, Aachen
- [7.42] A. Schönbucher, Ereignis in Buncefield, Hemel Hempstead, UK. 59. Sitzung des DECHEMA / GVC - Gemeinschaftsausschuss "Sicherheitstechnik in Chemieanlagen", Frankfurt, 12.10.2006
- [7.43] I. Vela, H. Chun, K.B. Mishra, M. Gawlowski, P. Sudhoff, M. Rudolph, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, Vorhersage der thermischen Strahlung großer Kohlenwasserstoff- und Peroxidfeuer mit CFD-Simulation, Forsch. Ingenieurwes. 73 (2009) 87-97
- [7.44] C.L. Tien, K.Y. Lee, A.J. Stretton, in: P.J. DiNenno et al. (Eds.), SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. National Fire Protection Association, Quincy, MA, Section 2, chap. 4, 1-73 bis 1-89, 3. Aufl. (2002)
- [7.45] R. Fiala, D. Göck, X. Zhang, A. Schönbucher, TÜ 33 (1992) 219 (Teil 2)
- [7.46] P.G. Seeger, GWF, Gas Erdgas 120 (1979) 25
- [7.47] N.A. Eisenberg, C.J. Lynch, R.J. Breeding, Vulnerability model. A simulation system for assessing damage resulting from marine spills. Nat. Tech. Inf. Service, AD-A 015-245 Springfield, VA. (USA), (1975)
- [7.48] D.D. Cline, L.N. Koenig, Fire Techn. Poolfire (1983) 149
- [7.49] W.P. Crocker, D.H. Napier, Hazards IX (1986) 159
- [7.50] E. Lois, J. Swithenbank, 17 th Symp. on Combustion (1979) 1087
- [7.51] R. Lautkaski, J. Loss Prev. Process Ind. 5 (1992) 175
- [7.52] J.R. Welker, The effect of wind on uncontrolled buoyant diffusion flames from burning liquid. Ph. D. Thesis, University of Oklahoma, (1965)
- [7.53] K.S. Mudan, P.A. Croce, ASME Winter Annual Meeting, New Orleans, LA (1984)

- [7.54] V. Babrauskas, in: A.E. Cote, J.M. Linville (Eds.): Fire Protection Handbook (1986) 21
- [7.55] A.R. Hall, Oxidation Combust. Revs 6 (1973) 169
- [7.56] K.S. Mudan, Encyclopaedia of Environmental Control Technology, chap. 14 (1989)
- [7.57] W. Brötz, A. Schönbucher, Chem.-Ing.-Tech. 50 (1978) 573
- [7.58] M. Kobori, T. Handa, T. Yumoto, J. Fire Flammability 12 (1981) 157
- [7.59] E.E. Zukoski, B.M. Cetegen, T.Kubota, 20th Symp. on Combustion (1985) 361
- [7.60] R. Siegel, J.R. Howell: Thermal Radiation Heat Transfer, Hemisphere, N.Y., 1991
- [7.61] S.E. Petty, Fire Safety J. 5 (1983) 123
- [7.62] American Petroleum Institute, Report API 521; Guide for pressure relief and depressuring systems, (1969)
- [7.63] M. Hailwood, M. Gawlowski, B. Schalau, A. Schönbucher, Conclusions drawn from the Buncefield and Naples incidents regarding the utilisation of consequence models, Chem. Eng. Technol. 32 (2009) 207
- [7.64] N. Liu, Q. Liu, J.S. Lozano, L.Zhang, J. Zhu, Z. Deng, K. Satoh, 32nd Int. Symp. on Combust., August 3-8, 2008, McGill University, Montreal, Canada
- [7.65] P.J. Pagni, S. Bard: 17th Symp. (Int.) on Combust. 1017, The Combustion Institute, Pittsburgh (1979)
- [7.66] M. Muñoz, E. Planas, F. Ferrero, J. Casal, J. Hazard. Mater. 144 (2007) 725
- [7.67] H. Chun, K.-D. Wehrstedt, I. Vela, A. Schönbucher, J. Hazard. Mater. 167 (2009),
 105 [7.68]P. G. Seeger, *AGF-Forschungsbericht* 22 (1974)
- [7.69] B. Hägglund, L.E. Persson, FOA Rapport (1976) C20126-D6 (A3)
- [7.70] Modak, A., *Tech. Rep. Nr.* 0A0E6 (1978), BU-1, Factory Mutual Research Corp., Norwood
- [7.71] R.W.G. Hoftijzer, *TNO-Ber.* 9092 (1980), Chap. 6, 1-37
- [7.72] Society of Fire Protection Engineers, Bethesda, Maryland. Engineering Guide for Assessing Flame Radiation to External Targets from Pool Fires, June (1999)
- [7.73] Report on Burning of Petroleum Fires (1982), Japan Institute for Safety Engineering
- [7.74] I. Tiezzi, A. Irace, G. Amato, *Fire Int.* 69 (1980) 60
- [7.75] W. G. May, W. McQueen, Combust. Sci. Technol. 7 (1973) 51
- [7.76] J. Moorhouse, M. J. Pritchard, Int. Chem. Eng. Symp. Ser. 71 (1982) 397
- [7.77] G. A. Mizner, J. A. Eyre, Int. Chem. Eng. Symp. Ser. 71 (1982) 147
- [7.78] D. S. Burgess, M. Hertzberg (Chap. 27, p.413 ff.) in: Heat Transfer in Flames(N. H. Afgan, J. M. Beer, Eds.) J. Wiley, London, 1974

- [7.79] A. Schönbucher, Wärmetransport durch Strahlung Kap. 4.6, S. 182 ff., in: Thermische Verfahrenstechnik, Springer Verlag, Berlin, 2002
- [7.80] Broeckmann, B.; Schecker, H.-G.: J. Loss Prev. Process Ind., Vol. 8, No. 3, 1995
- [7.81] Gosewinkel, M.; Buren, J. v., CIT 2009, 81, Nr. 8
- [7.82] Gosewinkel, M.; Buren, J.v.: 13th symposion on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries, Brugge, 2010
- [7.83] Broeckmann, B.: Der "boil over" bei brennenden Mineralöltanks; Dissertation, Universität Dortmund; 1993
- [7.84] K. Hasegawa: Experimental study on the mechansim of hot-zone-formation in open-tank-fires; Proceedings of the 2nd International Symposium on Fire Safety Science, S. 221-230; 1988
- [7.85] H. Koseki, et al.: A study on large-scale boilover using crude oil containing emulsified water; Fire Safety Journal 39 (2004), S. 143-155
- [7.86] Ortner, J.; Hensler, G.: (1995): Beurteilung von Kunststoffbränden, LFU Bayern,1995 (https://www.lfu.bayern.de/luft/doc/kunststoffbraende.pdf)
- [7.87] Buren, J.; Gosewinkel, M.: Additive im Rohöl ein neuer Ansatz zur Vermeidung eines Boilover, 10. Fachtagung Anlagen-, Arbeits- und Umweltsicherheit, November 2010
- [7.88] Bartknecht, W.: Explosionsschutz –Grundlagen und Anwendung-, Springer-Verlag, 1993
- [7.89] G. A. Chamberlain. Development in design methods for prediction thermal radiation from flares. Chem. Eng. Res. Des. Vol. 65 (1987)
- [7.90] Schmitt, D.A.; Marietta, M.: Radiation from a Hydrogen Flare in a Crosswind. AIAA 23rd Aerospace Sciences Meeting January 14-17, 1985/Reno, Nevada.
- [7.91] Mogi, T.; Horiguchi, S.: Experimental study on the hazards of high-pressure hydrogen jet diffusion flames. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 22 (2009) 45–51
- [7.92] Saffers, J.-B.; Molkov, V.V.: Towards hydrogen safety engineering for reacting and non-reacting hydrogen releases. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 26 (2013) 344-350
- Johnson, A.D.; Brightwell, H.M.; Carsley, A.J.: A model for predicting the thermal radiation hazards from large-scale horizontally released natural gas jet fires.
 Transactions of the Institution of Chemical Engineers, Bd. 72, S. 157-166 (1994)
- [7.94] ProNuSS 8: Benutzerdokumentation, Versions-Nummer 8.07, Sachverständigenbüro für Anlagensicherheit Dr.-Ing. Bernd Schalau, 01.02.2014

- [7.95] Center for Chemical Process Safety (CCPS) (2010) Guidelines for vapor cloud explosions, pressure vessel burst, BLEVE and flash fire hazards. American Institute of Chemical Engineers, Wiley, Hoboken
- [7.96] Hauptmanns, Ulrich: Prozess- und Anlagensicherheit: Ulrich Hauptmanns, 1. Auflage Springer-Verlag Berlin-Heidelberg, 2013
- [7.97] Simmons, R. F.: Fire Chemistry.erschienen in: Cox, G. (Hrsg.): Combustion Fundamentals of Fire. Academic Press, London 1995
- [7.98] Drysdale; D. D.: An Introduction to Fire Dynamics (2nd ed.), John Wiley & Sons, Chichester 1998
- [7.99] VDI-Richtlinie 2263: Staubbrände und Staubexplosionen; Gefahren, Beurteilung,
 Schutzmaßnahmen Blatt 1: Untersuchungsmethoden zur Ermittlung von sicherheitstechnischen Kenngrößen von Stäuben. VDI, Düsseldorf 1990
- [7.100] Schneider, U.: Ingenieurmethoden im Baulichen Brandschutz. Expert Verlag, Renningen 2001
- [7.101] VDI-Richtlinie 6019: Ingenieurverfahren zur Bemessung der Rauchableitung aus Gebäuden. Blatt 1: Brandverläufe, Überprüfung der Wirksamkeit. VDI, Düsseldorf 2005 Blatt 2: Ingenieurmethoden. VDI, Düsseldorf 2009
- [7.102] Drysdale, D. D.: Fundamental Fire Properties of Combustible Materials. Improved
 Fire- And Smoke Resistant Materials for Commercial Aircraft Interiors,
 Proceedings, 1995
- [7.103] Methods for the determination of possible damage to people and objects resulting from releases of hazardous materials. CPR 16E, Erste Auflage, Den Haag, 1992
- [7.104] Methoden voor het bepalen van mogelijke schadenPublicatiereeks Gevaarlijke Stoffen 1 (PGS 1) Den Haag/NL, 2005 <u>http://www.publicatiereeksgevaarlijkestoffen.nl/publicaties/PGS1.html</u>
- [7.105] International Standards Organisation: Fire Safety Engineering. Subsystem 4: Detection, Activation and Suppression, ISO CD 13393, Mai 1997
- [7.106] DIN 18232: Rauch- und Wärmefreihaltung Teil 2: Natürliche Rauchabzugsanlagen (NRA); Bemessung, Anforderungen und Einbau; Nov. 2007
- [7.107] Thomas, P. H.: The growth of fire.erschienen in: Cox, G. (Hrsg.): Combustion Fundamentals of Fire. Academic Press, London 1995
- [7.108] Richter, Hans: Schadstoffentstehung bei Bränden mit Chemikalien. erschienen
 in: Braunschweiger Brandschutz-Tage 99 (Tagungsband), Institut für Baustoffe,
 Massivbau und Brandschutz, Braunschweig
- [7.109] DIN 53436: Erzeugung thermischer Zersetzungsprodukte von Werkstoffen unter Luftzufuhr und ihre toxikologische Prüfung Teil 1: Zersetzungsgerät und Bestimmung der Versuchstemperatur, April 1981

- [7.110] Bräutigam, A.: Einflüsse der Brandgutzusammensetzung und der Verbrennungsbedingungen auf die Entstehung mittel- und schwerflüchtiger organischer BrandrauchinhaltstoffeDissertation, Ruhr-Uni Bochum, 2000
- [7.111] ISO 5660: Prüfungen zum Brandverhalten von Baustoffen Wärmefreisetzung, Rauchentwicklung und Masseverlustrate. Teil 1: Wärmefreisetzungsrate (Cone-Calorimeter-Verfahren), Dez. 2002
- [7.112] Auswirkungen von Bränden in Pflanzenschutzmittellägern Industrieverband Agrar e.V. (IVA), Frankfurt am Main, 1993
- [7.113] SFPE Handbook of Fire Protection Engineering, 3rd Edition, NFPA, Quincy, Massachusetts, 2002
- [7.114] Brein, D.: Anwendungsbereiche und -grenzen für praxisrelevante Modellansätze zur Bewertung der Rauchausbreitung in Gebäuden (Plume-Formeln);
 Forschungsstelle für Brandschutztechnik, Karlsruhe, Dezember 2001
- [7.115] Kaiser, W., et al.: Ermittlung und Berechnung von Störfallablaufszenarien nach Maßgabe der 3. Störfallverwaltungsvorschrift. UBA-Forschungsbericht 29748 428, Umweltbundesamt, Berlin 2000
- [7.116] Hosser, D., Blume, G., Will, J.: Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Optimierung von Nachweismethoden und Schutzkonzepten für Brandstörfälle in Chemikalienlagern (I) (Abschlussbericht), Institut für Baustoffe, Massivbau und Brandschutz, Braunschweig 2000
- [7.117] Seifert, U.; Schalau, B., Heuer, I.-G.: Brände in Lagern für Pflanzenschutzmittel ein aktueller Ansatz. Technische Sicherheit Bd. 4 (1014) Nr. 1/2, 20-28
- [7.118] Seifert, U.: Quellterme bei Feststoffbränden, DECHEMA-Kurs: Auswirkungen von Stoff- und Energiefreisetzungen, Frankfurt/M, 2013
- [7.119] KAS 18, Kommission für Anlagensicherheit: Leitfaden Empfehlungen für Abstände zwischen Betriebsbereichen nach der Störfall-Verordnung und schutzbedürftigen Gebieten im Rahmen der Bauleitplanung — Umsetzung § 50 BImSchG, 2. überarbeitete Fassung, November 2010
- [7.120] API Standard 521: Pressure-relieving and Depressuring Systems API STANDARD 521 SIXTH EDITION, American Petroleum Institute, 2013, Draft
- [7.121] Benutzung von Schutzkleidung, Deutsche Gesetzliche Unfallversicherung, 2007
- [7.122] Raj, P. K.: A review of the criteria for people exposure to radiant heat flux from fires, Journal of Hazardous Materials, 159 (2008), 61-71
- [7.123] Gosewinkel, M.: Bewertung der Auswirkungen von Tropfenleckagen an rohölfördenden Installationen, Vortrag, Processnet-AA, ASEF, 28.04.2015
- [7.124] Leitfaden Ingenieurmethoden des Brandschutzes, vfdb TB 04-01, November 2013

7.6 Anhang

Tabelle A7.1: Maximale Massenabbrandraten $\overline{\dot{m}}_{f,max}''$, Verbrennungsenthalpien ($-\Delta h_c$),

Wärme- freisetzungsraten $\overline{\dot{q}}_{f}'' \equiv \overline{\dot{m}}_{f,max}'' (-\Delta h_{c})$, Abbrandgeschwindigkeiten $\overline{\nu}_{a,max} = \overline{\dot{m}}_{f,max}'' / \rho_{f}$, sowie Werte für k β und k, von Flüssigkeiten und verflüssigten Gasen; die $\overline{\dot{m}}_{f,max}''$ und $\overline{\nu}_{a,max}$ -Werte sind teilweise experimentell oder teilweise aus Stoffeigenschaften ermittelt [7.1, 7.2, 7.8, 7.9, 7.19, 7.34].

Brennstoff	Massen-	Ver-	Totale	Ver-	Abbrand-		
	abbrand-	brennungs-	Wärme-	dampf-	geschwin-		
	rate	enthalpie	freisetzungs-	ungs-	digkeit		
			rate	enthalpie			
	m̃ ^r _{f,max}	$\left(-\Delta h_{c,i}\right)$	$\bar{\dot{q}}_{f,max}''$	Δh_v	$\overline{V}_{a,max}$	kβ	k
	[kg/(m ² s)]	[kJ/kg]	[kW/m ²]	[kJ/kg]	[10 ⁻⁴ m/s]	[m ⁻¹]	[m ⁻¹]
Acetic Acid	0.033	13 100	432		0.31		
Acetone	0.041	25 800	1058	570	0.52	2.24	
Acrylonitrile	0.052	31 900	1659		0.64		
Amyl Acetate	0.102	32 400	3305		1.16		
Amyl Alcohol	0.069	34 500	2381		0.81		
Benzene	0.048	44 700	2146	390	0.55	2.70	4.0
Butane	0.110	45 390	4993	370	1.83	0.85	0.94
i-Butane	0.092	45 260	4164	370	1.55		
Butanol	0.054	35 900	1939		0.67		
Butylene	0.086	45 330	3898	390	1.47		
Butyl Acetate	0.100	37 700	3770		1.14		
m-Cresol	0.082	32 600	2673		0.79		
	0.022	42 600	937		0.26	1.30	
	0.045	42 000	1917		0.53		
Cumene	0.123	41200	5438			1.53	
Cyclohexane	0.122	43 500	5307	360	1.56		
Cyclopentane	0.099	46 500	4604	390	1.32		
Diosol	0.035	30 700	1390		0.36	1 30	
010901	0.062	53700	2461	0.30		1.50	
Diethylether	0.094	33 800	3177	385	1.32	0.7	

Ethane	0.141	47 200	6655	490	2.61	0.14	0.15
Ethanol	0.015	26 800	402	1000	0.19		0.4
Ethyl Acetate	0.064	23 400	1498		0.71		
Ethyl Acrylate	0.089	25700	2287		0.95		
Ethyl Benzene	0.121	40 900	4949	340	1.40	1.48	
Ethene	0.070	47 200	3304	490	1.23		
Gasoline	0.055	43 700	2404	330	0 74	1 48	20
Gusonne	0.083	-0700	3627	000	0.7 4	1.40	2.0
Hexane	0.074	44 700	3308	450	1.13	1.39	
Heptane	0.101	44 600	4505	320	1.48	1.39	
Hydrogen (liquid)	0.161	120 300	19368	442	2.30	6.74	7.42
i-Butanol	0.054	35 900	1939		0.67		
i-Propyl					0.83		
Acetate	0.073	27 200	1986				
i-Propanol	0.046	30 500	1403		0.59		
JP-4	0.051	43 500	2219		0.67	1.96	
JP-5	0.054	43 000	2320	700	0.67	1.60	0.5
Kerosene	0.063	43 200	2722	670	0.77	1.30	2.6
LNG	0.078	50 020	3902	619	1.88	0.14	0.15
LPG	0.099	46 010	4555	426	1.69	1.4	0.5
Methanol	0.017	20 000	340	1230	0.21		
Methylcyclo- pentane	0.088	44 000	3872	390	1.18		
Methyl Ethyl Ketone	0.072	31 500	2268		0.89		
Nonane	0.069	44 320	3058	300	0.967		
Octane	0.081	44 430	3599	300	1.15	1.39	
Pentane/	0.095	45 010	4276		1 29		
Naphtha	0.000	-0010	4270		1.20		
i-Pentane	0.076	44 920	3414	340	1.23		
Propene	0.080	45 800	3660	340	1.33		
Toluene	0.112	40 500	4536	360	1.29	3.37	
transformer oil	0.039	46400	1810		0.51	0.7	
Vinyl Acetate	0.136	22 700	3087		1.46		
Xylene	0.090	40 800	3672	350	1.04	1.4	

LNG (d = 15	0.164		8203	4	
m)	0.451	50 020	22559	11	
(auf Wasser)					
LNG (d = 20					
m)	0 098	50 020	4902	2 37	
(auf Land)	0.000	00 020	1002	2.07	
LNG (d = 30					
m)	0.087	50 020	4352	2.1	
(auf Wasser)					
LNG (d = 35					
m)	0.127	50 020	6353	3.1	
(auf Land)					

Tabelle A7.2:GemesseneStrahlungsanteile $\overline{f}_{rad}(d, f)$ und maximalespezifischeAusstrahlungen \overline{SEP}_{max} nach Gl. (7.17e) für verschiedeneBrennstoffe f undPooldurchmesser d[7.1, 7.2, 7.8, 7.9].

Brennstoff	d [m]	$\overline{\mathrm{f}}_{\mathrm{rad}}$ [-]	$\overline{\text{SEP}}_{max} [kW/m^2]$
Aceton			130
Benzin	1.22	0.30 bis 0.40	
	1.53	0.16 bis 0.27	
	3.05	0.13 bis 0.14	
	1.0 bis 10.0	0.601 bis 0.10	130
Benzol	0.076	0.35	
	0.457	0.345	
	0.76	0.350	
	1.22	0.360 bis 0.380	130
		0.14 bis 0.38	
Butan	0.305	0.199	
	0.457	0.205	
	0.76	0.269	225
		0.27 bis 0.30	
Diesel			130
Ethan		0.38	250
Ethanol		0.20	130
H ₂ (flüssig)		0.25	70
Heizöl			130
Heptan			200
Hexan		0.2 bis 0.4	200

JP4	1.0	0.35	
	1.5	0.39	
	2.0	0.34	
	3.0	0.31	
	5.0	0.16	
	10.0	0.10	130
Kerosin/JP5		0.35	130
LEG			265
LNG (auf Land)	0.4 bis 3.05	0.15 bis 0.34	
	1.8 bis 6.1	0.20 bis 0.25	
	18.0	0.164	
	20.0	0.36	265
LNG (auf Wasser)	8.5 bis 15.0	0.31 bis 0.12	265
LPG		0.26	
LPG (auf Land)			250
LPG (auf Wasser)			250
Methan	0.305	0.21	
	0.76	0.23	
	1.53	0.15 bis 0.24	
	3.05	0.24 bis 0.34	
	6.10	0.20 bis 0.27	265
Methanol	0.76	0.162	
	0.152	0.165	
	1.22	0.177	70
		0.17 bis 0.20	

Naphtha/ Pentan		200
Octan		200
Toluol		130
UDMH, Benzol, Methanol,		
Butan, LNG, Wasserstoff und	0.0951 bis 0.401	
Hexan		
Xylol		130

Tabelle A7.3: Gemessene Flächenanteile \overline{a}_{sz} der Rußzonen (SZ) sowie C / H - Verhältnissein Poolfeuern für verschiedene Brennstoffe

Brennstoff	ā _{sz}			C/H
	d < 10 m	10 m < d < 20 m	d > 20 m	-
Aceton	0.98	0.98	0.98	0.500
Benzin	0.98	0.98	0.98	0.430
Benzol	0.98	0.98	0.98	1.000
Butan	0.77	0.88	0.92	0.400
Diesel	0.98	0.98	0.98	0.530
Ethan	0.23	0.32	0.45	0.330
Ethanol	0	0	0	0.330
Heptan	0.77	0.88	0.92	0.438
Hexan	0.77	0.88	0.92	0.429
JP-4	0.98	0.98	0.98	0.460
JP-5 / Kerosin	0.98	0.98	0.98	0.450
LEG	0	0	0	0.500
LNG / Methan	0.23	0.31	0.45	0.250
LNG / Methan (Wasser)	0.23	0.31	0.45	0.250
LPG / Propan	0.45	0.77	0.84	0.375
LPG / Propan (Wasser)	0.45	0.77	0.84	0.375
Methanol	0	0	0	0.250
Naphtha / Pentan	0.77	0.88	0.92	0.417
Oktan	0.77	0.88	0.92	0.444
Rohöl	0.95	0.95	0.95	0.540
Toluol	0.98	0.98	0.98	0.875
Wasserstoff (flüssig)	0	0	0	0
Xylol	0.98	0.98	0.98	0.800

Tabelle A7.4: Gemessene aktuelle spezifische Ausstrahlungen, (Strahlungs-) Temperaturen T und relative Flammenlängen teilweise in Abhängigkeit vom Pooldurchmesser d für Einzel-Poolfeuer zahlreicher Brennstoffe [7.1, 7.2, 7.6, 7.8, 7.9, 7.16; 7.20]

Brennstoff	SEP _{act} [kW / m²]	T [K]	H/d [−]
Acetaldehyd	35 (d = 1 m); 64 (d = 10 m)		2.88 (d = 1 m); 1.43 (d = 10 m)
Aceton	42 (d = 1 m); 79 (d = 10 m)		3.06 (d = 1 m); 1.52 (d = 10 m)
	130 (max)		
Acetonitril	34 (d = 1 m); 62 (d = 10 m)		2.27 (d = 1 m); 1.13 (d = 10 m)
Acrylnitril	36 (d = 1 m); 67 (d = 10 m)		2.64 (d = 1 m); 1.31 (d = 10 m)
Allylalkohol	37 (d = 1 m); 68 (d = 10 m)		2.45 (d = 1 m); 1.21 (d = 10 m)
Ammoniak	17 (d = 1 m); 30 (d = 10 m)		1.57 (d = 1 m); 0.78 (d = 10 m)
Benzol	71 (d = 1 m); 135 (d = 10 m)	1490	4.16 (d = 1 m); 2.06 (d = 10 m)
Butan	86 (d = 1 m); 165 (d = 10 m)		4.84 (d = 1 m); 2.40 (d = 10 m)
	225 (max)		
Butadien	87 (d = 1 m); 168 (d = 10 m)		4.88 (d = 1 m); 2.42 (d = 10 m)
i-Butan	87 (d = 1 m); 168 (d = 10 m)		5.02 (d = 1 m); 2.49 (d = 10 m)
Diesel	130 (max)		
Diethylamin	71 (d = 1 m); 135 (d = 10 m)		4.29 (d = 1 m); 2.12 (d = 10 m)
Dimethylamin	59 (d = 1 m); 112 (d = 10 m)		3.59 (d = 1 m); 1.78 (d = 10 m)
Ethan	96 (d = 1 m); 185 (d = 10 m)		4.76 (d = 1 m); 2.36 (d = 10 m)
	250 (max)		
Ethen	90 (d = 1 m); 130 (d = 2.5 m)		4.52 (d = 1 m); 2.24 (d = 10 m)
	173 (d = 10 m)		
Ethylchlorid	28 (d = 1 m); 52 (d = 10 m)		3.01 (d = 1 m); 1.49 (d = 10 m)
Ethyldiamin	36 (d = 1 m); 66 (d = 10 m)		2.37 (d = 1 m); 1.18 (d = 10 m)
Ethenoxid	37 (d = 1 m); 68 (d = 10 m)		2.79 (d = 1 m); 1.38 (d = 10 m)
Ameisensäure-	29 (d = 1 m); 54 (d = 10 m)		2.86 (d = 1 m); 1.42 (d = 10 m)
ethylester			
Ethylmercaptan	45 (d = 1 m); 84 (d = 10 m)		3.44 (d = 1 m); 1.71 (d = 10 m)
Heptan	200 (max)		
Hexan	87 (d = 1 m); 166 (d = 10 m)		4.53 (d = 1 m); 2.24 (d = 10 m)
	200 (max)		
Methan	100 (d = 1 m); 193 (d = 10 m)		4.59 (d = 1 m); 2.29 (d = 10 m)
Methanol	19 (d = 1 m); 70 (d = 3 m)	1300	1.59 (d = 1 m); 0.79 (d = 10 m)
	34 (d = 10 m)		
Essigsäuremethyl-	26 (d = 1 m); 48 (d = 10 m)		2.59 (d = 1 m); 1.28 (d = 10 m)

ester		
Methylbromid	9 (d = 1 m); 16 (d = 10 m)	2.25 (d = 1 m); 1.11 (d = 10 m)
Methylchlorid	15 (d = 1 m); 27 (d = 10 m)	4.90 (d = 1 m); 2.43 (d = 10 m)
Ameisensäure-	18 (d = 1 m); 33 (d = 10 m)	2.31 (d = 1 m); 1.14 (d = 10 m)
methylester		
Kohlenstoffmonoxid	13 (d = 1 m); 24 (d = 10 m)	2.71 (d = 1 m); 1.34 (d = 10 m)
Kohlenstoffdisulfid	15 (d = 1 m); 28 (d = 10 m)	2.37 (d = 1 m); 1.18 (d = 10 m)
LEG	250 (max)	
LNG (auf Land)	150 bis 220 (d = 20 m); 250	
	52 (d = 15 m); 36 (d = 24 m)	
	153; 219 (max) (d = 20 m)	
	290 bis 320 (Ω klein)	
	257 bis 273 (Ω groß)	
	350 (max) (d = 35 m)	
	140 bis 180 (d = 20 m)	
	175 ± 30 (d = 35 m)	

			7
Brennstoff	SEP _{act}	Т	Ĥ/d
	[kW / m²]	[K]	[-]
LNG (auf Wasser)	210 bis 280 (8.5 m < d 15 m)	1500	
	210 \pm 20 (Ω klein)		
	220 \pm 50 (Ω groß) (d = 15 m)		
	178 bis 248 (d = 30 m)		
	203 (d = 30 m)		
	185 bis 224 (d = 15 m)	ĺ	
LPG (auf Land)	48 (d = 20 m)		
	60 bis 160 (2 m < d < 17 m)		
	250 (max)		
Octan	200 (max)		
Propan	98 (d = 1 m); 188 (d = 10		5.08 (d = 1 m); 2.52 (d = 10 m)
Propen	m)		4.90 (d = 1 m); 2.43 (d = 10 m)
Rohöl	92 (d = 1 m); 178 (d = 10		
Toluen	m)		
Vinylchlorid	130 (max)		2.68 (d = 1 m); 1.41 (d = 10 m)
Vinylacetat	130 (max)		2.89 (d = 1 m); 1.43 (d = 10 m)
Wasserstoff (flüssig)	26 (d = 1 m); 46 (d = 10	1600	
	1		

Wasserstoffdisulfid	m)			2.20 (d = 1 m); 1.09 (d = 10 m)
Kerosin	32 (d = 1 m); 59	(d = 10	1600;	1.7
	m)		1480	
Benzin; Jet B	70 (max)		1240;	1.7 (d = 23 m); 1.0 (d = 15 m)
	18 (d = 1 m); 32	(d = 10	1450	1.9 (d = 6 m)
JP-4 (d = 5.8 m)	m)		1200	
JP-4; JP-5	80 bis 30 (10 m < d < 25 m)			
JP-5	120 (d = 10 m, 14 m)		1250	
	130 bis 60 (1 m < d <	: 10 m)		
UDMH (d = 0.5 m)			1300	
Pentan/ Naphtha				
Ethanol	40 bis 80 (d = 2.4 m)		1490	
Xylene	50 bis 30 (1 m < d < 30 m)			
	110 (d = 3 m)			
	61 (d = 1 m); 200 (r	nax)		
	130 (max)			

8 Explosion

Ganz allgemein ist eine Explosion eine Energiefreisetzung in die Atmosphäre, durch die eine Druckwelle entsteht. Resultiert die Explosion aus einer Verbrennungs- oder Zerfallsreaktion, so können z.B. die Definitionen aus der DIN EN 13237 [8.1] zur Unterscheidung einzelner Phänomene herangezogen werden:

- Explosion: plötzliche Oxidations- oder Zerfallsreaktion mit Anstieg der Temperatur, des Druckes oder beider gleichzeitig.
- Deflagration: Explosion, die sich mit Unterschallgeschwindigkeit fortpflanzt.
- Detonation: Explosion, die sich mit Überschallgeschwindigkeit fortpflanzt, gekennzeichnet durch eine Stoßwelle.

Eine Detonation zeigt einen sehr steilen Druckanstieg, gefolgt von einem exponentiellen Abfall und einer kleinen negativen Amplitude. Eine Deflagrationsdruckwelle weist an der Front einen langsamen Druckanstieg auf, gefolgt von einem - verglichen mit dem Anstieg steilen Abfall. Die Zerstörungswirkung einer Explosion ergibt sich aus dem Explosionsspitzenüberdruck und der Dauer der Druckwirkung. Die Abschätzung von Explosionsauswirkungen erfolgt meist näherungsweise über die Druckspitze der Druckwelle. Die Orientierung allein an der Druckspitze ist ein konservatives Vorgehen, weil mit kürzer werdender Einwirkdauer der Druckwelle höhere Drücke für die gleiche Wirkung erforderlich sind.

Bei der Abschätzung der Zerstörungswirkung ist u.U. zu berücksichtigen, dass der auf senkrecht zur Ausbreitungsrichtung der Welle befindliche Objekte wirkende Druck durch Reflexion mehr als verdoppelt werden kann. Bei Flächen, die senkrecht zur Wellenausbreitungsrichtung angeordnet sind, kann der Überdruck Δp_R durch Reflexion der Welle nach Glasstone (zitiert in [8.2]) mit folgender Gleichung berechnet werden:

$$\Delta p_{\rm R} = 2\,\Delta p \,\frac{7 + 4\,\Delta p}{7 + \Delta p} \tag{8.1}$$

Hierbei bedeuten

∆p _R [Pa]	Überdruck mit Druckwellenreflexion	
∆p [Pa]	Überdruck ohne Druckwellenreflexion	
Gl. 8.1 bezieht sich auf sog. "blast"-Wellen mit einem steilen Druckanstieg mit nachfolgendem Druckabfall bis unter den Atmosphärendruck, die bei Sprengstoffdetonationen auftreten. Die Wellenformen von Detonationen und Gasexplosionen, die meist deflagrativ ablaufen, unterscheiden sich in der Nähe des Explosionszentrums erheblich. Im weiteren Umfeld gleichen sich die Wellenformen zunehmend an. Bei größerem Abstand vom Explosionszentrum kann deswegen die obige Gleichung in erster Näherung auch bei Gaswolkenexplosionen angewendet werden.

In diesem Kapitel sind Modelle zusammengestellt, die die Auswirkungen einer Gaswolkenexplosion berechnen. Weiterhin werden Modelle für das Behälterbersten und den BLEVE (Boiling Liquid Expanding Vapour Explosion) angegeben.

8.1 Gaswolkenexplosion

Im Unterschied zu einer Sprengstoffexplosion, die als Detonation abläuft, gibt es bei Gaswolkenexplosionen ein breites Spektrum an möglichen Explosionsabläufen. Je nach Durchmischungsgüte (Homogenität) und Turbulenz sind in einer Gaswolke alle Übergänge beobachtet worden, vom einfachen Abbrennen ohne Druckaufbau über eine Deflagration mit relativ flachem Druckanstieg bis hin zur Detonation mit steilem Druckanstieg und Ausbreitungsgeschwindigkeiten im Bereich von einigen km/s.

Wie hoch der Explosionsdruck steigt, hängt von der Verbrennungsgeschwindigkeit des Gases ab, die ihrerseits wiederum von der Art des Gases, der Stärke des Zündpotentials, der Feindurchmischung der Wolke, der Turbulenz, die z.B. durch Hindernisse verstärkt werden kann, der Masse der Verbrennungsgase und der Behinderung des Abströmens abhängt. Hindernisse wie Büsche und Bäume führen erst zu einer relevanten Beschleunigung der Flamme und einem Anstieg des Explosionsüberdrucks wenn die Verblockung ausreichend groß ist [8.26]. Andere Untersuchungen legen nahe, dass es sogar zum Umschlag von einer Deflagration in eine Detonation kommen kann [8.58].

Das Entstehen einer Detonation bei Zündung einer <u>unverdämmten</u> Gaswolke ist relativ unwahrscheinlich. Giesbrecht [8.2] hat bei den Experimenten von berstenden Behältern (Propylen) mit anschließender Zündung (auch mit Sprengstoff) der Gaswolke nur Deflagrationen messen können. Bei den Coyote-Experimenten (LNG) erfolgte die Zündung auch mittels einer Freistrahlzündung, die zu einer erhöhten Flammengeschwindigkeit in der Nähe der Zündquelle führte, die sich dann aber auf die normale turbulente Flammengeschwindigkeit reduzierte. In [8.38] wird dagegen auf Experimente verwiesen, bei denen mit Freistrahlzündungen Detonationen hervorgerufen wurden, wenn der Freistrahl ausreichend groß genug war. Auch die Zündung einer Gaswolke mit einer ausreichenden Sprengstoffmenge kann zu einer Detonation führen [8.6].

Bei <u>verdämmten</u> Gaswolken oder Gaswolken in denen sich turbulenzerzeugende Hindernisse befinden, kann ein Umschlag einer Deflagration zu einer Detonation nicht ausgeschlossen werden [8.29].

Für die Berechnung der Explosionsüberdrücke existieren mehrere Modelle, die eine Berücksichtigung spezieller Freisetzungs- und Umgebungsbedingungen erlauben. Für eine genaue Betrachtung sind numerische Modelle entwickelt worden, die die bei einer Explosion vorliegenden turbulenten Strömungsverhältnisse berücksichtigen. Diese Modelle sind auch in der Lage, Einflüsse des Zündortes zu berücksichtigen.

8.1.1 Äquivalenzmodelle / Methoden

8.1.1.1 TNT Äquivalenzmodell

Bei dem TNT-Äquivalenzmodell wird davon ausgegangen, dass sich eine deflagrativ abbrennende Gaswolke hinsichtlich des Überdrucks der Druckwelle genauso verhält wie eine Detonation. Für die Auswirkungsberechnung wird der Anteil der in der Gaswolke gespeicherten Verbrennungsenthalpie herangezogen, der in Druckenergie übergeht und in eine äquivalente Menge TNT-Sprengstoff umgerechnet. Im Nahbereich werden zu hohe Explosionsüberdrücke berechnet, ist aber für Fernwirkungen durch Erfahrung als Maximum belegt. Dieses Modell berücksichtigt nicht die Freisetzungsart und die Umgebungsparameter.

Die äquivalente Masse TNT wird ermittelt mit:

$$m_{\rm TNT} = m_{\rm Gas} \cdot \eta \cdot \frac{\Delta h_{\rm Gas}}{4500 \,\text{kJ} \,/ \,\text{kg}}$$
(8.2)

Der maximale Explosionsüberdruck in Abhängigkeit von einem mit der äquivalente Masse TNT skalierten Abstand kann aus dem Diagramm im Kapitel 5.3.2 in [8.4] entnommen werden. Der maximale Explosionsüberdruck, der Impuls und die Dauer oder Ankunftszeit einer TNT-Explosion am Erdboden kann auch mit den Koeffizienten aus Tabelle 8.1 und der folgenden Formel berechnet werden:

$$\log_{10} \left(\Phi \right) = \sum_{i=0}^{n} c_{i} \cdot \left[a + b \cdot \log_{10} \left(z \right) \right]^{i}$$

$$z = \frac{r}{m_{\text{TNT}}^{0,3333}}$$
(8.3)

Hierbei bedeuten

m _{TNT} [kg]	Äquivalente Masse TNT
m _{Gas} [kg]	Explosionsfähige Gasmasse
∆h _{Gas} [J/kg]	Heizwert des Gases
η [-]	Wirkfaktor
z [m/kg ^{1/3}]	skalierter Abstand

Mittels des Wirkfaktors wird diejenige Menge berücksichtigt, die explodiert, da nicht die gesamte Stoffmasse an der Explosion beteiligt ist. Im Yellow Book [8.4] ist eine Übersicht über die in der Literatur verwendeten Wirkfaktoren angegeben, die im Bereich von 2% bis 20% liegen. Es wird empfohlen für ein "mittleres" Szenario einen Wirkfaktor von 4% und für eine konservative Abschätzung 10% zu verwenden.

Im Guidline for Evaluation the Characteristics of Vapor Cloud Explosions, Flash Fires, and BLEVEs [8.38] wird empfohlen, mittels einer Gasausbreitungsberechnung die explosionsfähige Masse zu bestimmen und einen Wirkfaktor im Bereich von 5% bis 20% zu verwenden. Daraus aufbauend wird in ALOHA [8.45] ein Wirkfaktor von 20% verwendet.

In [8.46] werden für eine unverdämmte Gaswolkenexplosion drei Wirkfaktoren (3%, 6% und 19%) in Abhängigkeit vom Gefahrstoff verwendet. Den Wirkfaktoren ist eine umfangreiche Stoffliste zugeordnet.

		Function				
Constant	Range	Overpressure p ⁰ (kPa)	Impulse <i>i_p</i> (Pa s)	Duration time t_d (ms)	Arrival time t_a (ms)	
	1 2 3	$0.0674 \le Z \le 40$	$0.0674 \le Z \le 0.955$ $0.955 \le Z \le 40$	$0.178 \le Z \le 1.01$ $1.01 \le Z \le 2.78$ $2.78 \le Z \le 40$	$0.0674 \le Z \le 40$	
а	1 2 3	-0.214362789151	2.06761908721 -1.94708846747	1.92946154068 -2.12492525216 -3.53626218091	-0.202425716178	
Ь	1 2 3	1.35034249993	3.0760329666 2.40697745406	5.25099193925 9.2996288611 3.46349745571	1.37784223635	
¢0	1 2 3	2.78076916577	2.52455620925 1.67281645863	-0.614227603559 0.315409245784 0.686906642409	-0.0591634288046	
c ₁	1 2 3	-1.6958988741	-0.502992763686 -0.384519026965	0.130143717675 -0.0297944268976 0.0933035304009	1.35706496258	
c ₂	1 2 3	-0.154159376846	0.171335645235 -0.0260816706301	0.134872511954 0.030632955288 -0.0005849420883	0.052492798645	
c3	1 2 3	0.514060730593	0.0450176963051 0.0059579875382	0.0391574276906 0.0183405574086 0.00226884995013	-0.196563954086	
c4	1 2 3	0.0988554365274	-0.0118964626402 0.014544526107	-0.00475933664702 -0.0173964666211 -0.00295908591505	-0.0601770052288	
c5	1 2 3	-0.293912623038	-0.00663289334734	-0.00428144598008 -0.00106321963633 0.00148029868929	0.0696360270891	
c ₆	1 2 3	-0.0268112345019	-0.00284189327204	0.00562060030977	0.0215297490092	
c7	1 2 3	0. 109097496421	0.0013644816227	0.0001618217499	0.0161658930785	
c ₈	1 2 3	0.00162846756311		-0.0006860188944	-0.00232531970294	
c9	1 2 3	-0.0214631030242			0.00147752067524	
c ₁₀	1 2 3	0.0001456723382				
c ₁₁	1 2 3	0.00167847752266				

Tabelle 8.1: Koeffizienten für Gl. 8.3 zur Berechnung von Explosionsüberdruck, Impuls, Dauer und Ankunftszeit einer TNT-Explosion am Erdboden ([8.5], Tabelle 2.17)

8.1.2 Analytische Modelle

8.1.2.1 Kogarko

Das Modell von Kogarko [8.6] wurde für detonativ verlaufende Gasexplosionen erstellt und basiert auf experimentellen Daten, die von Kogarko in den 60er Jahren für Gemische aus Methan, Propan, Acetylen und Luft bzw. Sauerstoff ermittelt worden sind. Die Detonation der Gasgemische wurde dabei durch die Zündung eines Sprengstoffes eingeleitet. Das Modell besteht aus zwei Gleichungen, die in verschiedenen Bereichen des bezogenen Radius r/L_0 gültig sind:

$$\Delta p[kg/cm^{2}] = 0, 6 \cdot 10^{-3} \frac{E_{Gas}^{\frac{1}{3}}}{R} + 1, 4 \cdot 10^{-2} \frac{E_{Gas}^{\frac{2}{3}}}{R^{2}} + 2, 5 \cdot 10^{-3} \frac{E_{Gas}}{R^{3}} \quad \text{für} \frac{R}{E_{Gas}^{\frac{1}{3}}} > 0, 3$$

$$\Delta p[kg/cm^{2}] = \frac{0,052}{\left(\frac{R}{E_{Gas}^{\frac{1}{3}}}\right)^{1,7}} \quad \text{für } 0,05 \le \frac{R}{E_{Gas}^{\frac{1}{3}}} \le 0,3$$
(8.4)

Der Impuls der Druckwelle berechnet sich nach folgender Beziehung:

I [kgs/m²]=0,095
$$\frac{E_{Gas}^{\frac{2}{3}}}{R}$$
 (8.5)

Der Abstand R [m] wird vom Explosionszentrum aus gemessen und die verfügbare Verbrennungsenergie E_{Gas} ist in kcal einzusetzen.

8.1.2.2 Wiekema

Das von Wiekema [8.7] entwickelte Modell geht von einer Deflagration einer Schwergaswolke am Boden aus. Es vergleicht die Flammenausbreitung und den Druckaufbau bei einer Gaswolkenexplosion mit der Bewegung eines äquivalenten sphärischen Kolbens und kommt zu einem Zusammenhang zwischen Flammengeschwindigkeit und Spitzenüberdruck.

$$\frac{\Delta P_s}{p_u} = A \frac{L}{R}$$
(8.6)

S=40 m/s: A = 0.02S=80 m/s: A = 0.06S=160 m/s: A = 0.15

$$L = \left(\frac{2}{3} \pi r_0^3 \frac{3.5 \times 10^6 \,[J/m^3]}{P_u}\right)^{\frac{1}{3}}$$
(8.7)

Der Radius R wird vom Mittelpunkt der als Halbkugel idealisierten Gaswolke gemessen. Der Radius der Halbkugel beträgt r₀ und wird aus der explosionsfähigen Masse innerhalb der Zündgrenzen und der unteren Explosionsgrenze berechnet.

Der Impuls der Gaswolkenexplosion berechnet sich nach folgender Beziehung:

$$I=0,5\Delta P_{s} t_{p}$$
(8.8)

$$I = \frac{0.5L\Delta P_s}{a} \left(\frac{a}{S} - 1\right) + \frac{0.5L\Delta P_s}{a} \frac{3A}{7} \ln \left(\frac{1 + \frac{7R}{3AL}}{1 + \frac{1.064}{A}}\right)$$
(8.9)

Auf der Grundlage der von Kogarko [8.6] veröffentlichten Werte gibt Wiekema folgende Beziehungen für den maximalen Explosionsüberdruck und den Impuls an:

$$\begin{split} \frac{\Delta P_{s}}{p_{u}} &= 0,518 \left(\frac{L}{R}\right)^{1,7} & \text{für } 0,29 < \frac{R}{L} < 1,088 \\ \frac{\Delta P_{s}}{p_{u}} &= 0,2177 \frac{R}{L} + 0,1841 \left(\frac{L}{R}\right)^{2} + 0,1194 \left(\frac{L}{R}\right)^{3} & \text{für } \frac{R}{L} \ge 1,088 \\ I &= \frac{0,09265 \text{ L} \Delta P_{s}}{a} \sqrt{\frac{R}{L}} & \text{für } 0,36 < \frac{R}{L} < 12,6 \\ I &= \frac{0,5 \text{ L} \Delta P_{s}}{a} \left(0,2 + 0,0933 \ln(1 + 10,7\frac{R}{L})\right) & \text{für } \frac{R}{L} \ge 12,6 \end{split}$$
(8.10)

Einflussparameter auf die Ergebnisse dieses Modells ist in erster Linie die Verbrennungsenergie der Gaswolke und die turbulente Flammengeschwindigkeit S. Wiekema setzt für die Verbrennungsenergie der Gaswolke einen Mittelwert von 3,5*10⁶ J/m³ an. Anstatt die turbulente Flammengeschwindigkeit zu berechnen, werden für die oben genannten drei Stufen (Gl. 8.6) Beispiele für Stoffe aufgeführt:

S = 40 m/s:	Methan
$S = 80 \frac{m}{s}$:	Ethan, Butan
S=160 ^m / _s :	Wasserstoff, Ethylenoxid, Acetylen

Die Formelzeichen bedeuten

ΔP_s	Maximaler Explosionsüberdruck [bar]
Pu	Umgebungsdruck [bar _{abs}]
R [m]	Entfernung vom Mittelpunkt der als Halbkugel idealisierten
	Gaswolke
r ₀ [m]	Radius der explosionsfähigen Gaswolke
a [m/s]	Schallgeschwindigkeit
L [m]	charakteristische Explosionslänge
t _p [s]	Dauer der positiven Druckwelle
l [bar s]	Impuls der Druckwelle

8.1.2.3 Multi-Energy-Modell

Der maximale Explosionsüberdruck einer Gaswolkenexplosion ist von vielen Parametern abhängig. Neben den Stoffeigenschaften sind

- die Art der Zündung,
- die Flammengeschwindigkeit, die durch die Turbulenz in der Gaswolke stark beeinflusst wird und
- die Verdämmung der Gaswolke z. B. durch Gebäude,

wesentliche Einflussfaktoren. Im Multi-Energy-Modell hat van den Berg [8.8] dies berücksichtigt, indem für den maximalen Explosionsüberdruck in der Nähe der Gaswolke 10 Klassen festgelegt werden. Die Klasse 1 hat einen geringen maximalen Explosionsüberdruck (Verpuffung), während die Klasse 10 eine starke Detonation beschreibt In den folgenden Bildern sind der normierte Explosionsüberdruck in Abhängigkeit von der normierten Entfernung und die positiven Druckphase der Explosionsdruckwelle dargestellt. Die normierten Größen sind hierbei wie folgt definiert:

$$\overline{P}_{s} = \frac{\Delta P_{s}}{p_{u}} ; r_{0}' = \frac{r}{\left(\frac{E}{p_{u}}\right)^{\frac{1}{3}}} ; t_{p} = \frac{t_{p}'}{a} \left(\frac{E}{p_{u}}\right)^{\frac{1}{3}}$$
(8.11)

Der Impuls der Druckwelle berechnet sich dann nach

$$I=0,5\Delta P_{s} t_{p}$$
(8.12)

ΔP_{s} [bar]	Explosionsüberdruck
p _u [bar]	Umgebungsdruck
r [m]	Entfernung vom Mittelpunkt der Gaswolke
a [m/s]	Schallgeschwindigkeit
t _p [s]	Dauer der positiven Druckwelle
E [kJ]	Verbrennungsenergie
l [bar*s]	Impuls der Druckwelle







Abb. 8.2: Dauer der positiven Druckphase der Explosionsdruckwelle im Multi-Energy-Model aus [8.4]

Die wesentliche Fragestellung ist die Zuordnung der zu betrachtenden Situation zu den Klassen des Multi-Energy-Modells. Hierzu wird in [8.4] als Hilfestellung die von Kinsella [8.9] entwickelte Matrix angegeben.

Zündungsenergie		Verblockung		Verdämmung		Klasse	
hoch	gering	hoch	gering	keine	hoch	gering	
x		x			x		7-10
x		x				x	7-10
	x	x			x		5-7
x			x		x		5-7
x			x			x	4-6
x				x	x		4-6
	x	x				x	4-5
x				x		x	4-5
	x		x		x		3-5
	x		x			x	2-3
	x			x	x		1-2
	x			x		x	1

Die drei Parameter Zündungsenergie, Verblockung und Verdämmung werden hierbei wie folgt beschrieben:

Zündungsenergie

Hoch: Die Zündung der Gaswolke erfolgt durch eine sehr starke Zündquelle, wie z. B. eine Freistrahlzündung aus einem Gebäude heraus oder durch ein Behälterbersten infolge einer Primärexplosion.

Gering: Die Zündquelle ist ein Funken, eine Flamme, eine heiße Oberfläche usw.

Verblockung

Hoch: In der Gaswolke befinden sich dicht gepackte Hindernisse (Rohrleitungen, Behälter). Das gesamte Volumen der Hindernisse beträgt mehr als 30 % des Volumens im betrachteten Bereich. Die Abstände zwischen den Hindernissen betragen weniger als 3 m.

Gering: In der Gaswolke befinden sich Hindernisse (Rohrleitungen, Behälter). Das gesamte Volumen der Hindernisse ist geringer als 30 % des Volumens im betrachteten Bereich. Die Abstände zwischen den Hindernissen sind größer als 3 m.

Keine: In der Gaswolke befinden sich keine oder nur wenige Hindernisse.

Verdämmung

Hoch: Die Gaswolke wird durch den Boden und auf zwei oder drei Seiten durch Wände begrenzt.

Gering: Die Gaswolke wird durch den Boden begrenzt und kann bei der Explosion nach allen Seiten expandieren.

Diese einfachen Unterteilungen ergeben eine nachvollziehbare Begründung für die Wahl der Explosionsklasse.

Im HSE Report [8.10], im TNO Report [8.25] und darauf aufbauend in [8.23] wird eine Vorgehensweise bei komplex bebauten Gelände beschrieben. Der maximale Explosionsüberdruck kann nach [8.23] wie folgt berechnet werden:

$$P_0 = 0.84 \left(\frac{VBR L_f}{D}\right)^{2.75} S_1^{2.7} D^{0.7}$$
(8.13)

Hierbei bedeuten:

P ₀ [bar]	maximaler Explosionsüberdruck
VBR [-]	Volumen-Verblockungsgrad (Anteil des Volumens der
	Strömungshindernisse)
L _f [m]	Länge, die die Flamme zurücklegt. Dies ist meistens die
	Länge vom Zündpunkt bis zum äußeren Ende der
	Hindernisstruktur
D [m]	mittlerer Durchmesser der Hindernisse
S _I [m/s]	laminare Flammengeschwindigkeit des Brennstoffs

In [8.19] und [8.25] wird anhand einiger Beispiele die Vorgehensweise zur Festlegung des Volumen-Verblockungsgrads und des mittleren Durchmessers der Hindernisse beschrieben.

8.1.2.4 Tang-Baker Modell

Baker-Strehlow [8.11] haben vergleichbar mit dem Ansatz der TNO ebenfalls Explosionskurven, wie in den Abbildungen 8.1 und 8.2 dargestellt, für kugelförmige Explosionen von stöchiometrisch gemischten Brenngaswolken entwickelt. Tang und Baker [8.12] haben diese Kurven überarbeitet und an verfügbare experimentelle Daten angepasst. Als Parameter der verschiedenen Druckverläufe in Abhängigkeit von der Entfernung wird die mit der Flammengeschwindigkeit berechnete Machzahl verwendet.

Ein Vergleich des Kurvenverlaufs des maximalen Explosionsüberdruckes bei einer Detonation (Klasse 10 in Abbildung 8.1) ergibt sehr ähnliche Werte. Ein Vergleich im Bereich der Deflagrationen ist nicht möglich, da ein Zusammenhang zwischen der Flammengeschwindigkeit bei Tang-Baker und der Explosionsklasse im Multi-Energy-Model nicht vorliegt. Angaben zur Bestimmung der Flammengeschwindigkeit, vor allem in bebautem Gelände, werden nicht gemacht.

8.1.2.5 Giesbrecht

Giesbrecht u.a. [8.2], [8.3] haben experimentelle Untersuchungen zum Bersten von Flüssiggasbehältern mit anschließender Zündung der Gemischwolke durchgeführt. Hierbei wurden Behälter mit Volumina zwischen 0,2 I und 1 m³ vollständig mit flüssigem Propylen gefüllt, elektrisch auf Temperaturen zwischen 50 und 80°C aufgeheizt und bei Flüssigkeitsdrücken zwischen 40 und 70 bar durch Anstechen mit einer Lanze bzw. durch eine kleine Sprengladung zum Bersten gebracht. Die Zündung der Gaswolke erfolgte nach einer vorgewählten Verzögerungszeit durch eine Funkenstrecke bzw. bei einem Experiment auch mittels Sprengstoff.

Aus den Experimenten wurde eine Beziehung für die turbulente Flammengeschwindigkeit abgeleitet:

$$S = 0.07 F_{v} S_{1} e_{DW}^{1/4} E_{Gas}^{1/6}$$
(8.14)

Die in Abb. 15 in [8.2] dargestellte Abhängigkeit des maximalen Explosionsüberdruckes von der Behältermasse - basierend auf den Ergebnissen der durchgeführten Propylen-Experimente - lässt sich mit folgender Funktion beschreiben:

$$\log(\Delta p_{s}) = -0,00033 \cdot \left[\log(m_{B,Pr})\right]^{3} + 0,0163 \cdot \left[\log(m_{B,Pr})\right]^{2} + 0,216 \cdot \log(m_{B,Pr}) - 1,686$$
(8.15)

Bei den Experimenten mit Propylen betrug der Anteil der explosionsfähigen Masse in der Wolke ca. $1/_3$ der Masse im Behälter. Bezieht man in Gl. 8.15 den maximalen Explosionsüberdruck auf die explosionsfähige Masse der Propylen-Gaswolke, so ergibt sich

$$log(\Delta p_{s}) = -0,00033 \cdot \left[log(m_{Ex,Pr}) \right]^{3} + 0,0159 \cdot \left[log(m_{Ex,Pr}) \right]^{2} + 0,231 \cdot log(m_{Ex,Pr}) - 1,58$$
(8.16)

Bezieht man den maximalen Explosionsüberdruck auf die Explosionsenergie der Gaswolke so folgt allgemein gültig auch für andere Stoffe:

$$\log(\Delta p_{s}) = -0,00033 \cdot [\log(E_{Gas})]^{3} + 0,0234 \cdot [\log(E_{Gas})]^{2} - 0,07 \cdot \log(E_{Gas}) - 2,27$$
(8.17)

$$E_{Gas} = m_{Ex} \cdot \Delta h_{R}$$
(8.18)

Die in Abb. 14 in [8.2] dargestellte Abhängigkeit des radialen Druckverlaufs in Abhängigkeit von der Entfernung lässt sich für ein isobares Expansionsverhältnis von v = 3,5 mit folgender Funktion beschreiben:

$$\Delta p = 1,45 \cdot \left(\frac{r_{\rm G}}{r}\right)^{\frac{1}{1.12}} \cdot \Delta p_{\rm s}$$
(8.19)

$$r_{\rm G} = \sqrt[3]{\frac{3 \cdot m_{\rm Ex}}{2 \cdot \pi \cdot \overline{\rho} \cdot c}}$$
(8.20)

$$\overline{\rho} = \frac{c \cdot (M - M_L) + M_L}{24, 1}$$
(8.21)

Die Formelzeichen bedeuten

Δp_{s} [bar]	Maximaler Explosionsüberdruck		
P _u [bar _{abs}]	Umgebungsdruck		
F _V []	Volumenvergrößerungsfaktor = 3.5		
S [m/s]	turbulente Flammengeschwindigkeit		
S ₁ [m/s]	laminare Flammengeschwindigkeit		
	= ca. 0,5 m/s		
a [m/s]	Schallgeschwindigkeit		
e _{DW} [kJ/kg]	an die Umgebung abgegebene physikalische Arbeit		
	= 60 kJ/kg		
E _{Gas} [MJ]	verfügbare Verbrennungsenergie = unterer Heizwert*Masse		
L [m]	charakteristische Explosionslänge		
t _p [s]	Dauer der positiven Druckwelle		
l [bar s]	Impuls der Druckwelle		
m _{Ex.Pr} [kg]	Explosionsfähige Propylen-Masse		
m _{B.Pr} [kg]	Propylen-Masse im Behälter		
m _{Ex} [kg]	Explosionsfähige Masse des Gases		
M [kg/mol]	molare Masse des Gases		
M _L [kg/mol]	molare Masse von Luft		
c [Vol-%]	Konzentration des Gases (untere Explosionsgrenze oder		
	stöchiometrische Konzentration)		

8.1.2.6 CAM

Für die Berechnung der Auswirkungen einer Gaswolkenexplosion in einem Gelände mit Strömungshindernissen (Rohrleitungen, Behälter, usw.) wurde das Modell CAM (Congestion Assessment Method) von Puttock [8.13], [8.14] entwickelt. Die Berechnungsmethode umfasst drei Schritte:

1. Unter Berücksichtigung der Bebauungssituation im Bereich, der durch die Gaswolke beaufschlagt wird, wird ein Referenzdruck bestimmt, der maximal bei der Zündung einer Gaswolke mit Propan entstehen könnte. Als Entscheidungshilfe wird in [8.13] ein Entscheidungsbaum vorgestellt, der Referenzdrücke zwischen 0,1 bar (Gelände ohne Hindernisse) bis 1 bar (8 Reihen von Hindernissen und große Verblockung) ermöglicht. Ein Hinweis, wie eine reale Bebauungssituation einer Anzahl von Hindernisreihen zugeordnet werden kann, fehlt. In [8.14] werden folgende Beziehungen zur Berechnung des Referenzdrucks bei einer Explosion ohne Verdämmung angegeben:

$$S = P_0 e^{\left(0.4 \frac{P}{\nu^{1.08} - 1 - P}\right)}$$

$$S = 3.9 * 10^{-5} \left(S_1 \left(\nu - 1\right)\right)^{2.71} L^{0.55} n^{1.99} e^{6.44b} F_c$$
(8.22)

Wird die Explosion durch ein Dach verdämmt, so berechnet sich der Faktor S wie folgt:

$$S = 4,8*10^{-5} \left(S_1 \left(\nu - 1 \right) \right)^{2,71} L^{0,55} n^{1,66} e^{7,24 \text{ b}} F_c$$
(8.23)

P ₀ [bar]	Referenzüberdruck
S _I [m/s]	laminare Flammengeschwindigkeit
ν[-]	Volumenvergrößerungsfaktor
L [m]	Weglänge der Flamme durch den Bereich mit
	Strömungshindernissen
n [-]	Anzahl der Reihen von Strömungshindernissen
b [-]	Verblockungsgrad (area blockage ratio)
F _c [-]	Faktor für die Komplexität der Hindernisstruktur

Hierbei bedeuten:

In [8.14] ist keine Angabe enthalten, wie der Verblockungsgrad berechnet werden soll. Eine mögliche Festlegung wäre:

$b = \frac{Volumen der Strömungshindernisse in der Gaswolke}{Volumen der Gaswolke}$

Um die idealisierte Modellvorstellung von Rohrreihen als Strömungshindernisse auf eine reale Anlagenkonfiguration zu übertragen, ist der Faktor für die Komplexität der Hindernisstruktur eingeführt worden.

Komplexität der Strömungshindernisse	
Ideale Anordnung der Hindernisse mit nahezu identischen	1.0
Durchmessern (siehe MERGE-Projekt [8.15])	
Komplexere Anordnung der Hindernisse mit zwei	1,7
Hindernisgrößen, die eine Größenordnung voneinander	
abweichen	
Komplexe Anlagenstruktur	2,8
Sehr komplexe Anlagenstruktur, wie sie z.B. bei Raffinerien	
oder Offshore Plattformen zu erwarten ist	

In [8.14] sind weiterhin Angaben enthalten, wie besondere Situationen wie

- scharfkantige Hindernisse,
- unsymmetrische Anordnung von Hindernissen,
- einseitige Begrenzung der Gaswolke durch eine Wand,
- langestreckte, schmale Anlagenbereiche,
- partiell gefüllte Anlagenbereiche,
- nicht zentrale Zündung der Gaswolke

zu berücksichtigen sind.

- 2. Die Reaktivität anderer Gase als Referenzstoff Propan wird durch einen Faktor berücksichtigt. Hiermit wird dann der maximale Explosionsdruck im Bereich der Gaswolke ermittelt. Für die Ermittlung des Faktors ist keine Formel angegeben worden, sondern eine tabellarische Auflistung für 13 Stoffe. Methan wird ein Faktor von 0,6 und Ethylen ein Faktor von 3 zugeordnet.
- 3. Berechnung des Explosionsüberdruckes in Abhängigkeit von der Entfernung. Hierfür werden die folgenden Beziehungen angegeben:

$$P(a) = \min\left(\frac{R_0}{r}P_0, P_1\right)$$

$$R_0 = \sqrt[3]{\frac{3V_0}{2\pi}} = \sqrt[3]{\frac{3(L+4)(W+4)*(H+2)}{2\pi}}$$

$$r = R_0 + a$$

$$\log_{10}(P_1) = 0.08c^4 - 0.592c^3 + 1.63c^2 - 3.28c + 1.39$$

$$c = \log_{10}\left(\frac{r}{R_0}\right) + 0.2 - 0.02P_0$$

Hierbei bedeuten:

P ₀ [bar]	Referenzüberdruck	
P [bar]	Explosionsüberdruck im Abstand a zum Rand der	
	abgebrannten Gaswolke	
a [m]	Abstand a zum Rand der abgebrannten Gaswolke	
L [m]	Weglänge der Flamme durch den Bereich mit	
	Strömungshindernissen	
W [m]	Breite der abgebrannten Gaswolke	
H [m]	Höhe der abgebrannten Gaswolke	
R ₀ [m]	Referenzlänge	

8.1.3 Numerische Modelle

8.1.3.1 SCOPE

Puttock u.a. [8.16] haben das Modell SCOPE (Shell Code for Overpressure Prediction in gas Explosions) zur Berechnung des Explosionsüberdrucks in einem druckentlasteten Raum mit Strömungshindernissen entwickelt. Hierzu wird ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen gelöst, wodurch der Rechenaufwand gering ist. Das Modell wurde an einer großen Anzahl von Experimenten validiert.

8.1.3.2 CFD

Für Detailuntersuchungen von Gaswolkenexplosionen werden speziell entwickelte CFD Programme wie FLACS [8.17], [8.18], EXSIM [8.19], AutoReagas [8.20], aber auch bekannte CFD Programmpakete wie CFX und Fluent [8.21], [8.22] eingesetzt. Aufgrund der erforderlichen Detailinformationen zur Anlagenkonfiguration und des großen Rechen-

(8.24)

aufwands ist der Einsatz von CFD Programmen zurzeit noch Einzeluntersuchungen vorbehalten.

8.1.4 Experimentelle Untersuchungen zur Gaswolkenexplosion

Bei den Experimenten der Coyote Series wurde LNG freigesetzt und gezündet [8.23]. Die Freisetzung erfolgte auf freiem Gelände ohne Hindernisse. Es werden Aussagen zu Flammengeschwindigkeiten, Flammenhöhen und Bestrahlungsstärken gemacht.

Viele experimentelle Untersuchungen sind für geschlossene Räume mit Strömungshindernissen durchgeführt worden. Eine Auflistung solcher Experimente ist in [8.16] enthalten. Oft werden auch die MERGE- Untersuchungen [8.15] zitiert, die aber nicht frei verfügbar sind. In [8.28] und [8.30] sind Angaben zu gemessenen Explosionsüberdrücken enthalten.

Gexcon [8.26] hat einen Bericht über die Experimente zum Einfluss der Vegetation auf die Flammengeschwindigkeit einer Gaswolkenexplosion herausgegeben. Bei den Untersuchungen des HSL [8.27] wurde Propan freigesetzt und gezündet. Es sind Angaben zu den gemessenen Flammengeschwindigkeiten und Bestrahlungsstärken vorhanden. In [8.29] wurden die Flammengeschwindigkeiten und Explosionsüberdrücke von Methan/Wasserstoff-Gemischen gemessen. Bei den Maplin Sands Experimenten wurde für LPG und LNG Flammengeschwindigkeiten gemessen [8.35].

Eine größere Anzahl von experimentellen Untersuchungen mit und ohne Strömungshindernisse ist in [8.38] zusammengestellt worden. Es werden Angaben zu den gemessenen minimalen Flammengeschwindigkeiten und soweit vorhanden zu den maximalen Explosionsüberdrücken gemacht.

8.1.5 Anwendungsgrenzen und Empfehlungen

Die Berechnung der Gaswolkenexplosion basiert auf den Ergebnissen der Gasausbreitungsberechnung, aus der die untere Zünddistanz, die explosionsfähige Masse und ggf. die Abmessungen des Gaswolke entnommen werden können. Wird ein Schwergas freigesetzt, so können viele Modelle Strömungshindernisse nicht berücksichtigen. Wird die Richtlinie VDI 3783 Blatt 2 verwendet, so können Strömungshindernisse grob berücksichtigt werden, aber es kann nicht die Geometrie der Gaswolke bestimmt werden. Erst der mit einem größeren Rechenaufwand verbundene Einsatz von CFD-Modellen ermöglicht hierzu eine Aussage. Bei den meistens eingesetzten einfachen Gasausbreitungsmodellen ist es sinnvoll, einfache analytische Modelle für die Gaswolkenexplosion zu verwenden. Bei Schwergasen in einem Gelände ohne Hindernisse können die Modelle von Wiekema oder Giesbrecht verwendet werden. Flexibler einsetzbar ist aber das Multi-Energy-Modell, das in Verbindung mit der Matrix von Kinsella eine nachvollziehbare Abschätzung des zu erwartenden Explosionsüberdruckes ermöglicht. Der Einsatz komplexerer Modelle erscheint erst sinnvoll, wenn die Geometrie der Gaswolke berechnet worden ist und dann potentielle Zündquellen bzw. –orte festgelegt werden können.

8.1.6 Wärmestrahlung bei einer Gaswolkenexplosion

Ein im Vergleich zu Luft schweres Gas bildet auf dem Boden eine flache Gaswolke. Cracknell und Carsley [8.31] gehen aufgrund von experimentellen Untersuchungen davon aus, dass sich die abbrennende Gaswolke im Wesentlichen nach oben ausdehnt. Unter den konservativen Annahmen, dass ein stöchiometrisches Gemisch vorliegt und die Flammentemperatur die adiabatische Temperatur erreicht, wurde folgende Abschätzung für die Flammenhöhe der abbrennenden Gaswolke entwickelt:

$$H = \frac{V_{\text{Prod}} m_{\text{ex}}}{A_{\text{ex}}}$$
(8.25)

Hierbei bedeuten:

H [m]	Flammenhöhe
V _{Prod} [m³/kg]	Volumen der heißen Brandgase pro kg Brennstoff
m _{ex} [kg]	explosionsfähige Masse
A _{ex} [m ²]	Grundfläche des explosionsfähigen Bereichs der Gaswolke

Das Volumen der Brandgase pro kg Brennstoff kann nach [8.31] aus der Verbrennungsgleichung des Brennstoffs, der adiabaten Flammentemperatur und anderen Parametern berechnet werden. Es sind für mehrere Stoffe die Volumina angegeben und liegen im Bereich von 103 m³/kg bis 124 kg/m³.

Die explosionsfähige Masse und die Grundfläche des explosionsfähigen Bereichs der Gaswolke können mit einem Gasausbreitungsmodell berechnet werden. Für die Berechnung der Bestrahlungsstärke in der Umgebung der Gaswolke kann dann die strahlende Fläche aus Flammenhöhe und Länge des explosionsfähigen Bereichs der Gaswolke verwendet werden. Hierbei wird konservativ vernachlässigt, dass die Gaswolke vom Zündort aus abbrennt und somit nicht gleichzeitig diese Fläche als Strahler vorliegt.

Für Methan (LNG, Biogas) sind in der Literatur unterschiedliche Angaben zur Strahlungsintensität der Flamme zu finden. Chamberlain [8.32] gibt für eine Freistrahlflamme einen Wert von ca. 200 kW/m² an. Bei den LNG-Freisetzungen der Coyote Series [8.23], [8.33] wurde Wert zwischen 220 kW/m² und 280 kW/m² gemessen. In [8.34] wird für LNG und Propan ein Wert von 220 kW/m² angegeben. Bei Bränden von LPG auf Wasser wurden Werte zwischen 145 und 190 kW/m² und bei LNG Bränden zwischen 178 und 248 kW/m² gemessen [8.35].

Bei der Beurteilung der Bestrahlungsstärke in der Nähe der Gaswolke sollte die Branddauer berücksichtigt werden. Bei den LNG-Freisetzungen der Coyote Series ohne turbulenzerzeugende Hindernisse in der Gaswolke wurden Flammengeschwindigkeiten zwischen 6 m/s und 24 m/s gemessen. Bei einer Freistrahlzündung wurden bis zu 50 m vom Zündort höhere Flammengeschwindigkeiten als bei einer punktförmigen Zündung gemessen. Bei entsprechend starken Zündquellen können auch Werte von 45 m/s erreicht werden [8.29]. In [8.34] wird unter der Voraussetzung einer Gaswolke ohne turbulenzerzeugende Hindernisse für Propan ein Wert von 12 m/s und für LNG 6 m/s angegeben. Bei den Maplin Sands Experimenten wurde für LPG eine Flammengeschwindigkeit von ca. 11 m/s und für LNG Werte zwischen 4,5 m/s und 6 m/s gemessen [8.35].

Die Branddauer kann konservativ aus der unteren Zünddistanz (die Zündung findet dann am Ende der Gaswolke statt) und der Flammengeschwindigkeit abgeschätzt werden.

8.2 Behälterbersten

Grundlage für die Berechnung des Explosionsüberdruckes infolge Behälterbersten ist die Bestimmung der für die Druckwelle zur Verfügung stehenden Energie. Hierfür gibt es nach [8.47] vier Ansätze mit deutlich unterschiedlichen Ergebnissen. In den beiden folgenden Modellen werden der Ansatz der Exergie und die Gleichung nach Brode eingesetzt.

8.2.1 TNT Äquivalenzmodell

Die beim Bersten eines Druckgerätes, das ausschließlich mit komprimiertem Gas gefüllt ist, freigesetzte Energie lässt sich nach [8.36] durch folgende Beziehungen abschätzen:

$$E = f_E p_i V \left[ln \frac{P_i}{P_u} - 1 + \frac{P_u}{P_i} \right]$$
(8.26)

Der Anteil der freigesetzten Energie, der zum Druckaufbau zur Verfügung steht, wird in [8.36] mit $f_E = 0,6$ und in [8.37] mit 0,5 angesetzt. Im Abstand r_s um das Druckgerät baut sich eine Stoßwelle mit dem Druck P_s auf.

$$r_{s} = \left[\frac{E}{12P_{u}}\right]^{0.33}; P_{s} = P_{u} \frac{2Ma^{2}\kappa_{L} - \kappa_{L} + 1}{\kappa_{L} + 1}$$

$$Ma = \frac{\sqrt{\frac{2\kappa_{G}}{\kappa_{G} - 1}R_{G}T_{i}}}{\sqrt{\kappa_{L}R_{L}T_{u}}}$$
(8.27)

Die Abnahme des Drucks in der Stoßwelle erfolgt mit einem TNT-Ansatz.

$$\Delta P = f_{p} P_{u} \left[7 \frac{q}{r^{3}} + 2, 7 \frac{q^{0.66}}{r^{2}} + 0, 84 \frac{q^{0.33}}{r} \right]; q = \frac{E}{4, 3*10^{6} \text{ J}}$$

$$f_{p} = \frac{P_{s} - P_{u}}{P_{u} \left[7 \frac{q}{r_{s}^{3}} + 2, 7 \frac{q^{0.66}}{r_{s}^{2}} + 0, 84 \frac{q^{0.33}}{r_{s}} \right]}$$
(8.28)

Die Formelzeichen bedeuten:

P _i [Pa]	Druck beim Bersten des Druckgerätes
P _u [Pa]	Umgebungsdruck
P _s [Pa]	maximaler Druck in der Stoßwelle
ΔP [Pa]	Überdruck in der Stoßwelle (P-P _u)
V [m³]	Volumen des Druckgerätes
f _E [-]	Anteil der freigesetzten Energie, der zum Druckaufbau zur
	Verfügung steht
fp [-]	Anpassungsfaktor
E [J]	Freigesetzten Energie, die zum Druckaufbau zur Verfügung
	steht
κ _G , κ _L [-]	Isentropenexponenten des Gases und der Luft
Ma [-]	Machzahl
R _G , R _L [J/(kg K)]	spez. Gaskonstanten des Gases im Druckgerät und der Luft
T _i , T _u [K]	Temperatur im Behälter und Umgebungstemperatur
r _s [m]	Abstand, in dem der maximale Druck der Stoßwelle auftritt

8.2.2 Baker

In [8.38] werden verschiedene Ansätze zur Berechnung der Auswirkungen eines Behälterbersten diskutiert und es wird dann auf das Verfahren von Baker [8.39], [8.40] zur Berechnung des Überdruckes beim Bersten eines Druckgerätes verwiesen.

Die in einem verdichteten Gas gespeicherte und für den Druckaufbau in der Umgebung zur Verfügung stehende Energie E_0 lässt sich wie folgt berechnen:

$$E_0 = \frac{\left(P_i - P_u\right)V}{\kappa_G - 1}$$
(8.29)

Befindet sich der Behälter in Bodennähe, so kann sich die Druckwelle nicht gleichmäßig in alle Richtungen ausbreiten. Dies wird durch einen Faktor 2 berücksichtigt.

$$E = 2E_0$$
 (8.30)

$$\overline{R} = r \left(\frac{P_u}{E}\right)^{0.33} ; \ \overline{P}_s = \frac{\Delta P}{P_u} - 1$$
(8.31)

und der Machzahl Ma

$$Ma^{2} = \frac{\kappa_{L} T_{u} M_{L}}{\kappa_{G} T_{i} M_{G}}$$
(8.32)

wird das Behältervolumen durch eine Halbkugel mit dem Radius r₀ idealisiert. Dieser Radius ist der Mindestabstand für die Berechnung des Explosionsüberdruckes.

$$\mathbf{r}_{0} = \left(\frac{3\,\mathrm{V}}{2\,\pi}\right)^{0.33}; \ \overline{\mathbf{R}}_{0} = \mathbf{r}_{0} \left(\frac{\mathbf{P}_{u}}{\mathrm{E}}\right)^{0.33}$$
 (8.33)

Der maximale Druck direkt neben dem Behälter P_{s0} (in der Entfernung r_0) ist deutlich geringer als der Druck im Behälter und wird aus folgender Beziehung iterativ berechnet:

$$\frac{P_{i}}{P_{u}} = \left(\frac{P_{s0}}{P_{u}}\right) \left[1 - \frac{Ma\left(\kappa_{G} - 1\right)\left(\frac{P_{s0}}{P_{u}} - 1\right)}{\sqrt{2\kappa_{L}\left(2\kappa_{L} + \left(\kappa_{L} + 1\right)\left(\frac{P_{s0}}{P_{u}} - 1\right)\right)}}\right]^{\frac{-2\kappa_{G}}{\kappa_{G} - 1}}$$
(8.34)

Die Formelzeichen bedeuten:

P _i [Pa]	Berstdruck des Druckgerätes
P _u [Pa]	Umgebungsdruck
P _{s0} [Pa]	maximale Druck direkt neben dem Behälter
V [m³]	Behältervolumen
κ _g	Isentropenexponent des Gases
κ _L	Isentropenexponent von Luft
T _i [K]	Gastemperatur beim Bersten
T _u [K]	Umgebungstemperatur
M _L [kg/kmol]	Molare Masse von Luft
M _G [kg/kmol]	Molare Masse des Gases im Druckgerät
r [m]	Entfernung zum Behälter
Ma [-]	Machzahl
E [J]	Freigesetzten Energie, die zum Druckaufbau zur Verfügung steht

In [8.38], [8.39] und [8.40] sind die von Baker entwickelten Diagramme enthalten, in denen die Abhängigkeiten des normierten Druckes und des normierten Impulses vom normierten Abstand dargestellt sind.

Um die Abnahme des Explosionsüberdruckes mit der Entfernung vom Behälter bestimmen zu können, werden der normierte Mindestabstand nach GI. (8.33) und der dazugehörige maximale Druck aus GI. (8.34) eingetragen. Damit wird die Druckkurve im Nahbereich festgelegt. Der dimensionslose Druck wird dann aus dieser Kurvenschar in Abhängigkeit vom dimensionslosen Abstand interpoliert.

Da die bisherigen Betrachtungen für einen idealisierten halbkugelförmigen Behälter durchgeführt worden sind, ist eine Anpassung an zylindrische oder kugelförmige Behälter, die oberirdisch aufgestellt sind, erforderlich. Hierzu werden der ermittelte Druck und der Impuls mit folgenden Faktoren multipliziert: Zylindrische Behälter:

\overline{R}	Faktor Ps	Faktor I
< 0,3	4	2
\geq 0,3 \leq 1,6	1,6	1,1
< 1,6 ≤ 3,5	1,6	1,0
> 3,5	1,4	1,0

Kugelförmige Behälter:

\overline{R}	Faktor Ps	Faktor I
< 1	2	1,6
≥ 1	1,1	1,0

In [8.41] werden die in den folgenden Tabellen angegebene Beziehungen zur Berechnung des normierten Druckes und des normierten Impulses entsprechend der Diagramme von Baker für Explosivstoffe als obere Grenzkurven angegeben. Diese Beziehungen stellen somit im Nahbereich eine sehr konservative Abschätzung dar. In [8.38] wird hierzu empfohlen, dass das oben beschriebene Verfahren normierten Abständen von weniger als 2 verwendet werden sollte.

Zylindrische Behälter:

$0,1 \ge \overline{R} \ge 0,2$	$\overline{\mathbf{P}} = \frac{4,99}{\overline{\mathbf{R}}^{1,92}}$	$\overline{\mathbf{I}} = \frac{0,0328}{\overline{\mathbf{R}}^{1,97}}$
0,2 < <i>R</i> ≤ 1,5	$\overline{\mathbf{P}} = \frac{0,86}{\overline{\mathbf{R}}^{2,8}}$	$\overline{\mathbf{I}} = \frac{0,0634}{\overline{\mathbf{R}}^{1,39}}$
$1,5 < \overline{R} \le 1000$	$\overline{\mathbf{P}} = \frac{0,4}{\overline{\mathbf{R}}^{1,13}}$	$\overline{I} = \frac{0,0558}{\overline{R}^{1,04}}$

Kugelförmige Behälter:

$0,1 \ge \overline{R} \ge 0,2$	$\overline{\mathbf{P}} = \frac{1,25}{\overline{\mathbf{R}}^{1,92}}$	$\overline{\mathrm{I}} = \frac{0,0164}{\overline{\mathrm{R}}^{1,97}}$
0,2 < <i>R</i> ≤ 1,5	$\overline{\mathbf{P}} = \frac{0,58}{\overline{\mathbf{R}}^{2,39}}$	$\overline{I} = \frac{0,0622}{\overline{R}^{1,14}}$
1,5 < <i>R</i> ≤ 1000	$\overline{\mathbf{P}} = \frac{0,26}{\overline{\mathbf{R}}^{1,11}}$	$\overline{\mathbf{I}} = \frac{0,055}{\overline{\mathbf{R}}^{1,04}}$

8.2.3 Vergleichsrechnungen

In [8.44] sind die Messergebnisse für das Bersten von 1,5 m³ Behältern, die mit Stickstoff gefüllt waren, zusammengestellt. Die Berstdrücke der im Folgenden als Vergleichsmessungen herangezogenen Versuche betrugen:

Experiment	Berstdruck
1-1	102 bar
2-1, 2-2, 2-3	238 bar
1-4	491 bar

Es ist festzustellen, dass die oben beschriebenen Modelle im Allgemeinen zu große Explosionsüberdrücke berechnen und damit eine konservative Abschätzung ergeben. Der etwas unstetige Kurvenverlauf beim Modell von Baker kann auf die Ungenauigkeit der Datenübernahme aus dem Diagramm, in dem die Abhängigkeit des normierten Druckes vom normierten Abstand dargestellt ist, zurückgeführt werden.



Abb. 8.3: Maximaler Explosionsüberdruck in Abhängigkeit von der Entfernung für das Experiment 1-1 aus [8.44]I



Abb. 8.4: Maximaler Explosionsüberdruck in Abhängigkeit von der Entfernung für die Experimente 2-1 bis 2-3 aus [8.44]I



Abb. 8.5: Maximaler Explosionsüberdruck in Abhängigkeit von der Entfernung für das Experiment 1-4 aus [8.44]I

8.3 BLEVE

Ein BLEVE (Boiling Liquid Expanding Vapour Explosion) ist die explosionsartige Verdampfung eines brennbaren oder nicht brennbaren Stoffes durch die spontane Freisetzung aus einem Behälter. Hierbei sind die Temperatur des Stoffes oberhalb der Siedetemperatur und der Druck dem entsprechend größer als der Umgebungsdruck. Handelt es sich um einen brennbaren Stoff in einem unterfeuerten Behälter, so kommt es zu einem Feuerball.

Bevor der Behälter birst, befindet sich die Flüssigphase mit der Gasphase im thermodynamischen Gleichgewicht. Beim Aufreißen des Behälters entweicht die unter dem Dampfdruck – entsprechend der Flüssigkeitstemperatur - stehende Gasphase und der Druck fällt sehr schnell. Das thermodynamische Gleichgewicht liegt somit nicht mehr vor und die überhitzte Flüssigkeit verdampft an den Grenzflächen Gas-Flüssigkeit und Gas-Behälterwand (Blasenbildung). Überschreitet die Bersttemperatur die maximale Überhitzungstemperatur, die im Bereich von ca. 89 % der kritischen Temperatur liegt, so kommt es zur Bildung mikroskopischer Blasen innerhalb der Flüssigkeit die schnell anwachsen und zu einer explosionsartigen Verdampfung der Flüssigkeit mit entsprechender Energiefreisetzung führen. Bei Kohlendioxid ist aufgrund mehrerer Explosionen bekannt, dass es auch bei Temperaturen unterhalb der maximalen Überhitzungstemperatur zum BLEVE kommen kann. Dies wird darauf zurückgeführt, dass sich bei der Entspannung Trockeneis bildet und damit Kristallisationskeime für die Blasenbildung vorhanden sind, was dann zur Flash-Verdampfung führt [8.38].

Für die Bestimmung der bei der spontanen Verdampfung freigesetzten Energie wird in [8.28] ein Berechnungsverfahren verwendet, das auf der Bestimmung der spezifische inneren Energie aus den Enthalpien der Flüssig- und Gasphase basiert. Prugh [8.42] hat ein einfaches Berechnungsverfahren entwickelt, das eher eine konservative Abschätzung ergibt [8.43].

Die beim BLEVE freigesetzte Energie lässt sich mit den zum Zeitpunkt des Behälterberstens vorliegenden gasförmigen und flüssigen Massen bzw. Volumina berechnen, wobei zur Berücksichtigung der Reflexion von Stoßwellen am Boden die Energie verdoppelt wird.

$$E = 2 \left(\frac{\left(P_{i} - P_{u}\right)V^{*}}{\kappa_{G} - 1} \right) \left(1 - \left(\frac{P_{u}}{P_{i}}\right)^{\frac{\kappa_{G} - 1}{\kappa_{G}}} \right)$$

$$V^{*} = V_{g} - V_{fi} x_{fla} \left(\frac{\rho_{fl}}{\rho_{g}} \right)$$

$$x_{fla} = 1 - e^{-2.63a}$$

$$a = \frac{c_{pm} \left(T_{k} - T_{s}\right)}{h_{vm}} \left(1 - \left(\frac{T_{k} - T}{T_{k} - T_{s}}\right) \right)^{0.38}$$
(8.35)

Die Bestimmung des Explosionsüberdruckes in Abhängigkeit von der Entfernung erfolgt mit dem im Kapitel 6.1.2 dargestellten Verfahren. Für Entfernungen von

$$\overline{\mathsf{R}} = \mathsf{r} \left[\frac{\mathsf{p}_{u}}{\mathsf{E}} \right]^{\frac{1}{3}} > 2 \tag{8.36}$$

sind die zu erwartenden maximalen Explosionsüberdrücke bei einem BLEVE mit denen einer Sprengstoffexplosion gut zu vergleichen. Bei kleineren Entfernungen werden die maximalen Explosionsüberdrücke mit diesem Verfahren überschätzt [8.38].

E _{ex} [J	Freigesetzten Energie, die zum Druckaufbau zur Verfügung steht
V _{fl} [m³]	Volumen der Flüssigphase
V _g [m³]	Volumen der Gasphase
P _u [Pa]	Umgebungsdruck
P _i [Pa]	Berstdruck
h _{vm} [J/kg]	Mittlere Verdampfungsenthalpie zwischen Berst- und
	Siedetemperatur
c _{pm} [J/kg K]	Mittlere Wärmekapazität der Flüssigphase zwischen Berst- und
	Siedetemperatur
T _{fl} [K]	Temperatur beim Besten
T _s [K]	Siedetemperatur
T _k [K]	kritische Temperatur
X _{fla} [-]	Flash-Anteil
κ _g	Isentropenexponent des Gases
κ _L	Isentropenexponent von Luft

Die Formelzeichen bedeuten:

ρ _{fl} [kg/m³]	Dichte der Flüssigkeit
ρ _g [kg/m³]	Dichte des Gases

8.3.1 Feuerball

In [8.38] sind mehrere Modelle zur Berechnung des Feuerballdurchmessers und der Branddauer zusammengestellt. Alle Modelle haben den folgenden Aufbau:

$$D_{fb} = a m^{b}$$

$$t_{fb} = c m^{e}$$
(8.37)

In [8.38] wird die Anwendung der Formulierung von Roberts u.a. empfohlen:

a = 5,80; b = 0,333 c = 0,45; e = 0,333 für m < 30000 kg c = 2,60; e = 0,166 für m \geq 30000 kg

Die Formelzeichen bedeuten:

D _{fb} [m]	Durchmesser des Feuerballs
t _{fb} [s	Branddauer des Feuerballs
a, b, c, e	Modellkonstanten
m [Kg]	Gasmasse im Behälter

8.4 Trümmerwurf

8.4.1 Empirisches Modell

Im Bericht [8.56] zum UBA Forschungsvorhaben "Ermittlung und Berechnung von Störfallablaufszenarien nach Maßgabe der 3. Störfallverwaltungsvorschrift" wird vom TÜV Rheinland folgendes Modell zur Bestimmung der maximalen Flugweite vorgestellt.

Die Anfangsgeschwindigkeit eines Behälterfragmentes berechnet sich aus dem Durchmesser und der Masse des Fragmentes

$$v_{i} = 396 \sqrt{\frac{\left(\frac{p}{p_{u}} - 1\right)D_{T}^{3}}{m_{T}}}$$
 (8.38)

Zur Abschätzung der maximalen Flugweite R_w wird zunächst eine normierte Geschwindigkeit und Entfernung berechnet

$$\overline{u} = 0.1143 \frac{D_{\rm T}^2}{m_{\rm T}} v_{\rm i}^2$$
(8.39)

 $\ln \overline{R} \cong -0,1852 + 0,9650 \ln \overline{u} \qquad 0,004 \le \overline{u} \le 0,3$ $\ln \overline{R} \cong -0,3567 + 0,7162 \ln \overline{u} - 0,08173 \ln^2 \overline{u} + 0,003873 \ln^3 \overline{u} \qquad 0,3 \le \overline{u} \le 1000$ (8.40)

Die maximale Flugweite wird aus der normierten Entfernung berechnet.

$$\mathbf{R}_{w} = 0,892 \frac{\mathbf{m}_{\mathrm{T}}}{\mathbf{D}_{\mathrm{T}}^{2}} \overline{\mathbf{R}}$$
(8.41)

Die Formelzeichen bedeuten:

D _T [m]	Durchmesser des Fragmentes
m⊤ [kg]	Masse des Fragmentes
p [Pa]	Berstdruck
p _u [Pa]	Umgebungsdruck
v _i [m/s]	Anfangsgeschwindigkeit eines Behälterfragmentes
ū[–]	normierte Geschwindigkeit
R [-]	normierte Entfernung
R _w [m]	maximale Flugweite des Fragmentes

8.4.2 Integralmodell

Das Problem des schnellen Fluges beliebiger Körper durch Luft kann allgemein als schiefer Wurf mit Newton-Reibung aufgefasst werden. Ein durch die Luft fliegender Körper z. B. eine Platte mit kreisförmigen Querschnitt besitzt zwei sehr unterschiedliche Querschnittsflächen A_x und A_y bzw. Widerstandsbeiwerte c_x und c_y (Abbildung 8.6). Ausgehend von der Annahme, dass die Platte um die z-Achse rotiert, ergibt sich ein zeitabhängiger Winkel β zur Horizontalen. Die größte Flugweite ergibt sich, wenn der Strömungswiderstand am geringsten ist und der Winkel β der Flugrichtung entspricht. Wird eine Rotation vorausgesetzt, so reduziert sich die Flugweite.



Abb. 8.6:Skizze einer, mit der Geschwindigkeit v durch die Luft fliegende Platte mit der
Neigung β zur Horizontalen (aus [8.48])

Die Bewegungsgleichungen für einen rotierenden Körper in Luft lauten [8.48]:

$$m\ddot{x} + 0.5 \rho(c_x A_x \cos^2 \beta + c_y A_y \sin^2 \beta) \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2} \dot{x} = 0$$

(8.42)
$$m\ddot{y} + 0.5 \rho(c_x A_x \sin^2 \beta + c_y A_y \cos^2 \beta) \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2} \dot{y} = -mg$$

Diese Differentialgleichungen können mit einem Runge-Kutta-Verfahren gelöst werden. Es müssen hierbei nur die Anfangsbedingungen für den Startpunkt, die Startgeschwindigkeit und der Startwinkel festgelegt werden. Für die Berechnung der Trümmerflugbahn mit maximaler Reichweite beträgt der optimale Startwinkel

$$\alpha = \arccos\left(\frac{\sqrt{2(v_{\text{Start}}^4 + 3v_{\text{Start}}^2 h_{\text{max}}g + 2h_{\text{max}}^2g^2)}}{2(v_{\text{Start}}^2 + h_{\text{max}}g)}\right)$$
(8.43)

Bei einem ausschließlich mit Gasphase gefüllten Behälter kann die Startgeschwindigkeit mit den Ansätzen von Baum [8.49], [8.50], [8.51] berechnet werden. Liegt ein druckverflüssigtes Gas vor, so sollte die Berechnung mit dem Modell nach [8.38], [8.4] erfolgen.

Beim Bersten eines Behälters sind die freigesetzten Energien relativ gering und es ist mit einer geringen Anzahl von Fragmenten zu rechnen [8.50]. Experimentelle Untersuchungen zeigen, dass als Bruchstücke des Behälters die Behälterböden, Teile des abgewickelten Behältermantels, evtl. Schwallbleche und Kleinteile wie Rohrleitungen zu erwarten sind [8.52] bis [8.54]. Um die Berechnung der Flugbahn durchführen zu können, müssen aber plausible Annahmen über die Querschnittsflächen und die Widerstandsbeiwerte getroffen werden. Für einige Geometrien sind Widerstandsbeiwerte in der Literatur zu finden (z.B. [8.38], [8.55]).

́ ѫ , ӱ [m/s²]	Beschleunigung in waagerechter und senkrechter Richtung
х, ý [m/s]	Geschwindigkeiten in waagerechter und senkrechter Richtung
ρ [kg/m³]	Dichte der Luft
m [kg]	Masse des Trümmerstückes
C _x , C _y [-]	Widerstandsbeiwerte des umströmten Trümmerstückes
A _x , A _y [m ²]	Querschnittsflächen

Die Formelzeichen bedeuten:

g [m/s²]	Erdbeschleunigung
h _{max} [m]	höchste Punkt des berstenden Behälters
β [°]	Winkel des Trümmerstückes gegenüber der Horizontalen
v _{Start} [m/s]	Startgeschwindigkeit des Trümmerstückes
α [°]	Startwinkel des Trümmerstückes gegenüber der Horizontalen

8.4.3 Bewertung der Auswirkungen

In [8.56] sind Ansätze zur Bewertung des Schadens beim Auftreffen des Trümmerstückes auf einen Behälter oder ein Gebäude zusammengestellt. Hierbei bestehen aber die Probleme

- die auftreffende Fläche des Trümmerstückes festzulegen und
- die auftreffende Fläche des Trümmerstückes in einen äquivalenten Durchmesser eines Projektils umzurechnen.

8.5 Quellenverzeichnis

- [8.1] DIN EN 13237: Explosionsgefährdete Bereiche Begriffe für Geräte und Schutzsysteme zur Verwendung in explosionsgefährdeten Bereichen. 01/2013
- [8.2] Giesbrecht, Hess, Leuckel und Maurer: Analyse der potentiellen Explosionsauswirkung von kurzzeitig in die Atmosphäre freigesetzten Brenngasmengen, Teil I, Chem.-Ing.-Tech 52 (1980), Nr. 2, S. 114-122
- [8.3] Giesbrecht, Hemmer, Hess, Leuckel und Stoeckel: Analyse der potentiellen Explosionsauswirkung von kurzzeitig in die Atmosphäre freigesetzten Brenngasmengen, Teil II, Chem.-Ing.-Tech 53 (1981), Nr. 1, S. 1-10
- [8.4] CPR 14E; Methods for calculation of physical effects (Yellow Book); Committee for the Prevention of Disasters, The Hague (2005)
- [8.5] Guidelines for Chemical Process Quantative Risk Analysis, Second Edition, Center for Chemical Process Safety (CCPS), AIChE, New York
- [8.6] S.M. Kogarko, V.V. Aduskin, A.G. Lyamin; An investigation of sperical detonations of gas mixtures. Int. Chem. Eng., 6 (1966)
- [8.7] B. J. Wiekema; Vapour cloud explosion model. Journal of Harzardous Materials, 3 (1980)
- [8.8] A.C. van den Berg. A framework for vapour cloud explosion blast prediction. Journal of Hazardous Materials. 12 (1985), 1-10.

- [8.9] K.G. Kinsella. A rapid assessment methodology for the prediction of vapour cloud explosion overpressure. Proceedings of the International Conference and Exhibition on Safety, Health and Loss Prevention in the Oil, Chemical and Process Industries, Singapore.
- [8.10] J.B.M.M. Eggen: GAME: development of guidance for the application of the multienergy method. HSE Contract research report 202/1998
- [8.11] R.A. Strehlow, R.T. Luckritz, A.A. Adamczyk, S.A. Shimp: The Blast Wave Generation By Spherical Flames. Combustion and Flame, 35, 297-310, 1979
- [8.12] M.J. Tang, Q.A. Baker: A New Set of Blast Curves from Vapor Cloud Explosion.Process Safety Progress, Vol. 18, No. 3, 235-240, 1999
- [8.13] Puttock, J.S.: Fuel gas explosion guidelines the Congestion Assessment Method. Second European Conference on Major Hazards Onshore and Offshore.
 267. IChemE Symposium Series no. 139. (1995)
- [8.14] Puttock, J.S.: Improvements in Guidelines for Prediction of Vapour-Cloud Explosions. International Conference and Workshop on Modeling the Consequences of Accidential Releases of Hazardous Materials. S. 541 -569.(1999)
- [8.15] W.P.M. Mercx, D.M. Johnson, J.S.Puttock: Validation of scaling techniques for experimental vapour cloud explosion investigations. Process Safety Progress, 14 (1995)
- [8.16] Puttock, J.S.; Yardley, M.R.; Cresswell, T.M.: Prediction of vapour cloud explosions using the SCOPE model. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 13. S. 419-431. (2000)
- [8.17] van Wingerden, K., Storvik, I., Arntzen, B.J., Teigland, R., Bakke, J.R., Sand, I.O., & Sorheim, H.R. (1993). FLACS-93, a new explosion simulator. 2nd International Conference on Offshore Structural Design against Extreme Loads, London.
- [8.18] P. Middha, O. R. Hansen, J. Grune, A. Kotchourko: CFD calculations of gas leak dispersion and subsequent gas explosions: Validation against ignited impinging hydrogen jet experiments. Journal of Hazardous Materials 179 (2010) 84–94
- [8.19] B.H. Hjertager, S. Enggrav, J.E. Forrisdahl, T. Solberg: A case study of gas explosions in a process plant using a threedimensional computer code. Guidelines for evaluating consequences of fires and explosions from vapor clouds and BLEVE's. AIChE Center for Chemical Process Safety. (1991)
- [8.20] A.C. van den Berg, H.G. The, W.P.M. Mercx, Y. Mouilleau,C.J. Hayhurst: AutoReaGas-a CFD tool for gas explosion hazard analysis. In: Loss Prevention

and Safety Promotion in the Process Industries, 1, S. 349. (1995). Eds. J.J. Mewis, M.J. Pasman, E.F. de Rademaker, UK.

- [8.21] X. Wen, M. Yu, Z. Liu, W. Sun: Large eddy simulation of methaneeair deflagration in an obstructed chamber using different combustion models. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 25, S. 730-738 (2012)
- [8.22] S.M. Tauseef, D. Rashtchian, T. Abbasi, S.A. Abbasi: A method for simulation of vapour cloud explosions based on computational fluid dynamics (CFD). Journal of Loss Prevention in the Process Industries 24, S. 638-647 (2011)
- [8.23] H.C. Goldwire u.a.: Coyote Series Data Report LLNL/NWC 1981 LNL Spill Tests
 Dispersion, Vapor Burn, and Rapid-Phase-Transition. Lawrence Livermore National Laboratory. UCID-19953. Vol. 1 + 2. (1983)
- [8.24] W.P.M. Mercx, A.C. van den Berg, C.J. Hayhurst, N.J. Robertson, K.C. Moran: Developments in vapour cloud explosion blast Modeling. Journal of Hazardous Materials 71. S. 301–319, (2000)
- [8.25] W.P.M. Mercx, A.C. van den Berg, D. van Leeuwen: Application of correlations to quantify the source strength of vapour cloud explosions in realistic situations. Final report for the project: 'GAMES': TNO Report PML 1998-C53
- [8.26] Gecon: Experimental Investigation of the Effect of Flexible Obstructions on Flame Propagation in Vapour Cloud Explosions. GexCon-08-F44110-RA-1 (2009)
- [8.27] C. J. Butler, M. Royle: Experimental data acquisiton for validation of a new vapour cloud fire (VCF) modelling approach. HSL/2001/15
- [8.28] A.C. van den Berg, A.L. Mos: Research to improve guidance on separation distance for the multi-energy method (RIGOS). HSL RESEARCH REPORT 369, (2005)
- [8.29] B.J. Lowesmith, G. Hankinson, D.M. Johnson: Vapour cloud explosions in a long congested region involving methane/hydrogen mixtures. Process Safety and Environmental Protection 89, S. 234–247 (2011)
- [8.30] A.J. Harrison, J.A. Eyre: The effect of obstacle arrays on the combustion of large premixed gas/air clouds. Combust. Sci. and Tech. 52, S. 121-137 (1987)
- [8.31] R.F. Cracknell, A.J. Carsley: Cloud fires a methodology for hazard consequence modelling. ICHEME SYMPOSIUM SERIES NO. 141 (Hazards XIII), S. 139 (1997)
- [8.32] G. A. Chamberlain. Development in design methods for prediction thermal radiation from flares. Chem. Eng. Res. Des. Vol. 65 (1987)
- [8.33] P.A. Rodean, u.a.: Vapour Burn Analysis for the Coyote Series LNG Spill Experiments. Lawrence Livermore National Laboratory. UCRL-53530. (1984)
- [8.34] S.M. Hockey, P.J. Rew: Review of human response to thermal radiation. HSE Contract Research Report No. 97/1996
- [8.35] G.A. Mizner; J.A. Eyre: Radiation from liquefied Gas fires on Water. Combustion Science Technology, Vol. 35 (1983) S. 33-57
- [8.36] S. Bussenius: Abschätzung der Schadenfolgen als Grundlage für die Festlegung von Schutzmaßnahmen. Schadensprisma 4/92. S. 64-68
- [8.37] B. Vanderstraeten, M. Lefebvre, J. Berghmans: A simple blast wave model for bursting spheres based onnumerical simulation. Journal of Hazardous Materials 46, S. 145-157 (1996)
- [8.38] American Institute of Chemical Engineers, Center for Chemical Process Safety. Guidline for Evaluation the Characteristics of Vapor Cloud Explosions, Flash Fires, and BLEVEs. 1994
- [8.39] W. E. Baker. Explosions in Air. Austin: University of Texas Press. 1973
- [8.40] W.E. Baker, J.J. Kulesz, R.E. Ricker, R.L. Bessey, P.S. Westine, V.B. Parr, and G.A. Oldham, Workbook for predicting pressure wave and fragment effects of exploding propellant tanks and gas storage vessels, NASA CR-134906, NASA Scientific and Technical Information Office, Washington, DC (1977).
- [8.41] E. G. Ferradas, F. D. Alonso, J. F. S. Perez, A. M. Aznar, J. R. Gimeno, J. M. Alonso: Characteristic Overpressure– Impulse–Distance Curves for Vessel Burst. Process Safety Progress, Vol.25, No.3, S: 250-254 (2006)
- [8.42] R.W. Prugh: Quantify BLEVE hazards. Chemical Engineering Progress, 87/2, S.66-71 (1991)
- [8.43] E. Planas-Cuchi, J.M. Salla, J. Casal: Calculatiing overpressure from BLEVE explosions. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 17 (2004), 431-436
- [8.44] M.R. Cain: Pressure Vessel Burst Test Study, (1996)
- [8.45] U.S. DEPARTMENT OF COMMERCE: NOAA Technical Memorandum NOS OR&R 43; ALOHA® (AREAL LOCATIONS OF HAZARDOUSATMOSPHERES) 5.4.4; TECHNICAL DOCUMENTATION (2013)
- [8.46] Federal Emergency Management Agency: HANDBOOK OF CHEMICAL HAZARD ANALYSIS PROCEDURES (1989)
- [8.47] M. Almustafa, M. H. M. Abuuznien, I. A. Ibrahim: Estimation of Blast over Pressures of Possible Explosion in a Furnace in Khartoum Refinery by Using MATLAB Software. Journal of Applied and Industrial Sciences, 2 (4): S. 181-187 (2014)

- [8.48] D. S. Trümmerflug Lorenz, Radandt. in der Umgebung von Staubexplosionsherden Vergleich zwischen Modellrechnung und Explosionsereignissen. VDI Berichte Nr. 1272, 1996
- [8.49] M. R. Baum. The velocity of large missiles resulting from axial rupture of gas pressurised cylindrical vessels. J. Loss. Prev. Process Ind., Vol.14, S. 199-203, (2001)
- [8.50] M. R. Baum. Velocity of a single small missile ejected from a vessel containing high pressure gas. J. Loss. Prev. Process Ind., Vol.6, No.4, S. 251-264, (1993)
- [8.51] M. R. Baum. Failure of horizontal pressure vessel containing a high temperature liquid: the velocity of end-cap and rocket missiles. J. Loss. Prev. Process Ind., Vol.12, S. 137-145, (1999)
- [8.52] B. Droste, E. Ahlhorn. Instrumentierte Brandversuche mit Flüssiggas Lagertanks. Bundesanstalt für Materialprüfung, Bericht Nr. 1.53-01[84
- [8.53] J. Ludwig, W. Heller. Brandversuch mit einem Propankesselwagen. Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Versuchsbericht III.2/9907
- [8.54] J. Ludwig, Ch. Balke. Untersuchung der Versagensgrenzen eines mit Flüssiggas gefüllten Eisenbahnkesselwagens bei Unterfeuerung. Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung, Abschlußbericht. 1999
- [8.55] Kuchling; Taschenbuch der Physik; Fachbuchverlag Leipzig-Köln, 1994
- [8.56] UBA Bericht "Ermittlung und Berechnung von Störfallablaufszenarien nach Maßgabe der 3. Störfallverwaltungsvorschrift"; Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 204 09 428
- [8.57] A. Beard, I.G. Lines: Development of a Software Model for Missile Impact Damage – Final Report. HSE No. 90/1996
- [8.58] A. Pekalski, J. Puttock, S. Chynoweth: Deflagration to detonation transition in a vapour cloud explosion in open but congested space: Large scale test. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 36 (2015) S 365-370

9 Beurteilungswerte für störungsbedingte Expositionen

9.1 Luftgetragene Schadstoffe

9.1.1 ERPG- und AEGL-Werte

Für die Beurteilung einer kurzzeitigen Exposition der Allgemeinbevölkerung sind mehrere Werte entwickelt worden [9.1], [9.2]. Bei Auswirkungsbetrachtungen im Rahmen der Störfall-Verordnung werden meistens ERPG- oder AEGL-Werte herangezogen.

Der Arbeitskreis Schadstoffe (Luft) der SFK hat untersucht, welche Beurteilungswerte im Rahmen von Auswirkungsbetrachtungen bei toxischen Gasen herangezogen werden können. Dabei hat er die Begriffe "Störfall" und "Ernste Gefahr" nach der Störfall-Verordnung zugrunde gelegt. Im Leitfaden SFK-GS-28 "Konzept zur Begründung der Konzentrationsleitweite im Störfall des Arbeitskreises Schadstoffe (Luft) der SFK" [9.3] werden drei Konzepte diskutiert:

- das ERPG-Konzept (Emergency Response Planning Guidelines),
- das AEGL-Konzept (Acute Exposure Guideline Levels) und
- das EEI-Konzept (Emergency Exposure Indices) [9.4].

Die genannten Ansätze gehen bezüglich der Auswirkungen einer Schadstoffexposition von vier Wirkungskategorien mit zugeordneten Konzentrationsbereichen aus, die durch drei Konzentrationsschwellen voneinander abzugrenzen sind:

- Bereich erster sensorischer Effekte (Wahrnehmbarkeit),
- Bereich nachteiliger, aber reversibler gesundheitlicher Auswirkungen (Belästigung),
- Bereich erster irreversibler oder schwerwiegender gesundheitlicher Auswirkungen oder einer Beeinträchtigung der Fluchtmöglichkeit,
- Bereich lebensbedrohlicher Auswirkungen und tödlich verlaufender Vergiftungen.

Diese Einteilung ist z. B. bei der Definition der AEGL-Werte wieder zu finden:

AEGL-1 ist die luftgetragene Stoff-Konzentration (ausgedrückt in ppm oder mg/m³), bei deren Überschreiten die allgemeine Bevölkerung einschließlich empfindlicher Personen **ein spürbares Unwohlsein erleiden** kann⁶. Luftgetragene Stoff-Konzentrationen unterhalb des AEGL-1-Wertes bedeuten Expositionshöhen, die leichte Geruchs-, Geschmacks- oder andere sensorische Reizungen hervorrufen können.

AEGL-2 ist die luftgetragene Stoff-Konzentration (ausgedrückt in ppm oder mg/m³), bei deren Überschreiten die allgemeine Bevölkerung einschließlich empfindlicher Personen **irreversible oder andere schwerwiegende, lang andauernde Gesundheitseffekte erleiden kann** oder bei denen die Fähigkeit zur Flucht beeinträchtigt sein kann. Luftgetragene Stoff-Konzentrationen unterhalb des AEGL-2- aber oberhalb des AEGL-1-Wertes bedeuten Expositionshöhen, die spürbares Unwohlsein hervorrufen können.

AEGL-3 ist die luftgetragene Stoff-Konzentration (ausgedrückt in ppm oder mg/m³), bei deren Überschreiten die allgemeine Bevölkerung einschließlich empfindlicher Personen **Iebensbedrohliche oder tödliche Gesundheitseffekte erleiden kann**. Luftgetragene Stoff-Konzentrationen unterhalb des AEGL-3- aber oberhalb des AEGL-2-Wertes bedeuten Expositionshöhen, die irreversible oder andere schwerwiegende, lang andauernde Gesundheitseffekte hervorrufen oder die Fähigkeit zur Flucht beeinträchtigen können.

Während die ERPG-Werte für eine Expositionsdauer von einer Stunde ermittelt worden sind, sind die AEGL-Werte für fünf Expositionszeiträume von 10 Minuten, 30 Minuten, 1 Stunde, 4 Stunden und 8 Stunden festgelegt worden. Diese zeitliche Differenzierung ermöglicht eine bessere Beurteilung der meist zeitlich begrenzten Auswirkungen eines Störfalls. Eine Extrapolation auf Expositionszeiträume außerhalb der genannten Werte (< 10 Minuten, > 8 Stunden) ist im AEGL-Konzept nicht vorgesehen und ohne eine toxikologische Begutachtung nicht zu empfehlen.

Ein weiterer Unterschied zwischen den beiden Konzepten ERPG / AEGL ist die zu schützende Zielgruppe. Bei den AEGL-Werten soll nicht nur die allgemeine Bevölkerung, sondern auch empfindliche Personen geschützt werden. Es ist aber festzustellen, dass nicht für alle Stoffe die ERPG-Werte größer sind, als die entsprechenden AEGL-Werte.

⁶ Die Formulierung ist so zu verstehen, dass davon auszugehen ist, dass der jeweilige Effekt nach Überschreitung der Schwelle bei den empfindlicheren Individuen der Bezugsgruppe eintreten kann. Unterhalb der Schwelle ist auch bei empfindlichen Individuen der Bezugsgruppe nicht davon auszugehen, dass der Effekt eintritt.

Parallel zu den ERPG-/AEGL-Werten hat der Europäische Chemieverband das EEI-Konzept entwickelt. Die Konzepte sind kompatibel und so entspricht die Definition der EEI-Werte im Grunde genommen den AEGL-Werten. Der Leitfaden SFK-GS-28 kommt abschließend zu der Aussage, dass das AEGL-/EEI-Konzept als wissenschaftlich ausgewogener zu betrachten ist, als das ERPG-Konzept.

Nach der Empfehlung des Leitfadens KAS-18 [9.5] ist für eine Berechnung zur Bauleitplanung der ERPG-Wert zu verwenden. Die Entscheidung zugunsten der ERPG-Werte ergab sich aus der Tatsache, dass zum Zeitpunkt der Erarbeitung der ersten Fassung des Leitfadens (SFK/TAA-GS-1) im Jahr 2001 mehr ERPG-Werte als AEGL-Werte vorlagen. Darüber hinaus war für die damalige Zielrichtung der Bauleitplanung ohne Detailkenntnisse über die Anlage die Betrachtung einer festen Expositionsdauer von einer Stunde ausreichend. Heute wird der Leitfaden überwiegend für die Beurteilung bestehender Situationen, meistens in Gemengelagen, eingesetzt. Da die vorhandenen störfallbegrenzenden Maßnahmen bei den Szenarien berücksichtigt werden können, ist eine zeitliche Staffelung der Beurteilungswerte sinnvoll.

Im Anhang 4 des Leitfadens KAS-18 werden die heranzuziehenden Beurteilungswerte diskutiert. Aus der Analyse der Begriffsidentitäten von Störfall-Verordnung und ERPG-Definition wird dann geschlossen, dass die Beeinträchtigung einer großen Anzahl von Menschen i. S. des § 2 Nr. 4 b Störfall-Verordnung für die Auswahl des relevanten Konzentrationsleitwertes maßgeblich ist. Damit ergibt sich eine weitgehende Definitionsüberschneidung mit dem Schweregrad 2 der AEGL- bzw. ERPG-Werte. Der ERPG-3-Wert markiert die Schwelle der lebensbedrohenden gesundheitlichen Auswirkungen, die nach § 2 Nr. 4 a Störfall-Verordnung für einen einzelnen Menschen maßgeblich ist.

Daraus resultiert, dass im Geltungsbereich der Störfall-Verordnung für die Festlegung von gefährdeten Bereichen auf der Grundlage der toxischen Auswirkungen einer luftgetragenen Stofffreisetzung der Schweregrad 2 der AEGL- bzw. ERPG-Werte herangezogen wird. Dies entspricht auch der Anforderung der TRBS 3146 "Ortsfeste Druckanlagen für Gase" zur Bestimmung des Sicherheitsabstandes.

Für den Fall, dass für einen Gefahrstoff weder ein AEGL-Wert noch ein ERPG-Wert abgeleitet wurde, besteht die Möglichkeit, auf den TEEL-Wert zurückzugreifen. TEEL-Werte (Temporary Emergency Exposure Limits) werden vom US Department of Energy (DOE) gemeinsam mit den AEGL- und ERPG-Werten in der PAC-Liste (Protective Action Criteria (PAC)) veröffentlicht [9.6]. Die Werte beziehen sich auf eine Expositionsdauer von einer

Stunde und werden in folgender Reihenfolge aus bekannten Werten zusammengestellt: AEGL-Werte, ERPG-Werte, TEEL-Werte.

Der Ableitung der TEEL-Werte liegen verschiedene Methoden zu Grunde. Sie sind meistens nicht direkt aus toxikologischen Studien abgeleitet. Die TEEL-Werte können unter anderem auf Arbeitsplatzgrenzwerten, IDLH-Werten oder LC_{50} -, LD_{50} -, TC_{Lo} - oder TD_{Lo} - Werten basieren. Die zur Ableitung der TEEL-Werte verwendeten Methoden sind im DOE-Handbook beschrieben [9.53]. Ist auch der TEEL-Wert für einen Stoff nicht vorhanden, so kann eine Anfrage an das Department of Energy (DOE) mit der Bitte um Ermittlung dieses Wertes gerichtet werden [9.54].

Darüber hinaus besteht natürlich immer die Möglichkeit, in einem aufwändigen Verfahren einen Beurteilungswert für einen Stoff neu abzuleiten, indem bereits vorhandene Studien ausgewertet werden oder neue Studien durchgeführt werden.

Ein solches Verfahren kann jedoch nur von Fachleuten (Toxikologen) durchgeführt werden.

Bei Auswirkungsbetrachtungen im Rahmen der Störfall-Verordnung werden meistens die genannten Beurteilungswerte mit den berechneten maximalen Konzentrationen verglichen, um Gefährdungsbereiche festzulegen. Das bedeutet, dass z.B. bei einer Stofffreisetzung für die Zeitdauer von einer Minute die berechnete maximale Konzentration an einem Ort mit einer Konzentration vergleichen wird, die nach einer Zeitdauer von mind. 10 Minuten beim AEGL-Wert bzw. 60 Minuten bei einem ERPG-Wert vorliegen muss, um eine entsprechende Beeinträchtigung von Personen auszulösen. Dies führt bei Stoffen, deren Wirkung sowohl von der Konzentration als auch der Expositionsdauer abhängt, zu einer Überschätzung des Gefährdungsbereiches. Während der AEGL-Wert für eine Expositionsdauer von über 10 Minuten aus den vorliegenden Werten interpoliert werden kann, ist die Möglichkeit einer Extrapolation auf Zeiten kleiner 10 Minuten bisher durch Veröffentlichungen nicht belegt.

Nach [9.49] ist es in den meisten Fällen nicht möglich, Beurteilungswerte im Hinblick auf die letale Wirkung für eine Expositionsdauer von weniger als 10 Minuten abzuleiten. Als Gründe werden fehlende Daten, Schwierigkeiten bei der Erzeugung der entsprechenden Testatmosphäre (im Tierexperiment) aufgrund physikalisch-chemischer Stoffeigenschaften sowie eine zu große Unsicherheit bei der Extrapolation bzw. Modellierung ausgehend von Daten für relativ lange Expositionszeiten (> 60 min) genannt.

Nach der Gefahrstoffverordnung ist als Beurteilungswert für den Arbeitsschutz der Arbeitsplatzgrenzwert heranzuziehen, der für die zeitlich gewichtete durchschnittliche

Konzentration eines Stoffes in der Luft am Arbeitsplatz in Bezug auf einen gegebenen Referenzzeitraum bestimmt wird. Er gibt an, bei welcher Konzentration eines Stoffes akute oder chronische schädliche Auswirkungen auf die Gesundheit im Allgemeinen nicht zu erwarten sind. Die Arbeitsplatzgrenzwerte sind Schichtmittelwerte bei in der Regel täglich achtstündiger Exposition an 5 Tagen pro Woche während der Lebensarbeitszeit. Expositionsspitzen während einer Schicht werden entsprechend mit Kurzzeitwerten beurteilt [9.7].

Bei einer störungsbedingten Stofffreisetzung kann im Allgemeinen davon ausgegangen werden, dass die Freisetzungsdauer relativ kurz ist. Die o.g. Definition des Arbeitsplatzgrenzwertes mit dem Bezug auf die Lebensarbeitszeit macht deutlich, dass Beurteilungswerte für den Arbeitsschutz zur Beurteilung von kurzfristigen Stofffreisetzungen nicht geeignet sind.

9.1.2 Beurteilung von zeitabhängigen Konzentrationsverläufen

Bei druckverflüssigten Gasen ergibt sich während der Freisetzung aus der Flüssigphase ein hoher gasförmiger Massenstrom infolge der Flash-Verdampfung und Spray Bildung, der deutlich größer ist, als der Massenstrom aus der sich anschließenden deutlich länger dauernden Lachenverdampfung und –verdunstung. Hierdurch entsteht ein ausgeprägtes Maximum im Konzentrationsverlauf an einer Position in Lee der Quelle. In der Praxis wird zumeist der auftretende Maximalwert zum Vergleich mit einem AEGL- oder ERPG-Wert herangezogen, obwohl dieser Wert nur kurzfristig vorliegt.

Mit zunehmender Leistungsfähigkeit der Computer wird der Einsatz von komplexen Gasausbreitungsmodellen (CFD-Modelle) immer mehr möglich. Für die Berechnung von Gebäudeumströmungen sind nach Aussagen von Experten die Large-Eddy-Turbulenzmodelle am besten geeignet, da hiermit die sich an den Gebäudekanten bildenden Wirbel modelliert werden können. Problematisch ist die Beurteilung der Berechnungsergebnisse, da bei einer LES-Berechnung keine stationäre Lösung vorliegt, sondern an jedem Punkt im Raum – wie in der Realität – zeitlich schwankende Konzentrationen berechnet werden. Es ist dann erforderlich an jeder Position eine Dosis zu berechnen und mit den Beurteilungswerten in Beziehung zu setzen. Vom TÜV Rheinland wird in [9.8] für die Beurteilung einer zeitabhängigen Konzentrationsverteilung eine sogenannte Belastung B eingeführt:

$$B = \int_{t_{a}}^{t_{c}} w[c(t)]c(t) dt$$

$$c(t) < c_{s} : w[c(t)] = 0$$

$$c(t) \ge c_{s} : w[c(t)] = \frac{c(t) - c_{s}}{c_{R} - c_{s}}$$
(9.1)

Durch die Einführung der unteren Grenzkonzentration c_s , z.B. ein Arbeitsplatzgrenzwert, wird vermieden, dass eine geringe Konzentration über eine lange Expositionsdauer zu einer relevanten Dosis führt. Dieser Ansatz wird verwendet, wenn als Beurteilungswert der ERPG-Wert herangezogen werden soll. Die Referenzkonzentration c_R ist dann der ERPG-Wert und die Referenzdosis berechnet sich durch Multiplikation des ERPG-Wertes mit der Expositionsdauer von einer Stunde. Ist die berechnete Belastung größer als die Referenzdosis, so kann die dem ERPG-Wert entsprechende Beeinträchtigung von Personen nicht mehr ausgeschlossen werden.

Für viele Stoffe, für die AEGL-Werte veröffentlicht worden sind, lassen sich die Dosen durch folgende Funktion beschreiben:

$$c^n t = const$$
 (9.2)

Der Exponent n ist stoffspezifisch und liegt im Bereich von 0,8 bis 3,5 [9.9]. Bei einigen Stoffen findet sich dieser Zusammenhang in den AEGL-Werten nur in Teilbereichen, während in anderen Bereichen die Konzentration konstant für verschiede Expositionsdauern ist. Die Belastung wird für diese Stoffe dann wie folgt berechnet:

$$B = c_{R}^{n-1} \int_{t_{a}}^{t_{e}} w_{p} [c(t)]c(t) dt$$

$$c(t) < c_{s} : w_{p} [c(t)] = 0$$

$$c(t) \ge c_{s} : w_{p} [c(t)] = \left(\frac{c(t)}{c_{R}}\right)^{n-1}$$
(9.3)

Stage [9.9] führt für die Beurteilung zeitabhängiger Konzentrationsverläufe eine Vergleichsdosis ein:

$$D_{eq} = c_{k} t_{k} \left(\frac{t_{eff}}{t_{k}}\right)^{\alpha_{k}+1} t_{k} \le t_{eff} \le t_{k+1}$$

$$\alpha_{k} = \frac{\ln\left(\frac{c_{k+1} t_{k+1}}{c_{k} t_{k}}\right)}{\ln\left(\frac{t_{k+1}}{t_{k}}\right)} - 1 \quad k = 1, 4 ; \quad \alpha_{5} = \alpha_{4}$$

$$t_{eff} > 8 \text{ Stunden} : D_{eq} = c_{5} t_{5}$$

$$t_{eff} < 10 \text{Minuten} : \quad D_{eq} = c_{1} t_{1} \left(\frac{t_{eff}}{t_{1}}\right)^{\alpha_{1}+1}$$
(9.4)

Der Index k bezeichnet hierbei die Stufe der Expositionsdauer (k=1: 10 Minuten), die Konzentration c_k ist die Konzentration des AEGL-Wertes und t_k die dazugehörige Expositionsdauer. Die effektive Expositionsdauer t_{eff} wird aus der Dosis und der maximalen Konzentration an dem Ort berechnet.

$$t_{\rm eff} = \frac{\int_{a}^{t_{\rm e}} c(t) dt}{c_{\rm max}}$$
(9.5)

t

Ist die Dosis größer als die Vergleichsdosis, so kann eine Beeinträchtigung nicht ausgeschlossen werden.

Boris und Patnaik [9.10] ermitteln zu jeder mit dem Gasausbreitungsmodell berechneten Konzentration die Zeitdauer t_k , nach der bei dieser (konstanten) Konzentration die AEGL-Schwelle erreicht werden würde. Der Kehrwert wird dann als "Toxic Load rate" (TL_{rate}) bezeichnet.

$$TL_{rate} = \frac{1}{t_{k}} \left(\frac{c(t)}{c_{k}}\right)^{n_{k}} \qquad c_{1} \ge c(t) \ge c_{5}$$

$$TL_{rate} = \frac{1}{200} \qquad c(t) > c_{1}$$

$$TL_{rate} = \frac{1}{86400} \qquad c(t) < c_{5}$$

$$c_{k-1} \ne c_{k} : n_{k} = \frac{\log\left(\frac{t_{k}}{t_{k-1}}\right)}{\log\left(\frac{c_{k-1}}{c_{k}}\right)} \qquad k = 2,5$$

$$c_{k-1} = c_{k} : n_{k} = 0$$

$$n_{1} = n_{2} ; n_{6} = n_{5}$$

$$(9.6)$$

Mit der "Toxic Load" (TL) wird ein dimensionsloser Wert für die kumulierte Belastung berechnet. Die AEGL-Schwelle ist dann erreicht, wenn TL den Wert 1 erreicht hat.

$$TL = \int_{t_a}^{t_e} TL_{rate} dt$$
(9.7)

Die TL_{rate} wird für Konzentrationen, die größer als der AEGL-Wert für 10 Minuten bzw. kleiner als der AEGL-Wert für 8 Stunden willkürlich festgelegt. Dies ist in Bezug auf die größeren Konzentrationen kritisch zu sehen, da es einer Extrapolation der AEGL-Werte gleich kommt..

B [-]	Belastungsfaktor
t [s]	Zeit; Index a: Anfang; e: Ende
t _k [s]	Expositionsdauer des AEGL-Wertes
t _{eff} [s]	effektive Expositionsdauer
TL _{rate} [1/s]	Toxic Load rate
c [mg/m³]	Konzentration
c _S [mg/m ³]	unteren Grenzkonzentration
c _R [mg/m ³]	Referenzkonzentration z.B. ERPG-Wert
c _k [mg/m³]	Konzentration des AEGL-Wertes
c _{max} [mg/m ³]	maximale Konzentration an einem Ort
n [-]	Exponent der Dosisberechnung
D _{eq} [mg s /m³]	Vergleichsdosis

Hierbei bedeuten

9.1.2.1 Beispielrechnungen

Es wird die Freisetzung eines druckverflüssigten Gases mit anschließender Lachenverdampfung für eine Zeitdauer von 30 Minuten betrachtet. Es wird zuerst eine Schwergasausbreitung in ebenem Gelände mit der VDI RL 3783 Blatt2 und anschließend eine Leichtgasausbreitung mit der VDI 3783 Blatt 1 berechnet. Die Windgeschwindigkeit beträgt 3 m/s bei einer indifferenten Temperaturschichtung und einer Bodenrauigkeit von 1,2 m.

In Abbildung 9.1 sind die Verdampfungsmassenströme der Fälle 1 und 2 dargestellt. Durch unterschiedliche flüssige Massenströme und Freisetzungsdauern ergeben sich unterschiedliche Verläufe mit gleich großen Maximalwerten. In einer Entfernung von 1200 m sind die in der Abbildung 9.2 dargestellten Konzentrationsverläufe mit der DVI RL 3783 Blatt 1 berechnet worden. Die Expositionsdauer beträgt ca. 2100 s.



Abb. 9.1: Verdampfungsmassenströme der Fälle 1 und 2



Abb. 9.2: Konzentrationsverläufe in einer Entfernung von 1200 m Als Beurteilungswerte werden zunächst die AEGL-Werte für einen Stoff 1 mit konstanten Werten im Bereich von 10 und 30 Minuten verwendet:

	10 Min	30 min	60 min	240 Min	480 Min
AEGL-1	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
AEGL-2	2.8	2,8	2,0	1,0	0,71
AEGL-3	50	28	20	10	7,1

In der folgenden Tabelle sind die Entfernungen angegeben, bei denen der AEGL-2-Wert unterschritten wird. Die Schrittweite der Berechnungen in Strömungsrichtung beträgt 10 m.

Modell	Fall 1	Fall 2
AEGL-2-Wert 30 Minuten	1090 m	1010 m
AEGL-2-Wert 60 Minuten	1280 m	1180 m
Boris-Patnaik	1100 m	970 m
Stage	1090 m	1010 m
TÜV bezogen auf AEGL-2-Wert 30 Minuten	810 m	675 m

Handelt es sich um einen Stoff 2, bei dem die verallgemeinerte Habersche Regel (Erläuterung siehe unten) gültig ist, so können die AEGL-Werte wie in der folgenden Tabelle angegeben aussehen:

	10 Min	30 min	60 min	240 Min	480 Min
AEGL-1	127	73	52	18	9
AEGL-2	2000	1100	800	400	200
AEGL-3	9700	5600	4000	2000	990

In der folgenden Tabelle sind die Entfernungen angegeben, bei denen der AEGL-2-Wert unterschritten wird.

Modell	Fall 1	Fall 2
AEGL-2-Wert 30 Minuten	220 m	215 m
AEGL-2-Wert 60 Minuten	235 m	235 m
Boris-Patnaik	205 m	200 m
Stage	210 m	205 m
TÜV bezogen auf AEGL-2-Wert 30 Minuten	205 m	200 m

Als Fall 3 wird die Freisetzung eines gasförmigen Stoffes mit einem Massenstrom von 3,2 kg/s für 2500 s betrachtet. Die Parameter für die Gasausbreitung entsprechen den der Fälle 1 und 2. In der Abbildung 3 ist der Konzentrationsverlauf in einer Entfernung von 1000 m dargestellt. Die Expositionsdauer beträgt ca. 2800 s.



Abb. 9.3: Konzentrationsverlauf in einer Entfernung von 1000 m

In der folgenden Tabelle sind die Entfernungen angegeben, bei denen die AEGL-2-Werte für die beiden Stoffe unterschritten werden.

Modell	Stoff 1	Stoff 2
AEGL-2-Wert 30 Minuten	1120 m	225 m
AEGL-2-Wert 60 Minuten	1330 m	240 m
Boris-Patnaik	1295 m	225 m
Stage	1220 m	230 m
TÜV bezogen auf AEGL-2-Wert 30 Minuten	1210 m	235 m
TÜV bezogen auf AEGL-2-Wert 60 Minuten	1140 m	235 m

Werden die AEGL-2-Werte als Grenzwerte verwendet, so ist festzustellen, dass es relevante Unterschiede ergibt, ob die Freisetzungsdauer (30 Min. in den Fällen 1 und 2) als Beurteilungszeitraum angesetzt wird, oder konservativ eine Zeitstufe höher gewählt wird, da die Expositionsdauer immer größer als die Freisetzungsdauer ist und mit der Entfernung variiert.

Bei den Ansätzen von Boris-Patnaik und Stage ergibt sich diese Fragestellung nicht, da der Konzentrationsverlauf an jeder Position ausgewertet wird. Während Stage bei den Fällen 1 und 2 und Stoff 1 dieselben Entfernungen wie AEGL-2-Wert 30 Minuten berechnet, ergibt der Ansatz von Boris-Patnaik bei dem schmaleren Konzentrationsverlauf des Falls 2 eine geringere Entfernung. Beim Stoff 2 liegen beide Ansätze unterhalb der Entfernung des Grenzwertes AEGL-2-Wert 30 Minuten. Bei dem Fall 3 mit einer nahezu konstanten Konzentrationsverteilung über die Zeit liegen beide Ansätze zwischen den AEGL-2-Werten 30 und 60 Minuten.

Der Ansatz vom TÜV Rheinland ist für Stoffe mit konstanten AEGL-Werten bei unterschiedlichen Expositionsdauern nicht geeignet. Im Fall des Stoffs 2 ergeben sich plausible Ergebnisse im Bereich der beiden anderen Ansätze.

9.1.3 Probit Funktion

Bei probabilistischen Risikoanalysen muss nicht nur ein Gefährdungsbereich ermittelt werden, innerhalb dessen ein Konzentrationsleitwert überschritten wird, sondern es muss der Anteil an der betroffenen Bevölkerung berechnet werden, der bei einer berechneten Intensität der Exposition eine bestimmte Schädigung erleidet (z. B. den Tod). Dieser Anteil entspricht der Schädigungswahrscheinlichkeit W für den betrachteten Effekt. Die Schädigungswahrscheinlichkeit steigt mit zunehmender Expositionsintensität von W = 0 bis W = 1 an und folgt dabei im Allgemeinen einer S-Kurve. Diese Kurve ist die (kumulierte) Verteilungsfunktion der Expositionsintensität für den betrachteten Effekt und entspricht der Dosis-Wirkungs-Beziehung für eine Gruppe von Individuen.

Zur einfacheren Beschreibung wird die Wahrscheinlichkeit W durch die Probitvariable Pr ersetzt. Den exakten Zusammenhang zwischen W und Pr liefert die Beziehung

$$W = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{Pr-5} e^{-\frac{x^2}{2}} dx$$
(9.8)

Der Wert Pr = 5 entspricht der Wahrscheinlichkeit W = 0,5 (50 %)⁷. Die Probitvariable nimmt für 1 % bzw. 99 % Wahrscheinlichkeit den Wert 2,67 bzw. 7,33 an, Pr = 0 entspricht einer Wahrscheinlichkeit von $0,3 \cdot 10^{-6}$.

⁷ Die Festlegung Pr = 5 bei 50 % Wahrscheinlichkeit ist historisch begründet [9.12]; es ist auch eine andere Definition gebräuchlich, bei der die Wahrscheinlichkeit 50 % dem Probitwert Pr = 0 entspricht.

Die Umrechnung zwischen W und Pr ist z.B. in Tabellenkalkulationsprogrammen mit Hilfe folgender statistischer Funktionen möglich:

$$W = NORM.S.VERT(Pr-5;WAHR)$$

Pr = 5+NORM.S.INV(W)

Analytische Näherungsgleichungen zur Umrechnung zwischen W und Pr sind in [9.11] angegeben.

Aus (tier-)experimentellen Untersuchungen kann für einen betrachteten Effekt die kumulierte Häufigkeit ermittelt und zur Abschätzung der (kumulierten) Verteilungsfunktion verwendet werden. Im Allgemeinen führt die Annahme einer Normalverteilung der logarithmierten Expositionsintensität zu einer zufriedenstellenden Approximation. Der Zusammenhang zwischen der Intensität bzw. Dosis V der Exposition und der Effektwahrscheinlichkeit, ausgedrückt durch die Probit-Variable Pr, wird in diesem Fall durch den linearen Ansatz beschrieben:

$$Pr = a + b \ln(V) \tag{9.9}$$

Die Intensität V kann bei einer Exposition gegen luftgetragene Schadstoffe für die Effekte "Reizung" und "Tod" durch die Beziehung

$$V = C^{n} t \tag{9.10}$$

ausgedrückt werden, wobei C die Konzentration (in mg/m³) und t die Dauer der Exposition (in min) angibt. Daraus resultiert folgende Form der Probitbeziehung:

 $Pr = a + b \ln(C^{n} t)$ (9.11)

Die Parameter a, b und n sind stoffspezifische Größen, die auf der Grundlage toxikologischer Untersuchungen empirisch ermittelt werden. Hierzu werden für den Effekt "Tod" z. B. LC₅₀-Werte (Konzentration, die nach einer spezifizierten Expositionsdauer bei 50 % der Population zum Tod führt) herangezogen. Die Vorhersagegenauigkeit derartiger Probitbeziehungen nimmt im Bereich niedriger Probit- bzw. Wahrscheinlichkeitswerte ab, denn dort folgt die Effektwahrscheinlichkeit nicht mehr der angenommenen Verteilungsfunktion.

Die vorstehende Formulierung der Expositionsintensität V entspricht der verallgemeinerten Haberschen Regel, der zufolge eine bestimmte toxische Wirkung luftgetragener Schadstoffe (gleicher Effekt, gleiche Wahrscheinlichkeit) in vielen Fällen mit einem konstanten Ausdruck Cⁿ·t einhergeht. In anderen Fällen, insbesondere dann, wenn die Exposition zu lokalen Effekten führt, kann die toxische Wirkung hingegen stärker von der Maximalkonzentration abhängen. Für viele Substanzen existiert diesbezüglich kein einfacher Zusammenhang [9.4].

Eine zum Zweck der Quantitativen Risikoanalyse erforderliche, für Expositionsszenarien mit zeitveränderlicher Konzentration wesentliche Erweiterung des Konzepts besteht darin, die Expositionsintensität (Dosis) bei luftgetragenen toxischen Schadstoffen aus dem zeitlichen Konzentrationsverlauf gemäß nachstehender Beziehung als Zeitintegral zu berechnen (C in ppm oder mg/m³ und t in Minuten) [9.13]:

$$V = \int_{0}^{t} C^{n}(t) dt$$
(9.12)

Somit sind drei stoffspezifischen Größen a, b und n eingeführt worden, die für eine bestimmte Schädigung gelten (z. B. für tödliche Wirkung). In [9.13] bis [9.16] sind für einige Stoffe die drei Parameter angegeben. Es ist festzustellen, dass in der Literatur für manche Stoffe Parametersätze angegeben werden, die sich deutlich voneinander unterscheiden und die zu erheblich voneinander abweichenden Intensitäts- bzw. Dosiswerten für die gleiche Effektwahrscheinlichkeit führen. Daraus resultieren auch deutliche Unterschiede der Berechnungsergebnisse in Form des Zusammenhangs zwischen dem Abstand von der Freisetzungsstelle und der jeweiligen Effektwahrscheinlichkeit [9.17].

In den Niederlanden ist das im "Green Book" beschriebene Verfahren zur Herleitung von Probitbeziehungen grundlegend überarbeitet worden [9.18].

Eine direkte Umrechenbarkeit der Probitbeziehung für die tödliche Wirkung eines luftgetragenen Schadstoffs in die AEGL-3-Konzentration hätte generell zur Voraussetzung, dass der Wahrscheinlichkeitswert für den Effekt an der AEGL-Schwelle durch eine Vereinbarung festgelegt worden ist (z. B. auf 1 %, 0,1 % oder 0,01 %) und dass die Probitbeziehung auch im Bereich geringer Effektwahrscheinlichkeit (d. h. niedriger Expositionsintensität) hinreichend genaue Aussagen liefert, was im Allgemeinen nicht der Fall ist.

9.2 Brand

Ein Objekt in der Nähe einer Flamme wird mit einer Bestrahlungsstärke beaufschlagt. Für die Beurteilung der sich daraus ergebenen Schäden werden herangezogen:

- Grenzwerte für die Bestrahlungsstärke,
- Grenzwerte für die Dosis der Bestrahlungsstärke,
- Dosis abhängige Probit Funktionen.

9.2.1 Grenzwerte

Für Baustoffe und Textilien sind in [9.19] Grenzwerte für die Selbst- und Fremdzündung angegeben. Die unter dem Begriff Selbstzündung stehenden Bestrahlungsstärken führen nach max. 15 min zu einer Selbstzündung des Stoffes. Die geringeren Werte für die Fremdzündung geben Bestrahlungsstärken wieder, die nach einer gewissen Einwirkungszeit aus dem bestrahlten Stoff so viele Gase und Dämpfe austreiben, dass diese durch kleine Zündquellen entzündet werden können.

Stoffe	Bestrahlungsstärke für	Bestrahlungsstärke für
	Selbstentzündung	Fremdentzündung
	[kW/m²]	[kW/m²]
ungestrichenes dunkles Holz	34	13
(ofentrocken)		
gestrichenes Holz (trocken)		17 25
Sperrholz		17
ungestrichene poröse Holzfaser-	25	11
platte		
duroplastischer Kunststoff	84	
Textilien (allg.)	34	
Baumwollgewebe	24	13

In der DIN EN 1473 [9.20] sind zulässige Wärmestrahlungsintensität ohne Sonneneinstrahlung innerhalb der Anlagengrenze angegeben:

	Bestrahlungsstärke [kW/m ²]
Betonaußenfläche von benachbarten Lagertanks	32
Metallaußenfläche von benachbarten Lagertanks	15
Außenoberfläche von benachbarten Druckbehältern und	15
Anlagenteilen	
Betriebszentrale, Werkstatt, Labor- und Lagergebäude	8
Verwaltungsgebäude	5

Weitere kritische Bestrahlungsstärken für Baumaterialien sind in [9.21] zusammengestellt.

Einige Angaben zur Bestrahlungsdauer für bestimmte Bestrahlungsstärken um Schmerzen an der Haut zu fühlen sind aus der API 521, 1982 (in [9.22]) zu entnehmen:

Bestrahlungsstärke [kW/m ²]	Bestrahlungsdauer [s] zum Erreichen der
	Schmerzgrenze
1,58	60
2,33	40
2,9	30
4,73	16
6,94	9
9,46	6
11,67	4
19,87	2

In der API 521 (1997) (in [9.23]) werden die folgenden Grenzwerte empfohlen:

Bestrahlungsstärke	Randbedingungen
[kW/m²]	
15,97	Zulässige Bestrahlungsstärke auf Anlagenteile und Bereiche in
	denen das Personal wahrscheinlich nicht tätig ist und es
	Fluchtmöglichkeiten z.B. in den Schatten von Anlagenteilen gibt
9,46	Zulässige Bestrahlungsstärke für Bereiche zu denen das
	Personal auch bei einem betriebsmäßigen Ansprechen einer
	Fackel Zugang hat. Die Bestrahlungsdauer darf nur wenige
	Sekunden betragen.
6,31	Zulässige Bestrahlungsstärke für Bereiche in denen Personal
	im Notfall bis zu einer Minute ohne besondere
	Schutzausrüstung tätig sein müssen.
4,73	Zulässige Bestrahlungsstärke für Bereiche in denen Personal
	im Notfall bis zu mehreren Minuten ohne besondere
	Schutzausrüstung tätig sein müssen.
1,58	Zulässige Bestrahlungsstärke für Bereiche in denen sich
	Personen ohne besondere Schutzausrüstung dauerhaft
	aufhalten können.

In der folgenden Tabelle sind die in [9.24] und [9.25] angegebenen Auswirkungen auf die Haut in Abhängigkeit von der Bestrahlungsstärke zusammengefasst.

Auswirkung auf die menschliche Haut	Bestrahlungsstärke [kW/m ²]
Sonnenstrahlung im Sommer zur Mittagszeit	1,2
max. Bestrahlungsstärke bei unbestimmter	< 1,3
Bestrahlungsdauer	
Minimale Strahlungsdauer für Schmerz nach 1 Minute	2,1
Schmerz nach 10 bis 20 s	4
Brandblasen nach 30 s, tolerierbar bis 13 s	5
Schmerz nach 3 s	10,5
Blasen nach 10 bis 12 s	10,5
Tödliche Schwelle nach 40 s	10
1% tödlich	25 bis 32,9
Verbrennung 2. Grades	27,4 bis 32,9
50 % tödlich	44,7 bis 58,8
Verbrennung 3. Grades	49 bis 64,5

Eine Verbrennung 1. Grades ist eine oberflächliche Verbrennung, bei der die Haut schmerzt und gerötet ist, aber nach wenigen Tagen abheilt. Ein Sonnenbrand wird auch zu dieser Kategorie gezählt. Bei einer Verbrennung 2. Grades ist die Haut oberflächlich bis tief verbrannt, und es kommt oftmals zur Blasenbildung. Je nach Schwere der Verbrennung können Narben zurückbleiben. Verbrennungen 3. Grades machen Hauttransplantationen nötig, wenn eine größere Fläche der Haut betroffen ist. Die Verbrennungen sind in diesem Fall so tief, dass die untersten Schichten der Haut angegriffen werden. Eine Verbrennung 4. Grades kommt häufig durch offenes Feuer oder Starkstrom zustande. Hier ist die komplette Haut bis zum Fettgewebe zerstört und auch die Nerven, Muskulatur und schlimmstenfalls die Knochen sind beschädigt.

In [9.26] sind die experimentellen Ergebnisse eines Selbstversuchs dokumentiert. In einer Wanne (3 m x 3 m) wurde LNG verbrannt und der Autor konnte feststellen, dass eine normal gekleidete Person Bestrahlungsstärken bis 5 kW/m² ohne Probleme (keine Schmerzen) 25 s – 30 s ertragen kann. Bei Bestrahlungsstärken bis 4 kW/m² erhöht sich die mögliche Bestrahlungsdauer bis auf 120 s. Diese Angaben liegen über den o.g. Literaturwerten.

Eine weitere Möglichkeit zur Beurteilung der Auswirkung der Wärmestrahlung einer Flamme ist die Berechnung einer Wärmestrahlungsdosis D in Abhängigkeit von der Branddauer t_{Brand} und der Einführung der Größe TDU (Thermal Dosage Unit):

$$D = \int_{0}^{t_{Brand}} \left(\dot{Q} \left[\frac{kW}{m^2} \right] \right)^{\frac{4}{3}} dt$$

$$TDU = 1s \left(\frac{kW}{m^2} \right)^{\frac{4}{3}}$$
(9.13)

Mehrere HSE Reports beschäftigen sich mit der Bestimmung von Grenzwerten für die Strahlungsdosis. In [9.27] wurde ein Wert für die "Dangerous Dose" (entspricht einer Letalitätswahrscheinlichkeit von 1%) von 1000 TDU festgelegt. In [9.28] wurde die Wärmestrahlungsdosis für die "Significant Likelihood of Death (SLOD)" zu 2000 TDU bestimmt. In aktuellen Veröffentlichungen ist der Wert auf 1800 TDU reduziert worden [9.29]. Die SLOD ist so definiert, dass für die betroffene Bevölkerung eine Letalitätswahrscheinlichkeit.

Nach Sichtung der HSE Reports [9.27] und [9.28] wurde in [9.29] entschieden keine Probit Funktion zu verwenden, sondern einen pragmatischen Ansatz auf der Grundlage der beiden Reports. Die Letalitätswahrscheinlichkeit P berechnet sich dann wie folgt:

P=0 für V < 734,5 TDU $P=0,0373 V - 27,396 für 734,5 TDU \le V \le 3415 TDU (9.14)$ P=100 für V > 3415 TDU

9.2.2 Probit Funktionen

Für die Berechnung der Probit Variable wird die Strahlungsdosis in TDU verwendet:

$$Pr = a + b \ln(D[TDU])$$
(9.15)

Für die Berechnung der Letalitätswahrscheinlichkeit sind verschiedene Ansätze entwickelt worden. Eine gute Zusammenstellung und kritische Diskussion ist in [9.29] zu finden und wird im Folgenden kurz zusammengefasst.

Die Probitfunktion aus dem Vulnerability Model von Eisenberg et al. (1975) wurde lange Zeit sehr verbreitet eingesetzt. Sie basiert auf den Untersuchungen von White (1971), der die Auswirkungen der beiden Atombombenabwürfe in Hiroshima und Nagasaki auf die Bevölkerung analysiert hat. Es sind einige Zweifel an der Anwendbarkeit der Probit-Funktion von Eisenberg et al. im Fall von Kohlenwasserstoffbränden aufgekommen. Vor allem wird kritisiert, dass bei Nuklearexplosionen vor allem Strahlung im kurzwelligen UV-Bereich emittiert wird, während die Strahlung von Kohlenwasserstoffbränden im langwelligen Infrarotbereich liegt.

Tsao & Perry (1979) versuchten dieses Problem zu durch Verringerung der Strahlungsdosis beheben. Dieser Ansatz wird auch im "Green Book" [9.13] verwendet, ist aber nach [9.29] nicht plausibel. Eine etwas neuere Probit-Funktion für die Letalitätswahrscheinlichkeit ist die von Lees (1994). Sie basiert auf Bestrahlungsversuchen mit Schweinehaut, wobei eine Lampe eingesetzt wurde, die vor allem im UV-Bereich strahlt. Im UV-Bereich sind höhere Strahlungsdosen nötig, um dieselben Verbrennungen zu verursachen, als im Infrarotbereich. Die Probit-Funktion von Lees eignet sich deshalb kaum für die Verwendung bei Kohlenwasserstoffbränden.

In [9.30] sind die folgenden Konstanten für die Berechnung der Probit Variablen zusammengestellt worden:

Schädigung	а	b
Verbrennung ersten Grades	-39,8	3,019
Verbrennung zweiten Grades	-43,1	3,019
Tödliche Verbrennung, ungeschützte Person	-36,38	2,56
Tödliche Verbrennung, geschützte Person	-37,2	2,56
Tödliche Verbrennung, bei Entzündung der Kleidung	-10,7	1,99

Die Bestrahlungsdauer kann konservativ gleich der Branddauer angenommen werden, oder unter Berücksichtigung der Flucht von Personen nach einem Ansatz in [9.13] wie folgt abgeschätzt werden:

$$t = t_{r} + \frac{3x_{0}}{5u} \left\{ 1 - \left(1 + \frac{u}{x_{0}} \left(\frac{x_{s} - x_{0}}{u} \right) \right)^{-\frac{5}{3}} \right\}$$
(9.16)

Hierbei bedeuten:

t _r [s]	Reaktionszeit = 5 s				
x ₀ [m]	Abstand zum Mittelpunkt des Feuers				
	Abstand vom Mittelpunkt des Feuers bis zum				
x _s [III]	Sicherheitsabstand (1,6 kW/m ²)				
u [m/s]	Fluchtgeschwindigkeit				

Im Rahmenbericht der Schweiz [9.29] wird davon ausgegangen, dass eine flüchtende Person innerhalb von 30 Sekunden eine Strecke bis 200 m zurücklegen kann. Dies entspricht einer Fluchtgeschwindigkeit von ca. 6 m/s. Im Green Book [9.13] wird eine Fluchtgeschwindigkeit von 4 m/s genannt. Die Reaktionszeit (t_r) eines Menschen von der Realisierung der Gefahrensituation bis zur Auslösung von Aktionen wird u. a. in [9.13] und [9.23] mit 5 Sekunden angegeben.

Als "sicherer Abstand" ist ein Abstand zu einer Wärmequelle zu definieren, bei dessen Überschreitung aufgrund der Wärmestrahlung keine negativen Wirkungen auf den Menschen zu erwarten sind. Im Leitfaden KAS-18 [9.5] wird für die Wärmestrahlung der Grenzwert von 1,6 kW/m² genannt, der die Grenze des Beginns nachteiliger Wirkung für den Menschen darstellt. Die Entfernung, die einer Wärmestrahlung von 1,6 kW/m² entspricht, wird als "sicherer Abstand" definiert.

Durch medizinische Beobachtungen wurde festgestellt, dass Personen, die sich nicht im Bereich von Flammen befanden und deren Kleidung sich nicht entzündete eine sehr hohe Überlebenswahrscheinlichkeiten aufwiesen. Es ist davon auszugehen, dass dies auf die Bekleidung zurückzuführen ist, die einen Schutz z. B. durch teilweise Absorption und Reflektion der Wärmestrahlung darstellt [9.49]. Entzündet sich die Kleidung muss jedoch von 100% Letalitätswahrscheinlichkeit ausgegangen werden. Ob sich die Kleidung entzündet, kann nach folgender Beziehung ermittelt werden [9.13].

$$D_{kl} = t_{eff} * Q^2 > 2.5 \times 10^4 \text{ kW}^2 \text{m}^{-4} \text{s}$$
(9.17)

D_{kl} Strahlungsdosis [kWm⁻²m⁻⁴s] zur Entzündung von Kleidung

- t_{eff} Expositionszeit [s]
- Q Strahlungsintensität [kWm⁻²]

In [9.26] ist eine Übersicht über experimentelle Untersuchungen zur Schutzwirkung von Kleidung enthalten und es werden eigene Untersuchungsergebnisse vorgestellt. In einer Wanne (3 m x 3 m) wurde LNG verbrannt. In einer Entfernung, in der eine Bestrahlungsstärke von ca. 5 kW/m² gemessen worden ist (Entfernung: 8,4 m – 12,2 m), wurde eine Puppe mit normaler Bekleidung (Baumwolle, Baumwolle-Polyester-Mix) aufgestellt. In Abhängigkeit von der Art der Bekleidung wurde unter der Bekleidung eine Reduktion der Bestrahlungsstärke um den Faktor 2 – 5 gemessen.

9.3 Explosion

9.3.1 Grenzwerte

Die folgenden Tabellen aus [9.31] geben einen Überblick über die möglichen Schäden in Bezug auf den maximalen Explosionsüberdruck:

Personenschäden:

Schadensbild	max. Explosionsüberdruck
	[bar]
Unangenehme Knallwirkung tiefer Frequenz	0,0015
Sehr lauter Knall	0,003
Personen werden umgestoßen	0,010
Druckbezogener Grenzwert für Schäden durch	0,015
Spreng- und Wurfstücke	
Untere Grenze Trommelfellriss	0,175
Untere Grenze für Lungenschäden	0,85
Untere Grenze für ernste Lungenschäden	1,85
Untere Letalitätsgrenze	2,05

Glasscheiben:

Schadensbild	max. Explosionsüberdruck
	[bar]
Gelegentlicher Bruch großer unter Spannung	0,002 bar
stehender Scheiben	
Glasbruch durch Schallwellen	0,003 bar
Bruch kleiner unter Spannung stehender Scheiben	0,005 bar
Bruch von 10 % der Scheiben	0,01 bar
Bruch von 75 % der Scheiben	0,03 bar
Bruch von 100 % der Scheiben	0,05 bar

Schäden an Häusern:

Schadensbild	max. Explosionsüberdruck
	[bar]
Schäden an Fensterrahmen, Türen, Dächern	0,005
Geringe Schäden an Dächern	0,020
Gelegentliche Beschädigung von Fensterrahmen,	0,035
Risse im Mauerputz	
Zerstörung der Dächer und Wände von Holzhäusern	0,06
Zerstörung Seitenwandverkleidungen	0,075
Beschädigung des Außenputzes	0,085
Zerstörung gemauerter Wände	0,10
Zerstörung von Wänden aus Ziegel- und	0,13
Schlackesteinen	
Zerstörung von 20 bis 30 cm dicken	0,15
Ziegelsteinausfachungen	
Mittlere Schäden an Fachwerkgebäuden	0,20
Zerstörung 24er Mauerwerk	0,25
Schwere Schäden an Fachwerkgebäuden	0,31
Nahezu vollständige Zerstörung üblicher Gebäude	0,40
Zerstörung 50er Mauerwerk	0,50

Schäden an Anlagenteilen:

Schadensbild	max. Explosionsüberdruck
	[bar]
Stahlblechplatten verbeult	0,075
Stahlrahmen von Skelettgebäuden leicht verformt	0,095
Öltanks aufgerissen	0,215
Zerstörung von Stahlbetonwänden	0,35
Eisenbahnwagen wird umgeworfen	0,46
99 % Schaden an Tanks mit konischem Dach	0,55
Beladene Güterwagen werden umgestürzt	0,60
Beladene Güterwagen zerstört, 99 % Schaden an	0,75
horizontal gelagerten Druckkesseln, chemischen	
Reaktoren und Wärmetauschern	

In [9.32] ist eine umfangreiche Liste aus der Literatur über Schäden an Anlageteilen in Bezug auf den maximalen Explosionsüberdruck zusammengestellt worden (siehe folgende Tabelle; Literaturangaben wurde [9.32] entnommen). Es wird aber darauf hingewiesen, dass die in der Literatur angegeben Werte stark variieren, was auch auf die nicht eindeutigen Definition der Schäden zurückzuführen ist.

Schadensbild	max. ExplÜberdruck [kPa]	Lit
Minor damage, cooling tower	1.72	[9.33]
Minor damage, cone roof tank (100% filled)	5.17	[9.33]
Minor damage, cone roof tank (50% filled)	5.17	[9.33]
1% structural damage of equipment	6.10	[9.34]
Failure of connection	7.00	[9.35]
Failure of equipment	9.90	[9.36]
Failure of atmospheric equipment	10.00	[9.37]
5% damage of process plant	10.00	[9.38]
50% damage of atmospheric tank	10.00	[9.38]
Minor damage of cooling tower	14.00	[9.39]
Minor damage of atmospheric tank	14.00	[9.39]
Minor damage, distillation tower and cylindrical steel	17.00	[9.40]
vertical structure. Failure of part of the equipment		
Minor damage, floating roof tank (50% filled)	18.70	[9.33]
Minor damage, reactor: cracking	18.70	[9.33]
Catastrophic failure, cone roof tank (50% filled)	18.70	[9.33]
Displacement of steel supports	20.00	[9.41]
Tubes deformation	20.00	[9.39]
Deformation of atmospheric tank	20.00	[9.39]
20% damage, process plant	20.00	[9.38]
100% damage, Atmospheric Tank	20.00	[9.38]
50% structural damage of equipment	20.40	[9.34]
Minor damage, pipe supports	22.10	[9.33]
Catastrophic failure, cooling tower	22.11	[9.33]
20% of structural damage of steel floating roof	24.00	[9.42]
petroleum tank		
Atmospheric tank destruction	25.00	[9.39]
Minor damage, reactor chemical	25.30	[9.33]
Failure of steel vessel	27.00	[9.41]
Distillation tower and cylindrical steel vertical	29.00	[9.40]

structure		
Failure of pressure vessel	30.00	[9.37]
99% structural damage of equipment	34.00	[9.34]
80% damage of process plant	35.00	[9.38]
40% damage, Heavy machinery	35.00	[9.38]
Structural damage of equipment	35.50	[9.43]
Minor damage, fractionation column	35.71	[9.33]
Catastrophic failure, pipe supports	37.42	[9.33]
Deformation of non-pressure equipment	38.00	[9.39]
Structural damage to pressure vessel	39.00	[9.44]
Minor damage, pressure vessel horizontal	39.12	[9.33]
Tubes failure	42.00	[9.39]
Pressure vessel deformation	42.00	[9.39]
Minor damage, floating roof tank (100% filled)	42.51	[9.33]
Catastrophic failure, cone roof tank (100% filled)	42.51	[9.33]
Minor damage, extraction column	42.52	[9.33]
Catastrophic failure, fractionation column	45.92	[9.33]
Failure of non-pressure equipment	47.00	[9.33]
Minor damage, heat exchanger	49.32	[9.33]
Minor damage, tank sphere	52.72	[9.33]
Pressure vessel failure	53.00	[9.39]
Failure of spherical pressure vessel	53.00	[9.39]
20% of structural damage of spherical steel	55.00	[9.42]
petroleum tank		
Catastrophic failure, reactor chemical	59.52	[9.33]
Catastrophic failure, heat exchanger	59.52	[9.33]
Catastrophic failure, pressure vessel horizontal	61.22	[9.33]
Displacement and failure of heavy equipment	69.00	[9.33]
Catastrophic failure, extraction column	69.73	[9.33]
Structural damage of equipment	70.00	[9.44]
Deformation of steel structures	70.00	[9.39]
100% damage, heavy machinery, process plant	70.00	[9.38]
Catastrophic failure, reactor: cracking	76.53	[9.33]
Minor damage, pressure vessel vertical	81.63	[9.33]
Minor damage, pump	81.63	[9.33]
20% structural damage of vertical cylindrical steel	83.00	[9.42]

pressure vessel		
Catastrophic failure, pressure vessel vertical	88.44	[9.33]
99% structural damage of vertical, steel pressure	95.30	[9.46]
vessel		
99% damage of vertical cylindrical steel pressure	97.00	[9.42]
vessel		
Catastrophic failure, tank sphere	108.84	[9.33]
Catastrophic failure, pump	108.84	[9.33]
99% structural damage of spherical, pressure steel	108.90	[9.46]
vessel		
99% damage (destruction) of spherical steel	110.00	[9.42]
petroleum tank		
Structural damage, low pressure vessel	136.00	[9.44]
Catastrophic failure, floating roof tank (50% filled)	136.05	[9.33]
Catastrophic failure, floating roof tank (100% filled)	136.05	[9.33]
99% structural damage of floating roof tank	136.10	[9.46]
99% damage (destruction) of floating roof petroleum	137.00	[9.42]
tank		

9.3.2 Probit Funktionen

Für die Berechnung der Probit Variable werden der maximale Explosionsüberdruck und der Impuls der Druckwelle herangezogen. In [9.13] werden für Personenschäden zwei Probit-Funktionen angegeben:

Tödliche Lungenschädigung:

$$Pr = 5, 0 - 5, 74 \ln (S)$$

$$S = \frac{4, 2}{P^*} + \frac{1, 3}{i^*}$$

$$P^* = \frac{P}{P_u}$$

$$i^* = \frac{i}{\sqrt{P_u} m^{\frac{1}{3}}}$$

Säuglinge:m = 5 kgKinder:m = 25 kg

(9.18)

Frauen:	m= 55 kg
Männer:	m = 75 kg

Schädigung des Gehörs:

$$Pr = -12, 6+1, 524 \ln (P) \tag{9.20}$$

Alonso u.a. [9.47] gibt eine Anzahl von weiteren Probit-Funktionen an:

Schädigung des Gehörs:

$$Pr = -15, 6 + 1,93 \ln{(P)}$$
(9.21)

Tödliche Schädelfraktur:

$$\Pr = 5 - 8,49 \ln \left(\frac{2430}{P} + \frac{4*10^8}{Pi} \right)$$
(9.22)

Tödliche Schädigung des Körpers:

$$Pr = 5 - 2,44 \ln\left(\frac{7,38*10^{3}}{P} + \frac{1,3*10^{9}}{Pi}\right)$$

$$Pr = 5 - 4,82 \ln\left(\frac{40267}{Pi}\right)$$
(9.23)

Tödliche Lungenschädigung:

$$Pr = 5 - 6, 6 \ln \left(\frac{620550}{P} + \frac{2069}{i} \right)$$

$$Pr = -77, 1 + 6, 91 \ln (P)$$
(9.24)

Hierbei bedeuten:

P [Pa]	Spitzenüberdruck
P _u [Pa]	Umgebungsdruck

i [Pa s]	Impuls
m [kg]	Gewicht einer Person
W [-]	Wahrscheinlichkeit einer Schädigung

In [9.48] sind Probit-Funktionen für Gebäudeschäden infolge von Gaswolkenexplosionen angegeben:

Geringere Auswirkungen wie gebrochene Fenster, kaputte Türen und Dachziegel usw.:

$$Y = 5 - 0,26 \ln \left[\left(\frac{4600}{P_s} \right)^{3,9} + \left(\frac{110}{i} \right)^5 \right]$$
(9.25)

Große Gebäudeschäden wie Risse in Wänden oder die Zerstörung einzelner Wände:

$$Y = 5 - 0,26 \ln \left[\left(\frac{17500}{P_s} \right)^{8,4} + \left(\frac{290}{i} \right)^{9,3} \right]$$
(9.26)

Zusammenbruch des Gebäudes;

$$Y = 5 - 0,26 \ln \left[\left(\frac{40000}{P_s} \right)^{7,4} + \left(\frac{460}{i} \right)^{11,3} \right]$$
(9.27)

9.4 Quellenverzeichnis

- [9.1] http://www.umweltbundesamt.de/aegl-stoerfallbeurteilungswerte-die-werte
- [9.2] <u>http://www.kas-bmu.de/links/stoffdaten.htm</u>
- [9.3] SFK-GS-28 Bericht "Konzept zur Begründung der Konzentrationsleitweite im Störfall des Arbeitskreises Schadstoffe (Luft) der SFK", (1999)
- [9.4] Emergency Exposure Indices for Industrial Chemicals. ECETOC Technical Report No. 43, Brussels, Belgium, 1991
- [9.5] KAS-18 Leitfaden: Empfehlungen f
 ür Abst
 ände zwischen Betriebsbereichen nach der St
 örfall-Verordnung und schutzbed
 ürftigen Gebieten im Rahmen der Bauleitplanung - Umsetzung § 50 BImSchG. (2010)
- [9.6] PAC: http://orise.orau.gov/emi/scapa/chem-pacs-teels/default.htm
- [9.7] TRGS 900: Arbeitsplatzgrenzwerte. Ausgabe Januar 2006 (BArbBl. 1/2006, S. 38 (41); BArbBl. 2/2006, S. 145)
- [9.8] W. Kaiser, P. Rogazewski: Quantifizierung von Gefahren bei Störfällen. TÜ Bd.41 Nr. 10, S 41 45, (2000)
- [9.9] St. A. Stage: Determination of Acute Exposure Guidelines in a Dispersion Model. Journal of the Air and Waste Management Association 54, S. 49-59 (2004)
- [9.10] Boris, J.P., Patnaik, G.: Acute Exposure Guideline Levels (AEGLs) for Time Varying Toxic Plumes Naval Research Laboratory, Washington D.C., 2014
- [9.11] J.A. Vilchez, H. Montiel, J. Casal, J. Arnaldos: Analytical expressions for the calculation of damage percentage using probit methodology. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 14, S 193-197, (2001)
- [9.12] D. J. Finney, Probit Analysis. Cambridge University Press, Cambridge 1971
- [9.13] CPR 16; Methods for calculation of damage (Green Book); Committee for the Prevention of Disasters, The Hague (2005)
- [9.14] Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis; 2nd Edition; Center for Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers (2000)
- [9.15] S. Mannan, Lees' loss prevention in the process industries hazard identification assessment and control. §. Auflage, Bd 1-3, Amsterdam, Boston: Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005.
- [9.16] A.P. Franks, P.J. Harper, M. Bilo: The relationship between risk of death and risk of dangerous dose for toxic substances. Journal of Hazardous Materials 51
 S. 11-34 (1996)
- [9.17] Drewitz, Y.: Methodik zur Durchführung einer Quantitativen Risikoanalyse unter Berücksichtigung des Standes der Sicherheitstechnik bei Störfall-Anlagen in Deutschland. Diss. TU Berlin, (2012)

- [9.18] Ruijten, M.M.W.M., et al.: Method for derivation of probit functions for acute inhalation toxicity, RIVM Report 2015-0102, National Institute for Public Health and the Environment, Bilthoven, NL, 2015
- [9.19] P. G. Seeger; Wärmeübertragung durch Strahlung und Konvektion bei Bränden in Flüssiggaslagern. VFDB 1/87.
- [9.20] DIN EN 1473:2007; Anlagen und Ausrüstung für Flüssigerdgas . Auslegung von landseitigen Anlagen; Deutsche Fassung, Beuth Verlag
- [9.21] G. Burrell, J. Hare: Review of HSE Building Ignition Criteria. HSL/2006/33
- [9.22] American Institute of Chemical Engineers, Center for Chemical Process Safety. Guidline for Evaluation the Characteristics of Vapor Cloud Explosions, Flash Fires, and BLEVEs. 1994
- [9.23] Raj, P.K.: A review of the criteria for people exposure to radiant heat flux from fires. Journal of Hazardous Materials 159 (2008) S. 61–71
- [9.24] Chr. Kuhr, A. Schönbucher. Zur Festlegung von Abständen zwischen Industrieanlagen und Schutzobjekten für das Ereignis Lachenbrand. 6. Fachtagung Anlagen-, Arbeits- und Umweltsicherheit. Köthen, 2002
- [9.25] Uelpenich, G.: Freisetzung druckverflüssigter Gase: Gefährdungsbeurteilung. Brandschutz / Deutsche Feuerwehrzeitung. 10/1993. S. 696-702
- [9.26] Raj, P.K.: Field tests on human tolerance to (LNG) fire radiant heat exposure, and attenuation effects of clothing and other objects. Journal of Hazardous Materials 157 (2008) S. 247 -259
- [9.27] S.M. Hockey, P.J. Rew: Review of human response to thermal radiation. HSE Contract Research Report No. 97/1996
- [9.28] P.J. Rew: LD50 equivalent for the effect of thermal radiation on humans. HSE Contract Research Report No. 129/1997
- [9.29] Schweizer Erdgaswirtschaft; Erdgasswisse plan: Sicherheit von hochdruckanlagen. Letalität bei Brandszenarien. Erläuterungen zum "Rahmenbericht zur standardisierten Ausmaßabschätzung und Risikoermittlung". (2010)
- [9.30] Maillette, J.; Birk, A.M.: Review of injury criteria from exposure to heat. PVP –
 Vol. 333. Integrity of Structure and Fluid Systems, Hazardous Release
 Protection, Piping and Pipe Supports and Pump and Valves. ASME 1996
- [9.31] UBA Bericht "Ermittlung und Berechnung von Störfallablaufszenarien nach Maßgabe der 3. Störfallverwaltungsvorschrift"; Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 204 09 428.

- [9.32] V. Cozzani, E. Salzano: The quantitative assessment of domino effects caused by overpressure Part I. Probit models. Journal of Hazardous Materials A107 (2004) S. 67–80
- [9.33] R.W. Nelson, Hydrocarbon Process. August (1977) 103.
- [9.34] N.A. Eisenberg, C.J. Lynch, R.J. Breeding, Vulnerability Model: A Simulation System for Assessing Damage Resulting from Marine Spills, Rep. CG-D-136-75, Enviro Control Inc., Rockville, MD, 1975.
- [9.35] J. Henrych, The Dynamics Of Explosion and Its Use, Developments in Civil Engineering, vol. 1, Elsevier Scientific Publishing Company, Amsterdam, 1979.
- [9.36] HSE, Health and Safety Executive, Canvey: An Investigation of Potential Hazards from Operations in the Canvey Island/Thurrock Area, London, UK, 1978.
- [9.37] P.H. Bottelberghs, B.J.M. Ale, in: Proceedings of the 19–20th European Seminar on Domino Effects, Leuven, 1996.
- [9.38] R.F. Barton, Fuel gas explosion guidelines—practical application, in: IChemE Symposium Series no.139, Sedgwick, 1995, S 285–286.
- [9.39] K. Gugan, Unconfined Vapour Cloud Explosions, The Institutions of Chemical Engineers, Rugby, 1979.
- [9.40] P. Schneider, J. Loss Prevent. Process Ind. 10 (3) (1997) 185.
- [9.41] V.J. Clancey, in: 6th Int. Meeting of Forensic Sciences, Edinburgh, 1972.
- [9.42] W.C. Brasie, D.W. Simpson, Loss Prevent. 2 (1968) 91.
- [9.43] D.F. Bagster, R.M. Pitblado, Proc. Safety Environ. Protect. 69 (1991) S. 196.
- [9.44] G.L. Wells, Safety in Process Plant Design, Wiley, Chichester, 1980.
- [9.45] I.F. Khan, S.A. Abbasi, J. Loss Prevent. Process Ind. 14 (2001) S. 43.
- [9.46] E.E. Pickering, J.L. Bockholt, Probabilistic Air Blast Criteria for Urban Structures, Report, Stanford Res. Inst., Menlo Park, CA, 1971.
- [9.47] F.D. Alonso, E.G. Ferradas, T. Sanchez, A.M. Aznar, J.R. Gimeno, J.M. Alonso: Consequence analysis to determine the damage to humans from vapour cloud explosions using characteristic curves. In: Journal of Hazardous Materials 150 (2008) S. 146-152
- [9.48] F.D. Alons, E.G. Ferradas, J.F.S. Perez, A.M. Aznar, J.R. Gimeno, M.D. Minarro: Consequence analysis to determine the damage to buildings from vapour cloud explosions using characteristic curves. In: Journal of Hazardous Materials 159 (2008) S. 264-270
- [9.49] Contribution to the Methodology for the Development of Acute Exposure Threshold Levels in Case of Accidental Chemical Release, ECETOC Technical Report No. 100, Brussels, July 2006

- [9.50] Protective Action Criteria, 29. Rev., DOE (2016). https://sp.eota.energy.gov/pac/teel/teel_pdf.html
- [9.51] DOE Handbook. Temporary Emergency Exposure Limits for Chemicals: Methods and Practice. U.S. Department of Energy, DOE-HDBK-1046-2015 Draft
- [9.52] <u>https://orise.orau.gov/emi/forms/TEELRequestForm.html</u>
- [9.53] DOE Handbook. Temporary Emergency Exposure Limits for Chemicals: Methods and Practice. U.S. Department of Energy, DOE-HDBK-1046-2015 Draft
- [9.54] https://orise.orau.gov/emi/forms/TEELRequestForm.html