

Instationäre Berechnung der Lachenverdunstung mittels eines Grenzschichtverfahrens

vorgelegt von
Dipl.-Ing. Abdelkarim Habib
aus Berlin

von der Fakultät III - Prozesswissenschaften
der Technischen Universität Berlin
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Ingenieurwissenschaften
- Dr.-Ing. –

genehmigte Dissertation

Promotionsausschuss:

Vorsitzender: Prof. Dr.-Ing. Prof. e.h. Dr. h.c. George Tsatsaronis
Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Jörg Steinbach
Gutachter: Dr.-Ing. Aydan Acikalin
Gutachter: Dr.-Ing. Bernd Schalau

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 21. Dezember 2010

Berlin 2011

D83

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter an der BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung in der Arbeitsgruppe „Explosionsschutz und Risikobewertung“.

Für die wissenschaftliche Betreuung und hilfsbereite Begleitung dieser Arbeit möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Jörg Steinbach, Technische Universität Berlin, und Frau Dr.-Ing. Aydan Acikalin, BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, herzlich bedanken. Prof. Dr.-Ing. Prof. e.h. Dr. h.c. George Tsatsaronis, Technische Universität Berlin, danke ich für die Übernahme des Promotionsvorsitzes.

Besonders bedanken möchte ich mich bei Herrn Dr.-Ing. Bernd Schalau, BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, dessen Fachwissen und zielstrebige Arbeitsweise ich sehr geschätzt habe. Bei Fragen und Problemen war er immer zur Stelle um gemeinsam eine Lösung zu finden. Sowohl sein entgegengebrachtes Vertrauen als auch seine Zuversicht haben mich sehr motiviert, ebenso wie das gute Verhältnis das sich auch in nicht-fachlichen Belangen entwickelt hat.

Bei meinen Kollegen Martin Beckmann-Kluge, Dr.-Ing. Christian Lohrer, Lutz Fritzsche, Dr. Fabio Ferrero, Jörg Schossig, Dr.-Ing. Michal Gula und Stephan Gerber möchte ich mich für die fachliche, technische und insbesondere moralische Unterstützung bedanken.

Für die Hilfe in technischen Belangen möchte ich mich bei meinen Kollegen Swen Scheider, Detlef Arndt und Robert Zeps bedanken, die mir beim Aufbau von Versuchseinrichtungen und der Durchführung der Untersuchungen eine große Hilfe waren.

Der größte Dank gilt jedoch meinen Eltern und Geschwistern, ohne die ich niemals soweit gekommen wäre.

Berlin, im Mai 2011

Abdelkarim Habib

Abstract

Abdelkarim Habib:

Instationäre Berechnung der Lachenverdunstung mittels eines Grenzschichtverfahrens

Im Rahmen von Auswirkungsbetrachtungen, wie sie bei Sicherheitsberichten oder Risikoanalysen erforderlich sind, sind oft Szenarien mit einer Lachenverdunstung von brennbaren und/oder toxischen Flüssigkeiten zu untersuchen. Wesentliche Einflussgrößen für die Konzentrationsverteilung in der Umgebung sind der Verdunstungsmassenstrom, das Lachenwachstum und die Gasausbreitung. Bisher werden für diese Berechnungen mehrere Modelle mit unterschiedlicher Genauigkeit miteinander gekoppelt.

In dieser Arbeit wird ein instationäres turbulentes Grenzschichtverfahren vorgestellt, das mit dem Ziel entwickelt wurde, bei relativ geringem Rechenaufwand eine genauere Berechnung des Verdunstungsmassenstromes zu ermöglichen, sowie ausgehend von der Freisetzung aus der Lache direkt die Konzentrationsverteilung in der Umgebung ermitteln zu können.

Im Vergleich zu in der Literatur veröffentlichten und eigenen experimentellen Untersuchungen zeigt sich, dass das hier entwickelte Grenzschichtverfahren bei der Berechnung des Verdunstungsmassenstromes mindestens auf dem Niveau der besten empirischen Modelle liegt. Die instationäre Formulierung der Grenzschichtgleichungen ermöglicht zudem eine zeitabhängige Betrachtung der in der Lache herrschenden Temperaturen, des Massenstromes sowie der Konzentrationsverteilung in der Umgebung. Des weiteren ermöglicht das instationäre Grenzschichtverfahren die direkte Bestimmung der explosionsfähigen Masse in der Gaswolke über der Lache und die Berechnung des Massenstromes bei der Verdampfung von siedenden Flüssigkeiten mit anschließender Unterkühlung und Übergang zur Verdunstung.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	iii
Tabellenverzeichnis	v
Symbolverzeichnis	vii
1 Einleitung und Zielsetzung	1
2 Theoretische Grundlagen	11
2.1 Empirische Verdunstungsmodelle	11
2.1.1 Das Modell von Sutton Pasquill	12
2.1.2 Das Modell von Clancey	12
2.1.3 Das Modell von Mackay - Matsugu	12
2.1.4 Das Modell von Deutsch	13
2.1.5 Das TÜV-Rheinland Modell	14
2.1.6 Das Modell von Meurer	14
2.1.7 Das Modell von Brötz	14
2.2 Lachenausbreitung	15
2.3 Theoretischer Einfluss der Topografie auf den Stoffübergang	17
2.4 Gasausbreitungsrechnung mit der VDI-Richtlinie 3783	20
3 Modellierung der instationären Lachenverdunstung anhand des Grenzschichtverfahrens	26
3.1 Grenzschichtverfahren	26
3.2 Energiebilanz	28
3.3 Turbulenzmodelle	30
3.3.1 Das Modell von Cebeci-Smith	30
3.3.2 Das Modell von Cebeci-Chang	32
3.3.3 Turbulenzmodellierung bei schweren Gasen	32
4 Numerische Lösungsmethode	34
4.1 Anfangs- und Randbedingungen	34
4.1.1 Start- und Anfangsbedingungen	34
4.1.2 Randbedingungen	35
4.2 Numerische Lösung der Grenzschichtgleichungen	38
4.2.1 Koordinatentransformation	38
4.2.2 Rechengitter	41
4.2.3 Zeitliche Diskretisierung	42
4.2.4 Lösungsverfahren	43
4.2.5 Transformierte Randbedingungen	44
4.3 Lösungsalgorithmus	46
5 Experimentelle Untersuchungen	48
5.1 Versuchsaufbau und -durchführung	48
5.2 Versuchsauswertung	49

6	Ergebnisse zur Simulation der Lachenverdunstung	58
6.1	Beurteilung der empirischen Modelle	58
6.1.1	Lachenausbreitung	66
6.1.2	Zusammenfassende Beurteilung der empirischen Modelle	71
6.2	Grenzschichtverfahren	72
6.2.1	Laminare, stationäre Strömung	72
6.2.2	Turbulente, stationäre Strömung	74
6.2.3	Weitere Einflussparameter	82
6.2.4	Vergleich des stationären turbulenten Grenzschichtverfahrens mit den empirischen Verdunstungsmodellen	86
6.2.5	Laminare, instationäre Grenzschichtverfahren	92
6.2.6	Turbulente, instationäre Grenzschichtverfahren	94
6.2.7	Validierung des instationären turbulenten Grenzschichtverfahrens	97
6.2.8	Zusammenfassende Beurteilung des instationären turbulenten Grenzschichtverfahrens	103
7	Zusammenfassung	105
	Literatur	107

Abbildungsverzeichnis

1	Darstellung einer Strömungsgrenzschicht über städtischer Bebauung (sehr rauhes Gelände)	19
2	Vergleich zweier Windgeschwindigkeitsprofile für glattes und sehr rauhes Gelände.	20
3	In der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1 verwendetes Koordinatensystem [53] .	21
4	Darstellung einer anwachsenden Strömungsgrenzschicht mit Geschwindigkeitsprofilen	26
5	Schematische Darstellung der auftretenden Wärmeströme um eine Flüssigkeitslache	29
6	Schematische Darstellung des Lösungsalgorithmus	47
7	Vergleich der Massenströme über der Windgeschwindigkeit in 2m Höhe über dem Boden von Ethanol und Cyclohexan bei 30°C und einem Lachendurchmesser von 0,74m.	50
8	Gemessene Massenströme einer 30°C Ethanollache mit 0,74m Durchmesser in glattem und sehr rauem Gelände in Abhängigkeit von der Windgeschwindigkeit in 2 m Höhe über dem Boden.	50
9	Gemessene Massenströme einer 30°C Ethanollache mit 0,74m Durchmesser in glattem und sehr rauem Gelände in Abhängigkeit von der Windgeschwindigkeit in 10m Höhe über dem Boden.	51
10	Verschiebung der Messpunkte bei Auftragung über der Windgeschwindigkeit in 2 oder 10 m Höhe in glattem Gelände.	52
11	Verschiebung der Messpunkte bei Auftragung über der Windgeschwindigkeit in 2 oder 10 m Höhe in sehr rauem Gelände.	53
12	Schwankungen der Windrichtung während einer Messung in BAM-UE .	54
13	Schwankungen der Windgeschwindigkeit während einer Messung in BAM-UE	55
14	Verdunstungsmassenströme von Ethanol, Lachendurchmesser 0,74 m .	56
15	Verdunstungsmassenströme von Cyclohexan, Lachendurchmesser 0,74 m	56
16	Vergleich der Messwerte aus den Freilandversuchen mit dem Modell von Deutsch für glattes und sehr rauhes Gelände für eine Ethanollache bei 30°C und einem Durchmesser von 0,74 m.	59
17	Vergleich der Messwerte aus den Freilandversuchen mit den empirischen Modellen für eine Ethanollache bei 30°C und einem Durchmesser von 0,74m.	60
18	Vergleich der Messwerte aus den Freilandversuchen mit den empirischen Modellen für eine Cyclohexanlache bei 30°C und einem Durchmesser von 0,74m.	60
19	Vergleich der Messwerte aus den Freilandversuchen mit den empirischen Modellen für eine Ethanollache mit einem Durchmesser von 0,74 m bei unterschiedlichen Dampfdrücken und einer Windgeschwindigkeit von 2,5 m/s.	61
20	Vergleich der gemessenen mit den anhand der empirischen Modelle berechneten Massenstromdichten für verschiedene Lachendurchmesser. .	63

21	Einfluss der Lachengröße auf die mit den empirischen Modellen berechneten Massenstromdichten.	64
22	Vergleich der zeitabhängigen Lachenradien bei der reinen Ausbreitung einer Ethanollache für die Ansätze von Webber und Briscoe und Shaw sowie Schalau.	67
23	Vergleich der zeitabhängigen Lachenradien bei der Ausbreitung einer Ethanollache mit gleichzeitiger Verdunstung für die Ansätze von Webber und Schalau.	69
24	Vergleich der zeitabhängigen Verdunstungsmassenströme bei der Ausbreitung einer Ethanollache für die Ansätze von Webber und Schalau mit Berücksichtigung der Mindestschichtdicke.	71
25	Vergleich der von Splettstößer gemessenen und der mit dem Grenzschichtverfahren berechneten Kühlgrenztemperaturen für Benzol in laminarer Strömung bei einer Windgeschwindigkeit von 10 m/s.	73
26	Vergleich der von Splettstößer gemessenen und der mit dem Grenzschichtverfahren berechneten Kühlgrenztemperaturen für Benzol in laminarer Strömung bei einer Windgeschwindigkeit von 20 m/s.	73
27	Vergleich der experimentellen Daten aus den Freilandversuchen für eine Ethanollache bei 30°C mit den Berechnungsergebnissen aus dem Grenzschichtverfahren mit den Turbulenzmodellen nach Cebeci-Smith und Cebeci-Chang.	75
28	Vergleich der dimensionslosen turbulenten Viskosität aus dem CS-Modell mit den Werten aus dem CC-Modell für sehr raues Gelände bei gleicher Windgeschwindigkeit.	77
29	Vergleich der experimentellen Daten aus den Freilandversuchen für eine Cyclohexanlache bei 30°C mit den Berechnungsergebnissen aus dem Grenzschichtverfahren mit den Turbulenzmodellen nach Cebeci-Smith und Cebeci-Chang.	78
30	Vergleich der experimentellen Werte mit den berechneten Werten des Cebeci-Smith Turbulenzmodells für eine 0,74 m Ethanollache bei unterschiedlichen Dampfdrücken und einer Windgeschwindigkeit von 2,5 m/s.	79
31	Vergleich der berechneten Massenströme anhand des CS-Modells mit und ohne Dichteterm.	80
32	Vergleich der berechneten Konzentrations- und Dichteprofile anhand des CS-Modells mit und ohne Dichteterm für eine Cyclohexanlache mit 10 m Durchmesser und einem Dampfdruck von 0,65 bar.	81
33	Verdunstungsmassenströme einer Ethanollache bei 30°C und unterschiedlichen x bzw. ξ -Schrittweiten	84
34	Vergleich der Ergebnisse des Grenzschichtverfahrens mit den Ergebnissen der empirischen Modelle nach Clancey und Mackay-Matsugu sowie den experimentellen Daten für eine 30°C Ethanollache mit 0,74 m Durchmesser.	87
35	Vergleich der Ergebnisse des Grenzschichtverfahrens mit den Ergebnissen des empirischen Modells nach Clancey sowie den experimentellen Daten für eine 30°C Cyclohexanlache mit 0,74 m Durchmesser.	87

36	Experimentelle Konzentrationswerte in 1,5 cm Höhe über dem Boden im Nachlauf einer 0,74 m Ethanollache bei 44°C im Vergleich mit den berechneten Konzentrationen aus dem Grenzschichtverfahren.	89
37	Vergleich der Nachlaufkonzentrationen gemäß VDI Richtlinie 3783 Blatt 1 und 2, sowie nach dem Grenzschichtverfahren für einen 10x10m Ethanollache bei 30°C.	90
38	Vergleich der explosionsfähigen Masse in der Gaswolke mit den Modellen von Clancey, Mackay-Matsugu und Deutsch nach der Berechnungsmethode von ProNuSs, sowie nach dem Grenzschichtverfahren für einen 10x10m Ethanollache bei unterschiedlichen Dampfdrücken.	92
39	Vergleich der stationären Kühlgrenztemperatur nach Spletstösser mit der Lachentemperaturberechnung anhand des instationären Grenzschichtverfahrens.	93
40	Zeitlicher Verlauf der Absolutwerte der einzelnen in der Energiebilanz berücksichtigten Wärmen für eine Cyclohexanlache mit 10 m Durchmesser, 30°C Starttemperatur und einer Anströmgeschwindigkeit von 3 m/s.	95
41	Vergleich der berechneten zeitlichen Temperaturverläufe einer Cyclohexanlache auf Betonboden sowie einer dem Boden gegenüber isolierten Lache.	97
42	Gemessene Abkühlkurve einer 0,74 m Ethanollache mit einer Starttemperatur von 29,6°C im Vergleich mit den Berechnungsergebnissen des instationären Grenzschichtverfahrens für unterschiedliche Strahlungsstärken.	98
43	Gemessene Abkühlkurve einer 0,74 m Ethanollache mit einer Starttemperatur von 29,6°C im Vergleich mit den Berechnungsergebnissen des instationären Grenzschichtverfahrens und der empirischen Modelle von Clancey und Mackay-Matsugu.	99
44	Zeitliche Entwicklung der Lachentemperatur bei der Verdampfung von Chlor, Propan und Butan mit anschließendem Übergang zur Verdunstung.	101
45	Zeitliche Entwicklung des Massenstroms bei der Verdampfung von 80 l Propan mit anschließendem Übergang zur Verdunstung.	102
46	Zeitliche Entwicklung des Massenstroms bei der Verdampfung von 130 l Propan mit anschließendem Übergang zur Verdunstung.	103

Tabellenverzeichnis

2	Geländeklassen und Profilexponenten nach Deutsch [18]	13
3	Geländeklasseneinteilung gemäß VDI-Richtlinie 3783, Blatt1 [53]	23
4	Mittlerer Massenstrom und Massenstromdichte für verschiedene Größen einer Ethanollache bei 30°C	57
5	Abweichungen der berechneten Massenströme von den gemessenen für eine Ethanol- und eine Cyclohexanlache bei einem jeweiligen Dampfdruck von 0,3 bar	63

6	Massenströme der empirischen Modelle für eine rechteckige und eine runde Ethanollache mit jeweils 100 m^2 Fläche und einer Lachentemperatur von 30°C sowie einer Windgeschwindigkeit von $4,5 \text{ m/s}$	65
7	Vergleich der von Splettstößer ermittelten und der mit dem Grenzschichtverfahren berechneten Massenströme	74
8	Verdunstungsmassenströme einer Ethanollache bei 30°C und unterschiedlichen y bzw. η -Schrittweiten	82
9	Verdunstungsmassenströme einer Ethanollache bei 30°C und unterschiedlichen y bzw. η -Schrittweiten	83
10	Verdunstungsmassenströme einer Cyclohexanlache bei 30°C und unterschiedlichen Lufttemperaturen	85
11	Berechnete Massenströmdichten mit dem Grenzschichtverfahren für verschiedene Lachengrößen	88
12	Verdunstungsmassenströme einer Ethanollache bei 30°C und unterschiedlichen Zeitschritten	94
13	Verdunstungsmassenströme und Temperaturverluste einer Cyclohexanlache bei unterschiedlichen Wärmeströmen	96
14	Zeitabhängige Entwicklung der unteren Zünddistanz und der explosionsfähigen Masse für eine $10 \times 10 \text{ m}$ Ethanollache bei 30°C	100

Symbolverzeichnis

Lateinische Buchstaben

Symbol	Einheit	Beschreibung
A_{Lache}	m^2	Lachenfläche
a	W/m^2K	Wärmedurchgangskoeffizient (Gl. 35)
c	–	dimensionslose Konzentration
c_P	kJ/kgK	Wärmekapazität
D_{ab}	m^2/s	Diffusionskoeffizient
d	m	Durchmesser
g	m^2/s^2	Erdbeschleunigung
H	m	Höhe der Lache / Schichtdicke
h_{min}	m	Mindestschichtdicke der Lache
h_V	J	Verdampfungsenthalpie
k_s	mm	Sandrauigkeitsparameter
k_s^+	–	Äquivalente Sandrauigkeit
L_C	m	charakteristische Länge (Gl. 5)
L	m	charakteristische Länge (Gl. 6)
\tilde{M}	g/mol	molare Masse
m_{Lache}	kg	Masse der Lache
\dot{m}	kg/s	Massenstrom
\tilde{m}	kg/m^2s	flächenbezogene Massenstromdichte
p^{LV}	bar	Dampfdruck
p_e	bar	Druck am Grenzschichtausserand
$p_{U_{umgebung}}$	bar	Umgebungsdruck
Q	J	Energie / Wärme
\dot{Q}	W	Wärmestrom
R	$kJ/Kg \cdot K$	universelle Gaskonstante
r	m	Radius
r_0	m	Radius zum Zeitpunkt $t=0$
T_{Lache}	K	Temperatur der Flüssigkeit in der Lache
t	s	Zeit
u	m/s	horizontale Geschwindigkeitskomponente
u_{ref}	m/s	Windgeschwindigkeit in der Referenzhöhe z_{ref}
u_τ	m/s	Schubspannungsgeschwindigkeit
V	m^3	Volumen
V_{Lache}	m^3	Volumen der Lache
\dot{V}	m^3/s	Volumenstrom
v	m/s	vertikale Geschwindigkeitskomponente
x	m	Länge in Strömungsrichtung / Länge
y	m	Länge quer zur Strömungsrichtung / Breite
z	m	Länge vertikal zum Boden / Höhe
z_{ref}	m	Referenzhöhe

Griechische Buchstaben

Symbol	Einheit	Beschreibung
α	–	Profilexponent (Tab. 1)
α	–	Transformationsparameter (Gl. 71)
α	W/m^2K	Wärmeübergangskoeffizient (Gl. 36)
β	m/h	Stoffübergangskoeffizient (Gl. 11 und 12)
β	$kg/m \cdot s$	Transformationsparameter (Gl. 71 und 74)
η	–	dimensionslose transformierte y-Koordinate
λ	W/mK	Wärmeleitungskoeffizient
μ	$kg/m \cdot s$	dynamische Viskosität
ν	m^2/s	kinematische Viskosität
ν_t^+	–	dimensionslose turbulente Scheinzähigkeit
ξ	m	transformierte x-Koordinate
ρ	kg/m^3	Dichte
ρ_{fl}	kg/m^3	Dichte der Flüssigkeit
ρ_{Gas}	kg/m^3	Gasdichte
ρ_{Luft}	kg/m^3	Luftdichte
σ	–	Sichtfaktor (Gl. 38)
τ	N/m^2	Schubspannung
Ψ	–	Stromfunktion

Dimensionslose Kennzahlen

Symbol	Einheit	Beschreibung
Pr	–	Prandtl-Zahl
Sc	–	Schmidt-Zahl
Re	–	Reynolds-Zahl

1 Einleitung und Zielsetzung

Betreiber, deren Betriebsbereiche den erweiterten Pflichten der Störfallverordnung [1] unterliegen, müssen einen Sicherheitsbericht anfertigen, in dem Szenarien möglicher Störfälle beschrieben sind. Neben den Bedingungen für ihr Eintreten ist eine Abschätzung des Ausmaßes und der Schwere der Folgen der ermittelten Störfälle erforderlich. Im Rahmen dieser Störfallauswirkungsbetrachtungen müssen unter anderem die Verdunstung und die Verdampfung einer brennbaren oder toxischen Flüssigkeit aus einer Lache berechnet werden.

Angefangen bei der Abschätzung der zu erwartenden Leckgröße und der damit einhergehenden Freisetzung der Flüssigkeit durch die Leckage und des daraus resultierenden Massenstromes, muss die Bildung der Lache und deren Wachstum berücksichtigt werden. Hierbei ist relevant, ob die Flüssigkeit in eine Auffangwanne läuft und somit in ihrer Ausbreitung begrenzt ist oder auf freiem Gelände freigesetzt wird, wo sie sich unbegrenzt ausbreiten kann. Weiterhin spielt das Bodenmaterial eine Rolle, da z.B. auf einem Betonboden andere Lachenausbreitungsgeschwindigkeiten und Lachendicken zu erwarten sind als z.B. auf Sandboden.

Für die Beschreibung des Stoffüberganges aus der Lache in die Gasphase sind mehrere Einflussfaktoren zu berücksichtigen. Zum einen ist die Lachentemperatur bei der Freisetzung entscheidend dafür, ob eine Verdunstung (Lachentemperatur unterhalb der Siedetemperatur des freigesetzten Stoffes) oder eine Verdampfung (Lachentemperatur entspricht der Siedetemperatur des Stoffes) vorliegt. Zum anderen wird der aus der Flüssig- in die Gasphase übergehende Verdunstungsmassenstrom durch die herrschende Windgeschwindigkeit und die Turbulenz beeinflusst. Dabei spielt für die Beurteilung der Turbulenz die Bebauungsstruktur der näheren Umgebung eine Rolle, da Gebäude zu einer höheren Verwirbelung der Luft führen. Ebenso ist die Änderung der Lachentemperatur zu berücksichtigen, da z.B. eine sinkende Lachentemperatur zu geringeren Verdunstungsmassenströmen führt.

Als letzter Schritt bei der Beurteilung eines solchen Störfalles muss die Gasausbreitung in der Umgebung der Lache berechnet werden. Aus diesen Berechnungen lassen sich dann Zielgrößen wie z.B. die explosionsfähige Masse in der Gaswolke, die untere Zünddistanz (UZD) oder Toxizitätsgrenzen bestimmen. Diese Informationen können dann entweder für die Genehmigung zum Bau einer Anlage im Sinne des Schutzes der

Bevölkerung, oder zur innerbetrieblichen Optimierung des Sicherheitskonzeptes zum Schutz der Anlage verwendet werden.

Für die Berechnung von Leckgrößen und den daraus resultierenden Freisetzungsmassenströmen existieren mehrere empirische Modelle wie z.B. das Modell von Brötz [3] oder von Strohmeier [4]. Ebenso werden im Leitfaden SFK/TAA-GS-1 [2] Empfehlungen für die im Rahmen der Flächennutzungsplanung anzunehmenden Leckgrößen gegeben. Anhand der Betriebsbedingungen, insbesondere des im flüssigkeitsführenden Anlagenteil herrschenden Druckes, kann dann über Ausflussgleichungen der austretende Massenstrom bestimmt werden [5].

Der Massenstrom geht dann in die Berechnung der Lachenausbreitung ein, um die Lachenfläche bestimmen zu können. Die Kenntnis der Lachenfläche ist in doppelter Hinsicht relevant. Zum Einen wird der Massenstrom direkt durch die zur Verfügung stehende Austauschfläche für den Stoff- und Wärmetransport beeinflusst, zum Anderen bewirkt die von der Fläche abhängige überströmte Länge Änderungen in den Gradienten des Stoff- und Wärmeübergangs, was sich wiederum auf den Massenstrom auswirkt. Aufgrund dieses direkten Einflusses auf den Verdunstungsmassenstrom ist nicht nur die Erfassung des Lachenwachstums solange wie der Lache Stoff zugeführt wird wichtig, sondern auch das anschließende Schrumpfen der Lache durch die Verdunstung.

Zur Berechnung der Lachenausbreitung wurden diverse Untersuchungen durchgeführt. Hierbei wurden nicht nur Formeln für die Ausbreitung auf festem Boden entwickelt [49], [27], [39], [35], sondern auch das Ausbreitungsverhalten auf Wasser beschrieben [6],[7]. Briscoe [49] entwickelte ein empirisches Modell, welches zwischen spontaner und kontinuierlicher Freisetzung unterscheidet. Hierbei wird jedoch die Ausbreitung der Lache bei kontinuierlicher Freisetzung nur so lange stattfinden, wie ein Volumenstrom der Lache zugeführt wird. Eine weitere Ausbreitung nur aufgrund von Schwerkrafteffekten wurde ebensowenig berücksichtigt wie die Viskosität oder die Oberflächenspannung. Webber [27], dessen Ansatz auch im Yellow Book der TNO [39] aufgeführt ist, leitete für die Beschreibung der Ausbreitung einer Lache eine Differentialgleichung her, in der auch die reine Ausbreitung nur aufgrund von Schwerkrafteffekten, sowie die Viskosität und die Oberflächenspannung berücksichtigt wurden. Der Ansatz von Webber erscheint somit geeigneter, um die Lachenausbreitung zu beschreiben. Bei beiden Ansätzen wird jedoch das Schrumpfen der Lache durch Verdunstung nicht berücksichtigt.

Der Stoffübergang aus einer Flüssigkeitslache in eine darüber streichende Gasphase wird durch die Überlagerung von diffusiven und konvektiven Prozessen bestimmt. Da die „treibende Kraft für die Stoffübertragung (...) Konzentrations-, Temperatur- und Druckgradienten“ [22] sind, führt eine steigende Strömungsgeschwindigkeit der Gasphase zu einem schnelleren Abtransport der in die Gasphase übergegangenen Stoffmenge, also zu einer Erhöhung des konvektiven, sowie daraus resultierend, des diffusiven Transports bis zum Erreichen des maximalen Diffusionsmassenstromes, welcher die Obergrenze der Verdunstung darstellt.

Dieser physikalische Sachverhalt wurde in empirischen Modellen abgebildet, welche häufig zur Berechnung des Verdunstungsmassenstromes herangezogen werden.

Das grundlegende Modell hierzu basiert auf der Arbeit von Sutton [11], die anhand von Windkanalexperimenten von Pasquill [12] weiterentwickelt wurde. 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. Des Weiteren schlägt Sutton einen Ansatz zur Berücksichtigung der Turbulenz der Anströmung vor. Hierbei gilt jedoch einschränkend, dass die Turbulenz der Atmosphäre und somit der Anströmung, nach Suttons Definition, hauptsächlich von der Temperaturschichtung der Atmosphäre abhängt. Eine Abhängigkeit von der Bodenrauigkeit wird zwar angenommen, jedoch wird deren Einfluss auf die Turbulenz der Atmosphäre als wesentlich geringer angesehen als der der Temperaturschichtung [11].

Pasquill schlug aufgrund seiner Untersuchungen im Windkanal die Ersetzung der in dem Modell verwendeten kinematischen Viskosität durch den Diffusionskoeffizienten vor, da er nachweisen konnte, dass dadurch eine bessere Übereinstimmung zwischen den berechneten und den gemessenen Werten erreicht wird. Diese Änderung wurde von Sutton akzeptiert und das so veränderte Modell als Sutton-Pasquill Modell bezeichnet [15].

Auf dieser Basis wurden weitere empirische Gleichungen [15], [18] entwickelt. Unter diesen ist das weit verbreitete Modell von Mackay-Matsugu [19] nochmals gesondert hervorzuheben. Mackay und Matsugu führten im Gegensatz zu Sutton und Pasquill Freiland- statt Windkanalversuche durch. Hierbei wurden Versuchsorte mit unterschiedlicher Topografie ausgewählt, wobei Versuche auf dem Dach eines Gebäudes und an einem Hafenbecken durchgeführt wurden. Als Ergebnis dieser Untersuchun-

gen wurde eine Abwandlung der Sutton-Pasquill Gleichung vorgestellt.

Weitere Modelle, wie die von Colburn [8], Zhukauskas [9], Smolsky [10] und Popov und Schlichting [14], basieren auf der Analogie zwischen Stoff- und Wärmeübergang. Ausgehend von den bekannten Gleichungen zur Beschreibung des Wärmeübergangs wird eine Formulierung für die Sherwoodzahl und somit den Stoffübergangskoeffizienten abgeleitet, die ausschließlich eine Funktion der Reynolds- und der Schmidtzahl ist. Lediglich Smolsky erweiterte seinen Ansatz um einen Term, der den Unterschied zwischen Lachen- und Umgebungstemperatur berücksichtigt. Wobei anzumerken ist, dass in Smolskys Ansatz die Lachentemperatur zwingendermaßen unterhalb der Lufttemperatur liegen muss, da sonst modellbedingt negative Verdunstungsmassenströme auftreten. Die zur Validierung der jeweiligen Modelle durchgeführten Versuche basieren jedoch auf einer Versuchseinrichtung, die nicht mit den bei Störfällen vorliegenden Gegebenheiten in Einklang gebracht werden kann. So wurden Untersuchungen im Windkanal durchgeführt, bei denen eine Platte in freier Strömung angebracht war, so dass sich erst an der Plattenspitze eine Grenzschicht ausbildete; im Gegensatz zu den Versuchen von z.B. Sutton und Pasquill, bei denen die Platte in den Windkanalboden eingelassen war. Letzteres entspricht auch viel eher den Gegebenheiten bei einem Störfall mit Lachenbildung, da dort die schon ausgebildete atmosphärische Grenzschicht vorliegt und die Lache strömungstechnisch lediglich als Teil des Bodens zu sehen ist.

Lebuser [35] führte experimentelle Untersuchungen im Windkanal und im Freien durch, um das Verdampfungs- und Verdunstungsverhalten von verschiedenen Frigenen und Methanol zu untersuchen. Um die Messwerte nachzurechnen, bediente er sich der o.g. Modelle und leitet aus der Wärme- und Stoffübergangsanalogie eine eigene Gleichung für turbulente Strömungen ab und kommt zu dem Schluss, dass eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen Messungen und Berechnungen erreicht wurde. Weiterhin untersuchte er den Einfluss der Energiebilanz auf die Genauigkeit der Berechnungen im Vergleich zu seinen experimentellen Untersuchungen. In Kombination mit einem einfachen zeitabhängigen Modell für den Massenstrom kommt Lebuser zu dem Schluss, dass die Lösung der Energiebilanz über die dadurch mögliche genaue Bestimmung der Lachentemperatur und somit des Dampfdruckes zu einer exakteren Abschätzung des Massenstromes führt.

Deutsch [18] beschäftigte sich eingehender mit der Turbulenz der Anströmung und deren Einfluss auf den Verdunstungsmassenstrom. Anhand von Windkanal- und Freiland-

versuchen wurde eine weitere empirische Vorhersagegleichung entwickelt, die ebenso wie das Modell von Sutton über einen Ansatz zur Einstellung der Turbulenz verfügt. Im Unterschied zu Sutton bezieht Deutsch die Turbulenz jedoch maßgeblich auf die Topografie des Geländes und somit auf die vorliegende Bodenrauigkeit. Des Weiteren entwickelte er eine neue Gleichung für den Wärmeübergang, da er nachweisen konnte, dass die Analogieannahme zwischen Wärme- und Stoffübergang für die Verdunstung nicht gilt. Somit sind, nach seiner Aussage, die Ansätze von Colburn, Zhukauskas, Smolksy und Popov-Schlichting nicht nur aufgrund der verwendeten Versuchsaueinrichtung zweifelhaft, sondern auch durch die Annahme dieser Analogie. Ebenso sollen die Ergebnisse von Lebuser nicht verwendbar sein, da dieser nach Aussage von Deutsch eine falsche Windkanalkonfiguration benutzt hat, um seine Messwerte, die er zur Validierung verwendet hat, zu erzeugen. Die Anwendbarkeit der Modelle für die Abschätzung von Störfällen muss dementsprechend noch einmal überprüft werden.

Empirische Modelle stellen zwar eine schnelle und einfache Methode dar, den Massenstrom aus einer verdunstenden Lache zu bestimmen, die Modellannahmen und getroffenen Vereinfachungen führen jedoch dazu, dass in den meisten Fällen geometrische und atmosphärische Einflüsse nicht berücksichtigt werden können. So wird zum Beispiel nur die überströmte Länge, meist jedoch nicht die Form der Lache berücksichtigt. Bis auf das Modell von Deutsch kann die Bebauungsstruktur des Geländes nicht berücksichtigt werden. Des Weiteren werden die Stoffdaten der Anströmung der Lache grundsätzlich als konstant angenommen (reine Luft bei 20°C), so dass ein möglicher Einfluss auf den Massenstrom nicht betrachtet wird.

Außerdem ist festzustellen, dass die Ergebnisse der einzelnen Modelle teilweise sehr große Abweichungen voneinander aufweisen [18], [23], ohne dass bisher geklärt wurde, wie gut die einzelnen Modelle Freilandversuche abschätzen können. Eine Bestimmung der für eine sicherheitstechnische Bewertung gewünschten Zielgrößen, wie die untere Zünddistanz oder Toxizitätsgrenzen, kann nur durch die Kopplung mit weiterführenden Gasausbreitungsmodellen erreicht werden.

Als Zwischenschritt von der empirischen zur analytischen Beschreibung des Verdunstungsvorganges ist das sog. „Integralmodell“ von Kunsch [16] zu erwähnen. Er bediente sich der „Konvektions-Diffusionsgleichung“, um einen analytischen Ausdruck für den Verdunstungsmassenstrom abzuleiten. Hierzu musste er die parabolische Differentialgleichung für die Konzentration integrieren, um einen analytisch lösbaeren Ausdruck zu bekommen. Er verglich sein Modell mit den Modellen von Sutton und Brighton sowie Messwerten. Letztere sind in dimensionsloser Form wiedergegeben und die in

der Veröffentlichung enthaltenen Angaben erlauben es nicht, auf die ursprünglichen Messwerte zurückzurechnen. Kunsch kommt zu dem Schluss, dass das von ihm vorgeschlagene Modell trotz seiner Einfachheit mit komplexeren Modellen vergleichbar ist, wenn es um die Genauigkeit der Berechnung geht. Bei diesen Berechnungen werden aber Einflüsse auf die Geschwindigkeits- und Temperaturprofile in der Grenzschicht durch den verdunstenden Stoff nicht berücksichtigt. Die Änderung der Windgeschwindigkeit über die Höhe wird hier anhand eines Potenzansatzes berücksichtigt.

Splettstösser [28] ging in seiner Arbeit zur experimentellen und theoretischen Untersuchung der Verdunstung von reinen Stoffen in eine laminare Strömung einen Schritt weiter und verwendete zur Modellierung des Verdunstungsvorganges die Lösung der zweidimensionalen stationären Grenzschichtgleichungen. Zur Untersuchung der Einflussparameter wie z.B. Anströmtemperatur und überströmte Länge verwendete er mit Benzol benetzte Platten unterschiedlicher Länge, welche in einen beheizten Windkanal eingebracht wurden. Er stellte fest, dass die Lösung der Grenzschichtgleichungen eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten ergab. Insbesondere merkte er an, dass mit dem Grenzschichtverfahren die Rückwirkung des Stoffübergangs auf das Geschwindigkeits- und Temperaturfeld berücksichtigt werden kann, was eine Begründung für die gute Übereinstimmung sei. Baumann [24] verwendete auch ein zweidimensionales stationäres Grenzschichtverfahren, jedoch erweitert um ein Turbulenzmodell, um die Verdunstung in eine turbulente Strömung berechnen zu können. In seiner Arbeit untersuchte er zwei verschiedene Turbulenzmodelle hinsichtlich des Aufwandes bei der Modellierung und der dadurch erzielten Genauigkeit bei der Berechnung. Baumann kommt zu dem Schluss, dass für die von ihm untersuchten Turbulenzmodelle im Rahmen eines Grenzschichtverfahrens die Verwendung einfacher Modelle ausreichend ist. Der Einsatz komplexerer Modelle führt, laut seiner Aussage, nur zu einem marginalen Zugewinn an Genauigkeit, erhöht parallel aber massiv den Rechenaufwand.

Heutzutage wird aufgrund der gestiegenen Rechnerleistung und der ständig verbesserten Berechnungssoftware, sowie durch genauere Modellierung der physiko-chemischen Prozesse zunehmend CFD angewendet. Zwar verspricht dieser Ansatz durch die Lösung der vollständigen, dreidimensionalen Navier-Stokes Gleichungen die momentan höchstmögliche Genauigkeit bei der Simulation, erfordert jedoch einen sehr großen Aufwand hinsichtlich Investition, Fachkenntnis des Benutzers, Modellierungs- sowie Rechenzeit.

Die bisher vorgestellten Berechnungsansätze (bis auf die CFD-Modelle) gehen von einer konstanten Lachentemperatur aus. In der Realität jedoch wird sich die Lachentemperatur aufgrund des Verdunstungsmassenstromes und des Wärmeaustauschs mit der Umgebung immer zeitlich verändern. Die Änderung der Lachentemperatur führt zu einem zeitlich veränderlichen Dampfdruck und Massenstrom. Um die Änderung der Lachentemperatur berechnen zu können, muss die Energiebilanz um die Lache gelöst werden. Hierbei werden alle ein- und ausgehenden Wärmeströme der Lache bilanziert. Wie bei u.a. Lebuser [35] dargestellt, sind die Wärmeströme durch Konvektion, Wärmeleitung aus dem Boden, durch Sonneneinstrahlung und durch Verdunstung zu berücksichtigen. Insbesondere bei dem wärmedominierten Vorgang der Verdampfung hat die Wärmeübertragung zwischen dem Boden und der Lache einen signifikanten Einfluss auf den Massenstrom, welcher ohne Energiebilanz nicht erfasst wird.

Die aus den empirischen Modellen errechneten Verdunstungsmassenströme dienen als Eingangsgröße für Modelle zur Berechnung der Gasausbreitung. Hier hat sich in Deutschland die VDI-Richtlinie 3783, Blatt 1 und 2 [53] für die Ausbreitung von leichten und schweren Gasen etabliert. Die VDI-Richtlinie 3783, Blatt 1 zur Ausbreitung von leichten Gasen ermöglicht die Berücksichtigung einer Punkt- sowie einer Flächenquelle.

Der größte Nachteil dieser Richtlinie liegt darin begründet, dass aufgrund der modellbedingten Verwendung von Streuungen zur Turbulenzmodellierung, erst ab Entfernungen von ca. 100 m von der Quelle zuverlässige Werte berechnet werden können. Im Nahbereich unterhalb von 100 m muss eine Interpolation dieser Streuungen vorgenommen werden, die zu ungenauen Ergebnissen führt. Mit der VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2 zur Ausbreitung von schweren Gasen kann zwar die Gasausbreitung im Nahbereich der Quelle berechnet werden, durch die Annahme einer Punktquelle gehen jedoch jegliche Informationen zur Lachengeometrie und Lachenfläche und deren Einflüsse auf den Verdunstungsmassenstrom verloren. Die Annahme, dass die gesamte Masse über einen Punkt statt einer Fläche freigesetzt wird, führt zu höheren Quellkonzentrationen, so dass die Annahme einer Punktquelle zu einer konservativeren Abschätzung als bei der Berücksichtigung einer Flächenquelle führt.

Die Verwendung eines Grenzschichtverfahrens bietet den Vorteil, dass alle relevanten Größen wie Windgeschwindigkeit, Temperatur und Konzentration über die gesamte Höhe der Grenzschicht berechnet werden. Da sich die Berechnung nicht nur auf die Lache beschränkt, sondern auch bis in beliebige Entfernungen hinter der Lache aus-

gedehnt werden kann, bietet sich hier die Möglichkeit, eine Aussage zur Konzentrationsverteilung im Nahbereich zu erhalten. Aus einer solchen Berechnung kann dann auch abgeleitet werden, ob bei der Verdunstung aus Lachen überhaupt ausreichend Stoff in die Atmosphäre gelangt, um eine Schwergasberechnung zu rechtfertigen, oder ob die bei der Verdunstung recht geringen Massenströme nicht viel eher eine Leichtgasausbreitung bedingen.

Schwere Gase breiten sich eher wie Flüssigkeiten aus. Die spezifische Lage, Größe und Orientierung der Gebäude / Hindernisse in Lee der Quelle spielt somit für die Konzentrationsverteilung eine wesentlich größere Rolle, als bei den leichten Gasen. Die Berücksichtigung des Einflusses von Gebäuden auf die Gasausbreitung gemäß ihres genauen Aufstellungsortes und ihrer genauen Orientierung, kann nur durch Berechnungen mit CFD und geeigneter Turbulenzmodellierung erfolgen. Die VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2 bietet die Möglichkeit für die Ausbreitung schwerer Gase bestimmte Bebauungssituationen gesondert zu berücksichtigen. Es wurden 26 Beispielkonfigurationen für die mögliche Bebauung untersucht. Somit kann aus diesen eine Konfiguration ausgewählt werden, die der tatsächlichen Bebauungssituation am ehesten entspricht. Bei der Verwendung anderer Berechnungsmethoden, wie z.B. eines Grenzschichtverfahrens, kann die konkret vorliegende Bebauung durch eine Bodenrauigkeit für den vorliegenden Geländetyp ersetzt werden. In der VDI-Richtlinie 3783 wurde eine Aufteilung in fünf unterschiedliche Geländeklassen, von unbebautem Ackerland bis hin zur innerstädtischen Bebauungsstruktur vorgenommen. Zwar gehen somit spezifische Informationen zu den einzelnen Gebäuden verloren, jedoch kann die Turbulenz der Anströmung mit ausreichender Genauigkeit approximiert werden. Diese Einteilung wird allgemein angewandt.

Zur Abschätzung der explosionsfähigen Masse in der Gaswolke, die sich durch die Lachenverdunstung gebildet hat, kann die VDI-Richtlinie 3783 herangezogen werden. Diese ermöglicht es, zu den berechneten Konzentrationen in Lee der Lache eine explosionsfähige Masse zu bestimmen. Aussagen zur explosionsfähigen Masse in der Gaswolke direkt über der Lache sind jedoch nicht möglich. Ein Ansatz diese zu berechnen ist im Programm ProNuSs [58] implementiert. Es wird angenommen, dass sich oberhalb der Lache ein explosionsfähiges Gas-Luft-Gemisch bildet, das ideal durchmischt ist und dessen Konzentration gerade der unteren Explosionsgrenze entspricht. Zur Berechnung der explosionsfähigen Masse über der Lache wird ein fiktiver Raum angenommen, für den das Modell eines idealen kontinuierlichen Rührkessels angewandt wird. Da beim Grenzschichtverfahren über der Lache die Profile zur Konzentrations-

verteilung über die Höhe der Grenzschicht berechnet werden, kann durch Integration derselben eine Berechnung der explosionsfähigen Massen in der Lache erfolgen, ohne auf die für den Ansatz aus ProNuSs [58] getroffenen Annahmen zurückgreifen zu müssen.

Um eine Abschätzung der Qualität und Anwendbarkeit der genannten Methoden liefern zu können, werden Messwerte benötigt. In der Literatur sind einige Veröffentlichungen zu experimentellen Untersuchungen zum Thema der Verdunstung aus Lachen zu finden. Hierbei ist festzustellen, dass die meisten Veröffentlichungen [11], [35], [18], [38], [39], [41] zwar Massenströme auflisten, die gemessen wurden, jedoch ohne die Randbedingungen, die bei den Versuchen herrschten, wiederzugeben, so dass eine Vergleichsrechnung oftmals nicht möglich ist. Lediglich wenige Arbeiten wie z.B. [12],[28] verfügen über eine ausreichende Dokumentation der Versuchsrandbedingungen, um diese nachrechnen zu können.

Die meisten dieser Untersuchungen wurden im Windkanal durchgeführt. Dadurch können die Randbedingungen exakt eingestellt werden und die einzelnen Messungen weisen eine gute Reproduzierbarkeit auf. Diese Versuche sind somit sehr gut geeignet, um simuliert zu werden. Der Nachteil dieser Versuche ist aber, dass diese Laborbedingungen nicht den Bedingungen entsprechen, die bei realen Freisetzungsunfällen in chemischen Anlagen vorliegen. So wurden in den Windkanalversuchen weder der Einfluss der Umgebung auf die Turbulenz der Anströmung, noch die natürlichen Schwankungen der Windgeschwindigkeit und -richtung berücksichtigt. Um die Leistungsfähigkeit eines Vorhersagemodells für den realen Fall bestimmen zu können, muss dieses anhand von Freilandversuchen validiert werden. Hierzu sind jedoch keine ausreichend dokumentierte Daten vorhanden [35],[18].

Experimente zur Verdampfung von tiefkalt oder druckverflüssigt gelagerten Gasen wurden hauptsächlich in den Vereinigten Staaten von Amerika sowie in England in den 1970er und 1980er Jahren in größerem Maßstab (mehrere Kubikmeter freigesetztes Volumen) durchgeführt [37], [31], [29], [20], [42], [32]. Da bei diesen Versuchen jedoch nur die Gas- und Lachenausbreitung untersucht wurden, sind aus diesen Veröffentlichungen keine Werte für die Validierung von Verdampfungssimulationen zu ziehen. Die Arbeit von Böke und Hartwig [33] dokumentiert den Einsatz von Löschsäumen zur Massenstromminderung bei der Verdampfung. Hierzu wurden Verdampfungsversuche mit Propan und Ammoniak durchgeführt, welche einen Satz an nachvollziehbaren Daten zu Verdampfungsmassenströmen bilden.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass empirische Modelle durch ihre ausschließliche Beschränkung auf den Verdunstungsmassenstrom nur in Verbindung mit Modellen zur Gasausbreitungsberechnung die eingangs erwähnten Zielgrößen wie untere Zünddistanz, Toxizitätsgrenzen oder explosionsfähige Masse in der Lache liefern können. Der Einsatz von CFD-Modellen würde zwar all diese Anforderungen erfüllen, der Aufwand der dabei betrieben werden müsste, steht jedoch in keinem Verhältnis zum Zugewinn an Genauigkeit für den gewünschten Anwendungsbereich der Störfallauswirkungsbetrachtungen im Rahmen der Störfallverordnung. Die Verwendung eines Grenzschichtverfahrens verspricht in diesem Fall das beste Verhältnis zwischen erhöhtem Rechenaufwand und exakterer Berechnung.

Aufbauend auf der Arbeit von Baumann wird deshalb in dieser Arbeit ein instationäres Grenzschichtverfahren mit geeigneter Turbulenzmodellierung zur Berechnung des Stoffübergangs aus einer Lache entwickelt. Hierbei werden zwei unterschiedliche Turbulenzmodelle untersucht. Die Berücksichtigung eines instationären Ansatzes zur Lachenausbreitung, sowie der Energiebilanz soll eine genauere Wiedergabe der bei Störfällen auftretenden Vorgänge ermöglichen. Die daraus resultierende Kenntnis der Wärmeströme und der zeitabhängigen Lachentemperatur ermöglicht die Berechnung der Verdampfung aus einer Lache, inklusive der Unterkühlung derselben und dem anschließenden Übergang zur Verdunstung. Anhand der aus der Lösung der Grenzschichtgleichungen resultierenden Konzentrationsprofile über und im Nachlauf der Lache, können Angaben zu den Zielgrößen explosionsfähige Masse, untere Zünddistanz oder Toxizitätsgrenzen in der Gaswolke gemacht werden.

Aufgrund des Mangels an nachvollziehbaren veröffentlichten Daten zur Verdunstung, werden zur Validierung des in dieser Arbeit entwickelten instationären Verfahrens Freilandversuche zur Verdunstung reiner Kohlenwasserstoffe durchgeführt. Hierbei wird der Einfluss der Topografie und somit der Turbulenz der Anströmung auf den Verdunstungsmassenstrom untersucht und eine Vorgehensweise für die Behandlung unterschiedlicher Topografien vorgeschlagen. Abschließend wird die Leistungsfähigkeit des hier vorgestellten Verfahrens durch den Vergleich mit empirischen Modellen und den in der Literatur vorhandenen Windkanaldaten, sowie den Daten aus den oben genannten eigenen Freilandversuchen ermittelt.

2 Theoretische Grundlagen

Zur Beschreibung der Verdunstung aus einer Flüssigkeitslache in die umgebende Atmosphäre muss die Stoffübertragung zwischen einer flüssigen und einer gasförmigen Phase betrachtet werden. Wie im vorigen Kapitel schon erwähnt, existieren empirische Ansätze, um den Verdunstungsmassenstrom abzuschätzen, ebenso wie das möglicherweise zu berücksichtigende Anwachsen oder Schrumpfen der Lache. Um auf die für eine Sicherheitsanalyse relevanten Größen wie die UZD, Toxizitätsgrenzen oder die explosionsfähige Masse zu kommen, müssen diese empirischen Ansätze mit weiterführenden Berechnungsmodellen zur Gasausbreitung gekoppelt werden.

In diesem Kapitel sollen einige empirische Modelle zur Berechnung des Verdunstungsmassenstromes, Ansätze zur Lachenausbreitung, ein Ansatz zur Gasausbreitung, sowie der Einfluss der Topografie auf den Stoffübergang vorgestellt werden.

2.1 Empirische Verdunstungsmodelle

Bisher werden in sicherheitstechnischen Abschätzungen zum Verdunstungsmassenstrom aus einer Flüssigkeitslache meistens empirische Modelle eingesetzt. Diese bieten den Vorteil einer einfachen Handhabung und eines geringen Rechenaufwandes. Als Nachteil ist bei diesen Modellen jedoch zu sehen, dass es sehr viele davon gibt, die alle auf unterschiedlichen Annahmen basieren. Die Ergebnisse für einen konkreten Berechnungsfall mit verschiedenen empirischen Modellen weichen somit meist stark voneinander ab. Um eine Aussage bezüglich der Leistungsfähigkeit und Genauigkeit dieser Modelle machen zu können, werden in dieser Arbeit einige bekannte und zum Teil weit verbreitete Ansätze ausgewählt, um diese mit experimentellen Ergebnissen zu vergleichen. In einem weiteren Schritt werden diese Modelle anschließend mit dem hier vorgestellten Grenzschichtverfahren verglichen.

Wie in der Einleitung schon erwähnt, müssen die empirischen Modelle mit einem Gasausbreitungsmodell wie die VDI-Richtlinie 3783 [53] gekoppelt werden, um die für eine Sicherheitsanalyse relevanten Größen wie die UZD, Toxizitätsgrenzen oder die explosionsfähige Masse zu erhalten.

Die in dieser Arbeit verwendeten Modelle werden im Folgenden vorgestellt.

2.1.1 Das Modell von Sutton Pasquill

Das Modell von Sutton - Pasquill [15], welches als Grundlage für die meisten empirischen Modelle genutzt wurde, basiert auf der Lösung der Stofftransportgleichungen in einer turbulenten Strömung. Hierbei wird der Massenstrom in Abhängigkeit der überströmten Länge, der Strömungsgeschwindigkeit, der Lachengröße, sowie des Dampfdruckes und des Diffusionskoeffizienten berechnet. Umgeformt für die Eingabe von SI Einheiten ergeben sich die folgenden Gleichungen zur Berechnung des Verdunstungsmassenstroms:

rechteckige Lache:

$$\dot{m} = 0,394 \cdot u^{0,78} \cdot x^{0,89} \cdot y \cdot \frac{p^{LV} \cdot \tilde{M}}{R \cdot T_{Lache}} \cdot \left(\frac{D_{AB}}{1,47 \cdot 10^{-5}} \right)^{0,22} \quad (1)$$

kreisförmige Lache:

$$\dot{m} = 0,316 \cdot u^{0,78} \cdot d^{1,89} \cdot \frac{p^{LV} \cdot \tilde{M}}{R \cdot T_{Lache}} \cdot \left(\frac{D_{AB}}{1,47 \cdot 10^{-5}} \right)^{0,22} \quad (2)$$

2.1.2 Das Modell von Clancey

Basierend auf den Gleichungen von Sutton-Pasquill leitete Clancey [13], [15], [17] eigene Gleichungen zur Abschätzung des Verdunstungsmassenstromes her. Eine Überprüfung der Primärliteratur ergab, dass das Modell physikalisch nicht nachvollziehbar abgeleitet wurde, so dass die Gleichungen als reine Zahlenwertgleichungen anzuwenden sind.

rechteckige Lache:

$$\dot{m} = 2,63 \cdot 10^{-2} \cdot u^{0,78} \cdot x^{0,89} \cdot y \cdot \frac{p^{LV} \cdot \tilde{M}}{T_{Lache}} \quad (3)$$

kreisförmige Lache:

$$\dot{m} = 2,12 \cdot 10^{-2} \cdot u^{0,78} \cdot d^{1,89} \cdot \frac{p^{LV} \cdot \tilde{M}}{T_{Lache}} \quad (4)$$

2.1.3 Das Modell von Mackay - Matsugu

Mackay und Matsugu führten Versuche zur Verdunstung von Wasser-, Benzin- und Benzollachen auf einem Hochhausdach sowie in einem Hafenbecken durch. Dabei

sollte der Einfluss der Bebauung auf die Turbulenz und somit auf die Windprofile untersucht werden. Aus diesen Feldversuchen leiteten Mackay und Matsugu eine allgemeine Gleichung [19],[15] für den Stoffübergangskoeffizienten ab, die zu folgender Gleichung zur Berechnung des Massenstromes führt:

$$\dot{m} = 17,35 \cdot u^{0,78} \cdot L_c^{-0,11} \cdot \left(\frac{\nu}{D_{AB}} \right)^{-0,67} \cdot \frac{A_{Lache} \cdot p_{Umgebung}}{R \cdot T_{Lache}} \cdot \ln \left(\frac{p_{Umgebung}}{p_{Umgebung} - p^{LV}} \right) \quad (5)$$

Es erfolgt hierbei keine Unterscheidung zwischen runden und rechteckigen Lachen. Für die charakteristische Länge L_c wird entweder der Durchmesser der Lache oder bei einer rechteckigen Lache die Länge in Windrichtung angesetzt.

2.1.4 Das Modell von Deutsch

Aufgrund der von ihm festgestellten starken Abweichungen der untersuchten empirischen Modelle von den Messwerten bei steigender Turbulenz, entwickelte Deutsch [18], basierend auf Windkanal- und Freilandversuchen, die er durchgeführt hat, eine neue Vorhersagegleichung, die die Turbulenz der Atmosphäre aufgrund von Hindernissen wie Wäldern oder Gebäuden besser berücksichtigen soll. Hierbei wird, wie in der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1 [53], eine Einteilung des Geländes in verschiedene Rauigkeitsklassen vorgenommen, denen ein so genannter „Profilexponent“ zugewiesen wird (siehe Tabelle 2).

Profilexponent α [-]	Rauigkeitsparameter z_0 [cm]	Geländetyp
0,08 - 0,12	0,01 - 2,0	sehr glatt: Eis, Schnee, Wasserflächen
0,13 - 0,18	0,1 - 20	glatt: Grasland, Ackerflächen
0,20 - 0,24	100 - 150	rau: Waldgebiete, Vorstadt
0,28 - 0,40	200 - 400	sehr rau: Innenstadtbereiche

Tabelle 2: Geländeklassen und Profilexponenten nach Deutsch [18]

Gemäß des vorliegenden Geländetyps wird der Profilexponent α ausgewählt und in die von Deutsch entwickelte Formel zur Berechnung der Verdunstungsmassenstromes eingesetzt:

$$\dot{m} = 0,077\alpha^{0,156} \cdot Re^{0,76} \cdot Sc^{0,19} \cdot \frac{D_{AB}}{L_c} \cdot \frac{A_{Lache} \cdot p_{Umgebung}}{R \cdot T_{Lache}} \cdot \ln \left(\frac{p_{Umgebung}}{p_{Umgebung} - p^{LV}} \right) \quad (6)$$

2.1.5 Das TÜV-Rheinland Modell

In [51], Anhang 1 wird vom TÜV-Rheinland folgendes Modell, dessen physikalische Grundlagen nicht erläutert wurden, zur Berechnung des Verdunstungsmassenstroms eingesetzt:

$$\dot{m} = -0,0259 \cdot \frac{u^{0,78} \cdot \tilde{M} \cdot A_{Lache}}{d^{0,11} \cdot T_{Lache}} \cdot \ln \left(1 - \frac{p^{LV}}{1,01325} \right) \quad (7)$$

2.1.6 Das Modell von Meurer

Meurer [34] verwendet eine Kombination aus dem Modell von Clancey, sowie eines Modells von Lebuser-Schecker [35]. Es werden die Massenströme aus beiden Modellen berechnet und daraus das arithmetische Mittel gebildet, um den Massenstrom zu erhalten.

$$\dot{m}_1 = 2,63 \cdot 10^{-2} \cdot u^{0,78} \cdot x^{0,89} \cdot y \cdot \frac{p^{LV} \cdot \tilde{M}}{T_{Lache}} \quad (8)$$

$$\dot{m}_2 = 8,0 \cdot 10^{-5} \cdot \tilde{M} \cdot u^{0,78} \cdot (x \cdot y)^{0,945} \ln \left(1 + \frac{p^{LV}}{p - p^{LV}} \right) \quad (9)$$

$$\dot{m} = 0,5 \cdot (\dot{m}_1 + \dot{m}_2) \quad (10)$$

Da die Formeln nur für rechteckige Lachen aufgestellt wurden, wird in diesem Modell für eine kreisförmige Lache davon ausgegangen, dass es sich um eine rechteckige Lache gleicher Fläche handelt.

2.1.7 Das Modell von Brötz

Brötz [36], [17] entwickelte eine Vorhersagegleichung für den Verdunstungsmassenstrom, ausgehend von der Analogie von Wärme- und Stoffübertragung. Hierbei wird der Stoffübergangskoeffizient β aus der Windgeschwindigkeit berechnet. Als einziges

Modell liefert Brötz einen unteren Grenzwert für den Gültigkeitsbereich des Modells, indem ein minimaler Wert von 2 für den Stoffübergangskoeffizienten vorgegeben wird.

$$\dot{m} = \frac{A_{Lache} \cdot \beta \cdot p^{LV} \cdot \tilde{M}}{8,064 \cdot 10^6} \quad (11)$$

$$\beta = 11 \cdot u^{0,8} \qquad \beta_{min} = 2 \quad (12)$$

2.2 Lachenausbreitung

Bei einer Freisetzung von Flüssigkeiten wird sich die Lache eine Zeit lang ausbreiten, um danach aufgrund des Verdunstungsmassenstromes wieder zu schrumpfen. Diese zeitliche Änderung der Lachenfläche beeinflusst den Verdunstungsmassenstrom sehr stark. Sofern keine Hindernisse auftreten, wie z.B. Berandungen von Tankwannen, breitet sich die Lache durch Schwerkrafteinflüsse immer weiter aus. Begrenzt wird diese Ausbreitung lediglich durch Mindestschichtdicken (h_{min}), die je nach Untergrund variieren [35]. Um dieses Verhalten abbilden zu können, existiert z.B. der Ansatz von Briscoe und Shaw [49], [35]. Hierbei werden zwei Fälle unterschieden. Für die instantane Lachenausbreitung - bei der das gesamte Volumen plötzlich freigesetzt wird - gilt für den Lachenradius zum Zeitpunkt t :

$$r(t) = \left(r_0^2 + \left(\frac{8gV}{\pi} \right)^{0,5} \cdot t \right)^{0,5} \quad (13)$$

Für die kontinuierliche Freisetzung anhand eines zugeführten Volumenstromes gilt:

$$r(t) = \left(\frac{32g\dot{V}}{9\pi} \right)^{0,25} \cdot t^{0,75} \quad (14)$$

Dieser Ansatz unterliegt jedoch einer maßgeblichen Einschränkung. Bei der kontinuierlichen Freisetzung (Gl. 14) wächst die Lache nur so lange an, wie ein Volumenstrom zugeführt wird. Eine weitere Ausbreitung nur durch die Wirkung der Schwerkraft kann nicht berechnet werden.

Basierend auf dem Modell von Briscoe und Shaw wurde von Schalau [2] [58] eine Erweiterung entwickelt, die die Möglichkeit bietet, eine Ausbreitung bei kontinuierlicher Stofffreisetzung und anschließender schwerkraftbedingter Ausbreitung zu berechnen.

Hierbei wird die Ausbreitung der Lache anhand der Mindestschichtdicken nach Lebuser [35] begrenzt. Die Gleichung für dieses Modell lautet:

$$r(t) = \sqrt{\left(\frac{8g}{\pi} \cdot \int_0^t \left(\frac{\dot{m}_0}{\rho_{fl,0}} - \frac{\dot{m}}{\rho_{fl}} dt\right)\right)^{0,5} \cdot t} \quad \text{mit} \quad r(t) \leq \sqrt{\frac{V_{Lache}}{\pi \cdot h_{min}}} \quad (15)$$

Die von Lebuser aufgelisteten Mindestschichtdicken sind:

- 25 mm für unebenen sandigen Boden
- 10 mm für ebenen Sand oder Kies
- 5 mm für Beton oder Stein

Laut Lebuser ist der Ursprung dieser Werte in einer Veröffentlichung von Opschoor [40] zu finden. In dieser Veröffentlichung wird die Mindestschichtdicke zwar erwähnt, jedoch werden keine Angaben zu den anzunehmenden Werten gemacht. Zwar sind die von Lebuser vorgeschlagenen Werte recht weit verbreitet und dementsprechend anerkannt, der Ursprung dieser Daten aber bleibt ungeklärt.

Ein weiteres Modell zur Lachenausbreitung stellt das Modell von Webber [27] dar.

$$\frac{\partial r}{\partial t} = U \left(1 - \frac{2\sqrt{1+\epsilon} - 2}{\epsilon}\right) \quad (16)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{4gH(1-s)}{r} - F \quad (17)$$

$$s = \frac{h_{min}(\sqrt{1+\epsilon} - 1)}{2H} \quad (18)$$

$$H = \frac{m}{\rho_{fl}\pi r^2} - h_{min} \quad (19)$$

$$F = \max(|F_L|; |F_T|) \quad (20)$$

mit

$$F_L = \frac{7,59\eta_{fl}U}{\rho_{fl}H^2} \quad F_T = \frac{0,007184U^2}{H} \quad \epsilon = \frac{8U^2}{g \cdot h_{min}} \quad (21)$$

Ist die Lache durch ein Auffangbecken in ihrer Ausdehnung eingeschränkt, so wird die maximale Fläche durch die Abmessungen des Beckens vorgegeben. Die Ausbrei-

tungsgeschwindigkeit der Lache bis zum Erreichen der Fläche des Auffangbeckens wird auch anhand des Modells von Webber bestimmt. Ist die komplette Fläche des Auffangbeckens bedeckt, wird der Flüssigkeitsspiegel ansteigen bis das Volumen der freigesetzten Flüssigkeit erreicht ist. Hierbei wird die Lache meist eine wesentlich höhere Schichtdicke erreichen, als die Mindestschichtdicke nach Lebuser [35].

Hat die Lache ihre maximale Ausbreitung erreicht, setzt aufgrund des Massenverlustes durch Verdunstung ein Schrumpfen derselben ein. Für eine nicht beschränkte Lache, deren maximaler Radius ausschließlich aus Gleichung 16 bestimmt wurde, gilt die Annahme der Mindestschichtdicke nach Lebuser. Daher kann ein Massenverlust nur zu einem Schrumpfen des Lachenradius führen. Dieses Schrumpfen wird über folgende Gleichung berechnet:

$$r = \sqrt{\frac{m_{Lache}}{\rho_{fl}\pi(H + h_{min})}} \quad (22)$$

Für den Fall der durch ein Auffangbecken begrenzten Lache wird das Schrumpfen derselben in zwei Schritten berechnet. Da die Lache nach der Ausbreitung meist eine höhere Schichtdicke aufweist als die Mindestschichtdicke h_{min} für den jeweiligen Boden, wird der Verdunstungsmassentrom zuerst zu einem Absinken des Flüssigkeitsspiegels bis zum Erreichen der Mindestschichtdicke führen. Ist die Mindestschichtdicke erreicht, wird wiederum ein Schrumpfen der Lache gemäß Gleichung 22 angenommen.

Die Bestimmung der Lachenfläche ist deswegen so relevant, da sie für die Lösung der Energiebilanz und die in den Grenzschichtgleichungen benötigte überströmte Länge eine Rolle spielt. Der Verdunstungsmassentrom hängt in mehrfacher Hinsicht von der Lachenfläche ab. Zum einen bedeutet eine größere Austauschfläche einen höheren Massenstrom, gleichzeitig bedeutet aber eine Erhöhung der überströmten Länge eine Verschlechterung des Stoffübergangs und somit ein Absinken der flächenspezifischen Massenstromdichte.

2.3 Theoretischer Einfluss der Topografie auf den Stoffübergang

In diesem Abschnitt soll kurz erläutert werden, inwiefern die Topografie einen Einfluss auf den Stoffübergang aus einer Lache in die Atmosphäre haben kann und welche Annahmen dem Potenzgesetz zur Beschreibung der Windgeschwindigkeitsverteilung

über der Höhe zugrunde liegen.

Bei der Abschätzung der anzusetzenden Windgeschwindigkeit für die Berechnung des Stoffüberganges aus der Lache müssten für eine möglichst genaue Berechnung des Massenstromes die Windgeschwindigkeiten in Bodennähe am betrachteten Standort bekannt sein. Da dies meist nicht der Fall ist, wird auf die Windgeschwindigkeitsdaten der Wetterdienste, in Deutschland auf die Daten des Deutschen Wetterdienstes (DWD), zurückgegriffen, welche in 10 m Höhe aufgezeichnet werden. In dieser Höhe sind auch die Windgeschwindigkeiten für die empirischen Modelle anzugeben. Da die Messdaten häufig nicht am Standort selbst gemessen wurden, sondern an Stationen im Umkreis, müssen interpolierte Werte verwendet werden, was zu einer ungenauen Beschreibung der Windgeschwindigkeiten führt. Des Weiteren kann aufgrund der Bebauung und der Geländestruktur nur selten eine zuverlässige Abschätzung der Windgeschwindigkeit am Boden erfolgen.

Wie in Abb. 1 gezeigt, bildet sich bei der Überströmung einer Fläche, aufgrund der Wandhaftungsbedingung eine Grenzschicht aus. Innerhalb dieser Grenzschicht wiederum ergeben sich Geschwindigkeitsprofile, die das Anwachsen der Geschwindigkeit von Null am Boden bis hin zu Geschwindigkeit der Außenströmung abbilden.

In der Natur ist die Ausbildung solcher Profile entweder nur ab einer gewissen Höhe über dem Boden möglich, oder im Nachlauf von Hindernissen. Die Bebauung eines Geländes beeinflusst die Strömung in der Hinsicht, dass Hindernisse (wie Gebäude) aufgrund ihres Windschattens (siehe Abb. 1) zwar eine Ausbildung der Profile bis in Bodennähe im Vergleich zum freien Gelände verhindern, aber gleichzeitig für eine deutlich höhere Turbulenz sorgen und somit für einen besseren vertikalen Austausch in der Strömung. Dieser verbesserte vertikale Austausch - im Vergleich zur ungestörten Anströmung - führt auch zu einer besseren Verteilung des verdunsteten Stoffes weg von der Phasengrenzfläche hin zu den wandfernen Schichten. Da an der Phasengrenzfläche wegen des erhöhten Abtransports von Stoff bei höherer Turbulenz größere Gradienten vorliegen, als bei einer weniger turbulenten Strömung, ergibt sich somit ein besserer und dementsprechend höherer Stoffübergang.

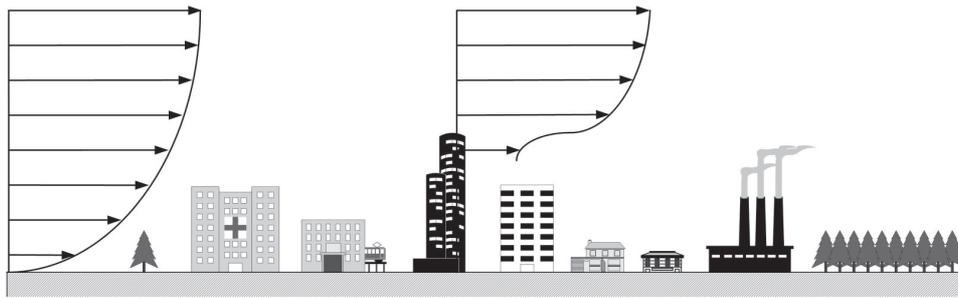


Abbildung 1: Darstellung einer Strömungsgrenzschicht über städtischer Bebauung (sehr rauhes Gelände)

Die Geschwindigkeitsprofile in der Atmosphäre, die sich durch die Topografien und die Temperaturschichtung ergeben, werden im Allgemeinen durch das sog. „Potenzprofil“ abgebildet [18],[53],[57]. Es lautet:

$$u(z) = u_{ref} \left(\frac{z}{z_{ref}} \right)^\alpha \quad (23)$$

Die Windgeschwindigkeit $u(z)$ in einer bestimmten Höhe z über dem Boden errechnet sich aus der gemessenen Referenzwindgeschwindigkeit u_{ref} in der Referenzhöhe z_{ref} . Letztere beträgt im Allgemeinen 10 m, da dies der Standardhöhe für Windmessungen der Wetterdienste entspricht und diese häufig die einzigen Messwerte sind, die zur Verfügung stehen. Der Einfluss der Topografie und somit der Turbulenz der Anströmung wird über den Exponenten α berücksichtigt. Dieser Exponent ist mit dem „Profilexponenten“ aus dem Modell von Deutsch identisch. Dieser liegt im Wertebereich von 0,1 bis ca. 0,4 und bildet damit respektive *extrem glattes* bis *sehr rauhes* Gelände ab. Die daraus resultierenden unterschiedlichen Geschwindigkeitsprofile sind exemplarisch in Abbildung 2 für eine Geschwindigkeit von 3 m/s in 10 m Höhe und $\alpha=0,15$ sowie $\alpha=0,33$ dargestellt.

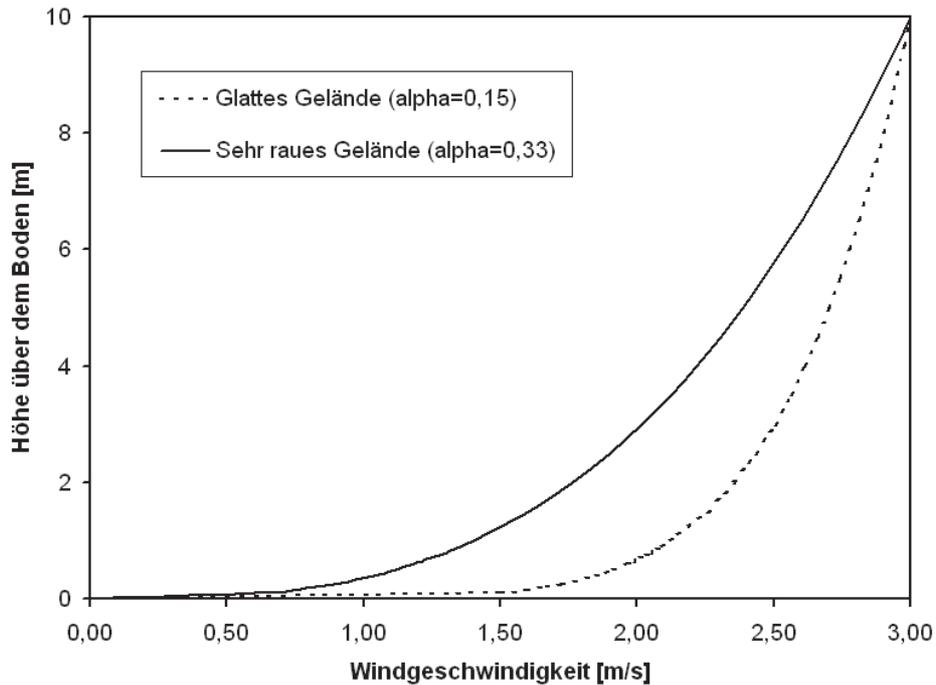


Abbildung 2: Vergleich zweier Windgeschwindigkeitsprofile für glattes und sehr raues Gelände.

Dass an dieser Stelle die Gebäude nicht als einzelne Hindernisse aufgelöst, sondern als Rauigkeiten parametrisiert werden, liegt darin begründet, dass die atmosphärische Grenzschicht, für die dieses Gesetz aufgestellt wurde, eine Dicke von ca. 1000 m aufweist. Im Verhältnis dazu ist die Größe eines einzelnen Gebäudes nicht relevant für die Vorgänge in der Grenzschicht, so dass die Bebauung als Rauigkeit angesehen werden kann. Für die in dieser Arbeit und im Allgemeinen bei Störfallauswirkungsbeurteilungen relevanten Höhen von meist deutlich unter 10 m stellt sich zwar die Frage der Anwendbarkeit des Potenzgesetzes, in Ermangelung einer besseren Beschreibung des Verhaltens der Windgeschwindigkeit mit der Höhe in diesem Bereich, wird es dennoch verwendet.

2.4 Gasausbreitungsrechnung mit der VDI-Richtlinie 3783

Die Ausbreitung von Gasen wird anhand der in der VDI-Richtlinie 3783 [53] vorgestellten Berechnungsverfahren abgeschätzt. Diese Richtlinie unterscheidet zwischen der Ausbreitung von, im Vergleich zu Luft, dichteneutralen bis leichten Gasen, sowie der Ausbreitung von, im Vergleich zu Luft, schweren Gasen.

Für die Ausbreitungsberechnung von dichteneutralen bis leichten Gasen wird die VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1 [53] herangezogen. Als Grundlage dient ein gaußsches Ausbreitungsmodell. Als Quelle für die Ausbreitung wird die Freisetzung einer Gaswolke in einer Höhe h über dem Erdboden angenommen, deren Mittelpunkt mit konstanter Windgeschwindigkeit fortbewegt wird.

In Abbildung 3 ist das in Blatt 1 dieser Richtlinie verwendete Koordinatensystem dargestellt. Die x -Richtung entspricht hierbei der Windrichtung, die y -Achse ist somit quer zur Windrichtung orientiert und die z -Achse stellt die Höhe über dem Erdboden dar. Die Größen X_q , Y_q und Z_q bezeichnen jeweils die Kantenlänge der für die Ausbreitung betrachteten Volumenquelle. Die in Windrichtung vordere Kante der Volumenquelle liegt immer bei $x=0$, während sich die Oberkante auf der Quellhöhe h befindet. Sind eine oder mehrere dieser Kanten kürzer als 1 m, so geht die Volumenquelle in eine Flächenquelle, Linienquelle oder Punktquelle über.

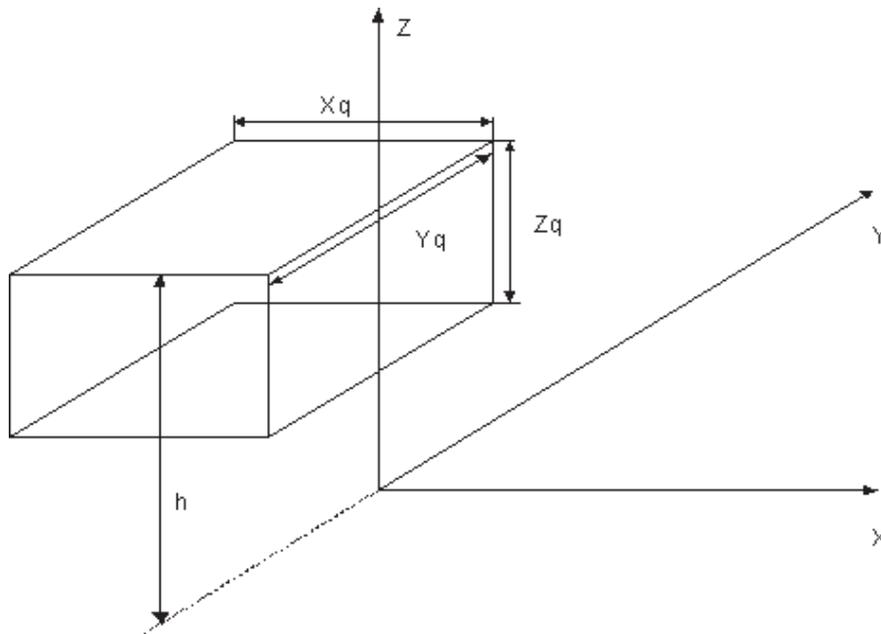


Abbildung 3: In der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1 verwendetes Koordinatensystem [53]

Die Ausbreitung und das Wachstum der Gaswolke mit einhergehender Verdünnung durch Zumischung von Luft aufgrund der turbulenten Diffusion, wird durch die so genannte „Streuung“ im Gaußmodell wiedergegeben. Die Streuungen $\sigma_{x,y,z}$ wurden experimentell in einem Bereich von 100 bis 10000 m hinter der Lache bestimmt. Soll die Berechnung für Entfernungen außerhalb dieses Bereichs erfolgen, müssen die Streu-

ungen interpoliert und eine größere Ungenauigkeit in Kauf genommen werden.

Die Ausbreitung eines Gases wird durch mehrere Faktoren beeinflusst und die VDI-Richtlinie berechnet die Konzentrationen jeweils für eine mittlere und eine ungünstigste Ausbreitungssituation. Diese entstehen aufgrund unterschiedlicher Temperaturschichtungen der Atmosphäre, Windgeschwindigkeiten, effektiver Quellhöhen und Bodenrauigkeiten.

Die Temperaturschichtung der Atmosphäre bestimmt die Ausbildung atmosphärischer Turbulenzen. Diese wurde schon von Pasquill als dominanter Faktor für die Turbulenz der Atmosphäre identifiziert [12] und eine Einteilung in verschiedene „Stabilitätsklassen“ vorgenommen [55]. Diese als Pasquill- bzw. Pasquill-Gifford Stabilitätsklassen bekannte Einteilung basiert auf dem Vergleich des vertikalen Temperaturgradienten der Atmosphäre mit dem adiabaten Temperaturgradienten und wird allgemein verwendet [54], [56], [53].

Die Windgeschwindigkeit wird gemäß des Potenzansatzes aus Kapitel 2.3 bestimmt. Nach Definition der Richtlinie wird eine Windgeschwindigkeit von 1 m/s als die Geschwindigkeit für die ungünstigste Ausbreitungssituation angenommen. Lediglich bei der Annahme einer Quellüberhöhung, wie bei sehr leichten Gasen anzunehmen, können auch andere Windgeschwindigkeiten zur ungünstigsten Ausbreitungssituation führen.

Die effektive Quellhöhe entspricht der Freisetzungshöhe und der Quellüberhöhung. Eine Quellüberhöhung tritt auf, wenn Gase mit einer deutlich geringeren Dichte als Luft oder Brandgase mit hoher Temperatur freigesetzt werden und aufgrund der Dichteunterschiede einen Auftrieb erfahren. Die Gaswolke befindet sich dann oberhalb der eigentlichen Freisetzungshöhe. Die Überhöhung hängt von der Temperaturschichtung und der äquivalenten Wärmeemission ab [53]. In der VDI-Richtlinie 3783, Blatt 1 werden im Sinne einer konservativen Abschätzung nur äquivalente Wärmeemissionen > 6 MW berücksichtigt. Bei der Verdunstung aus Flüssigkeitslachen ist diese Quellüberhöhung nicht relevant und wird somit für die Gasausbreitungsrechnung nicht berücksichtigt.

Die Bodenrauigkeit wird durch die vorhandene Bebauung bestimmt und dient dazu, den Einfluss des Geländes auf die Turbulenz der Atmosphäre zu berücksichtigen. Sie

richtet sich nach der Höhe der Gebäude. Bei mehreren Gebäuden wird ein Mittelwert der Höhen gebildet, um einen Wert für die Bodenrauigkeit zu erhalten. In der VDI-Richtlinie wird eine Einteilung der Bodenrauigkeiten in 5 Klassen vorgenommen die jeweils stellvertretend für eine Geländetyp stehen und für jede eine effektive Rauigkeitslänge z_0 festgelegt (siehe Tabelle 3).

z_0 [m]	Beschreibung des Geländes
0,02	extrem glatt: homogenes, extrem ebenes Gelände (keine Gebäude, Bäume, Büsche in weiterem Umkreis) und Wasserflächen
0,2	glatt: homogenes, ebenes Gelände; nur einzelne Gebäude bzw. Bäume in weiterem Umkreis
0,5	wenig rau: relativ ebenes Gelände, nur wenige Gebäude und mäßiger Bewuchs in weiterem Umkreis
0,8	mäßig rau: unebenes Gelände; Ortschaften bzw. kleine Waldgebiete in weiterem Umkreis
1,2	sehr rau: Stadt- und Waldgebiet

Tabelle 3: Geländeklasseneinteilung gemäß VDI-Richtlinie 3783, Blatt1 [53]

Aus dieser Aufteilung der Rauigkeitslängen ist zu erkennen, dass die VDI-Richtlinie nur annähernd Strukturen, wie die Bebauung in städtischem Gebiet, erfassen kann.

Einen Ansatz zur besseren Erfassung der Bebauungssituation wurde von Theurer [61] vorgestellt. Dieser untersuchte im Windkanal diverse Bebauungsszenarien und bestimmte hierfür die jeweiligen Streuungen. Anhand dieser modelliert er den Nahbereich der Quelle der Freisetzung, indem die für den jeweiligen Fall vorliegende Bebauung einem der untersuchten Szenarien zugeordnet werden muss. Für den Fernbereich wird dann die VDI-Richtlinie 3783, Blatt 1 herangezogen. Der Ansatz von Theurer kann jedoch ebenso wenig den unmittelbaren Nahbereich der Quelle beschreiben, den er als „Quellbereich“ bezeichnet. In den meisten Fällen liegt dieser Quellbereich zwar deutlich unterhalb der Mindestentfernung für den ersten Berechnungspunkt der VDI-Richtlinie 3783, Blatt 1; er kann aber auch bis zu 200 m Ausdehnung betragen. Für die Berechnung des Quellbereichs behilft sich Theurer, wie auch Blatt 1 der Richtlinie, mit einer Interpolation der Werte. Des Weiteren kann, im Gegensatz zu Blatt 1 der Richtlinie, die Punkt-, Flächen- und Volumenquellen berücksichtigt, in seinem Ansatz

die Quelle nur als Punktquelle berücksichtigt werden.

Weiterhin führte Theurer Messungen zur Gasausbreitung im Windkanal durch. Der Vergleich dieser Messwerte mit seinem Verfahren und der VDI-Richtlinie ergab eine gute Beschreibung der experimentellen Ausbreitungssituation durch beide Ansätze mit leichten Vorteilen in der Genauigkeit für das Verfahren von Theurer.

Auch wenn die Turbulenz in bebautem Gebiet maßgeblich durch die Anordnung und jeweilige Größe der Gebäude bestimmt wird, ist die Parametrisierung als (Boden-) Rauigkeiten zulässig, da in dem Bereich der Gültigkeit des Blattes 1 der VDI-Richtlinie 3783 die Gaswolke sich schon soweit in vertikaler Richtung ausgedehnt hat, dass Hindernisse am Boden kaum noch ihre Ausbreitung beeinflussen [61]. Als Vorteil der VDI-Richtlinie 3783, Blatt 1 gegenüber des Verfahrens von Theurer ist zu sehen, dass die Handhabung unkomplizierter ist. Für die Berücksichtigung des Geländes müssen lediglich grobe Abschätzungen gemacht werden, im Gegensatz zu Theurers Verfahren, bei dem eine möglichst exakte Zuordnung zu einem seiner untersuchten Musterszenarien erfolgen muss, um keine falschen Ergebnisse zu erhalten. Daher wird die Richtlinie trotz ihrer Einschränkungen für Abschätzungsberechnungen verwendet.

Für die Ausbreitung von relativ zu Luft schweren Gasen wird die VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2 [53] herangezogen. Die Entscheidung welche Gase als „schwer“ anzusehen sind, wird in der Richtlinie anhand folgender Kriterien getroffen:

- Die Dichte des Gases ist 16 % größer als die Luftdichte:

$$\frac{\rho_{Gas} - \rho_{Luft}}{\rho_{Luft}} > 0,16 \quad (24)$$

- Bei spontaner Freisetzung ist das Quellvolumen größer als $0,1m^3$ und bei kontinuierlicher Freisetzung muss der Volumenstrom größer als $1 \cdot 10^{-3}m^3/s$ sein.

Bei der Ausbreitung von schweren Gasen wird sich, im Gegensatz zu den Leichtgasen, die Gaswolke aufgrund der Schwerkraft und negativer Auftriebskräfte in einer flachen, bodennahen Schicht ausbreiten. Durch den Dichtesprung am Rand der Wolke wird die Vermischung mit der Außenluft und damit die Auflösung der Wolke behindert, wodurch diese eine ausgeprägte Eigendynamik besitzt.

Im Gegensatz zu Blatt 1 dieser Richtlinie wird in Blatt 2 grundsätzlich eine Punktquelle angenommen. Des Weiteren werden die Hindernisse (Gebäude, Anlagen, Bepflanzung) in unmittelbarer Umgebung des Freisetzungsortes nicht als Rauigkeiten parametrisiert. Da einfache analytische oder numerische Modelle keine Berücksichtigung

der Einzelhindernisse ermöglichen, basiert das Blatt 2 dieser Richtlinie auf Ergebnissen aus systematisch durchgeführten Windkanalversuchen, bei denen 25 Gebäudekonfigurationen untersucht wurden. Diese Ergebnisse decken den Nahbereich bis zum Absinken der Konzentration auf etwa 1% der Quellkonzentration ab. Ab diesem Punkt wird davon ausgegangen, dass der Schwergascharakter nicht mehr vorliegt und eine Ausbreitungsrechnung gemäß Blatt 1 durchgeführt werden kann. Am Kopplungspunkt der beiden Blätter der Richtlinie wird die Ausdehnung der Gaswolke nicht mehr berücksichtigt und es wird eine Punktquelle angenommen. Somit gehen bei der gekoppelten Berechnung jegliche Informationen zur Lachenbreite verloren. Des Weiteren kann das numerische Modell nach Blatt 1 erst in größerer Entfernung vom Kopplungspunkt angewandt werden, da es auf der Gauß-Formel basiert. Im Bereich zwischen Kopplungspunkt und dem Punkt, ab dem die Berechnung nach Blatt 1 angewandt werden kann, auch erster Aufpunkt genannt, muss zwischen den Konzentrationswerten am Aufpunkt und am Kopplungspunkt interpoliert werden. Die Interpolationsgleichung, die einer linearen Interpolation mit doppelt logarithmischer Auftragung entspricht, berechnet die Streuungen $\sigma_{x,y,z}$ wie folgt:

$$\sigma_{x,y,z}(\tau\bar{u}) = [\sigma_{x,y,z}(a) - \sigma_{x,y,z}(0)] \frac{\tau\bar{u}}{a} + \sigma_{x,y,z}(0) \quad (25)$$

mit

$$a = 100 \text{ m} \qquad \sigma_{x,y,z}(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \text{ m} \quad (26)$$

3 Modellierung der instationären Lachenverdunstung anhand des Grenzschichtverfahrens

Zur Modellierung der Verdunstung aus einer Flüssigkeitslache wird in dieser Arbeit ein instationäres Grenzschichtverfahren mit geeigneter Turbulenzmodellierung (siehe Kap. 3.3) eingesetzt.

3.1 Grenzschichtverfahren

Die Grenzschichttheorie postuliert, dass das Strömungsfeld eines umströmten Körpers in eine dünne, wandnahe Schicht (die sog. Grenzschicht) und in eine von der Platte unbeeinflusste Strömung (Potentialströmung) im übrigen Strömungsfeld aufgeteilt werden kann (siehe Abbildung 4). Hierbei repräsentiert die Grenzschichtströmung den reibungsbehafteten Anteil des Strömungsfeldes und die Außenströmung den reibungsfreien Anteil.

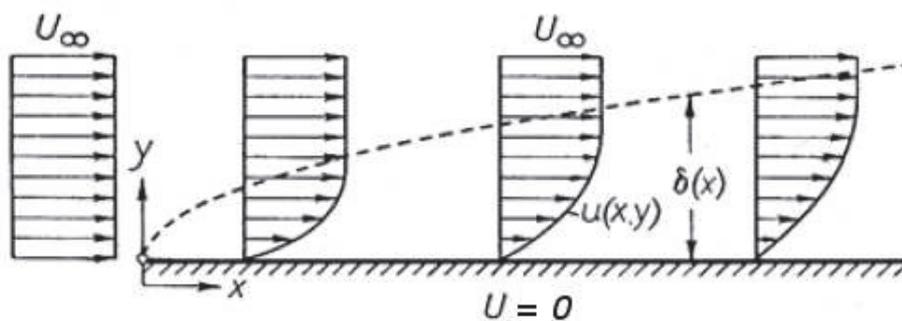


Abbildung 4: Darstellung einer anwachsenden Strömungsgrenzschicht mit Geschwindigkeitsprofilen

In dieser Grenzschicht steigt die Strömungsgeschwindigkeit von Null an der Wand (Wandhaftungsbedingung) auf den Wert in der Außenströmung an.

Die Grenzschichtdicke δ wird als derjenige Abstand definiert, innerhalb dessen die Geschwindigkeit $U(x,y)$ 99% des Wertes der Geschwindigkeit der Potentialströmung erreicht.

Neben den Bilanzen für den Stoff-, Energie- und Impulstransport, die die Vorgänge in der Grenzschicht beschreiben, ist die Kontinuitätsgleichung zu erfüllen, um die Forderung der Massenerhaltung zu berücksichtigen.

Die zu lösenden instationären Gleichungen sind:

Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0 \quad (27)$$

Impulsgleichung

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = - \frac{dp_e}{dx} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu (1 + \nu_t^+) \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (28)$$

Energiegleichung

$$\begin{aligned} \rho c_P \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right) &= \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\mu c_P}{Pr} (1 + \nu_t^+) \frac{Pr}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial y} \right] + \\ &+ \left\{ \left[\frac{\mu c_{P1}}{Sc_1} (1 + \nu_t^+) \frac{Sc_1}{Sc_t} - \frac{\mu c_{P2}}{Sc_2} (1 + \nu_t^+) \frac{Sc_2}{Sc_t} \right] \frac{\partial c_1}{\partial y} \right\} \frac{\partial T}{\partial y} \end{aligned} \quad (29)$$

Konzentrationsgleichung

$$\rho \left(\frac{\partial c_k}{\partial t} + u \frac{\partial c_k}{\partial x} + v \frac{\partial c_k}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\mu}{Sc_k} (1 + \nu_t^+) \frac{Sc_k}{Sc_t} \frac{\partial c_k}{\partial y} \right] \quad (30)$$

$$\sum_k c_k = 1 \quad (31)$$

In den Gleichungen bedeuten u und v die Geschwindigkeitskomponenten in respektive x- und y-Richtung, T die Temperatur der Flüssigkeit und $c_k = \rho_k / \rho$ die dimensionslose Konzentration des verdunstenden Stoffes. Die Größen mit Index k beziehen sich hierbei auf die reinen Stoffe, während die Größen ohne Index sich auf das Gasgemisch beziehen.

Impuls-, Energie- und Konzentrationsgleichung sind über die Geschwindigkeit u und die Dichte ρ miteinander gekoppelt. Durch den Stoffübergang von der Flüssig- in die Gasphase, verändert sich in Strömungsrichtung die Dichte des Gases oberhalb der

Lache. Zur Berücksichtigung dieser kontinuierlichen Dichteänderung wird ein mittleres Molekulargewicht des Gasgemisches über folgende Mischungsregel eingeführt:

$$\widetilde{M} = \frac{1}{\frac{1}{(1-c_1) \cdot \widetilde{M}_{Luft}} + \frac{c_1}{\widetilde{M}_{Stoff}}} \quad (32)$$

welches dann über die umgeformte ideale Gasgleichung die Berechnung der Änderung der Dichte ermöglicht.

$$\rho = \frac{p \cdot \widetilde{M}}{R \cdot T} \quad (33)$$

3.2 Energiebilanz

Wie im vorigen Abschnitt erläutert, sind die Grenzschichtgleichungen miteinander u.A. über die Dichte gekoppelt. Diese hängt jedoch maßgeblich vom Dampfdruck der Flüssigkeit und somit von der Lachentemperatur ab. Um die Lachentemperatur als Randbedingung der Energiegleichung möglichst genau bestimmen zu können, muss eine Energiebilanz um die Lache (siehe Abb. 5) gemacht werden. Wie bei Lebuser [35] beschrieben, müssen hierbei alle ein- und ausgehenden Wärmeströme berücksichtigt werden. Diese setzen sich aus der durch Konvektion, Sonneneinstrahlung und den über den Boden ausgetauschten Wärme, sowie der durch Verdunstung oder Verdampfung abgeführten Wärme zusammen. Insbesondere die Berücksichtigung des Bodewärmestromes erfordert eine instationäre Betrachtung, da die Bodentemperatur sich während der Verdunstung durch den Wärmeaustausch mit der Lache verändert. Insbesondere im Falle der Verdampfung spielt die, durch den Boden zur Verfügung stehende, Wärme eine maßgebliche Rolle für die Dauer, die die Lache auf Siedetemperatur gehalten werden kann und ab wann eine Unterkühlung der Lache und somit ein Übergang zur Verdunstung stattfindet.

Da eine Flüssigkeitslache meist nur aus einem sehr dünnen Flüssigkeitsfilm besteht [35], wird für die hier vorgestellte Betrachtungsweise angenommen, dass an jedem Punkt in der Lache dieselbe Temperatur herrscht, so dass eine Berücksichtigung der Wärmeleitung innerhalb der Flüssigphase an dieser Stelle nicht notwendig ist.

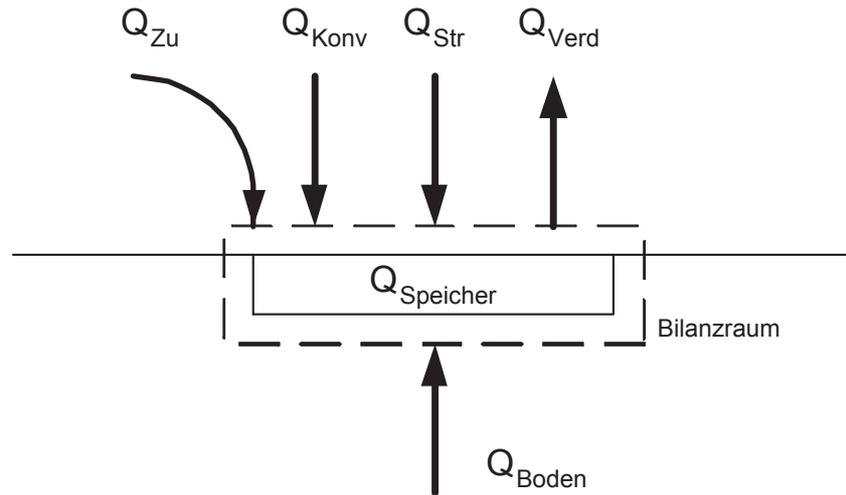


Abbildung 5: Schematische Darstellung der auftretenden Wärmeströme um eine Flüssigkeitslache

Die Bilanz der Wärmeströme wie in Abbildung 5 dargestellt lautet:

$$m_{Lache} \cdot c_{p,Lache} \cdot \frac{\partial T_{Lache}}{\partial t} = \dot{Q}_B + \dot{Q}_{Konv} + \dot{Q}_{Strahlung} - \dot{Q}_{Verd} + \dot{Q}_{zu} \quad (34)$$

Der linke Term der Gleichung stellt die von der Lache aufgrund ihrer Masse und Wärmekapazität gespeicherte Wärme dar. Die auf der rechten Seite der Gleichung aufgelisteten Energien setzen sich wie folgt zusammen:

- Die zwischen dem Boden und der Lache ausgetauschte Wärme:

$$\dot{Q}_B = \frac{\lambda_B}{\sqrt{\pi \cdot a \cdot t}} \cdot (T_{Boden} - T_{Fl}) \cdot A_{Lache} \quad (35)$$

- Die durch Konvektion zwischen Luft und Lache ausgetauschte Wärme:

$$\dot{Q}_{Konv} = \alpha \cdot (T_{Luft} - T_{Fl}) \cdot A_{Lache} \quad (36)$$

- Die durch Verdunstung der Lache entzogene Wärme:

$$\dot{Q}_{Verd} = \dot{m} \cdot h_V \quad (37)$$

- Die durch Strahlung der Lache zugeführte Wärme [35]:

$$\dot{Q}_{Strahlung} = \left(0,86 \cdot \dot{Q}_{Sonne} - 0,9\sigma T_{Lache}^4 + 0,46\sigma (T_{Luft}^4 - T_{Lache}^4) \right) \cdot A_{Lache} \quad (38)$$

Für die solare Einstrahlung \dot{Q}_{Sonne} werden an wolkenlosen Sommertagen Werte von 0,9 bis 1,4 kW/m² (meistens 1 kW/m²) angegeben.

- Die durch einen Zufluss an Flüssigkeit zugeführte Wärme:

$$\dot{Q}_{Zu} = \dot{m}_{zu} \cdot c_{p,Lache} \cdot (T_{zu} - T_{Lache}) \quad (39)$$

3.3 Turbulenzmodelle

Die Berechnung des turbulenten Impuls-, Wärme- und Stoffaustauschs erfordert die Modellierung sowohl der dimensionslosen turbulenten Scheinzähigkeit (auch turbulente Viskosität genannt) ν_t^+ , als auch der turbulenten Schmidt- und Prandtlzahl durch geeignete Ansätze. Da eine genaue Ermittlung der Größen Pr_t und Sc_t bisher nicht gelungen ist, werden diese auf einen konstanten Wert von 0,9 gesetzt [24]. Die in dieser Arbeit zur Berechnung der turbulenten Scheinzähigkeit verwendeten Ansätze sind ein algebraisches Modell oder auch Nullgleichungsmodell nach Cebeci-Smith [44], sowie eine Erweiterung dieses Modells mit der Möglichkeit Rauigkeiten zu berücksichtigen durch Cebeci-Chang [45]. Der Vorteil dieser algebraischen Turbulenzmodelle liegt in ihrem geringen zusätzlichen numerischen Aufwand. Die turbulente Scheinzähigkeit wird aus lokalen Eigenschaften der Strömung bestimmt.

3.3.1 Das Modell von Cebeci-Smith

Das Modell basiert auf der Annahme, dass die Grenzschicht in eine innere (wandnahe) und eine äußere Schicht aufgeteilt werden kann. Für die innere Schicht ist die turbulente Viskosität definiert als:

$$\nu_{t,innen} = \ell^2 \cdot \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right| \quad (40)$$

Hierin stellt ℓ die Mischungsweglänge dar, welche nach dem Modell von Rotta [43] wie folgt definiert ist:

$$\ell = 0,4 \cdot y \cdot [1 - \exp(-y/A)] \quad (41)$$

Der van Driestsche Dämpfungsterm A ist definiert als:

$$A = 26 \cdot \frac{\nu}{u_\tau \cdot N} \cdot \left(\frac{\rho}{\rho_I}\right)^{0,5} \quad (42)$$

mit

$$u_\tau = \left(\frac{\tau_I}{\rho_I}\right)^{0,5} \quad (43)$$

und

$$N^2 = \frac{\mu}{\mu_e} \cdot \left(\frac{\rho_e}{\rho_I}\right)^2 \cdot \frac{p^+}{v_I^+} \cdot \left[1 - \exp\left(11,8 \cdot \frac{\mu_I}{\mu} \cdot v_I^+\right)\right] + \exp\left(11,8 \cdot \frac{\mu_I}{\mu} \cdot v_I^+\right) \quad (44)$$

Hierin sind:

$$p^+ = \frac{\nu_e \cdot u_e}{u_\tau^3} \cdot \frac{du_e}{dx} = 0 \quad (45)$$

und

$$v_I^+ = \frac{v_I}{u_\tau} \quad (46)$$

In der wandfernen äußeren Schicht ist die turbulente Viskosität über folgende Formel definiert:

$$\nu_{t,aussen} = 0,0168 \cdot \left| \int_0^\infty (u_\infty - u) \cdot dy \right| \quad (47)$$

Zwischen innerer und äußerer Schicht wird wie folgt unterschieden:

$$\nu_t^+ = \min(\nu_{t,innen}, \nu_{t,aussen}) \cdot \quad (48)$$

3.3.2 Das Modell von Cebeci-Chang

Das Modell von Cebeci-Chang [45] wurde eigentlich für raue Wände entwickelt und nicht für Bodenrauigkeiten im Sinne der atmosphärischen Grenzschicht. Dennoch soll untersucht werden, ob damit nicht auch die Rauigkeiten aus den Freilandversuchen abgebildet und somit der Einfluss der Umgebung auf die Turbulenz und letztendlich auf den Verdunstungsmassenstrom wiedergegeben werden kann. Das Modell von Cebeci-Chang stellt eine Erweiterung des Modells von Cebeci-Smith für raue Flächen dar. Die grundlegende Berechnung der turbulenten Viskosität ν_t erfolgt, wie im vorigen Abschnitt erläutert. Es wird daher nur auf die Veränderungen im Vergleich zum Modell von Cebeci-Smith eingegangen.

Cebeci-Chang verwenden zur Berücksichtigung von Rauigkeiten eine erweiterte Formulierung der Mischungsweglänge ℓ aus Gleichung (41). Basierend auf den Erkenntnissen von Rotta [43], dass die Geschwindigkeitsprofile für glatte und raue Flächen ähnlich sind, sofern eine Koordinatenverschiebung berücksichtigt wird; formulieren Cebeci und Chang die Mischungsweglänge neu:

$$\ell = 0,4 \cdot (y + \Delta y) \cdot [1 - \exp(-(y + \Delta y)/A)] \quad (49)$$

Der Term Δy ist eine Funktion der äquivalenten Sandrauigkeit (siehe auch [30]):

$$k_s^+ = \frac{k_s u_\tau}{\nu} \quad (50)$$

und wird durch folgende Gleichung beschrieben:

$$\Delta y = 0,9 \cdot \left(\frac{\nu}{u_\tau}\right) \left[\sqrt{k_s^+} - k_s^+ \exp\left(-\frac{k_s^+}{6}\right) \right] \quad (51)$$

Laut Cebeci-Chang ist diese Gleichung gültig für $4,535 < k_s^+ < 2000$.

3.3.3 Turbulenzmodellierung bei schweren Gasen

Aufgrund ihrer hohen Dichte hat eine Schwergaswolke einen dämpfenden Einfluss auf die Turbulenzstruktur [59] [60], insbesondere in vertikaler Richtung. Zur Berücksichtigung dieses Effekts muss eine Anpassung der Turbulenzmodelle vorgenommen werden. Thiele [60] und Heudorfer [59] schlagen vor, die turbulenten Berechnungsgleichungen um ein Dichteverhältnis zu erweitern, so dass

$$\nu_{t,Schwergas}^+ \approx \nu_t^+ \cdot \frac{\rho_e}{\rho} \quad (52)$$

Während Heudorfer eine Erweiterung um das reine Dichteverhältnis $\frac{\rho_e}{\rho}$ vorschlägt, wird bei dem Ansatz von Thiele lediglich die Quadratwurzel des Terms verwendet.

Es soll in dieser Arbeit untersucht werden, ob bei der Verdunstung aus Lachen und der anschließenden Gasausbreitung, Schwergaseffekte auftreten und berücksichtigt werden müssen. Dies soll anhand des Ansatzes von Thiele überprüft werden. Die aus den oben beschriebenen Turbulenzmodellen berechneten turbulenten Viskositäten sind anhand des Ansatzes von Thiele wie folgt zu erweitern :

$$\nu_{t,Schwergas}^+ = \nu_t^+ \cdot \left(\frac{\rho_e}{\rho} \right)^{0,5} \quad (53)$$

4 Numerische Lösungsmethode

Im Folgenden wird die Methodik zur Lösung des im vorigen Kapitel dargestellten gekoppelten Differentialgleichungssystems vorgestellt. Die Gleichungen beschreiben die Vorgänge in der Gasphase. Eine Strömung in der Flüssigphase wird nicht angenommen, da durch die geringe Schichtdicke von Flüssigkeitslachen die konvektiven Vorgänge in der Flüssigphase vernachlässigbar sind. Die instationäre Formulierung der Differentialgleichungen erfordert die Auswahl eines geeigneten Zeitschrittes. Dieser sollte einerseits möglichst groß sein, um die Rechenzeit gering zu halten, andererseits muss er klein genug gewählt werden, um einen Einfluss auf die Lösung der Gleichungen ausschließen zu können. Gleiches gilt für die Diskretisierung des Rechengitters. Des Weiteren müssen die Anfangs- und Randbedingungen zur Lösung der instationären Gleichungen festgelegt werden. Die Wahl des numerischen Lösungsverfahrens sollte, ebenso wie die Wahl der Schrittweiten, die Anforderungen an hohe Genauigkeit bei gleichzeitig möglichst geringer Rechenzeit erfüllen.

4.1 Anfangs- und Randbedingungen

4.1.1 Start- und Anfangsbedingungen

Die zur Berechnung benötigten Startwerte werden in Form von Startprofilen vorgegeben. Diese resultieren aus einer stationären Lösung der Grenzschichtgleichung für die Überströmung einer ebenen Platte ohne Stoffübergang. Hierbei wird eine Vorlauflänge vor der Lache so gewählt, dass die auf die Lache treffende Strömung einer voll ausgebildeten Grenzschichtströmung mit der gewünschten Grenzschichtdicke entspricht. Für die in dieser Arbeit durchgeführten Berechnungen wurde eine Grenzschichtdicke von 2 m angenommen, da dies den relevanten Bereich in Bodennähe repräsentiert, in dem Menschen gefährdet sein können. Relevant für das Erreichen einer voll ausgebildeten Grenzschichtströmung ist zum einen eine ausreichende Entfernung vom Staupunkt (entspricht dem vorderen Ende der angeströmten Platte aus Abbildung 4), und zum anderen die Turbulenz der Strömung. Eine höhere Turbulenz führt durch den verstärkten vertikalen Impulsaustausch zu einem schnelleren Aufdicken der Grenzschicht. Mit steigender Entfernung vom Staupunkt nimmt das relative Wachstum der Grenzschicht mit der Lauflänge deutlich ab, so dass die Gradienten innerhalb der Grenzschicht, für eine definierte Lauflänge, auch nur noch minimale Änderungen erfahren.

Mit den oben erwähnten Startwerten / Startprofilen wird eine stationäre Berechnung ohne Lache mit eventuellem Nachlauf gestartet und die Ergebnisse als Anfangsbedingungen der instationären Gleichungen verwendet.

4.1.2 Randbedingungen

Die Ränder der Grenzschicht sind einerseits die Grenzfläche zwischen der überströmten Fläche und der Strömung (im Folgenden als Wand bezeichnet) und andererseits der obere Rand der Grenzschicht, an dem der Übergang zur angenommenen Potentialströmung (im Folgenden Grenzschichtaußenrand genannt und mit dem Index e gekennzeichnet).

Betrachtet man die vom Wind überstrichene Strecke in Strömungsrichtung, so kann man eine Einteilung in drei Bereiche vornehmen:

- der Vorlauf der Lache (der Bereich, in dem sich eine vollausgebildete Grenzschichtströmung einstellt)
- die Lache
- der Nachlauf der Lache (der Bereich in Lee der Lache, in dem die Gasausbreitung stattfindet).

Während Vor- und Nachlauf der Lache der Überströmung einer ebenen Platte ohne Stoffübergang entsprechen, muss für die Lache der Stoffübergang berücksichtigt werden. Somit unterscheiden sich jeweils die Randbedingungen an der Wand, während die Randbedingungen am Grenzschichtaußenrand für alle Fälle gleich sind.

Für den Bereich der Lache leiten sich die Randbedingungen für die Impulsgleichung an der Wand aus der flächenbezogenen Massenstromdichte \tilde{m} und der Wandhaftungsbedingung ab:

$$(\rho \cdot v)_{Wand} + \tilde{m} = 0 \quad (54)$$

$$u_{wand} = 0 \quad (55)$$

Die Massenstromdichte \tilde{m} berechnet sich für den Fall der Verdampfung aus:

$$\tilde{m} = \frac{\dot{Q}_B + \dot{Q}_{Konv} + \dot{Q}_{Strahlung} + \dot{Q}_{zu}}{\Delta h_V \cdot A_{Lache}} \quad \text{mit} \quad T_{Lache} = T_{Siede} \quad (56)$$

und für den Fall der Verdunstung aus [28], [24]:

$$\tilde{m} = \rho v - \frac{\mu}{Sc} \left(1 + \nu_t^+ \frac{Sc}{Sc_t} \right) \frac{\partial c_1}{\partial y} \quad (57)$$

Für den Vorlauf, die Erzeugung der Anfangswerte und im Nachlauf ist die Massendichte Null. Somit gilt an der Wand lediglich die Wandhaftungsbedingung:

$$v_{Wand} = 0 \quad (58)$$

$$u_{Wand} = 0 \quad (59)$$

Für die Energiegleichung gilt über der Lache folgende Randbedingung:

$$T_{Wand} = T_{Lache} \quad (60)$$

wobei hier T_{Lache} aus der Lösung der Energiebilanz (Gl.34) stammt. Hierbei wird eine konstante Lachentemperatur über die Lauflänge angenommen und die Temperatur der Lache aus der Bilanz der Wärmeströme über die gesamte Lache ermittelt. Die so berechnete Lachentemperatur wirkt sich auf die Randbedingung der Konzentrationsgleichung aus, da die Sättigungskonzentration eines Stoffes an der Phasengrenzfläche maßgeblich vom Dampfdruck und dem Molekulargewicht abhängt und der Dampfdruck direkt temperaturabhängig ist. Die Randbedingung der Konzentrationsgleichung lautet somit [24]:

$$c_{1,Wand} = \frac{p_{1,Wand}}{p_{1,Wand} + (p_e - p_{1,Wand}) \cdot \frac{\tilde{M}_{Luft}}{\tilde{M}_{Stoff}}} \quad (61)$$

Für den Vorlauf, die Erzeugung der Anfangswerte und im Nachlauf entspricht die Wandtemperatur der Temperatur des unbenetzten Bodens:

$$T_{wand} = T_{Boden} \quad (62)$$

Die Randbedingung für die Konzentrationsgleichung für den Vorlauf und die Erzeugung der Anfangswerte entspricht der Konzentration am Boden also Null:

$$c_{1,Wand} = 0 \quad (63)$$

während im Nachlauf für die Konzentrationsgleichung eine Gradientenrandbedingung gilt:

$$\frac{\partial c_{1,Wand}}{\partial y} = 0 \quad (64)$$

Am Grenzschichtaußenrand wird die Geschwindigkeit der Anströmung in der der Grenzschichtdicke entsprechenden Höhe als Randbedingung für die Impulsgleichung angenommen:

$$u_e = \textit{konstant} \quad (65)$$

Die Geschwindigkeit am Grenzschichtaußenrand wird für die Höhe der Grenzschicht über folgenden Potenzansatz:

$$u(z) = u_{ref} \left(\frac{z}{z_{ref}} \right)^\alpha \quad (66)$$

aus den Angaben des DWD zur Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe berechnet. Hierbei sind die von z abhängigen Werte, die Werte in der gewünschten Höhe, in diesem Fall also der Grenzschichtdicke und die Werte mit dem Index ref die Referenzdaten in der Referenzhöhe, welche den 10 m Messhöhe des DWD entspricht. Der Exponent α hängt von der jeweiligen Geländestruktur ab und stellt den Einfluss der Turbulenz auf das Geschwindigkeitsprofil dar. Eine genaue Beschreibung des Einflusses der Geländestruktur auf das Windprofil und die dementsprechende Auswahl von α erfolgt in Kapitel 2.3. Die nach diesem Ansatz berechnete Windgeschwindigkeit am Grenzschichtaußenrand wird für die gesamte Berechnung konstant gehalten, da die Grenzschicht mit der Lauflänge nur minimal wächst und die daraus resultierende Änderung der Geschwindigkeit am Außenrand vernachlässigbar ist.

Ebenso gilt am Grenzschichtaußenrand die Temperatur und die Konzentration der Anströmung, wobei letztere meistens Null sein wird, so dass gilt:

$$T_e = T_{Luft} \quad (67)$$

und

$$c_{1,e} = 0 \quad (68)$$

4.2 Numerische Lösung der Grenzschichtgleichungen

4.2.1 Koordinatentransformation

Für die Berechnungen des gekoppelten nicht-linearen Gleichungssystems wird eine Variation der Mangler - Falkner - Skan Koordinatentransformation [48] angewandt. Hierdurch werden die in einer Stromfunktionsformulierung verwendeten Gleichungen in eine dimensionslose Form gebracht. Des Weiteren wird durch diese Transformation die anwachsende Grenzschicht auf ein Rechteck abgebildet, so dass mit einem konstanten, der Strömung angepassten Gitter gerechnet werden kann. Die angewandten Transformationsregeln lauten:

$$dx = d\xi \quad (69)$$

$$dy = \frac{\beta}{u_e \cdot \rho_e} \cdot d\eta \quad (70)$$

$$\beta = \alpha \cdot (\rho_e \cdot u_e \cdot \mu_e \cdot \xi)^{\frac{1}{2}} \quad (71)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (72)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{u_e \cdot \rho_e}{\beta} \cdot \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (73)$$

Des Weiteren wird die Stromfunktion

$$\Psi = \beta \cdot f \quad (74)$$

in folgender Form eingeführt

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = -\rho v \quad (75)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial y} = \rho u \quad (76)$$

Daraus resultiert für die Geschwindigkeit u :

$$u = \frac{\rho_e}{\rho} \cdot u_e \cdot f' \quad (77)$$

Durch diese Vorgehensweise wird zwar die Anzahl der Gleichungen und Unbekannten um eins reduziert, parallel erhöht sich jedoch die Ordnung der Differentialgleichungen um eins, wodurch erhöhte Anforderungen an das Differenzenverfahren gestellt wer-

den.

Hier und im Folgenden werden Ableitungen $\frac{\partial}{\partial \xi}$ mit dem Index ξ gekennzeichnet und Ableitungen $\frac{\partial}{\partial \eta}$ mit einem Apostroph.

Im Gegensatz zur stationären Formulierung der Gleichungen, bei der die Kontinuitätsgleichung durch die Einführung der Stromfunktion implizit erfüllt wird, muss für den instationären Fall die instationäre Kontinuitätsgleichung explizit berücksichtigt werden. Vor der Transformation in das ξ, η - Koordinatensystem wurde die Kontinuitätsgleichung nach $\rho \frac{\partial u}{\partial x}$ umgestellt. Durch Ausdifferenzieren der Kontinuitätsgleichung (Gl. 27) erhält man:

$$\rho \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} - u \frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{\partial \rho v}{\partial y}. \quad (78)$$

Dieser Term wird dann in der Impulsgleichung (Gl. 28) substituiert, so dass durch die Lösung der Impulsgleichung gleichzeitig auch die Kontinuitätsgleichung erfüllt wird.

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \left(-\frac{\partial \rho}{\partial t} - u \frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{\partial \rho v}{\partial y} \right) + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{dp_e}{dx} + \frac{\partial}{\partial y} (\mu(1 + \nu_t^+) \frac{\partial u}{\partial y}) \quad (79)$$

Durch die explizite Berücksichtigung der instationären Kontinuitätsgleichung ergeben sich im Vergleich zu Baumann [24] zusätzliche zu lösende Terme. Speziell die nun zeitabhängige Dichte führt zu einer noch stärkeren Kopplung zwischen den Gleichungen. Änderungen der Konzentration wirken sich so viel stärker auf die Lösung der Gleichungen aus, als im stationären Fall.

Zur Vereinfachung der Schreibweise werden folgende Abkürzungen verwendet:

$$\begin{aligned}\bar{\xi} &= CEL1 = \frac{\xi}{\partial\xi} \\ P11 &= \frac{\xi}{\beta}\beta_\xi \\ P21 &= \frac{\xi}{u_e}u_{e,\xi} \\ P1P &= P11 + CEL1 \\ P2P &= P21 + CEL1 \\ b &= \frac{1}{\alpha^2} \cdot \frac{\rho\mu}{\rho_e\mu_e} (1 + \nu_t^+) \\ b_e &= \frac{1}{\alpha^2} \cdot \frac{1}{Pr} \cdot c_P \cdot \frac{\rho\mu}{\rho_e\mu_e} \cdot \left(1 + \nu_t^+ \cdot \frac{Pr}{Pr_t}\right) \\ b_s &= \frac{1}{\alpha^2} \cdot \frac{1}{Sc_1} \cdot \frac{\rho\mu}{\rho_e\mu_e} \cdot \left(1 + \nu_t^+ \cdot \frac{Sc_1}{Sc_t}\right) \\ E &= \frac{\mu c_{P1}}{Sc_1} (1 + \nu_t^+ \frac{Sc_1}{Sc_t}) - \frac{\mu c_{P2}}{Sc_2} (1 + \nu_t^+ \frac{Sc_2}{Sc_t})\end{aligned}$$

Somit lauten die transformierten instationären Grenzschichtgleichungen:

Impulsgleichung

$$\begin{aligned}& \frac{\rho_e}{\rho} b f''' + \frac{\rho_e}{\rho} b' f'' - 3 \frac{\rho_e}{\rho} \frac{\rho'}{\rho} b f'' - \bar{\xi} f_i f'' + \\ & + P1P f f'' - \frac{\xi \rho_0}{u_e \rho_e \Delta t} - \frac{\rho_e}{\rho} \frac{\rho'}{\rho} b' f' + 3 \frac{\rho_e}{\rho} \frac{\rho'^2}{\rho^2} b f' - \frac{\rho_e}{\rho} \frac{\rho''}{\rho} b f' + \bar{\xi} f'_i f' + \frac{\rho'}{\rho} \bar{\xi} f'_i f' - \\ & - P21 f' f' - \bar{\xi} \frac{\rho_i}{\rho} f' f' - \frac{\rho'}{\rho} P1P f f' \\ & = \\ & - \frac{\rho}{\rho_e} P21\end{aligned}\tag{80}$$

Energiegleichung

$$\begin{aligned}
 & \frac{\rho_e}{\rho} b e T'' + \\
 & + \frac{\rho_e}{\rho} b e' T' - \frac{\rho_e \rho'}{\rho \rho} b e T' + \frac{E}{\alpha^2 \mu_e} c_1' T' - c_P \bar{\xi} f_i T' + c_P P 1 P f T' - c_P \bar{\xi} f' T - \frac{\xi \rho}{u_e \Delta t \rho_e} c_P T \\
 & = \\
 & - c_P \bar{\xi} f' T_i - \frac{\xi \rho}{u_e \Delta t \rho_e} c_P T_0
 \end{aligned} \tag{81}$$

Konzentrationsgleichung

$$\begin{aligned}
 & \frac{\rho_e}{\rho} b s c_1'' + \frac{\rho_e}{\rho} b s' c_1' - \frac{\rho_e \rho'}{\rho \rho} b s c_1' + c_P P 1 P f c_1' - \bar{\xi} f_i c_1' - \bar{\xi} f' c_1' - \frac{\xi \rho}{u_e \Delta t \rho_e} c_1 \\
 & = \\
 & - \bar{\xi} f' c_{1i} - \frac{\xi \rho}{u_e \Delta t \rho_e} c_{10}
 \end{aligned} \tag{82}$$

4.2.2 Rechengitter

Das Rechengebiet wird mit einem rechtwinkligen Gitternetz bedeckt, dessen Gitterpunkte im transformierten (ξ, η) -Raum gegeben sind durch:

$$\xi_1 = 0 \qquad \xi_{i+1} = \xi_1 + k_i \qquad i = 1, \dots, N - 1 \tag{83}$$

$$\eta_1 = 0 \qquad \eta_{j+1} = \eta_1 + h_j \qquad j = 1, \dots, M - 1 \tag{84}$$

Die Anzahl der Gitterpunkte in ξ und η -Richtung sind respektive N und M. Die Schrittweiten k_i und h_j sind variabel. Die Schrittweite k_i hängt von der gewählten Anzahl an Punkten in x-Richtung ab und beeinflusst die Lösung dadurch, dass größere Schrittweiten zu einer ungenaueren Erfassung der Änderungen mit der Lauflänge führen. Sehr kleine Schrittweiten hingegen führen zu einer sehr grossen Rechenzeit, ohne zwangsweise eine höhere Genauigkeit zu ermöglichen.

Die verwendete Schrittweite beträgt jeweils 1/100 der überströmten Lachenlänge. Entspricht die Schrittweite aufgrund der überströmten Länge einem Wert, der größer als 0,1 m ist, so wird die Schrittweite auf 0,1 m begrenzt, da dieser Wert die Obergrenze darstellt, ab der der Einfluss auf die Lösung nicht mehr vernachlässigbar ist. Bei der Festlegung der Schrittweite h_j über die Höhe der Grenzschicht ist zu berücksichtigen, dass an der Wand die größten Gradienten auftreten, so dass für eine genaue Berech-

nung eine geringe Schrittweite erforderlich ist. Im wandfernen Bereich treten hingegen keine großen Gradienten mehr auf, so dass für eine genaue Berechnung auch eine größere Schrittweite als in Wandnähe ausreichend ist. Dementsprechend wird h_j so gewählt, dass in Wandnähe ein stark verdichtetes Gitter vorliegt, welches sich zum Grenzschichtrand hin immer weiter aufweitet.

Die Verwendung variabler Schrittweiten, die sich in Bereichen mit geringen Änderungen der zu berechnenden Größen immer weiter erhöhen, ist nicht auf numerische Notwendigkeiten zurückzuführen. Es ermöglicht vielmehr die gegensätzlichen Zielsetzungen einer möglichst genauen Berechnung, mit der der möglichst kurzen Rechenzeit zu vereinbaren.

Das verwendete Gitter ermöglicht nur eine zweidimensionale Berechnung. Hierbei werden lediglich die Lauflänge und die Höhe über dem Boden abgebildet. Für die Breite wird bei rechteckigen Lachen angenommen, dass diese immer der Lachenbreite entspricht. Bei der Berechnung von Kreisflächen wird der Kreis durch schmale Rechtecke approximiert, deren Längsseite parallel zur Strömungsrichtung ausgerichtet ist. Somit kann für jedes einzelne Rechteck, die zur Länge gehörige x-Position bestimmt und die für diese Länge vorliegenden Geschwindigkeits-, Temperatur- und Konzentrationsprofile abgespeichert und die jeweilige Massenstromdichte zugeordnet werden. Diese Vorgehensweise ermöglicht es, die Berechnung für beliebige Lachenflächen durchzuführen.

4.2.3 Zeitliche Diskretisierung

Aufgrund der starken Kopplung der Gleichungen, insbesondere durch die zeitabhängige Dichte $\frac{\partial \rho}{\partial t}$, muss ein relativ kleiner Zeitschritt gewählt werden, um die zeitlichen Gradienten erfassen zu können und gleichzeitig zu gewährleisten, dass die Lösung nicht beeinflusst wird. Gleichzeitig sollte auch hier die Schrittweite so groß wie möglich gewählt werden, um die Rechenzeit gering zu halten. Zur Bestimmung des Zeitschrittes wurde dieser immer kleiner gewählt bis zum Erreichen einer konvergenten und von einer weiteren Verringerung des Zeitschrittes unabhängigen Lösung. Weitere Untersuchungen zum Zeitschritt ergaben, dass ein sehr kleiner Zeitschritt nur zu Beginn der Berechnung notwendig ist, da dies der Moment ist, in dem die größten Gradienten auftreten. Der Zeitschritt wurde daher variabel gestaltet und beträgt in der Anfangsphase 0,01 s, um dann sukzessive bis auf 5 s angehoben zu werden. Dieser Maximalwert entspricht auch der Obergrenze, ab der eine weitere Erhöhung des Zeitschrittes einen

Einfluss auf die Lösung hat.

4.2.4 Lösungsverfahren

Zur Diskretisierung der Gleichungen in Hauptströmungsrichtung ξ werden implizite rückwärtige Differenzenformeln mit nur einer rückwärtigen Stelle verwendet. Der Vorteil dieses Verfahrens gegenüber genaueren Diskretisierungen, wie z.B. nach Crank-Nicholson ist, dass ein besseres Stabilitätsverhalten vorliegt, wodurch sprunghafte Änderungen, wie sie beim Übergang von der Lache zum unbenetzten Boden im Nachlauf auftreten, einfacher berücksichtigt werden können. Zur Veranschaulichung dieser Diskretisierung wird die Approximierung der allgemeinen Funktion f und ihrer ersten Ableitung an dieser Stelle wiedergegeben:

$$f(\xi_{i+1}) = f_{i+1} \quad (85)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \xi_{\xi_{i+1}}} = \frac{f_{i+1} - f_i}{\xi_{i+1} - \xi_i} \quad (86)$$

Durch diese Diskretisierung vereinfacht sich das Differentialgleichungssystem zu einem Satz von gewöhnlichen Differentialgleichungen für die Stelle ξ_{i+1} . Hierbei sind jedoch noch nichtlineare Terme in der transformierten Impulsgleichung (Gl.80) enthalten, die vor der Lösung linearisiert werden müssen. Diese sind:

$$P_1 P f f'' - P_2 f' f' - \bar{\xi} \frac{\rho_i}{\rho} f' f' - \frac{\rho'}{\rho} P_1 P f f' \quad (87)$$

Die Linearisierung der Impulsgleichung erfolgt anhand der Methode von Newton-Raphson, bei der zwei nichtlineare Terme f_1 und f_2 wie folgt linearisiert werden:

$$f_1 f_2 = f_1 \hat{f}_2 + \hat{f}_1 f_2 - \hat{f}_1 \hat{f}_2 \quad (88)$$

Die Werte mit „ $\hat{\cdot}$ “ kennzeichnen jeweils den Wert der vorherigen Iteration. Wendet man diese Linearisierung auf die Impulsgleichung an, so ergibt sich aus Gleichung 80:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\rho_e}{\rho} b f''' + \frac{\rho_e}{\rho} b' f'' - 3 \frac{\rho_e}{\rho} \frac{\rho'}{\rho} b f'' - \bar{\xi} f_i f'' + \\
 + P1P \hat{f} f'' & - \frac{\xi \rho_0}{u_e \rho_e \Delta t} - \frac{\rho_e}{\rho} \frac{\rho'}{\rho} b' f' + 3 \frac{\rho_e}{\rho} \frac{\rho'^2}{\rho^2} b f' - \frac{\rho_e}{\rho} \frac{\rho''}{\rho} b f' + \bar{\xi} f_i' f' + \frac{\rho'}{\rho} \bar{\xi} f_i' f' - \\
 & - 2P21 \hat{f}' f' - 2 \bar{\xi} \frac{\rho_i}{\rho} \hat{f}' f' - \frac{\rho'}{\rho} P1P \hat{f} f' + \\
 & + P1P \hat{f}'' f - \frac{\rho'}{\rho} P1P \hat{f}' f \\
 & = \\
 & - \frac{\rho}{\rho_e} P21 + P1P \hat{f} f'' - P21 \hat{f}'^2 - \bar{\xi} \frac{\rho_i}{\rho} \hat{f}'^2 - \frac{\rho'}{\rho} P1P \hat{f}' f
 \end{aligned} \tag{89}$$

Für die direkte Lösung der einzelnen linearen Differentialgleichungen kommt ein Differenzenverfahren vom Hermiteschen Typ mit variablen Schrittweiten nach Thiele und Wagner [25] in der Version von Baumann und Thiele [26] zum Einsatz.

4.2.5 Transformierte Randbedingungen

Um auch die Randbedingungen in eine dimensionslose Form zu bringen müssen diese auch transformiert werden. Nach der Transformation ergibt sich für die einzelnen Variablen:

$$f' = \frac{u}{u_e} \cdot \frac{\rho}{\rho_e} \tag{90}$$

$$T = \frac{T}{T_e} \tag{91}$$

$$c = \frac{\rho}{\rho_{gesamt}}. \tag{92}$$

Die transformierten Randbedingungen der Impulsgleichung für die ebene Platte ohne Lache lauten nun:

$$f_{Wand} = 0 \tag{93}$$

$$f'_{Wand} = 0 \tag{94}$$

$$f'_e = 1 \tag{95}$$

Die Randbedingungen der Energiegleichung :

$$T_{Wand} = \frac{T_{Boden}}{T_e} \quad (96)$$

$$T_e = 1 \quad (97)$$

Die Randbedingung der Konzentrationsgleichung :

$$c_{1,Wand} = 0$$

$$c_{1,e} = 0$$

Für den Bereich der Lache lauten die Randbedingungen:

$$f_{Wand} = \frac{\bar{\xi}}{P1P} \cdot f_i - \frac{\xi \cdot \tilde{m}}{\beta \cdot P1P} \quad (98)$$

$$f'_{Wand} = 0 \quad (99)$$

$$f'_e = 1 \quad (100)$$

Die Randbedingungen der Energiegleichung :

$$T_{Wand} = \frac{T_{Lache}}{T_e} \quad (101)$$

$$T_e = 1 \quad (102)$$

Zwar verändert sich die Randbedingung der Konzentrationsgleichung durch die Transformation nicht, da sie schon in dimensionsloser Form vorlag; der Vollständigkeit halber wird sie jedoch nochmals aufgeführt:

$$c_{1,Wand} = \frac{p_{1,Wand}}{p_{1,Wand} + (p_e - p_{1,Wand}) \cdot \frac{\tilde{M}_{Luft}}{\tilde{M}_{Stoff}}}$$

$$c_{1,e} = 0$$

Speziell an dieser Randbedingung verdeutlicht sich der Einfluss der instationären Energiebilanz auf die Lösung der Grenzschichtgleichungen. Die Konzentration hängt nur vom Dampfdruck an der Phasengrenzfläche ab, der wiederum über die ideale Gasgleichung direkt mit der Temperatur gekoppelt ist. Somit bewirkt die Lösung der Energiebilanz und die daraus resultierende instationäre Lachentemperatur eine Änderung der Konzentration an der Phasengrenzfläche, die dann eine Änderung der Dichte zur Folge hat, wodurch die Lösung der Impulsgleichung beeinflusst wird.

4.3 Lösungsalgorithmus

In Abbildung 6 ist das Schema zum grundsätzlichen Ablauf bei der Berechnung des Verdunstungsmassenstromes dargestellt. Nach dem Einlesen der Startprofile wird eine stationäre Lösung der Grenzschichtgleichungen ohne Stoffübergang berechnet, die die Anfangsbedingungen des instationären Verfahrens liefert. Die Iterationsschleife um die Impulsgleichung stellt die Iterationen der Linearisierung nach Newton-Raphson dar. Anschließend werden die Gleichungen, wie im Ablaufschema dargestellt, sequentiell gelöst. Da drei Differentialgleichungen gekoppelt sind und ihre jeweilige Lösung die Lösung der beiden anderen Gleichungen beeinflusst, muss die Lösung derselben iterativ solange wiederholt werden, bis eine konvergente Lösung erreicht wurde. Als Konvergenzkriterium wurde definiert, dass die relative Abweichung der Lösungen aus dem aktuellen und dem vorigen Iterationsschritt nicht größer als $5 \cdot 10^{-3}$ sein darf. Die Letzte Iterationsschleife stellt die Iteration über die Anzahl an Schritten in Strömungs- also in ξ -Richtung dar.

Anschließend werden die instationären Differentialgleichungen gelöst. Die Iterationsschleifen um die drei Differentialgleichungen entsprechen denen aus der stationären Lösung. Zu jedem Schritt in ξ -Richtung wird die jeweilige Massenstromdichte und die zugehörige Fläche abgespeichert. Wurde die Lösung der Gleichungen über die gesamte Lauflänge einmal berechnet, wird der Massenstrom berechnet, indem jede abgespeicherte Massenstromdichte mit der zugehörigen Fläche multipliziert und die daraus resultierenden Massenströme addiert werden, um den Gesamtmassenstrom zu erhalten. Anschließend wird die Energiebilanz um die Lache gelöst und eine neue Lachentemperatur berechnet. Anhand des Verdunstungsmassenstromes, der neuen Lachentemperatur und des daraus resultierenden neuen Dampfdruckes werden die Randbedingungen des Differentialgleichungssystems für den nächsten Zeitschritt neu bestimmt.

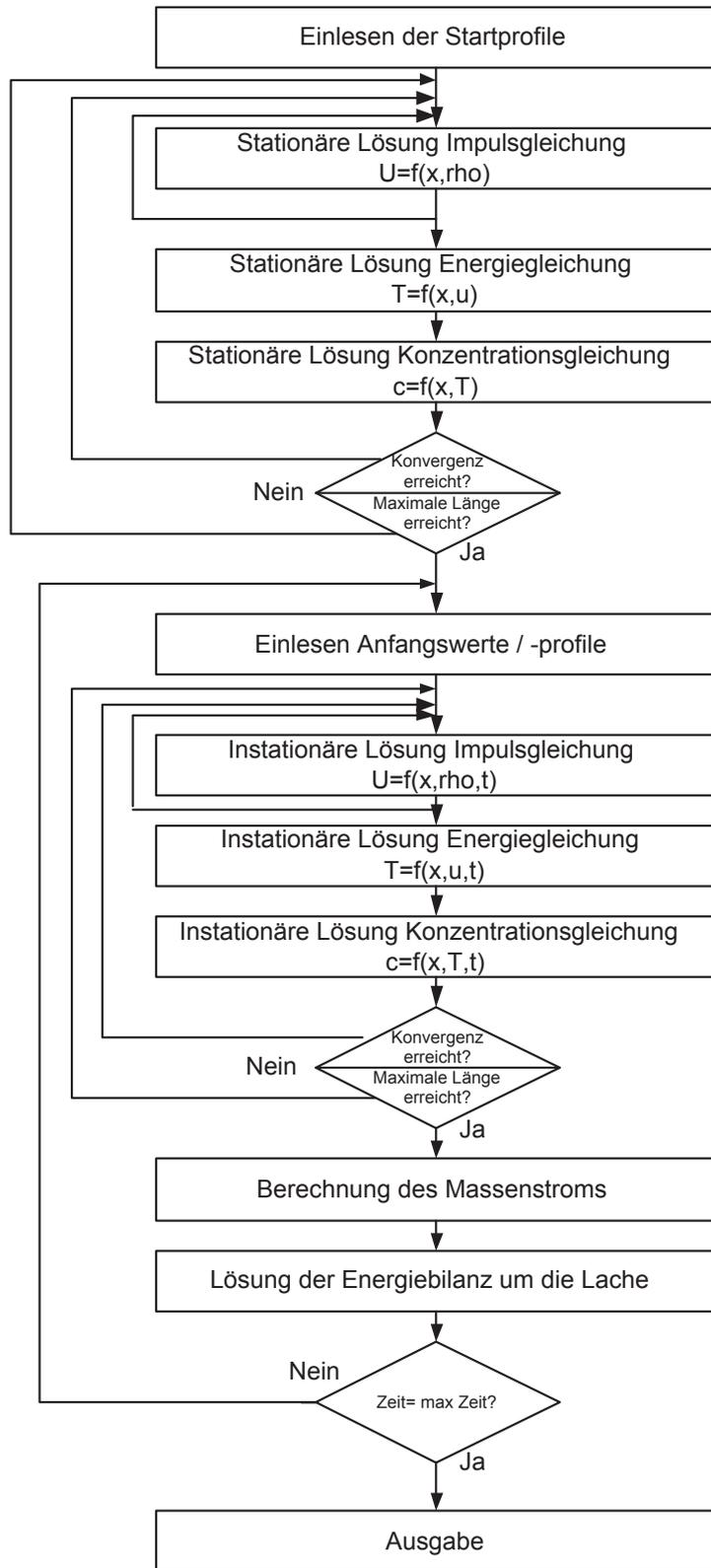


Abbildung 6: Schematische Darstellung des Lösungsalgorithmus

5 Experimentelle Untersuchungen

Zur Validierung des in dieser Arbeit entwickelten Grenzschichtverfahrens, sowie der Überprüfung der Genauigkeit der vorgestellten empirischen Modelle, wurden Freilandversuche durchgeführt. Um den von diversen Autoren [11], [18] postulierten Einfluss der Bebauung auf den Stoffübergang zu untersuchen, wurden zwei Gelände mit unterschiedlicher Topografie ausgewählt. Zum einen das Freiversuchsgelände „Testgelände Technische Sicherheit“ der BAM (BAM-TTS), zum anderen eine Versuchsfläche auf dem Hauptgelände der BAM in Berlin-Lichterfelde (BAM-UE). Diese Gelände wurden ausgewählt, da sie von ihrer Topografie her respektive die beiden Extreme glatt und sehr rauh in den Geländeeinstufungen gemäß VDI-Richtlinie [53] oder auch nach Deutsch [18] entsprechen.

5.1 Versuchsaufbau und -durchführung

Bei der Verdunstung von Flüssigkeiten spielen mehrere Parameter eine Rolle: so wird der Verdunstungsmassenstrom durch die Lachengröße, die Flüssigkeits- und Umgebungstemperatur, die Windgeschwindigkeit, die Bebauungsstruktur und die Stoffeigenschaften beeinflusst. Da bei Freilandexperimenten die Parameter Windgeschwindigkeit und Umgebungstemperatur nicht beeinflussbar sind, konnten nur die anderen Parameter verändert werden. Wie oben bereits erwähnt, wurden zwei Gelände (BAM-UE und BAM-TTS) mit unterschiedlicher Bebauungsstruktur ausgewählt. Um den Einfluss unterschiedlicher Stoffeigenschaften abbilden zu können, wurden die Versuche mit Ethanol und Cyclohexan durchgeführt. Diese beiden Stoffe wurden unter anderem auch deswegen ausgewählt, da von ihnen keine toxische Gefährdung zu erwarten und die Gefahr der Bildung einer explosiven Wolke ebenfalls als gering anzusehen ist. Der Einfluss der Lachengröße wurde durch die Verwendung von flachen, kreisförmigen Wannen mit 0,5 m, 0,74 m und 1 m Durchmesser untersucht. Für beide Gelände wurden Versuche bei vier unterschiedlichen Flüssigkeitstemperaturen (30°C, 37°C, 44°C und 50°C) mit beiden Stoffen durchgeführt. Die Lachentemperatur konnte mittels einer Heizschlange über die Versuchsdauer nahezu konstant gehalten werden, wobei leichte Schwankungen durch die variierende Intensität der Sonneneinstrahlung entstanden. Neben den Versuchen bei konstanter Lachentemperatur wurden auch Versuche durchgeführt, bei denen das Abkühlverhalten der Lache untersucht wurde. Hierbei wurde die Flüssigkeit lediglich auf eine Starttemperatur hochgeheizt, anschließend die Heizschlange entfernt und der Temperaturabfall während der Verdunstung gemessen. Bei allen Versuchen wurden die Lachentemperatur, die Umgebungstemperatur sowie die

Windrichtung und -geschwindigkeit in 2 m Höhe über dem Boden aufgezeichnet. Als zusätzliche Daten zur Windrichtung und -geschwindigkeit an den Messtagen standen die Messwerte vom Deutschen Wetterdienst (DWD) sowie des meteorologischen Instituts der FU Berlin zur Verfügung.

Um eine untere Grenze für den Verdunstungsmassenstrom zu erhalten, wurden darüber hinaus Versuche mit Ethanol für unterschiedliche Lachentemperaturen in einer geschlossenen Halle durchgeführt. Die Halle hatte eine Höhe von 4,73 m bei einer Grundfläche von 7,3 x 7,9 m. Obwohl die Halle geschlossen war, lag die Windgeschwindigkeit aufgrund natürlicher Konvektion bei 0,04 m/s. Diese Strömungsgeschwindigkeit ist jedoch so gering, dass die Strömungsbedingungen als quasi Windstill angesehen werden können. Die Bestimmung des Massenstromes erfolgte gravimetrisch. Für alle Versuche wurde der Massenverlust für eine einheitliche Versuchsdauer von 15 Minuten bestimmt. Aus diesen Versuchen bei denen jeweils 3 Wiederholungen bei gleichen Randbedingungen durchgeführt wurden, konnte der aufgrund der Versuchsdurchführung sowie der verwendeten Messtechnik bei allen experimentellen Untersuchungen zu erwartende Messfehler bestimmt werden. Dieser liegt bei ca. 13%.

5.2 Versuchsauswertung

Aufgrund der größeren Anzahl an durchgeführten Versuchen werden die Diskussionen und Bewertungen der Ergebnisse hauptsächlich anhand der Versuche mit Ethanol bei 30°C durchgeführt. Die Versuche mit Cyclohexan, ebenso wie die Versuche mit Ethanol bei höheren Temperaturen, zeigen die gleichen Tendenzen bei gleichzeitig höheren Massenströmen aufgrund der höheren Dampfdrücke (siehe Abb. 7, 14, 15).

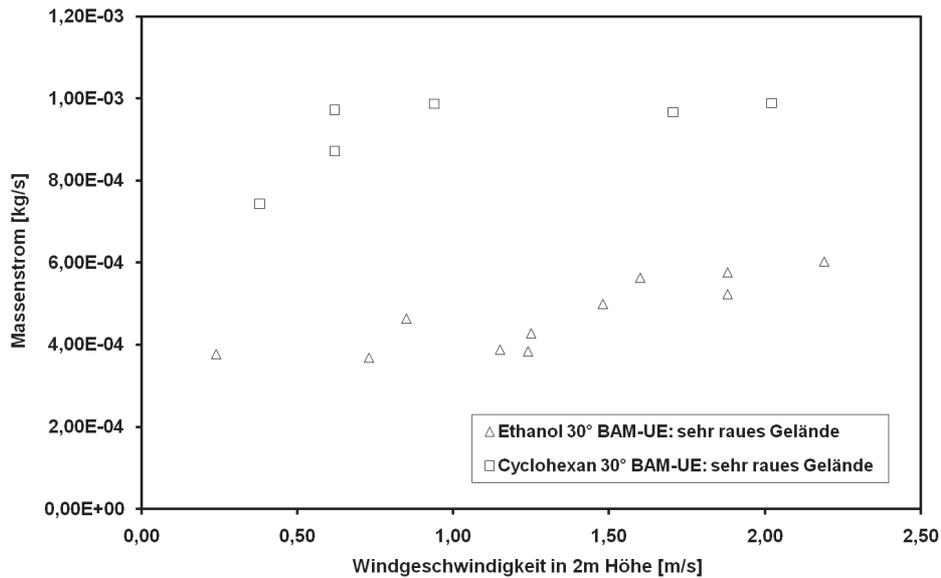


Abbildung 7: Vergleich der Massenströme über der Windgeschwindigkeit in 2m Höhe über dem Boden von Ethanol und Cyclohexan bei 30°C und einem Lachendurchmesser von 0,74m.

In Abbildung 8 sind die bei den Freilandversuchen ermittelten Massenströme für eine Ethanollache mit 0,74m Durchmesser und einer Temperatur von 30°C aufgetragen. Die Auftragung stellt den Massenstrom über der Windgeschwindigkeit in 2m Höhe dar.

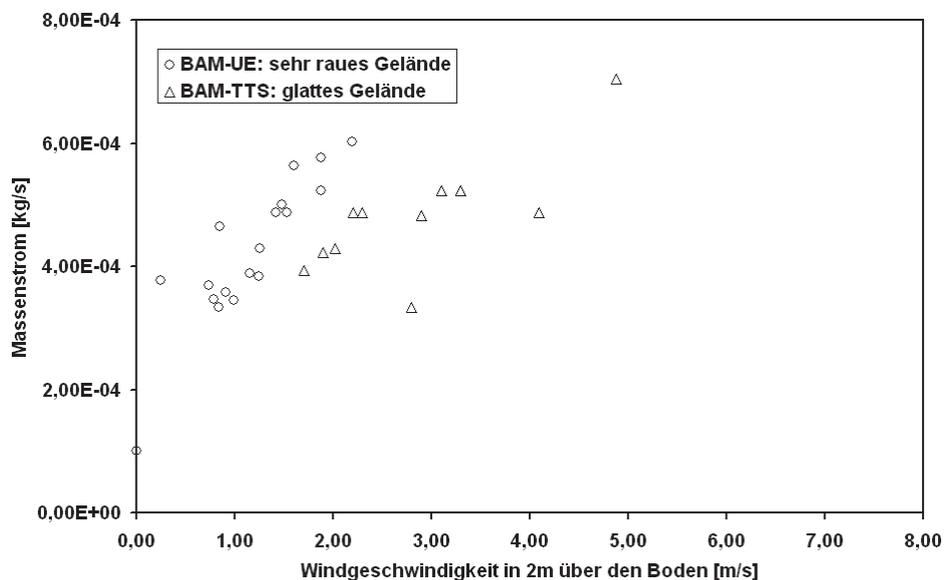


Abbildung 8: Gemessene Massenströme einer 30°C Ethanollache mit 0,74m Durchmesser in glattem und sehr rauem Gelände in Abhängigkeit von der Windgeschwindigkeit in 2 m Höhe über dem Boden.

Bei der Auftragung des gemessenen Verdunstungsmassenstromes über der Windgeschwindigkeit in 2 m Höhe scheint die Frage nach dem Einfluss der Topografie recht eindeutig beantwortet zu sein. Die gemessenen Massenströme im sehr rauen Gelände sind höher als die im glatten Gelände. Die Vermutung, dass zusätzliche Bebauung aufgrund der höheren Turbulenz in der Anströmung den Massenstrom erhöht, scheint somit bestätigt.

Bei der Erstellung von Szenarien im Rahmen von Störfallauswirkungsbetrachtungen stehen im Allgemeinen für die Windgeschwindigkeit nur die Daten vom DWD in einer Messhöhe von 10 m über dem Boden zur Verfügung. Diese standardisierte Messhöhe spiegelt sich auch in den meisten empirischen Modellen wieder (bei den in dieser Arbeit verwendeten Modellen ist dies für alle gültig), bei denen die Windgeschwindigkeit als diejenige definiert ist, die in 10m Höhe über dem Boden gilt.

Eine Bewertung der in Abbildung 8 gezeigten, sowie aller weiteren gemessenen Werte, auf einer allgemein nachvollziehbaren Basis, erfordert eine Korrelation der Messdaten mit den zugehörigen Winddaten vom Deutschen Wetterdienst.

Trägt man die Messwerte aus Abbildung 8 über die Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe über dem Boden nach den Angaben des DWD auf (siehe Abb. 9), so zeigen sich deutliche Unterschiede zur Auftragung über der Windgeschwindigkeit in 2 m Höhe.

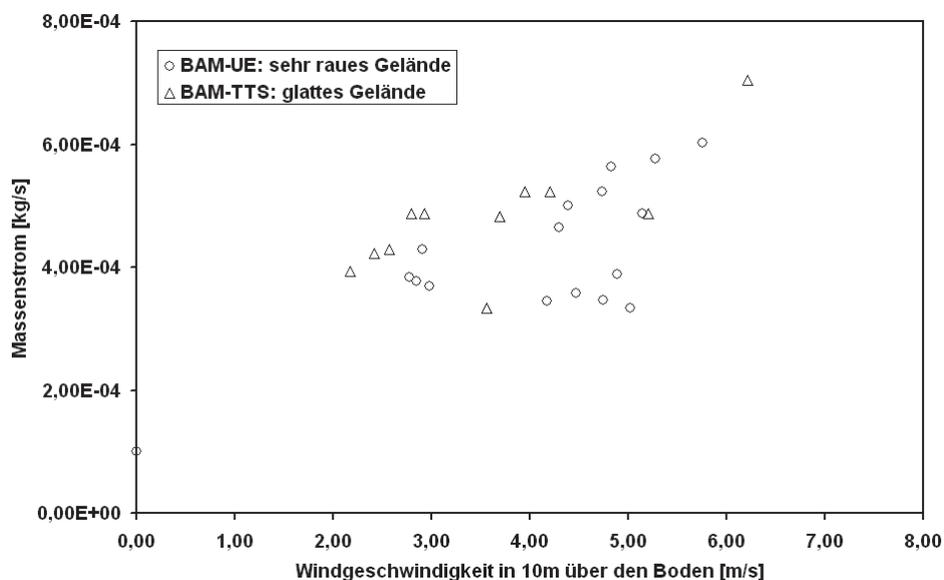


Abbildung 9: Gemessene Massenströme einer 30°C Ethanollache mit 0,74m Durchmesser in glattem und sehr rauem Gelände in Abhängigkeit von der Windgeschwindigkeit in 10m Höhe über dem Boden.

Bei der Auftragung über der Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe (siehe Abb. 9) fällt auf, dass sich vor allem die Messwerte in sehr rauem Gelände deutlich verschieben. Einen Unterschied im Massenstrom, der auf die zwei unterschiedlichen Topografien zurückzuführen wäre, ist in diesem Diagramm nicht mehr festzustellen.

Die stärkere Verschiebung der Werte, bei sehr rauem Gelände im Vergleich zu denen bei glattem Gelände, ist zwei Faktoren geschuldet. Zum einen zeigen die Geschwindigkeitsprofile gemäß Potenzprofil (siehe Abb. 2), dass in glattem Gelände nur noch ein geringer Geschwindigkeitsanstieg zwischen 2 und 10m Höhe stattfindet, während in sehr rauem Gelände die Geschwindigkeit um fast das Doppelte ansteigt. Eine stärkere Verschiebung der Werte zu den höheren Geschwindigkeiten wie in Abbildung 9 sichtbar, ist somit plausibel.

Der zweite Einflussfaktor erklärt, warum die Messwerte aus dem glatten Gelände lediglich eine Parallelverschiebung hin zu höheren Geschwindigkeiten erfahren (siehe Abb. 10), während die Werte aus dem sehr rauhen Gelände auch untereinander verschoben werden (siehe Abb. 11).

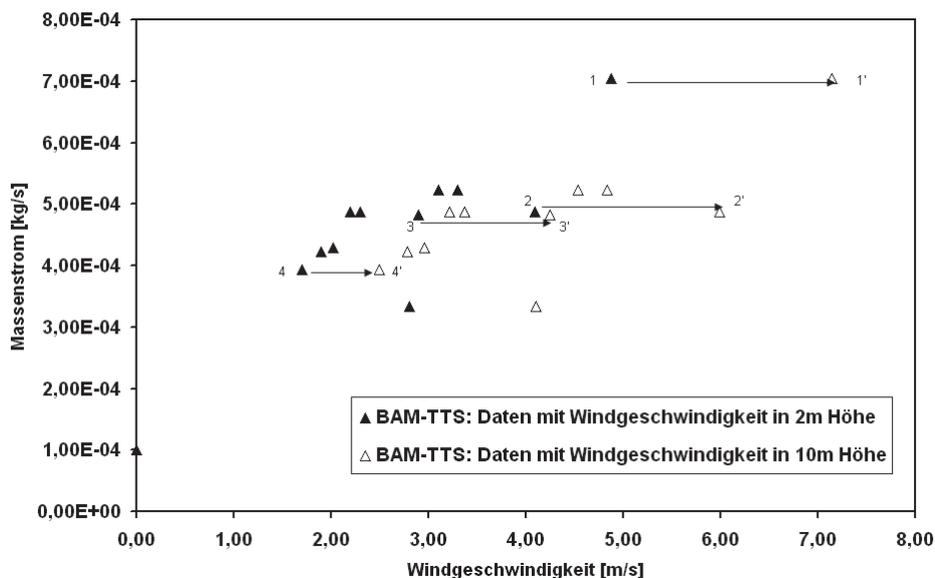


Abbildung 10: Verschiebung der Messpunkte bei Auftragung über der Windgeschwindigkeit in 2 oder 10 m Höhe in glattem Gelände.

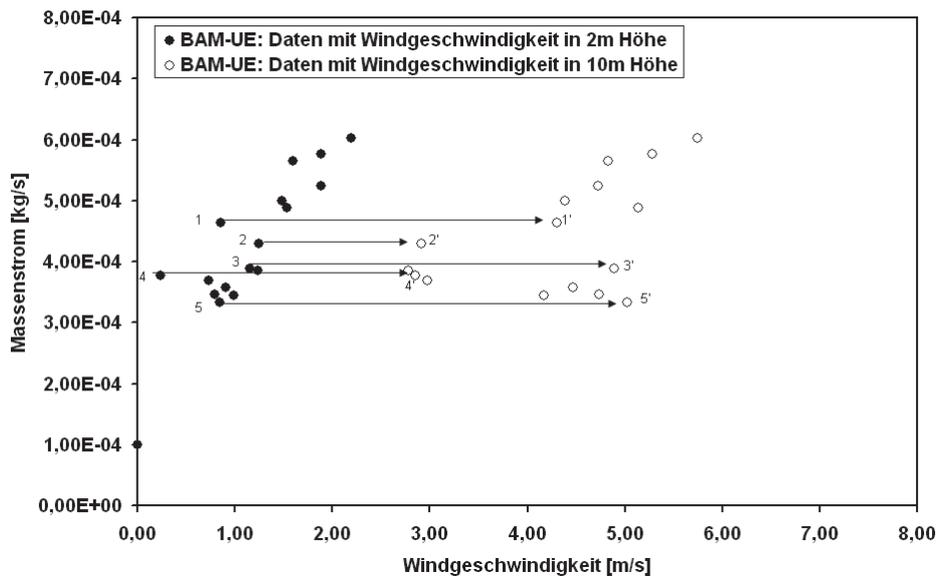


Abbildung 11: Verschiebung der Messpunkte bei Auftragung über der Windgeschwindigkeit in 2 oder 10 m Höhe in sehr rauem Gelände.

Die zu beobachtende Verschiebung der Punkte auch untereinander in Abbildung 11 resultiert daraus, dass die Messungen in sehr rauem Gelände in der Stadt stattfanden. Dort sind aufgrund der Bebauung die Unterschiede zwischen der Geschwindigkeit am Boden und der vom Wetterdienst gemessenen Geschwindigkeit in 10 m Höhe wesentlich größer, als in freiem Gelände, wo tatsächlich ein Potenzprofilverlauf angenommen werden kann. In der Stadt jedoch kann es lokal am Boden zu größeren Geschwindigkeiten kommen, als anhand der Potenzprofilannahme, ausgehend von der Geschwindigkeit in 10m Höhe, errechnet werden würde.

Des Weiteren treten in der Stadt durch die Umströmung der Gebäude Verwirbelungen auf, die zu konstanten Windrichtungswechseln, sogar entgegen der vorherrschenden meteorologischen Windrichtung, führen. Durch diese, auch während der Versuche stetigen Windrichtungswechsel (siehe Abbildung 12) kann angenommen werden, dass die Gaswolke, die sich aufgrund der Verdunstung bildet, nicht konstant von der Lache fort getragen wird. Es ist eher anzunehmen, dass die Wolke sogar zurück über die Lache getragen wird. Durch die vorhandene Konzentration des verdunstenden Stoffes in dieser Wolke und die daraus folgenden geringeren Konzentrationsgradienten über der Lache, wird der Stoffübergang verlangsamt und somit der Massenstrom reduziert.

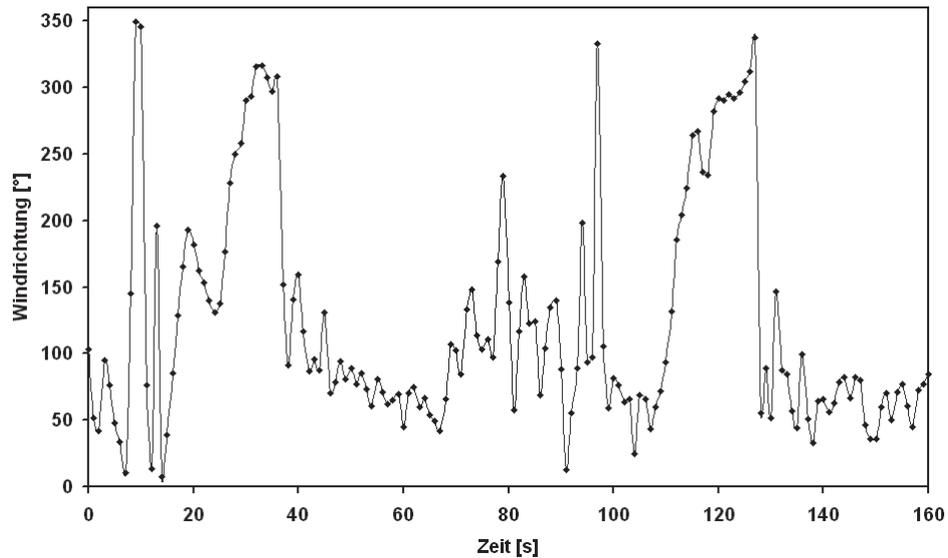


Abbildung 12: Schwankungen der Windrichtung während einer Messung in BAM-UE

Ebenso führen die aufgrund der Richtungsschwankungen auch stark schwankende Windgeschwindigkeit (teilweise bis hin zur Windstille für mehrere Sekunden, siehe Abbildung 13) zu einem ungleichmäßigen Abtransport des verdunsteten Stoffes und somit zu einer Verminderung der Verdunstung. Allgemein kann angenommen werden, dass die zu erwartende höhere Turbulenz in der Stadt theoretisch zwar zu höheren Massenströmen führen würde, aufgrund der durch diese Turbulenz hervorgerufenen Unstetigkeiten in der Richtung und Geschwindigkeit des Windes am Boden dieser Effekt jedoch neutralisiert wird.

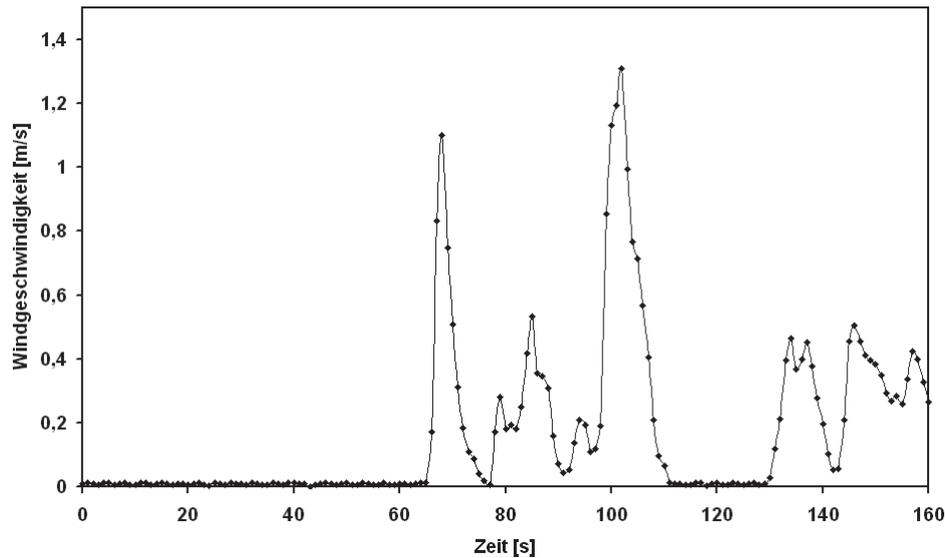


Abbildung 13: Schwankungen der Windgeschwindigkeit während einer Messung in BAM-UE

Aus den vorliegenden Untersuchungen mit einer Gesamtanzahl von 171 Versuchen kann abgeleitet werden, dass unter Berücksichtigung der Genauigkeit, der für die Störfallauswirkungsbetrachtung zur Verfügung stehenden Wetterdaten, der Einfluss der Bebauung auf den Verdunstungsmassenstrom eine untergeordnete Rolle spielt. Daher werden die Messergebnisse im Folgenden nur noch auf die Daten des DWD und der FU Berlin bezogen und keine Unterscheidung mehr zwischen den Versuchsgeländen gemacht.

In Abbildung 14 und 15 sind die Ergebnisse aller experimentellen Untersuchungen für Ethanol und Cyclohexan dargestellt. In Abbildung 14 sind zur visuellen Unterstützung manuell Trendlinien über den geschätzten Verlauf des Massenstromes mit der Windgeschwindigkeit eingetragen. Für die Werte bei einer Temperatur von 323 K ist der Bereich 0 m/s bis 1,5 m/s nur gestrichelt dargestellt, da für diese Temperatur kein Messwert für Windstille vorliegt. Es wird in dieser Darstellung angenommen, dass der Verlauf den Verläufen bei niedrigeren Temperaturen ähnelt.

Mit ansteigender Lachentemperatur erhöht sich der Dampfdruck des Stoffes und somit auch der Verdunstungsmassenstrom. Dies ist gut bei den Messungen in der Halle (Windgeschwindigkeit ≈ 0) zu erkennen, da hier die Schwankungen der Windgeschwindigkeit, Windrichtung und Sonneneinstrahlung keinen Einfluss auf die Messungen haben. Da Cyclohexan bei 20°C schon einen fast doppelt so hohen Dampfdruck

aufweist, wie Ethanol und der gemessene Massenstrom bei vergleichbarer Temperatur und Windgeschwindigkeit fast doppelt so groß ist, kann in dem untersuchten Temperaturbereich von einem fast linearen Zusammenhang zwischen dem Massenstrom und dem Dampfdruck ausgegangen werden.

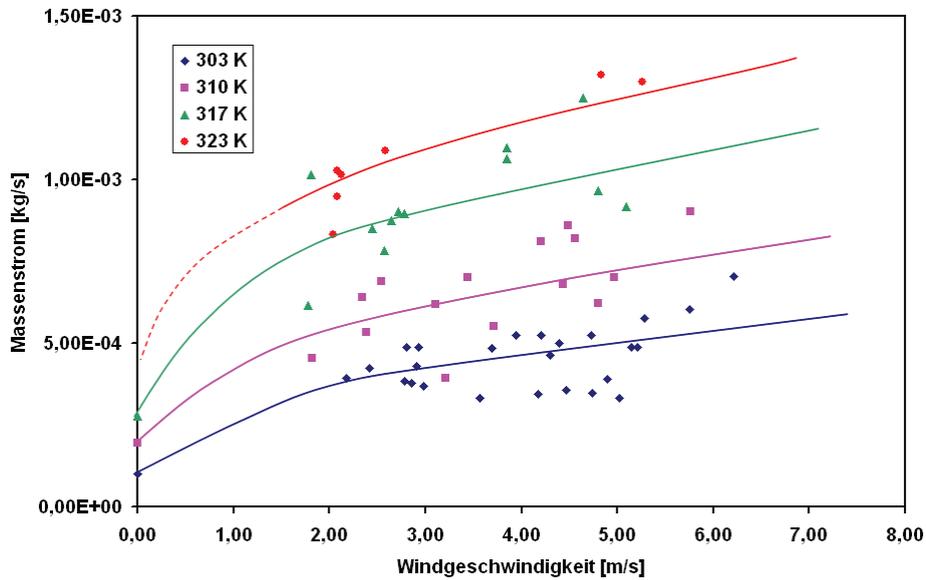


Abbildung 14: Verdunstungsmassenströme von Ethanol, Lachendurchmesser 0,74 m

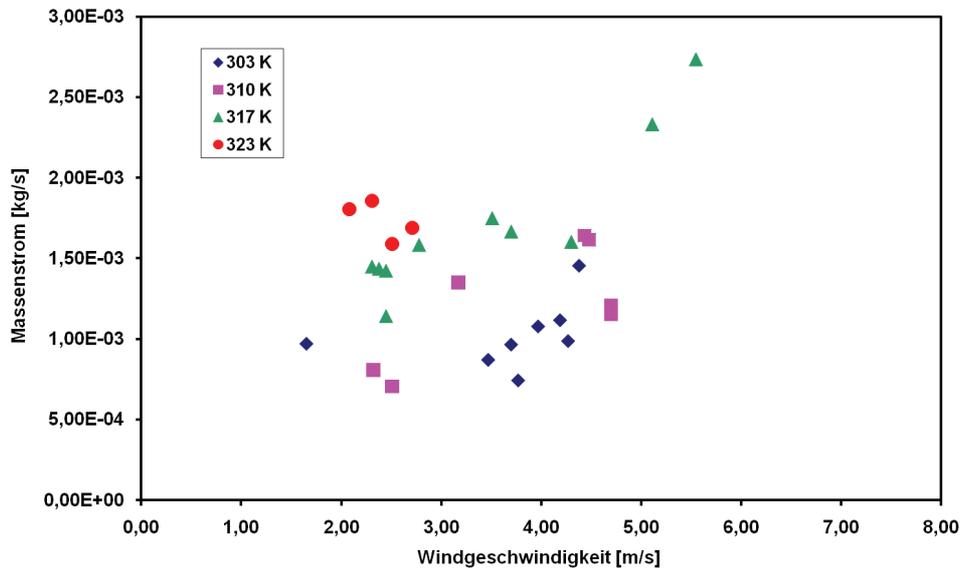


Abbildung 15: Verdunstungsmassenströme von Cyclohexan, Lachendurchmesser 0,74 m

Um den Einfluss der Lachengröße und somit der überströmten Länge auf den Verdunstungsmassenstrom bewerten zu können, wurde eine Messreihe mit Ethanol bei 30°C, einer Windgeschwindigkeit von 4,5 m/s ($\pm 0,15$ m/s), sowie Lachendurchmessern von 0,5 m, 0,74 m und 1 m durchgeführt. Um die Einflüsse von Wind- und Temperaturschwankungen zu minimieren, wurden je drei Wiederholungsversuche mit allen drei Lachengrößen direkt hintereinander durchgeführt. Die Mittelwerte der Ergebnisse dieser Versuchsreihen sind in Tabelle 4 dargestellt. Wie zu erwarten, steigt der Massenstrom mit größer werdender Lachenfläche. Im Gegensatz dazu verringert sich jedoch die Massenstromdichte mit steigender Lachenfläche. Dies ist dadurch begründet, dass mit steigender Überströmlänge immer mehr Stoff in die Gasphase übergeht und dort den weiteren Stoffübergang aus der Lache hemmt.

Lachendurchmesser [m]	Massenstrom [kg/s]	Massenstromdichte [kg/m ² s]
0,50	$2,73 \cdot 10^{-4}$	$1,39 \cdot 10^{-3}$
0,74	$4,91 \cdot 10^{-4}$	$1,14 \cdot 10^{-3}$
1,00	$8,28 \cdot 10^{-4}$	$1,05 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 4: Mittlerer Massenstrom und Massenstromdichte für verschiedene Größen einer Ethanol-lache bei 30°C

6 Ergebnisse zur Simulation der Lachenverdunstung

In diesem Kapitel werden die Daten aus den durchgeführten Freilandversuchen herangezogen, um die Genauigkeit der einzelnen empirischen Modelle bei der Abschätzung von Massenströmen zu untersuchen, die nicht unter Laborbedingungen gemessen wurden. Des Weiteren werden die Ergebnisse des Grenzschichtverfahrens vorgestellt und mit den Daten aus den Experimenten und den empirischen Modellen verglichen, um Aussagen bezüglich der Leistungsfähigkeit des Verfahrens treffen zu können.

6.1 Beurteilung der empirischen Modelle

Da das Modell von Deutsch die Möglichkeit bietet, die Berechnung an die Topografie anzupassen, soll zuerst der Einfluss dieser Einstellmöglichkeit untersucht werden. In Abbildung 16 ist der Vergleich zwischen den Messwerten und den errechneten Werten mit dem Modell von Deutsch für eine Ethanollache in sehr rauem und in glattem Gelände aufgetragen. Die mit dem Modell von Deutsch berechneten Massenströme für beide Extrema, glattes und sehr raues Gelände, weichen um rund 10% voneinander ab. Prinzipiell wird damit der auch experimentell festgestellte Unterschied im Anstieg des Verdunstungsmassenstroms mit der Windgeschwindigkeit erfasst. Da aber der Einfluss der beiden Gelände auf die Messwerte gering ist und beide Einstellungen im Modell von Deutsch zu einer deutlichen Überschätzung derselben führen, wird im Folgenden nur noch die Einstellung für glattes Gelände verwendet, da diese näher an den Messwerten liegt.

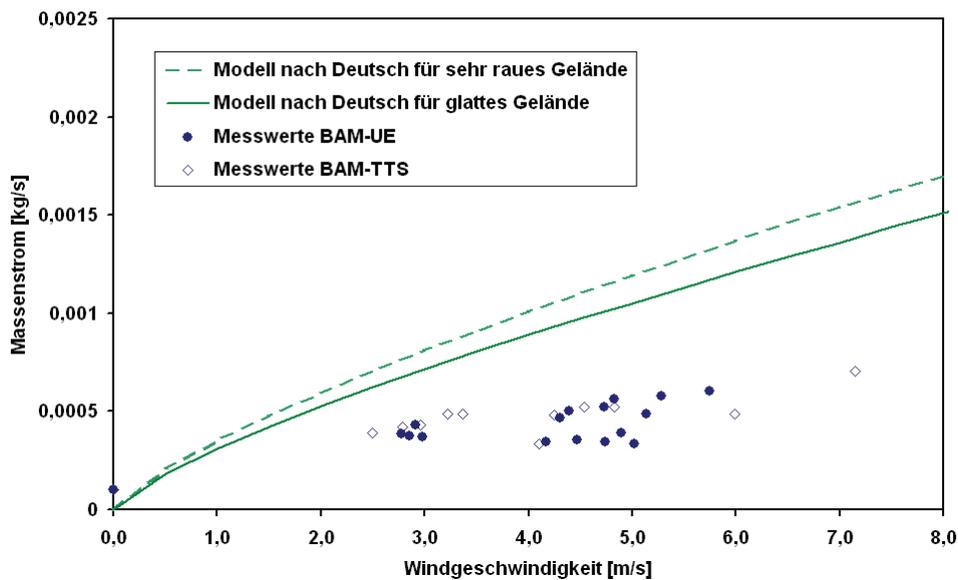


Abbildung 16: Vergleich der Messwerte aus den Freilandversuchen mit dem Modell von Deutsch für glattes und sehr rauhes Gelände für eine Ethanollache bei 30°C und einem Durchmesser von 0,74 m.

In Abbildung 17 und 18 sind die gemessenen Massenströme respektive für eine Ethanol- und eine Cyclohexanlache im Vergleich mit den berechneten Massenstromverläufen aus den empirischen Modellen aufgetragen. In Abbildung 17 sind weiterhin die bei sehr geringen Windgeschwindigkeiten (Windstille) gemessenen Massenströme aufgetragen. Dieser Messwert gibt einen Hinweis auf die untere Grenze des Anwendungsbereiches der empirischen Modelle. Bis auf das Modell von Brötz berechnen alle Modelle einen Massenstrom von 0 kg/s bei Windstille. Aus dem Vergleich der Kurvenverläufe mit dem Messwert bei Windstille ist zu schließen, dass die empirischen Modelle unterhalb von 1 m/s Windgeschwindigkeit keine zuverlässigen Werte mehr liefern. Selbst bei dem Modell von Brötz, welches noch einen Massenstrom liefert, müsste der minimale Stoffübergangskoeffizient β_{min} auf ca. 6 m/h erhöht werden, um den Messwert zu erreichen.

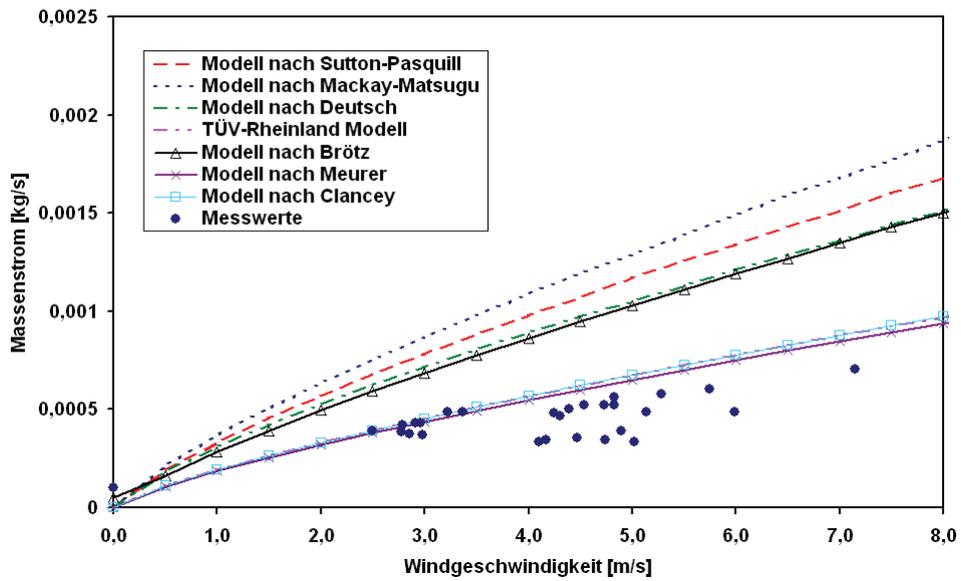


Abbildung 17: Vergleich der Messwerte aus den Freilandversuchen mit den empirischen Modellen für eine Ethanollache bei 30°C und einem Durchmesser von 0,74m.

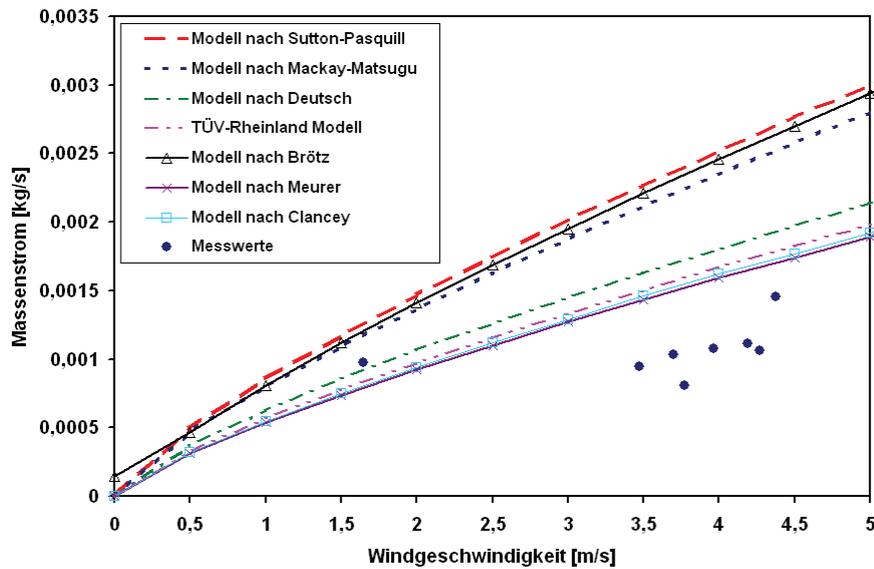


Abbildung 18: Vergleich der Messwerte aus den Freilandversuchen mit den empirischen Modellen für eine Cyclohexanlache bei 30°C und einem Durchmesser von 0,74m.

Die Modelle von Meurer, Clancey und dem TÜV-Rheinland 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-Rheinland, 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. Vor allem aber lässt sich feststellen, dass der Abstand zu den anderen empirischen Modellen, insbesondere dem Modell von Deutsch, nur noch sehr gering ist.

Die Erklärung für diese unterschiedlichen Abweichungen zu den Messergebnissen ist in den Modellgleichungen zu finden. Diese unterscheiden sich hauptsächlich in der Berücksichtigung des Dampfdruckes und der molaren Masse. Die Modelle von Mackay-Matsugu und Deutsch weisen die gleiche Berücksichtigung des Dampfdruckes auf, ohne jedoch die molare Masse mit in die Berechnung einzubeziehen, während die Modelle von Sutton-Pasquill, Meurer, Brötz, Clancey und dem TÜV-Rheinland die molare Masse direkt und den Dampfdruck in einer anderen Formulierung berücksichtigen. Da hier zwei konkurrierende Effekte auftreten, muss jeweils der Einfluss des Dampfdruckes und der molaren Masse separat untersucht werden.

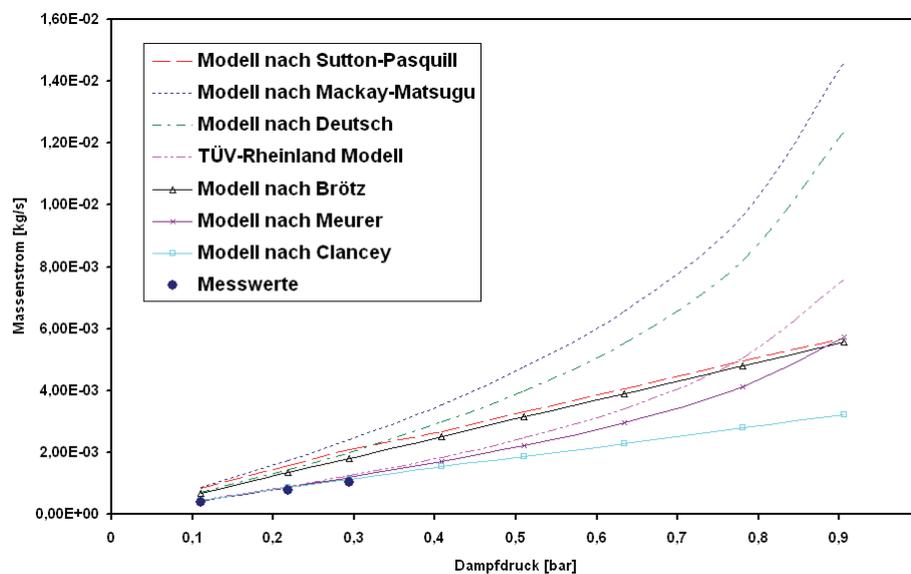


Abbildung 19: Vergleich der Messwerte aus den Freilandversuchen mit den empirischen Modellen für eine Ethanol-lache mit einem Durchmesser von 0,74 m bei unterschiedlichen Dampfdrücken und einer Windgeschwindigkeit von 2,5 m/s.

Um den Einfluss des Dampfdruckes bei gleich bleibender molarer Masse zu untersuchen, wurden in Abbildung 19 die berechneten Massenströme für eine Ethanollache für unterschiedliche Dampfdrücke, also bei unterschiedlichen Lachentemperaturen, in Relation zu den Messwerten aufgetragen. Es ist festzustellen, dass in dem durch die Messwerte abgebildeten Bereich bis 0,3 bar, kein Einfluss des Dampfdruckes auf die Verhältnisse der einzelnen Modelle zueinander feststellbar ist. Auch in dieser Auftragung liefern die Modelle von Meurer, Clancey und dem TÜV-Rheinland die beste Abschätzung der Messwerte.

Für höhere Dampfdrücke jedoch tritt eine Veränderung der Verhältnisse der Modelle zueinander auf. Insgesamt ist festzustellen, dass ab einem Dampfdruck von 0,8 bar alle Modelle mit logarithmischer Berücksichtigung des Dampfdruckes in den Bereich exponentiellen Anstieges kommen, so dass 0,8 bar als obere Grenze des Anwendungsbereichs der Modelle angesetzt werden sollte. Einzig die Modelle von Sutton-Pasquill, Clancey und Brötz liefern durch ihre lineare Berücksichtigung des Dampfdruckes einen proportionalen Anstieg des Massenstromes bis hin zu 1,0 bar. Hierbei scheint das Modell von Clancey mit der geringen Steigung am ehesten dem Trend der Messwerte zu folgen. In Ermangelung von Messwerten im Bereich nahe des Siedepunktes kann für hohe Dampfdrücke keine Aussage zur Qualität der Ergebnisse dieser drei Modelle gemacht werden.

Da im experimentell untersuchten Bereich bis 0,3 bar der Dampfdruck keinen Einfluss auf die Verhältnisse der Ergebnisse der Modelle zueinander hat, muss die unterschiedliche Berücksichtigung der molaren Masse in den empirischen Modellen der Grund für die Änderung der Verhältnisse der Berechnungsergebnisse zueinander sein. In Tabelle 5 ist das Verhältnis von berechnetem zu gemessenem Massenstrom für die empirischen Modelle bei nahezu gleichem Dampfdruck von Ethanol (0,2938 bar bei 50°C, Molare Masse von 46,07 g/mol) und Cyclohexan (0,3007 bar bei 44°C, Molare Masse von 84,16 g/mol) zusammengestellt. Die Modelle von Mackay-Matsugu und Deutsch zeigen eine konstante Abweichung zu den Messwerten, während sich bei den anderen Modellen, welche die molare Masse direkt berücksichtigen, die Abweichungen von den Messwerten mit steigender molarer Masse ansteigen. Somit ist bei der Verwendung dieser anderen Modelle bei Stoffen mit großen molaren Massen mit einer zunehmend konservativen Abschätzung des Massenstromes zu rechnen.

	Ethanol	Cyclohexan
Messwert	$1,02 \cdot 10^{-3}$ [kg/s]	$2,33 \cdot 10^{-3}$ [kg/s]
Modell	Abweichungen vom Messwert in %	
Sutton-Pasquill	190	230
Mackay-Matsugu	225	225
Deutsch	180	180
TÜV-Rheinland	115	165
Brötz	165	235
Meurer	110	155

Tabelle 5: Abweichungen der berechneten Massenströme von den gemessenen für eine Ethanol- und eine Cyclohexanlache bei einem jeweiligen Dampfdruck von 0,3 bar

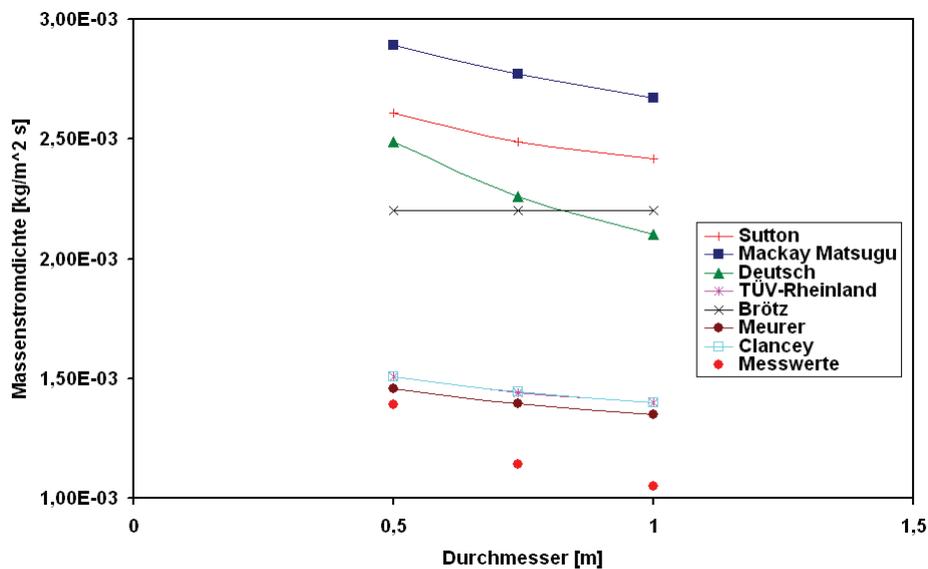


Abbildung 20: Vergleich der gemessenen mit den anhand der empirischen Modelle berechneten Massenstromdichten für verschiedene Lachendurchmesser.

Der experimentell festgestellte Effekt, dass mit wachsender Lachenfläche die Massenstromdichte abnimmt, wird durch die empirischen Modelle wiedergegeben (siehe Abbildung 20 und 21). Die Ausnahme bildet hierbei das Modell von Brötz, das eine lineare Abhängigkeit des Massenstromes von der Lachenfläche besitzt und somit immer eine konstante Massenstromdichte berechnet. Es ist festzustellen, dass nahezu alle Modelle eine Abnahme der Massenstromdichte von ca. 8% zwischen den Lachendurchmessern von 0,5 m und 1,0 m vorhersagen. Lediglich das Modell von Deutsch nähert sich mit einer Abnahme um knapp 16% dem experimentell festgestellten Wert

von ca. 24% an (siehe Abbildung 20).

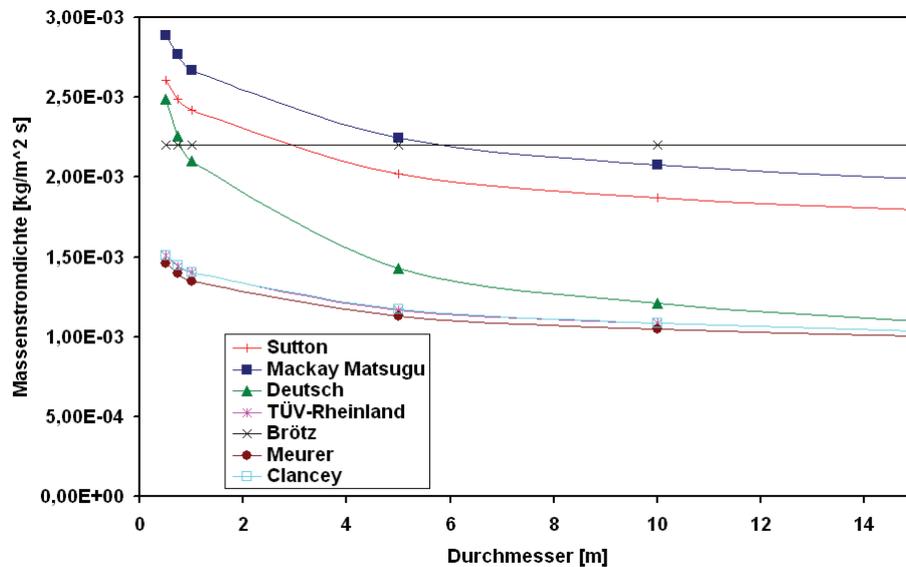


Abbildung 21: Einfluss der Lachengröße auf die mit den empirischen Modellen berechneten Massenstromdichten.

Steigt der Lachendurchmesser weiter an, so sind die Verhältnisse der einzelnen Modelle (bis auf die Modelle von Deutsch und Brötz) nahezu konstant. Das Modell von Deutsch liefert Werte, die mit steigendem Lachendurchmesser wesentlich stärker abfallen, so dass im Bereich des Lachendurchmessers von 15 m annähernd die Werte aus den Modellen von Meurer, vom TÜV-Rheinland und von Clancey erreicht werden. Steigt der Lachendurchmesser noch weiter, liegen die mit dem Modell von Deutsch berechneten Werte unterhalb der Werte der anderen Modelle. Wie in Abbildung 21 zu sehen ist, liegt der mit dem Modell von Brötz berechnete Wert ab einem Lachendurchmesser von ca. 6 Metern deutlich oberhalb der von den anderen Modellen berechneten Werte. Aus diesen Beobachtungen ist zu schließen, dass das Modell von Brötz für reale Lachengrößen mit einigen Metern Durchmesser unrealistisch hohe Werte liefert und dass das Modell von Deutsch am besten geeignet ist, den Einfluss der Lachengröße auf die Massenstromdichte abzubilden.

Nachdem der Einfluss der Lachenfläche auf die Massenstromberechnung untersucht wurde, soll nun der Einfluss der Lachenform betrachtet werden. Nur die Modelle von Sutton-Pasquill und Clancey unterscheiden in ihren Gleichungen zwischen einer runden und einer rechteckigen Lache. Alle anderen betrachteten Modelle berücksichtigen

die Form der Lache nicht. Die überströmte Länge entspricht jeweils dem Durchmesser im Falle einer runden Lache oder der überströmten Länge im Falle einer rechteckigen Lache. Um den Einfluss der Lachenform einschätzen zu können, wurden für alle Modelle zwei Lachen gleicher Fläche berechnet. Für den rechteckigen Fall wurde eine 10 x10 Meter Lache ausgewählt. Korrespondierend dazu ergibt sich eine runde Lache mit einem Durchmesser von 11,28 Metern. Die Ergebnisse dieser Berechnungen sind in Tabelle 6 dargestellt.

Modell	Massenstrom [kg/s]	
	rund	eckig
Brötz	$2,20E - 01$	$2,20E - 01$
Meurer	$1,03E - 01$	$1,03E - 01$
TÜV-Rheinland	$1,07E - 01$	$1,08E - 01$
Mackay Matsugu	$2,05E - 01$	$2,08E - 01$
Deutsch	$1,17E - 01$	$1,21E - 01$
Clancey	$1,07E - 01$	$1,05E - 01$
Sutton-Pasquill	$1,85E - 01$	$1,83E - 01$

Tabelle 6: Massenströme der empirischen Modelle für eine rechteckige und eine runde Ethanollache mit jeweils 100 m^2 Fläche und einer Lachentemperatur von 30°C sowie einer Windgeschwindigkeit von $4,5 \text{ m/s}$

Wie aufgrund der Modellformulierung mit der expliziten Unterscheidung zwischen einer rechteckigen und einer runden Lache zu erwarten, ergeben sich bei den Modellen von Sutton-Pasquill und Clancey Abweichungen zwischen den Massenströmen für beide Lachenformen.

Die Modelle von Mackay-Matsugu, Deutsch und dem TÜV-Rheinland ergeben, im Vergleich mit der runden Lache, höhere Massenströme für die rechteckige Lache, obwohl keine explizite Unterscheidung zwischen den Lachenformen in den Gleichungen vorgesehen ist.

Da die runde Lache mit gleicher Fläche einen größeren Durchmesser aufweist, als die längste Seite der rechteckigen Lache, ist der Unterschied in den Massenströmen auf die Abnahme der Massenstromdichte mit steigender überströmter Länge, wie in Abbildung 21 dargestellt, zurückzuführen.

Dass anhand der Modelle von Brötz und Meurer kein Einfluss der Lachenform nachzuweisen ist, liegt in den Modellgleichungen begründet. Während Brötz ausschließlich die Lachenfläche aber keinerlei Längen in seiner Gleichung berücksichtigt, kann das Modell von Meurer nur rechteckige Lachen berechnen, so dass eine runde Lache durch

eine rechteckige Lache äquivalenter Fläche substituiert werden muss, wodurch etwaige Einflüsse, wie eine unterschiedliche überströmte Länge, nicht zur Geltung kommen.

Interessanterweise liefern die Modelle von Sutton-Pasquill und Clancey zu diesen Beobachtungen genau entgegengesetzte Werte, so dass der Massenstrom einer runden Lache größer ist als der der flächengleichen rechteckigen Lache. Eine Begründung hierfür könnte sein, dass bei einer eckigen Lache die überströmte Länge über die gesamte Breite der Lache gleich ist und somit auch die Massenstromdichte. Bei einer runden Lache ergeben sich quer zur Strömungsrichtung jedoch unterschiedliche überströmte Längen, so dass an den äußersten Rändern der Lache nur kurze Strecken überströmt werden und somit hohe Massenstromdichten an dieser Stelle auftreten, wohingegen auf der Mittelachse der Lache die längste überströmte Strecke und auch die geringste Massenstromdichte vorliegt. Der Mittelwert dieser Massenstromdichten könnte somit größer sein, als die Massenstromdichte einer eckigen Lache, was den höheren Massenstrom der runden Lache erklären würde. Da jedoch keine experimentellen Daten zum Einfluss der Lachenform auf den Verdunstungsmassenstrom vorliegen, kann an dieser Stelle keine abschließende Bewertung durchgeführt werden.

6.1.1 Lachenausbreitung

Um den Einfluss der Lachenausbreitung auf den Massenstrom zu untersuchen, werden die empirischen Modelle mit einem Lachenausbreitungsmodell gekoppelt. Da mehrere Lachenausbreitungsmodelle zur Verfügung stehen, soll zuerst geklärt werden, wie sehr sie sich voneinander unterscheiden. Zu diesem Zweck wurden Berechnungen zur Ausbreitung der Lache ohne Verdunstung durchgeführt (Abbildung 22). Hierbei wurde die Ausbreitung von Ethanol bei 30°C auf einem Betonboden berechnet. Die Freisetzungsrate betrug 1 kg/s für 600 s. Der gesamt berechnete Zeitraum betrug 7200 s.

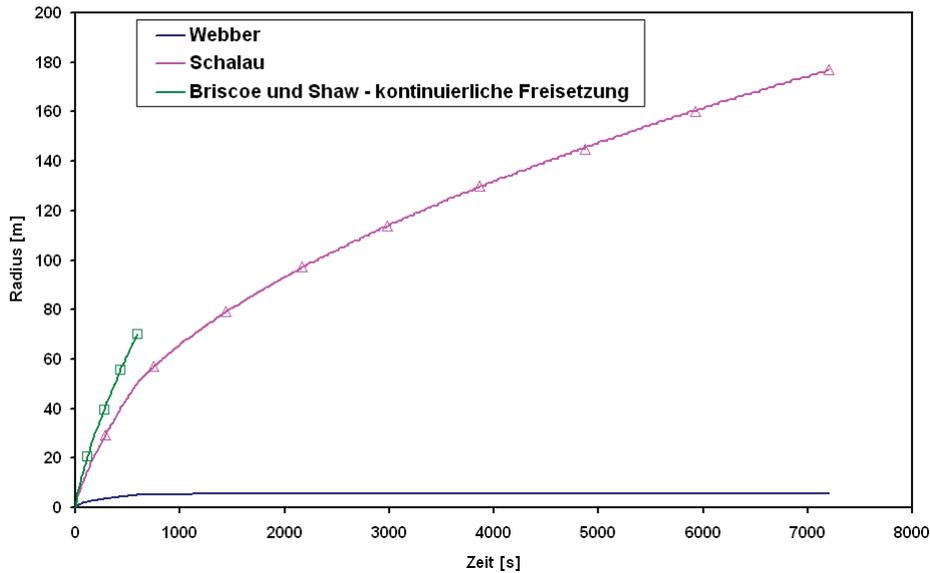


Abbildung 22: Vergleich der zeitabhängigen Lachenradien bei der reinen Ausbreitung einer Ethanollache für die Ansätze von Webber und Briscoe und Shaw sowie Schalau.

Die mit dem Ansatz von Briscoe und Shaw berechneten Radien liegen deutlich über denen von Webber und unterschreiten die von Lebusser zitierten Mindestschichtdicken. Das Modell von Schalau ist hier aufgetragen worden, ohne die in diesem Modell vorgesehene Mindestschichtdickenbegrenzung bei der Berechnung berücksichtigt zu haben. Es zeigt sich, dass auch hier die berechneten Radien deutlich zu groß sind und die Lache sich bei unendlicher Zeit unendlich weit ausdehnen würde. Somit ist die von Schalau vorgesehene Radienbegrenzung aufgrund der Mindestschichtdicke zwingend erforderlich. Für den Ansatz von Briscoe und Shaw wäre eine solche Begrenzung ebenso sinnvoll. Das Modell von Briscoe und Shaw kann jedoch keine Ausbreitung der Lache nach dem Ende der flüssigen Freisetzung berücksichtigen, was auch der Grund für dafür ist, dass die Kurve nach Briscoe und Shaw in Abbildung 22 nach 600 s endet. Dieser Umstand führt dazu, dass im Weiteren nur noch die Modelle von Webber und von Schalau betrachtet werden. Letzteres, so wie vom Autor vorgesehen, immer mit der Begrenzung des Radius über die Mindestschichtdicke gemäß folgender Formel:

$$r_{max} = \sqrt{\frac{V}{\pi \cdot h_{min}}} \quad (103)$$

In Abbildung 23 sind die Radien aus der instationären Berechnung einer Ausbreitung einer Ethanollache mit gleichzeitiger Verdunstung, für die Ansätze von Webber und von

Schalau aufgetragen, sowie der Radius aus der stationären Berechnung, also ohne Ausbreitung. Im stationären Fall errechnet sich der Lachenradius über das freigesetzte Volumen und die Annahme der Mindestschichtdicke für Beton. Dieser Radius stellt den maximalen Radius bei Annahme einer Mindestschichtdicke dar. Da keinerlei Ausbreitungsmodell berücksichtigt wird, schrumpft die Lache während der Verdunstung nicht in der Fläche sondern nur in der Dicke, bis die gesamte vorhandene Masse verdunstet ist. Dies widerspricht zwar der eingangs erwähnten Annahme einer Mindestschichtdicke, spiegelt aber genau den Fall wieder der vorliegt, wenn ausschließlich mit einem der empirischen Modelle ohne weiteres Lachenausbreitungsmodell gerechnet wird. Somit ist auch zu erklären, dass die Kurve für den Fall ohne Ausbreitung abrupt bei 2335 s abbricht, da zu diesem Zeitpunkt die gesamte Masse verdunstet war.

Das Modell von Schalau liefert für diesen Fall so große Radien, dass schon nach der ersten Sekunde das Mindestschichtdickenkriterium greift und das im Diagramm dargestellte Anwachsen eigentlich nicht auf die Verwendung eines Ausbreitungsmodells zurückzuführen ist, sondern lediglich auf die Berechnung des maximal möglichen Radius gemäß Formel (103). Wäre ein deutlich höherer Flüssigkeitsmassenstrom in die Lache gewählt worden, würde das Schichtdickenkriterium erst viel später greifen, so dass eine Ausbreitung gemäß der Gleichungen von Schalau möglich ist. Dass an dieser Stelle nicht der maximale Radius wie für den Fall der stationären Betrachtung erreicht wird, liegt darin begründet, dass während der Ausbreitung schon Stoff verdunstet ist, so dass der zum Zeitpunkt Null theoretisch erreichbare maximale Radius mit der verbleibenden Stoffmenge nicht mehr erreicht werden kann.

Das Modell von Webber liefert an dieser Stelle die plausibelsten Ergebnisse. Während das Modell von Schalau einen erst ansteigenden und dann sofort wieder abfallenden Radius vorhersagt, liefert das Modell von Webber einen „Gleichgewichtsradius“, der daraus resultiert, dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Lache eine Zeit lang genau so groß ist, wie das durch die Verdunstung hervorgerufene Schrumpfen. Aus diesen Beobachtungen ist zu schließen, dass das Modell von Webber der geeignetere Ansatz zur Beschreibung der Lachenausbreitung ist.

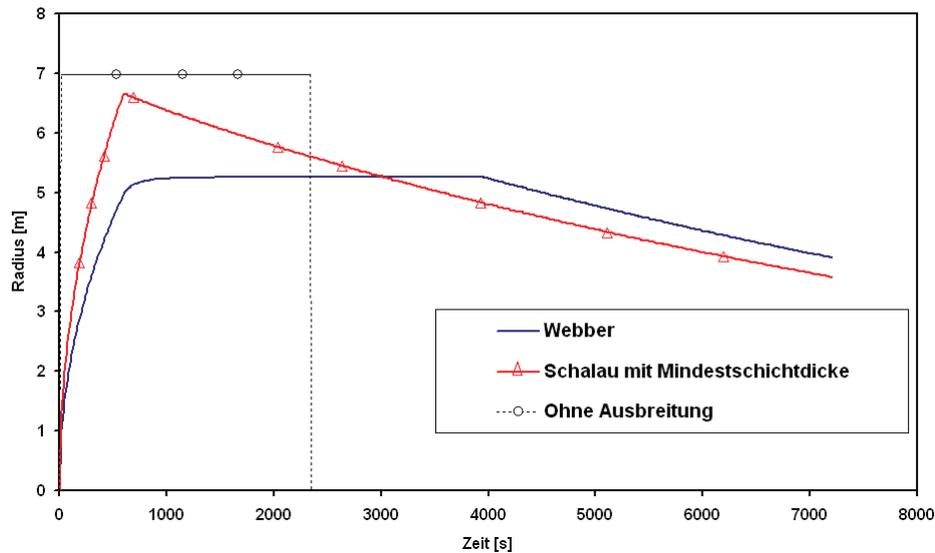


Abbildung 23: Vergleich der zeitabhängigen Lachenradien bei der Ausbreitung einer Ethanollache mit gleichzeitiger Verdunstung für die Ansätze von Webber und Schalau.

Da keine Messwerte zur Ausbreitung von Lachen vorliegen, kann keine konkrete Aussage zur Genauigkeit des Verfahrens von Webber gemacht werden. Um dennoch abschätzen zu können, inwiefern das Verfahren plausible Werte ergibt, wird ein Ausbreitungsversuch der HSE herangezogen [62]. Bei diesem Versuch wurde Wasser mit einem Massenstrom von ca. 225 kg/s für 5 Sekunden in einem viertel-kreisförmigen Auffangbecken mit 20 m Durchmesser freigesetzt. Hierbei erreichte die Flüssigkeit nach 5 Sekunden einen Radius von 10 m, also die Wand des Auffangbeckens. Berechnungen mit dem Modell von Webber ergeben für dieses Szenario einen Radius von 6,5 m nach 5 s. Ergänzend ist zu erwähnen, dass der Versuchsaufbau der HSE ein Freisetzen des Wassers aus einem zylindrischen Behälter mit einem Durchmesser von 3,4 m vorsah. Dieser Behälter war so platziert, dass sein Mittelpunkt mit dem des Auffangbeckens übereinstimmte. Das Wasser wurde somit erst bei einem Radius von 1,7 m freigesetzt, so dass lediglich 8,3 m in 5 s zurückgelegt werden mussten. Des Weiteren war die Flüssigkeit bei ihrem Freisetzen aus dem Behälter mit einem zusätzlichen Impuls versehen, der die Ausbreitung sicherlich beschleunigt hat. Dementsprechend können die Ergebnisse nach Webber als realistisch eingestuft werden.

Basierend auf den in Abbildung 23 dargestellten Lachenradien, soll nun die zeitliche Entwicklung der Massenströme betrachtet werden. In Abbildung 24 sind die zeitlichen

Verläufe der Massenströme für die stationäre Berechnung mit dem Verdunstungsmodell nach Mackay-Matsugu, sowie der beiden instationären Berechnungen mit dem selben Verdunstungsmodell - diesmal jedoch gekoppelt mit den Modellen von Webber und von Schalau - aufgetragen.

Die stationäre Betrachtung ergibt erwartungsgemäß den höchsten Massenstrom, jedoch ist nach 2335 s die gesamte Masse verdunstet, so dass ab diesem Zeitpunkt im Gegensatz zu den instationären Berechnungen, keine Gefährdung durch eine Flüssigkeitslache mehr vorliegt.

Während Webber in der Anfangsphase, aufgrund der kleiner berechneten Radien, deutlich niedrigere Massenströme liefert als das Modell von Schalau, oder das stationäre Modell, kehrt sich dieses Verhältnis nach einer gewissen Zeit um. Aufgrund der wesentlich höheren anfänglichen Massenströme (resultierend aus den größeren Lachenradien), schrumpft die Lache beim Modell von Schalau wesentlich schneller als beim Modell von Webber. Daraus folgt, dass für kurze Zeitspannen dieses Modell wesentlich höhere Massenströme ergibt als das Modell von Webber. Dies wiederum führt zu deutlich höheren Anfangskonzentrationen für eine Gasausbreitungsrechnung und damit zu größeren Sicherheitsabständen wie UZD oder Toxizitätsgrenzen. Diese Beobachtungen gelten ebenso für die stationäre Berechnung, die aufgrund des höheren Massenstromes noch wesentlich größere Sicherheitsabstände ergibt. Aufgrund des schnellen Schrumpfens der Lache bei Anwendung des Modells von Schalau und dem vollständigen Verdunsten der Lache im stationären Fall, nimmt der Massenstrom und die daraus resultierende Gefährdung jedoch deutlich schneller ab, als dies z.B. beim Modell von Webber der Fall ist.

Insgesamt ist jedoch festzuhalten, dass für die betrachtete Zeitspanne von zwei Stunden die gesamte verdunstete Masse bei dem Modell von Webber um 10 % niedriger ausfällt als bei dem Modell von Schalau, so dass das Gefahrenpotenzial insgesamt auch niedriger eingeschätzt wird.

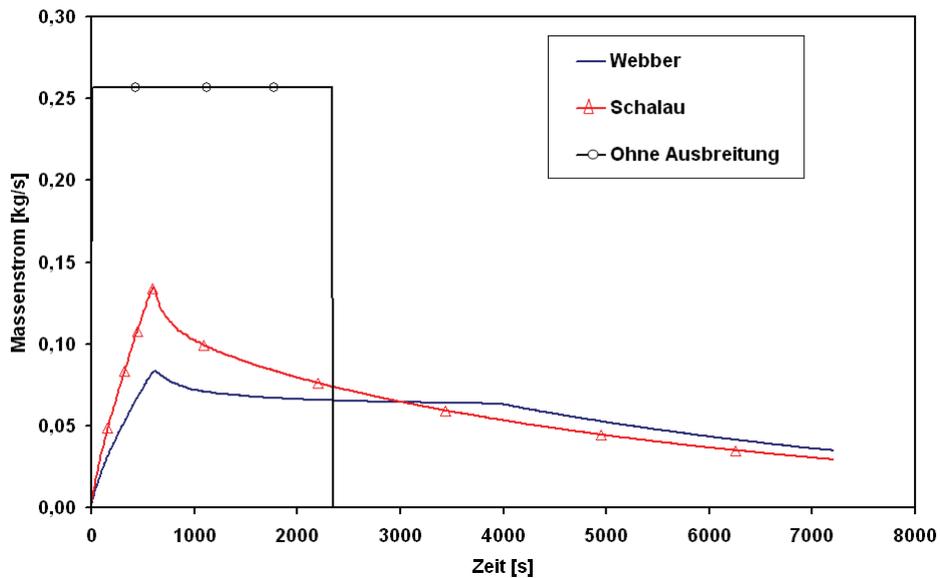


Abbildung 24: Vergleich der zeitabhängigen Verdunstungsmassenströme bei der Ausbreitung einer Ethanollache für die Ansätze von Webber und Schalau mit Berücksichtigung der Mindestschichtdicke.

6.1.2 Zusammenfassende Beurteilung der empirischen Modelle

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass die durchgeführten Untersuchungen gezeigt haben, dass das Modell von Mackay-Matsugu und das Modell von Deutsch, stoffunabhängig, eine gleich bleibende Qualität der Vorhersage liefern. Des Weiteren ist das Modell von Deutsch am Besten dafür geeignet, den Einfluss der Lachengröße auf die Massenstromdichte und somit den Massenstrom abzubilden, so dass dieses als das zuverlässigste Modell zu empfehlen ist, auch wenn z.B. die Modelle von Clancy, Meurer oder dem TÜV-Rheinland stellenweise eine bessere Approximation der Messwerte liefern können.

Für die empirischen Modelle wurden Anwendungsgrenzen anhand des Vergleichs mit den Daten aus den Freilandversuchen bestimmt und als untere Grenze eine Windgeschwindigkeit von 1 m/s festgelegt, da in diesem Bereich die Messwerte unterschätzt werden. Des Weiteren sind ab einem Dampfdruck von 0,8 bar die Ergebnisse dieser Modelle nicht mehr als realistisch anzusehen, so dass von Berechnungen oberhalb dieses Wertes abzuraten ist.

Die Verwendung eines Lachenausbreitungsmodells in Verbindung mit den empirischen Modellen führt zu einer signifikant niedrigeren Abschätzung des Massenstromes. Hierbei sollte auf das Modell von Webber zurückgegriffen werden, da dieses die plausibleren Werte liefert und im Gegensatz zu dem Modell von Briscoe und Shaw oder auch dem Modell von Schalau deutlich geringere Massenströme ergibt. Ein Verzicht auf die Berücksichtigung der Lachenausbreitung bei der Berechnung ist, in sicherheitstechnischem Sinne, zwar unbedenklich, da dies zu einer noch konservativeren Abschätzung führt, jedoch ist fraglich, inwiefern die daraus resultierende Überschätzung noch zu verwertbaren Ergebnissen führt.

Betrachtet man die Abweichungen der berechneten Massenströme der einzelnen empirischen Modelle voneinander, so ist festzustellen, dass die Unterschiede zwischen den berechneten Massenströmen ca. 15% betragen, auch wenn in Einzelfällen die Abweichungen deutlich größer (bis zu 50%) ausfallen können. Setzt man hierzu die 10 % Abweichung im Massenstrom zwischen den beiden Lachenausbreitungsmodellen ins Verhältnis, so ist festzustellen, dass die Wahl des Verdunstungs- und des Lachenausbreitungsmodells einen vergleichbaren Einfluss auf das Ergebnis haben.

Die Genauigkeit der Berechnung der Zielgrößen, wie der Verdunstungsmassenstrom, die UZD oder die explosionsfähige Masse, hängt somit von der gewählten Kombination der empirischen Modelle zur Verdunstungsmassenstrom-, Lachenausbreitungs- und Gasausbreitungsberechnung ab.

6.2 Grenzschichtverfahren

6.2.1 Laminare, stationäre Strömung

Splettstößer [28] führte im Windkanal Versuche zur Verdunstung von Benzol in einer stationären laminaren Strömung durch. Hierbei wurde die Kühlgrenztemperatur der Flüssigkeit bestimmt, die sich im stationären Zustand einstellt, wenn eine sich abkühlende Flüssigkeit und die Umgebung im Gleichgewicht sind. Der Vergleich seiner Messwerte der Kühlgrenztemperatur für Strömungsgeschwindigkeiten von 10 m/s (Abbildung 25) und 20 m/s (Abbildung 26) und der mit dem hier vorgestellten Grenzschichtverfahren berechneten Werte ergibt eine sehr gute Übereinstimmung.

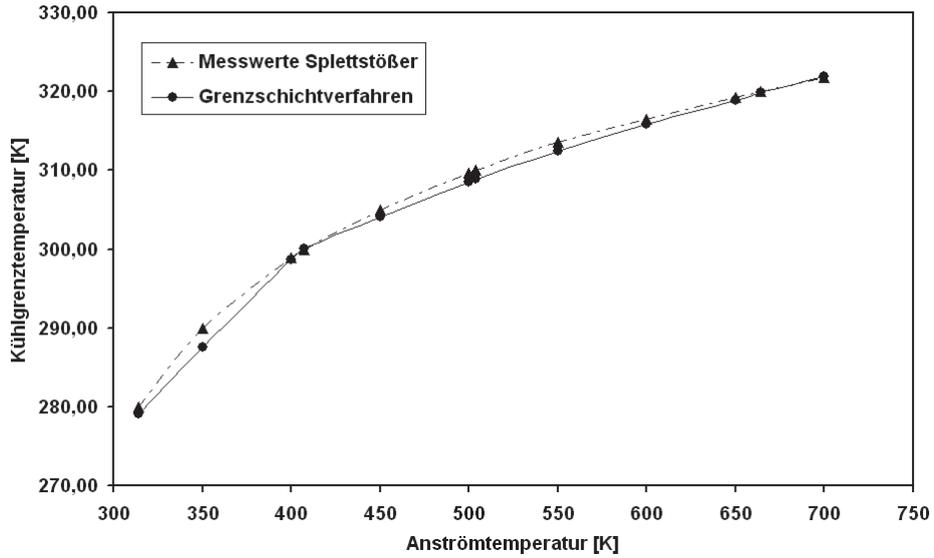


Abbildung 25: Vergleich der von Splettstößer gemessenen und der mit dem Grenzschichtverfahren berechneten Kühlgrenztemperaturen für Benzol in laminarer Strömung bei einer Windgeschwindigkeit von 10 m/s.

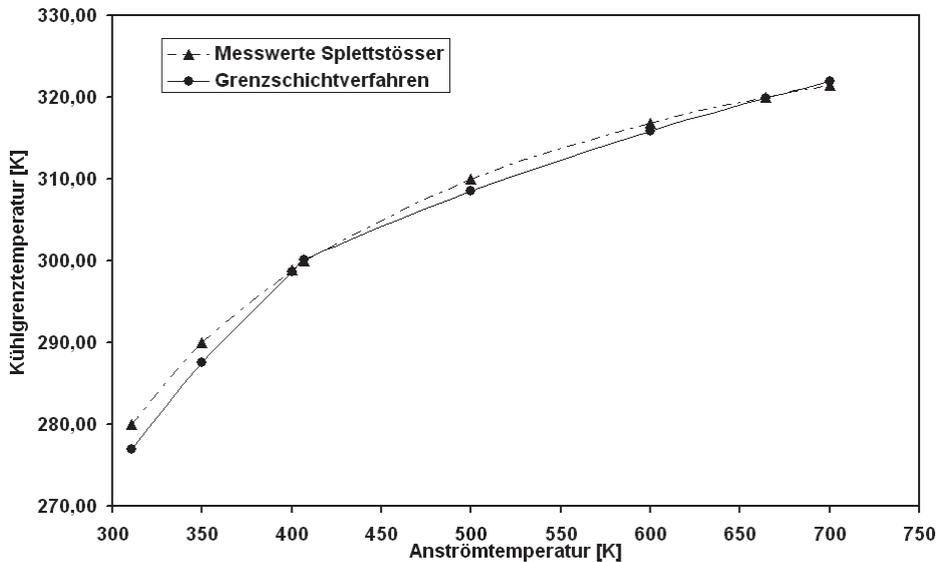


Abbildung 26: Vergleich der von Splettstößer gemessenen und der mit dem Grenzschichtverfahren berechneten Kühlgrenztemperaturen für Benzol in laminarer Strömung bei einer Windgeschwindigkeit von 20 m/s.

Der Vergleich der von Splettstößer gemessenen und der mit dem Grenzschichtverfahren berechneten Massenströme für eine Benzollache in laminarer Strömung ergibt eine

ähnlich gute Übereinstimmung (siehe Tabelle 7). Somit kann das stationäre, laminare Grenzschichtverfahren als validiert angesehen werden.

Anströmtemperatur [K]	Massenstromdichte nach Splettstößer $\dot{m} \cdot \sqrt{Re}$ [kg/m ² s]	Massenstromdichte nach Grenzschichtverfahren $\dot{m} \cdot \sqrt{Re}$ [kg/m ² s]
373	1,83	1,9
473	2,78	2,8
573	3,25	3,3

Tabelle 7: Vergleich der von Splettstößer ermittelten und der mit dem Grenzschichtverfahren berechneten Massenströme

6.2.2 Turbulente, stationäre Strömung

Für die Berechnung der Verdunstungsmassenströme in turbulenter Strömung wurden zwei Turbulenzmodelle verwendet. Durch den Vergleich der berechneten Werte mit den gemessenen Werten aus den Freilandversuchen, lässt sich der Einfluss der Turbulenzmodellierung auf die Massenstromberechnung bewerten. In Abbildung 27 sind die berechneten und gemessenen Werte für eine 0,74 m Ethanollache bei 30°C aufgetragen. Das Modell von Cebeci-Chang (im Folgenden CC-Modell genannt) wurde für drei unterschiedliche Gelände und somit Bodenrauigkeiten angewandt. Hierbei wurde ein glattes Gelände mit einem Exponenten α von 0,15, ein mäßig rauhes Gelände mit einem Exponenten von 0,22 und ein rauhes Gelände mit einem Exponenten von 0,33 berechnet. Während für das glatte Gelände bei niedrigen Windgeschwindigkeiten (unterhalb von 5 m/s) noch übereinstimmende Werte mit dem Modell von Cebeci-Smith (im Folgenden CS-Modell genannt) erzielt werden, liegen die Ergebnisse nach Cebeci-Chang bei höheren Geschwindigkeiten schon deutlich über denen nach Cebeci-Smith. Für das mäßig rauhe und das rauhe Gelände sind die berechneten Massenströme in allen Geschwindigkeitsbereichen deutlich über denen nach Cebeci-Smith, außer bei Windgeschwindigkeiten um die 1 m/s und weniger. Insbesondere die stärkere Steigung der Kurven für das CC-Modell bei höheren Windgeschwindigkeiten sorgt für eine immer größer werdende Abweichung von den Berechnungsergebnissen des CS-Modells und von den experimentellen Daten.

Der deutliche Anstieg des Massenstromes mit der Windgeschwindigkeit beim CC-Modell ist darauf zurückzuführen, dass bei höheren Windgeschwindigkeiten die Bodenrauigkeit zu einem viel stärkeren Anstieg der Turbulenz und somit des Massen-

stromes führt. Andererseits zeigt sich bei diesen Berechnungen, dass der Einfluss der Bodenrauigkeit bei niedrigeren Windgeschwindigkeiten so weit absinkt, dass er im Vergleich zu den Modellen ohne Bodenrauigkeit vernachlässigbar wird.

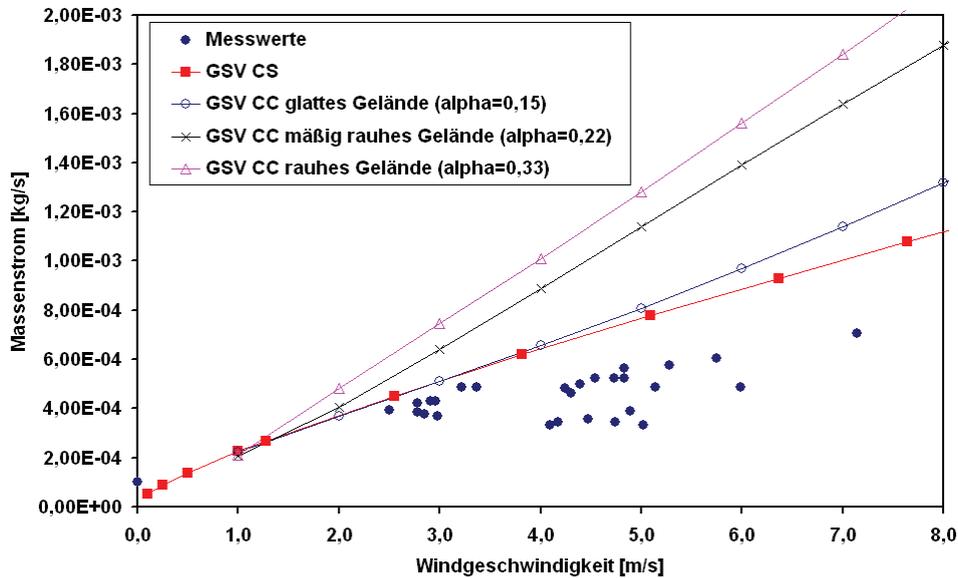


Abbildung 27: Vergleich der experimentellen Daten aus den Freilandversuchen für eine Ethanollache bei 30°C mit den Berechnungsergebnissen aus dem Grenzschichtverfahren mit den Turbulenzmodellen nach Cebeci-Smith und Cebeci-Chang.

In Abbildung 28 ist die Verteilung der dimensionslosen turbulenten Viskosität über die Höhe der Grenzschicht für das CS-Modell und das CC-Modell für sehr rauhes Gelände aufgetragen. Es ist deutlich zu erkennen, dass Berechnungen mit dem CC-Modell eine höhere Turbulenz ergeben als mit dem CS-Modell. Diese erhöhte Turbulenz führt einerseits zu steigenden Geschwindigkeitsgradienten an der Wand, die wiederum zu steigenden Wandgradienten der Konzentration führen.

In dieser Abbildung nicht zu erkennen ist jedoch, dass das CC-Modell im Gegensatz zum CS-Modell an der Wand einen Wert für die Turbulenz errechnet, der nicht Null ist. Da an der Wand die Turbulenz aus der Mischungsweglänge nach Prandtl berechnet wird, ist der Unterschied zwischen den beiden Modellen auf die unterschiedliche Formulierung derselben zurückzuführen. Für beide Modelle gilt an der Wand:

$$\nu_{t,Wand}^+ = \ell^2 \cdot \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right| \quad (104)$$

Der Unterschied liegt in der Formulierung der Mischungsweglänge ℓ .

Für die Mischungsweglänge im CS-Modell:

$$\ell = 0,4 \cdot y \cdot [1 - \exp(-y/A)] \quad (105)$$

ergibt ich an der Wand, also bei $y = 0$, ein Wert von Null und dem entsprechend auch für die Turbulenz.

Im CC-Modell wird die Mischungsweglänge neu formuliert,, um die Bodenrauigkeit zu berücksichtigen:

$$\ell = 0,4 \cdot (y + \Delta y) \cdot [1 - \exp(-(y + \Delta y) / A)] \quad (106)$$

Der Term Δy stellt hierbei die Koordinatenverschiebung aufgrund der Bodenrauigkeit dar. Somit ergibt sich an der Wand zwar ein $y = 0$, jedoch ist ℓ aufgrund des Δy nicht gleich Null.

Betrachtet man wiederum den Massenstrom:

$$\dot{m} = \left(\rho_{Wand} v_{Wand} - \frac{\mu_{Wand}}{Sc_{Wand}} \left(1 + \nu_{t,Wand}^+ \frac{Sc_{Wand}}{Sc_t} \right) \frac{\partial c_1}{\partial y} \right) \cdot A_{Lache} \quad (107)$$

so wird deutlich, dass dieser direkt von der Turbulenz an der Wand abhängt. Die festgestellte Erhöhung des Wandgradienten der Konzentration und das Auftreten einer Wandturbulenz führen dazu, dass beim CC-Modell höhere Massenströme als beim CS-Modell ermittelt werden.

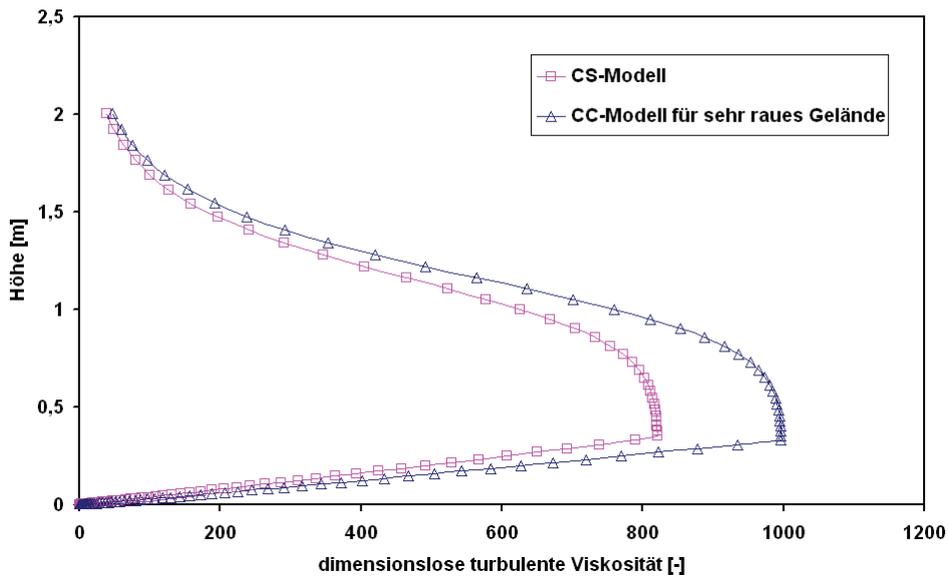


Abbildung 28: Vergleich der dimensionslosen turbulenten Viskosität aus dem CS-Modell mit den Werten aus dem CC-Modell für sehr raues Gelände bei gleicher Windgeschwindigkeit.

Der Vergleich der berechneten Massenströme mit den Messergebnissen für eine Cyclohexanlache (siehe Abbildung 29) ergibt ein ähnliches Bild, wie für die Ethanollache. Während das CS-Modell noch eine gute Approximation der Messwerte liefert, liegen die mit dem CC-Modell berechneten Werte deutlich höher. Eine Abhängigkeit der beiden Turbulenzmodelle von den Stoffeigenschaften kann somit ausgeschlossen werden. Des Weiteren ist die Steigung der Kurve für das CS-Modell deutlich flacher und folgt somit besser dem zu erwartenden Verlauf der Messwerte bei steigender Geschwindigkeit.

Da die Berücksichtigung der Bodenrauigkeit im Turbulenzmodell von Cebeci-Chang zu keiner zufrieden stellenden Übereinstimmung mit den experimentellen Daten führt und das CS-Modell eine deutlich besser Approximation liefert, wird im Folgenden das CC-Modell nicht mehr betrachtet und alle weiteren Untersuchungen nur noch mit dem Modell nach Cebeci-Smith durchgeführt.

Aufgrund der Beobachtungen aus Abbildung 27 und 29 wird als untere Grenze des Anwendungsbereichs des Grenzschichtverfahrens eine Windgeschwindigkeit von 1 m/s angenommen. In beiden Abbildungen, aber insbesondere in Abbildung 27 mit dem Messwert bei Windstille, ist zu vermuten, dass bei geringeren Windgeschwindigkeiten

die berechneten Massenströme unterhalb der zu erwartenden experimentellen Werte liegen würden.

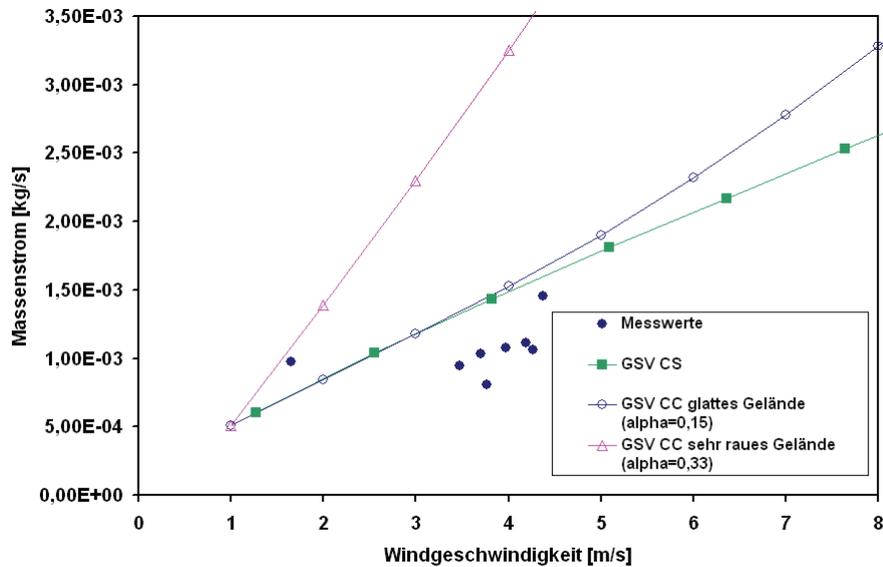


Abbildung 29: Vergleich der experimentellen Daten aus den Freilandversuchen für eine Cyclohexanlache bei 30°C mit den Berechnungsergebnissen aus dem Grenzschichtverfahren mit den Turbulenzmodellen nach Cebeci-Smith und Cebeci-Chang.

Um das Verhalten des Turbulenzmodells bei hohen Dampfdrücken zu untersuchen, wurden für eine Ethanollache mehrere Berechnungen mit steigender Lachentemperatur und somit steigendem Dampfdruck durchgeführt (siehe Abbildung 30). Zum Vergleich sind in dem Diagramm auch die Messwerte für unterschiedliche Temperaturen eingetragen. Eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messwerten ist festzustellen.

Laut Schlichting [30] wird der Anwendungsbereich der Grenzschichtgleichungen auch durch die vertikale Geschwindigkeitskomponente v begrenzt. Diese muss klein gegenüber der horizontalen Komponente sein. Damit die Grenzschichtgleichungen erfüllt werden können, muss die vertikal zur Phasengrenzfläche gerichtete Geschwindigkeit v von der Größenordnung $O(1/\sqrt{Re})$ sein. Ist v deutlich größer, müssen Gleichungen höherer Ordnung als die Grenzschichtgleichungen gelöst werden, um das Phänomen des massiven Ausblasens noch erfassen zu können. Hierfür würde sich die Lösung der parabolisierten Navier-Stokes Gleichungen anbieten.

Da die Geschwindigkeit v direkt mit dem Massenstrom, bzw. der Massenstromdichte zusammenhängt:

$$-(\rho v)_{Wand} = \tilde{m} \quad (108)$$

wird sich die vertikale Geschwindigkeit mit steigendem Dampfdruck immer weiter erhöhen. Geht man von der kritischen Reynoldszahl für das Vorliegen einer turbulenten Grenzschichtströmung von $5 \cdot 10^5$ aus, so ergibt sich für v eine Größenordnung von 10^{-3} . Dies ist bis zu einem Dampfdruck von 0,8 bar noch gegeben, während bei höheren Dampfdrücken die Größenordnung der resultierenden Werte für v eine Zehnerpotenz darüber liegt. Dies stimmt mit Abbildung 30 überein, da auch hier aufgrund des exponentiellen Anstiegs des Massenstromes bei hohen Dampfdrücken eine Obergrenze von 0,8 bar sinnvoll erscheint.

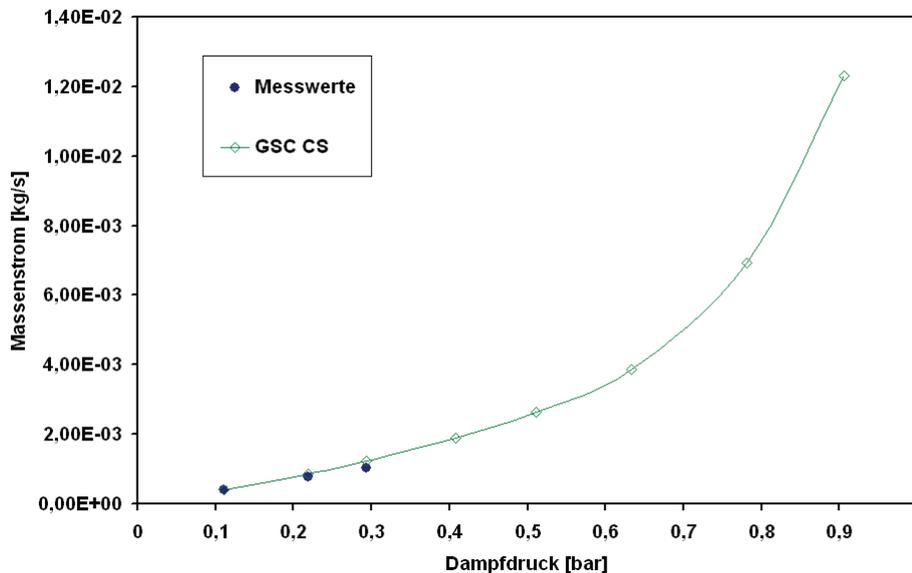


Abbildung 30: Vergleich der experimentellen Werte mit den berechneten Werten des Cebeci-Smith Turbulenzmodells für eine 0,74 m Ethanollache bei unterschiedlichen Dampfdrücken und einer Windgeschwindigkeit von 2,5 m/s.

Zu den Beobachtungen bei hohen Dampfdrücken soll anhand von Abbildung 31 geklärt werden, inwiefern an dieser Stelle das Gas möglicherweise schon Schwergascharakter hat und somit die hierfür vorgesehen Erweiterung der Turbulenzmodelle anhand des Dichteterms $\sqrt{\frac{\rho_e}{\rho}}$ nach Thiele sinnvoll ist.

Die berechneten Massenströme wurden für eine Cyclohexanlache mit 10 m Durchmes-

ser bei einer Windgeschwindigkeit von 3 m/s ermittelt. Es ist deutlich zu erkennen, dass bei niedrigen Dampfdrücken (unterhalb von 0,5 bar) der Einfluss des Dichteterms sehr gering ist (kleiner als 5 %), so dass in diesem Bereich davon ausgegangen werden kann, dass die Gaswolke, trotz der hohen Dichte von Cyclohexan kein Schwergasverhalten zeigt. Bei höheren Dampfdrücken betragen die Abweichungen zwischen den Ergebnissen mit und ohne Dichteterm 10%. Es ist somit davon auszugehen, dass die hohe Dichte des Gases Einfluss auf die Turbulenz und somit auf den Verdunstungsmassenstrom nimmt. Der Einfluss des Dichteterms ist insofern von Bedeutung, da die Reduktion des Massenstromes durch die dämpfende Wirkung des Schwergases auf die Turbulenz, besonders in dem Bereich des exponentiellen Anstiegs zum tragen kommt, wodurch letzterer zum Teil kompensiert wird.

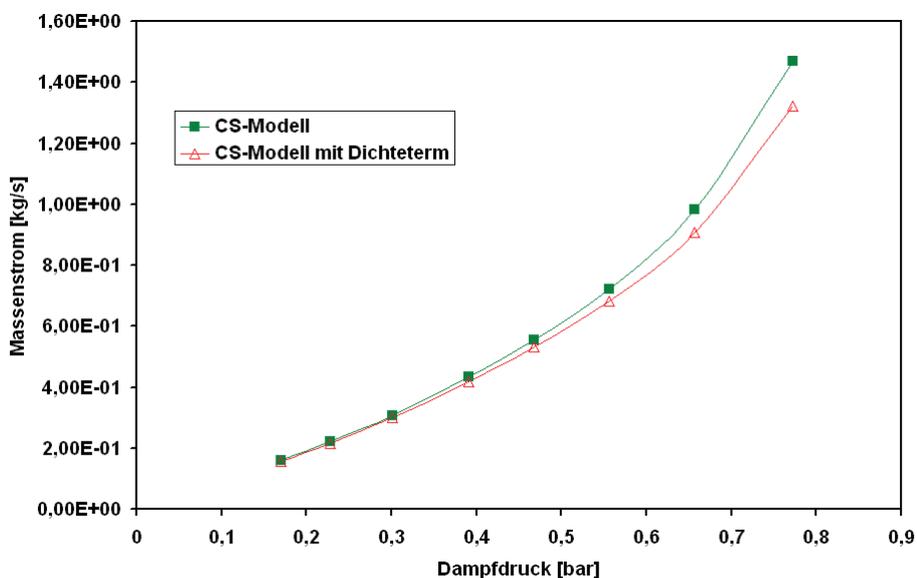


Abbildung 31: Vergleich der berechneten Massenströme anhand des CS-Modells mit und ohne Dichteterm.

Betrachtet man die, anhand des CS-Modells mit und ohne Dichteterm, berechneten Konzentrations- und Dichteprofile am hinteren Rand der Lache (wie in Abbildung 32 dargestellt), so ist festzustellen, dass kaum Unterschiede in den Profilen zu erkennen sind. Eine Beeinflussung der Berechnungsergebnisse durch die Erweiterung anhand des Dichteterms ist somit kaum nachzuweisen. Des Weiteren ist festzustellen, dass eine ausreichend hohe Konzentration von über 10 Vol.% und eine deutlich höhere Dichte als die von Luft nur in einem Bereich von ca. 10 cm über dem Boden vorliegen. Die Annahme einer Schwergaswolke erscheint somit zwar nicht gerechtfertigt, die Anwendung des Dichteterms bei der Turbulenzberechnung ist dennoch sinnvoll, da zumindest

in Wandnähe eine Beeinflussung der Turbulenz durch die höhere Dichte wahrscheinlich ist.

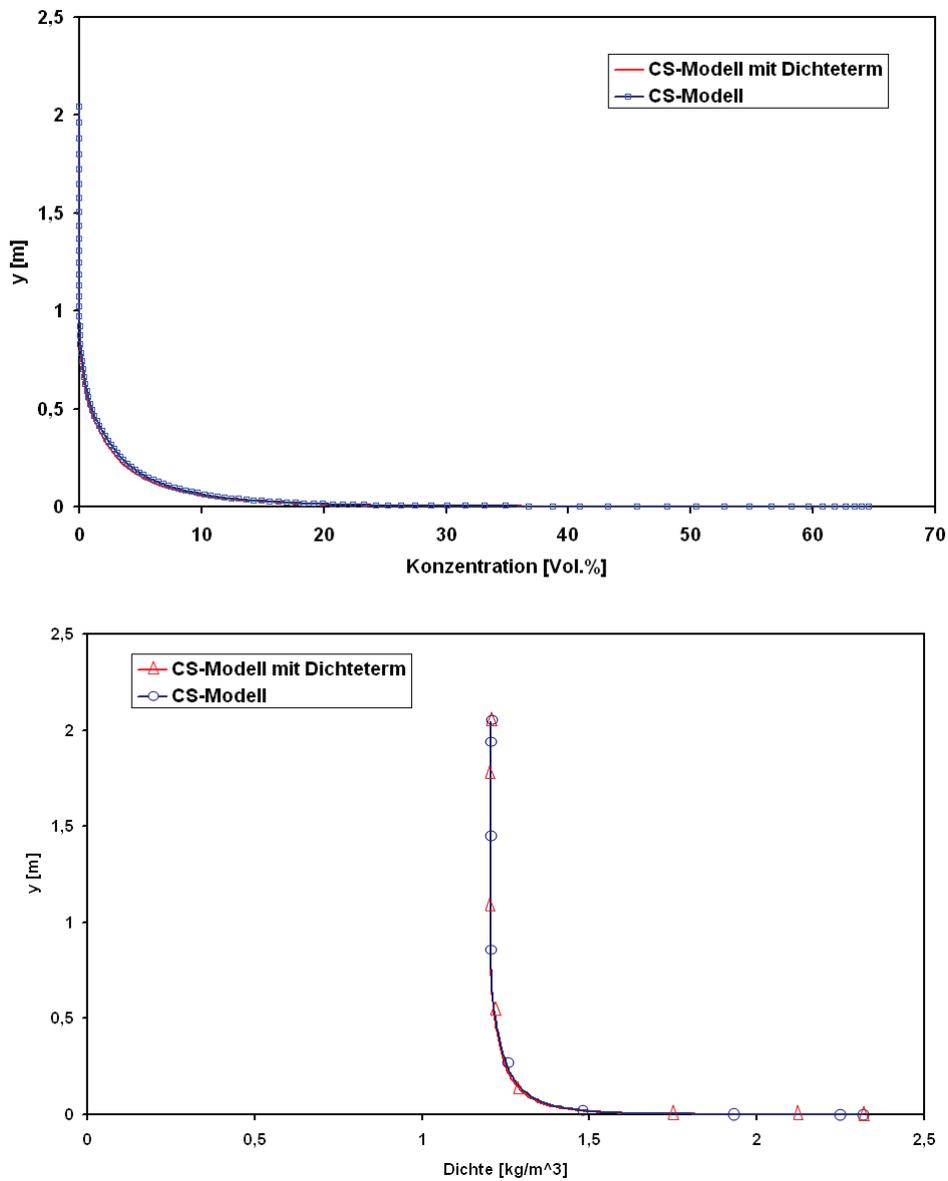


Abbildung 32: Vergleich der berechneten Konzentrations- und Dichteprofile anhand des CS-Modells mit und ohne Dichteterm für eine Cyclohexanlache mit 10 m Durchmesser und einem Dampfdruck von 0,65 bar.

Zur abschliessenden Untersuchung des Dichteterms sollte der Einfluss der Potenz, mit der dieser berücksichtigt wird, geprüft werden. Untersucht wurde eine 10 x 10 m Ethanolache bei 30°C und einer Windgeschwindigkeit von 3 m/s. In Tabelle 8 sind die berechneten Massenströme mit Dichtetermen mit unterschiedlichen Exponenten auf-

getragen. Im Vergleich zu der bisher berücksichtigten Potenz von 0,5 gemäß dem Vorschlag von Thiele, sind keine maßgeblichen Unterschiede zu den anderen Exponenten feststellbar. Der Exponent von 0 entspricht dem Turbulenzmodell ohne Dichteterm. Vergleicht man die Exponenten die von Thiele (0,5) und Heudorfer (1) vorgeschlagen wurden, ergibt sich eine Abweichung von gerade mal 1 %. Selbst die Verwendung eines quadratischen Dichteterms anstelle der Quadratwurzel ergibt eine Abweichung von unter 4 %.

Auf die grafische Darstellung der Konzentrations- oder Dichteprofile im Nachlauf der Lache für diese Potenzen wird an dieser Stelle verzichtet, da keinerlei sichtbare Unterschiede zwischen den einzelnen Profilen existieren und die Verläufe denen in Abbildung 32 entsprechen. Somit kann geschlossen werden, dass die Potenz des Dichteterms im Grenzschichtverfahren eine untergeordnete Rolle spielt. Der Dichteterm wird jedoch beibehalten, da bei hohen Dampfdrücken ein Einfluss existiert (siehe Abbildung 31). Da Thiele schon Untersuchungen zur Potenz des Dichteterms durchgeführt hat und diese somit validiert wurde, wird die von ihm vorgeschlagene Potenz von 0,5 in allen Berechnungen verwendet.

Exponent des Dichteterms [-]	Verdunstungsmassenstrom [kg/s]
0	$1,2351 \cdot 10^{-2}$
0,10	$1,2315 \cdot 10^{-2}$
0,25	$1,2261 \cdot 10^{-2}$
0,50	$1,2176 \cdot 10^{-2}$
1,00	$1,2013 \cdot 10^{-2}$
2,00	$1,1694 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 8: Verdunstungsmassenströme einer Ethanollache bei 30°C und unterschiedlichen y bzw. η -Schrittweiten

6.2.3 Weitere Einflussparameter

Von den physikalischen Einflussgrößen Windgeschwindigkeit, Turbulenz, Lachentemperatur, Lufttemperatur und Energiebilanz der Lache auf den Verdunstungsmassenstrom wurden bisher die Windgeschwindigkeit, die Turbulenz und die Lachentemperatur untersucht. Weiterhin hängt die Lösung des hier vorgestellten Berechnungsverfahrens von numerischen Parametern wie der Schrittweite in Strömungs- also x-Richtung, vertikal zur Strömungs- also in y-Richtung und der Schrittweite in der Zeit ab.

Weitere Einflussgrößen wie die Energiebilanz und die Schrittweite in der Zeit sind für das stationäre Grenzschichtverfahren nicht von Bedeutung und werden somit erst in Kapitel 6.2.6, bei der Vorstellung des instationären Verfahrens diskutiert.

Wie bereits in Abschnitt 4.2.2 erwähnt, beeinflusst die Wahl der Schrittweite für das Diskretisierungsverfahren das Ergebnis. An dieser Stelle soll daher nachgewiesen werden, dass die für das hier vorgestellte Grenzschichtverfahren gewählten Schrittweiten in x und y-Richtung keinen signifikanten Einfluss auf das Ergebnis mehr haben.

Da die Schrittweite quer zur Strömung, also in y-Richtung massgeblich ist für die Bestimmung der Gradienten an der Wand und somit für die Berechnung des Stoffübergangs, muss gewährleistet sein, dass die Schrittweite klein genug ist, um bei einer weiteren Verringerung keinen nennenswerten Einfluss auf das Ergebnis zu haben. In Tabelle 9 sind die berechneten Massenströme für den Wandabstand, also die Schrittweite in transformierten Koordinaten η an der Phasengrenzfläche dargestellt. Zum Grenzschichtausserand hin wird die Schrittweite immer grösser, da in diesem Bereich keine das Ergebnis signifikant beeinflussende Vorgänge mehr stattfinden.

Bei Schrittweiten von $2 \cdot 10^{-3}$ oder mehr konvergiert die Lösung des Grenzschichtverfahrens nicht. Somit ist eine Schrittweite von $1 \cdot 10^{-3}$ als Obergrenze für den y-Schritt anzusehen. Für das hier vorgestellte Berechnungsverfahren wurde eine Wandschrittweite von $2 \cdot 10^{-4}$ gewählt. Eine Verkleinerung dieser Schrittweite um den Faktor 10 führt, wie in Tabelle 9 ersichtlich, zu keiner signifikanten Veränderung des Ergebnisses mehr (die Abweichung liegt unterhalb von 0,002%). Auch wenn insgesamt die Abweichungen zwischen den berechneten Massenströmen bei allen dargestellten Schrittweiten sehr gering sind, so wurde die verwendete Schrittweite gewählt, da eine Abweichung von nur 0,002% auf jeden Fall als vernachlässigbar angesehen werden kann.

Wandabstand η [-]	Verdunstungsmassenstrom [kg/s]
$2 \cdot 10^{-3}$	keine Konvergenz
$1 \cdot 10^{-3}$	$8,747 \cdot 10^{-2}$
$9 \cdot 10^{-4}$	$8,725 \cdot 10^{-2}$
$5 \cdot 10^{-4}$	$8,720 \cdot 10^{-2}$
$3 \cdot 10^{-4}$	$8,719 \cdot 10^{-2}$
$2 \cdot 10^{-4}$	$8,663 \cdot 10^{-2}$
$1 \cdot 10^{-4}$	$8,652 \cdot 10^{-2}$
$2 \cdot 10^{-5}$	$8,650 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 9: Verdunstungsmassenströme einer Ethanollache bei 30°C und unterschiedlichen y bzw. η -Schrittweiten

Nachdem die Wahl einer ausreichenden Schrittweite in y-Richtung nachgewiesen wurde, kann nun der Einfluss der Schrittweite in Strömungs- also in x-Richtung (bzw. in transformierten Koordinaten in ξ -Richtung) untersucht werden. In dem hier vorgestellten Grenzschichtverfahren wurde eine Schrittweite in Strömungsrichtung verwendet die $1/100$ der Lachenlänge, jedoch maximal $0,01$ m entspricht (siehe Abschnitt 4.2.2). In Abbildung 33 sind unterschiedliche x-Schrittweiten und die jeweiligen damit berechneten Verdunstungsmassenströme dargestellt.

Zwischen dem Massenstrom bei einer Schrittweite von 1 m und dem bei der gewählten Schrittweitenobergrenze von $1 \cdot 10^{-2}$ liegt eine Verringerung des Massenstromes um ca. 40% . Selbst die Massenströme bei den Schrittweiten $1 \cdot 10^{-1}$, $5 \cdot 10^{-1}$ und $1 \cdot 10^{-2}$ weichen noch um jeweils ca. 3% voneinander ab.

Eine weitere Reduzierung der Schrittweite von der gewählten Obergrenze um den Faktor 10 ergibt nur noch eine Abweichung von $0,06\%$. Somit ist gewährleistet, dass das hier vorgestellte Verfahren unabhängig von der Lachengröße ist und das Ergebnis nicht von der Schrittweite abhängt.

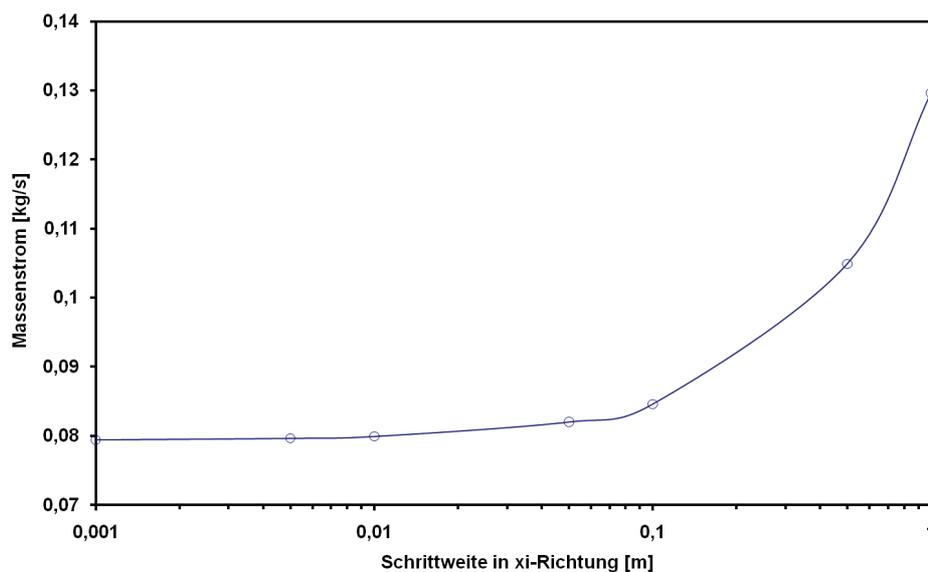


Abbildung 33: Verdunstungsmassenströme einer Ethanollache bei 30°C und unterschiedlichen x bzw. ξ -Schrittweiten

Die Lufttemperatur spielt bei der Verdunstung eine doppelte Rolle. Zum einen beeinflusst sie die Stoffwerte der Luft und somit den Stoffübergangskoeffizienten, zum anderen wirkt sie sich auf die durch Konvektion mit der Lache ausgetauschte Wärme aus. Der konvektive Wärmestrom kann, im Gegensatz zu den Strahlungs- und Bodenwärmeströmen die nur instationär bilanziert werden können, auch im stationären Fall

bilanziert und berücksichtigt werden. In Tabelle 10 sind die Ergebnisse des Grenzschichtverfahrens für eine Cyclohexanlache mit 10 m Durchmesser und einer konstanten Lachentemperatur von 30°C, bei einer Windgeschwindigkeit von 3 m/s in 10 m Höhe für verschiedene Lufttemperaturen zusammengestellt.

Lufttemperatur [°C]	Verdunstungsmassenstrom [kg/s]
10	$1,56 \cdot 10^{-1}$
20	$1,52 \cdot 10^{-1}$
30	$1,49 \cdot 10^{-1}$
40	$1,46 \cdot 10^{-1}$
100	$1,3 \cdot 10^{-1}$

Tabelle 10: Verdunstungsmassenströme einer Cyclohexanlache bei 30°C und unterschiedlichen Lufttemperaturen

Mit steigender Lufttemperatur sinkt der Verdunstungsmassenstrom. Die Abweichung zwischen dem Verdunstungsmassenstrom bei 10 und dem bei 100°C beträgt 17%. Im Mittel ergibt sich daraus eine Abweichung von ca. 0,2%/K. Die Lufttemperatur spielt also bei Störfallauswirkungsbetrachtungen in dem in dem zumeist betrachteten Bereich von 10°C bis 30°C eine untergeordnete Rolle, da sich der Verdunstungsmassenstrom hier um maximal 4 % ändert. Kleinere Temperaturschwankungen von lediglich einigen Kelvin während des Betrachtungszeitraumes, wie sie während der experimentellen Untersuchungen oder wie sie bei Störfällen auftreten, können also bei der Berechnung vernachlässigt und eine konstante mittlere Lufttemperatur angenommen werden.

Der Abfall des Massenstromes:

$$\dot{m} = \left(\rho v - \frac{\mu}{Sc} \left(1 + \nu_t^+ \frac{Sc}{Sc_t} \right) \frac{\partial c_1}{\partial y} \right) \cdot A_{Lache} \quad (109)$$

mit steigender Lufttemperatur ist auf die Abnahme des Konzentrationsgradienten zurückzuführen. Da mit steigender Lufttemperatur der Diffusionskoeffizient ansteigt, wird eine bessere Verteilung des Stoffes in der Gasphase erreicht, was zu einer Abnahme des Gradienten der Konzentration über die Höhe der Grenzschicht führt.

6.2.4 Vergleich des stationären turbulenten Grenzschichtverfahrens mit den empirischen Verdunstungsmodellen

Zum Vergleich des hier vorgestellten Grenzschichtverfahrens mit den im vorigen Abschnitt diskutierten empirischen Modellen, werden die Modelle von Clancey und Mackay-Matsugu herangezogen (siehe Abbildung 34 und 35). Diese beiden Modelle wurden ausgewählt, da sie respektive die Ober- und die Untergrenze der mit den empirischen Modellen berechneten Werte darstellen (siehe Abb. 17 und 18).

In Abbildung 34 und 35 ist zu erkennen, dass die mit dem Grenzschichtverfahren berechneten Werte im Bereich der mit dem Modell von Clancey berechneten Werte liegen. Des Weiteren ist zu erkennen, dass die bei den empirischen Modellen festgestellte größere Abweichung der berechneten Werte von den experimentellen Ergebnissen für Cyclohexan aufgrund der im Vergleich zu Ethanol höheren molaren Masse, bei den Berechnungen mit dem Grenzschichtverfahren nicht auftritt. In Abbildung 34 ist außerdem zu sehen, dass das Modell von Clancey im unteren Geschwindigkeitsbereich Werte vorhersagt, die möglicherweise leicht niedriger ausfallen können, als die experimentell festgestellten, insbesondere bei Berücksichtigung des Messfehlers von 13% bei den experimentellen Daten. Das Grenzschichtverfahren zeigt bei ähnlich guter Approximation der Messwerte wie beim Modell von Clancey, eine deutlich konservativere Tendenz. Der Vergleich mit den Messwerten für Cyclohexan (Abbildung 35) zeigt, dass das Grenzschichtverfahren hier die besten Abschätzungen liefert und dabei immer konservativ bleibt.

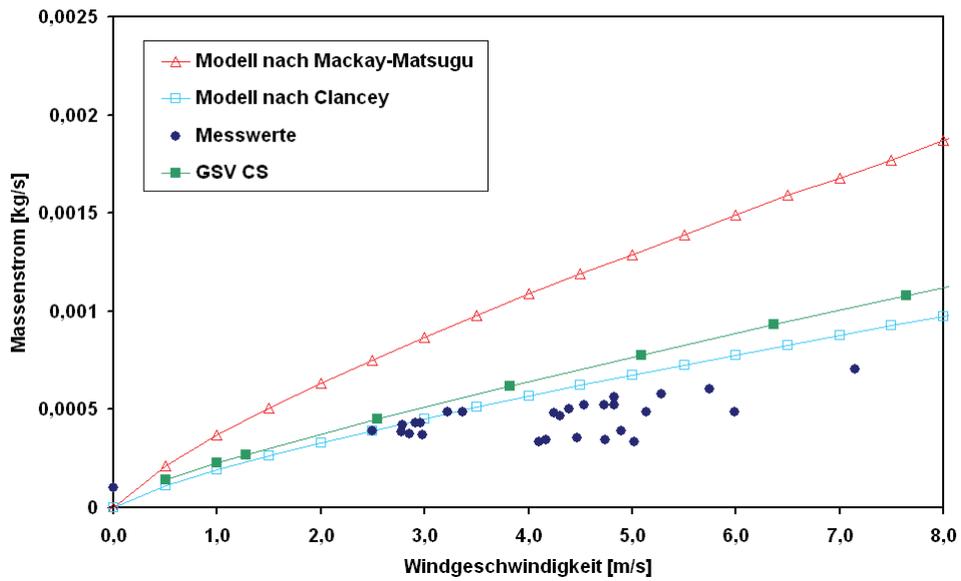


Abbildung 34: Vergleich der Ergebnisse des Grenzschichtverfahrens mit den Ergebnissen der empirischen Modelle nach Clancey und Mackay-Matsugu sowie den experimentellen Daten für eine 30°C Ethanol-lache mit 0,74 m Durchmesser.

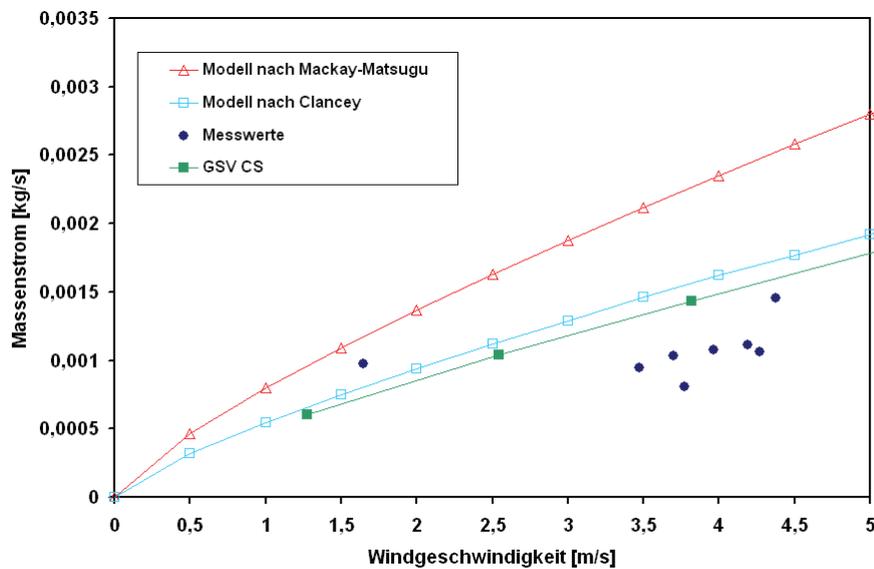


Abbildung 35: Vergleich der Ergebnisse des Grenzschichtverfahrens mit den Ergebnissen des empirischen Modells nach Clancey sowie den experimentellen Daten für eine 30°C Cyclohexan-lache mit 0,74 m Durchmesser.

Der Einfluss der Lachengröße und somit der überströmten Länge auf die Massenstromdichte weist mit dem Grenzschichtverfahren eine ähnliche Genauigkeit, wie bei den empirischen Modellen auf. Lag bei den empirischen Modellen die Abnahme der Massenstromdichte von einer 0,5 auf einen 1 m Durchmesser Lache bei ca. 8% (bis auf das Modell von Deutsch mit ca. 16%), so liegt dieser Wert für das Grenzschichtverfahren bei ca. 10% (siehe Tabelle 11). Da die experimentell bestimmte Abnahme der Massenstromdichte bei ca. 24% lag, wird das Grenzschichtverfahren für steigende Lachengrößen eine höhere Überschätzung des Massenstromes aufweisen, als bei kleinen Lachen.

Lachendurchmesser [m]	Massenstromdichte GSV [kg/m ² s]
0,50	$1,58 \cdot 10^{-3}$
0,74	$1,49 \cdot 10^{-3}$
1,00	$1,43 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 11: Berechnete Massenstromdichten mit dem Grenzschichtverfahren für verschiedene Lachengrößen

Während die empirischen Modelle nur die Bestimmung des Massenstroms bei der Verdunstung ermöglichen, zeichnet sich das Grenzschichtverfahren durch die direkte Bestimmung weiterer Größen aus. Um die Konzentrationsverteilung im Nachlauf der Lache berechnen zu können, aus der dann z.B. die untere Zünddistanz bestimmt werden kann, wird bei der Verwendung empirischer Modelle ein weiteres Modell zur Berechnung der Gasausbreitung benötigt, während das Grenzschichtverfahren durch die Berechnung von Konzentrationsprofilen in der Grenzschicht eine direkte Aussage ermöglicht (siehe Abbildung 36). Zu diesem Diagramm ist anzumerken, dass die experimentellen Daten nur als Richtwert zu verstehen sind. Aufgrund der Schwankungen der Windrichtung während der Versuche sind auch die Schwankungsbreiten der gemessenen Werte, wie im Diagramm dargestellt, sehr groß. In Anbetracht dieser großen Messunsicherheit kann anhand dieses Diagramms nur geschlossen werden, dass die vom Grenzschichtverfahren berechneten Konzentrationen im Nachlauf konservativ sind und größenordnungsmäßig mit den experimentellen Daten übereinstimmen. Hierbei ist jedoch zu beachten, dass aufgrund des zweidimensionalen Charakters der verwendeten Gleichungen im Grenzschichtverfahren eine Verteilung des Stoffes in der Gasphase und somit eine Verminderung der Konzentration nur über die vertikale Verteilung des Stoffes erreicht werden kann. Eine Verdünnung durch Ausbreitung der Gaswolke quer zur Strömungsrichtung, wie es in der Realität auftritt, kann anhand des hier vorgestellten Grenzschichtverfahrens nicht berücksichtigt werden.

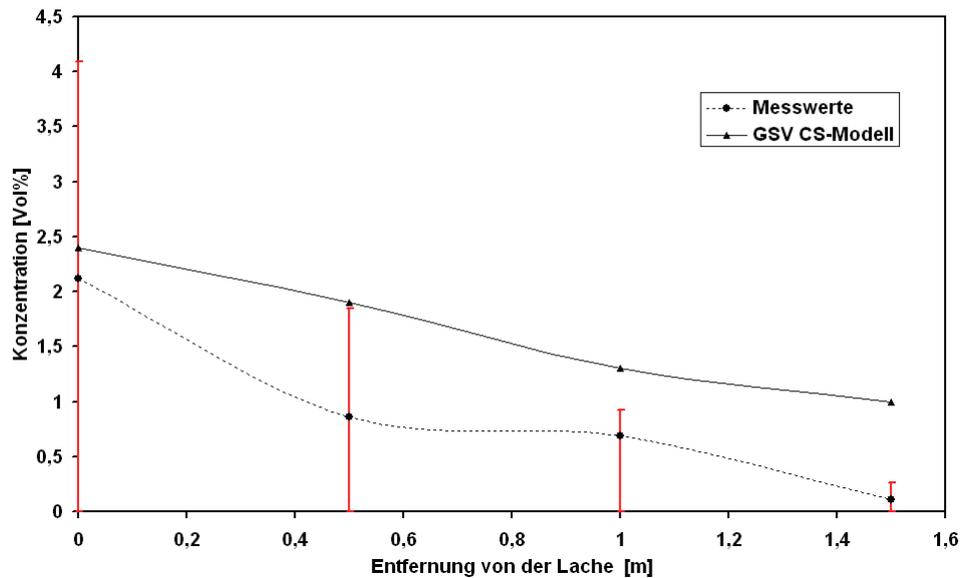


Abbildung 36: Experimentelle Konzentrationswerte in 1,5 cm Höhe über dem Boden im Nachlauf einer 0,74 m Ethanollache bei 44°C im Vergleich mit den berechneten Konzentrationen aus dem Grenzschichtverfahren.

Zur Berechnung der Gasausbreitung und somit der Konzentrationen im Nachlauf muss bei der Verwendung von empirischen Verdunstungsmodellen ein Gasausbreitungsmodell herangezogen werden. Hierfür wird häufig die VDI-Richtlinie 3783, Blatt 1 und 2 [53] verwendet. Diese gliedert sich in einen Ansatz zur Ausbreitung von Gasen die leichter sind als Luft (VDI-Richtlinie 3783, Blatt 1) und einen zur Ausbreitung von Gasen die schwerer sind als Luft (VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2). Bei beiden Ansätzen ist die Modellierung des direkten Nahbereichs der Lache nicht möglich. Die VDI-Richtlinie 3783, Blatt 1 zur Ausbreitung leichter Gase liefert modellbedingt erst ab einer Entfernung von ca. 100 m zuverlässige Werte. Im Bereich von 0 bis 100 m müssen die Streuungen σ interpoliert werden. Die VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2 deckt zwar auch den Bereich unterhalb von 100 m ab, gilt jedoch nur, wie eingangs erwähnt, für die Ausbreitung schwerer Gase. Während die Schwergasrichtlinie grundsätzlich von einer Punktquelle ausgeht, und somit die Anfangskonzentration 100 Vol.% entspricht, kann bei der Leichtgasausbreitung zwischen einer Punkt- und einer Flächenquelle ausgewählt werden. Wobei auch hier die Punktquelle die höheren Konzentrationen liefert. Betrachtet man eine 10 x 10 m Ethanollache bei 30°C und einer Windgeschwindigkeit von 3 m/s, so ist der resultierende Massenstrom groß genug, um eine Schwergasberechnung nach der Definition der VDI Richtlinie 3783, Blatt 2 zu rechtfertigen. Der Vergleich der Ausbreitungsrechnung nach VDI Richtlinie Blatt 1 und 2 mit der aus dem Grenzschichtverfahren resultierenden Berechnung (siehe Abbildung 37) ergibt, dass

die von der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 2 berechneten Konzentrationen in einem Meter hinter der Lache bei ca. 85 Vol.% liegen, während die aus der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1 berechneten Werte gerade einmal 1 Vol.% erreichen. Das Grenzschichtverfahren liefert an dieser Stelle einen Wert von ungefähr 2,2 Vol.%. In Anbetracht der Beobachtungen, die im Vergleich mit den experimentellen Daten gemacht wurden, ist anzunehmen, dass das Grenzschichtverfahren im Nahbereich die realistischeren Werte liefert. Insbesondere, da die aufgrund des Dampfdruckes resultierende Konzentration an der Lachenoberfläche gerade einmal 10 Vol.% beträgt.

Da das Grenzschichtverfahren in der hier vorgestellten Form, wie schon erwähnt, keine laterale Ausbreitung berücksichtigt, ist anzunehmen, dass in größeren Entfernungen von der Lache, welche dann im Geltungsbereich der VDI-Richtlinie liegen, die berechneten Konzentrationen zu hoch sein dürften. Somit sind die Konzentrationswerte im Nachlauf nur für den direkten Nahbereich der Lache als realistisch zu betrachten. Dieser Bereich ist unter anderem für die Bestimmung der UZD interessant.

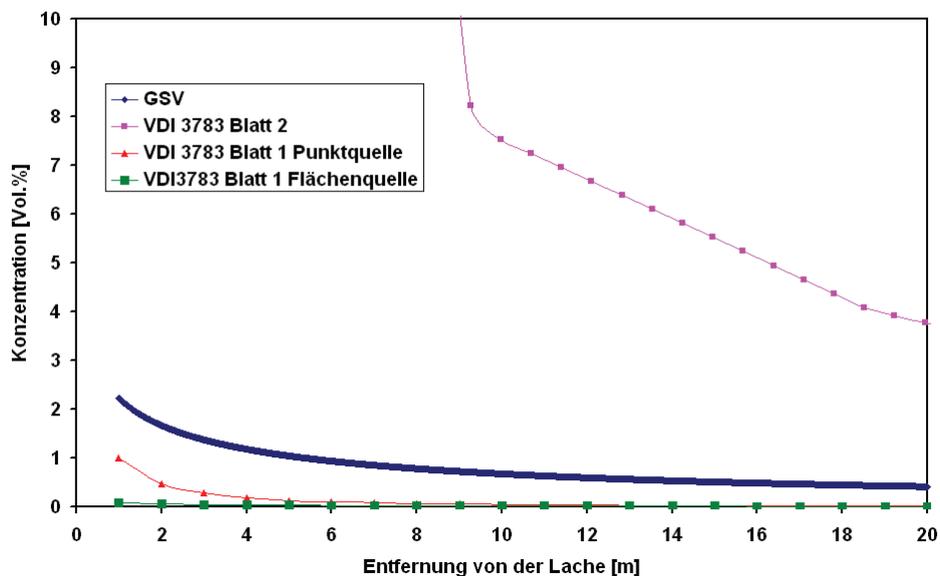


Abbildung 37: Vergleich der Nachlaufkonzentrationen gemäß VDI Richtlinie 3783 Blatt 1 und 2, sowie nach dem Grenzschichtverfahren für einen 10x10m Ethanol-lache bei 30°C.

Das Grenzschichtverfahren ermöglicht neben der Berechnung der Gasausbreitung auch die Berechnung der explosionsfähigen Masse in der Gaswolke über der Lache. Die bisherige Vorgehensweise bei der Bestimmung dieses Wertes entsprach der Annahme eines fiktiven Raumes über der Lache, der einem ideal durchmischten, kontinuierlichen Rührkessel gleichkommt (siehe ProNuSs [58]). Im Gegensatz dazu wird in

dem hier vorgestellten Grenzschichtverfahren, die explosionsfähige Masse über die Integration der Konzentrationsprofile über die Höhe berechnet. Hierbei werden alle Konzentrationen, die oberhalb der unteren Zündgrenze liegen, integriert. Zum Vergleich wurden die Modelle von Mackay-Matsugu, Clancey und Deutsch herangezogen. Mackay-Matsugu und Clancey als die Modelle, die respektive die Ober- und Untergrenze der Massenstromberechnung der untersuchten empirischen Modelle darstellen und das Modell von Deutsch, da dieses als Bestes innerhalb der betrachteten Modelle zu empfehlen ist. Es wurde eine 10 x 10 m Ethanollache bei unterschiedlichen Temperaturen und somit unterschiedlichen Dampfdrücken betrachtet. Die Windgeschwindigkeit wurde für diese Berechnungen mit 3 m/s angenommen. Im Vergleich mit den empirischen Modellen und dem Ansatz nach ProNuSs ergeben sich insbesondere im Bereich niedriger Dampfdrücke deutliche Unterschiede zu den Ergebnissen des Grenzschichtverfahrens (siehe Abbildung 38).

Die Annäherung der Werte aus dem Grenzschichtverfahren an die der empirischen Modelle für höhere Dampfdrücke, liegt an dem exponentiellen Anstieg des Massenstromes in diesem Bereich. Er entspricht in etwa dem des Modells von Mackay-Matsugu. Dass die Werte des Modells nach Clancey übertroffen werden, liegt an dem linearen Verhalten dieses Modells bei hohen Dampfdrücken, während das Modell von Deutsch zwar auch einen exponentiellen Anstieg aufweist, der jedoch nicht ganz so steil verläuft, wie bei dem Grenzschichtverfahren oder bei Mackay-Matsugu. Da hierzu keine experimentellen Daten zur Validierung zur Verfügung stehen, kann an dieser Stelle nur gesagt werden, dass das Grenzschichtverfahren bei der Berechnung der explosionsfähigen Masse tendenziell deutlich geringere Werte liefert, als die empirischen Modelle. Zum einen kann dies durch die niedrigeren berechneten Massenströme (z.B. im Vergleich zu Mackay-Matsugu und Deutsch) begründet sein, zum anderen liegt es an den zwei grundsätzlich verschiedenen Ansätzen zur Berechnung der explosionsfähigen Masse. Während im Modell des ideal durchmischten kontinuierlichen Rührkessels eine einheitliche Konzentration des gesamten Volumens angenommen wird, wird im Grenzschichtverfahren die laut Berechnung an jedem Punkt vorliegende Konzentration berücksichtigt.

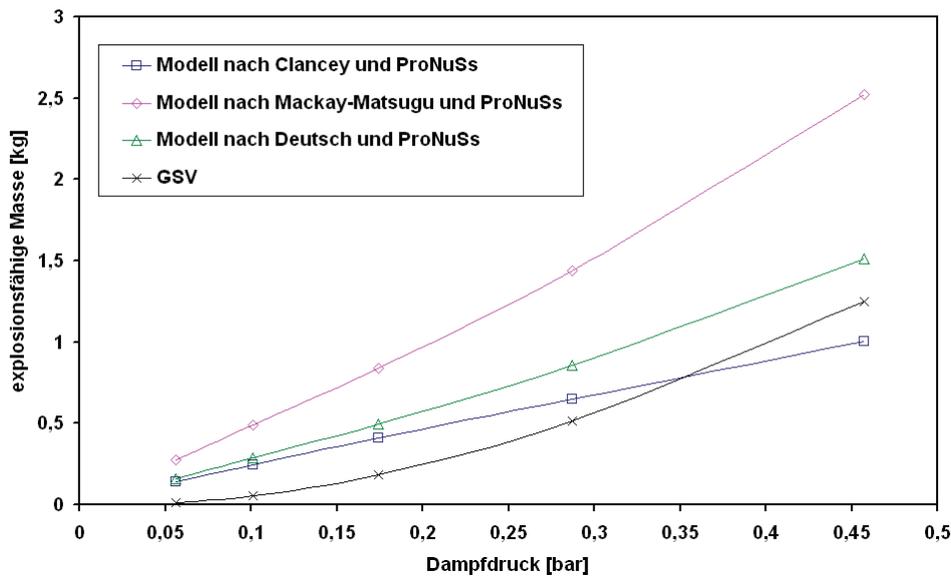


Abbildung 38: Vergleich der explosionsfähigen Masse in der Gaswolke mit den Modellen von Clancey, Mackay-Matsugu und Deutsch nach der Berechnungsmethode von ProNuSs, sowie nach dem Grenzschichtverfahren für einen 10x10m Ethanollache bei unterschiedlichen Dampfdrücken.

6.2.5 Laminares, instationäres Grenzschichtverfahren

Zur Validierung des laminaren, instationären Grenzschichtverfahrens wurde nochmals auf die Kühlgrenztemperaturmessungen von Splettstößer zurückgegriffen. Zwar stellen diese nur die stationären Endwerte dar, jedoch sollte ein korrekt funktionierendes instationäres Berechnungsverfahren bei hinreichend großen Berechnungszeiträumen einen zumindest asymptotischen Einlauf auf den stationären Wert ergeben.

In Abbildung 39 ist exemplarisch ein Wert aus Abbildung 25 aufgetragen. Die instationären Vergleichsrechnungen wurden für einen Berechnungszeitraum von 3600 s durchgeführt. Es wurden zwei Starttemperaturen ausgewählt, die jeweils oberhalb (bei 30°C) und unterhalb (bei 10°C) der von Splettstößer bestimmten stationären Kühlgrenztemperatur lagen.

Zwar liegen die Endwerte der instationären Berechnung 0,1 K unterhalb der von Splettstößer gemessenen Kühlgrenztemperatur, dennoch ist in Abbildung 39 deutlich zu erkennen, dass das instationäre Verfahren bei großen Berechnungszeiträumen asymptotisch gegen die stationäre Lösung läuft.

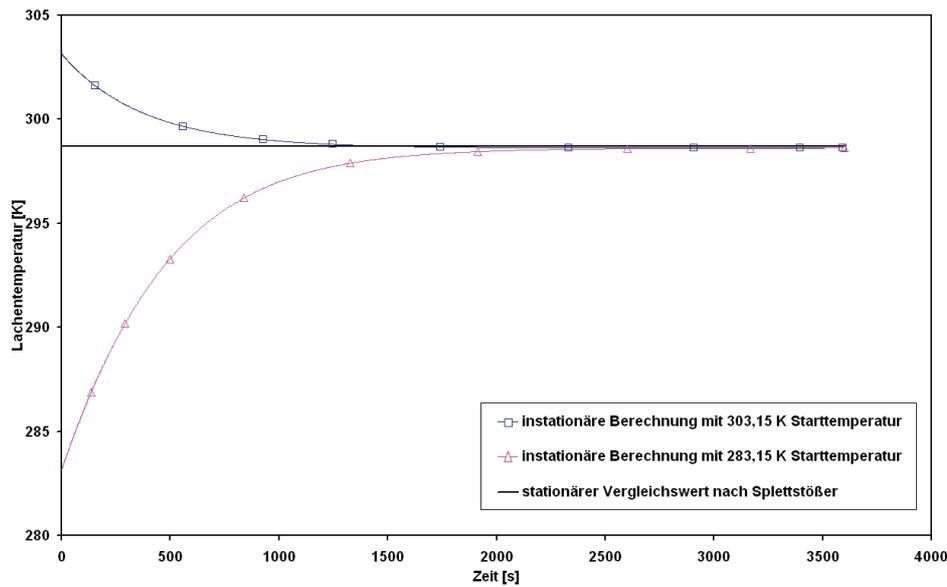


Abbildung 39: Vergleich der stationären Kühlgrenztemperatur nach Splettstösser mit der Lachentemperaturberechnung anhand des instationären Grenzschichtverfahrens.

Inwiefern die berechnete Geschwindigkeit der Temperaturänderung einer realistischen Abschätzung entspricht, soll in Kapitel 6.2.7 anhand eines Vergleichs mit Messwerten überprüft werden.

Die Zeitschrittweite spielt bei instationären Verfahren eine zentrale Rolle. Ebenso wie die Schrittweiten in x- und y-Richtung, beeinflusst die Zeitschrittweite das Ergebnis maßgeblich. Um den Einfluss des Zeitschrittes zu untersuchen, wurde eine 10 x 10m Ethanollache bei 30°C, eine Windgeschwindigkeit von 3 m/s und einer Berechnungsdauer von 120 s betrachtet. In Tabelle 12 sind die Zeitschrittweiten und die jeweiligen damit berechneten Massenströme aufgetragen. Während der Massenstrom bei Schrittweiten von 5 bis 0,5 s quasi konstant bleibt, nimmt er für kleinere Schrittweiten zu. So beträgt der Massenstromzuwachs bei einer Verringerung der Schrittweite von 0,5 auf 0,01 s ca. 3 %. Wird der Zeitschritt noch weiter verkleinert, ergeben sich keine weiteren Einflüsse auf das Ergebnis. Weiterhin ist festzuhalten, dass die Zeitschritte variabel gehalten wurden. So wird in der Anfangsphase, in der grosse zeitliche und örtliche Gradienten auftreten, mit einem Zeitschritt von 0,01 s gerechnet. Dieser wird dann jedoch sukzessive auf maximal 5 s angehoben, um die Rechenzeit gering zu halten. Diese Vorgehensweise hat so gut wie keinen Einfluss auf das Ergebnis im Vergleich zur Berechnung mit einem konstanten Zeitschritt von 0,01 s. Die Abweichungen liegen bei gerade mal 0,5 % und sind somit vernachlässigbar. Zeitschritte grösser als 5 s füh-

ren jedoch zu einer nicht konvergenten Lösung, bzw. zum Abbruch der Berechnung. Ebenso muss der Anfangszeitritt in einer ähnlichen Größenordnung gewählt werden, wie der hier verwendete Zeitschritt von 0,01 s, da sonst auch keine konvergente Lösung erreicht wird.

Zeitschritt [s]	Verdunstungsmassenstrom [kg/s]
10	keine Konvergenz
5	$1,1034 \cdot 10^{-3}$
1	$1,1035 \cdot 10^{-3}$
0,5	$1,1038 \cdot 10^{-3}$
0,1	$1,1066 \cdot 10^{-3}$
0,01	$1,1427 \cdot 10^{-3}$
0,001	$1,1484 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 12: Verdunstungsmassenströme einer Ethanollache bei 30°C und unterschiedlichen Zeitschritten

6.2.6 Turbulentes, instationäres Grenzschichtverfahren

Wie bereits bei der Beschreibung der Einflussparameter auf das turbulente stationäre Grenzschichtverfahren erwähnt, sind die Wärmeströme, die mit der Lache ausgetauscht werden, zu berücksichtigen, da diese maßgeblich die Lachentemperatur und somit den Dampfdruck beeinflussen.

In Abbildung 40 sind die berechneten Absolutwerte der einzelnen Wärmen für eine sich abkühlende Cyclohexanlache mit 10 m Durchmesser, 30°C Starttemperatur und einer Anströmgeschwindigkeit von 3 m/s in 10 m Höhe aufgetragen. Als Bodenmaterial wurde Beton angenommen, so dass die Lachendicke gemäß des Mindestschichtdickenkriteriums 5 mm beträgt, woraus sich eine Masse von 306,3 kg flüssigem Cyclohexan in der Lache ergibt. Die Temperatur der Luft wurde - ebenso wie die Starttemperatur des Bodens - mit 20°C angenommen. Die berechnete Zeitspanne beträgt 120 s.

Während der konvektive Anteil der Wärmeübertragung im Vergleich zu den anderen Wärmeströmen verschwindend gering ist, sind insbesondere die durch Verdunstung und die mit dem Boden und die durch Strahlung ausgetauschte Energie relevant.

Der beobachtete starke Abfall der Bodenwärme ist darauf zurückzuführen, dass in der Anfangsphase ein grosser Temperaturgradient zwischen der Lache und dem Boden vorliegt. Der immer flacher werdende Verlauf des Bodenwärmestroms ist darauf zurückzuführen, dass mit der Zeit die Lache sich abkühlt und der Boden erwärmt wird. Somit nähern sich beide Temperaturen an, so dass der Temperaturgradient zwischen der Lache und dem Boden und dementsprechend die übertragene Wärme geringer

wird.

Der Strahlungswärmestrom wirkt in der gewählten semi-logarithmischen Auftragung in Abbildung 40 zwar konstant, tatsächlich steigt er jedoch leicht an (von 35,8 kJ auf 36,5 kJ). Durch die Abkühlung der Lache mit der Zeit wird die in der Berechnungsgleichung für den Strahlungswärmestrom (Gl. 38) berücksichtigte Differenz zwischen der Luft- und der Lachentemperatur immer grösser. Dass dieser Anstieg nicht deutlicher ausfällt, liegt an der relativ geringen Temperaturänderung von ca. 3 K in dem betrachteten Zeitraum.

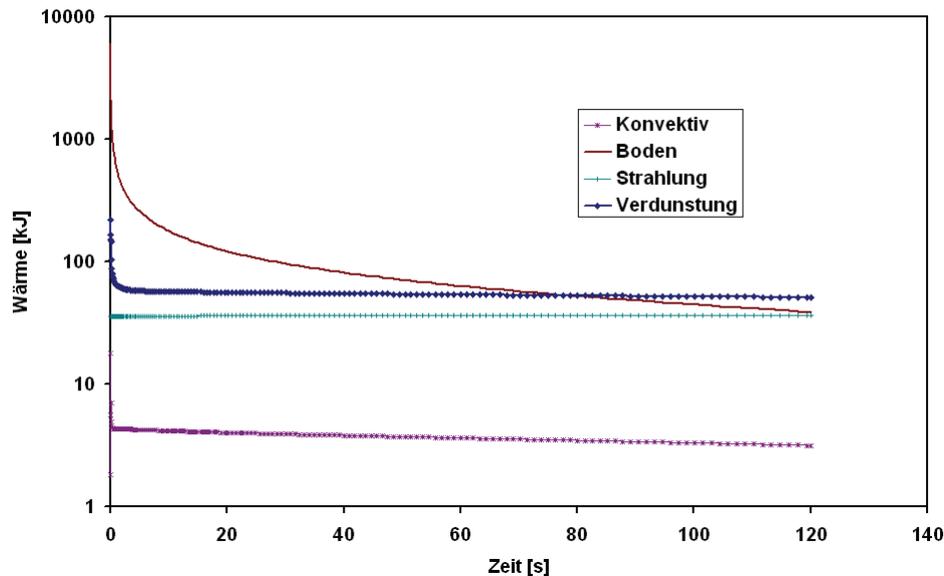


Abbildung 40: Zeitlicher Verlauf der Absolutwerte der einzelnen in der Energiebilanz berücksichtigten Wärmen für eine Cyclohexanlache mit 10 m Durchmesser, 30°C Starttemperatur und einer Anströmgeschwindigkeit von 3 m/s.

Um die jeweiligen Einflüsse des Boden- und des Strahlungswärmestromes zu untersuchen, sind in Tabelle 13 die Berechnungsergebnisse der instationären Grenzschichtrechnung für den Massenstrom und die Abkühlung der Lache für unterschiedliche Konfigurationen zusammengefasst. Die Berechnungen wurden mit denselben Randbedingungen wie für Abbildung 40 durchgeführt. Als Referenzberechnung wurde zuerst eine Berechnung ohne Berücksichtigung von Strahlungs- oder Bodenwärmestrom durchgeführt.

Da die Bodentemperatur unterhalb der Lachentemperatur liegt, ist, bei Berücksichtigung des Bodenwärmestromes, mit einer stärkeren Abkühlung der Lache, als bei Nichtberücksichtigung desselben zu rechnen. Im Vergleich mit der Referenzberech-

nung bei der weder Strahlung noch der Bodenwärmestrom berücksichtigt wurden, sinkt der Verdunstungsmassenstrom um fast 30 %, während der Temperaturabfall in der Lache etwas mehr als doppelt so hoch ist.

Für den Fall der alleinigen Berücksichtigung der Strahlung ergibt sich eine deutlich langsamere Abkühlung als im Referenzfall, da die Strahlungswärme der Lache Energie zuführt. Werden beide Wärmeströme berücksichtigt, so ergibt sich im Vergleich zum Referenzfall eine deutlich schnellere Abkühlung bei gleichzeitig geringerem Massenstrom. Werden beide Wärmeströme berücksichtigt, zeigt sich deutlich, dass der Bodenwärmestrom die dominante Größe ist. Abkühlung der Lache und Abnahme des Verdunstungsmassenstromes liegen in einem ähnlichen Bereich wie bei der alleinigen Berücksichtigung des Bodenwärmestromes, so dass daraus geschlossen werden kann, dass der Einfluss des Strahlungswärmestromes, im Vergleich zum Bodenwärmestrom, nur eine geringfügige Rolle spielt.

Bodenwärmestrom	Strahlungswärmestrom	Verdunstungsmassenstrom [kg/s]	Temperaturverlust nach 120 s [K]
nein	nein	$1,39 \cdot 10^{-1}$	1,77
ja	nein	$1,25 \cdot 10^{-1}$	3,92
nein	ja	$1,46 \cdot 10^{-1}$	0,77
ja	ja	$1,31 \cdot 10^{-1}$	3,01

Tabelle 13: Verdunstungsmassenströme und Temperaturverluste einer Cyclohexanlache bei unterschiedlichen Wärmeströmen

Bei längeren Beobachtungszeiträumen ist festzustellen, dass nach anfänglich verstärkter Abkühlung der Lache durch Wärmeübertragung an den Boden, dieser dann wiederum als Wärmequelle dient, wenn die Lachentemperatur die Bodentemperatur unterschreitet und somit die weitere Abkühlung durch die vom Boden gelieferte Wärme langsamer abläuft (siehe Abb. 41).

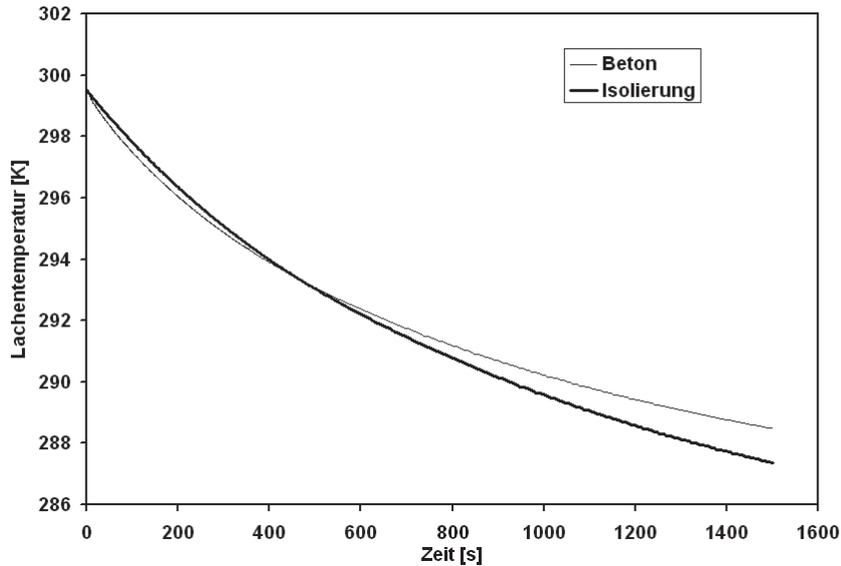


Abbildung 41: Vergleich der berechneten zeitlichen Temperaturverläufe einer Cyclohexanlache auf Betonboden sowie einer dem Boden gegenüber isolierten Lache.

Die Berücksichtigung der Energiebilanz um die Lache und insbesondere des Bodenwärmestromes führt zu einer deutlichen Veränderung der Lachentemperatur und daraus resultierend des Massenstromes. Um den Verdunstungsvorgang möglichst genau beschreiben zu können, müssen somit alle mit der Umgebung ausgetauschten Wärmeströme berücksichtigt werden, insbesondere aber der Bodenwärmestrom, da dieser den größten Anteil an der Wärmeübertragung hat.

6.2.7 Validierung des instationären turbulenten Grenzschichtverfahrens

Um das in dieser Arbeit entwickelte instationäre turbulente Grenzschichtverfahren zu validieren, wurden Abkühlungsversuche durchgeführt. Hierbei wird die Lachenflüssigkeit mit einer definierten Starttemperatur freigesetzt und die Abkühlung über einen gewissen Zeitraum aufgrund der Verdunstungskühlung gemessen. Diese Abkühlkurven werden dann mit den Berechnungsergebnissen des Grenzschichtverfahrens verglichen. In Abbildung 42 ist die Abkühlkurve für eine gegenüber dem Boden isolierte 0,74 m Ethanollache bei 29,6°C Starttemperatur und einer Abkühldauer von 600 s aufgetragen. Durch die Isolierung der Lache gegenüber dem Boden anhand einer Styroporschicht zwischen Wanne und Boden liegt kein Bodenwärmestrom vor. Nur der konvektive und der Strahlungswärmestrom werden berücksichtigt. Die Schwankungen in

den gemessenen Temperaturen sind maßgeblich auf die starke Bewölkung mit kurzzeitigem Aufreißen der Wolkendecke während der Versuche und der daraus resultierenden wechselnden Sonneneinstrahlung zurückzuführen. Im Vergleich sind drei mit dem instationären Grenzschichtverfahren berechnete Temperaturverläufe für unterschiedliche Strahlungsstärken dargestellt. Es ist deutlich zu sehen, dass die Kurve mit einer konstanten Strahlungsstärke von 1 kW/m^2 zu einer viel zu langsamen Abkühlung der Lache führt, während die Annahme einer Strahlungsstärke von 0 kW/m^2 zu einer, im Vergleich zu den Messwerten, leicht zu schnellen Abkühlung führt. Die Berücksichtigung der Strahlung gemäß Gl. 38 führt zu einer sehr guten Übereinstimmung mit den gemessenen Temperaturen. Da für die Berechnung der Lachentemperatur mit dem Grenzschichtverfahren die Energiebilanz um die Lache gelöst wird und diese maßgeblich vom Massenstrom abhängt, ist die genaue Berechnung der Lachentemperatur ein weiterer Beweis dafür, dass das in dieser Arbeit entwickelte Grenzschichtverfahren eine gute Approximation des Verdunstungsvorganges liefert.

Des Weiteren ist festzustellen, dass bei einer gegenüber dem Boden isolierten Lache, die Strahlungswärme einen deutlichen Einfluss auf die Lachentemperatur und somit den Verdunstungsvorgang hat.

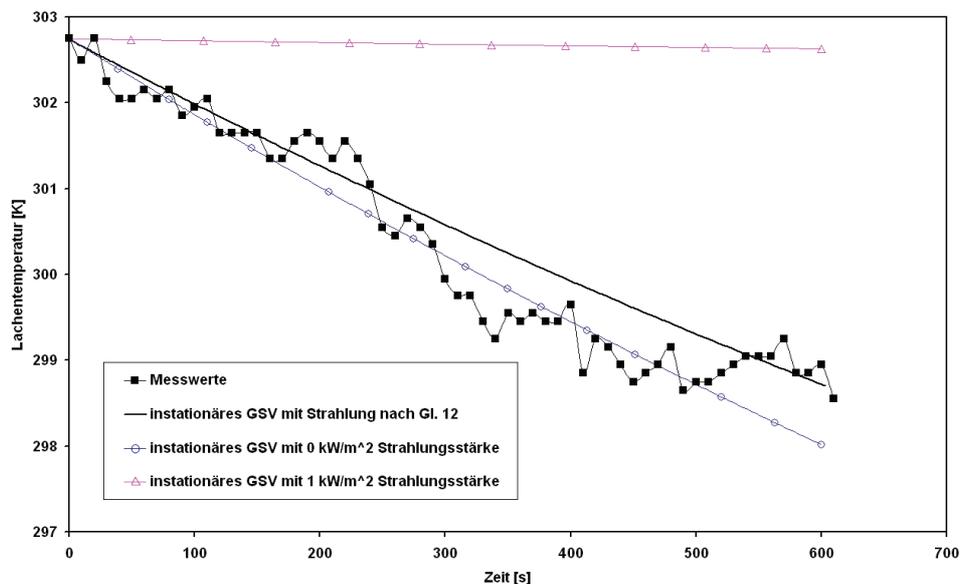


Abbildung 42: Gemessene Abkühlkurve einer 0,74 m Ethanollache mit einer Starttemperatur von $29,6^\circ\text{C}$ im Vergleich mit den Berechnungsergebnissen des instationären Grenzschichtverfahrens für unterschiedliche Strahlungsstärken.

Zum Vergleich sind in Abbildung 43 der gemessene Temperaturverlauf, der mit instationären Grenzschichtverfahren berechnet und die Temperaturverläufe anhand der em-

pirischen Modelle von Clancey und Mackay-Matsugu dargestellt. Hierbei wird die auch im Grenzschichtverfahren implementierte Energiebilanz gelöst, wobei der für die Verdunstungswärme relevante Massenstrom über die empirischen Modelle bestimmt wird. Somit ist die deutlich stärkere Abkühlung der Lache bei den Berechnungen anhand der beiden empirischen Modelle auf den wesentlich höheren Massenstrom zurückzuführen, den diese im Vergleich zum Grenzschichtverfahren vorhersagen.

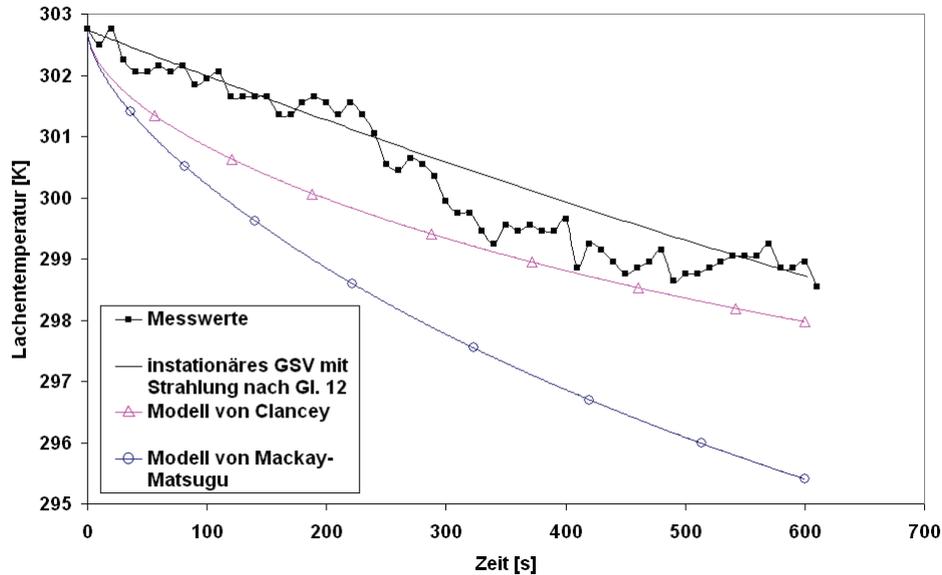


Abbildung 43: Gemessene Abkühlkurve einer 0,74 m Ethanollache mit einer Starttemperatur von 29,6°C im Vergleich mit den Berechnungsergebnissen des instationären Grenzschichtverfahrens und der empirischen Modelle von Clancey und Mackay-Matsugu.

Aus der instationären Berechnung kann nicht nur die zeitabhängige Entwicklung des Massenstromes, sondern auch die zeitliche Veränderung der unteren Zünddistanz und parallel dazu durch Integration der Konzentrationsprofile über der Lache, die explosionsfähige Masse in der Gaswolke zu jedem Zeitpunkt der Verdunstung bestimmt werden. Hierbei stellt die explosionsfähige Masse nur den Teil der Gaswolke dar in dem die Konzentration oberhalb der unteren Zündgrenze liegt. In Tabelle 14 sind die berechneten unteren Zünddistanzen und explosionsfähigen Massen für eine 10 x 10 m Ethanollache bei 30°C aufgetragen. In der Anfangsphase steigen die UZD und die explosionsfähige Masse auf einen Maximalwert an, da immer mehr Stoff aus der Lache in die Gasphase übergeht. Der Zeitpunkt, zu dem der jeweilige Maximalwert erreicht wird, ist jedoch nicht derselbe. Während die explosionsfähige Masse nach 6,6 s ihr Maximum erreicht und ab diesem Zeitpunkt aufgrund der Abkühlung der Lache wieder fällt, ist dies für die UZD erst nach 10 s der Fall. Sind beide Maxima durchlaufen, fallen

beide Werte aufgrund der fortschreitenden Abkühlung der Lache. Aus diesen Angaben kann somit abgelesen werden, wann die UZD die größte Ausdehnung erreicht und zu welchem Zeitpunkt die explosionsfähige Masse in der Gaswolke am grössten ist.

Zeit [s]	UZD [m]	Expl. Masse [kg]
0,15	0,015	0,019
0,20	0,025	0,022
0,50	0,06	0,029
1,00	0,1	0,036
6,66	0,28	0,05136
10,00	0,30	0,05099
50,00	0,27	0,047
100,00	0,25	0,045

Tabelle 14: Zeitabhängige Entwicklung der unteren Zünddistanz und der explosionsfähigen Masse für eine 10 x 10 m Ethanollache bei 30°C

Bei der Freisetzung von kalt- oder druckverflüssigten Gasen kommt es zu einer Lachenbildung am Boden. Da der Stoff aber bei dem nun herrschenden Normaldruck weit oberhalb seiner Siedetemperatur liegt, fängt die Lache an zu verdampfen. Solange eine ausreichend grosse Energiezufuhr aus der Umgebung (im Speziellen aus dem sich nach und nach abkühlenden Boden) stattfindet, wird die Lache ihre Siedetemperatur beibehalten. Die überschüssige Energie dient dann ausschliesslich dem Phasenübergang. Nach einer gewissen Zeit wird aufgrund der Abkühlung des Bodens die zugeführte Energie nicht mehr ausreichen, um die Lache bei Siedetemperatur zu halten. Nun findet eine Unterkühlung der Lache und ein sukzessiver Übergang zur Verdunstung statt.

Um diesen Sachverhalt bildlich darzustellen, sind in Abbildung 44 exemplarisch die zeitlichen Verläufe der Lachentemperatur für anfänglich siedende Chlor-, Propan- und Butanlachen aufgetragen. Es wurde jeweils eine 10 m Durchmesser Lache betrachtet, die bei 20°C Luft- und Bodentemperatur freigesetzt wird. Die Windgeschwindigkeit soll 3 m/s betragen. Bei der Berechnung anhand des Grenzschichtverfahrens entspricht der Verdampfungsmassenstrom der Energie, die der Lache durch Konvektion, den Boden und durch Strahlung zugeführt wird geteilt durch die Verdampfungsenthalpie.

$$\dot{m}_{Verd} = \frac{Q_{zu}}{\Delta h_v} \quad (110)$$

Die Umschaltung auf die Verdunstungsberechnung erfolgt, wenn aufgrund der einhergehenden Abkühlung der Lache der Verdampfungsmassenstrom kleiner ist als der durch Verdunstung des Stoffes bei maximal 0,8 bar Dampfdruck erreichte. Die Beschränkung auf 0,8 bar Dampfdruck für die Verdunstung liegt in den Beobachtungen begründet, die zu Abbildung 30 gemacht wurden.

Die unterschiedlich langen Zeiträume, in denen die drei Stoffe auf Siedetemperatur bleiben, sind hauptsächlich auf zwei Ursachen zurückzuführen. Diese sind zum einen der Temperaturunterschied zwischen Boden (20°C) und Lache, welcher bei Butan (Siedetemperatur von -0,45°C) am geringsten ist und somit auch der Bodenwärmestrom, zum anderen auf die unterschiedlichen Dichten der Flüssigkeiten, welche zu Unterschieden in den Speichertermen der Energiebilanzen führen. Zwar ist die Siedetemperatur von Propan mit -42,02 °C deutlich niedriger als die von Chlor (-34,45°C), dafür beträgt aber die Dichte von Chlor mit knapp 1500 kg/m³ fast das dreifache der Dichte von Propan mit knapp 580 kg/m³. Somit hat die Chlорlache einen viel grösseren Energieinhalt als die Propanlache, wodurch ein längeres Sieden ermöglicht wird.

Zur qualitativen Bewertung dieser Berechnungsergebnisse fehlen bisher jedoch geeignete Messwerte.

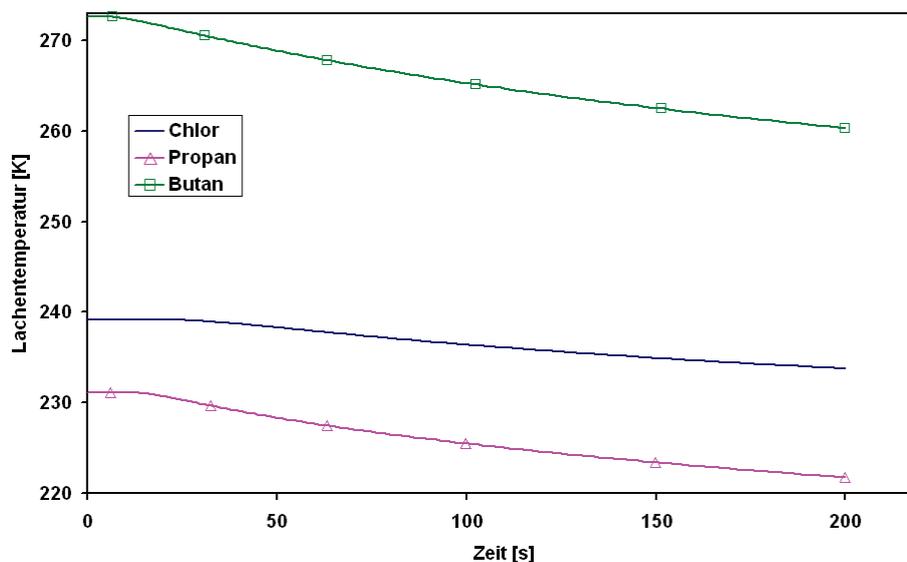


Abbildung 44: Zeitliche Entwicklung der Lachentemperatur bei der Verdampfung von Chlor, Propan und Butan mit anschließendem Übergang zur Verdunstung.

Um die Verdampfungsberechnung anhand des hier vorgestellten instationären Grenzschichtverfahrens zu validieren, wurden die Massenstrommessungen an Propanlachen

von Böke und Hartwig [33] verwendet. Bei diesen Versuchen wurden 80 und 130 l Propan in eine berandete Wanne freigesetzt, so dass die Lachenfläche in beiden Fällen 2m^2 betrug. Bei dem Versuch mit 80 l Propan herrschte eine Windgeschwindigkeit von $1,3\text{ m/s}$ in 1 m über dem Boden, eine Lufttemperatur von 14°C und eine durchschnittliche Strahlungsstärke von $260\text{W}/\text{m}^2$. Da keine Angaben zur Bodentemperatur gemacht wurden, wurde für die Berechnung angenommen, dass der Boden dieselbe Temperatur hat wie die Luft.

In Abbildung 45 sind die gemessenen und mit dem instationären Grenzschichtverfahren berechneten Massenströme aufgetragen. Insbesondere in der Anfangsphase liegen die berechneten Massenströme deutlich über den gemessenen, um sich dann immer weiter anzunähern.

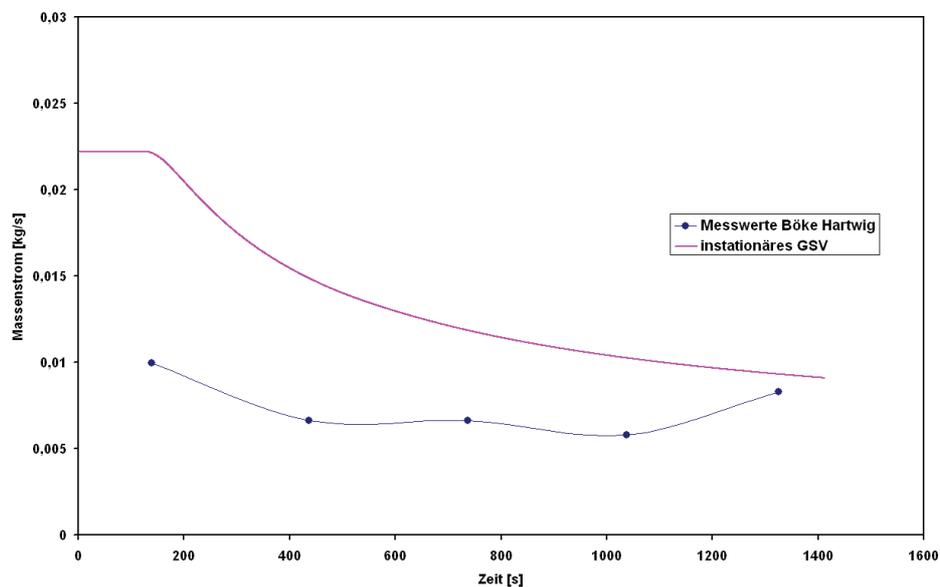


Abbildung 45: Zeitliche Entwicklung des Massenstroms bei der Verdampfung von 80 l Propan mit anschließendem Übergang zur Verdunstung.

Bei dem Versuch mit 130 l Propan betrug die Windgeschwindigkeit in 1 m über dem Boden $1,1\text{ m/s}$ und die Lufttemperatur betrug 15°C . Die durchschnittliche Strahlungsstärke lag bei $210\text{W}/\text{m}^2$. Auch hier wurde angenommen, dass Boden und Luft dieselbe Temperatur haben. Zwar liegen auch hier die berechneten Massenströme über den gemessenen Werten, insgesamt werden letztere aber deutlich besser approximiert, als bei dem Versuch mit 80 l Propan. Betrachtet man den Verlauf der Messwerte in beiden Versuchen, ist festzustellen, dass nur bei dem 130 l Versuch die für eine Verdampfung zu erwartende starke Abnahme des Massenstromes in der Anfangsphase beobachtet wurde. Dieser Sachverhalt kann unter anderem dem Umstand geschuldet sein, dass

bei dem 80 l Versuch der erste Messwert erst nach 200 s aufgenommen wurde, während bei dem 130 l Versuch der erste Wert schon nach ca. 100 s aufgezeichnet wurde. Des Weiteren kann die grössere Energiemenge, die in 130 l gespeichert ist, dazu führen, dass die Flüssigkeitstemperatur längere Zeit nahe am Siedepunkt bleibt und somit einen langsameren und somit deutlicheren Verlauf des Massenstromes ergibt.

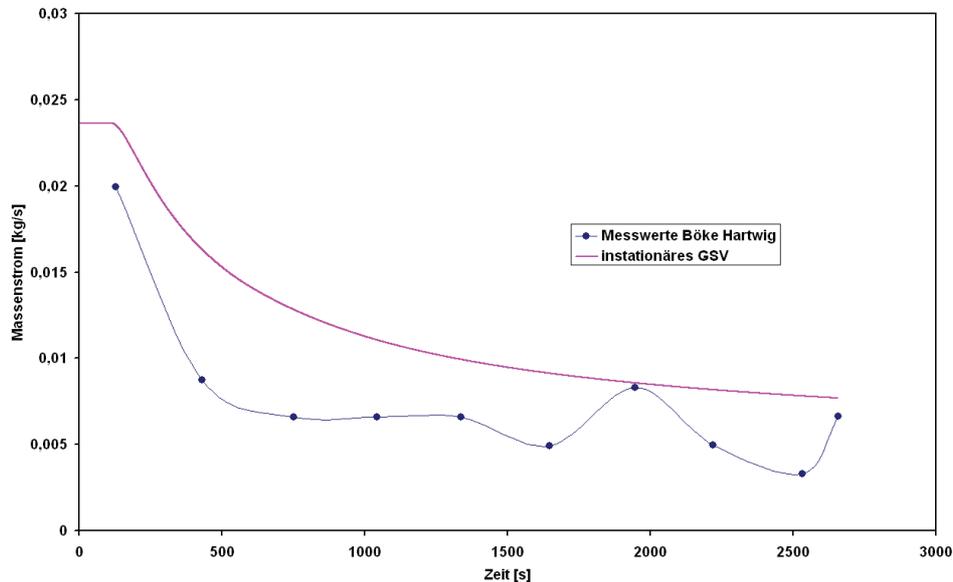


Abbildung 46: Zeitliche Entwicklung des Massenstroms bei der Verdampfung von 130 l Propan mit anschließendem Übergang zur Verdunstung.

6.2.8 Zusammenfassende Beurteilung des instationären turbulenten Grenzschichtverfahrens

Aus den durchgeführten Untersuchungen kann geschlossen werden, dass das in dieser Arbeit entwickelte und vorgestellte Grenzschichtverfahren eine gute und konservative Approximation der Messwerte liefert.

Im Vergleich mit den empirischen Modellen zeigen sich mehrere Vorteile bei der Verwendung des hier vorgestellten Grenzschichtverfahrens. Die Berechnung des Massenstromes anhand des Grenzschichtverfahrens ermöglicht eine mindestens so genaue bis hin zu einer genaueren Approximation der Messwerte im Vergleich zu den besten empirischen Modelle. Des Weiteren gehen in das Grenzschichtverfahren eine Vielzahl von Stoffwerten ein. Dadurch ist die Abweichung zwischen der Berechnung und den experimentellen Werten, im Gegensatz zu den genauesten hier untersuchten empirischen Modellen, auch für verschiedene Einsatzbedingungen und Stoffe gleich groß. Als weitere wesentliche Vorteile des Grenzschichtverfahrens, im Vergleich zu den em-

pirischen Modellen, sind die Möglichkeit der Modellierung der Verdampfung, die direkte Berechnung der Konzentrationen im Nachlauf der Lache für die Bestimmung der UZD, sowie die Berechnungen der explosionsfähigen Masse in der Gaswolke zu nennen. Für die Berechnung der Gasausbreitung im Nahbereich wird ausserdem kein zusätzliches Gasausbreitungsmodell benötigt, mit dem die Massenstromberechnung gekoppelt werden muss. Aus dem Vergleich mit der VDI-Richtlinie 3783 und den Messwerten im Nachlauf der Lache ist zu schliessen, dass im direkten Nahbereich der Lache das hier vorgestellte Grenzschichtverfahren die zuverlässigeren Abschätzungen liefert.

Der Vergleich mit den Massenstrommessungen an verdampfenden Lachen zeigt, dass das in dieser Arbeit entwickelte Modell, eine gute Abschätzung des Verdampfungsmassenstromes ermöglicht. Aufgrund der starken Abhängigkeit des Massenstromes von der Energiebilanz, ist ebenso davon auszugehen, dass die für die Verdampfung berechneten Temperaturverläufe eine gute Näherung darstellen, auch wenn hierfür bisher keine experimentelle Daten vorlagen.

Die Anwendungsgrenzen des hier vorgestellten Grenzschichtverfahrens liegen, ähnlich wie bei den empirischen Modellen, bei 1 m/s Windgeschwindigkeit als untere und 0,8 bar Dampfdruck als obere Grenze des Anwendungsbereichs.

7 Zusammenfassung

Bei der Erstellung eines Sicherheitsberichtes und der Beschreibung der möglichen Störfälle, sowie der Abschätzung des Ausmaßes und der schweren der Folgen müssen die Verdunstung und die Verdampfung von toxischen oder brennbaren Flüssigkeiten aus einer Lache berücksichtigt werden.

Zur Beschreibung des Stoffüberganges aus einer Lache wurden in dieser Arbeit unterschiedliche empirische Ansätze untersucht und ein eigenes, auf den Grenzschichtgleichungen basierendes Berechnungsverfahren entwickelt und vorgestellt. Des Weiteren wurden zur Überprüfung der Berechnungsergebnisse Freilandversuche durchgeführt, um möglichst realistische Messwerte zu erhalten, wie sie bei einem Störfall auch auftreten würden.

Die experimentellen Untersuchungen ergaben, dass die von Deutsch und auch Sutton postulierte Annahme, dass die Topografie durch ihren Einfluss auf die Turbulenz den Verdunstungsmassenstrom beeinflusst, im Rahmen von Störfallauswirkungsbetrachtungen vernachlässigbar ist, sofern die Wetterdaten des DWD in 10 m Höhe herangezogen werden. Nur bei Betrachtung der real am Boden herrschenden Windgeschwindigkeiten konnte ein Einfluss der Topografie festgestellt werden. Wurden, wie in den empirischen Modellen vorausgesetzt, die Windgeschwindigkeiten in 10 m Höhe zugrunde gelegt, war kein Unterschied zwischen den Messwerten aus beiden Geländen mehr feststellbar.

Des Weiteren konnte gezeigt werden, dass das Potenzgesetz zur Berechnung der Windgeschwindigkeit im Bereich zwischen 0 und 10 m Höhe nur für flaches Gelände die in der Natur vorliegende Geschwindigkeit gut approximiert, während in stark bebautem Gelände keine Aussagen mehr zur Verteilung der Windgeschwindigkeit, ausgehend von dem Wert in 10 m Höhe mehr möglich sind.

Anhand der experimentellen Untersuchungen und der Daten aus der Literatur konnte gezeigt werden, dass das in dieser Arbeit entwickelte und vorgestellte Grenzschichtverfahren eine gegenüber den empirischen Modellen verbesserte Vorhersage des Verdunstungsmassenstromes ermöglicht.

Im Gegensatz zu den meisten veröffentlichten Untersuchungen, wurden in dieser Arbeit alle Berechnungsmodelle mit Messdaten aus Freilandversuchen verglichen, an-

stelle von Windkanaldaten, die unter Laborbedingungen ermittelt wurden. Somit konnte in dieser Arbeit die Leistungsfähigkeit der Modelle im Vergleich mit Daten überprüft werden, wie sie bei einem Störfall tatsächlich auftreten können.

Als wesentlichen Vorteil bei der Anwendung des Grenzschichtverfahrens im Vergleich zu der Berechnung anhand empirischer Modelle ist zu erwähnen, dass das Grenzschichtverfahren neben dem Massenstrom die direkte Bestimmung der für einen Sicherheitsbericht relevanten Größen wie UZD, Toxizitätsgrenzen und explosionsfähige Masse in der Gaswolke ermöglicht.

Zwar können diese Daten auch bei der Verwendung empirischer Modelle bestimmt werden, jedoch nur durch die Kombination unterschiedlichster Ansätze. Zum einen können durch die jeweiligen Einschränkungen der eingesetzten Modelle nicht immer Informationen für alle relevanten Bereiche (wie z.B. den Nahbereich der Lache oder die Gasphase direkt über der Lache) ermittelt werden, zum anderen ergeben sich aufgrund der jeweiligen Modelleinschränkungen, je nach gewählter Modellpaarung, Unterschiede in der Genauigkeit der ermittelten Ergebnisse. Das Grenzschichtverfahren bietet an dieser Stelle eine gleichbleibende Abweichung von den experimentellen Daten und somit eine gleichbleibende Qualität der Ergebnisse.

Zusammenfassend kann geschlossen werden, dass die bisherige Vorgehensweise durch Kombination unterschiedlicher empirischer Ansätze, die Zielgrößen der Störfallauswirkungsbetrachtung bei der Verdunstung oder Verdampfung eines brennbaren oder toxischen Stoffes aus einer Lache zu bestimmen, teilweise eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten ermöglicht. Das in dieser Arbeit entwickelte instationäre Grenzschichtverfahren jedoch stellt aufgrund der genaueren, sowie der durchgängigen instationären Berechnung von der Ermittlung des Massenstromes bis hin zur direkten zeitabhängigen Bestimmung der Zielgrößen, wie die UZD oder die explosionsfähige Masse, eine verbesserte Berechnungsmethode dar.

Als weiterführende Untersuchungen sind zum einen experimentelle Untersuchungen der Lachenausbreitung und zum anderen Messungen der Konzentrationsverteilungen im Nachlauf und im Gasraum oberhalb der Lache vorzusehen. Zur Weiterentwicklung des Grenzschichtverfahrens ist der Einsatz von Turbulenzmodellen höherer Ordnung zu untersuchen, ebenso wie die Formulierung der Grenzschichtgleichungen für alle drei Raumrichtungen, so dass auch die Vorgänge quer zur Strömungsrichtung abgebildet werden können.

Literatur

- [1] Zwölfte Verordnung zur Durchführung des Bundes-Immissionsschutzgesetzes (12. BImSchV): Störfallverordnung, BGBl. I, Nr. 33, 16. Juni 2005, S. 1598 1620
- [2] SFK/TAA-GS-1 „Empfehlungen für Abstände zwischen Betriebsbereichen nach der Störfall-Verordnung und schutzbedürftigen Gebieten im Rahmen der Bauleitplanung - Umsetzung § 50 BImSchG der SFK/TAA-Arbeitsgruppe „Überwachung der Ansiedlung“, Leitfaden, 2005
- [3] 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
- [4] Strohmeier, K. „Leckanalyse bei der Anwendung der Störfall-Verordnung“, Chemie Ingenieur Technik 62, Nr. 12, 1990
- [5] Kuchling, H. „Taschenbuch der Physik“, 14. Auflage, Fachbuchverlag Leipzi-Köln, 1994
- [6] Fay, J.A. „Spread of large LNG Pools on the sea“, Journal of Hazardous Materials, 140, 2007
- [7] Conrado, C. , Vesovic, V. „The influence of chemical composition on vaporisation of LNG and LPG on unconfined water surfaces“, Chemical Engineering Science, 55, 2000
- [8] Brauer, H. „Stoffaustausch einschliesslich chemischer Reaktionen“, Verlag Sauerländer, Aarau und Frankfurt am Main, 1971
- [9] Zhukauskas, A.A. „Heat transfer of a plate in a liquid flow“, International Journal of heat and mass transfer, 3, 1961
- [10] Smolsky, B.M., Sergejev, G.T. „Heat and mass transfer with liquid evaporation“, International Journal of heat and mass transfer, 5, 1962
- [11] Sutton, O.G. „Wind structure and evaporation in a turbulent atmosphere“, Proceedings of the royal society of London, Series A146, 1934
- [12] Pasquill, F. „Evaporation from a plane, free liquid surface into a turbulent air Stream“, Proceedings of the royal society of London, Series A182, 1943

- [13] Clancey, V.J., „The Evaporation and Dispersion of Flammable Liquid Spillages, in Chemical Process Hazards with Special Reference to Plant Design“, Proceedings of the 5th Symposium held at the University of Manchester, Institution of Chemical Engineers, London, 1974
- [14] Schlünder, E.-U. „Einführung in die Wärmeübertragung“, Vieweg-Verlag Braunschweig/Wiesbaden, 5. Auflage, 1986
- [15] Lees, F.P. „Loss Prevention in the Process Industries - Hazard identification, assessment and control“, Vol.1, Second Edition, Butterworth Heinemann, 2001
- [16] Kunsch, J.P. „Two-Layer integral model for calculating the evaporation from a liquid surface“, Journal of Hazardous Material, 59, 1998
- [17] LIS Bericht Nr. 115 „Ermittlung des Gefährdungspotentials ereignisbezogener Stofffreisetzungen unter dem Aspekt der Störfall-Verordnung.“, Landesanstalt für Immissionsschutz Nordrhein-Westfalen, 1994
- [18] Deutsch, S. „Verdunstung aus Flüssigkeitslachen unter atmosphärischen Bedingungen“, Universität Dortmund, 1995
- [19] Mackay, D., Matsugu, R. S., „Evaporation rates of liquid hydrocarbon spills on land and water“, The Canadian Journal of Chemical Engineering, 51, 1973
- [20] Napier, D.H., Roopchand, D.R. „An approach to hazard analysis of LNG spills“, Journal of occupational accidents, 7, 1986
- [21] Farrell, C., Iyengar, A.K.S. „Experiments on the wind tunnel simulation of atmospheric boundary layers“, Journal of wind engineering and industrial aerodynamics, 79, 1999
- [22] Baehr, H. D., Stephan, K. „Wärme- und Stoffübertragung“, 5. Auflage, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006
- [23] Bachelorarbeit von Robert Zeps
- [24] Baumann, W.W., „Modellierung und Berechnung des Wärme- und Stoffübergangs bei der Verdunstung eines binären Flüssigkeitsfilms in turbulenter Strömung“, Fortschrittberichte VDI, 3, 167, Düsseldorf, 1988
- [25] Thiele, F., Wagner, H. „Ein Berechnungsverfahren für den laminaren zweidimensionalen Wandstrahl entlang gekrümmter Oberflächen“, IB01/81 Hermann-Föttinger-Institut, TU-Berlin, 1981

- [26] Baumann, W.W., Thiele, F. „A direct method for calculating laminar duct flow with injection or suction“, Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow, Proceedings of the 3rd Conference, Pineridge Press, Seattle, 1983
- [27] Webber, D.M., „Source terms“, Journal of loss prevention in the process industries, 4, 1991
- [28] Splettstößer, W. „Theoretische und experimentelle Untersuchung der laminaren Zweistoff-Grenzschichtströmung längs eines ebenen, verdunstenden Flüssigkeitsfilms bei temperatur- und konzentrationsabhängigen Stoffeigenschaften“, Dissertation, Technische Universität Braunschweig, 1973
- [29] LLNL, „Coyote series data report.“UCID: 19953 V. 1, 2, LLNL/NWC, Livermore, 1983
- [30] Schlichting, Grenzschichttheorie
- [31] R.P. Koopman et al., „Burro Series Data Report LLNL/NWC 1980 LNG Spill Tests“, UCID-19075, Lawrence Livermore National Laboratory, 1982
- [32] Humbert-Basset, R., Montet, A., „Dispersion dans l’atmosphère d’un nuage gazeux formé par épandage de GNL sur le sol“, 3rd International Conference on LNG, Washington DC, 1972
- [33] Böke, J., Hartwig, S. „Einsatz von Schäumen zur Konsequenzminderung bei Störfällen mit tiefkalten Flüssigkeiten“, IV. Symposium „Schwere Gase und Sicherheitsanalyse“, Bonn, 1992
- [34] P. Meurer. „Festlegung einiger Quellparameter für eine Ausbreitungsrechnung zur Sicherheitsanalyse.“, Staub - Reinhaltung der Luft, 51, 1991
- [35] Lebuser, U., „Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Verdunstung aus Flüssigkeitslachen“, Dissertation, Universität Dortmund, 1989
- [36] Brötz, W., „Gutachten Sicherheitstechnik NRW im Auftrag des MAGS“, Stuttgart, 1979
- [37] Luketa-Hanlin, A., „A review of large-scale LNG spills: Experiments and modelling“, Journal of Hazardous Materials, A132, 2006
- [38] Kawamura, P.I., Mackay, D., „The evaporation of volatile liquids“, Journal of hazardous Materials, 15, 1987

- [39] „Methods for the calculation of physical effects. “, 'Yellow Book', Committee for the Prevention of Disasters, Third edition 2005, Sdu Uitgevers.
- [40] Opschoor, G., „Investigations into the evaporation of liquefied gases spreading on land“, Cryogenics, 1981
- [41] Böke, J. „Experimente und Untersuchungen der Verdampfungsminde- rung durch Löschsäume als Konsequenzminderungsmaßnahme bei Störfällen mit Flüssiggaslachen “, Dissertation, Bergische Universität Wuppertal, 1994
- [42] Brambilla, S., Manca, D. „Accidents involving liquids: A step ahead in modeling pool spreading evaporation and burning“, Journal of hazardous materials, 161, 2009
- [43] Rotta, J.C. „Turbulent Boundary Layers in Incompressible Flow“, Progress in Aerospace Science, Vol. 2, 1962
- [44] Smith, A.M.O. and Cebeci, T. „Numerical solution of the turbulent boundary layer equations“, Douglas aircraft division report DAC 33735, 1967
- [45] Cebeci, T. and Chang, K.C. „Calculation of Incompressible Rough-Wall Boundary-Layer Flows “, AIAA Journal, Vol. 16, Nr. 7, 1978
- [46] Baldwin, B. and Lomax, H. „Thin layer approximation and algebraic model for separated turbulent flows“, AIAA Paper 78-257, 1978
- [47] Johnson, D.A., King, L.S. „A mathematically simple turbulence closure model for attached and separated turbulent boundary layers “, AIAA Journal, Vol. 23, Nr. 11, 1985
- [48] Blottner, F.G. „Computational techniques for boundary layers“, AGARD-LS 73, 1975
- [49] Briscoe, F., Shaw, P. „Spread and evaporation of liquid“, Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 6, 1980
- [50] Thiele, F. „Accurate numerical solutions of boundary layer flows by the finite-difference method of Hermitian type.“, Journal of Computational Physics, 27, 1978
- [51] UBA Bericht „Ermittlung und Berechnung von Störfallablaufszszenarien nach Maßgabe der 3. Störfallverwaltungsvorschrift “, Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 204 09 428.

- [52] Kalbhenn, M. „Experimentelle und numerische Untersuchungen der Strömung in Outflow-Valves“, Dissertation, Universität Darmstadt, 2002
- [53] VDI Richtlinie 3783 Blatt 1 und 2
- [54] Schönbacher, A., Scheller, V. „Ausbreitung von Gasfahnen“, Chemie Ingenieur Technik 53, Nr. 5, 1981
- [55] Gifford, F. A. „Turbulent Diffusion-Typing Schemes: A Review.“Nuclear Safety Vol. 17, No. 1, 1976
- [56] „Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis - Second Edition“, American Institute for Chemical Engineers, New York, 2000
- [57] Etling, D. „Theoretische Meteorologie, Eine Einführung“, 3. Auflage, Springer Verlag, 2008
- [58] www.pronuss.de
- [59] Hartwig, S., Heudorfer, W. et al. „Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Ausbreitung schwerer Gase“, RGB 8011, Frankfurt, 1986
- [60] Thiele, F.W. „Die numerische Berechnung turbulenter rotationssymmetrischer Freistrahlen und Freistrahldiffusionsflammen“, Dissertation, Uni Karlsruhe, 1975
- [61] Theurer, W. „Ausbreitung bodennaher Emissionen in komplexen Bebauungen“, Dissertation, Uni Karlsruhe, 1993
- [62] Health and Safety Executive „A series of experiments to study the spreading of liquid pools with different bund arrangements“HSE Report 405/2002, 2002