

Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Schwergasfreisetzung und -ausbreitung

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktoringenieur

(Dr.-Ing.)

von	M.Sc. Christ	ian R	auchegger
geb. am	15.06.1982	in	Kiel

genehmigt durch die Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Promotionskommission: Prof. Dr.-Ing. Ulrich Krause Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin Dr. rer. nat. Volkmar Schröder Prof. Dr. rer. nat. Tammo Redeker

Eingereicht am: 29.08.2012

Promotionskolloquium am: 11.01.2013

Danksagung

Die vorliegende Doktorarbeit entstand zwischen August 2009 und Oktober 2012 in meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter an der BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung in Berlin. Ich möchte die nachfolgenden Zeilen dazu nutzen, mich bei denjenigen zu bedanken, die direkt oder indirekt am Gelingen dieser Arbeit beteiligt waren.

Besonders bedanken möchte ich mich bei meinem Doktorvater Herrn Prof. Dr. D. Thévenin, der mir mit seinem Fachwissen zu jeder Zeit zur Seite stand. Ich danke Ihnen für eine hervorragende Betreuung, für die von Ihnen gewährte Freiheit in der Ausgestaltung der Arbeit sowie für Ihren freundschaftlichen Umgang.

In gleichem Maße möchte ich mich bei meinem ehemaligen disziplinarischen Vorgesetzten bei der BAM und Zweitgutachter der Dissertation Herrn Dr. V. Schröder bedanken. Sie gaben mir die Möglichkeit und Unterstützung, innerhalb Ihres Fachbereichs diese Arbeit anfertigen zu können. Ich danke Ihnen für eine herausragende Betreuung, für Ihren unermüdlichen Einsatz sowie für Ihre Rückendeckung in schwierigen Zeiten.

Herrn Prof. Dr. T. Redeker danke ich für die Anfertigung des Drittgutachtens.

Herrn Prof. Dr. U. Krause danke ich für die Übernahme des Vorsitzes des Prüfungsausschusses.

Bei den Herren Dr. V. Lohse, D. Negendank, G. Buschbeck sowie J. Bethge möchte ich mich für die ausführliche Unterstützung auf dem Gebiet der Gasmesstechnik bedanken. Bei den Herren D. Schmidt, A. Habib, T. Runge, S. Scheider sowie D. Arndt möchte ich mich einerseits für die wissenschaftliche Unterstützung im Rahmen der Doktorarbeit sowie andererseits für die Mithilfe bei den Versuchsaufbauten und der Versuchsdurchführung bedanken.

Und nicht zuletzt danke ich meiner Ehefrau, meinen Eltern sowie Familie Elsaeßer, die mich auf meinem Lebensweg in jeglicher Hinsicht unterstützt und damit den Grundstein für meinen Erfolg gelegt haben.

Kurzreferat

Eine Vielzahl von Schwergasunfällen der Vergangenheit verdeutlichen das Gefahrenpotential, das von brennbaren und vor allem toxischen Schwergasen ausgeht. Zur Bestimmung des Gefährdungsbereichs müssen in diesem Fall Ausbreitungsabschätzungen angestellt werden. Während der Gefährdungsbereich für brennbare Gase auf das Erreichen der unteren Explosionsgrenze (c > 1 Vol.-%) beschränkt ist, so ergibt sich bei der Freisetzung toxischer Gase ein weitaus größerer Gefahrenbereich. Toxische Gase haben auch in sehr geringen Konzentrationen (c < 3000 ppm) noch ein hohes Schadenspotenzial.

Zur Abschätzung der Schwergasausbreitung kann die VDI-Richtlinie 3783 verwendet werden. Diese Richtlinie entspricht zurzeit dem Stand des Wissens in Deutschland. Die VDI 3783 macht keine Angaben zur Höhe und Breite der Schwergaswolke, welche sowohl im Rahmen von quantitativen Risikoanalysen als auch evtl. für die Kopplung eines Lagrangeschen-Partikelmodells mit dem Schwergasmodell erforderlich sind. In der vorliegenden Arbeit wurden deshalb Berechnungen mit verschiedenen Modellen zur Erweiterung der VDI 3783 durchgeführt. Die Berechnungsergebnisse wurden mit experimentellen Untersuchungen zur Länge, Breite und Höhe des Schwer- und Neutralgasbereichs verglichen und bewertet. Darüber hinaus wurde der Einfluss der Quellhöhe auf die Schwergasausbreitung untersucht. Hierbei wurde festgestellt, dass sich die Länge des Schwergasbereichs mit zunehmender Quellhöhe verringert und ab einer kritischen Höhe kein Schwergasbereich am Boden mehr vorliegt. Für Freisetzungshöhen über der kritischen Quellhöhe ist der Schwergaseffekt vernachlässigbar und es ist keine Berechnung nach der VDI 3783, Blatt 2 erforderlich.

Die Freisetzung des Schwergases kann hierbei sowohl aus einer verfahrenstechnischen Anlage als auch aus handelsüblichen Gasflaschen erfolgen. Für die Freisetzung aus handelsüblichen Gasflaschen wurde ein mathematisches Modell zur Vorhersage des zeitabhängigen Massenstroms weiterentwickelt. Dieses Modell beinhaltet die Berechnung der instationären Wärmeleitung in der Flaschenwand, eine komplexe Beschreibung der Energieund Massenbilanzen sowie die Berücksichtigung einer Zweiphasenströmung. Zur Validierung des Modells wurden experimentelle Untersuchungen mit verschiedenen Gasen, Gasflaschengrößen und –typen durchgeführt. Experimentelle Ergebnisse und Berechnungen zeigen eine gute Übereinstimmung.

Abstract

The hazardous potential of accidental heavy gas releases, especially those involving flammable and toxic gases, is widely known. In order to predict the area in which these gases are in hazardous concentrations, an estimation of the dispersion of these gases must be carried out. While the hazardous area for flammable heavy gases is determined by the lower explosion limit (ca. > 1 vol.%), the release of toxic heavy gases can result in a much larger hazardous area, as toxic gases, even in very low concentrations (ca. < 3000 ppm), have the potential to be highly damaging.

The VDI guideline 3783, which is considered as state-of-the-art in Germany, can be used to estimate the dispersion of heavy gases. However, VDI 3783 gives no method for the prediction of the height and width of a heavy gas cloud, which are both required for quantitative risk analysis as well as for a possible coupling of a Lagrangian particle model with the VDI 3783 heavy gas dispersion model. Therefore, further calculation methods were used to describe these dimensions and were evaluated against, experimental studies of the length, width and height of the heavy and neutral gas field. The influence of the source height on the heavy gas dispersion was also investigated. It was found that elevating the source leads to a reduction of the length of the heavy gas area. Once the source reaches a critical height, a heavy gas area at ground level no longer exists. Therefore, for release heights above the critical height, heavy gas dispersion effects can be neglected and the calculation of the heavy gas area according to VDI 3783 part 2 is therefore no longer necessary.

The release of heavy gases can occur from a process plant as well as from a standard gas bottle. For the release of heavy gases from standard gas bottles, a mathematical model has been developed to predict the time-dependent mass flow. This model takes into account the time-dependent temperature distribution of the bottle wall, and contains a detailed description of the energy and mass balances as well as the possible occurrence of two-phase flow. To validate the model experimental studies with various gases, gas bottle sizes and bottle types were performed. The model predictions and the experimental data show good systematic agreement.

Inhaltsverzeichnis

S.	
DanksagungI	
KurzreferatII	[
AbstractII	Π
InhaltsverzeichnisIV	V
SymbolverzeichnisV	II
AbkürzungsverzeichnisX	Ι
1. Einleitung und Zielsetzung1	
2. Literaturüberblick – Stand der Forschung 4	
2.1. Freisetzung von druckverflüssigten Gasen4	
2.2. Ausbreitung von Schwergasen	
3. Experimentelle Untersuchungen1	5
3.1. Messtechnik	5
3.1.1. Messung Massenstrom1	5
3.1.2. Messung von Gaskonzentrationen	6
3.1.2.1. Kalibration R134a-Sensoren1	7
3.1.2.1.1. Einsatzmöglichkeiten	8
3.1.2.1.2. Fehlerabschätzung	9
3.1.2.1.3. Korrektur Feuchte, Temperatur und	
Windgeschwindigkeit2	1
3.1.2.2. Kalibration Sauerstoffsensoren	3
3.1.2.2.1. Fehlerabschätzung	3
3.1.2.2.2. Korrektur	7
3.1.3. Meteorologische Messdaten	7
3.1.3.1. Ultraschallanemometer	7
3.1.3.2. MEgicDisk	9
3.2. Verwendetes Schwergas	0
3.3. Versuchsaufbau und -durchführung	1
3.3.1. Freisetzungsversuche	1
3.3.1.1. Freisetzung aus der Gasphase	1
3.3.1.2. Freisetzung aus der Flüssigphase	6
3.3.1.3. Liegende Flasche	8
3.3.2. Ausbreitungsversuche40	0
3.3.2.1. Abmessungen des Schwergasbereichs40	0
3.3.2.1.1. Länge	0
3.3.2.1.2. Breite	2
3.3.2.1.3. Höhe	4
3.3.2.2. Länge des Schwer- und Neutralgasbereichs4	5
3.3.2.3. Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des Schwergasbereichs 4	7
3.4. Ergebnisse experimenteller Untersuchungen	8
3.4.1. Freisetzungsversuche	8

3.4.1.1. Leckage aus der Gasphase	48
3.4.1.2. Leckage aus der Flüssigphase	59
3.4.1.3. Liegende Flasche	62
3.4.2. Ausbreitungsversuche	66
3.4.2.1. Abmessungen des Schwergasbereichs	66
3.4.2.1.1. Länge	67
3.4.2.1.2. Breite	68
3.4.2.1.3. Höhe	69
3.4.2.2. Länge Schwer- und Neutralgasbereich	70
3.4.2.3. Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des Schwergasbereichs	72
4. Mathematische Berechnungsgrundlagen	73
4.1. Stofffreisetzung aus Druckgasflaschen	73
4.1.1. Modellannahmen	74
4.1.2. Berechnungsverfahren	74
4.1.2.1. Äußerer Wärmeübergang	75
4.1.2.2. Innerer Wärmeübergang	76
4.1.2.2.1. Wand – Gasphase	76
4.1.2.2.2. Wand – Flüssigphase	77
4.1.2.2.3. Gasphase – Flüssigphase	80
4.1.2.3. Energiebilanz	80
4.1.2.4. Massenbilanz und Aufwallmodell	82
4.2. Gasausbreitungsmodelle	89
4.2.1. VDI 3783, Blatt 2	89
4.2.1.1. Standardverfahren	89
4.2.1.2. Modifiziertes Verfahren	92
4.2.2. Breitenmodell von Britter	94
4.2.3. Austal 2000	96
4.2.4. ANSYS CFX	97
5. Numerische Simulationen	99
5.1. Freisetzungsversuche	99
5.1.1. Bestimmung der Ausflussziffern	99
5.1.2. Freisetzung aus einer stehenden Flasche	101
5.1.2.1. Gas- und Zweiphasenströmung	101
5.1.2.2. Verallgemeinerung der Berechnungsmethode	108
5.1.2.3. Parameterstudie – Einflussfaktoren auf den Massenstrom	111
5.1.2.4. Variation verschiedener Blasensiedemodelle	121
5.2. Ausbreitungsversuche	125
5.2.1. VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2	125
5.2.1.1. Länge des Schwergasbereichs	126
5.2.1.2. Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die Länge des	
Schwergasbereichs	127
5.2.2. VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2 gekoppelt mit Breitenmodell von Britter	129
5.2.2.1. Breite des Schwergasbereichs	130

5.2.2.2. Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die Breite des	
Schwergasbereichs	132
5.2.2.2.1. Breitenmodell von Britter	133
5.2.2.2. VDI 3783, Blatt 2 (modifiziert) und Breitenmodell	
von Britter	134
5.2.3. Austal 2000	135
5.2.3.1. Länge des Neutralgasbereichs	136
5.2.3.2. Einfluss der Bodenrauigkeit auf die Länge des	
Neutralgasbereichs	138
5.2.3.3. Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die Länge des	
Neutralgasbereichs	139
5.2.4. ANSYS CFX	140
5.2.4.1. Länge der Schwergaswolke (Schwer- und Neutralgas)	140
5.2.5. Abschätzungsformeln	143
5.2.5.1. Breite und Höhe des Schwergasbereichs und Kopplung	
Austal 2000	143
5.2.5.2. Einfluss der Quellhöhe auf den Schwergasbereich	146
6. Zusammenfassung und Schlussfolgerungen	148
7. Ausblick auf zukünftige Untersuchungen	152
8. Literaturverzeichnis	154
Anhang A	162
A 1: Überblick über bisherige Experimentalreihen zur Schwergasausbreitung	162
A 2: Ziel- und Fragestellungen bisheriger Experimentalreihen zur	
Schwergasausbreitung	166
A 3: Länge der Schwergaswolke – Anordnung der Messpunkte	175
A 4: Breite der Schwergaswolke – Anordnung der Messpunkte	175
A 5: Höhe der Schwergaswolke – Anordnung der Messpunkte	176
A 6: Länge des Schwer- und Neutralgasbereichs - Anordnung der Messpunkte	176
A 7: Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des Schwergasbereichs - Anordnung der	
Messpunkte	176
A 8: Länge der Schwergaswolke – VDI 3783, Blatt 2	177
A 9: Länge der Schwergaswolke – VDI 3783, Blatt 2 (modifiziert)	178
A 10: Breite der Schwergaswolke – VDI 3783, Blatt 2 gekoppelt mit Breitenmodell vo	on
Britter	179
A 11: Breite der Schwergaswolke – Einfluss der Windgeschwindigkeit auf das	
Breitenmodell von Britter	180
A 12: Breite der Schwergaswolke – Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die VDI 37	/83,
Blatt 2 (modifiziert) und Breitenmodell von Britter	181
A 13: Konzentrationsverlauf Neutralgas – Austal 2000	182
Abbildungsverzeichnis	183
Tabellenverzeichnis	186

Symbolverzeichnis

Symbol	Einheit	Bedeutung
а	$[m^2/s]$	Temperaturleitfähigkeit
Α	$[m^2]$	Fläche
b	[-]	Korrelationsparameter für den Siedeverzug
С	$[kg/m^3]$	Gaskonzentration
С	[-]	Ausflussfunktion
C _M	$[kg/m^3]$	Maximale Gaskonzentration an einem festen Ort bei einer Gasfreisetzung
c_p	[J/kgK]	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
C _{uM}	$[kg/m^3]$	Maximale Gaskonzentration an einem festen Ort bei mehreren
		Gasfreisetzungen bei unterschiedlichen u_{aR}
C_v	[J/kgK]	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen
C_{χ}	$[kg/m^3]$	Lokale Volumenkonzentration in x-Richtung
d	[m]	Durchmesser
D	[m]	Durchmesser der Freisetzungsquelle
DiffC	[-]	Diffusionsklasse nach Pasquill
dir	[°]	Windrichtung
E	[/]	Energie
Fak	[—]	Windfaktor
FG	[%]	Füllgrad
g	$[m/s^2]$	Erdbeschleunigung
h	[m]	Höhe
Δh_v	[J/kg]	Verdampfungsenthalpie
k	[m]	Dicke
\overline{k}	$[m^2/s^2]$	Turbulenzparameter für die kinetische Energie
l _{ch}	[m]	Charakteristische Länge
L _b	[m]	Auftriebslängenskala
L _c	[m]	Charakteristisches Längenmaß nach VDI 3783, Blatt 2
$L_h(x)$	[m]	Breite der Schwergaswolke am Punkt x nach Britter
L _u	[m]	Längenausbreitung der Schwergaswolke gegen den Wind
т	[kg]	Masse
'n	[kg/s]	Massenstrom
М	[—]	Relative Molekülmasse
m_T	[—]	Exponent der Temperaturschichtung
Ν	[-]	Ungleichgewichtsfaktor
p	[Pa]	Druck
ġ	$[W/m^{2}]$	Wärmestromdichte
Ż	[W]	Wärmestrom

Symbol	Einheit	Bedeutung
Rh	[%]	Relative Luftfeuchte
R_L	[Ω]	Abschlusswiderstand
RMS	[%]	Streuung
R_p	$[\mu m]$	Oberflächenrauigkeit
Rs	[Ω]	Sensorwiderstand in verschiedenen Konzentrationen
$R0_{(100ppm)}$	[Ω]	Sensorwiderstand für 100 ppm Gas in Luft
t	[<i>s</i>]	Zeit
Т	[<i>K</i>]	Temperatur
T_c	[<i>s</i>]	Charakteristisches Zeitmaß nach VDI 3783, Blatt 2
t _e	[<i>s</i>]	Entlöseverzugszeit
u	[m/s]	Strömungsgeschwindigkeit
u_{aR}	[m/s]	Umgebungsgeschwindigkeit in Referenzhöhe
U _c	[m/s]	Charakteristisches Geschwindigkeitsmaß nach VDI 3783, Blatt2
$u_{g,max}$	[m/s]	Gasleerrohrgeschwindigkeit
u_x	[m/s]	Anteil der Windgeschwindigkeit in x-Richtung
u_y	[m/s]	Anteil der Windgeschwindigkeit in y-Richtung
u_{∞}	[m/s]	Aufstiegsgeschwindigkeit einer einzelnen Blase
u^*	[m/s]	Schubspannungsgeschwindigkeit
v	$[m^3/kg]$	Spezifisches Volumen
V	$[m^{3}]$	Volumen
<i>॑</i> V	$[m^{3}/s]$	Volumenstrom
V_c	[V]	Arbeitsspannung
V _{RL}	[V]	Spannungsausgabe des Sensors unter einer definierten
VO	[1/]	Spannungsausgabe des Sensors bei 100 ppm
v 0 _(100ppm)	["] [m/c]	Lakele Windgeschwindigkeit in der Höhe z
v_z	[m/s]	Windgeschwindigkeit in der Höhe 10m
V_{10m}	$\begin{bmatrix} II \end{bmatrix}$	Arbeit
Y Y	[m]	Längenkoordinate
x.	[]	Strömungsmassengasgehalt
x(c)	[m]	Länge der Schwergaswolke bis zum Erreichen der
<i>x</i> (c)	[]	Konzentration <i>c</i>
Xdh	[_]	Dimensionalose Blasenaufstiegsgeschwindigkeit
uD Xaamassan	[m]	Gemessene Länge des Schwergasbereichs
x(1 Vol%)	[m]	Länge der Schwergaswolke nach VDI 3783. Blatt 2
v	[m]	Breitenkoordinate
y(1 Vol%	[m]	Breite der Schwergaswolke nach VDI 3783. Blatt 2
Z	[m]	Höhenkoordinate
z(1 Vol%)	[m]	Höhe der Schwergaswolke nach VDI 3783. Blatt 2
	L 3	. ,

Griechische Buchstaben

Symbol	Einheit	Bedeutung
α	$[W/m^2K]$	Wärmeübergangskoeffizient
β	[1/K]	Wärmeausdehnungskoeffizient
γ	$[kg/s^2]$	Oberflächenspannung
ε	[—]	Emissionsgrad
$\bar{\varepsilon}$	$[m^2/s^3]$	Turbulenzparameter für die isotrope Dissipationsrate
ε_{EQ}	[—]	Volumetrischer Gasgehalt im engsten Querschnitt
ε_0	[—]	Leerraum-Volumen-Verhältnis
η	[kg/ms]	Dynamische Viskosität
θ	[°]	Randwinkel
κ	[-]	Isentropenexponent des Gases
λ	[W/mK]	Wärmeleitfähigkeit
μ	[-]	Ausflussziffer
ν	$[m^2/s]$	Kinematische Viskosität
ρ	$[kg/m^3]$	Dichte
σ	$[W/m^2K^4]$	Stefan-Boltzmann-Konstante
arphi	[—]	Einstrahlzahl
χ	[%]	Normierte Konzentration
$\overline{\chi}$	[%]	Mittlere normierte Konzentration
Ψ	[—]	Flächenverhältnis
Ω	[-]	Druckverhältnis
ω	[-]	Kompressibilitätsfaktor

Indizes Symbol

а	außen
an	Anemometer
Aus	Auströmung
В	Blase
BH	Behälter
BQ	Behälterquerschnitt
BS	Blasensieden
сс	kontinuierlich
ci	schlagartig
DWD	Wetterdaten stammen vom DWD
е	effektiv
ERW	Erwärmung
erzw	erzwungen
EXP	Expansion

Bedeutung

Symbol	Bedeutung
FK	Freie Konvektion
fl	Flüssigkeit
FV	Flaschenventil
g	Gas
GF	Gasflasche
i	innen
ideal	theoretisch perfekt (adiabat, reibungsfrei)
КОМР	Kompression
krit	kritisch
L	Luft
lam	laminar
max	maximal
min	minimal
Misch	Mischung
N2	Stickstoff
02	Sauerstoff
Р	Gemischpegel
q	Freisetzungsquelle
r	reduziert
S	Sieden
STR	Strahlung
turb	turbulent
и	Umgebung
v	verdampfen
V	Verdampfung
VDI	Umgerechnet mit der VDI 3783, Blatt 1
W	Wand
0	Anfangswert/Quellaustritt
2ph	zweiphasig
10min	über einen Zeitraum von 10 Minuten gemittelt

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Bedeutung
AD-Wandler	Analog-Digital-Wandler
AEGL	Acute Exposure Guideline Levels
AZ	Ausflussziffer
BAM	Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
CFD	Computational Fluid Dynamics
CPU	Central Processing Unit
DGL	Differenzialgleichung
DIN	Deutsches Institut für Normung
DWD	Deutscher Wetterdienst
EN	Europäische Norm
ERPG	Emergency Response Planning Guidelines
FG	Füllgrad
FID	Flammenionisationsdetektor
Fm	Figaro-Sensor Nr. m
FQ	Freisetzungsquelle
HWR	Hauptwindrichtung
ISO	International Organization for Standardization
O2-Sn	Sauerstoffsensor Nr. n
TTS	Testgelände Technische Sicherheit
USA	Ultraschallanemometer
USV	Unabhängige Stromversorgung
UZD	Untere Zünddistanz
VDI	Verein Deutscher Ingenieure

1. Einleitung und Zielsetzung

In der weltweiten industriellen Produktion werden Gase in einer beträchtlichen Anzahl produziert, verarbeitet, transportiert oder gelagert. Ein nicht unerheblicher Teil dieser Gase sind aufgrund ihres hohen Molekulargewichts oder der niedrigen Temperaturen, die sie bei einer Unfall bedingten Freisetzung annehmen würden, schwerer als Luft. Zu den bekanntesten brennbaren, schweren Gasen gehören hierbei sicherlich Liquefied Petroleum Gas (LPG) und Liquefied Natural Gas (LNG) sowie zu den toxischen, schweren Gasen Chlor und Ammoniak. Schwerwiegende Schwergasunfälle der Vergangenheit, wie z.B. Bhopal (1984) [134], ebenso das Flüssiggasunglück in Viareggio (2009) [115] zeigen das große Schadenspotential, das von brennbaren und vor allem toxischen Schwergasen ausgeht und verdeutlichen, dass die Handhabung dieser häufig druckverflüssigt oder tiefkalt vorliegenden Gase mit Sicherheitsrisiken verbunden ist. Sowohl Hartwig [48] als auch Schnatz [109] stellten im Rahmen ihrer Untersuchungen verschiedener Störfälle fest, dass die Folgen einer ungewollten Schwergasfreisetzung üblicherweise zu höheren Schäden führt als eine vergleichbare Freisetzung von leichten oder dichteneutralen Gasen.

Grund hierfür ist das spezifische Ausbreitungsverhalten schwerer Gase. Während ein Leichtgas, aufgrund der geringeren Dichte im Vergleich zu Luft, auftreibt, verhält sich ein Schwergas genau gegenteilig. Ein Schwergas hat eine ausgeprägte Eigendynamik und breitet sich in Form einer relativ flachen Wolke bodennah aus und kann in Bodenunebenheiten fließen. Das hat zur Folge, dass es Bodenvertiefungen ausfüllen, Bodenrinnen entlang fließen sowie sich in Gebäudekellern sammeln kann. Dort kann ein Schwergas relativ lange verweilen und über einen längeren Zeitraum eine Gefahr für Mensch und Umwelt darstellen, wie aktuelle Unfälle mit CO_2 wieder gezeigt haben [4].

Neben Schwergasfreisetzungen in größerem Maßstab, wie z.B. aus verfahrenstechnischen Anlagen bei Störfällen, stellen auch Schwergasfreisetzungen in kleinerem Maßstab, wie z.B. aus handelsüblichen Druckgasflaschen, eine erhebliche Gefahr für Mensch und Umwelt dar. Zur Einschätzung dieser Gefahr ist es notwendig, Auswirkungsbetrachtungen anzustellen. Wesentliche Elemente dieser Auswirkungsbetrachtungen sind die Berechnung des freigesetzten Massenstroms und die Gasausbreitung, die bei schweren Gasen große Entfernungen erreichen kann.

Um Rückschlüsse auf die Gasausbreitung ziehen zu können, muss der Massenstrom bekannt sein. Bei der Freisetzung von schweren Gasen aus verfahrenstechnischen Anlagen mit relativ kleinem Austritt kann aufgrund des geringen Druckverlusts von einem relativ konstanten

Massenstrom ausgegangen werden. Die Freisetzung aus handelsüblichen Gasflaschen hingegen führt zu einem zeitlich stark abhängigen Massenstrom, der bei der Gasausbreitung berücksichtigt werden muss. In beiden Fällen kann das Schwergas sowohl einphasig (gasförmig oder flüssig) als auch zweiphasig (gasförmig und flüssig) freigesetzt werden. Die Art der Freisetzung hat hierbei entscheidenden Einfluss auf die anschließende Gasausbreitung. Eine Freisetzung kann hierbei durch einen Unfall oder im Rahmen einer Freisetzung durch Unbefugte hervorgerufen werden.

Die Abschätzung der Gasausbreitung kann beispielsweise mit der VDI-Richtlinie 3783 erfolgen. Diese Richtlinie entspricht zurzeit dem Stand des Wissens in Deutschland [12]. Das Blatt 2 [125] der Richtlinie beschreibt die Modellierung der Schwergasausbreitung und basiert auf Windkanalexperimenten für 25 Ausbreitungsgebiete mit unterschiedlichen Strömungshindernissen [70]. Es findet Anwendung bei der Bestimmung explosionsgefährdeter Bereiche im Rahmen einer störfallartigen Ausbreitung. Der explosionsgefährdete Bereich wird dabei durch die untere Explosionsgrenze beschrieben. Eine Übersicht über die Explosionsgrenzen wichtiger brennbarer Gase in Luft ist und deren Einflussparameter werden in Brandes et al. [8] beschrieben. Für die Ausbreitung leichter und dichteneutraler Gase (VDI 3783, Blatt 1 [124]) wird ein Gaußmodell eingesetzt. Bei der Berechnung der Ausbreitung eines toxischen Schwergases erfolgt eine gekoppelte Berechnung beider Modelle, bei der im Übergangsbereich eine Interpolation der Konzentrationen erfolgt. Der Gefährdungsbereich toxischer Gase ist im Vergleich zu brennbaren Gasen deutlich größer. Grund hierfür ist das hohe Schadenspotential, das von toxischen Gasen, auch noch in sehr geringen Konzentrationen, ausgeht.

Ziel dieser Arbeit ist es einerseits, Modelle für die Gasfreisetzung aus Druckgasflaschen zu entwickeln und andererseits vorhandene Ansätze zur Schwergasausbreitung weiter zu entwickeln. Für den Freisetzungsprozess aus handelsüblichen Gasflaschen wurde ein Berechnungsmodell zur Vorhersage des Massenstroms einer Einphasenund Zweiphasenströmung entwickelt. Dieses Modell basiert auf den Energie- und Massenbilanzen von Beynon et al. [3] sowie der Modellierung der instationären Behältererwärmung nach Acikalin [1] und wurde um eine Zweiphasenströmung erweitert. Das Eintreten der Zweiphasenströmung führt zu einer weitreichenden Abänderung der Energie- und Massenbilanzen. Zur Validierung des Berechnungsverfahrens wurden experimentelle Untersuchungen durchgeführt.

Der Fokus der Untersuchungen zum Ausbreitungsprozess lag auf der VDI Richtlinie 3783. Bei den experimentellen Untersuchungen im Windkanal, aus denen das Blatt 2 für die

Schwergasausbreitung abgeleitet worden ist, sind keine Messungen zur Breite und Höhe der Schwergaswolke durchgeführt worden. Durch die Kopplung des Blattes 2 mit z. B. einem Modell von Britter [10] zur Bestimmung der Breite der Schwergaswolke soll eine Erweiterung der VDI 3783 geprüft werden. Die Angaben zur Höhe und Breite der Schwergaswolke sind sowohl für Ausbreitungsrechnungen im Rahmen von quantitativen Risikoanalysen als auch evtl. für die Kopplung des Lagrangeschen-Partikelmodells mit dem Schwergasmodell erforderlich. Zurzeit beschäftigt sich ein VDI-Arbeitskreis mit der Überarbeitung der VDI 3783. Es finden Überlegungen statt, das Gaußmodell aus Blatt 1 durch ein Lagrangesches-Partikelmodell (AUSTAL 2000) zu ersetzten. Im Rahmen der Arbeit wurden Berechnungen mit verschiedenen Modellen zur Erweiterung der VDI 3783 durchgeführt und mit experimentellen Ergebnissen verglichen.

Bei allen durchgeführten experimentellen Untersuchungen handelt es sich um Naturexperimente. Ein Vergleich mit den Modellen, die im Windkanal oder in ruhender Atmosphäre erzeugt wurden, soll zeigen, ob diese auf reale Anwendungsfälle unter Umgebungsbedingungen übertragbar sind. Neben der Validierung der Modelle und der Modellkopplungen können so Aussagen zur Genauigkeit getroffen werden.

Die zur Ermittlung der Messwerte notwendige Messtechnik, der Versuchsaufbau sowie die experimentellen Ergebnisse an sich sind in Kapitel 3 beschrieben. Die mathematischen Grundlagen der verwendeten Berechnungsmodelle werden in Kapitel 4 erläutert. Der Vergleich der Berechnungsergebnisse mit den experimentellen Ergebnissen wird in Kapitel 5 dargestellt. Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung der Ergebnisse in Kapitel 6 und einem Ausblick für zukünftige Untersuchungen in Kapitel 7.

2. Literaturüberblick – Stand der Forschung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit zwei großen Forschungsfeldern. Der Übersicht halber unterteilt sich der Literaturüberblick daher in die Bereiche Freisetzung von druckverflüssigten Gasen und Ausbreitung von Schwergasen.

2.1. Freisetzung von druckverflüssigten Gasen

Die physikalischen Vorgänge sowie die mathematische Beschreibung des Freisetzungsprozesses von unter Druck stehenden Gasen wurde in einer Vielzahl von Veröffentlichungen beschrieben. Auf die wichtigen Ergebnisse dieser Veröffentlichungen wird im nachfolgenden eingegangen.

Die Druckentlastung von Gas/Dampf-Flüssigkeitssystemen aus Chemiereaktoren in Kombination mit Sicherheitseinrichtungen wie Sicherheitsventil oder Berstscheibe wurde von Friedel und Purps (1982) [34] untersucht. Hierbei beschrieben sie den Einfluss einer Zweiphasenströmung auf die Auslegung des Entlastungsquerschnitts. Dieser muss im Falle einer Zweiphasenströmung größer im Vergleich zu einer reinen Gasströmung bemessen werden. Die Vorhersage einer Zweiphasenströmung und die Auslegung der Entlastungseinrichtung seien noch nicht zuverlässig möglich. Mit ihren experimentellen Untersuchungen stellten sie Unterlagen zur Auslegung von Entlastungsquerschnitten bereit.

In einer weiteren Veröffentlichung stellen Friedel und Purps (1984) [35] erstmals Modelle und Berechnungsverfahren für die plötzliche Druckentlastung von Gas/Dampf-Flüssigkeitssystemen dar. Hierbei beschreiben sie, dass die Auslegung der Entlastungsquerschnitte von Sicherheitseinrichtungen wesentlich von den thermodynamischen und fluiddynamischen Vorgängen sowie durch die parallel ablaufenden chemischen Umsetzungen im Reaktionsbehälter und in der Abblaseleitung bestimmt wird. Eine exakte Berechnung gestaltet sich aufgrund der sehr komplexen Wechselbeziehungen und unzureichender Detailkenntnisse schwierig. Sie beschreiben den derzeitigen Kenntnisstand und nennen die wichtigsten Einflussgrößen auf die Druckentlastung. Darüber hinaus stellten sie die in der Literatur aufgeführten Berechnungsverfahren zur Druckentlastung experimentellen Ergebnissen gegenüber. Als Ergebnis daraus konnte festgehalten werden, dass es kein einheitliches allgemeingültiges Berechnungsverfahren für die exakte Dimensionierung der notwendigen Entlastungsquerschnitte für die Zweiphasenausströmung gibt, welches sich nur auf die stofflichen, geometrischen und betrieblichen Vorgaben stützt.

Friedel et al. (1985) [33] beschäftigt sich im Rahmen eines BMFT-Forschungsberichts mit der Untersuchung von Sicherheitseinrichtungen an Druckbehältern zur Druckentlastung bei Gas/Dampf-Flüssigkeitsreaktionen. Im Fokus dieses Berichts standen die Untersuchung des Gemischaufwallens und die damit verbundene Zweiphasenströmung. Ziele der Untersuchungen waren die Ableitung einer halbempirischen Beziehung zur Siedeverzugszeit sowie die Auswahl geeigneter Modelle zur Beschreibung des kritischen Massenstroms bei einer Zweiphasenströmung. In ihrem Bericht beschreiben sie das Phänomen des Behälteraufwallens sehr detailliert. Es wurde ein Rechenprogramm entwickelt, bei dem sich der im Behälter einstellende Druckverlauf alleine aufgrund der Vorgaben der thermodynamischen und geometrischen Anfangs- und Randbedingungen vorausberechnen lässt. Dieses Modell ist jedoch nur für die im Rahmen der experimentellen Untersuchungen verwendeten halogenierten Kohlenwasserstoffe R12, R114 und R22 gültig.

Die Druckentlastung von chemischen Reaktoren wurde ebenfalls von Hardekopf und Mewes (1989) [43] untersucht. Im Rahmen der Untersuchungen mit den Kältemitteln R12 und R114 wurden die Konzentration des Gemisches sowie der Druck und der Füllgrad zu Anfang der Druckentlastung variiert. Mittels eines Dampfgehaltsmessgebers konnte der austretende zweiphasige Massenstrom gemessen werden. Der Aufwallprozess wurde in einem Druckgasbehälter aus Glas aufgezeichnet. Mit den Ergebnissen dieser Untersuchungen wurde ein Berechnungsverfahren hergeleitet, um den volumetrischen Dampfgehalt im Behälter und den zeitlichen Verlauf der Aufwallhöhe eines zweiphasigen Gemisches zu berechnen. Weitere sowie detailliertere Ergebnisse hierzu sind in Hardekopf (1988) [44] beschrieben.

Ein zentrales Werk wurde von Wehmeier (1994) [132] im Rahmen eines VDI-Forschungsberichts veröffentlicht. Dieser Bericht beschäftigt sich mit der theoretischen und experimentellen Untersuchung der Vorgänge bei der Druckentlastung von Chemiereaktoren. Im Rahmen des Berichts wurde ein Rechenprogramm zur zeitlichen Vorausberechnung der Druckentlastung entwickelt. Die Ergebnisse dienen als Grundlage für die Auslegung von Entlastungsquerschnitten. Darüber hinaus werden der Einfluss einer überlagerten chemischen Reaktion experimentell und analytisch untersucht, sowie bisher entwickelte Modelle zur Druckentlastung auf ihre Vorhersagegenauigkeit hin überprüft. Hierbei liegt ein besonderes Augenmerk auf dem Vergleich der Modelle zur Zweiphasenmassenstromdichte sowie bei der Erstellung eines eigenen Modells, das die Dampfverteilung im Reaktor und den Dampfgehalt im Austrittsstutzen bei einer Druckentlastung beschreibt.

Der Druckentlastung siedender aufwallender, reaktiver und nicht-reaktiver sowie viskoser Stoffsysteme widmeten sich Hoff et al. (2001) [53]. Im Rahmen ihrer Untersuchungen stellten sie fest, dass der Entlastungsvorgang bei niedrig- und hochviskosen Stoffsystemen prinzipiell ähnlich ist, sich aber vor allem im Druckverlauf und im Massenaustrag unterscheidet. Der Druckabfall erfolgt bei geringerer Viskosität zu Beginn schneller, wohingegen der Masseaustrag aufgrund des höheren Strömungsdampfgehaltes in der Abblaseleitung geringer war. Ziel der Untersuchungen war die Entwicklung von Methoden zur Auslegung von Notentspannungseinrichtungen und Auffangsystemen bei der Druckentlastung höher viskoser Stoffe.

Der Effekt des Siedeverzugs in Kältemitteln bei einer plötzlichen dampfraumseitigen Druckentlastung bei einer Notentspannung aus dem Sättigungszustand wurde von Friedel et al. (1985) [32] beschrieben. Sie definierten die Siedeverzugszeit hierbei als die Zeitspanne vom Freigeben des Entlastungsquerschnitts bis hin zur Bildung der ersten sichtbaren Blasen. In ihrer Veröffentlichung untersuchten sie den Einfluss des Füllgrades sowie den Einfluss des Entlastungsquerschnitts auf die Siedeverzugszeit. Dabei stellten sie fest, dass die Siedeverzugszeit mit kleiner werdendem Anfangsfüllstand größer und mit größer werdender Entlastungsöffnung kürzer wird. Mittels der experimentellen Versuche mit den Kältemitteln R12, R22 und R114 und einer nichtlinearen Regressionsrechnung ergab sich als Ergebnis eine erste Potenzbeziehung für die Siedeverzugszeit. Diese Beziehung gestattet eine zufriedenstellende Wiedergabe der gemessenen Siedeverzugszeiten der zuvor aufgeführten Kältemittel mit etwa ± 30 %.

Auf die Modellierung und Beschreibung der Zweiphasenströmung spezialisierte sich Schmidt (1997) [108]. Im Mittelpunkt seiner Untersuchungen stand hierbei die Auslegung von Sicherheitsventilen für das Durchströmen mit Gas/Dampf-Flüssigkeitsgemischen. Die Ergebnisse seiner Untersuchungen sind hierbei in Diener und Schmidt (2004) [21], Schmidt (2011) [106] sowie Schmidt (2012) [107] dargestellt. In den beiden letztgenannten Veröffentlichungen beschreibt Schmidt ein Verfahren zur Unterscheidung des Einsetzens einer Einphasen- oder Zweiphasenströmung. Der Stand des Wissens zur mathematischen Beschreibung einer Zweiphasenströmung im Rahmen einer Druckentlastung ist in der ISO 4126 (2010) [55] dargestellt.

Weitere Veröffentlichungen auf dem Gebiet der Zweiphasenströmung befassen sich mit den verschiedensten Aspekten. Während sich Boccardi et al. (2008) [6] mit dem Einfluss der Geometrie des Sicherheitsventils auf die Zweiphasenströmung beschäftigen, befassen sich Nielsen (1991) [81] sowie Leung und Nazario (1990) [65] mit der Validierung verschiedener Zweiphasenströmungsmodelle.

Alle zuvor aufgeführten Veröffentlichungen beschäftigen sich mit der Auslegung von Entlastungsquerschnitten im Rahmen einer Notentlastung. Die rechtzeitige Freigabe des Entlastungsquerschnitts führt zu einem Austrag von Masse und Energie und damit zu einer Druckabsenkung im Behälter, so dass ein Behälterbersten vermieden werden kann. Ziel dieser Arbeit ist nicht die Berechnung des notwendigen Entlastungsquerschnitts, sondern die Vorhersage des eintretenden Massenstroms. Dieser nimmt bei der anschließenden Gasausbreitung eine zentrale Rolle ein.

Zur akkuraten Beschreibung des freigesetzten Massenstroms müssen Energie- und Massenbilanzen aufgestellt werden. Im Rahmen der Modellierung der instationären Behältererwärmung beschreiben Schalau et al. (2002) [99] und Acikalin (2003) [1] als zentrales Werk entsprechende Energie- und Massenbilanzen für eine Einphasenströmung. Ziel dieser Untersuchungen war es, Aussagen über die Branddauer bis zum Behälterbersten treffen zu können. Als Vereinfachungen wurden eine gleichmäßige Befeuerung entlang der Behälterachse, eine konstante Flammentemperatur sowie eine ideale Durchmischung der Gasund der Flüssigphase angenommen. Vergleiche mit experimentellen Ergebnissen zeigten, dass das Modell geeignet ist, eine Behältererwärmung durch Unterfeuerung oder durch Bestrahlung eines Unfallfeuers zu simulieren.

Beynon et al. (1988) [3] beschreibt in seiner Veröffentlichung zur Feuereinwirkung auf LPG-Tanks ein Modell zur Vorhersage des Temperatur-, Druck-, und Massenverlustverlaufs. Das Modell, welches ebenfalls von einer idealen Durchmischung der Gas- und der Flüssigphase ausgeht, wurde mit experimentellen Ergebnissen verifiziert und liefert eine gute Übereinstimmung. Es wurden Untersuchungen mit unterschiedlichen Tankgrößen und Füllgraden durchgeführt. Im Rahmen dieser Veröffentlichung werden die Energie- und Massenbilanzen bei einer Behälterbefeuerung sehr ausführlich beschrieben.

In einer weiteren Veröffentlichung präsentieren Dancer und Sallet (1990) [16] ein mathematisches Modell zur Vorhersage des Druck- und des Temperaturverlaufs in einem Druckbehälter, der entweder durch eine exotherme Reaktion innerhalb des Behälter oder von außerhalb, zum Beispiel von einem Feuer, erwärmt wird. In ihrer Veröffentlichung vergleichen sie experimentelle Ergebnisse mit ihren Berechnungen. Das entwickelte Modell ist nur anwendbar für lange horizontale zylindrische Behälter. Dieser kann entweder nur mit Flüssigkeit, nur mit Gas oder mit beidem gleichzeitig gefüllt sein. In ihren Modellannahmen gehen sie davon aus, dass der durch das Sicherheitsventil entweichende Massenstrom im Vergleich zum Behältervolumen so gering ist, dass es zu keinem merklichen Druckabfall

kommt und die damit verbundenen Effekte vernachlässigbar sind. Darüber hinaus vernachlässigen sie den instationären Temperaturverlauf in der Behälterwand und gehen davon aus, dass es keine Temperaturunterschiede über die Wanddicke gibt.

Raj (2005) [93] beschäftigte sich ebenfalls mit Gasbehältern, die dem Feuer ausgesetzt sind. Mit einem Strahlungs-Wärmeübertragungsmodell werden die notwendigen Abstände bestimmt, damit es im Falle eines Feuers nicht zu einen Behälterbersten kommt, und mit den gesetzlichen Vorgaben der USA verglichen. Das Augenmerk der Simulationen liegt hierbei aber auf der Erwärmung der Behälteraußenwand. Erreicht diese eine gewisse Temperatur (z.B. >500 °C), so ist mit einem Behälterversagen zu rechnen. Zwar wird zwischen der Wandtemperatur im Bereich der Flüssigphase und der Gasphase unterschieden, jedoch findet eine Modellierung der innerhalb des Gasbehälters ablaufenden thermodynamischen und fluiddynamischen Prozesse nicht statt.

Wehmeier (1994) [132] beschäftigte sich im Rahmen der Modellierung des Druckentlastungsvorgangs sowohl mit der Beschreibung der Energie- und Massenbilanz für den Gasbehälter als auch mit der Modellierung einer Zweiphasenströmung. Für die Energieund Massenbilanz setzt er eine vollständige thermische Durchmischung der Gas- und Flüssigphase voraus, so dass mit einer einheitlichen Temperatur innerhalb des Gasbehälters gerechnet werden kann. Diese Energiebilanz gilt allerdings nur für den Zustand des Behälteraufwallens. In seiner Veröffentlichung beschreibt er diesen Vorgang sehr ausführlich und führt die zur Beschreibung des Phänomens bekannten Gleichungen auf. Hierbei geht er insbesondere auf die Berechnung der Dampfverteilung im Reaktor, auf die Aufwallzeit sowie auf den Dampfgehalt im Reaktorkopf ein. Er erstellt eine Berechnungsmethode zur Simulation des Druckentlastungsvorgangs, die es ermöglicht, den Druck- sowie den Massenstromverlauf zu bestimmen. Die Energiebilanz innerhalb und außerhalb der Flasche wird hierbei aber nur in einer sehr vereinfachten Form berücksichtigt.

Jede der zuvor aufgeführten Veröffentlichungen hat hierbei jedoch eine ganz spezifische Frage- oder Problemstellung, wie bspw. der Behälterunterfeuerung. Eine instationäre Wärmeleitung in die Flasche wird, ausgenommen von Acikalin (2003) [1] und Schalau et al. (2002) [99], in keinem Modell berücksichtigt. Die zuvor erläuterten Modelle sind mit starken Vereinfachungen verbunden und haben Anwendungsgrenzen, wie beispielsweise einer bestimmten Behältergröße oder -geometrie. Bei größeren Behältern sinkt das Oberfläche-Volumen-Verhältnis, so dass die Effekte durch die innerhalb der Flasche auftretenden Wärmeströme kleiner werden. Mit der Freisetzung einer einphasigen und zweiphasigen Strömung als Gesamtpaket beschäftigt sich ausschließlich Weihmeier (1994) [132]. Die

genaue Modellierung der auf den Druckentlastungsprozess einwirkenden Energie- und Massenströme ist insbesondere bei handelsüblichen Gasflaschen, die im Rahmen dieser Arbeit verwendet werden, wichtig, da diese über ein großes Oberfläche-Volumen-Verhältnis verfügen. Im Vergleich zu den von Dancer und Sallet (1990) [16] getroffenen Annahmen zur Vernachlässigung des austretenden Massenstroms bei großen Behältern und geringen Entlastungsöffnungen spielt dieser bei handelsüblichen Gasflaschen eine große Rolle und dominiert den Entspannungsprozess. Der Schwerpunkt der bisherigen Veröffentlichungen lag bei der Modellierung einer Unter- oder Befeuerung von Druckbehältern durch ein Unfallfeuer. Hierbei spielen Strahlungseffekte oder Filmsieden eine wichtige Rolle, die im Rahmen dieser Thematik vernachlässigt werden können. Die durchgeführten Versuche beschäftigen sich ausschließlich mit dem Wärmeeintrag aus den umgebenden Luftmassen.

Prozess Blasensiedens hat einen sehr starken Einfluss Der des auf den Wärmeübertragungsprozess während der Druckentspannung. Um diesen so gut wie möglich abzubilden, wurden im Rahmen dieser Arbeit eine Vielzahl von Modellen ausprobiert. Zentrale Werke zur Bestimmung des Wärmeübergangskoeffizienten beim Blasensieden stammen hierbei von Stephan und Preußer (1978) [118], Maurus (2003) [71], sowie Genske (2006) [37]. Die grundlegenden mathematischen Formeln wurden von Stephan und Abdelsalam (1980) [117] sowie von Cooper (1984) [14] beschrieben.

2.2. Ausbreitung von Schwergasen

Die Schwergasausbreitung ist ein breit aufgestellter Forschungsbereich, welcher seinen Höhepunkt in den achtziger und neunziger Jahren hatte. Ein Überblick über die bisher durchgeführten zentralen mittel- und großskaligen Experimentalreihen ist in Anhang 1 dargestellt. Für die dort angegebenen 21 Experimentalreihen werden Angaben zur Versuchsanzahl, zur Freisetzungsart (kontinuierlich, schlagartig), zur Freisetzungsdauer, zum Ausbreitungsgebiet sowie zur Literaturquelle gemacht. Die Anordnung der Versuchsreihen erfolgt hierbei chronologisch.

Wie auch die Experimentalreihe dieser Arbeit, beschäftigt sich jede der zuvor aufgeführten Experimentalreihen mit einer ganz speziellen Ziel- und Fragestellung. Diese Arbeit befasst sich mit der kontinuierlichen und impulsfreien Freisetzung von schweren Gasen. Diese Eigenschaften sind Voraussetzung für die Anwendung der VDI-Richtlinie 3783 im Rahmen von Ausbreitungsberechnungen, die zurzeit den Stand des Wissens in Deutschland darstellt. Ein Großteil der bisher durchgeführten Experimentalreihen beschäftigt sich mit schlagartigen oder impulsbehafteten Freisetzungen, die mit den Inhalten dieser Arbeit nicht zu vergleichen sind. Die Versuche mit kontinuierlichen Freisetzungen hatten zum Teil einen starken Anfangsimpuls und deutlich größere Freisetzungsmengen. In einer Vielzahl der Versuche wurde das Gas flüssig freigesetzt. Diese Arbeit befasst sich ausschließlich mit gasförmigen Freisetzungen mit deutlich geringeren Massenströmen - zwischen 10 bis 50 g/s. Insgesamt wird neben dem Schwergas- auch der Neutralgasbereich betrachtet. Zur besseren Abgrenzung werden die Ziel- und Fragestellungen der bisherigen Experimentalreihen in Anhang 2 dargestellt.

Die Ziel- und Fragestellungen der bisherigen Experimentalreihen lassen deutlich erkennen, dass die Gefahren im Bezug auf Brenngase und dessen Handhabung im Vordergrund standen. Viele der Fragestellungen beschäftigten sich z.B. mit der Größe des zündfähigen Bereichs für ein bestimmtes Gas. Die nachfolgende Tabelle 1 stellt dar, welches Gas freigesetzt und welche Zielgröße (toxisch oder brennbar) untersucht wurde. Die Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit sind vorrangig nicht an der Größe des zündfähigen Bereichs, sondern an der Länge des Schwer- und Neutralgasbereichs interessiert. Der Schwergasbereich wird hierbei nach der VDI 3783, Blatt 2 als der Bereich definiert, in dem Konzentrationen größer 1 Vol.-% vorhanden sind [125]. Die Länge des Neutralgasbereichs sowie die Ausbreitung toxischer Schwergase wurden in der Vergangenheit nur selten untersucht.

LfdNr.:	Versuchsreihe	Versuchs- anzahl	Freigesetztes Gas	brennbar (b) / toxisch (t)	Ausbreitung auf
1	Bureau of Mines I	55	LNG	b	Wasser
2	Esso/API – Matagorda Bay	17	LNG	b	Wasser
3	Bureau of Mines II	6	LNG	b	Wasser
4	Gaz de France – Bay Nantes	41	LNG	b	Wasser
5	Shell – SS Gadila	6	LNG	b	Wasser
6	DGL – Holland	1	Freon (Dichlorfluormethan; R12)	Ø	Wasser
7	Battelle/AGA – Capistrano Test	42	LNG	b	Land
	Site				
8	HSE – Porton Down	42	Freon	Ø	Land
9	LLNL – China Lake 'Avocet'	4	LNG	b	Wasser
10	LLNL – China Lake 'Burro'	1	Stickstoff (N ₂)	Ø	Wasser
		8	LNG	b	Wasser
11	Shell – Maplin Sands	20	LNG	b	Wasser
		14	Propan (C_3H_8)	b	Wasser
12	LLNL – China Lake 'Coyote'	10	LNG	b	Wasser
13	HSE – Thorney Island	28	Freon	Ø	Land
14	LLNL – Nevada Test Site	4	Ammoniak (NH ₃)	t, b	Land
	(NTS) `Desert Tortoise				
15	LLNL – NTS `Eagle´	6	Distickstofftetroxid (N ₂ O ₄)	t	Land
16	TÜV Nord – Lathen I	60	Propan	b	Land

Tabelle 1: Freigesetztes Gas und Ausbreitungsterrain bisheriger Experimentalreihen

LfdNr.:	Versuchsreihe	Versuchs- anzahl	Freigesetztes Gas	brennbar (b) / toxisch (t)	Ausbreitung auf
17	LLNL and Amoco – NTS	6	Fluorwasserstoff (HF)	t	Land
	`Goldfish´				
18	TÜV Nord und Risø – Lathen II	51	Propan	b	Land
19	Battelle – Drachhausen	2	Propan	b	Land
		6	Wasserstoff (H ₂)	b	Land
20	INERIS – Flashing Liquids in	64	Propan	b	Land
	Industrial Environments (FLIE)	30	Butan (C_4H_{10})	b	Land
21	MKOPSC – Brayton Fire	21	LNG	b	Land
	Training Field				

Der zu betrachtende Gefahrenbereich bei Brenngasen ist deutlich geringer als bei toxischen Gasen. Während die untere Explosionsgrenze der meisten Brenngase zwischen 1,5 und 15 Vol.-% liegt und unterhalb dieser Größe keine Explosion möglich ist, so ist der Gefahrenbereich bei toxischen Schwergasen weitaus größer [48]. Eine Übersicht über die untere Explosionsgrenze verschiedener brennbarer Schwergase ist in ausführlicher Form in Nabert et al. [79] dargestellt. Chlor als toxisches Gas beispielsweise wäre schon in einer Konzentration von 1000 ppm innerhalb von 10 Sekunden für einen Menschen tödlich. Auch geringere Chlor-Konzentrationen können bereits erhebliche Schäden anrichten, was den zu betrachtenden Gefahrenbereich um ein Vielfaches vergrößert und den messtechnischen Aufwand deutlich erhöht. Untersuchungen mit toxischen Schwergasen im kleinskaligen Maßstab wurden durchgeführt von Griffiths und Fryer (1988) [40], Vergison et al. (1989) [130], Dandrieux et al. (2002) [17] sowie Endregard et al. (2010) [25]. Neben rein theoretischen Betrachtungen wurden hierbei auch experimentelle Untersuchungen zu speziellen Fragestellungen durchgeführt.

Tabelle 1 lässt weiterhin erkennen, dass die Ausbreitungen zu etwa gleichen Anteilen über Wasser und über Land stattfanden. Bei der chronologisch ersten Hälfte der Experimentalreihen standen Gefahren durch den Transport von Brenngasen mit Schiffen im Vordergrund, die sich in der zweiten Hälfte dann weitestgehend auf Störfallgefahren von Flüssiggaslagern in der Nähe von Bebauungen verschoben haben. Das unterschiedliche Terrain hat Auswirkungen auf das Ausbreitungsverhalten. Unebene raue Geländeoberflächen erzeugen beispielsweise deutlich mehr Turbulenz und verringern damit die Schwergasausbreitung.

Darüber hinaus lässt sich anhand der Tabelle 2 verdeutlichen, dass fast alle Versuchsreihen der Vergangenheit Freisetzungen aus der Flüssigphase behandelt haben.

Lfd Nr.:	Versuchsreihe	Freisetzung aus der	
		Flüssigphase	Gasphase
1	Bureau of Mines I	Х	
2	Esso/API – Matagorda Bay	Х	
3	Bureau of Mines II	Х	
4	Gaz de France – Bay Nantes	Х	
5	Shell – SS Gadila X		
6	DGL – Holland X		
7	Battelle/AGA – Capistrano Test Site	Х	
8	HSE – Porton Down		Х
9	LLNL – China Lake 'Avocet'	Х	
10	LLNL – China Lake 'Burro'	Х	
11	Shell – Maplin Sands	Х	
12	LLNL – China Lake 'Coyote'	Х	
13	HSE – Thorney Island		Х
14	LLNL – Nevada Test Site (NTS)	Х	
	`Desert Tortoise		
15	LLNL – NTS `Eagle´	Х	
16	TÜV Nord – Lathen I	Х	
17	LLNL and Amoco – NTS `Goldfish'	Х	
18	TÜV Nord und Risø – Lathen II	Х	Х
19	Battelle – Drachhausen	Х	
20	INERIS – Flashing Liquids in	Х	
	Industrial Environments (FLIE)		
21	MKOPSC – Brayton Fire Training	X	
	Field		

 Tabelle 2: Gaszustand bei der Freisetzung bisheriger Experimentalreihen

Lediglich in drei Fällen wurde das Schwergas gasförmig freigesetzt, wobei sich die Experimentalreihen "HSE – Porton Down" und "HSE – Thorney Island" wesentlich von dieser Arbeit unterscheiden. In beiden Fällen wurde das Schwergas entspannt unter Umgebungsdruck und -temperatur freigesetzt. Vor der schlagartigen Freisetzung wurde das gesamte Gas in einem Kantenlänge-Kubus aufbewahrt, dessen Wände kurz vor der Freisetzung herabgelassen wurden. Eine Vermischung des Gases mit Luft vor der Freisetzung war hierbei nicht zu vermeiden [68]. In dieser Arbeit wird das Gas, das unter Umgebungstemperatur druckverflüssigt ist, rein gasförmig, kontinuierlich und impulsfrei freigesetzt. Die verbleibende dritte Messreihe mit Freisetzungen aus der Gasphase ist die Versuchsreihe "TÜV Nord und Risø – Lathen II" bei der insgesamt fünf Freisetzungsversuche mit Freisetzungsmengen von 0,17 bis 0,77 kg/s über einen Zeitraum von 105 bis 330 Sekunden durchgeführt wurden [52]. Diese Versuche hatten die Bestimmung des Einflusses von Hindernissen auf die Schwergasausbreitung als primäres Ziel. Messungen der Neutralgasausbreitung wurden nicht vorgenommen. Die Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit beschäftigen sich ausschließlich mit der hindernisfreien Ausbreitung von Schwer- und Neutralgas.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass erst ab dem Jahr 1980, also erst ab der Messreihe "LLNL - China Lake 'Burro'" Turbulenzmessungen vorgenommen wurden. Da die Turbulenzmessungen aber wichtige Größen zur Auswertung der Messergebnisse darstellen, sind die bis dato durchgeführten Experimentalreihen nur bedingt auswertbar. In den achtziger und neunziger Jahren wurden eine Vielzahl von experimentellen Untersuchungen zur Schwergasausbreitung durchgeführt. Diese beschäftigten sich im Wesentlichen mit schlagartigen oder impulsbehafteten Freisetzungen. Im Fokus der bisherigen Untersuchungen standen häufig Gefahren im Zusammenhang mit brennbaren Gasen [48]. Als wesentliche Ergebnisse dieser Versuchsreihen ergaben sich Informationen zur Länge des zündfähigen Bereichs sowie Erkenntnisse zu speziellen sicherheitstechnischen Fragestellungen, die mit der jeweiligen Versuchsreihe verbunden waren, wie bspw. das Ausbreitungs- und Abbrandverhalten bestimmter Schwergase. Fundierte Angaben zur Höhe und Breite der Schwergaswolke sowie zur Neutralgasausbreitung wurden nicht gemacht. Die Versuchsreihen dieses Vorhabens beschäftigen sich im Wesentlichen mit der kontinuierlichen und impulsfreien Ausbreitung von schweren Gasen. Diese Eigenschaften sind Voraussetzung für die Anwendung der VDI-Richtlinie 3783. Im Fokus der aktuellen Arbeit steht die Untersuchung des Schwer- und Neutralgasbereichs bei Vorliegen geringer Massenströme. Im Rahmen der Ausbreitungsversuche werden ausschließlich Freisetzungen aus der Gasphase betrachtet.

Zur Berechnung der Schwergasausbreitung gibt es neben der VDI-Richtlinie 3783 noch weitere Ausbreitungsmodelle. Blackmore et al. (1982) [5] beschäftigt ich in seiner Veröffentlichung unter anderem mit den Ausbreitungsmodellen HEGADIS II, DENZ und einem Modell von Pickett. Woodward et al. (1982) [135] vergleicht in seiner Veröffentlichung die Berechnungsergebnisse der Ausbreitungsmodelle MARIAH, ZEPHYR und einem Modell von Germeles und Drake mit experimentellen Ergebnissen aus den Versuchsreihen "Esso/API – Matagorda Bay" und "HSE – Porton Down". Ein Berechnungsvergleich mit der VDI-Richtlinie 3783 zur Länge des Schwergasbereichs wurde unter anderem von Heinrich und Scherwinski (2003) [51] vorgestellt. Der Vergleich der Berechnungsergebnisse erfolgte hierbei mit den experimentellen Ergebnissen der Versuchsreihe "TÜV Nord – Lathen I".

Berechnungsverfahren zur schlagartigen Freisetzung von schweren Gasen wurden von Fischer-Bruns (1987) [29] und Brighton et al. (1994) [9] vorgestellt. Der Thematik der Freisetzung von flüssigem Schwergas widmete sich Eidsvik (1981) [24]. Schatzmann (1976) [102] sowie Kahn und Abbasi (1999) [57] befassen sich in ihrer Arbeit mit der Freisetzung

von schweren Gasen über einen Freistrahl. Die Berechnung einer instationären Schwergasausbreitung wurde von Pereira und Chen (1996) [86] untersucht.

Seit dem vergangenen Jahrzehnt beschäftigte sich die Forschung mit der Anwendung von Computational Fluid Dynamics (CFD) im Rahmen von Ausbreitungsberechnungen bei Schwergasfreisetzungen. CFD-Berechnungen spielen insbesondere bei der bei Berechnung der Schwergasausbreitung in bebautem Gebiet eine zentrale Rolle. Die bisherigen empirischen und halbempirischen Ausbreitungsmodelle liefern für diese Problematik nur unzureichende Lösungen. Im Rahmen der Schwergasausbreitung stellen Bebauungen wie Häuser oder Anlagenteile Hindernisse dar, die die Schwergasausbreitung in starkem Maße beeinflussen und nicht vernachlässigt werden können. Pontiggia et al. (2010) [88] und Scargiali (2011) [98] beschäftigen sich im Rahmen ihrer Veröffentlichungen mit der Schwergasausbreitung in städtischen Gebieten. Dharmavaram et al. (2004) [20] sowie Gavelli et al. (2008) [36] befassen sich im Rahmen ihrer Arbeit mit der Schwergasausbreitung in einer komplexen Umgebung, wie sie beispielsweise in chemischen Anlagen vorliegt und vergleichen die Ergebnisse mit experimentellen Untersuchungen. CFD-Berechnungen können aber auch auf die Schwergasausbreitung innerhalb von Gebäuden angewendet werden, welcher sich Gilham et al. (2000) [38] widmete.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die mit CFD erzeugten Berechnungsergebnisse jeweils nur für das angegebene Freisetzungsszenario und die verwendete Hindernisstruktur gelten. Die Ergebnisse sind nicht auf ähnliche Szenarien übertragbar. CFD-Berechnungen sind stark von der Güte der Eingangsparameter und von der Ansetzung der Randbedingungen abhängig. In dieser Arbeit werden einerseits stationäre CFD-Berechnungen mit den gleichen Eingangsparametern, welche in die empirischen oder halbempirischen Berechnungsmodelle eingeflossen sind, durchgeführt. Andererseits werden instationäre CFD-Berechnungen unter Berücksichtigung der Windrichtung über die Versuchsdauer durchgeführt. Zielparameter der Simulationen sind die Länge, Breite und Höhe des Schwer- und Neutralgasbereichs auf ebenem Terrain.

3. Experimentelle Untersuchungen

Dieses Kapitel beschreibt die Messtechnik, das verwendete Schwergas, den Versuchsaufbau und die Versuchsdurchführung sowie die daraus resultierenden experimentellen Ergebnisse der Freisetzungs- und Ausbreitungsversuche.

3.1. Messtechnik

In dem Unterkapitel Messtechnik wird die zur Erfassung des Massenstroms, der Gaskonzentrationen sowie der meteorologischen Daten verwendete Messtechnik beschrieben. Ein Schwerpunkt liegt in diesem Unterkapitel auf der Beschreibung der Fehlergröße der verwendeten Gasmesstechnik.

3.1.1. Messung Massenstrom

Für die Messung des Massenstroms wurde eine Waage vom Typ Sartorius CW 1S4-150 verwendet. Diese hat eine Messungenauigkeit von 5 g [97]. Mit dem nachfolgend dargestellten Versuchsaufbau (Abb. 1) wurde der Gewichtsverlust der Flasche während der Freisetzung sekündlich aufgezeichnet. Aus dem Gewichtsverlust über die Zeit lässt sich der Massenstrom bestimmen.



Abbildung 1: Versuchsaufbau Ermittlung Massenstrom

Beim Versuchsaufbau musste darauf geachtet werden, dass die Waage immer lotrecht ausgerichtet ist. Auf unebenen Boden wurde dies durch verstellbare Waagenfüße realisiert. Darüber hinaus musste darauf geachtet werden, dass die Gasflasche möglichst mittig auf der Waage platziert wurde. Ergänzt wurde die Aufnahme des Masseverlustes durch die Aufzeichnung der Temperaturverläufe innerhalb und außerhalb der Gasflasche. Die Temperaturen wurden mit Messfühlern vom Typ K (NiCr-Ni) erfasst. Diese haben einen Messbereich von -60 °C bis 180 °C [80]. Die Aufzeichnung der Temperaturverläufe erfolgte über einen AD-Wandler vom Typ Agilent U2355 in Kombination mit einem Temperaturerweiterungsmodul vom Typ Agilent U2802A.

Der noch fehlende Druck wurde mittels eines piezoresistiven Druckaufnehmers von Typ PA-10 der Firma Keller mit einem piezoresistivem Amplifier vom Typ 4603 der Firma Kistler aufgezeichnet und dann mit einem separaten Messcomputer und einer dazugehörigen Software ausgewertet.

3.1.2. Messung von Gaskonzentrationen

Für die verschiedenen Messreihen zur Gasausbreitung stehen zwei unterschiedliche Sensortypen zur Verfügung. Zum einen der Gassensor vom Typ Figaro TGS 832. Dieser ist zur Detektion von Konzentrationen < 3000 ppm geeignet. Mit zunehmender Anwesenheit von R134a oder anderer selektiver Kältemittel erhöht sich die Leitfähigkeit der gassensitiven Schichten dieser Sensoren. Die Veränderung der Leitfähigkeit wird mittels eines Konverters in ein analoges Ausgangssignal umgewandelt. Die untere Messgrenze dieser Sensoren liegt bei 10 ppm [28]. Zum anderen werden die sogenannten Sauerstoffsensoren vom Typ Dräger Polytron 7000 verwendet. Der Messbereich dieser Sensoren liegt zwischen 0 Vol.-% und 100 Vol.-% Sauerstoff. Aus der ermittelten Sauerstoffverdrängung kann die R134a-Konzentration berechnet werden [23]. Konzeptionell stehen 8 Sauerstoffsensoren und weitere 40 Figaro-Sensoren, die auf einen AD-Wandler vom Typ Agilent U2355 aufgeschaltet werden, für die verschiedenen Messreihen zur Verfügung. Das verwendete Wort Gaskonzentrationen beschreibt hierbei jeweils den Stoffmengenanteil in $\frac{mol}{mol}$.

Die Bereitstellung des Gases erfolgt hierbei durch einen Verdampfer vom Typ TORPEDO ET8T0 mittels dessen die aus zwei Gasflaschen zugeführte Flüssigphase eines beliebigen Gases verdampf wird. Das kontinuierlich aus dem Verdampfer ausströmende Gas wird mittels eines im Auslasszylinder befindlichen Lochsiebes impulsfrei gemacht. Der Auslass des Zylinders hat einen Durchmesser von 30 cm. Messungen haben ergeben, dass das aus dem Verdampfer austretende Gas eine Temperatur von 44°C aufweist. Der beschriebene Aufbau ist in der nachfolgenden Abbildung 2 dargestellt.



Abbildung 2: Versuchsaufbau Verdampfer

3.1.2.1. Kalibration R134a-Sensoren

In der nachfolgenden Abbildung 3 ist die Kalibrierfunktion eines Sensors (Widerstandsverhältnis $\frac{Rs}{R0_{(100ppm)}}$ als Funktion der Gaskonzentration) dargestellt. Es wurde festgestellt, dass eine nichtlineare Funktion vorliegt, die bei kleinen Konzentrationen aufgrund der großen Steigung zu größeren Messfehlern führen wird und sich darüber hinaus auch für alle Sensoren relevant unterscheidet. Es kann daher keine allgemeingültige Kalibrierfunktion auf alle Sensoren angewendet werden, sondern es muss für jeden Sensor individuell eine eigene Kalibrierkurve ermittelt werden.



Abbildung 3: Kalibrierfunktion für die Messung von R134a

Es wurde die Darstellung der Konzentration über das Widerstandsverhältnis $\frac{Rs}{R0_{(100ppm)}}$ gewählt, da diese durch den Hersteller der Sensoren vorgegeben wird. Gemäß Sensordatenblatt ergeben sich die Formeln für *Rs* (1) und *R0*_(100ppm) (2) folgendermaßen:

$$Rs = \left(\frac{V_c}{V_{RL}} - 1\right) \cdot R_L \tag{1}$$

$$R0_{(100ppm)} = \left(\frac{V_c}{V0_{(100ppm)}} - 1\right) \cdot R_L$$
(2)

Rs ist hierbei der Sensorwiderstand in verschiedenen Konzentrationen und $R0_{(100ppm)}$ der Sensorwiderstand für 100 ppm R134a in Luft. Die Arbeitsspannung (V_c) sowie der Abschlusswiderstand (R_L) sind hierbei feste Größen. V_c muss gerätespezifisch bestimmt werden und entspricht den Werten der nachfolgend dargestellten Tabelle 3.

Verteilerbox	Sensoren	Arbeitsspannung [V]	Abschlusswiderstand [kOhm]
1	1-8	8,809	10
2	9-16	8,804	10
3	17-24	8,819	10
4	25-32	8,788	10
5	33-40	8,837	10

Tabelle 3: Arbeitsspannung Verteilerboxen

 $V0_{(100ppm)}$ ist die Spannungsausgabe des Sensors bei 100 ppm. V_{RL} ist die Spannungsausgabe des Sensors unter einer definierten Gasaufgabe. V_{RL} steigt mit zunehmender Gasbeaufschlagung [28].

3.1.2.1.1. Einsatzmöglichkeiten

Die Figaro-Sensoren müssen im Dauerbetrieb gehalten werden, sonst ist mit einem Verlust der Leistungsfähigkeit zu rechnen. Dauerbetrieb bedeutet, dass eine dauerhafte Stromversorgung, zumindest für die Dauer einer Messkampagne, gewährleistet werden muss. Diese wird durch eine unabhängige Stromversorgung (USV) vom Typ Fortran FSP EP 1000 sichergestellt. Sollte dennoch die Stromversorgung unterbrochen werden, werden eine 7tägige Wiederherstellungszeit sowie eine neue Kalibrierung der Sensoren erforderlich.

Berührungen der Sensoren sollen möglichst vermieden werden. Sie stören das thermische Gleichgewicht, so dass zeitnah keine sinnvollen Messungen möglich wären.

Die Sensoren verlieren mit zunehmender R134a-Dosis einen Teil ihrer Empfindlichkeit. Dementsprechend müssen die Kalibrierungen je nach Belastungsaufkommen regelmäßig erneuert werden. Die Einwirkung von anderen, störenden Gasen auf die Sensoren sollte möglichst vermieden werden. Diese können nicht nur messwertverfälschende Querempfindlichkeiten, sondern ggf. auch irreversible Schädigungen an der Sensorik verursachen. Weitere detaillierte Informationen zum Einsatzvermögen der Figaro-Sensoren können Sarry und Lumbreras (1997 [96] und 1999 [95]) sowie Delpha et al. [18] entnommen werden.

3.1.2.1.2. Fehlerabschätzung

Der Gassensor vom Typ Figaro TGS 832 wird im Nachfolgenden nur noch als Figaro-Sensor bezeichnet. Grundlage der Fehlerschätzung zum Figaro-Sensor stellen eigene Laboruntersuchungen in Anlehnung an die Vorgaben der DIN EN 50104 [22] dar. Unter Berücksichtigung der Anwendungsrandbedingungen des Figaro-Sensors im Rahmen der Messreihen wurden alle relevanten Fehlergrößen ermittelt. Diese sind hierbei konservativ ausgelegt, um die Fehlergröße nicht zu unterschätzen.

Bei der Angabe der Fehlergrößen handelt es sich immer jeweils um die relative Fehlergröße bezogen auf den jeweiligen Messwert. Alle Prüfungen – ausgenommen die der Klimaeinflüsse und der Strömungsgeschwindigkeit – wurden unter Laborbedingungen durchgeführt. Die in die Fehlerschätzung einfließenden Parameter sind nachfolgend dargestellt und erläutert.

a) Kalibrierkurve

Dieser Fehler berücksichtigt die Abweichung der Messwerte von den aufgegebenen Gaskonzentrationen nach vorheriger Kalibrierung/Justierung des Figaro-Sensors. Hierbei wurden Prüfgaskonzentrationen von 0 bis 3000 ppm R134a aufgegeben, welche auch den Messbereich unserer Versuchsreihen abdecken. Hierbei wurde ein mittlerer Fehler von 22,4 % festgestellt.

b) Unsicherheit der Prüfgaskonzentration

Die Genauigkeit der Kalibrierkurve ist abhängig von der Genauigkeit des Prüfgases. Das Prüfgas ist mit einer Unsicherheit von ± 3 % - bezogen auf die *R*134*a*-Gehaltsangabe - belegt. Der prüfgasbedingte Fehleranteil wird wie folgt bestimmt:

 $Fehler_{Unsicherhoit Prüfeas} = Fehler_{Kalibrierkurve} \times 0.03 = 0.7 \%$

c) Wiederholbarkeit

Bei der wechselnden Aufgabe von Umgebungsluft und Standardprüfgas (hier 100ppm R134a) ergab sich ein maximaler Fehler von **2,5 %**.

d) *Temperatur*

Der durch Temperaturänderungen entstehende Fehler wird mittels Korrekturfunktionen ausgeglichen. Die Korrekturfunktionen werden in regelmäßigen Abständen überprüft und erneuert. Überprüfungen haben ergeben, dass nach der Korrektur noch mit einem verbleibenden Fehler vom **0,5 %** gerechnet werden kann.

e) Druckabhängigkeit

Bei der Untersuchung der Figaro-Sensoren auf Druckabhängigkeit wurden keine signifikanten Abhängigkeiten der Sensoren von leichten Änderungen des Umgebungsdruckes festgestellt. Da die Figaro-Sensoren nur unter Umgebungsbedingungen eingesetzt werden, ist dieser Einflussfaktor in der Fehlerschätzung **vernachlässigbar**.

f) Feuchte

Der durch Änderungen der relativen Feuchte entstehende Fehler wird ebenfalls mittels Korrekturfunktionen ausgeglichen. Die Korrekturfunktionen werden in regelmäßigen Abständen überprüft und erneuert. Überprüfungen haben ergeben, dass nach der Korrektur noch mit einem verbleibenden Fehler vom **0,5 %** gerechnet werden kann.

g) Strömungsgeschwindigkeit

Der Einfluss der Strömungsgeschwindigkeit wird bei den Figaro-Sensoren mittels eines Anströmschutzes auf ein Minimum reduziert. Um die verbleibende Fehlergröße zu bestimmen, wurden im Windkanal Versuche mit Anströmschutz und unterschiedlichen Windgeschwindigkeiten durchgeführt. Grundlage der Fehlergröße ist die Abweichung der Nullspannung der Sensoren bei schlagartiger Steigerung der Windgeschwindigkeit von 0 auf 6 m/s. Bei dieser Vorgehensweise wurde eine maximale Abweichung von **3,2 %** festgestellt.

h) Staub

Die Fehlerangabe von **0,2** % durch Staub wurde nicht experimentell bestimmt, sondern basiert auf einer Expertenschätzung [66].

Der maximale rel. Gesamtfehler ergibt sich aus der Summe der Fehlergrößen, da die Fehler unabhängig voneinander sind. Für die Figaro-Sensoren ergibt sich damit ein maximaler Fehler (bezogen auf R134a) von **30 %**.

Um die ermittelte Fehlergröße zu verifizieren wurde eine Vergleichsmessung der FIGARO-Sensoren mit einem FID (Flammenionisationsdetektor) in einer Halle durchgeführt. Der FID ist von seiner Konstruktion her für die Messung von halogenierten Kohlenwasserstoffen wie R134a geeignet. Die FIGARO-Sensoren waren halbkreisförmig um den FID angeordnet. Aufgrund der räumlichen Nähe der Sensoren kann von vergleichbaren Umgebungs- und Konzentrationsbedingungen ausgegangen werden. Die im Vergleich zum FID ermittelten Konzentrationsmessungen hatten eine Abweichung von 29 %, welche die durchgeführte Fehlerschätzung bestätigt.

3.1.2.1.3. Korrektur Feuchte, Temperatur und Windgeschwindigkeit

Zusätzlich zu den Problemen der Kalibrierung und Handhabung ergaben sich Abhängigkeiten der Messwerte von der Temperatur und der relativen Feuchte. Die Erstellung der Kalibrierkurve erfolgt unter Laborbedingungen. Während der gesamten Kalibrierung herrschen eine Temperatur von 25 °C und eine relative Feuchte von 60 %. Da die Versuchsbedingungen auf dem Testgelände in der Regel von diesen Bedingungen abweichen, muss korrigiert werden. Für die Einflussparameter Temperatur und relative Feuchte konnten keine allgemeingültigen Abhängigkeiten festgestellt werden, so dass für jeden einzelnen Sensor eine eigene Korrekturfunktion bestimmt werden musste. Die Abhängigkeiten eines beliebigen Sensors von der Temperatur (Abb. 4) sowie der relativen Luftfeuchte (Abb. 5) werden nachfolgend dargestellt.



Abbildung 4: Temperaturabhängigkeit für die Messung von R134a

Rs(25) stellt hierbei den Widerstandswert des Sensors unter Kalibrier- bzw. Laborbedingungen dar. *Rs* den Spannungswert des Sensors bei einer konstanten relativen Feuchte von 60 % und veränderlichen Temperaturen. Im ungünstigsten Fall, also bei einer Temperatur von 15 °C, läge der Widerstandswert dieses Sensors um 18 % falsch.



Abbildung 5: Abhängigkeit der R134a-Messung von der relativen Feuchte

Rs(60) stellt hierbei den Widerstandswert des Sensors unter Kalibrier- bzw. Laborbedingungen dar. *Rs* den Spannungswert des Sensors bei einer konstanten Temperatur von 25 °C und veränderlicher relativer Feuchte. Im ungünstigsten Fall, also bei einer relativen Feuchte von 40 %, läge der Widerstandswert dieses Sensors um 13 % falsch.

Aufgrund der starken Abhängigkeiten der Figaro-Sensoren von der Temperatur und relativen Luftfeuchte ist eine Korrektur unvermeidlich. Ohne eine Korrektur würden sehr große Messfehler entstehen [19].

Darüber hinaus wurden Abhängigkeiten der Sensoren von der Windgeschwindigkeit und richtung festgestellt. Diese Abhängigkeiten haben bei Untersuchungen mit konstanten Anströmgeschwindigkeiten (3 m/s, 6 m/s) im Windkanal nur vernachlässigbar geringe Abhängigkeiten gezeigt, die in der Fehlerschätzung berücksichtigt wurden. Die ersten Freilandversuche zeigten jedoch deutliche Abhängigkeiten. Ein konstanter Nullwert der Sensoren, welcher Voraussetzung für eine akkurate Messung ist, stellte sich unter Umgebungsbedingungen nicht ein. Es gab Schwankungen des Nullwertes von ± 1 V. Diese Schwankungen hätten bei der Umrechnung der Messergebnisse in Konzentrationen einen erheblichen Fehler erzeugt. Grund für dieses zusätzliche Problem ist, dass die Sensoren sich bei konstanten Windgeschwindigkeiten automatisch auf die neuen Anströmbedingungen einstellen. Es findet innerhalb der Sensoren eine Spannungsnachregelung statt, die den Nullwert stabilisiert und die Sensoren einsatzbereit macht. Unter Umgebungsbedingen funktioniert dies aufgrund ständig wechselnder Windgeschwindigkeiten nicht. Die Änderung der Windgeschwindigkeit und- richtung sorgt dafür, dass der Sensor dauerhaft versucht sich auf die aktuellen Bedingungen einzustellen. Daraus ergibt sich eine starke Schwankung des Nullwertes sowohl nach oben als auch nach unten, die ein vernünftiges Messen ausschließt. Um dieses Problem zu beheben, wurde ein Anströmschutz entwickelt. Untersuchungen in einem Sensorwindkanal mit unterschiedlichen Gaskonzentrationen haben nachgewiesen, dass dieser Anströmschutz die Nullwertspannung des Sensors stabilisiert und die Konzentrationsmessung nicht beeinflusst.

3.1.2.2. Kalibration Sauerstoffsensoren

Die Sauerstoffsensoren von Dräger werden unmittelbar vor jeder Messung unter den gegebenen Umweltbedingungen kalibriert und justiert. Eine Abhängigkeit von den Laborbedingungen gibt es daher nicht.

3.1.2.2.1. Fehlerabschätzung

Der Transmitter vom Typ P3U (Polytron 7000) in Kombination mit der DrägerSensor O₂-Messzelle (68 09 720) wird im Nachfolgenden nur noch als Sauerstoffsensor bezeichnet. Grundlage der Fehlerschätzung zum Sauerstoffsensor stellt der Prüfbericht PFG-Nr. 41300504P der EXAM BBG Prüf- und Zertifizier GmbH [27] dar. Unter Berücksichtigung der Anwendungsrandbedingungen des Sauerstoffsensors im Rahmen der Messreihen wurden alle relevanten Fehlergrößen ermittelt und gegebenenfalls auf die Bedürfnisse der Messreihen angepasst. Um die Fehlergröße nicht zu unterschätzen, wurden alle ermittelten Fehlergrößen konservativ ausgelegt. Bei der Angabe der Fehlergrößen handelt es sich immer jeweils um die relative Fehlergröße bezogen auf den jeweiligen Messwert. Alle Prüfungen – ausgenommen die der Klimaeinflüsse – wurden unter Laborbedingungen durchgeführt. Die in die Fehlerschätzung einfließenden Parameter sind nachfolgend dargestellt und erläutert.

a) Kalibrierkurve

Dieser Fehler berücksichtigt die Abweichung der Messwerte von den aufgegebenen Gaskonzentrationen nach vorheriger Kalibrierung/Justierung des Sauerstoffsensors. Hierbei wurden Prüfgaskonzentrationen von 0 bis 24,1 Vol.-% O₂ aufgegeben, welche auch den
Messbereich unserer Versuchsreihen abdecken. Hierbei wurde ein mittlerer Fehler von **1,7** % festgestellt.

b) Unsicherheit der Prüfgaskonzentration

Die Genauigkeit der Kalibrierkurve ist abhängig von der Genauigkeit des Prüfgases. Das Prüfgas ist mit einer Unsicherheit von ± 2 % - bezogen auf die O₂-Gehaltsangabe - belegt. Der prüfgasbedingte Fehleranteil wird wie folgt bestimmt:

$Fehler_{Unsicherhidt Prüfgas} = Fehler_{Kalibrierkurve} \times 0.02 = 0.03 \%$

Er ist im Vergleich zum sensorbedingten Fehler vernachlässigbar klein.

c) Wiederholbarkeit

Bei der wechselnden Aufgabe von Umgebungsluft / reinem Stickstoff und Standardprüfgas (hier 100 Vol.-% O₂) ergab sich ein maximaler Fehler von **0,8 %**.

d) *Temperatur*

Bei der Bestimmung der Temperaturabhängigkeit des O₂-Messwertes wurde 20 °C als Bezugswert gewählt. Von diesem Wert ausgehend wurden die Abweichungen der Messwerte bei Temperaturänderungen von ± 25 °C festgestellt. Die maximale Messabweichung im Bezug auf Standardprüfgas lag bei 0,9 Vol.-% O₂. Somit würde ein Fehler von 7,2 % entstehen. Die Temperaturschwankungen während der Versuchsdauer sind jedoch deutlich geringer, so dass nur ein Teil des Fehlers in die Fehlergröße aufgenommen werden muss. Die Auswertung der Versuche hat ergeben, dass die maximal festgestellte Temperaturänderung \pm 5 °C ergeben hat. Der maximal für die Versuchsreihen relevante Temperaturfehler ergibt sich wie folgt:

$$Fehler_{Temperatur} = \frac{\pm 5^{\circ}C}{\pm 25^{\circ}C} \times 7,2\% = 1,4\%$$

e) Druckabhängigkeit

Bei der Bestimmung der Druckabhängigkeit wurde 1 bar als Bezugswert gewählt. Von diesem Wert ausgehend wurden die Abweichungen der Messwerte bei Druckänderungen von $\pm 0,2$ bar festgestellt. Die maximale Messabweichung im Bezug auf Standardprüfgas lag bei 2,6 Vol.-% O₂. Dies entspricht einem Fehler von 20,8 %. Da vor jedem Versuch die Sauerstoffsensoren neu kalibriert und justiert werden und im Rahmen der Versuchsdauer keine signifikanten Umgebungsdruckänderungen auftreten, wird dieser Einflussparameter **vernachlässigt**.

f) Feuchte

Bei der Bestimmung der Feuchteabhängigkeit wurde 50 % rel. Feuchte bei 40 °C als Bezugswert gewählt. Von diesem Wert ausgehend wurden die Abweichungen der Messwerte bei Änderungen der relativen Feuchte von ± 45 % festgestellt. Die maximale Messabweichung im Bezug auf Standardprüfgas lag bei 0,3 Vol.-% O₂. Dies entspricht einem maximalen Fehler von 2,4 %. Die Schwankungen der relativen Feuchte – unter Berücksichtigung der Temperaturänderung – sind während der Versuchsdauer deutlich geringer. Die Auswertung der Versuche hat ergeben, dass die maximale festgestellte Abweichung der relativen Feuchte ± 10 % ergeben hat. Der maximal für die Versuchsreihen relevante Feuchtefehler ergibt sich damit wie folgt:

$$Fehler_{\text{Rel.Feachte}} = \frac{\pm 10\%}{\pm 45\%} \times 2,4\% = 0,5\%$$

g) Strömungsgeschwindigkeit

Bei der Bestimmung der Abhängigkeit der Anströmgeschwindigkeit wurde 0 m/s als Bezugswert gewählt. Von diesem Wert ausgehend wurden die Abweichungen bis maximal 6 m/s Anströmgeschwindigkeit bestimmt. Die maximale Messabweichung im Bezug auf Luft (20,9 Vol.-% O₂) lag hierbei bei 0,2 Vol.-% O₂. Der maximale Fehler liegt somit bei 0,957 %. Da Messungen aber nur bis 4 m/s durchgeführt werden, ergibt sich der Fehler durch die Strömungsgeschwindigkeit wie folgt:

$$Fehler_{Strömungsgschwindigkeit} = \frac{4m/s}{6m/s} \times 0.975\% = 0.7\%$$

h) Staub

Hierbei wurde die Abweichung der Messwerte bei Verringerung des Gaseinlassquerschnitts um 50 % im Vergleich zum freien Querschnitt untersucht. Die Untersuchung hat ergeben, dass hierbei im Bezug auf Standardprüfgas ein Fehler von 0,1 Vol.-% O₂ entsteht. Prozentual ergibt sich somit ein maximaler Fehler von 0,8 %. Dieser Wert ist eine realistische Größe, wenn die Sensoren im Dauerbetrieb gefahren werden. Im Rahmen der geplanten Messreihen werden die Sensoren nur temporär in staubbelasteter Atmosphäre eingesetzt und der Gaseinlass nach jedem Versuchstag in Augenschein genommen. Es wird davon ausgegangen, dass eine maximale Verringerung des Einlassquerschnitts von 10 % realistisch ist. Die Fehlergröße wird wie folgt ermittelt:

$$Fehler_{Staub} = \frac{10\%}{50\%} \times 0.8\% = 0.2\%$$

Der maximale rel. Gesamtfehler ergibt sich aus der Summe der Fehlergrößen, da die Fehler unabhängig voneinander sind. Für die Sauerstoffsensoren ergibt sich damit ein maximaler Fehler (bezogen auf O_2) von **5,3 %**. Da die aufgeführten Fehlermessungen nicht persönlich durchgeführt worden, wird aus Gründen der Konservativität bei der Auswertung der Messreihen eine Fehlergröße von **10 %** angesetzt. Der Fehler für die Messung von **R134a ist der gleiche**, da es sich bei der Umrechnung von O_2 in R134a – wie nachfolgend dargestellt - nur um eine faktorielle Umrechung handelt. Der rel. Gesamtfehler bleibt bei der Darstellung der Fehlergröße in R134a der gleiche. Die Luft besteht in einer vereinfachten Darstellung zu 20,9 Vol.-% aus Sauerstoff (3) und zu 79,1 Vol.-% aus Stickstoff (4).

$$c_{02} = 0,209 \times c_L \tag{3}$$

$$c_{N2} = 0,791 \times c_L \tag{4}$$

Wird nun das R134a in die Umgebung freigesetzt, so verdrängt es ein einen Teil vom Sauerstoff und Stickstoff.

$$1 = c_{R134a} + c_{02} + c_{N2} \tag{5}$$

Setzt man nun Gl. (3) und (4) in Gl. (5) ein und stellt diese nach c_{R134a} um, so ergibt sich folgende Gleichung:

$$c_{R134a} = 1 - c_{02} \times \left(1 - \frac{0,791}{0,209}\right) \tag{6}$$

Gleichung 6 beschreibt, wie in der nachfolgenden Abbildung 6 dargestellt, einen linearen Verlauf und bestätigt damit, dass der relative Fehler bezogen auf R134a der gleiche ist.



Abbildung 6: Umrechnung O₂- in R134a-Konzentration

3.1.2.2.2. Korrektur

Eine wie für die Figaro-Sensoren vergleichbare Fehlerkorrektur gibt es nicht. Durch die unmittelbare Kalibrierung jeder Messung, wird die Fehlergröße auf ein Minimum reduziert. Der noch verbleibende Fehler ist gering und wird in der Abschätzung der Fehlergröße berücksichtigt.

3.1.3. Meteorologische Messdaten

Die meteorologischen Messdaten spielen eine wichtige Rolle für die Simulationen zur Gasausbreitung. Die Messgrößen Windrichtung sowie –geschwindigkeit haben maßgeblichen Einfluss auf das Ausbreitungsverhalten einer Gaswolke. Darüber hinaus werden Messgrößen wie die Temperatur und die Luftfeuchtigkeit für die Korrektur der Feldmesswerte benötigt.

3.1.3.1. Ultraschallanemometer

Im Rahmen der Versuche wurde das Ultraschallanemometer USA-1 der Firma METEK GmbH verwendet. Dieses ist in der nachfolgenden Abbildung 7 dargestellt. Das Anemometer ermittelt die rechtwinkligen Windkomponenten x, y und z sowie die Temperatur mittels Laufzeiten von Ultraschallimpulsen auf drei Messstrecken mit je zwei Ultraschallwandlern. Jeder Schallwandler fungiert hierbei abwechselnd als Sender und Empfänger.



Abbildung 7: Ultraschallanemometer USA-1

Das USA-1 ist in der Lage die in der folgend dargestellten Tabelle 4 angegebenen Ausgabeparameter während der Messung zu erfassen. Ein Großteil der angegebenen Parameter werden jedoch im Rahmen dieser Untersuchungen nicht benötigt.

Name	Bedeutung	Einheit	
х	Mittlere Windkomponente in x-Richtung bezogen auf das orthogonale	m/s	
у	Mittlere Windkomponente in y-Richtung bezogen auf das orthogonale	m/s	
z	Mittlere Windkomponente in z-Richtung bezogen auf das orthogonale	m/s	
Т	Mittlere Temperatur	°C	
xsig	Standardabweichung von x	m/s	
ysig	Standardabweichung von y	m/s	
zsig	Standardabweichung von z	m/s	
Tsig	Standardabweichung von T	°C	
хусоч	Kovarianz von x und y	m²/s²	
xzcov	Kovarianz von x und z	m²/s²	
xTcov	Kovarianz von x und T	mK/s	
yzcov	Kovarianz von y und z	m²/s²	
yTcov	Kovarianz von y und T	mK/s	
zTcov	Kovarianz von z und T	mK/s	
psig	Standardabweichung der Windkomponente parallel zur mittleren	m/s	
	Windrichtung		
qsig	Standardabweichung der Windkomponente horizontal senkrecht zur	m/s	
	mittleren Windrichtung		
rsig	Standardabweichung der Windkomponente vertikal senkrecht zur	m/s	
	mittleren Windrichtung		
tp	Longitudinale Turbulenzintensität		
tq	Transversale Turbulenzintensität		
tr	Vertikale Turbulenzintensität		
ustar	Schubspannungsgeschwindigkeit u*	m/s	
Tstar	Charakteristische Temperatur T*	К	
Cd	Bodenreibungskoeffizient C _d		
СТ	Strukturkonstante der Temperatur CT ²	K ² *m ^{2/3}	
MOs	Monin-Obukhov-Stabilitätsparameter	m ⁻¹	
mf	Vertikaler Impulsstrom	kg/ms²	
hf	Vertikaler Wärmestrom	W/m²	
u	Mittlere West-Ost-Windkomponente abhängig vom Azimut	m/s	
v	Mittlere Süd-Nord-Windkomponente abhängig vom Azimut	m/s	
w	Mittlerer Vertikalwind	m/s	
vel	Mittlere horizontale Windgeschwindigkeit	m/s	
dir	Mittlere horizontale Windrichtung abhängig vom Azimut	•	
diffc	Diffusionsklassen	16	

Tabelle 4: Messgrößen USA-1

Die angegebene mittlere Temperatur der Luft (T) wird aus der Schallgeschwindigkeit bestimmt. Sie entspricht nicht der von einem klassischen Thermometer gemessenen trockenen Luft, sondern der meteorologisch verwendeten Virtuelltemperatur. Diese berücksichtigt unter anderem den Feuchtegehalt der Luft. Es sind Abweichungen von 1-2,5 °K von der trockenen Temperatur zu berücksichtigen [75]. Die Ausgabe der Windkomponenten orientiert sich an einem linkshändigen Koordinatensystem [58].

Die Messgenauigkeit des USA-1 hängt maßgeblich von der waagerechten Aufstellung sowie von der korrekten Ausrichtung des Ultraschallanemometers im Messfeld ab. Hierbei entstehende Abweichungen beeinflussen die Auswertung der Messergebnisse in großem Maße und sollten vermieden werden. Insgesamt stehen zwei Ultraschallanemometer USA-1 für die verschiedenen Messreihen zur Verfügung. Diese können im Bedarfsfall durch fünf analoge Schaufelradanemometer zur Messung des Windfeldes ergänzt werden.

3.1.3.2. MEgicDisk

Die Klimaparameter relative Luftfeuchte (*Rh*) und Lufttemperatur (T_L) werden mit den MEgicDisk-Messfühlern der Meilhaus Electronic GmbH ermittelt (Abb. 8). Sie sind in der Lage die relative Luftfeuchte von 2 bis 99 % sowie die Lufttemperatur von –10 bis +70 °C im Rahmen einer Langzeitmessung zu erfassen. Ein interner Datenlogger kann für die Temperatur und Feuchte gleichzeitig maximal 1750 Werte über den Verlauf einer Messreihe aufzeichnen [73].



Abbildung 8: MEgicDisk-Messfühler

Probleme bei der Verwendung dieser Messfühler treten nur dann auf, wenn sie der direkten Sonnenstrahlung ausgesetzt werden. Die Sonnenstrahlung führt zu einer Erwärmung der Umhüllung. Diese Erwärmung verfälscht das Messergebnis der Temperaturmesszelle. Aus diesem Grund wurden die Messzellen bei Außenmessungen vor der Sonneneinstrahlung geschützt und stets im Schatten ausgelegt. Insgesamt stehen fünf MEgicDisk® für die verschiedenen Messreihen zur Verfügung. Diese können gleichzeitig Temperatur- und Feuchteverläufe oder jeweils nur Temperatur oder relative Feuchte aufnehmen.

3.2. Verwendetes Schwergas

Da aus Gründen des Arbeitsschutzes keine Gefahren durch die Verwendung toxischer oder brennbarer Gase entstehen sollten, wurden alle Versuchsreihen nur mit Gasen durchgeführt die keine dieser Eigenschaften aufweisen. Es wurde das Kältemittel 1,1,1,2-Tetrafluorethan (R134a) als Modellgas ausgewählt, da es den physikalisch-chemischen Eigenschaften von Chlor, als einem gefährlichen und weitverbreiteten Schwergas, weitgehend entspricht.

R134a ist ein nicht brennbares und nicht toxisches Schwergas mit einem Molekulargewicht vom 102,04 g/mol (CH_2FCF_3). In Gasflaschen liegt es als ein druckverflüssigtes Gas vor. Die Siedetemperatur von R134a unter Umgebungsdruck liegt bei -26,1 °C. Der Dampfdruckverlauf von R134a ist in Abbildung 9 dargestellt.



Abbildung 9: Dampfdruckverlauf R134a

R134a wird in der Automobilindustrie in Klimaanlagen eingesetzt und verfügt über folgende physikalische Eigenschaften (Tab. 5) [54]:

Physikalische Eigenschaft	Wert
Molekulargewicht	102,03
Siedepunkttemperatur (°C) bei 101.3 kPa	-25,9
Gefrierpunkttemperatur (°C) bei 101.3 kPa	-96,6
Kritische Temperatur* (°C)	101,06
Kritischer Druck* (kPa)	4059
Kritisches Volumen* (m³/kg)	0,002
Kritische Dichte (kg/m ³)	511,9
Dampfdichte am Siedepunkt (kg/m3)	5,26
Flüssigkeitsdichte † (kg/m ³)	1207
Wärmekapazität der Flüssigkeit † (kJ/kg·°K)	1,425
Wärmekapazität des Dampfes (bei konstantem Druck) (kJ/kg·ºK) bei 101.3 kPa	0,851
Verdampfungswärme am Siedepunkt (kJ/kg)	216,98
Dampfdruck † (kPa)	665
Wärmeleitkoeffizient der Flüssigkeit † (W/m·°K)	0,081
Wärmeleitkoeffizient des Dampfs (W/m·°K)	0,0138
Viskosität der Flüssigkeit † (μPa·sek)	197,9
Viskosität des Dampfs † (μPa·sek)	11,8
Verflüchtigung % / Volumen	100
Löslichkeit von R-134a in Wasser (Gewicht %)	0,15
Löslichkeit von Wasser in R-134a (Gewicht %)	0,11
Selbstentzündungstemperatur (°C)	770

Tabelle 5: Physikalische Eigenschaften von R134a

3.3. Versuchsaufbau und -durchführung

In diesem Unterkapitel werden nacheinander der Versuchsaufbau der Freisetzungs- und der Ausbreitungsversuche beschrieben. Darüber hinaus werden die Umgebungs- und Randbedingungen während der Versuchsdurchführung aufgeführt.

3.3.1. Freisetzungsversuche

Im Rahmen der Freisetzung von Schwergasen aus handelsüblichen Gasflaschen werden die nachfolgenden Freisetzungsszenarien untersucht. In allen Fällen ist das verwendete Gas in den Gasflaschen unter Umgebungstemperatur druckverflüssigt und wird unter Umgebungsbedingungen freigesetzt.

3.3.1.1. Freisetzung aus der Gasphase

Der Versuchsaufbau zur Ermittlung des Massenstroms bei einer Leckage in der Gasphase ist in der Abbildung 10 dargestellt. Eine mit Kugelhahn und Austrittsrohr ausgestattete Gasflasche wird mittig auf der Waage platziert. Um die Flasche vor dem Umfallen durch den Rückstoßimpuls beim anfänglichen Ausströmen zu schützen, wird diese an einem Metallgestell befestigt. Die grünen Kabel stellen die Anschlüsse der Thermoelemente sowie das graue Kabel den Anschluss des Druckaufnehmers dar.



Abbildung 10: Versuchsaufbau Freisetzung aus der Gasphase

Für die verschiedenen Versuchsreihen wurden Chlorgasflaschen mit Volumina von 2 ℓ und 10 ℓ eingesetzt. Die geometrischen Größen dieser Flaschen können Tabelle 6 entnommen werden.

Tabelle 6:	Geometrie	Gasflaschen
------------	-----------	-------------

Volumen [ℓ]	Höhe [cm]	Aussensdurch- messer [cm]	Mittlere Wand- dicke [mm]
2	33,5	10	3,3
10	81,5	14	3,3

Beide Gasflaschengrößen waren mit einem identischen Chlorgasventil vom Typ K49-54.0 ausgestattet und hatten kein Steigrohr. Der minimale Ventildurchmesser des Chlorgasventils ist 7,5 mm. Im Rahmen der experimentellen Untersuchungen wurden insgesamt 4 Messungen durchgeführt – zweimal mit der 2- ℓ - und zweimal mit der 10- ℓ -Flasche. Die Flaschen waren dabei, wie in der Tabelle 7 beschrieben, mit R134a gefüllt. Da die Gasflaschen zu den jeweiligen Experimenten mittels einer Abfüllstation selbst befüllt wurden, differieren dargestellten Füllmengen geringfügig.

Abfülltag	Volumen [ℓ]	Leergewicht Flasche [kg]	Gewicht Flasche mit Inhalt [kg]	Gasmasse R134a [kg]
09.10.2010	2	5,6	7,74	2,14
09.10.2010	10	12,6	22,93	10,33
20.05.2011	2	5,6	7,63	2,03
20.05.2011	10	12,6	22,65	10,05

Tabelle 7: Abfüllprotokoll für die Freisetzung aus der Gasphase

Nach der mittigen Platzierung der jeweiligen Flasche auf der Waage, dem Anschluss der benötigten Messtechnik für die Temperatur- und Druckaufzeichnung sowie eines anschließenden Drückens der Nullstelltaste der Waage, konnten die Messungen begonnen werden. Die Nullstelltastenfunktion ermöglicht die Aufzeichnung des Masseverlustes. Die Waage ist an einen Laptop mit einem Auswerteprogramm angeschlossen. Dieses Auswerteprogramm nimmt den sekündlichen Massenverlust auf.

Der in Abbildung 10 dargestellte Kugelhahn hat die Aufgabe den gesamten Öffnungsquerschnitt der Flasche innerhalb kürzester Zeit mit einer viertel Drehung freizugeben. So werden das Drehen des Flaschenventils und die damit verbundene zeitliche Änderung des Austrittsquerschnitts sowie Druckeinwirkungen durch die Drehbewegung auf die Waage minimiert. Das Austrittsrohr sorgt dafür, dass eventuell austretende Flüssigkeit nicht auf die Waage fällt und damit das Messergebnis verfälscht. Sowohl der Kugelhahn als auch das Austrittsrohr führen nicht zu einer Verengung des minimalen Austrittsquerschnitts des Chlorgasventils.

Darüber hinaus wurden verschiedene Temperaturgrößen ermittelt, die im Rahmen der Simulationen als Vergleichsgrößen dienen. Die hierfür benötigten Thermoelemente wurden über den AD-Wandler und das Temperaturerweiterungsmodul zusammen geschlossen und im 1/3-Sekundentakt aufgezeichnet. Die Anordnung der Thermoelemente sowie eines Druckaufnehmers sind in der nachfolgenden Abbildung 11 schematisch dargestellt.

33



Abbildung 11: Schematisches Messkonzept bei der Freisetzung aus der Gasphase

Die Gasflasche wurde mit insgesamt drei Temperaturmessfühlern in der Flüssigphase $(T1_{fl}, T2_{fl}, T3_{fl})$ ausgestattet. Dazu wurden die Temperatur in der Gasphase (T_g) , die Temperatur an der Flaschenwand (T_w) , die in die Umgebung ausströmende Gastemperatur (T_{Aus}) sowie der Druck in der Gasphase (p_g) gemessen.

Zur Aufzeichnung des Druckverlaufs innerhalb der Gasflasche wurde ein Druckaufnehmer über ein Swagelok-Rohr mit Kugelhahn an der Gasflasche angebracht. Der Aufnehmer misst in diesem Fall den Druck in der Gasphase. Unter den Druck in der Gasphase versteht sich der eigentliche Systemdruck in der Gasflasche. Bei der Anbringung des Druckaufnehmers in der Flüssigphase würde zusätzlich zum Systemdruck noch der hydrostatische Druck der Flüssigkeitssäule gemessen werden. Über einen Amplifier wird das Drucksignal auf einen separaten Messcomputer übermittelt und im 1/3-Sekundentakt aufgezeichnet. Die Anbringung der Thermoelemente an der Gasflasche mittels Swagelok-Verschraubungen sowie die Anbringung des Druckaufnehmers sind in Abbildung 12 dargestellt.



Abbildung 12: Anbringung Thermoelemente und Druckaufnehmer

Alle Messgrößen wurden zeitsynchron aufgezeichnet. Hierzu wurden zunächst die verschiedenen Messcomputer untereinander synchronisiert und anschließend die jeweiligen Aufzeichnungsprogramme mit der Computeruhr.

Die Aufnahme der Messgrößen wurde durch Videoaufzeichnungen des Freisetzungsprozesses ergänzt. Diese Aufnahmen liefern wichtige Informationen zum Verlauf des Massenstroms. Es ist z.B. erkennbar, in welchem Zeitraum eine Zweiphasenströmung aufgetreten ist.

Da die Umgebungsbedingungen sowie die Anfangstemperatur in der Gasphase Einfluss auf die Energiebilanz und damit auf den Massenstrom haben, müssen diese berücksichtigt werden. Die nachfolgende Tabelle 8 stellt die für die Simulationen wichtigen Umgebungsparameter der durchgeführten Messreihen dar.

Versuchsdatum	Volumen [ℓ]	Mittlere Wind- geschw. [m/s]	Mittlere Umgebungs- temperatur [°C]	Gastemperatur [°C]
11.10.2010	2	1,14	5,58	14,2
11.10.2010	10	1,06	7,88	12,4
16.06.2011	2	2,17	28,28	33,25
16.06.2011	10	1,9	27,8	32,82

Tabelle 8: Umgebungsbedingungen bei der Freisetzung aus der Gasphase

Es ist festzustellen, dass in allen Fällen die Gastemperatur innerhalb der Flasche höher als die Umgebungstemperatur ist. Dies ist durch den Einfluss der Sonnenstrahlung auf die Gasflasche zurückzuführen. Die Sonnenstrahlung führt zu einer zusätzlichen Erwärmung der Flasche und damit auch der Gastemperatur.

Zur Untersuchung der Temperatur der Gasphase auf eine eventuelle inhomogene Temperaturschichtung, wurden in der Gasphase in einer y-Ebene Thermoelemente in unterschiedlicher Tiefe angebracht. Die Anbringung der Thermoelemente ist nachfolgend dargestellt (Abb. 13).



Abbildung 13: Anbringung der Thermoelemente bei der Tiefenmessung (Draufsicht)

Das Thermoelement $T2_g$ befindet sich in der Flaschenmitte. Die Thermoelemente $T3_g$, $T4_g$ und $T5_g$ sind jeweils entsprechend des Flaschendurchmessers (d) $\frac{1}{3} \times d$, $\frac{1}{4} \times d$ und $\frac{1}{6} \times d$ tief in der Flasche angeordnet.

3.3.1.2. Freisetzung aus der Flüssigphase

Der Versuchsaufbau zur Ermittlung des Massenstroms bei einer Leckage in der Flüssigphase ist in der nachfolgenden Abbildung 14 dargestellt. Die mit Kugelhahn und Austrittsrohr ausgestattete Flasche ist nun kopfüber am Metallgestell befestigt und mittig auf der Waage platziert. Durch die Kopfstellung ist es nun möglich Flüssigphase freizusetzen.



Abbildung 14: Versuchsaufbau Freisetzung aus der Flüssigphase

Die Ermittlung des Massenstroms sowie die Verfahren zur Aufzeichnung der Temperaturund Druckverläufe und deren Befestigung an der Flasche haben sich im Vergleich zu 3.3.1.1 nicht verändert. Einzig die Anordnung der Thermoelemente sowie des Druckaufnehmers ist nun anderes. Die neue Anordnung wird in Abbildung 15 dargestellt.



Abbildung 15: Schematisches Messkonzept bei der Freisetzung aus der Flüssigphase

Die Gasflasche wurde mit insgesamt vier Temperaturmessfühlern in der Flüssigphase $(T1_{fl}, T2_{fl}, T3_{fl}, T4_{fl})$ ausgestattet. Dazu wurden die Temperatur an der Flaschenwand (T_w) , die in die Umgebung ausströmende Gastemperatur (T_{Aus}) sowie der Druck in der Flüssigphase (p_{fl}) gemessen. Der in der Flüssigphase gemessene Druck enthält zusätzlich zum Systemdruck den auf den Druckaufnehmer lastenden hydrostatischen Druck. Der hydrostatische Druck verändert sich mit abnehmender Höhe der Flüssiggassäule.

Im Rahmen der experimentellen Untersuchung wurde eine Messung mit der 10-ℓ-Flasche durchgeführt. Die Flasche war dabei, wie in Tabelle 9 dargestellt, mit R134a gefüllt.

Tabelle 9: Abfüllprotokoll für die Freisetzung aus der Flüssigphase

Abfülltag	Volumen [ℓ]	Leergewicht Flasche [kg]	Gewicht Flasche mit Inhalt [kg]	Gasmasse R134a [kg]
05.07.2011	10	12,6	22,6	10

Die Umgebungsbedingungen sowie die Anfangstemperatur der Gasphase für diesen Versuch sind in Tabelle 10 dargestellt.

Versuchsdatum	Volumen [ℓ]	Mittlere Wind- geschw. [m/s]	Mittlere Umgebungs- temperatur [°C]	Gastemperatur [°C]
05.07.2011	10	0,68	22,37	27,41

Tabelle 10: Umgebungsbedingungen bei der Freisetzung aus der Flüssigphase

3.3.1.3. Liegende Flasche

Der Versuchsaufbau zur Ermittlung des Massenstroms bei einer Leckage an einer liegenden Flasche ist in der Abbildung 16 dargestellt. Die Gasflasche wird hierzu waagerecht und mittig auf der Waage platziert. Hierbei musste darauf geachtet werden, dass die Flasche, bspw. durch das Austrittsrohr, keinen Kontakt zum Boden hat. Ein Bodenkontakt würde zu einer Verfälschung des Messergebnisses führen.



Abbildung 16: Versuchsaufbau Freisetzung aus einer liegenden Flasche

Die Ermittlung des Massenstroms sowie die Verfahren zur Aufzeichnung der Temperaturund Druckverläufe und deren Befestigung an der Flasche haben sich im Vergleich zu 3.3.1.1 nicht verändert. Einzig die Anordnung der Thermoelemente sowie des Druckaufnehmers ist anderes. Die neue Anordnung wird in Abbildung 17 dargestellt.



Abbildung 17: Schematisches Messkonzept bei der Freisetzung aus einer liegenden Flasche

Die Gasflasche wurde mit insgesamt vier Temperaturmessfühlern im inneren der Flasche ausgestattet (T1, T2, T3, T4) ausgestattet. Diese befinden sich zu Beginn der Freisetzung in der Flüssigphase und gehen dann mit abnehmendem Flüssigkeitsspiegel in die Gasphase über. Darüber hinaus wurden die Temperatur an der Flaschenwand (T_w), die in die Umgebung ausströmende Gastemperatur (T_{Aus}) sowie der Flaschendruck (p) gemessen. Im Rahmen der experimentellen Untersuchungen wurden insgesamt 2 Messungen durchgeführt – einmal mit der 2- ℓ - und einmal mit der 10- ℓ -Flasche. Die Flaschen waren dabei gemäß Tab. 11 mit R134a gefüllt.

Abfülltag	Volumen [ℓ]	Leergewicht Flasche [kg]	Gewicht Flasche mit Inhalt [kg]	Gasmasse R134a [kg]
18.07.2011	2	5,6	7,62	2,02
18.07.2011	10	12,6	22,66	10,06

Tabelle 11: Abfüllprotokoll für die Freisetzung aus der liegenden Flasche

Die Umgebungsbedingungen sowie die Anfangstemperatur der Gasphase für diesen Versuch sind in Tabelle 12 dargestellt.

Taballa 12.	Limashungshad	ingungan hai d	on Enginetrung o	wa dan liagan dar	Flogobo
тярене та:	Umgennngsned	inynnyen nei a	er rreiseizinny a	ins der nevender	і глязене
I ubtilt III.	Chigobangobea	ingungen bei u	or recoulding a	as all negenaer	I I Iuociic

Versuchsdatum	Volumen [ℓ]	Mittlere Wind- geschw. [m/s]	Mittlere Umgebungs-	Gastemperatur [°C]
			temperatur [°C]	
18.07.2011	2	1,53	21,9	28,99
18.07.2011	10	1,76	21,98	25,98

3.3.2. Ausbreitungsversuche

Im Rahmen der Untersuchung des Ausbreitungsprozesses eines Schwergases werden Messreihen zu den Abmessungen einer Schwergaswolke, zur Länge des Schwer- und Neutralgasbereichs sowie zum Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des Schwergasbereichs untersucht. Die Freisetzungen erfolgen hierbei in allen Fällen aus dem im Kap. 3.1.2. vorgestellten Verdampfer unter Umgebungsbedingungen.

3.3.2.1. Abmessungen des Schwergasbereichs

Für Auswirkungsbetrachtungen spielen neben der länglichen Ausbreitung des Schwergases auch die laterale und höhenmäßige Ausbreitung eine wichtige Rolle. Der Versuchsaufbau zur Bestimmung der jeweiligen Zielgrößen wird nachfolgend dargestellt.

3.3.2.1.1. Länge

Der Versuchsaufbau zur Ermittlung der Länge der Schwergaswolke sowie des Konzentrationsverlaufs in Windrichtung (x-Koordinate) sind in der nachfolgenden Abbildung 18 dargestellt. Zur Bestimmung der Länge des Schwergasbereichs ($c \ge 1$ Vol.-%) wurden hierbei die Sauerstoffsensoren vom Typ Dräger Polytron 7000 – nachfolgend nur noch als Sauerstoffsensoren (O₂-Sn) bezeichnet – in Wind- also x-Richtung ausgerichtet. Da die etwa 15 cm Hohen in Reihe aufgebauten Sauerstoffsensoren kein Hindernis für die Schwergasausbreitung darstellen sollten, wurden diese mittels Zuleitungen und Pumpen außerhalb des Messfeldes platziert (siehe Abbildung 19). Die verwendeten Pumpen hatten eine Förderleistung von 50 ℓ/h . Die Zuleitung zwischen Sensor und Messpunkt war genau 1 m lang. Die exakte Anordnung der Messpunkte ist in Anhang 3 dargestellt. Die Freisetzungsquelle befindet sich in allen Fällen im Ursprung des Koordinatensystems (x = 0 m, y = 0 m, z = 0 m).



Abbildung 18: Versuchsaufbau Länge der Schwergaswolke



Abbildung 19: Messkonzept Sauerstoffsensoren

Insgesamt wurden für die verschiedenen Messreihen bis zu 8 Sauerstoffsensoren eingesetzt. Die Ausrichtung des Sensorfeldes erfolgt hierbei immer in Hauptwindrichtung (HWR). Die Versuche wurden auf ebenen, hindernissfreien Gelände auf dem Testgelände Technische Sicherheit (TTS) der BAM Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung durchgeführt. Die Sauerstoffsensoren wurden über USB-Kabel an den AD-Wandler angeschlossen und der Spannungsverlauf im 1/3-Sekundentakt erfasst. Neben der Gasmesstechnik wurden die meteorologischen Messdaten mit bis zu zwei Ultraschallanemometern (USA) sowie mit mehreren Temperatur- und Feuchtemessern (Rh/T) aufgezeichnet. Alle Messgrößen wurden zeitsynchron erfasst. Hierzu wurden zunächst die verschiedenen Messcomputer untereinander synchronisiert und anschließend die jeweiligen Aufzeichnungsprogramme mit der Computeruhr.

Im Rahmen der experimentellen Untersuchungen zur Länge der Schwergaswolke wurden insgesamt 3 Messungen mit unterschiedlichen Massenströmen durchgeführt. Die nachfolgende Tabelle 13 stellt die für die Simulationen wichtigen Umgebungsparameter der durchgeführten Messreihen dar.

Massenstrom [g/s]	Mittlere Wind- geschw. [m/s]	Mittlere Umgebungs- temperatur [°C]	Mittlere relative Luftfeuchte [%]	Stabilitäts- klasse [-]	Bodenrauig- keit [m]
12,40	1,14	20,90	37,80	D	0,02
24,90	1,51	19,99	34,50	D	0,02
36,30	1,10	19,81	43,20	D	0,02

Tabelle 13: Umgebungsbedingungen Länge der Schwergaswolke

Die Angaben zur mittleren relativen Luftfeuchte und zur mittleren Umgebungstemperatur werden zur Fehlerkorrektur (siehe Kap. 3.1.2.1.3.) der Konzentrationswerte benötigt. Die lokale Windgeschwindigkeit, die Stabilitätsklasse sowie die Bodenrauigkeit fließen als Eingangsparameter in die Ausbreitungsberechnungen ein.

3.3.2.1.2. Breite

Die Versuchsanordnung der Sensoren zur Ermittlung der Breite des Schwergasbereichs ist in der nachfolgenden Abbildung 20 schematisch dargestellt. Aufgrund einer nicht ausreichenden Verfügung Anzahl Sauerstoffsensoren, die zur stehender konnte Breite des Schwergasbereichs nur etappenweise über mehrere Versuche hinweg ermittelt werden. Hierzu wurde die Breite jeweils in einen Abstand x zur Quelle (x = 1, 2, 3, ..., m) gemessen. Nach der Ermittlung der Breite für den jeweiligen x-Abstand wurde die Sensorreihe weiter nach hinten verschoben. Es wurde solange gemessen bis das Ende des Schwergasbereichs erreicht war. Bei den verschiedenen Versuchen wurde darauf geachtet, dass annähernd gleichbleibende Umgebungsbedingungen herrschten, so dass eine Vergleichbarkeit der Versuche miteinander möglich ist.

3. Experimentelle Untersuchungen



Abbildung 20: Versuchsaufbau Breite der Schwergaswolke

Die Ausrichtung des Sensorfeldes erfolgte in Hauptwindrichtung. Die Versuche wurden ebenfalls auf ebenen, hindernisfreien Gelände durchgeführt. Zur Gewährleistung der ungestörten Ausbreitung der Schwergaswolke, wurden die in Kap. 3.3.2.1.1. dargestellten Pumpen eingesetzt.

Im Rahmen der experimentellen Untersuchungen zur Breite des Schwergasbereichs wurden 3 Messreihen mit 15 Teilversuchen durchgeführt. Die Anordnung der Sensoren für die jeweiligen Versuche ist in Anhang 4 aufgeführt. Die während der Messreihen herrschenden Umgebungsparameter sind in der nachfolgenden Tabelle 14 aufgeführt.

Tabelle 14: Umgebungsbedingungen Breite der Schwergaswolke

Massenstrom [g/s]	Mittlere Wind- geschw. [m/s]	Mittlere Umgebungs- temperatur [°C]	Mittlere relative Luftfeuchte [%]	Stabilitäts- klasse [-]	Bodenrauig- keit [m]
9,00	1,12	16,24	35,26	D	0,02
23,00	1,01	17,34	46,00	D	0,02
35,00	0,77	16,88	50,11	D	0,02

3.3.2.1.3. Höhe

Zur Ermittlung der Höhe des Schwergasbereichs wurde der in Abbildung 21 dargestellte schematische Versuchsaufbau verwendet. Auch in dieser Messreihe konnte aufgrund einer nicht ausreichenden Anzahl von Sauerstoffsensoren die Schwergaswolke nur etappenweise über mehrere Versuche hinweg bestimmt werden. Zur Ermittlung der Höhe der Schwergaswolke wurden die Messpunkte in unterschiedlicher z-Höhe an einem Stativ angebracht (siehe Abb. 22) und die Höhe für den jeweiligen x-Abstand (x = 1, 2, 3, ...n) zur Quelle gemessen. Das Sensorstativ wurde solange nach hinten verschoben bis kein Schwergasbereich mehr detektierbar war. Die unterschiedlichen Versuche wurden unter annähernd gleichen Umgebungsbedingungen durchgeführt, so dass die Vergleichbarkeit der Messreihe gewährleitet ist.



Abbildung 21: Versuchsaufbau Höhe der Schwergaswolke



Abbildung 22: Anordnung der Höhenmesspunkte

Zur Sicherstellung der ungestörten Ausbreitung der Schwergaswolke, wurden die in Kap. 3.3.2.1.1. dargestellten Pumpen eingesetzt. Die Ausrichtung des Sensorfeldes erfolgte in Hauptwindrichtung. Die Versuche wurden auf ebenen, hindernissfreien Gelände durchgeführt.

Im Rahmen der experimentellen Untersuchungen zur Höhe des Schwergasbereichs wurden 4 Messreihen mit 22 Teilversuchen durchgeführt. Die Anordnung der Sensoren für die jeweiligen Versuche ist in Anhang 5 aufgeführt. Die während der Messreihen herrschenden Umgebungsparameter sind in der nachfolgenden Tabelle 15 dargestellt.

Massenstrom [g/s]	Mittlere Wind- geschw. [m/s]	Mittlere Umgebungs- temperatur [°C]	Mittlere relative Luftfeuchte [%]	Stabilitäts- klasse [-]	Bodenrauig- keit [m]
10,00	0,88	18,71	34,79	D	0,02
18,00	1,25	18,48	36,72	D	0,02
28,00	0,81	16,59	39,18	D	0,02
50,00	1,27	12,54	49,93	D	0,02

Tabelle 15: Umgebungsbedingungen Höhe der Schwergaswolke

3.3.2.2. Länge Schwer- und Neutralgasbereich

Der Versuchsaufbau zur Ermittlung der Länge des Schwer- und Neutralgasbereichs sowie des Konzentrationsverlaufs in Windrichtung sind in der nachfolgenden Abbildung 23 dargestellt. Der Schwergasbereich wurde mit Sauerstoffsensoren (O_2 -Sn) und der Neutralgasbereich mit Gassensoren vom Typ Figaro TGS 832 - nachfolgend nur noch als Figaro-Sensoren (Fm) bezeichnet - detektiert.



Abbildung 23: Versuchsaufbau Länge des Schwer- und Neutralgasbereichs

Um die Sensoren zur Bestimmung des Neutralgasbereichs richtig anzuordnen, mussten eine Reihe von Vorversuchen durchgeführt werden. Diese Versuche waren aufgrund des eingeschränkten Messbereichs ($c \le 3000 \, ppm$) der Figaro-Sensoren notwendig. Eine Gasbelastung der Figaro-Sensoren deutlich oberhalb des Messbereichs hätte zu einer irreversiblen Schädigung der Sensorik geführt.

Die Schwergassensoren wurden in dieser Messreihe wie in Kapitel 3.3.2.1.1. beschrieben eingesetzt. Die Figaro-Sensoren sind klein und konnten daher direkt ohne Pumpen im Messfeld platziert werden (siehe Abb. 24). Insgesamt wurden für die verschiedenen Messreihen bis zu 8 Sauerstoffsensoren und bis zu 40 Figaro-Sensoren eingesetzt.



Abbildung 24: Anordnung der Neutralgassensoren im Messfeld

Die Ausrichtung des Sensorfeldes erfolgte in Hauptwindrichtung. Aufgrund der starken Abhängigkeit der Figaro-Sensoren von den Umgebungsbedingungen wurden jeweils pro x-Abstand drei Figaro-Sensoren ausgelegt. Die links (y = 1 m) und rechts (y = -1 m) von der Zentrallinie (y = 0 m) ausgelegten Sensoren dienen der Verifikation der Zentrallinie. Die Versuche wurden auf ebenen, hindernisfreien Gelände durchgeführt.

Im Rahmen der experimentellen Untersuchungen zur Breite des Schwergasbereichs wurden 3 Messungen durchgeführt. Die Anordnung der Sensoren für die jeweiligen Messungen ist in Anhang 6 aufgeführt. Die während der Messreihen herrschenden Umgebungsparameter sind in der nachfolgenden Tabelle 16 aufgelistet.

Massenstrom	Mittlere Wind-	Mittlere	Mittlere relative	Stabilitäts-	Bodenrauig-
[g/s]	geschw. [m/s]	Umgebungs-	Luftfeuchte [%]	klasse [-]	keit [m]

T 1 1 1 4	1/	TT 1	1 1	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	• • • • • • • • • • • • • • • • • • • •	G 1			1 1
anelle	16.	Imgenung	ocneainaii	ngen Lg	ande dec	Schwer-	und Na	entralgae	nereiche
I abunu 1	10.	Umeuvum	esocumen	112011 1/0	met uto	DUI WUI -	unu 111	uu aizas	DUIUIU
				- -					

[g/s]	geschw. [m/s]	Umgebungs- temperatur [°C]	Luftfeuchte [%]	klasse [-]	keit [m]
47,90	1,25	13,98	47,50	D	0,02
48,40	1,05	13,67	46,40	D	0,02
48,80	1,57	13,41	46,57	D	0,02

3.3.2.3. Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des Schwergasbereichs

Im Rahmen dieser Thematik wurde der Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des Schwergasbereichs untersucht. Für die verschiedenen Messreihen wurden hierbei ausschließlich die Schwergassensoren verwendet. Die Anordnung der Sensoren sowie die verschiedenen Quellhöhen sind in der nachfolgenden Abbildung 25 schematisch dargestellt.



Abbildung 25: Versuchsaufbau Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des Schwergasbereichs

Der Aufbau des Sensormessfeldes wurde während der verschiedenen Teilversuche nicht verändert. Lediglich die Quellhöhe (z_q) wurde während der Messreihe angepasst. Die Quellhöhe ist definiert als der Höhenunterschied der Unterkante des Verdampferauslasses bis zum Boden (siehe Abb. 25) und wurde hierbei über die Messreihe hinweg etappenweise, angefangen direkt vom Boden, erhöht. Die Anhebung der Quelle wurde solange fortgesetzt bis kein Schwergasbereich mehr von den Sensoren detektiert werden konnte. Während der Versuche herrschten nahezu gleichbleibende Umgebungsbedingungen, so dass eine Vergleichbarkeit der Messergebnisse gegeben ist. Die Ausrichtung des Sensorfeldes erfolgte in Hauptwindrichtung.

Zum Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des Schwergasbereichs wurden insgesamt 4 Messreihen durchgeführt. Die genaue Anordnung der Messpunkte für die untersuchten Quellhöhen sind in Anhang 7 aufgeführt. Die während der Messreihen herrschenden Umgebungsparameter sind in der nachfolgenden Tabelle 17 dargestellt.

Massenstrom	Mittlere Wind-	Mittlere	Mittlere relative	Stabilitäts-	Bodenrauig-
[g/s]	geschw. [m/s]	Umgebungs-	Luftfeuchte [%]	klasse [-]	keit [m]
		temperatur [°C]			
14,00	1,04	20,69	38,36	D	0,02
24,00	1,35	20,72	35,89	D	0,02
36,00	1,31	19,80	30,60	D	0,02
39,00	0,91	12,08	45,43	D	0,02

Tabelle 17: Umgebungsbedingungen Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des Schwergasbereichs

3.4. Ergebnisse experimenteller Untersuchungen

In diesem Unterkapitel werden die experimentellen Ergebnisse der Freisetzungs- und Ausbreitungsversuche beschrieben und erläutert. Die Gliederung entspricht hierbei der Gliederung des Versuchsaufbaus.

3.4.1. Freisetzungsversuche

Im nachfolgenden werden die experimentellen Ergebnisse der in Kapitel 3.3.1. dargestellten Freisetzungsszenarien erläutert. Ziel der experimentellen Untersuchungen ist die Ermittlung des instationären Massenstroms aus handelsüblichen Chlorgasflaschen sowie die Bestimmung einiger relevanter Größen wie Druck und Temperaturen in der Gas- und Flüssigphase als Vergleichswerte für die nachfolgenden Simulationen. Hierfür wurden insgesamt 7 Versuche mit zwei Gasflaschengrößen (2 ℓ , 10 ℓ) durchgeführt.

3.4.1.1. Leckage aus der Gasphase

Im Rahmen dieser Messreihe wurden insgesamt 4 Versuche mit jeweils unterschiedlichen Gasflaschengrößen (2 ℓ , 10 ℓ) durchgeführt. In allen Fällen wurde das Gas ausschließlich aus der Gasphase freigesetzt. Die Versuche wurden solange fortgesetzt, bis sich nahezu stationäre Ausströmungsbedingungen eingestellt hatten. Es werden zwei Versuchstage mit sehr unterschiedlichen Umgebungsbedingungen und Gastemperaturen miteinander verglichen. Während bei den Versuchen am 11.10.10 (in hellblau, blau dargestellt) eher niedrigere Gastemperaturen herrschten, so waren es am 16.06.11 (in orange, rot dargestellt) eher höhere Gastemperaturen.

Bevor das Ventil der Druckgasflasche schlagartig geöffnet wird, befindet sich das R134a bei einer jeweiligen Gastemperatur unter dem dazugehörigen Sättigungsdampfdruck. Hierbei stehen die Gas- und die Flüssigphase im Gleichgewicht. Wird nun das Ventil geöffnet, so sinkt der Druck – wie in Abbildung 26 und 27 dargestellt – ab.



Abbildung 26: Druckverläufe 2-ℓ-Flasche (Freisetzung aus der Gasphase)



Abbildung 27: Druckverläufe 10-ℓ-Flasche (Freisetzung aus der Gasphase)

Nach der Öffnung des Ventils strömt zuerst das gasförmige R134a aus der Flasche ab. Dies führt zu einem Druckabfall, so dass sich ein thermodynamisches Ungleichgewicht zwischen Gas- und Flüssigphase einstellt. Die Flüssigkeit kann auf diese schnelle Zustandsänderung zu Beginn nicht mit der notwendigen Verdampfung und einer damit verbundenen Temperaturabsenkung folgen, da sie von langsameren Wärme- und Stoffübertragungsmechanismen an der Phasengrenze abhängig ist. Die Flüssigkeit ist in diesem Zustand überhitzt, da sie nicht die dem aktuellen Flaschendruck entsprechende Sättigungstemperatur aufweist [110]. Zum Abbau der Überhitzung, setzt nach Ablauf der sogenannten Entlöseverzugszeit in der Flüssigkeit eine starke Entspannungsverdampfung ein. Diese wirkt dem Druckabfall entgegen und führt im Falle einer stärkeren Verdampfung als Gas über das Ventil abströmen kann, sogar zu einem kurzeitigen Druckanstieg in der Gasflasche (siehe Abb. 28). Der Druckanstieg ist dann besonders ausgeprägt, wenn hohe Anfangs-Sättigungstemperaturen und die damit verbundenen hohen Flaschendrücke nach dem Öffnen des Ventils zu einem großen und steilen Druckabbau und damit zu einem großen thermodynamischen Ungleichgewicht führen. Im Falle von hohen Gastemperaturen ist ein deutlich größerer Druckanstieg zu verzeichnen [34].



Abbildung 28: Druckschwankung zu Entlastungsbeginn (Freisetzung aus der Gasphase)

Die 10-ℓ-Flasche mit einer Gastemperatur von 12,4 °C weicht von dem zuvor beschriebenen Vorgang ab. Grund hierfür ist eine längere Entlöseverzugszeit aufgrund eines nicht ausreichenden thermodynamischen Ungleichgewichts. Die Entlöseverzugszeit bestimmt den Beginn, die Dauer und die Heftigkeit des Behälteraufwallens. Sie ist abhängig vom Füllgrad, von der Anfangsgastemperatur sowie vom Entlastungsquerschnitt und umfasst die Zeitspanne vom Öffnen des Flaschenventils bis hin zur Bildung von Siedekeimen und dem sichtbaren Heranwachsen der Blasen auf ein Mindestmaß von 0,1 mm [31]. Füllgrad und Entlastungsquerschnitt sind im Vergleich zum Versuch der 10-ℓ-Flasche mit einer

Gastemperatur von 32,82 °C nahezu gleich. Die deutlich niedrigere Anfangsgastemperatur von 12,4 °C hingegen führt zu einer längeren Entlöseverzugszeit. Nach dem Öffnen des Flaschenventils führt der damit verbundene niedrigere Sättigungsdampfdruck zu einer geringeren Druckentlastungsgeschwindigkeit. Damit einhergehend vergeht eine längere Zeit bis sich das zur Keimaktivierung notwendige thermodynamische Ungleichgewicht in der Flasche einstellt [132].

Zur Überprüfung des Einflusses der Entlöseverzugszeit (t_e) auf die Druckschwankung, wurde diese mit der nachfolgend dargestellten Korrelationsgleichung nach Friedel [30] berechnet.

$$\frac{t_e}{t_{e,min}} = 1 + 0,0104 \cdot \left(\frac{A_{BQ,i}}{A_{FV}} - 1\right)^{0,94} \cdot \left(\frac{V_{BH,i}}{V_g} - 1\right)^{-0,55} \cdot \left(\frac{\rho_{fl}}{\rho_g} - 1\right)^{0,012} \cdot \left(\frac{m_{fl}}{m_g} - 1\right)^{0,1} \cdot \left(\frac{\gamma}{d_{B,krit}^2 \cdot \rho_{fl} \cdot g} \cdot \frac{\eta_{fl}}{\eta_g}\right)^{0,075}$$
(7)

mit $t_{e,min} = 75 \ ms$ und $d_{B,krit} = 10^{-4} \ m$

Die Entlöseverzugszeit kann mit einem relativen Fehler von kleiner ± 30 % wiedergegeben werden. Der Anwendungsbereich der Beziehungen ist durch die Randbedingungen $0,18 \le \frac{p_0}{p_{krit}} \le 0,36, 17 \le \frac{\rho_{fl}}{\rho_g} \le 105, 0,5 \le \frac{V_g}{V_{BH,i}} \le 0,75$ und $35 \le \frac{A_{BQ,i}}{A_{FV}} \le 720$ begrenzt [33]. Die berechneten Ergebnisse für die durchgeführten Messreihen sind in den nachfolgenden Tabellen 18 und 19 dargestellt. Es werden die Entlöseverzugszeiten der 2- ℓ - und der 10- ℓ -Flasche separat betrachtet, um den Einfluss der Behältergeometrie zu berücksichtigen.

Versuchstag	chstag Anfangsdruck p ₀ [bar] Anfangsgastemperatur T ₀ [°C]		Entlöseverzugszeit t _e [ms]
11.10.10	4,81	14,20	150,84
16.06.11	8,46	33,25	145,14

Tabelle 18: Entlöseverzugszeit 2-l-Flasche (Freisetzung aus der Gasphase)

Tabelle 19: Entlöseverzugszeit 10-ℓ-Flasche (Freisetzung aus der Gasphase)

Versuchstag	Anfangsdruck p ₀ [bar]	Anfangsgastemperatur T ₀ [°C]	Entlöseverzugszeit t _e [ms]
11.10.10	4,53	12,40	239,72
16.06.11	8,36	32,82	217,75

Es zeigt sich, dass in allen Fällen mit einem niedrigeren Anfangsdruck (p_0) und einer damit verbundenen niedrigeren Anfangsgastemperatur (T_0) , längere Entlöseverzugszeiten zu verzeichnen sind. Darüber hinaus ist festzustellen, dass der Versuch der 10- ℓ -Flasche mit einer Gastemperatur von 12,4 °C sich auch bei der Entlöseverzugszeit (t_e) hervorhebt, allerdings nicht in solchen Maße wie bei der Durchführung der Experimente.

Im Rahmen der Entspannungsverdampfung findet der Effekt des Blasensiedens statt. Um ein erneutes thermodynamisches Gleichgewicht auf einem niedrigeren Energieniveau herzustellen, muss die Flüssigkeit Wärme abgeben. Dies geschieht durch den Energieeintrag an Siedekeime oder bereits vorhandene Dampfblasen. Die Blasen sorgen für den Austrag von Masse und Energie in Form von Dampf [32]. Die heranwachsenden und aufsteigenden Blasen führen durch Mitreißen und Verdrängen von Flüssigkeit zu einem Aufwallen des Behälterinhalts. Der anfangs reine gasförmige Massenstrom kann jetzt schon vereinzelte aus der Flüssigkeit ausgetragene Tropfen mitführen. Die Blasen in der Flüssigkeit führen zu einer Volumenvergrößerung, welche mit einem Anstieg des aufwallenden Behälterinhalts verbunden ist. Sobald der aufwallende Behälterinhalt auf das Flaschenventil auftritt, führt dies zu einer Zweiphasenströmung [53].

Anhand der Experimente wurde festgestellt, dass eine Zweiphasenströmung in der Anfangsphase, ausgenommen dem Versuch der 10-ℓ-Flasche mit einer Anfangs-Gastemperatur von 12,4 °C, auftrat. Diese wird mittels der während der Versuche durchgeführten Foto- und Videoaufnahmen in Abbildung 29 dargestellt.



Abbildung 29: Fotoaufnahme Zweiphasenströmung (Freisetzung aus der Gasphase)

Der Zeitraum und die Dauer der Zweiphasenströmung für die verschiedenen Versuche konnten mittels der Videoaufnahmen festgestellt werden und sind in der Tabelle 20 dargestellt.

Gastemperatur	Volumen [ℓ]	Zeitraum
[°C]		Zweiphasen-
		strömung [sec]
14,2	2	0,2 - 11
33,25	2	0,1 - 12
12,4	10	%
32,82	10	0,1 - 12

Tabelle 20: Zeitraum Zweiphasenströmung (Freisetzung aus der Gasphase)

Der Zeitraum der Zweiphasenströmung spiegelt sich im zeitlichen Masseverlust der Freisetzung wieder. Abbildung 30 und 31 verdeutlichen, dass innerhalb der ersten 12 Sekunden der größte Masseverlust pro Zeit zu verzeichnen ist.



Abbildung 30: Massenverlust 2-ℓ-Flasche (Freisetzung aus der Gasphase)



Abbildung 31: Massenverlust 10-*l*-Flasche (Freisetzung aus der Gasphase)

Die ausbleibende Zweiphasenströmung bei dem Versuch der 10-ℓ-Flasche mit einer Anfangs-Gastemperatur von 12,4 °C verdeutlicht sich in der Abbildung 32. Der Masseabfall pro Zeit insbesondere in der Anfangsphase ist deutlich geringer als bei den anderen Versuchen. Grund hierfür sind die niedrigere Anfangsgastemperatur und die damit verbundene längere Siedeverzugszeit. Das sich in der Flasche einstellende thermodynamische Ungleichgewicht und das damit einhergehende Blasensieden sind nicht groß genug, um den Behälterinhalt bis zum Flaschenventil aufzuwallen. Es findet eine reine Gasströmung statt.



Abbildung 32: Masseverlust in der Anfangsphase (Freisetzung aus der Gasphase)

Die Verdampfung aus der Flüssigphase verringert sich mit zunehmender Annäherung an das thermische Gleichgewicht. Dies führt, in Verbindung mit einer geringen Masse in der Flasche, sukzessive zu einem Rückgang des aufgewallten Gemisches. Jetzt wird wieder nur Dampf mit einzelnen Flüssigtropfen über das Ventil abgeführt [34]. Der Masseverlust pro Zeit verringert sich deutlich (siehe Abb. 30 und 31). Gleichzeitig mit der Verringerung der Verdampfung fällt der Druck im Behälter stetig ab. Dieser Vorgang geht solange weiter bis sich Umgebungsdruck in der Flasche eingestellt hat (siehe Abb. 26 und 27). Jetzt findet nur noch ein ganz geringer Masseverlust statt. Dieser wird durch den Energieeintrag aus der Umgebung bestimmt und lässt die verbleibende Flüssigphase langsam verdampfen.

Die nachfolgenden Abbildungen 33-36 stellen den Temperaturverlauf innerhalb der Flasche während des Ausströmvorgangs für die verschiedenen Versuche dar. Zwischen den Temperaturmessungen am 11.10.10 und am 16.06.11 gibt es eine unterschiedliche Darstellung der Messergebnisse. Während bei den Versuchen am 11.10.10 die Temperatur noch direkt auf den AD-Wandler aufgeschaltet wurde und gewisse Schwankungen der Temperatur anzeigt, so wurde bei den Versuchen am 16.06.11 ein Temperturauswertemodul vom Typ Agilent U2802A zwischengeschaltet. Dieses Temperaturauswertemodul führt eine automatische Glättung der Messergebnisse durch.



Abbildung 33: Temperaturverlauf 2-ℓ-Flasche 11.10.10 (Freisetzung aus der Gasphase)



Abbildung 34: Temperaturverlauf 2-ℓ-Flasche 16.06.11 (Freisetzung aus der Gasphase)



Abbildung 35: Temperaturverlauf 10-*l*-Flasche 11.10.10 (Freisetzung aus der Gasphase)



Abbildung 36: Temperaturverlauf 10-*l*-Flasche 16.06.11 (Freisetzung aus der Gasphase)

 $T1_{fl}$ stellt den Temperaturverlauf der Flüssigphase dar. Diese entspricht der Siedetemperatur von R134a entsprechend des herrschenden Dampfdruckes [44]. R134a hat bei Umgebungsdruck eine Siedetemperatur von ca. -26 °C. Diese stellt sich bei der 2- ℓ -Flasche nach ca. 25 Sekunden und bei der 10- ℓ -Flasche nach ca. 110 Sekunden unabhängig von der Anfangstemperatur ein.

Die Thermoelemente $T2_{fl}$ und $T3_{fl}$ sind eingangs in der Flüssigkeitsphase angeordnet. Aufgrund der zunehmenden Verdampfung und dem damit verbundenen abnehmenden Flüssigkeitsspiegel zeigen diese jedoch im späteren die Temperatur der Gasphase. Bis zu diesem Zeitpunkt lässt sich unter Berücksichtigung der Messungenauigkeit der Thermoelemente von ± 1,5 °C feststellen, dass die gesamte Flüssigphase eine einheitliche Temperatur aufweist. Die durch das Blasensieden hervorgerufenen, aufsteigenden Blasen sorgen für eine gute Durchmischung und damit für eine einheitliche Flüssigkeitstemperatur.

Die Gastemperatur (T_g) kühlt sich bedingt durch die Entspannung und die starke Verdampfung der Flüssigphase zu Beginn deutlich ab. Durch das Aufwallen des Behälterinhalts wird das Thermoelement jedoch in der Anfangsphase durch Flüssigphase beeinflusst. Nach dem allmählichen Rückgang des aufgewallten Gemisches, liegt das Thermoelement wieder im Bereich der Gasphase. In der Gasphase verringert sich die Abkühlung mit abnehmender Verdampfung der Flüssigphase. Der Energieeintrag aus der Umgebung in die Gasphase führt zu einer weiteren Verlangsamung der Abkühlung. Nachdem die Verdampfung nahezu zum Erliegen gekommen ist, dominiert der Wärmeeintrag aus der Umgebung. Die Gasphase beginnt sich ab diesem Zeitpunkt kontinuierlich zu erwärmen.

In der Gasphase bildet sich eine Temperaturschichtung aufgrund vom Dichteunterschieden aus (Abb. 33-36). Vom Flüssigkeitsstand zum Flaschenkopf, also in y-Richtung, wird das Gas immer wärmer. Der große Temperaturanstieg an dem Thermoelement $T3_{fl}$ der Abbildungen 33-35 lässt sich durch eine Benetzung des Thermoelements mit Flüssigphase erklären. Nachdem die verbleibende Flüssigphase verdampft ist, zeigt das Thermoelement die Gastemperatur.

Darüber hinaus wurde mittels weiterer experimenteller Untersuchungen an einer 10-ℓ-Flasche festgestellt, dass es auch eine Temperaturverteilung in der Gasphase von der Mitte der Flasche bis zur Außenwand, also in x-Richtung, gibt. Diese wird anhang der nachfolgenden Abbildung 37 verdeutlicht.



Abbildung 37: Horizontale Temperaturverteilung in der Gasphase (Freisetzung aus der Gasphase)

Die Temperaturverläufe der in einer Ebene in unterschiedlichen Tiefen angeordneten Messfühler zeigen eine Erwärmung der Gasphase von der Mitte bis zur Außenwand. Von der Flaschenmitte bis nahezu zur Außenwand ist zeitweise eine Temperaturdifferenz von 5 °C zu verzeichnen. Grund für diese inhomogene Temperaturverteilung ist der aufsteigende Verdampfungsmassenstrom der Flüssigkeit. Dieser ist kälter als die Gasphase und steigt, bedingt durch den durch das Flaschenventil zentral abströmenden Massenstrom mittig stärker nach oben als am Flaschenrand. Dies führt zu einer größeren Abkühlung der Gasphase in der

Flaschenmitte. Darüber hinaus hat der Wärmeeintrag aus der Umgebung größeren Einfluss auf das Wand nahe Gas.

3.4.1.2. Leckage aus der Flüssigphase

Im Rahmen dieser Messreihe wurde ein Versuch mit einer Gasflaschengröße von 10 ℓ durchgeführt. Das Gas wurde dabei ausschließlich aus der Flüssigphase freigesetzt. Der Versuch wurde solange fortgesetzt, bis die Gasflasche leer war.

Bevor das Ventil der Druckgasflasche geöffnet wird, stehen die Gas- und die Flüssigphase im thermodynamischen Gleichgewicht. Wird nun das Ventil geöffnet, so sinkt der Druck – wie in Abbildung 38 dargestellt – ab.



Abbildung 38: Druckverlauf (Freisetzung aus der Flüssigphase)

Nach der Öffnung des Ventils verändert sich der Druck in der Phase 1 bedingt durch die Freisetzung der Flüssigphase insgesamt nur geringfügig. Dies liegt daran, dass zuerst die Flüssigphase aus der Gasflasche gedrückt wird. Mittels der während der Experimente aufgenommen Foto- und Videoaufnahmen konnte festgestellt werden, dass die nachfolgend abgebildete Flüssigkeitsfreisetzung (Abb. 39) innerhalb der ersten 36 Sekunden erfolgte.




Aufgrund des eingeschränkten Ausstritts der Flüssigphase aus dem Ventil, findet insgesamt nur eine geringe Druckabnahme statt. Der sinkende Flüssigkeitsspiegel innerhalb der auf dem Kopf stehenden Flasche erzeugt über die Zeit ein größeres Gasvolumen in der Flasche, welches den leichten Druckabfall und die damit verbundene Temperaturänderung der druckabhängigen Siedetemperatur (Abb. 41) erklärt. Die in der Abbildung 38 zu erkennende leichte Druckschwankung nach zwei Sekunden ergibt sich aus dem Siedeverzug.

In der zweiten Phase ist eine starke Druckabnahme zu verzeichnen. Die Videoaufnahmen verdeutlichen, dass in dieser Phase eine reine Gasströmung stattgefunden hat. Diese spiegelt sich auch im Verlauf des Masseverlusts wieder. Wenn hingegen in der Phase 1 nahezu der gesamte Flascheninhalt ausgeströmt ist, so ist in der Phase 2 nur noch ein ganz geringer Masseverlust zu verzeichnen. In der Phase 3 hat sich Umgebungsdruck in der Flasche eingestellt. Eine Gasströmung findet ab diesem Zeitpunkt nicht mehr statt. Die Flasche ist leer (siehe Abb. 40).



Abbildung 40: Massenverlust (Freisetzung aus der Flüssigphase)

Die nachfolgende Abbildung 41 stellt den Temperaturverlauf innerhalb der Flasche während des Ausströmvorgangs dar. Der Temperaturverlauf stellt eine Mischung aus Flüssig- und Gastemperatur dar, welche im nachfolgenden erläutert wird.



Abbildung 41: Temperaturverlauf (Freisetzung aus der Flüssigphase)

Die Temperaturen in der Phase 1 stellen die Siedetemperatur von R134a entsprechend des temporär herrschenden Druckes dar. Der leichte Druckabfall erzeugt ein kontinuierliches Sinken der Siedetemperatur in der Flüssigphase. In der Phase 2 führen der schlagartige Druckabfall und die damit verbundene Expansion zu einer deutlichen Abkühlung des Gases. Die stärkere Abkühlung der Thermoelemente $T1_{fl}$ und $T2_{fl}$ lassen sich durch eine teilweise Benetzung mit Flüssigphase des zuvor langsamen gesunkenen Flüssigkeitsspiegels erklären. Während der starken Druckabnahme sinkt die Siedetemperatur der Flüssigphase, welches diese starke Abkühlung begründet. Der Temperaturabfall am Thermoelement $T2_{fl}$ ist größer, weil die Flüssigkeit dieses Thermoelement erst zu einem späteren Zeitpunkt benetzt hat und somit die Flüssigkeit das Thermoelement bei niedrigeren Drücken und damit verbundenen tieferen Siedetemperaturen benetzt. Nachdem die Benetzung an den Thermoelementen verdampft ist, erwärmen sich diese an der Gastemperatur. Die Thermoelemente $T3_{fl}$ und $T4_{fl}$ liegen nahe dem Austritt und wurden nicht benetzt. Sie zeigen die reine Gastemperatur. In der Phase 3 gibt es kein Ausströmen mehr, so dass die Umgebungswärme die in der Flasche verbliebene Gasphase nun kontinuierlich erwärmt. In der Gasflasche bildet sich aufgrund der Dichteunterschiede eine Temperaturschichtung aus.

3.4.1.3. Liegende Flasche

Im Rahmen dieser Messreihe wurden zwei Versuche mit jeweils unterschiedlichen Gasflaschengrößen (2 ℓ , 10 ℓ) durchgeführt. Die Freisetzung fand in allen Fällen aus einer liegenden Flasche statt. Die Versuche wurden solange fortgesetzt, bis sich nahezu stationäre Ausströmungsbedingungen eingestellt hatten.

Bevor das Ventil der Druckgasflasche schlagartig geöffnet wird, stehen die Gas- und die Flüssigphase im Gleichgewicht. Wird nun das Ventil geöffnet, so sinkt der Druck – wie in Abbildung 42 dargestellt – ab.



Abbildung 42: Druckverläufe (Liegende Flasche)



Abbildung 43: Druckverläufe Nahansicht (Liegende Flasche)

Nach der Öffnung des Ventils verändert sich der Druck innerhalb der ersten 2 Sekunden nur geringfügig (Abb. 43). Grund hierfür ist die Freisetzung von reiner Flüssigphase. Der Druck ändert sich zu diesem Zeitpunkt nur durch die Zunahme des Gasraumes aufgrund des sinkenden Flüssigkeitsspiegels. Anhand der experimentellen Untersuchungen konnte festgestellt werden, dass innerhalb der ersten 2 Sekunden der größte Masseverlust pro Zeit zu verzeichnen ist, was die Freisetzung reiner Flüssigphase bestätigen würde (Abb. 46).

Sobald der Flüssigkeitsspiegel den Öffnungsquerschnitt erreicht hat, findet ein starker Druckabfall statt. Dieser wird durch die entstehende Zweiphasenströmung erzeugt. Im Rahmen dieser Zweiphasenströmung kann ein Großteil der Gasphase ausströmen. Der damit einstehende starke Druckabfall erzeugt ein thermodynamisches Ungleichgewicht, so dass sich in Verbindung mit der Siedeverzugszeit sowohl bei der 2- ℓ - als auch bei der 10- ℓ -Flasche nach 3 Sekunden eine Druckschwankung einstellt (Abb. 42). Anhand der Experimente wurde festgestellt, dass eine Flüssig- bzw. Zweiphasenströmung in der Anfangsphase bei der kleinen Flasche innerhalb der ersten 14 Sekunden und bei der großen Flasche innerhalb der ersten 15 Sekunden auftrat. Diese wird mittels der während der Versuche durchgeführten Foto- und Videoaufnahmen im nachfolgenden ausschnittsweise dargestellt (Abb. 44).



Abbildung 44: Fotoaufnahme Flüssig- bzw. Zweiphasenströmung (Liegende Flasche)

Die zuvor genannten Flüssig- bzw. Zweiphasenströmungen spiegeln sich im zeitlichen Masseverlust der Freisetzung wieder. Innerhalb der ersten 15 Sekunden ist in beiden Fällen der größte Masseverlust pro Zeit zu verzeichnen (Abb. 45).



Abbildung 45: Massenverlust (Liegende Flasche)



Abbildung 46: Massenverlust durch Flüssigphase (Liegende Flasche)

Die nachlassende Verdampfung aus der Flüssigphase führt zu einer Abnahme des Druckes. Nach 22 Sekunden stellt sich Umgebungsdruck bei der 2- ℓ -Flasche und nach 87 Sekunden bei der 10- ℓ -Flasche ein (Abb. 42). Damit einhergehend verringert sich auch der Masseverlust pro Zeit. Nach dem Erreichen des Umgebungsdrucks findet nur noch ein ganz geringer Masseverlust statt. Dieser wird durch den Energieeintrag aus der Umgebung bestimmt und lässt die in der Flasche verbleibende Flüssigphase langsam verdampfen. Die nachfolgenden Abbildungen 46 und 47 stellen die Temperaturverläufe während des Ausströmvorgangs für die beiden Versuche dar. Sie werden im nachfolgenden erläutert.



Abbildung 47: Temperaturverlauf 2-ℓ-Flasche (Liegende Flasche)



Abbildung 48: Temperaturverlauf 10-ℓ-Flasche (Liegende Flasche)

Bei dem Temperaturverlauf der 2-ℓ-Flasche ist festzustellen, dass alle 4 Thermoelemente die Siedetemperatur von R134a unter dem temporär herrschenden Druck anzeigen. Somit haben die Thermoelemente den gesamten Freisetzungsprozess über in der Flüssigkeitsphase gemessen. In der Anfangsphase gibt es bedingt durch die Entspannungsverdampfung eine starke Abkühlung der Flüssigkeit. Nachdem sich nahezu Umgebungsdruck in der Flasche eingestellt hat, herrscht bei allen Thermoelementen unter Berücksichtigung der Messungenauigkeit eine Siedetemperatur von -26 °C.

Bei dem Temperaturverlauf der 10-ℓ-Flasche ist festzustellen, dass die Thermoelemente nicht dauerhaft in der Flüssigphase gemessen haben. Bis zu einer Zeit von etwa 45 Sekunden messen die Thermoelemente die Temperatur der Flüssigphase. Sie zeigen die dem temporär herrschenden Druck entsprechende Siedetemperatur von R134a an. Aufgrund des sinkenden Flüssigkeitsspiegels befinden sich danach in der Gasphase. Die unterschiedlichen Ansprechzeiten der Thermoelemente lassen sich durch eine leicht schräge Anordnung der Thermoelemente innerhalb der Flasche begründen. Nachdem sich nach ca. 1,5 Minuten nahezu Umgebungsdruck in der Flasche eingestellt hat und die Verdampfung aus der Flüssigphase weitestgehend versiegt ist, zeigen alle Thermoelemente die Erwärmung des Gases durch die Umgebungswärme.

3.4.2. Ausbreitungsversuche

In diesem Kapitel werden die experimentellen Ergebnisse der Ausbreitungsversuche dargestellt und beschrieben. Ziel dieser experimentellen Untersuchungen ist die Bereitstellung Vergleichswerten für nachfolgende Ausbreitungsberechnungen. von Mittels der Vergleichswerte soll die Funktionsweise ausgewählter Ausbreitungsmodelle bewertet werden. Sämtliche Versuche fanden unter Umgebungsbedingungen statt. Das kontinuierlich ausströmende Gas wurde je Versuch über einen Zeitraum von ca. 5 Minuten freigesetzt. Die Sensoren wurden in Windrichtung ausgerichtet. Die im Rahmen der Auswertung maßgebenden Konzentrationen ergeben sich aus dem maximal gemessenen Konzentrationswert $c(\max)$ je Sensor aus dem Zeitraum mit optimaler Anströmung. Die Angaben zur Windgeschwindigkeit und zum Massenstrom sind über diesen Zeitraum gemittelt. Die angegebene Windgeschwindigkeit ist die lokale Windgeschwindigkeit v_z im Versuchsfeld. In Allen Fällen wurde das Kältemittel R134a (1,1,1,2–Tetrafluaethan) freigesetzt.

3.4.2.1. Abmessungen des Schwergasbereichs

Die Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Geometrie der Schwergaswolke, also zur Höhe, Breite und Länge der Schwergaswolke werden nachfolgend dargestellt.

3.4.2.1.1. Länge

Im Rahmen dieser Messreihe wurden insgesamt 3 Versuche mit jeweils unterschiedlichen Massenströmen (12,4 g/s; 24,9 g/s; 36,3 g/s) durchgeführt. Um diese Versuche miteinander vergleichen zu können, mussten relative ähnliche Umgebungsbedingungen herrschen. Die in Abbildung 49 dargestellten experimentellen Ergebnisse zeigen eine Variation der Windgeschwindigkeit 1.51 m/s. Diese annähernd von 1.1 bis gleichen Umgebungsbedingungen Versuchsdurchführung während der ermöglichen die Vergleichbarkeit der einzelnen Versuche miteinander.



Abbildung 49: Länge der Schwergaswolke für verschiedene Massenströme

Abbildung 49 zeigt den Verlauf der Konzentration über den Abstand zur Quelle in Windrichtung. Die in Gelb dargestellten Punkte stellen das Ende des Schwergasbereichs ($c \ge 1$ Vol.-%) dar. Aus dem Diagramm ist ersichtlich, dass höhere Massenströme zu höheren Konzentrationen in der Umgebung führen. Darüber hinaus ist festzustellen, dass höhere Massenströme zu einem größeren Schwergasbereich führen. Während der Schwergasbereich bei einem Volumenstrom von 12,4 g/s nur etwa 5,6 m lang ist, so ist er bei 36,3 g/s schon 8,2 m lang.

3.4.2.1.2. Breite

Zu Ermittlung der Breite der Wolke wurden insgesamt 3 Messreihen mit jeweils unterschiedlichen Massenströmen (9 g/s; 23 g/s; 35 g/s) durchgeführt. Aufgrund einer begrenzten Anzahl von zur Verfügung stehender Sensoren konnte die Breite nur etappenweise ermittelt werden. Die an den jeweiligen Messpunkten in Abbildung 50 dargestellten lokalen Windgeschwindigkeiten und Massenströme stellen die für den jeweiligen Teilversuch gemessenen Mittelwerte dar.



Abbildung 50: Breite der Schwergaswolke für verschiedene Massenströme

Abbildung 50 beschreibt den Verlauf der Breite der Schwergaswolke (y(1 Vol.-%)) über den Abstand zur Quelle in Windrichtung. In der Abbildung ist jedoch nicht die gesamte Breite der Wolke dargestellt, sondern nur die Hälfte. Die x-Achse fungiert als Symmetrieachse. Der Schwergasbereich ist als der Bereich definiert, in dem Schwergaskonzentrationen ≥ 1 Vol.-% vorhanden sind. y(1 Vol.-%) beschreibt somit den Abstand von der Symmetrieachse bis zu dem Punkt in y-Richtung an dem eine Konzentration von 1 Vol.-% erreicht wird.

Aus dem Diagramm ist ersichtlich, dass die Breite der Schwergaswolke mit zunehmendem Massenstrom steigt. Bei einem Massenstrom von 9 g/s ist die Wolke 2,75m breit und bei einem Massenstrom von 35 g/s ist sie bereits 4,9 m breit. Darüber hinaus ist zu erkennen, dass die maximale Breite der Schwergaswolke auf einer Länge von 1/2 bis $1/3 \cdot x$ erreicht wird. Ein höherer Massenstrom führt zu einer längeren Schwergaswolke und damit zu einem größeren Schwergasgebiet.

3.4.2.1.3. Höhe

Zur Ermittlung der Höhe der Schwergaswolke wurden 4 Messreihen mit jeweils unterschiedlichen Massenströmen (10 g/s; 18 g/s; 28 g/s; 50 g/s) durchgeführt. Da auch für diese Messreihen die Anzahl der Sensoren nicht ausreichend war, konnte die Höhe der Wolke nur etappenweise detektiert werden. Die an den jeweiligen Messpunkten in Abbildung 51 dargestellten lokalen Windgeschwindigkeiten und Massenströme stellen die für den jeweiligen Teilversuch gemessenen Mittelwerte dar.



Abbildung 51: Höhe der Schwergaswolke für verschiedene Massenströme

Abbildung 51 zeigt den Verlauf der Höhe der Schwergaswolke ($z(1 \ Vol.-\%)$) über den Abstand zur Quelle in Windrichtung. $z(1 \ Vol.-\%)$ beschreibt den Abstand von der x-Achse bis zu dem Punkt in z-Richtung an dem eine Konzentration von 1 Vol.-% erreicht wird.

Das Diagramm lässt erkennen, dass höhere Massenströme zur einer größeren Wolkenhöhe führen. In einer Entfernung von 1 m zur Quelle ist die Wolke bei einem Massenstrom von 10 g/s etwa 11 cm hoch, während sie bei einem Massenstrom von 50 g/s schon 24 cm hoch ist. Darüber hinaus kann festgestellt werden, dass die Höhe der Wolke nahezu linear mit der Distanz zur Quelle abfällt. Auch in dieser Abbildung zeigt sich, dass höhere Massenströme zu einer größeren Länge des Schwergasbereichs führen.

3.4.2.2. Länge Schwer- und Neutralgasbereich

Zur Ermittlung der Länge des Schwer- und Neutralgasbereichs wurden 3 Messreihen mit annähernd gleichen Massenströmen ($\approx 48,4$ g/s ± 1 %) jedoch unterschiedlichen Windgeschwindigkeiten (1,05 m/s; 1,25 m/s; 1,57 m/s) durchgeführt. Der Schwergasbereich endet bei einer Konzentration von 1 Vol.-%. Der Neutralgasbereich ist durch Konzentrationen von 0 bis 1 Vol.-% definiert. Der gesamte Konzentrationsverlauf von Schwer- und Neutralgasgebereich ist in Abbildung 52 in logarithmischer Form dargestellt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit werden Schwer- und Neutralgasbereich in den danach folgenden Abbildungen 53 (Schwergas) und 54 (Neutralgas) separat dargestellt und beschrieben.



Abbildung 52: Länge des Schwer- und Neutralgasbereichs für verschiedene Windgeschwindigkeiten

Abbildung 53 zeigt den Verlauf der Konzentration über den Abstand zur Quelle in Windrichtung für den Schwergasbereich. Unter der Annahme eines konstanten Massenstroms lässt sich feststellen, dass eine stärkere Windgeschwindigkeit zu einem längeren Schwergasbereich führt. Während bei einer Windgeschwindigkeit von 1,05 m/s eine Schwergaslänge von 7,2 m erreicht wird, so sind es bei 1,57 m/s bereits 7,7 m.



Abbildung 53: Länge des Schwergasbereichs für verschiedene Windgeschwindigkeiten



Abbildung 54: Länge des Neutralgasbereichs für verschiedene Windgeschwindigkeiten

Abbildung 54 zeigt den Verlauf der Konzentration über den Abstand zur Quelle in Windrichtung für den Neutralgasbereich. Zur besseren Übersicht wurden die Konzentrationen der im Kapitel 3.3.2.2. dargestellten Figaro-Sensoren mit gleichem x-Abstand zur Quelle gemittelt. Wie bereits für den Schwergasbereich festgestellt wurde, führt eine höhere Windgeschwindigkeit bei einem konstanten Massenstrom auch im Neutralgasbereich zu einem höheren Konzentrationsverlauf. Bei einer Windgeschwindigkeit von 1,05 m/s ist in 9 m Entfernung zur Quelle eine Konzentration von 3200 ppm festzustellen, bei einer Windgeschwindigkeit von 1,57 m/s sind es immerhin noch 4400 ppm.

3.4.2.3. Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des Schwergasbereichs

Zur Ermittlung des Einflusses der Quellhöhe auf die Länge des Schwergasbereichs wurden 4 Messreihen mit jeweils unterschiedlichen Massenströmen (14 g/s; 24 g/s; 36 g/s; 39 g/s) durchgeführt. Da die Länge des Schwergasbereichs für jede Quellhöhe neu bestimmt werden musste, mussten für jeden Massenstrom mehrere Versuche durchgeführt werden. Die an den maximalen Längen des Schwergasbereichs in Abbildung 55 dargestellten lokalen Windgeschwindigkeiten und Massenströme stellen die für den jeweiligen Teilversuch gemessenen Mittelwerte dar.



Abbildung 55: Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des Schwergasbereichs für verschiedene Massenströme

Abbildung 55 zeigt den Einfluss der Quellhöhe auf die Länge der Schwergaswolke (x(1 Vol.-%)). x(1 Vol.-%) beschreibt hierbei den Abstand vom Verdampferauslass bis zu dem Punkt in x-Richtung an dem eine Konzentration von 1 Vol.-% erreicht wird.

Das Diagramm lässt erkennen, dass der Schwergasbereich sich mit zunehmender Quellhöhe zurück zieht. Innerhalb einer Quellhöhe von 0 bis 25 cm ist nur eine geringe Veränderung der Länge des Schwergasbereichs zu erkennen. Ab einer Quellhöhe über 25 cm verkleinert sich die Länge des Schwergasbereichs insbesondere bei den kleineren Massenströmen (14 g/s; 24 g/s) rapide. Darüber hinaus lässt sich erkennen, dass die Länge des Schwergasbereichs bei gleicher Quellhöhe mit zunehmendem Massenstrom steigt.

4. Mathematische Berechnungsgrundlagen

In diesem Kapitel werden jeweils die verwendeten Berechnungsverfahren und Modelle für die Freisetzungs- und Ausbreitungsberechnungen beschrieben. Das erste Unterkapitel beschreibt das weiterentwickelte Berechnungsverfahren zur Freisetzung von schweren Gasen aus handelsüblichen Gasflaschen. Das zweite Unterkapitel erläutert die verwendeten Ausbreitungsmodelle.

4.1. Stofffreisetzung aus Druckgasflaschen

Neben Schwergasfreisetzungen im größeren Maßstab, wie z.B. aus verfahrenstechnischen Anlagen bei Störfällen, stellen auch Schwergasfreisetzungen in kleineren Maßstab, wie z.B. aus handelsüblichen Druckgasflaschen eine erhebliche Gefahr für Mensch und Umwelt dar. Die Freisetzung kann hierbei durch einen Unfall oder im Rahmen einer Freisetzung durch Unbefugte hervorgerufen werden. Um die Schwergasausbreitung durchführen zu können, muss man möglichst genaue Angaben über den zeitlichen Verlauf des Massenstroms haben. Ein zeitlich veränderlicher Massenstrom führt zu zeitlich veränderlichen Gaskonzentrationen in der Umgebung. Um Aussagen zu genauen Schädigungen von Personen machen zu können, muss die Dosis bekannt sein. Die Dosis beschreibt die über einen Expositionszeitraum aufgenommene Menge an Schadstoff und ist abhängig vom zeitlich veränderlichen Massenstrom. Das nachfolgend dargestellte Berechnungsverfahren hat zum Ziel den Massenstrom für beliebige Stoffe und Gasflaschengeometrien unter Berücksichtigung des Freisetzungsszenarios zu berechnen. Wird eine stehende Gasflasche geöffnet, so ist mit einer reinen Gas- bzw. mit einer kombinierten Zweiphasen-/Gasströmung zu rechnen. Kippt eine Gasflasche um und das Ventil bricht ab, so tritt zuerst eine reine Flüssigkeitsströmung aus, die Absinken des Flüssigkeitsspiegels Flasche mit dem innerhalb der in eine Zweiphasenströmung und im späteren in einen reine Gasströmung übergeht. Die Art der Freisetzung – einphasig oder zweiphasig – sowie die Lage der Flasche haben hierbei starken Einfluss auf den Ausbreitungsprozess und sollen mit dem Berechnungsverfahren berücksichtigt werden.

4.1.1. Modellannahmen

Bis zu dem Zeitpunkt an dem das Flaschenventil geöffnet wird, stehen die Gas- und die Flüssigphase im thermodynamischen Gleichgewicht. Ein Energieeintrag von außen erfolgt durch die Wärme der Luft und durch Wärmestrahlung der Umgebung. Es wird von einer konstanten Umgebungstemperatur ausgegangen. Das Öffnen des Flaschenventils führt unmittelbar zum Blasensieden in der Flüssigkeit und zu einer guten Durchmischung der Flüssigphase. Die durchgeführten experimentellen Untersuchungen bestätigen eine konstante Temperatur in der Flüssigphase. In der Gasphase zeigten die experimentellen Untersuchungen sowohl eine Temperaturverteilung in x- als auch in y-Richtung, welche im Rahmen des Berechnungsverfahrens vernachlässigt Es wird. wird von einer konstanten Temperaturverteilung sowohl in der Gas- als auch der Flüssigphase ausgegangen. In dieser Arbeit wird keine Modellierung der Strömungs- oder Temperaturverläufe innerhalb der Gasflasche vorgenommen, sondern von einer idealisierten Durchmischung beider Phasen ausgegangen.

4.1.2. Berechnungsverfahren

Ziel des Berechnungsverfahrens ist die Bestimmung des instationären Massenstroms, welcher vom Wärmeeintrag abhängig ist. Um den Massenstrom zu berechnen muss die dreidimensionale Differenzialgleichung für die instationäre Wärmeleitung gelöst werden. Das eigentlich dreidimensionale Wärmeleitungsproblem kann aufgrund des von allen Seiten gleichmäßigen Wärmeeintrags in die Flasche auf die Berechnung des Längsschnitts bei einer stehenden Flasche reduziert werden. Für die Berechnung der Temperaturverteilung in der Wand werden Zylinderkoordinaten (r, φ, z) verwendet.

$$\rho c_p \frac{\partial T_w}{\partial t} = \lambda \nabla \cdot (\nabla T_w) \tag{8}$$

Die Lösung der Differenzialgleichung erfolgt numerisch mit dem Verfahren von Patankar [85]. Als Randbedingungen zur Lösung werden die auf die Übertragungsflächen bezogenen Wärmeströme der äußeren (Index a) und inneren Behälterwand (Index i) berechnet. In [1] sind die Randbedingungen für einen unterfeuerten, liegenden Behälter angegeben und wurden für eine stehende Flasche entsprechend modifiziert und erweitert.

Die für die Berechnung der Wärmeübergangskoeffizienten notwendigen charakteristischen Längen (l_{ch}) bei freier Konvektion für eine stehende Flasche sind in der Abbildung 56 dargestellt.



Charakteristische Längen:

Umgebung - Flasche: $I_{ch} = h$ Flaschenwand - Gasphase: $I_{ch} = h_g$ Flaschenwand - Flüssigphase: $I_{ch} = h_{fl}$ Gasphase - Flüssigphase: $I_{ch} = d_i/4$

Abbildung 56: Charakteristische Längen einer stehenden Flasche bei freier Konvektion

4.1.2.1. Äußerer Wärmeübergang

Der Energieeintrag von der Umgebung (9) auf die Gasflasche erfolgt durch freie und erzwungene Konvektion der Luft sowie durch Strahlung.

$$\dot{q_a} = \alpha_a (T_u - T_{wa}) + \sigma \varphi_{u,wa} \varepsilon_u \varepsilon_{wa} (T_u^4 - T_{wa}^4)$$
(9)

Der Wärmeübergangskoeffizient α_a berechnet sich hierbei aus freier und erzwungener Konvektion:

$$\alpha_a = \sqrt[3]{\alpha_{erzw}^3 + \alpha_{frei}^3} \tag{10}$$

Die nachfolgend aufgeführten empirischen Formeln zur Berechnung der erzwungen und freien Konvektion wurden dem VDI-Wärmeatlas [122] entnommen. Der Wärmeübergangskoeffizient für die erzwungene Konvektion (11) wird mittels der Nusselt-Gleichung für die Queranströmung einzelner Rohre beschrieben. Der Wärmeübergangskoeffizient für die freie Konvektion (12) wird mittels der Nusselt-Gleichung für die Strömung über vertikale Flächen bestimmt.

Erzwungene Konvektion

$$Nu_{erzw} = 0,3 + \sqrt{Nu_{lam}^{2} + Nu_{turb}^{2}} = \frac{\alpha_{erzw}l_{ch}}{\lambda_{L}} \quad l_{ch} = \frac{\pi}{2}d_{a}$$
(11)
mit $Nu_{lam} = 0,664\sqrt{Re}\sqrt[3]{Pr}$ und $Nu_{turb} = \frac{0,037Re^{0,8}Pr}{1+2,443Re^{-0,1}(Pr^{2/3}-1)}$

Freie Konvektion

$$Nu_{frei} = \left\{ 0,825 + 0,387 \cdot [Ra \cdot f_1(Pr)]^{1/6} \right\}^2 = \frac{\alpha_{frei}l_{ch}}{\lambda_L} \quad l_{ch} = h$$
(12)
mit $f_1(Pr) = \left[1 + \left(\frac{0,492}{Pr}\right)^{9/16} \right]^{-16/9}$

Die für die Bestimmung des Wärmeübergangskoeffizienten für erzwungene und freie Konvektion benötigen dimensionslosen Kennzahlen sind nachfolgend dargestellt.

$$Ra = Gr \cdot Pr \tag{Rayleigh-Zahl} \tag{13}$$

$$Pr = \frac{\eta_{fluid} \cdot c_p}{\lambda}$$
(Prandtl-Zahl) (14)

$$Gr = \frac{g \cdot l_{ch} \cdot \beta \cdot (T_w - T_{fluid})}{v^2} \text{ mit } \beta = \frac{1}{T_{fluid}}$$
 (Grashof-Zahl) (15)

$$Re = \frac{u_{fluid} \cdot l_{ch}}{v_{fluid}}$$
(Reynolds-Zahl) (16)

4.1.2.2. Innerer Wärmeübergang

Der innere Wärmeübergang bei einer einphasigen Strömung muss unterschieden werden in den Übergang der Wärme von der Flascheninnenwand im Bereich der Gas- und der Flüssigphase sowie in den Wärmeaustausch zwischen Gas- und Flüssigphase.

4.1.2.2.1. Wand - Gasphase

Die Übertragung der Wärme im Gasraum (17) erfolgt durch freie Konvektion an die Gasphase und durch Strahlung an die Flüssigphase.

$$\dot{q}_{i,g} = -\alpha_{i,g} \left(T_{wi,g} - T_g \right) - \sigma \varphi_{wig,fl} \varepsilon_{wi} \varepsilon_{fl} \left(T_{wi,g}^{4} - T_{fl}^{4} \right)$$
mit $\varepsilon_{wi} \varepsilon_{fl} \approx 1$
(17)

Der Wärmeübergangskoeffizient $\alpha_{i,g}$ wird wie nachfolgend angegeben berechnet.

$$Nu_{frei} = (12) = \frac{\alpha_{i,g}l_{ch}}{\lambda_g} \quad l_{ch} = h_g$$
(18)

Die in Abbildung 56 dargestellte Höhe des Gasraumes (h_g) wird aus dem Füllstand der Flüssigphase berechnet.

4.1.2.2.2. Wand - Flüssigphase

Die Wärmeübertragung im Flüssigkeitsraum (19) erfolgt ausschließlich durch Konvektion. Bis zum Erreichen der Siedetemperatur (T_s) unter dem jeweils herrschenden Druck wird freie Konvektion und ab dem Erreichen von T_s Blasensieden angenommen. Der Effekt des Filmsiedens tritt aufgrund des niedrigen Energieeintrags aus der Umgebung in die Flasche nicht auf.

$$\dot{q}_{i,fl} = -\alpha_{i,fl} \left(T_{wi,fl} - T_{fl} \right) \tag{19}$$

Der Wärmeübergangskoeffizient $\alpha_{i,fl}$ muss hierbei in den Wärmeübergangskoeffizienten bei freier Konvektion und bei Blasensieden unterschieden werden.

Freie Konvektion

Der Wärmeübergangskoeffizient $\alpha_{i,fl}$ für die freie Konvektion an umströmten vertikalen Flächen wird wie nachfolgend angegeben berechnet.

$$Nu_{frei} = (12) = \frac{\alpha_{i,fl}l_{ch}}{\lambda_{fl}} \quad l_{ch} = h_{fl}$$

$$\tag{20}$$

Die in Abbildung 56 dargestellte Höhe des Flüssigkeitsraumes (h_{fl}) wird aus dem Füllstand der Flüssigphase für die stehende oder liegende Flasche berechnet.

Blasensieden

Im Rahmen der Beschreibung des Wärmeübergangs beim Blasensieden werden verschiedene Blasensiedemodelle miteinander verglichen. Diese werden im nachfolgenden dargestellt.

Stephan und Abdelsalam entwickelten auf der Grundlage von 5000 Messdaten aus 72 Veröffentlichungen eine Blasensieden-Korrelation für Wasser, Kohlenwasserstoffe, Tiefsieder und Kältemittel. Diese ergab für alle untersuchten Stoffe einen durchschnittlichen Fehler von $\pm 22,3 \%$ [117].

$$Nu_{BS} = 0.23 \cdot \left(\frac{\dot{q}d_B}{\lambda_{fl}T_S}\right)^{0.674} \cdot \left(\frac{\rho_g}{\rho_{fl}}\right)^{0.297} \cdot \left(\frac{\Delta h_{\nu}d_B^2}{a_{fl}^2}\right)^{0.371} \cdot \left(\frac{\rho_{fl}-\rho_g}{\rho_{fl}}\right)^{-1.73} \cdot \left(\frac{a_{fl}^2\rho_{fl}}{\gamma d_B}\right)^{0.35} = \frac{\alpha_{BS}l_{ch}}{\lambda_{fl}} \quad l_{ch} = d_B$$
(21)

mit $0,004 \le \frac{p}{p_{krit}} \le 0,97$ und $a_{fl} = \frac{\lambda_{fl}}{\rho_{fl}c_{p,fl}}$

Speziell für Kältemittel, zu denen auch das im Rahmen dieser Arbeit verwendet R134a gehört, entwickelten Stephan und Abdelsalam eine Korrelation mit einem durchschnittlichen Fehler von $\pm 10,57$ % [117].

$$Nu_{BS} = 207 \cdot \left(\frac{\dot{q}d_B}{\lambda_{fl}T_S}\right)^{0,745} \cdot \left(\frac{\rho_g}{\rho_{fl}}\right)^{0,581} \cdot \left(\frac{\nu_{fl}}{a_{fl}}\right)^{0,533} = \frac{\alpha_{BS}l_{ch}}{\lambda_{fl}} \quad l_{ch} = d_B$$
(22)
mit $0,003 \le \frac{p}{p_{krit}} \le 0,78$

Der Blasendurchmesser d_B als charakteristische Länge ergibt sich wie folgt [131].

$$d_B = 0,0208 \cdot \theta \cdot \sqrt{\frac{\gamma}{g(\rho_{fl} - \rho_g)}}$$
(23)

Der Randwinkel θ für die als Kältemittel eingesetzten halogenierten Kohlenwasserstoffe liegt bei etwa 35 °.

Stephan und Preußer optimierten die von Stephan und Abdelsalam entwickelte Blasensieden-Korrelation für Wasser, Kohlenwasserstoffe, Tiefsieder und Kältemittel [118].

$$Nu_{BS} = 0,1 \cdot \left(\frac{\dot{q}d_B}{\lambda_{fl}T_s}\right)^{0,674} \cdot \left(\frac{\rho_g}{\rho_{fl}}\right)^{0,156} \cdot \left(\frac{\Delta h_\nu d_B^2}{a_{fl}^2}\right)^{0,371} \cdot \left(\frac{a_{fl}^2 \rho_{fl}}{\gamma d_B}\right)^{0,35} \cdot \left(\frac{\nu_{fl}}{a_{fl}}\right)^{-0,162} = \frac{\alpha_{BS}l_{ch}}{\lambda_{fl}} \quad l_{ch} = d_B$$
(24)

Im Vergleich zur ihren Messungen stellten sie einen mittleren Fehler von 11 % fest.

Eine weitere Korrelation zum Blasensieden wurde von **Cooper** entwickelt. Diese basiert auf 6000 Datenpunkten aus über 100 Experimenten, die aus verschiedenen Veröffentlichungen entnommen wurden. Mit dieser Korrelation kann der Wärmeübergangskoeffizient direkt, nur unter Angabe des reduzierten Druckes (p_r) , der relativen Molekülmasse (M) und der Oberflächenrauigkeit (R_p) bestimmt werden [14].

$$\alpha_{BS} = 55 \cdot p_r^{\ b} \cdot (-log_{10}p_r)^{-0.55} \cdot M^{-0.5} \cdot \dot{q}^{0.67}$$
(25)
mit $b = 0.12 - 0.2 \cdot log_{10}R_p, \quad p_r = \frac{p}{p_{krit}} \text{ und } R_p = 0.4 \ \mu m$

Zhaohu et al. optimierten die von Cooper aufgestellte Korrelation und schränkten den Anwendungsbereich auf die Kältemittel R134a, R290, R600a ein. Hierbei ergänzten sie im Wesentlichen eine Funktion für den Exponenten der Wärmestromdichte [136].

$$\alpha_{BS} = 90 \cdot \dot{q}^{C_1} \cdot \left(\frac{p}{p_{krit}}\right)^n \cdot \left(-\log_{10}\left(\frac{p}{p_{krit}}\right)\right)^{-0.85} \cdot M^{-0.5}$$
(26)

mit $C_1 = 0.696 \cdot \left(\frac{T_{fl}}{T_{krit}}\right)^{2.9} \cdot \left(\frac{p}{p_{krit}}\right)^{-0.4}, R_p = 0.4 \ \mu m \text{ und } n = 0.12 - 0.2 \cdot \log_{10} R_p$

Die durchschnittliche Abweichung von den experimentellen Untersuchungen mit einem Wärmestrombereich von $1 \cdot 10^4 \le \dot{q} \le 4 \cdot 10^5 \frac{W}{m^2}$ und einem Druckbereich von $1 \le p \le 6 \text{ bar}$ ergab ±15 %.

Gemäß **VDI-Wärmeatlas** kann der normierte Wärmeübergangskoeffizient beim Blasensieden $\frac{\alpha}{\alpha_0}$ wie nachfolgend dargestellt, bestimmt werden [122].

$$\frac{\alpha}{\alpha_0} = C_W \cdot F(p_r) \cdot \left(\frac{\dot{q}}{\dot{q}_0}\right)^n$$
mit $\alpha_0 = 4000 \frac{W}{m^{2}K}$ und $\dot{q}_0 = 20000 \frac{W}{m^2}$
(27)

In diesem Ansatz ist der normierte Wärmeübergangskoeffizient nur von den Heizflächeneigenschaften (28), dem Siededruck (29 und 30) und der Wärmestromdichte \dot{q} abhängig.

$$C_W = (R_p)^{0,133}$$
 mit $R_p = 0.4 \,\mu m$ (28)

$$F(p_r) = 1,2 \cdot p_r^{0,27} + \left[2,5 + \frac{1}{1-p_r}\right] \cdot p_r \quad \text{mit} \quad p_r = \frac{p}{p_{krit}}$$
(29)

$$n = 0.9 - 0.3 \cdot p_r^{0.3} \tag{30}$$

Die Gleichung (30) ist für alle Stoffe außer Wasser und Helium gültig. Die Gleichung (29) gilt nicht für Wasser.

4.1.2.2.3. Gasphase - Flüssigphase

Aufgrund der entstehenden Temperaturdifferenz zwischen Gas- und Flüssigphase findet an der Phasengrenze ein weiterer Wärmeaustausch statt.

$$\dot{q}_{g,fl} = -\alpha_{g,fl} \left(T_g - T_{fl} \right) \tag{31}$$

Die Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten $\alpha_{g,fl}$ für die freie Konvektion an umströmten Körpern mit der Wärmeabgabe auf der Oberseite ist nachfolgend dargestellt [122]. Im Falle einer laminaren Strömung ($Ra \cdot f_2(Pr) \le 70000$) gilt

$$Nu_{frei} = 0,766 \cdot [Ra \cdot f_2(Pr)]^{1/5} = \frac{\alpha_{g,fl}l_{ch}}{\lambda_g}, \text{ ansonsten gilt}$$
(32)

$$Nu_{frei} = 0.15 \cdot [Ra \cdot f_2(Pr)]^{1/3} = \frac{\alpha_{g,fl}l_{ch}}{\lambda_g}$$
(33)

mit
$$f_2(Pr) = \left[1 + \left(\frac{0.322}{Pr}\right)^{11/20}\right]^{-20/11}$$
 und $l_{ch} = \frac{d_i}{4}$

Abgesehen von den Rundungen im oberen und unteren Bereich der Flasche bleibt der Innendurchmesser über die Ausströmung konstant.

4.1.2.3. Energiebilanz

Zur Bestimmung der Temperaturen der Gas- (T_g) und der Flüssigphase (T_{fl}) müssen entsprechende Energie- und Massenbilanzen aufgestellt werden (siehe auch [3]). Die Energiebilanzen der Gas- und der Flüssigphase für eine einphasige Strömung und deren Einflussparameter sind nachfolgend dargestellt.

Zu Verdeutlichung der innerhalb der Gasflasche ablaufenden thermodynamischen Prozesse sind diese in der nachfolgenden Abbildung 57 graphisch dargestellt. Die in blau eingezeichneten Pfeile beschreiben die Einflussfaktoren auf die Temperatur der Flüssigphase, die roten Pfeile die Einflussfaktoren auf die Temperatur der Gasphase.



Abbildung 57: Thermodynamische Prozesse innerhalb der Gasflasche

Die Energiebilanz der Flüssigphase (34) ergibt sich aus dem über die Behälterwand eingetragenen Wärmestrom ($\dot{Q}_{i,fl}FK/BS$), durch den konvektiven Wärmestrom der Gasphase ($\dot{Q}_{g,fl}FK$), durch die Strahlungswärme der Innenwand des Gasraumes ($\dot{Q}_{i,g}STR$) sowie durch den Verlust der für die Verdampfung aufgewendeten Energie (\dot{Q}_V).

$$m_{fl}c_{p,fl}\frac{dT_{fl}}{dt} = \dot{Q}_{i,fl}FK/BS + \dot{Q}_{i,g}STR + \dot{Q}_{g,fl}FK - \dot{Q}_V \quad \text{mit}$$
(34)
$$\dot{Q}_{i,fl}FK/BS = \alpha_{i,fl}A_{wi,fl}(T_{wi,fl} - T_{fl})$$

$$\dot{Q}_{i,g}STR = \sigma\varphi_{wig,fl}A_{wi,g}(T_{wi,g}^4 - T_{fl}^4)$$

$$\dot{Q}_{g,fl}FK = \alpha_{g,fl}A_{g,fl}(T_g - T_{fl})$$

$$\dot{Q}_V = \Delta h_v \dot{m}_v$$

Der Verdampfungsmassenstrom \dot{m}_v berechnet sich hierbei aus dem über das Flaschenventil abströmenden Gasmassenstrom \dot{m}_{FV} , dem Gasmassenstrom der benötigt wird um den durch den sinkenden Flüssigkeitsspiegel entstehenden Gasraum zu füllen $\frac{dV_{fl}}{dt} \cdot \rho_g$ (siehe Abb. 57) sowie aus einem Gasmassenstrom um die durch die Volumenvergrößerung des Gasraums hervorgerufene Dichteänderung zu kompensieren $\frac{d\rho_g}{dt} \cdot V_g$.

$$\dot{m}_{\nu} = \dot{m}_{FV} - \frac{dV_{fl}}{dt} \cdot \rho_g + \frac{d\rho_g}{dt} \cdot V_g$$
(35)

Die Energiebilanz der Gasphase (36) ergibt sich aus der über die Behälterwand eingetragenen Konvektionswärme ($\dot{Q}_{i,g} FK$), dem konvektiven Wärmeverlust an die Flüssigphase ($\dot{Q}_{g,fl} FK$), der benötigten Energie zur Erwärmung des Dampfmassenstroms aus der Flüssigphase auf Gastemperatur ($\dot{Q}_V ERW$), der zur Expansion und Kompression erforderlichen Arbeit (W EXP/KOMP) sowie dem Energieverlust durch das Ausströmen über das Flaschenventil (E_{FV}).

$$m_{g}c_{v,g}\frac{dT_{g}}{dt} = \dot{Q}_{i,g}FK - \dot{Q}_{g,fl}FK - \dot{Q}_{V}ERW - W EXP/KOMP - E_{FV} \text{ mit} (36)$$

$$\dot{Q}_{i,g}FK = \alpha_{i,g}A_{wi,g}(T_{wi,g} - T_{g})$$

$$\dot{Q}_{g,fl}FK = \alpha_{g,fl}A_{g,fl}(T_{g} - T_{fl})$$

$$\dot{Q}_{V}ERW = \dot{m}_{v}c_{p,g}(T_{g} - T_{fl})$$

$$W EXP/KOMP = p\left(\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{m_{g}}{\rho_{g}}\right) - \frac{\dot{m}_{v}}{\rho_{fl}}\right) - p \cdot \frac{\dot{m}_{FV}}{\rho_{g}}$$

$$E_{FV} = \left(\frac{p}{\rho_{g}}\right)\dot{m}_{FV}$$

4.1.2.4. Massenbilanz und Aufwallmodell

Im Rahmen der experimentellen Untersuchungen wurden sowohl das Auftreten einer reinen Gasströmung als auch das Auftreten einer Zweiphasenströmung beobachtet. Tritt eine Zweiphasenströmung auf, so hat dies Auswirkungen auf die Energiebilanz aus Kapitel 4.1.2.3. Diese Auswirkungen werden anhand von Abbildung 58 beschrieben.



Abbildung 58: Phasen des Gemischpegelstands während des Aufwallens

Bei einer Zweiphasenströmung kommt es zu einem Aufwallen des Behälterinhalts. Die Flüssigkeit wallt auf, weil mehr Dampf gebildet wird, als über den Gemischspiegel abgeführt werden kann. Grund hierfür ist die begrenzte Aufstiegsgeschwindigkeit der Gasblasen [108]. Dies hat zur Folge, dass sich das Flüssigkeitsvolumen durch die Anwesenheit der Gasblasen vergrößert. Das jetzt vorliegende Gas-/Flüssigkeitsgemisch dehnt sich aus und führt zu einem Anstieg des Gemischpegels (z_P). Der Gemischpegelstand lässt sich hierbei in drei Phasen unterteilen.

Die erste Phase beschreibt die Zeit vom Öffnen des Flaschenventils bis zu der Zeit in der der Gemischpegel das Flaschenventil erreicht hat. Gas- und Flüssigphase sind separiert und weisen eine unterschiedliche Dichte und Temperatur auf. In dieser Zeit findet eine reine Gasströmung ($\dot{x}_0 = 1$) statt.

Erreicht der Gemischpegel wie in Phase 2 dargestellt das Flaschenventil, so setzt eine Zweiphasenströmung ein. Zu diesem Zeitpunkt gibt es im Druckgasbehälter keinen getrennten Gas- und Flüssigkeitsraum mehr. Es wird vorausgesetzt, dass sich die Gas- und Flüssigphase homogen miteinander vermischen und eine gemeinsame Temperatur und Dichte aufweisen. Dieser Zustand führt in der Energiebilanz zum Wegfall des konvektiven Wärmeaustausches zwischen der Gas- und der Flüssigphase an der Phasengrenze ($\dot{Q}_{a,fl} FK$). Darüber hinaus entfallen die zur Erwärmung des Dampfmassenstroms aus der Flüssigphase auf Gastemperatur ($\dot{Q}_V ERW$) benötigte Energie sowie die Strahlungswärme der Innenwand des Gasraumes ($\dot{Q}_{i,g}STR$). Der über das Flaschenventil entweichende Massenstrom \dot{m}_{FV} enthält Gas- und Flüssigphase, so dass der Strömungsmassengasgehalt \dot{x}_0 kleiner 1 ist. Der Verdampfungsmassenstrom \dot{m}_v berücksichtigt hierbei in seiner Berechnung nur den über das Flaschenventil abströmenden Gasmassenstrom, der sich mit $\dot{m}_{FV} \cdot \dot{x}_0$ extrahieren lässt. Die zur Expansion und Kompression des Gases erforderliche Arbeit (W EXP/KOMP) kann nur dem gasphasigen Anteil verrichtet werden, so dass auch hier der an Strömungsmassengasgehalt \dot{x}_0 berücksichtigt werden muss.

In der anschließenden dritten Phase stellt sich dann mit dem absinkenden Gemischpegel wieder eine reine Gasphasenströmung ($\dot{x}_0 = 1$) ein. Gas- und Flüssigphase separieren sich.

Die Energiebilanz vereinfacht sich bei einer Zweiphasenströmung wie folgt:

$$m_{fl}c_{p,fl}\frac{dT_{fl}}{dt} = \dot{Q}_{i,fl}FK/BS - \dot{Q}_V \quad \text{mit}$$

$$\dot{Q}_{i,fl}FK/BS = \alpha_{i,fl}A_{wi}(T_{wi,fl} - T_{fl})$$
(37)

$$\begin{split} \dot{Q}_V &= \Delta h_v \dot{m}_v \\ \dot{m}_v &= \dot{m}_{FV} \cdot \dot{x}_0 - \frac{dV_{fl}}{dt} \cdot \rho_g + \frac{d\rho_g}{dt} \cdot V_g \end{split}$$

Die Energiebilanz der Gasphase entfällt, weil die Flüssig- gleich der Gastemperatur entspricht $(T_{fl} = T_g).$

Die zur Bestimmung der Gas- und der Flüssigkeitstemperatur notwendigen Massebilanzen sind nachfolgend dargestellt.

$$m_g + m_{fl} = m_0$$

$$\frac{m_{fl}}{\rho_{fl}} + \frac{m_g}{\rho_g} = V_0$$

$$\frac{dm_0}{dt} = -\dot{m}_{FV}$$
(38)

Der durch das Flaschenventil austretende Massenstrom \dot{m}_{FV} kann hierbei sowohl einphasig (gasförmig) als auch zweiphasig (gasförmig, flüssig) entweichen. Ob und wann eine Zweiphasenströmung auftritt, lässt sich hierbei mittels des kritischen Füllgrades (FG_{krit}) bei Entlastungsbeginn (Abb. 59) nach Schmidt [106] abschätzen.



Abbildung 59: Kritischer Füllgrad in Abhängigkeit der dimensionslosen Blasenaufstiegsgeschwindigkeit

Der Graph des kritischen Füllgrads entspricht der Einhüllenden sehr vieler Druckentlastungsversuche. Er gilt nur für niedrig viskose ($\eta_{fl,0} < 0,1 Pa \cdot s$) und nicht schäumende Flüssigkeiten in stehenden/vertikalen, zylindrischen Behältern und nur dann, wenn die Energie zur Dampfbildung aus dem Medium selber kommt, wie bei Druckentlastungen siedender Flüssigkeiten oder gleichmäßig in die Flüssigkeit eingebracht wird, wie bei chemischen Reaktionen. Liegt der Füllgrad (FG) einer Druckgasflasche in Abhängigkeit der dimensionslosen Blasenaufstiegsgeschwindigkeit oberhalb des kritischen Füllgrades, so ist eine Zweiphasenströmung zu erwarten. Liegt der Füllgrad unterhalb von *FG_{krit}* so ist eine Gasströmung wahrscheinlich [106].

Die dimensionslose Blasenaufstiegsgeschwindigkeit (X_{db}) in der Druckgasflasche ergibt sich aus dem Verhältnis von Gasleerrohrgeschwindigkeit des unter Druck stehenden Systems $u_{g,max}$ zu der Aufstiegsgeschwindigkeit einer einzelnen Blase in der Flüssigkeit u_{∞}

$$X_{db} = \frac{u_{g,max}}{u_{\infty} \cdot \Psi} \tag{39}$$

Die Berechnung der Gasleerrohrgeschwindigkeit (40) sowie der Aufstiegsgeschwindigkeit einer einzelnen Blase in der Flüssigkeit (41) sind nachfolgend dargestellt.

$$u_{g,max} = \frac{m_{FV,g}}{\Delta h_{\nu 0}} \cdot \frac{v_{g,0}}{\frac{\pi}{4} \cdot l_{ch}^2} \quad \text{mit} \quad l_{ch} = d_i$$

$$\tag{40}$$

$$u_{\infty} = \frac{k \cdot \left[\gamma_{fl,0} \cdot g \cdot \left(\frac{1}{v_{fl,0}} - \frac{1}{v_{g,0}}\right)\right]^{0,25}}{\sqrt{\frac{1}{v_{fl,0}}}}$$
(41)

mit $k = 1,53 \ (\eta_{fl,0} < 0,1 \ Pa \cdot s) \ oder \ k = 1,18 \ (\eta_{fl,0} > 0,1 \ Pa \cdot s)$

Bei einer gleichmäßigen Wärmezufuhr in die Flüssigkeit, wie sie im Rahmen der durchgeführten Versuche vorlag, ist das Flächenverhältnis $\Psi = 1$.

Die Berechnung eines einphasigen oder zweiphasigen Massenstroms durch ein Ventil ist in der Gleichung (42) dargestellt [2].

$$\dot{m}_{FV} = A_{FV} \cdot \mu \cdot \dot{m}_{ideal} = A_{FV} \cdot \mu \cdot C \cdot \sqrt{\frac{2p_0}{\nu_0}}$$
(42)

Demnach ist der Massenstrom durch ein Flaschenventil nur vom Auslassquerschnitt des Ventils (A_{AV}), der experimentell bestimmten Ausflussziffer (μ), sowie dem Massenstrom bei reibungsfreier, adiabater Düsenströmung (\dot{m}_{ideal}) mit der Ausflussfunktion (C) abhängig.

Im Rahmen einer reinen Gasströmung ($\dot{m}_{FV,g}$) ergeben sich die Ausflussziffer, die Ausflussfunktion sowie das spezifische Volumen im engsten Querschnitt wie folgt.

$$\begin{aligned}
\nu_0 &= \nu_{g,0} \\
\mu &= \mu_g \\
C &= C_g = \sqrt{\frac{\kappa}{\kappa - 1} \cdot \left[\Omega^{\frac{2}{\kappa}} - \Omega^{\frac{\kappa + 1}{\kappa}}\right]}
\end{aligned} \tag{43}$$

mit $\Omega = \Omega_u = \frac{p_u}{p_0}$ bei unterkritischer Strömung und $\Omega = \Omega_{krit} = \frac{p_{krit}}{p_0}$ bei kritischer Strömung ($\Omega_u \le \Omega_{krit}$)

Bei einer reinen Flüssigkeitsströmung ($\dot{m}_{FV,fl}$) ergeben sich die Ausflussziffer, die Ausflussfunktion sowie das spezifische Volumen im engsten Querschnitt wie nachfolgend angegeben.

$$\begin{aligned}
\nu_0 &= \nu_{fl,0} \\
\mu &= \mu_{fl} \\
C &= C_{fl} = \sqrt{1 - \Omega}
\end{aligned}$$
(44)

mit $\Omega = \Omega_u = \frac{p_u}{p_0}$ bei unterkritischer Strömung und $\Omega = \Omega_{krit} = \frac{p_{krit}}{p_0}$ bei kritischer Strömung ($\Omega_u \le \Omega_{krit}$)

Im Rahmen einer Zweiphasenströmung muss das spezifische Volumen ($v_{0,Misch}$) des Gas-Flüssigkeitsgemischs am Eintritt in das Ventil bestimmt werden.

$$v_0 = v_{0,Misch} = \dot{x}_0 \cdot v_{g,0} - (1 - \dot{x}_0) \cdot v_{fl,0}$$
(45)

Der hierfür notwendige Strömungsmassengasgehalt (\dot{x}_0) lässt sich wie folgt bestimmen.

$$\dot{x}_0 = \frac{\varepsilon_0 \cdot v_{fl,0}}{(1 - \varepsilon_0) \cdot v_{g,0} + \varepsilon_0 \cdot v_{fl,0}} \tag{46}$$

Er ist abhängig von den spezifischen Volumina der Gas- und der Flüssigphase sowie vom Leerraum-Volumen-Verhältnis (ε_0), welches sich aus dem Volumen der Flüssigphase ($V_{fl,0}$) und dem Behältervolumen (V_{BH}) berechnen lässt.

$$\varepsilon_0 = 1 - \frac{V_{fl,0}}{V_{BH}} \tag{47}$$

Die Ausflussziffer einer Zweiphasenströmung (μ_{2ph}) wird mittels des volumetrischen Gasgehalts im engsten Strömungsquerschnitt (ε_{EQ}) in Anlehnung an die ISO 4126-10 [55] berechnet.

$$\mu = \mu_{2ph} = \varepsilon_{EQ} \cdot \mu_g + (1 - \varepsilon_{EQ}) \cdot \mu_{fl}$$
(48)

Die Ausflussziffern für eine reine Gasströmung (μ_g) sowie für eine reine Flüssigkeitsströmung (μ_{fl}) müssen hierbei experimentell bestimmt werden. Der volumetrische Gasgehalt im engsten Querschnitt berechnet sich wie folgt.

$$\varepsilon_{EQ} = 1 - \frac{v_{fl,0}}{v_0 \cdot \left[\omega \cdot \left(\frac{1}{\Omega} - 1\right) + 1\right]} \tag{49}$$

Das Druckverhältnis Ω wird bei einer unterkritischen Strömung mit $\Omega = \Omega_u = \frac{p_u}{p_0}$ und bei einer kritischen Strömung mit $\Omega = \Omega_{krit}$ berechnet. Ω_{krit} kann mit den nachfolgenden Gleichungen (50 und 51) bestimmt werden.

$$0 = \Omega_{krit}^{2} + (\omega^{2} - 2\omega) \cdot (1 - \Omega_{krit})^{2} + 2\omega^{2} \cdot \ln(\Omega_{krit}) + 2\omega^{2} \cdot (1 - \Omega_{krit})$$
(50)
$$\Omega_{krit} = 0.55 + 0.217 \cdot \ln(\omega) - 0.046 \cdot [\ln(\omega)]^{2} + 0.004 \cdot [\ln(\omega)]^{3} \quad \omega \ge 2$$
(51)

Im Falle das $\omega < 1$ ist, muss die Gleichung (50) iterativ, z.B. mit dem Newtonschen Verfahren gelöst werden. Wenn $\omega \ge 2$ ist, kann der iterative Ansatz vermieden werden und Ω_{krit} mit der Gleichung (51) bestimmt werden.

Die Berechnung von Ω_{krit} ist hierbei vom Kompressibilitätsfaktor $\omega(N)$ abhängig. Die Berechnung von $\omega(N)$ ist nachfolgend dargestellt.

$$\omega(N) = \frac{\dot{x}_0 \cdot v_{g,0}}{\kappa \cdot v_0} + \frac{c_{p,fl0} \cdot T_0 \cdot p_0}{v_0} \left[\frac{v_{g,0} - v_{fl,0}}{\Delta h_{v,0}} \right]^2 \cdot N$$
(52)

Der Ungleichgewichtsfaktor N, der das thermodynamische Ungleichgewicht in der Strömung berücksichtigt, lässt sich mit dem nachfolgenden Ansatz von Diener und Schmidt [21] bestimmen. Die Gleichungen (52) und (53) gelten hierbei nur für reine Stoffe.

$$N(\Omega_{krit}) = \left[\dot{x}_0 + c_{p,fl0} \cdot T_0 \cdot p_0 \cdot \frac{(v_{g,0} - v_{fl,0})}{\Delta h_{v,0}^2} \cdot \ln\left(\frac{1}{\Omega_{krit}}\right)\right]^b \eta_{fl,0} < 0,1 \ Pa \cdot s \ (53)$$

Der Korrelationsparameter für den Siedeverzug b ist bei einem Sicherheitsventil 2/5.

Da Ω_{krit} im Falle einer niedrig viskosen Flüssigkeit ($\eta_{fl,0} < 0,1 Pa \cdot s$) sowohl von $\omega(N)$ als auch von $N(\Omega_{krit})$ abhängig ist, erfolgt die Bestimmung von Ω_{krit} zunächst für eine Ventilströmung mit der Annahme eines homogenen Gleichgewichts mit N = 1.

Zur Bestimmung des Ungleichgewichtsfaktors für eine nicht homogene Gleichgewichtströmung (N < 1), werden das ermittelte Ω_{krit} (N = 1) in die Gleichung (53)

eingesetzt und ein neues Ω_{krit} (N < 1) sowie ein neuer Kompressibiltätsfaktor $\omega(N < 1)$ berechnet. Ω_{krit} (N < 1) und $\omega(N < 1)$ für die Berücksichtigung des thermodynamischen Ungleichgewichts in der Strömung werden dann in die Gleichung (49) zur Bestimmung des volumetrischen Gasgehalts im engsten Querschnitt sowie in die Gleichung (54) zur Bestimmung der Ausflussfunktion einer Zweiphasenströmung eingesetzt, um den Massenstrom einer Zweiphasenströmung zu berechnen.

Die Ausflussfunktion einer Zweiphasenströmung (C_{2ph}) wird mit der nachfolgend angegebenen Korrelation bestimmt.

$$C = C_{2ph} = \frac{\sqrt{\omega \cdot ln(\frac{1}{\Omega}) - (\omega - 1) \cdot (1 - \Omega)}}{\omega \cdot (\frac{1}{\Omega} - 1) + 1}$$
(54)

Die Zielgröße der Simulationen ist die Ermittlung des instationären Massenstroms. Wie in Gleichung (42) ersichtlich ist, ist der Massenstrom unmittelbar von Flaschendruck sowie von der Stoffdichte abhängig.

$$\dot{m}_{FV} = f(p,\rho) \tag{55}$$

Zur Ermittlung dieser Größen ist es notwendig, mittels der Differenzialgleichung (DGL) für die instationäre Wärmeleitung (Gl. 8), die Temperaturverteilung in der Behälterwand zu bestimmen. Als Randbedingungen zur Lösung der DGL dienen die auf die Übertragungsflächen bezogenen Wärmeströme an der äußeren und inneren Behälterwand - \dot{q}_a , $\dot{q}_{i,g}$ sowie $\dot{q}_{i,fl}$. Zur Bestimmung der darin enthaltenen Gas- und Flüssigkeitstemperatur müssen die entsprechenden Energie- (Gl. 34 und 36) und Massenbilanzen (Gl. 38) aufgestellt und gelöst werden. Die Zielgröße der Energiebilanz ist die Bestimmung der Flüssigkeitstemperatur T_{fl} . Mit dieser werden dann die Dichte der Flüssigkeit sowie der Dampfdruck aus den Stoffwerten entnommen. Die Dichte der Gasphase wird mit dem idealen Gasgesetz berechnet.

4.2. Gasausbreitungsmodelle

In diesem Kapitel werden die verwendeten Gasausbreitungsmodelle vorgestellt. Hierzu gehören die VDI 3783, Blatt 2, ein Breitenmodell von Britter, Austal 2000 sowie Berechnungen mit CFX.

4.2.1. VDI 3783, Blatt 2

In diesem Kapitel wird das Berechnungsverfahren der VDI 3783, Blatt 2 beschrieben. Das erste Kapitel beschäftigt sich hierbei mit der Beschreibung des Standardberechnungsverfahrens. Das zweite Kapitel widmet sich einer Erweiterung der VDI-Richtlinie, in der der Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die Maximalkonzentration berücksichtigt wird.

4.2.1.1. Standardverfahren

Für die Ausbreitungsberechnung schwerer Gase kann die VDI Richtlinie 3783, Blatt 2 [125] verwendet werden. Im Sinne dieser Richtlinie sind Gase schwer, wenn sie nachfolgende Kriterien erfüllen:

$$\overrightarrow{\rho_{g}-\rho_{L}} > 0,1$$

$$\overrightarrow{V}_{0} > 1 \cdot 10^{-3}$$

Der relative Dichteüberschuss bildet sich aus der Dichte des Gases am Freisetzungsort (ρ_g) sowie der Luftdichte (ρ_L). \dot{V}_0 beschreibt den Quellvolumenstrom für eine kontinuierliche Freisetzung. In der VDI-Richtlinie sind immer die Kriterien für eine spontane und für eine kontinuierliche Freisetzung angegeben. Für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Versuche ist jedoch nur die kontinuierliche Freisetzung von Interesse, weshalb auf die Aufführung der Formeln zur spontanen oder schlagartigen Freisetzung verzichtet wird.

Die VDI 3783, Blatt 2 basiert auf experimentellen Untersuchungen im Windkanal. Durch die Anwendung dimensionsanalytischer Zusammenhänge konnten die im kleinskaligen Maßstab gewonnen Erkenntnisse auf die Realität übertragen werden. Die Dimensionsanalyse ist detailliert in Schatzmann und Lohmeyer [103] beschrieben. Die Übertragbarkeit des Modells wurde mit dem Vergleich einer Vielzahl von experimentellen Untersuchungen im Großmaßstab verifiziert. Zur Verifizierung der VDI 3783, Blatt 2 wurden unter anderem die Großversuche des TÜV Norddeutschland [50] herangezogen. Weitere Berechnungsvergleiche der Richtlinie zum Beispiel mit dem Thorney Island Versuchen [72] sind in König-Langlo und Schatzmann [60] dargestellt. Hierbei ergab sich eine generell zufriedenstellende Übereinstimmung [125]. Die Windkanalversuche decken das Ausbreitungsgebiet aber nur bis zu einer Entfernung ab, an der die anfängliche Quellkonzentration auf 1 Vol.-% abgesunken ist. Zur Bestimmung der Konzentrationen der anschließenden Neutralgasausbreitung muss die VDI 3783, Blatt 2 dann mit dem Blatt 1 [124] der Richtlinie gekoppelt werden.

Für die Bestimmung der Gasdichte am Quellort sind vier Fallgruppen zu unterscheiden. Diese sind in der Tabelle 1 der VDI 3783, Blatt 2 [125] aufgeführt. Die Freisetzung im Rahmen dieser Untersuchungen erfolgte immer rein gasförmig, sodass hiermit die Gasdichte unter Prozesstemperatur und Umgebungsdruck bestimmt wird. Das aus dem Verdampfer austretende Gas hatte hierbei immer eine Prozesstemperatur von 44 °C.

Im Rahmen der systematisch durchgeführten Windkanaluntersuchungen wurden Ergebniskurven erstellt, die auf beliebige Quellstärken umgerechnet werden können. Für die Umrechnung werden nachfolgend dargestellte charakteristische Größen (56 - 58) benötigt. Die aufgeführten charakteristischen Größen entsprechen hierbei den Größen einer kontinuierlichen Freisetzung (Index cc).

Charakteristisches Längenmaß:
$$L_{cc} = \left(\frac{{\dot{V}_0}^2}{g_e}\right)^{\frac{1}{5}} [m]$$
 (56)

Charakteristisches Zeitmaß:
$$T_{cc} = \left(\frac{\dot{V}_0}{g_e^3}\right)^{\frac{1}{5}} [s]$$
 (57)

Charakteristisches Geschwindigkeitsmaß: $U_{cc} = (\dot{V}_0 \cdot g_e^2)^{\frac{1}{5}} [\frac{m}{s}]$ (58)

Die effektive Erdbeschleunigung (59) lässt sich hierbei nach Schatzmann et al. [104] folgendermaßen bestimmen:

$$g_e = g \cdot \frac{\rho_{g,0} - \rho_L}{\rho_L} \tag{59}$$

Die Anfangsdichte $\rho_{g,0}$ des Schwergases muss bekannt sein. Für die Dichte der Luft empfiehlt die VDI 3783, Blatt 2 die Verwendung von $\rho_L = 1.2 kg/m^3$.

Der Quellvolumenstrom (60) berechnet sich gemäß Blatt 2 aus dem freigesetzten gasförmigen Massenstrom und einer Gasdichte bei 15 °C. Die Annahme einer Temperatur von 15 °C soll die Erwärmung des Gases auf Umgebungstemperatur vorwegnehmen [125].

$$\dot{V}_0 = \frac{\dot{m}_0}{\rho_{g,0}(15^\circ C)} \tag{60}$$

Sämtliche durchgeführte Untersuchungen fanden auf ebenem Gelände ohne Hindernisse statt. Das entsprechende Ausbreitungsgebiet der VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2 für eine kontinuierliche Freisetzung auf ebenem Gelände ohne Hindernisse ist in Abbildung 60 dargestellt. Weitere Ausbreitungsgebiete sind in der VDI 3783, Blatt 2 [125], einer nachträglich veröffentlichten Anlage zur VDI 3783, Blatt 2 [126] sowie in Marotzke [70] dargestellt.



Abbildung 60: Ausbreitungsgebiet I der VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2: (a) Aufsicht,
 (b) Normierte Konzentration χ als Funktion der Quellentfernung bei kontinuierlicher Freisetzung

Abbildung 60a beschreibt die Beschaffenheit des Ausbreitungsfeldes. Abbildung 60b stellt den Verlauf der normierten Konzentration über die Entfernung zur Quelle dar. Das Diagramm enthält je eine Kurve mit dem Mittelwert (durchgezogene Linie) und dem ungünstigsten Wert (gestrichelte Linie). Die normierte Konzentration (61) berechnet sich wie folgt:

$$\chi = \frac{c_x}{c_0} \cdot 100 \,[\%] \tag{61}$$

Sie ist das Verhältnis von lokaler Volumenkonzentration (c_x) zur Volumenkonzentration an der Quelle (c_0) . Die Entfernung von der Quelle x ist in charakteristischen Längen L_{cc} angegeben. Der aufgeführte experimentelle Konzentrationsverlauf wurde unmittelbar am Boden (z=0m) ermittelt. Dort herrschen bei der Schwergasausbreitung die höchsten Konzentrationen und damit auch das höchste Gefährdungspotenzial.

Mit der VDI 3783 wird standardmäßig die mittlere und die ungünstigste Ausbreitungssituation berechnet [89]. Grund hierfür ist, dass die Turbulenz innerhalb der Wolke an festen Orten zu schwankenden Konzentrationswerten führt. Die mittlere Ausbreitungssituation für eine kontinuierliche Freisetzung ergibt sich aus der mittleren Konzentration $\bar{\chi}$ über die Freisetzungsdauer. Die dabei auftretende Streuung (62) wird mit der nachfolgenden Formel berechnet.

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} (\bar{\chi} - \chi_i)^2}$$
(62)

Die ungünstigste Ausbreitungssituation ergibt sich aus der Addition des Mittelwertes und zweimal der Streuung [125].

4.2.1.2. Modifiziertes Verfahren

Experimentelle Untersuchungen zum Einfluss der Windgeschwindigkeit auf das Ausbreitungsverhalten der Schwergaswolke wurden von König [59] durchgeführt. Ziel der Untersuchungen war es herauszufinden, bei welcher Windgeschwindigkeit u_{aR} sich die maximale Länge der Schwergasausbreitung einstellt. u_{aR} beschreibt hierbei die Referenzgeschwindigkeit der Luft in der Höhe L_c und lässt sich mittels des nachfolgend angegebenen Potenzsatzes aus der VDI 3783, Blatt 1 [124] berechnen.

$$u_{aR}(L_c) = v(z_{an}) \cdot \left(\frac{L_c}{z_{an}}\right)^{m_T}$$
(63)

 z_{an} ist hierbei eine Anemometerhöhe von 10 m und m_T ein von der Temperaturschichtung abhängiger Exponent. m_T lässt sich hierbei wie folgt definieren:

- → $m_T = 0.20$ für eine labile Temperaturschichtung
- → $m_T = 0.28$ für eine indifferente Temperaturschichtung
- → $m_T = 0.37$ für eine stabile Temperaturschichtung

Für die mittlere Ausbreitungssituation wird im Allgemeinen von einer indifferenten und für die ungünstigste Ausbreitungssituation von einer stabilen Temperaturschichtung ausgegangen [100].

König [59] platzierte im Rahmen seiner Untersuchungen an verschiedenen Orten im Lee der Freisetzung Gassensoren und führte Konzentrationsmessungen bei verschiedenen Windgeschwindigkeiten durch. Je Gassensor und Geschwindigkeit ergab sich eine maximale Gaskonzentration c_M . Das je Gassensor über die verschiedenen Messreihen gemessene Maximum wurde als $c_{u,M}$ bezeichnet. $c_{u,M}$ dient der Normierung der c_M -Werte. Die in (63) beschriebene Windgeschwindigkeit bezieht sich auf eine Referenzhöhe von L_c . König stellte fest, dass bei $u_{aR} = U_c$ die Maximalkonzentrationen unabhängig vom Messort erreicht wurden. Der ungünstigste Fall stellt sich daher bei einer Windgeschwindigkeit von U_c ein. Das Ergebnis von Königs Untersuchungen ist in Abbildung 61 dargestellt. Dieses wurde einer Veröffentlichung von Schatzmann et al. [105] entnommen.



*Abbildung aus Schatzmann et al. [105]

Abbildung 61: Abhängigkeit der normierten Maximalkonzentration von der normierten Windgeschwindigkeit an vier verschiedenen Messorten

Abbildung 61 stellt den Verlauf der normierten Maximalkonzentration $(\frac{c_M}{c_{uM}})$ über die normierte Windgeschwindigkeit $(\frac{u_{aR}}{U_{ci}})$ für eine schlagartige Freisetzung (Index ci) an vier verschiedenen Messorten $(\frac{x}{L_{ci}})$ dar.

Um den dargestellten Einfluss der normierten Windgeschwindigkeit auf die normierte Maximalkonzentration in der VDI 3783, Blatt 2 zu berücksichtigen, schlägt Schalau [100] als Erweiterung der VDI 3783, Blatt 2 die Korrektur der berechneten Konzentrationen mit einem Windfaktor (*Fak*) vor. Hierbei werden die mit der VDI 3783, Blatt 2 standardmäßig

berechneten Konzentrationen mit dem Windfaktor multipliziert. Der Windfaktor ermittelt sich gemäß des Verlauf der Konzentration in Abbildung 61 und wird von Schalau [100] wie folgt vorgeschlagen:

Die Berücksichtigung des Windfaktors führt zu einer Reduktion des mit der VDI 3783, Blatt 2 berechneten Konzentrationsverlaufs und damit zu einer geringeren Länge des Schwergasbereichs.

4.2.2. Breitenmodell von Britter

Zur Bestimmung der Breite einer Schwergaswolke wurde das von Britter [10] veröffentlichte Berechnungsverfahren verwendet. Mit diesem Berechnungsverfahren kann die Isokontur einer Schwergaswolke, zum Beispiel die 1 Vol.-% Isokontur, bestimmt werden. Die im Rahmen des Berechnungsverfahrens ermittelten Größen werden in der nachfolgenden Abbildung 62 graphisch verdeutlicht. Diese Abbildung wurde einer Veröffentlichung von Britter und McQuaid [11] entnommen.



Abbildung 62: Darstellung der Breite der Wolke nach Britter und McQuaid

Die durchgezogene Linie in der Abbildung 62 beschreibt den Verlauf der Isokontur. Die Freisetzungsquelle (FQ) ist im Ursprung angeordnet (x=0 m, y=0 m, z=0 m). Wie der Abbildung zu entnehmen ist, findet bei einer Schwergasfreisetzung eine Ausbreitung nicht nur mit dem Wind, sondern auch gegen den Wind statt. Die Längenausbreitung der Schwergaswolke gegen den Wind (64) berechnet sich wie folgt:

$$L_u = \frac{D}{2} + 2 \cdot L_b \tag{64}$$

Der Parameter D beschreibt hierbei den Durchmesser der Freisetzungsquelle. Für alle im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Versuche entspricht dies dem Verdampferauslass mit einem Durchmesser von 30 cm. Die Berechnung der Auftriebslängenskala (65) ist ausführlich in sogenannten Yellow Book [76] beschrieben.

$$L_b = \frac{\dot{v}_g \cdot g_{e,0}}{v_{10m^3}} \tag{65}$$

Der darin angegebene Volumenstrom \dot{V}_g beschreibt den kontinuierlichen Volumenstrom des freigesetzten Schwergases. Die angegebene Windgeschwindigkeit v_{10m} beschreibt die Referenzgeschwindigkeit in 10m Höhe. Eine lokal gemessene Windgeschwindigkeit kann auf eine Höhe von 10m umgerechnet werden. Für die Umrechnung sind hierzu geeignete Formeln in der VDI 3783, Blatt 1 [124] sowie in Woodward et al. [135] enthalten. Die Berechnung der effektiven Fallbeschleunigung g_e ist in Kapitel 4.2.1.1., Formel (59) beschrieben.

Die Breite der Schwergaswolke auf Quellhöhe (66) lässt sich mit dem Quelldurchmesser und der Auftriebslängenskala bestimmen.

$$L_h(0) = D + 8 \cdot L_b \tag{66}$$

Die Breite der Wolke am Punkt x (67) lässt sich mit der nachfolgenden Formel bestimmen.

$$L_h(x) = L_h(0) + 2.5 \cdot L_b^{\frac{1}{3}} \cdot x^{\frac{2}{3}} \quad \text{mit} \quad x > 0 \ m \tag{67}$$

Die Größe x stellt hierbei den Abstand von der Quelle bis zum Erreichen der Zielkonzentration in Längsrichtung (x) dar. Die Isokontur als Grenze des Schwergasbereichs ist mit 1 Vol.-% definiert. Die Länge der Schwergaswolke x(1 Vol.-%) kann hierbei mit der VDI 3783, Blatt 2 [125] oder mit anderen Ausbreitungsmodellen bestimmt werden. Weitere Ausbreitungsmodelle sind beispielsweise im Yellow Book [76] beschrieben. Die maximale Breite der Schwergaswolke (siehe Abb. 62) ergibt sich nach Britter und McQuaid [11] bei einer Länge von 2/3 der Längsrichtung der Zielkonzentration.

$$x = \frac{2}{3} \cdot x(1 \, Vol. -\%) \tag{68}$$
4.2.3. Austal 2000

Zur Bestimmung der Länge des Neutralgasbereichs wurde das Ausbreitungsmodell Austal 2000 [121] verwendet. Austal 2000 besteht aus einer Vielzahl kombinierter Modelle. Neben einem Lagrangesches Partikelmodell aus der VDI 3945, Blatt 3 [129] enthält Austal 2000 ein Grenzschichtmodell für ebenes Gelände sowie ein diagnostisches Windfeldmodell, mit dem der Einfluss der Topographie auf das Windfeld berücksichtigt werden kann. Das Grenzschichtmodell für ebenes Gelände wurde der VDI 3783, Blatt 8 [127] entnommen. Zur Berechnung einer Abgasfahnenüberhöhung wurde auf die VDI 3782, Blatt 3 [123] sowie die VDI 3784, Blatt 2 [128] zurückgegriffen.

Herzstück von Austal 2000 ist das Lagrangesches Partikelmodell, welches in der VDI 3945, Blatt 3 [129] beschrieben ist. Das Lagrangesches Partikelmodell berechnet die Wege einzelner Partikel, die sich in einem turbulenten Strömungsfeld unabhängig voneinander ausbreiten. Die punktförmigen Partikel, deren Gesamtmasse der der freigesetzten Masse entspricht, bewegen sich mit der mittleren Strömung, zu der eine zufällige Bewegung zur Berücksichtigung der Turbulenz addiert wird. Die Transportgeschwindigkeit der Partikel setzt sich hierbei aus der mittleren Windgeschwindigkeit, der Turbulenzgeschwindigkeit und einer sogenannten Zusatzgeschwindigkeit zusammen [63].

Das theoretische Ausbreitungsfeld in Austal 2000 wird mit einem Auszählgitter überzogen, in dem sich die Partikel bewegen. Die Konzentration des sich ausbreitendem Gases ergibt sich aus der Aufenthaltszeit und der Masse der Partikel je Gittervolumen [56]. Als Freisetzungsquelle kann Austal 2000 Punkt-, Flächen-, Linien- und Volumenquellen berücksichtigen. Es kann sowohl die Ausbreitung auf ebenem wie auch auf bebautem Terrain berechnet werden [64]. Ziel des Programms ist die Berechnung der Schadstoffausbreitung in der Atmosphäre. Die Ausbreitung von schweren Gasen kann nicht berücksichtigt werden.

Das Programmpaket Austal 2000 wird durch das Umweltbundesamt sowie das Ingenieurbüro Janicke auf ihrer Internetseite [120] kostenlos zur Verfügung gestellt. Das dort zur Verfügung stehende Programmpaket wurde in das kommerzielle Programm ProNuSs [90] integriert und für die nachfolgenden Berechnungen verwendet.

4.2.4. ANSYS CFX

Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten CFD-Berechnungen wurden mit dem kommerziellen Programm Ansys CFX, Version 14.0 vorgenommen. Insgesamt wurden 3 Berechnungen zur Länge der Schwergaswolke durchgeführt. Zwei dieser Berechnungen wurden stationär und eine Berechnung instationär durchgeführt. Bei der stationären Berechnung wird der Windrichtungswechsel vernachlässigt. Die Berechnung basiert auf einer mittleren Windgeschwindigkeit in optimaler Anströmrichtung. Die Berechnungszeit sowie die Anzahl der verwenden CPUs für die durchgeführten Versuche sind in der nachfolgenden Tabelle 21 aufgeführt.

LfdNr.:	Berechnung	Rechenzeit [h]	Anzahl CPU
1	CFX (stationär, standard \bar{k} - $\bar{\epsilon}$)	8	32
2	CFX (stationär, k-e angepasst)	8,5	32
3	CFX (instationär, variabler Wind, k-ε angepasst)	42	32

Tabelle 21: CFX-Rechenzeit und verwendete CPUs

Das für die Berechnungen verwendete Gitter ist ein strukturiertes Gitter mit ca. 4,8 Millionen Zellen. Es hat eine Gitterdimension von $150m \cdot 100m \cdot 30m$ (Länge·Breite·Höhe) und verfügt in Bodennähe über eine Verfeinerung um die Strömungsgrenzschicht abzubilden. Der Boden ist als "Wall" definiert und restlichen Wände als "Openings". Auf den "Openings" wurden die Windgeschwindigkeit und die Turbulenzparameter k und ε vorgegeben.

Die Freisetzungsquelle wurde als Punktquelle (Source Point) angenommen. Sie befindet sich 9,5 cm über dem Boden. Dies entspricht der Hälfte des Radius der kreisförmigen Flächenfreisetzungsquelle des Verdampfers (siehe Kap. 3.1.2.) und einem Überstand von 2 cm. Die Freisetzung aus der Quelle erfolgt impulsfrei und ohne Turbulenz.

Für die Berechnungen wurde der Auftrieb aktiviert, der Wärmetransport mit dem Thermal Energy Model berücksichtigt und als Turbulenzmodell das \bar{k} - $\bar{\epsilon}$ -Modell verwendet. Nach Sklavounos und Rigas [112] eignet sich dieses Modell besonders für die atmosphärische Ausbreitung von gefährlichen Gasen.

In der ersten stationären Berechnung wurde das \bar{k} - $\bar{\epsilon}$ -Modell mit den Voreinstellungen von CFX verwendet. In der zweiten stationären Berechnung wurden die Turbulenzparameter \bar{k} und $\bar{\epsilon}$ aus dem Geschwindigkeitsprofil (genauer gesagt der Schubspannungsgeschwindigkeit u^*) der Ultraschallanemometeraufzeichnungen während des Experiments ermittelt und bei der Berechnung vorgegeben.

Für die instationäre Berechnung wird die Windrichtungsänderung über die gesamte Versuchszeit berücksichtigt. Hierzu wird zunächst die mittlere lokale Windgeschwindigkeit v_z in ihre Teilkomponenten für eine 2D-Windbewegung zerlegt. Der Anteil der Windgeschwindigkeit in x-Richtung ergibt sich aus Gleichung (69) und der Anteil der Windgeschwindigkeit in y-Richtung ergibt sich aus Gleichung (70).

$$u_x = v_z \cdot \cos(dir) \tag{69}$$

$$u_{v} = v_{z} \cdot \sin(dir) \tag{70}$$

Für diese Betrachtung wird die mittlere Windgeschwindigkeit anstatt der exakten Geschwindigkeit verwendet. Grund hierfür ist, dass das USA nur ein lokales Windfeld erfasst. Dieses Windfeld ist nicht zwingend repräsentativ für das globale Windfeld. Windgeschwindigkeitsänderungen am Ende des Ausbreitungsfeldes werden mit dem USA eventuell nicht mehr erfasst. Eine mittlere Windgeschwindigkeit bildet das globale Windfeld besser ab. Die simulierte Zeit entspricht für die instationäre Betrachtung der realen Versuchszeit.

Als Eingangsparameter für die Simulation dienen in allen drei Fällen eine mittlere Windgeschwindigkeit, eine mittlerer Massenstrom, eine mittlere Umgebungstemperatur sowie eine mittlere Quellaustrittstemperatur des Schwergases. Die benötigten Stoffdaten von R134a wurden dem VDI-Wärmeatlas [122] entnommen.

5. Numerische Simulationen

In diesem Kapitel werden die experimentell ermittelten Ergebnisse mit Berechnungsergebnissen verglichen und bewertet. Das erste Unterkapitel beschäftigt sich mit Freisetzungsberechnungen und das zweite Unterkapitel mit Ausbreitungsberechnungen.

5.1. Freisetzungsversuche

Mit dem im Kapitel 4.1 dargestellten Modell werden die experimentellen Untersuchungen zur Freisetzung von R134a aus handelsüblichen Druckgasflaschen nachgerechnet, um eine Bewertung der entwickelten Modellierung zu ermöglichen.

5.1.1. Bestimmung der Ausflussziffern

Für die Berechnung des Massenstroms müssen die Ausflussziffern (AZ) für die flüssige μ_{fl} und gasförmige Freisetzung μ_g bekannt sein. Die Bestimmung erfolgt experimentell, da die Ausflussziffer sowohl von Flaschenventil als auch vom strömenden Medium abhängig ist. Sie ist notwendig, weil bei der Berechnung des Massenstroms eine ideale Düse vorausgesetzt wird, bei der Reibung, Wärmeaustausch mit der Umgebung sowie bauartspezifische Einflüsse des Flaschenventils vernachlässigt werden. Der durch die Vernachlässigungen entstehende Fehler wird mit der Ausflussziffer korrigiert.

Die Nicht-Berücksichtigung der Korrektur (AZ = 1) auf den Masseverlust einer Gas- bzw. Flüssigkeitsströmung sowie der korrigierte Masseverlust (AZ < 1) werden in den nachfolgenden Abbildungen 63 und 64 verdeutlicht.



Abbildung 63: Ausflussziffer einer reinen Gasströmung für R134a



Abbildung 64: Ausflussziffer einer reinen Flüssigkeitsströmung für R134a

In Abbildung 63 ist der Massenverlust über die Ausströmdauer bei einer reinen Gasströmung dargestellt. Mit einer AZ von $\mu_g = 0,74$ konnte der experimentell ermittelte Verlauf am besten abgebildet werden.

In Abbildung 64 ist der Massenverlust über die Ausströmdauer bei einer Flüssigkeitsströmung dargestellt. Die Ausflussziffer von $\mu_{fl} = 0,22$ wurde hierbei im Zeitintervall von 0 bis 20 Sekunden gebildet. Nur in diesem Bereich lag eine reine Flüssigkeitsströmung vor. Der daran anschließende Zeitbereich von 20 bis 33 Sekunden deutet aufgrund des abnehmenden Massenverlusts auf eine Zweiphasenströmung hin, die danach in eine reine Gasströmung übergeht. Die Zweiphasenströmung kann durch das plötzliche Einsetzen des Blasensiedens hervorgerufen worden sein. Der absinkende Flüssigkeitspegel in der Flasche sorgt für eine Vergrößerung des Gasraums und damit zu einer Druckabsenkung in der Flasche. Nach dem Erreichen eines ausreichend großen thermodynamischen Ungleichgewichts setzt das Blasensieden ein. Die Blasen, die sich in der Flasche und im Ventil bilden werden mit dem Flüssigkeitsstrom ausgetragen. Dies führt zu einer Verringerung des Massenstroms und damit zu einer Reduzierung des Masseverlusts.

Darüber hinaus verdeutlichen die Abbildungen 63 und 64, dass das Berechnungsverfahren für die Randfälle Gas- und Flüssigkeitsströmung funktioniert.

5.1.2. Freisetzung aus einer stehenden Flasche

Im Rahmen der Freisetzung aus einer stehenden Flasche wurden bei annähernd gleichen Anfangsfüllständen (≈ 85 %) in einem von vier Versuchen eine reine Gasströmung und in drei von vier Fällen eine Zweiphasenströmung visuell festgestellt. Da das Eintreten einer Gasoder Zweiphasenströmung mittels des kritischen Füllgrads nach Schmidt [106] nur abgeschätzt werden kann, werden in den nachfolgenden Vergleichen sowohl die Berechnung einer Zweiphasenströmung als auch die Berechnung einer reinen Gasströmung mit den experimentellen Ergebnissen verglichen und bewertet. Als experimentelle Vergleichswerte dienen hierbei die in Kapitel 3.4.1.1. vorgestellten Versuchsdaten.

5.1.2.1. Gas- und Zweiphasenströmung

In den nachfolgenden Abbildungen 65 bis 68 werden zunächst die experimentell ermittelten Druckverläufe mit den Berechnungsergebnissen der vier durchgeführten Versuche – zweimal mit einer 2- ℓ - und zweimal mit einer 10- ℓ -Chlorgasflasche – miteinander verglichen.



Abbildung 65: Druckverlauf 2-ℓ-Flasche (14,2 °C) mit Berechnungsvergleich



Abbildung 66: Druckverlauf 2-ℓ-Flasche (33,25 °C) mit Berechnungsvergleich



Abbildung 67: Druckverlauf 10-ℓ-Flasche (12,4 °C) mit Berechnungsvergleich



Abbildung 68: Druckverlauf 10-*l*-Flasche (32,82 °C) mit Berechnungsvergleich

Grundsätzlich zeigt sich, dass die Annahme einer reinen Gasströmung den Druckverlauf einer Zweiphasenströmung insbesondere in der Anfangsphase unterschätzt. Die Zweiphasenströmungsberechnung hingegen führt in der Anfangsphase zu einer Überschätzung des Druckverlaufs. Grund hierfür ist die Nicht-Berücksichtigung des Schlupfs in der ISO 4126-10 [106]. Der Schlupf beschreibt das Verhältnis der Ausströmgeschwindigkeit der Gas- und der Flüssigphase $\frac{v_g}{v_{fl}}$. Bei einem Schlupf von 1, sind die beiden Phasen gleich schnell. In der Realität strömt die Gasphase jedoch schneller ab als die Flüssigphase, so dass ein Schlupf > 1 vorliegt. Die Annahme gleicher Geschwindigkeiten der Gas- und der Flüssigphase in der ISO 4126-10 führt insbesondere in der Anfangsphase zu einer Verlangsamung des Druckabbaus in der Flasche [133]. Die experimentellen Ergebnisse zeigen einen deutlich stärkeren Druckabfall, welcher sich mit der höheren Ausströmgeschwindigkeit der Gasphase erklären lässt.

Die durch den Entlöseverzug hervorgerufene Druckschwankung innerhalb der ersten Sekunden, kann mit der Berechnungsmethode nach ISO 4126-10 nicht abgebildet werden. Die in diesem Bereich berechneten Werte liefern aber eine konservative Abschätzung des Druckverlaufs, so dass aus Sicht des Massenstroms auf die Gasausbreitung auf diesen zeitweiligen Effekt (< 2 s) verzichtet werden kann. Poli [87] bestätigt mit seinen Untersuchungen zur Druckentlastung, dass der Siedeverzug aus sicherheitstechnischer Betrachtungsweise vernachlässigbar ist, da der nur sehr kurzweilig ist (< 1 Sekunde) und den Anfangsdruck bei nicht-reagieren Systemen nicht übersteigt.

Die im Rahmen der experimentellen Untersuchungen festgestellte Dauer der Zweiphasenströmung wird in der Tabelle 22 mit der berechneten Zeitdauer verglichen.

Gastemperatur [°C]	Volumen [ℓ]	Zeitraum Zweiphasen- strömung [sec] Experiment	Zeitraum Zweiphasen- strömung [sec] Berechnung
14.2	2	0,2 - 11	0-3,4
33.25	2	0,1 - 12	0-2,5
12.4	10	Ø	0-9,8
32.82	10	0,1 - 12	0-8,7

Tabelle 22: Zeitraum Zweiphasenströmung für Experiment und Berechnung

 \emptyset = Keine Zweiphasenströmung eingetreten

Hierbei ist festzustellen, dass die berechneten Zeiträume der Zweiphasenströmung zum Teil erheblich niedriger liegen. Grund hierfür ist eine Überschätzung des im Kapitel 4.1.2.4. mit der Gleichung (46) berechneten Strömungsmassengasgehalts (\dot{x}_0). Dieser führt wie in Tabelle 23 dargestellt, während der Zweiphasenströmung, zu einem deutlich größeren Massenstrom als experimentell bestimmt.

Gastemperatur [°C]	Volumen [&]	Massenstrom [g/s] Experiment	Massenstrom [g/s] Berechnung
14.2	2	100	175
33.25	2	150	228
12.4	10	Ø	177
32.82	10	130	236

Tabelle 23: Massenstrom während der Zweiphasenströmung bei $p \approx konst$

 \emptyset = Keine Zweiphasenströmung eingetreten

Diese Annahme kann leider durch den Vergleich mit experimentellen Ergebnissen nicht verglichen werden, da der Strömungsmassendampfgehalt im engsten Querschnitt während der Ausströmungen nicht gemessen wurde.

Wie in den nachfolgenden Abbildungen 69 und 70 zum Massenverlust ersichtlich, gleichen sich die zu niedrig bestimmten Zeiträume der Zweiphasenströmung und der zu hoch berechnete Massenstrom weitestgehend aus. Grund hierfür ist die durch den kritischen Füllstand aus Kapitel 4.1.2.4. und den Anfangsfüllstand vorgegebene Massendifferenz, die Unabhängig maximal zweiphasig abströmen kann. davon wie groß der Zweiphasenmassenstrom ist, kann nicht mehr als die Massendifferenz der beiden Füllstände zweiphasig abströmen. Ein zu hoch berechneter Massenstrom hat zur Konsequenz, dass sich die Massendifferenz schneller aufbraucht, welches sich in der Zeitdauer der Zweiphasenströmung (Tabelle 22) wiederspiegelt.



Abbildung 69: Massenverlust 2-*l*-Flasche mit Berechnungsvergleich



Abbildung 70: Massenverlust 10-ℓ-Flasche mit Berechnungsvergleich

Die in Kapitel 3.4.1.1. in der Tabelle 20 beschriebenen Beobachtungen zum Eintreten einer Zweiphasenströmung bestätigen sich auch durch die Berechnungen. Während bei dem Versuch der 10-ℓ-Flasche mit einer Gastemperatur von 12,4°C die Berechnung einer reinen Gasphasenströmung die besten Ergebnisse liefert, so ist es bei den verbleibenden Versuchen jeweils die Berechnung einer Zweiphasenströmung.

Insgesamt lässt sich bei der Berechnung einer Zweiphasenströmung im Vergleich zu den experimentellen Ergebnissen ein maximaler Fehler von ca. ± 13 % feststellen. Die Annahme einer reinen Gasströmung anstatt einer Zweiphasenströmung hätte zu einem maximalen Fehler von bis zu ± 90 % geführt.

Die Abweichungen von ± 13 % lassen sich mit der Ungenauigkeit des Graphen des kritischen Füllgrades bei einer Zweiphasenströmung begründen. Der in Kapitel 4.1.2.4 dargestellte allgemeingültige Verlauf entspricht der Einhüllenden sehr vieler Druckentlastungsversuche und dient der Abschätzung einer Zweiphasenströmung. Eine allgemeingültige Fehlergröße für den Verlauf des kritischen Füllgrades ist nicht angegeben [106].

Das experimentelle Ergebnis der 10-ℓ-Flasche mit einer Gastemperatur von 12,4°C wiederspricht der Berechnung des kritischen Füllgrads in Abhängigkeit der dimensionslosen Blasenaufstiegsgeschwindigkeit (Tabelle 24).

Versuchsdatum	Volumen [ℓ]	Gastemperatur [°C]	Anfangsfüll- grad FG [%]	Xdb	Kritischer Füllgrad FGkrit [%]	Eintreten einer Zweiphasen- strömung?
11.10.2010	10	12,4	82,49	1,18	68,84	ја
16.06.2011	10	32,82	85,4	1,3	67,28	ја
11.10.2010	2	14,2	85,4	2,31	57,05	ја
16.06.2011	2	33,25	86,39	2,56	54,83	ја

Tabelle 24: Vergleich kritischer Grenzfüllgrad mit Anfangsfüllgrad

Dem kritischen Füllgrad zufolge ($FG_{krit} < FG$), hätte auch bei diesem Versuch eine Zweiphasenströmung einsetzen müssen. Diese Abweichung deutet darauf hin, dass eine Anwendung des Graphen mit niedrigen Anfangsenergien und damit verbundenen niedrigen dimensionslosen Blasenaufstiegsgeschwindigkeiten (X_{db}) ungenau ist. Der kritische Füllgrand hat den Anspruch konservativ ausgelegt zu sein. Daher führt die Berücksichtigung einer Zweiphasenströmung anstatt einer reinen Gasströmung in keinem Fall zu einer Unterschätzung des austretenden Massenstroms.

Die nachfolgenden Abbildungen 71 und 72 stellen den Temperaturverlauf der Flüssigphase im Vergleich mit den Berechnungen dar. Auf den Berechnungsvergleich der Gasphasentemperatur wird an dieser Stelle verzichtet, da deren Einfluss auf den Massenstrom nur sehr gering und durch die starke Temperaturschichtung in der Gasphase schwierig abzubilden ist.



Abbildung 71: Temperaturverlauf 2-ℓ-Flasche mit Berechnungsvergleich



Abbildung 72: Temperaturverlauf 10-*l*-Flasche mit Berechnungsvergleich

Die nicht Berücksichtigung des Schlupfes macht sich auch in der Simulation der Flüssigkeitstemperatur deutlich bemerkbar. Der im Vergleich zum Experiment langsamer abfallende Druck, führt zu einer Verlangsamung der Abkühlung der Flüssigphase in der Anfangsphase. Die Abkühlung der Flüssigkeit nach dem schlagartigen Öffnen auf die Siedetemperatur ist vom Flascheninndruck abhängig. Da sich dieser, bedingt durch die nicht Berücksichtigung der unterschiedlichen Geschwindigkeiten von Gas- und Flüssigphase im Austrittsquerschnitt, in der Berechnung nur langsam ändert, verändert sich auch die berechnete Flüssigkeitstemperatur in der Anfangsphase nur langsam. Nach der Beendigung der Zweiphasenströmung setzt eine reine Gasströmung ein, die mit einem hohen Druckabfall und einer damit verbundenen starken Abkühlung der Flüssigkeit verbunden ist. Insgesamt bildet sich der starke Temperaturabfall bedingt durch die Berechnung der Zweiphasenströmung nach ISO 4126-10 verzögert ab.

5.1.2.2. Verallgemeinerung der Berechnungsmethode

Die im Rahmen der Hauptuntersuchungen durchgeführten Versuche wurden alle samt mit dem Kältemittel R134a durchgeführt. Um zu beweisen, dass das Berechnungsverfahren auch auf andere Stoffe übertragbar ist, wurden Versuche mit einem weiteren Gas durchgeführt. Auswahlkriterium für dieses Gas waren wieder die Eigenschaften nicht brennbar und nicht toxisch, um jegliche Gefährdungen für die an der Durchführung der Versuche beteiligten Personen auszuschließen. Die Entscheidung viel letztendlich auf das Gas CO₂. Da dieses Gas durch den Gaslieferanten bereits in den handelsüblichen Gasflaschen geliefert wird und damit die Möglichkeit die Flaschen selber zu füllen nicht mehr besteht, musste auf die Installation von Druck- und Temperaturmessfühlern verzichtet werden. Damit dienen diese Versuche ausschließlich dem Vergleich mit den berechneten Massenströmen. Der Versuchsaufbau entspricht Kapitel 3.3.1.

Neben bekannten Größen wie der Flaschengeometrie, dem minimalen Ventildurchmesser sowie der Füllmasse aus Tabelle 25, mussten die Ausflussziffern für die Gas - und die Flüssigphase experimentell bestimmt werden. Der Ergebnisse der Bestimmung sind in den nachfolgenden Abbildungen 73 und 74 dargestellt.

Szenario	Volumen [ℓ]	Höhe [cm]	Aussensdurch- messer [cm]	Mittlere Wand- dicke [mm]	Minimaler Ventil- durchmesser [mm]	Füllmasse [kg]
Gasströmung AZ gas	10	81,5	14	3,65	4	2,7
Flüssigkeitsstr. AZ flüssig	10	81,5	14	3,65	4	7,5
Berechnungsvergleich	10	81,5	14	3,65	4	7,5

Tabelle 25: Flaschengeometrie und Füllmasse CO₂-Versuche



Abbildung 73: Ausflussziffer einer reinen Gasströmung für CO₂



Abbildung 74: Ausflussziffer einer reinen Flüssigkeitsströmung für CO₂

In Abbildung 73 ist der Massenverlust über die Ausströmdauer bei einer reinen Gasströmung dargestellt. Mit einer Ausflussziffer (AZ) von $\mu_g = 0,5$ konnte der experimentell ermittelte Verlauf am besten abgebildet werden. Abbildung 74 zeigt den Massenverlust einer reinen Flüssigkeitsströmung. Die Ausflussziffer von $\mu_{fl} = 0,42$ wurde hierbei im Zeitintervall von 0 bis 12 Sekunden gebildet. Nur in diesem Bereich lag eine reine Flüssigkeitsströmung vor.

Bevor nun auf den Berechnungsvergleich eingegangen wird, werden in der nachfolgenden Tabelle 26 die für die Simulationen wichtigen Umgebungsparameter während der Versuche dargestellt.

Szenario	Volumen [ℓ]	Mittlere Wind- geschw. [m/s]	Mittlere Umgebungs- temperatur [°C]	Gastemperatur [°C]
Gasströmung AZ gas	10	1,58	8,59	12,42
Flüssigkeitsstr. AZ flüssig	10	1,89	8,23	8,81
Berechnungsvergleich	10	0,9	8,31	8,16

Tabelle 26: Umgebungsbedingungen und Anfangsgastemperatur CO₂-Versuche

Mit dem in Abbildung 75 dargestellten Berechnungsvergleich ist die Übertragbarkeit des Berechnungsverfahrens auf andere Gase nachgewiesen. Der experimentell ermittelte Massenstrom stimmt ziemlich genau mit dem berechneten Verlauf von CO₂ überein.



Abbildung 75: Massenverlust 10-ℓ-Flasche CO₂ mit Berechnungsvergleich

Die CO₂-Flasche war mit 7,5 kg Anfangsgasmasse durch den Lieferanten maximal gefüllt. Dies entspricht einem Füllgrad von 72,2 %. Bei diesem Füllgrad trat weder bei der Berechnung noch während der Versuchsdurchführung eine Zweiphasenströmung auf. Die Videoaufnahmen während des Versuchs bestätigen diesen Sachverhalt. Berechnungsverfahren und Versuch stimmen sehr gut überein und bestätigen eine reine Gasströmung. Grund für die reine Gasströmung kann der mit 4 mm sehr geringe minimale Flaschenventildurchmesser sein. Dieser führt zu einem verlangsamten Druckabbau in der Flasche und damit zu einem geringeren thermodynamischen Ungleichgewicht in der Anfangsphase. Die mit dem Ungleichgewicht einhergehende Bildung von Blasen im Rahmen des Blasensiedens war nicht ausreichend, um den Gemischpegel bis zum Flaschenventil aufzuwallen. Die innerhalb der ersten 20 Sekunden auftretende Schwankung des Massenstroms des Experiments ist eine Fehlmessung. Sie wurde durch den Ausströmimpuls beim Öffnen der Flasche hervorgerufen. Der Impuls versetzte die auf der Waage stehende Gasflasche leicht ins Schwanken und sorgte damit bei der Aufzeichnung des Masseverlusts für diesen Fehler.

5.1.2.3. Parameterstudie – Einflussfaktoren auf den Massenstrom

Der Verlauf des Massenstroms hat eine Vielzahl von Einflussgrößen. Da diese bei der Vorhersage in Rahmen einer Auswirkungsbetrachtung zum Teil nur abgeschätzt werden können, werden in diesem Kapitel verschiedene Einflussgrößen auf den Massenstrom variiert und bewertet. Die Variation findet innerhalb des im Kapitel 4.1 dargestellten Berechnungsverfahrens statt.

Die Einflussfaktoren lassen sich hierbei grob in drei Gruppen unterteilen:

- → Flaschenabhängige Einflussfaktoren
- → Umgebungsabhängige Einflussfaktoren
- → Einflussgrößen durch Flaschengeometrie und Füllstand

Im Kapitel 5.1.2.2. wurde die Übertragbarkeit des Berechnungsverfahrens auf andere Gase bewiesen. Die nachfolgende Parameterstudie bezieht sich ausschließlich auf die Berechnungsergebnisse von Chlor für die Freisetzung aus der Gasphase. Dieser Stoff wurde ausgewählt, weil er in Deutschland im Rahmen von industriellenVerfahren häufig Anwendung findet und über ein hohes toxisches Gefährdungspotenzial verfügt. Nach Hartwig et al. [47] wurden in den Jahren 1926 bis 1993 alleine in Deutschland 63 Störfälle im Zusammenhang mit der Produktion, der Lagerung, dem Transport und der Verarbeitung von Chlor dokumentiert.

Im Rahmen der flaschenabhängigen Einflussfaktoren werden der minimale Durchmesser des Flaschenventils, die mittlere Wanddicke der Flasche sowie die Ausflussziffer der Gas- und der Flüssigphase variiert.

Der Massenverlust für drei verschiedene Flaschenventildurchmesser (d_{FV}) , aber ansonsten gleichen Randbedingungen, ist in Abbildung 76 dargestellt.



Abbildung 76: Abhängigkeit des Massenverlusts vom Ventildurchmesser

Erwartungsgemäß zeigt sich, dass mit größer werdendem minimalen Ventildurchmesser (d_{FV}) der Massenstrom und damit auch der Masseverlust größer wird. Ein größerer Ventildurchmesser führt zu einem schnelleren Druckabbau in der Flasche, wodurch sich dementsprechend auch ein größeres thermodynamisches Ungleichgewicht einstellt. Je größer das Ungleichgewicht ist, desto stärker ist die Verdampfung aus der Flüssigphase. Im Versuch mit einem Ventildurchmesser von 10 mm ist das Ungleichgewicht im Vergleich zu den anderen Versuchen sogar so groß gewesen, dass sich innerhalb der ersten Sekunden eine Zweiphasenströmung eingestellt hat, die mit einem deutlich größeren Massenverlust verbunden ist.

Gasflaschen für druckverflüssigte Gase haben je nach Größe des Behältnisses bzw. des zu erwartenden Drucks des verwendeten Gases unter Umgebungstemperatur eine unterschiedliche Wanddicke (k_w) . Eine Variation der Wanddicke und dessen Einfluss auf den Massenstrom sind in der Abbildung 77 dargestellt.



Abbildung 77: Abhängigkeit des Massenverlusts von der Wanddicke

Eine Vergrößerung der Wandstärke führt zu einer Zunahme des Masseverlusts. Grund hierfür ist die Vergrößerung des Außendurchmessers bei gleichbleibendem Innendurchmesser und damit einer Vergrößerung der Wärmeübertragungsfläche. Je größer die Übertragungsfläche ist, desto mehr Wärme kann von der Umgebung auf die Flasche übertragen werden und desto größer ist die Verdampfung aus der Flüssigkeit. Insgesamt kann der Einfluss der Wanddicke auf den Masseverlust als eher vernachlässigbar angesehen werden. Eine Verdopplung der Wanddicke einer Standard-Chlorgasflasche (3 mm) führt gerade einmal zu einer Erhöhung des Masseverlust von 200 g. Mit der Wanddickenvariation von 3 bis 9 mm sind die üblichen Wanddicken von handelsüblichen Gasflaschen abgedeckt.

Der Einfluss der Ausflussziffer (μ) ist bekannt. Sie ist stark von der Geometrie des Flaschenventils abhängig und muss jeweils für die Kombination Ventil/Gas experimentell bestimmt werden. Da aber im Rahmen einer Auswirkungsbetrachtung, die Information zur realen Ausflussziffer in der Regel unbekannt ist und sie dementsprechend abgeschätzt werden muss, soll mit den nachfolgenden Abbildungen 78 und 79 der Einfluss der Ausflussziffer auf den Massenstrom dargestellt werden.



Abbildung 78: Abhängigkeit des Massenverlusts von der Ausflussziffer (gas)



Abbildung 79: Abhängigkeit des Massenverlusts von der Ausflussziffer (flüssig)

In der Abbildung 78 ist der Einfluss der Ausflussziffer(gas) dargestellt. Die Variation der Ausflussziffer findet hierbei über den üblichen Größenbereich statt. Es ist festzustellen, dass eine Fehlabschätzung der Ausflussziffer (gas) insbesondere in der Anfangsphase der Ausströmung zu einer deutlichen Fehlberechnung des Massenstroms führt. Um also einen realitätsnahen Massenstrom abschätzen zu können, müssen möglichst genaue Angaben zur Ausflussziffer bekannt sein. Anders sieht es bei dem Einfluss der Ausflussziffer (flüssig) in Abbildung 79 aus. Auch hier wurde die Ausflussziffer über den üblichen Größenbereich variiert. Es ist festzustellen, dass diese nur geringen Einfluss auf den Massenstrom hat und auch mit einer Fehlabschätzung noch akzeptable Ergebnisse liefert.

Im Rahmen der umgebungsabhängigen Einflussfaktoren werden die Umgebungstemperatur, die Anfangsgastemperatur sowie die Anströmgeschwindigkeit des umgebenden Mediums variiert.

Der Massenverlust für drei verschiedene Umgebungstemperaturen (T_u) , bei ansonsten gleicher Anfangsgastemperatur, ist in Abbildung 80 dargestellt. Dieses Szenario kommt zum Tragen, wenn eine Flasche beispielweise aus einem kälteren Raum in eine wärmere Umgebung gebracht wird. Die Erwärmung der Flasche dauert einige Zeit, so dass die Gastemperatur der Flasche nicht der Umgebungstemperatur entspricht.



Abbildung 80: Abhängigkeit des Massenverlusts von der Umgebungstemperatur

Der Einfluss der Umgebungstemperatur auf den Masseverlust ist nur geringfügig. Insbesondere in der Anfangsphase der Druckentlastung in der der größte Massenstrom freigesetzt wird, gibt es kaum eine Abweichung durch die Variation.

Ein anderes Bild zeigt sich für die Annahme, dass sich die Gasflasche und damit die Anfangsgastemperatur jeweils auf Umgebungstemperatur erwärmt haben. Der Massenverlust für verschiedene Anfangsgastemperaturen ist in Abbildung 81 dargestellt.



Abbildung 81: Abhängigkeit des Massenverlusts von der Anfangsgastemperatur

Erwartungsgemäß wird der Massenstrom und damit auch der Massenverlust mit zunehmender Anfangsgastemperatur ($T_{g,0}$) größer. Hierbei muss jedoch berücksichtigt werden, dass sich der Anfangsfüllgrad (FG_0) in Abhängigkeit der Anfangsgastemperatur bei gleicher Füllmasse geringfügig ändert. Die Ergebnisse der Anfangsgastemperatur lassen sich gleichermaßen auf den Anfangsdruck ($p_{g,0}$) übertragen, da die Anfangsgastemperatur als Systemtemperatur mittels der Siedekurve auf den Sättigungsdampfdruck umgerechnet werden kann. Höhere Gastemperaturen führen zu höheren Flaschendrücken und diese wiederum im Falle einer Entspannung zu einem höheren Masseverlust.

Der Einfluss der Anströmgeschwindigkeit auf den Massenverlust wird in Abbildung 82 verdeutlicht.



Abbildung 82: Abhängigkeit des Massenverlusts von der Anströmgeschwindigkeit

Als Variationswerte wurden hierbei die unter üblichen Wetterbedingungen zu erwartenden Windgeschwindigkeiten (*u*) in Bodennähe gewählt. Diese liegen in der Regel zwischen 0 und 6 m/s. Der Verlauf des Massenstroms über die Zeit verdeutlicht, dass die Abhängigkeit der Anströmgeschwindigkeit unter Umgebungsbedingungen vernachlässigbar gering ist und im Falle einer Auswirkungsbetrachtung grob abgeschätzt werden kann.

Im Rahmen der Einflussgrößen durch Flaschengeometrie und Füllstand werden Untersuchungen zum Einfluss eines unterschiedlichen Füllgrads bei gleichbleibendem Flaschenvolumen, einer Variation des Flaschenhöhe/-durchmesser-Verhältnisses bei konstantem Füllgrad und Volumen sowie des Flaschenvolumens unterschiedlicher handelsüblicher Gasflaschengrößen von Typ Chlor bei konstantem Füllgrad durchgeführt.

Die nachfolgende Abbildung 83 stellt schematisch verschiedene Füllgrade einer handelsüblichen $10-\ell$ -Chlorgasflasche dar.



Abbildung 83: Schematische Darstellung eines unterschiedlichen Füllgrads / einer unterschiedlichen Anfangsmasse bei konstantem Flaschenvolumen

Die Gasmassen 10, 5 und 2 kg entsprechen einem Füllgrad von 71, 35.5 und 14.2 %. Die Abbildung 84 verdeutlicht, dass mit einer höheren Anfangsgasmasse (m_g) sowie damit verbundenen höheren Anfangsfüllständen (FG_0) ein höherer Massenverlust erzielt wird. Grund für diesen Zustand sind die unterschiedlichen Kontaktflächen zwischen Flüssigkeit und Flaschenwand. Siedekeime zur Blasenbildung bilden sich vorwiegend an der Wandung. Je mehr Kontaktfläche besteht, desto mehr Energie und Masse können im Rahmen des Blasensiedens aus der Flüssigkeit abgeführt werden. Bei geringerem Füllstand verringert sich das Oberfläche-Volumen-Verhältnis und damit auch die Energie- und Masseabfuhr aus der Flüssigphase.



Abbildung 84: Abhängigkeit des Massenverlusts von dem Füllgrad / der Anfangsmasse bei konstantem Flaschenvolumen

In der Abbildung 85 ist eine 10- ℓ -Gasflasche mit unterschiedlichem Flaschenhöhe/durchmesser-Verhältnisses $(\frac{h}{d_i})$ dargestellt.



Abbildung 85: Schematische Darstellung eines unterschiedlichen $\frac{h}{d_i}$ -Verhältnisses bei konstantem Füllgrad und Flaschenvolumen

Alle Flaschen sind hierbei mit einer identischen Gasmasse gefüllt und verfügen über gleiche Füllgrade. Abbildung 86 lässt erkennen, dass der Massenverlust mit zunehmenden $\frac{h}{d_i}$ -Verhältnis steigt. Neben der Vergrößerung des Oberfläche-Volumen-Verhältnis bei steigendem $\frac{h}{d_i}$ -Verhältnis führt eine Verringerung des Flaschendurchmessers zu einer Verringerung der Phasengrenzfläche. Über die Phasengrenzfläche kann je Zeiteinheit aufgrund langsamerer Stoff- und Übertragungsmechanismen nur eine begrenze Menge an Energie und Masse abgeführt werden. Eine Verkleinerung des Durchmessers reduziert den Energie- und Masseaustrag über die Phasengrenzfläche und führt zu einem stärkeren Ansteigen des Gemischpegels und damit zu einer verlängerten Zweiphasenströmung. Unter der Voraussetzung eines konstanten Flaschenvolumens führt eine Verringerung des Flaschendurchmessers zu einer Vergrößerung des Masseverlusts.



Abbildung 86: Abhängigkeit des Massenverlusts vom unterschiedlichem $\frac{h}{d_i}$ -Verhältnis bei konstantem Füllgrad und Flaschenvolumen

In einer abschließenden Betrachtung werden die Massenströme von auf dem Markt verfügbaren handelsüblichen Chlorgasflaschen bei gleichem Füllgrad und Austrittsquerschnitt berechnet. Chlorgasflaschen werden hierbei in der Regel in den Flaschenvolumen 2 ℓ , 10 ℓ und 52 ℓ vertrieben. Diese Flaschen sind in der Abbildung 87 schematisch dargestellt.



Abbildung 87: Schematische Darstellung unterschiedlicher handelsüblicher Chlorgasflaschengrößen bei konstantem Füllgrad

Die für die Berechnung zugrunde liegenden geometrischen Größen sowie die entsprechenden Füllmassen sind in der nachfolgenden Tabelle 27 aufgeführt.

Flaschentyp	Volumen V [ℓ]	Höhe h [cm]	Durchmesser d [cm]	h/d _i - Verhältnis	Füllmasse [kg]
Chlor	2	33,5	10	3,4	2,96
Chlor	10	81,5	14	5,8	14,12
Chlor	52	148,5	22,9	6,5	68,85

Tabelle 27: Geometrie und Füllmasse der handelsüblichen Chlorgasflaschen

Der berechnete Massenverlust für drei verschiedene Chlorgasflaschengrößen, bei ansonsten gleichem Füllstand, ist in Abbildung 88 dargestellt. Hierbei ist deutlich zu erkennen, dass handelsübliche Chlorgasflaschen mit größeren Volumen zu größeren Massenströmen und damit auch zu einem größeren Masseverlust führen. Begründet werden kann dies einerseits durch eine höhere Anfangsmasse bei gleichem Füllgrad der Flaschen sowie andererseits durch die arttypische Gestaltung handelsüblicher Chlorgasflaschen. Eine Chlorgasflasche mit einem größeren Fassungsvermögen verfügt auch über ein größeres $\frac{h}{d_i}$ –Verhältnis. Wie in der Abbildung 86 zu erkennen ist, führt ein höheres $\frac{h}{d_i}$ –Verhältnis auch zu einem höheren Massenstrom. Der Tabelle 27 ist zu entnehmen, das das $\frac{h}{d_i}$ –Verhältnis der 10- ℓ - und der 52-

ℓ-Gasflasche sehr nah beieinander liegen, womit sich der Eingangs ähnliche Verlauf des Masseverlusts erklären lässt.



Abbildung 88: Abhängigkeit des Massenverlusts von der handelsüblichen Größe der Chlorgasflasche bei konstantem Füllgrad

5.1.2.4. Variation verschiedener Blasensiedemodelle

Der Einfluss verschiedener Blasensiedemodelle (siehe Kapitel 4.1.2.2.2.) auf den Massenverlust bei einer Druckentlastung ist in der Abbildung 89 dargestellt. Die berechneten Ergebnisse werden hierbei mit dem Versuch der 10-ℓ-Flasche vom 11.10.10 mit einer Anfangsgastemperatur von 12,4 °C (siehe Kapitel 3.4.1.1.) verglichen. Weil bei diesem Versuch keine Zweiphasenströmung festgestellt wurde, ist er sehr gut zur Verdeutlichung des Einflusses der Blasensiedemodelle geeignet. Es ist zu erkennen, dass alle verwendeten Modelle doch recht gut mit den experimentell ermittelten Werten übereinstimmen. In einer vergrößerten Auflösung des Massenverlusts (Abb. 90) werden die geringen Unterschiede verdeutlicht. Hierbei stellt sich heraus, dass die Blasensiedemodelle von Cooper [14] sowie von Stephan und Abdelsalam [117] am besten mit den experimentellen Werten übereinstimmen. Das Blasensiedemodell von Stephan und Abdelsalam [117], dessen Anwendungsbereich auf Kältemittel beschränkt ist, bringt erstaunlicherweise die schlechtesten Ergebnisse.



Abbildung 89: Masseverlust – Untersuchung verschiedener Blasensiedemodelle



Abbildung 90: Massenverlust Nachansicht – Untersuchung verschiedener Blasensiedemodelle

Im Nachfolgenden wird die Berechnung des inneren Wärmeübergangskoeffizienten ($\alpha_{i,fl}$) auf ihre Richtigkeit überprüft. Dieser Übergangskoeffizient hat maßgeblichen Einfluss auf den Wärmeübergang von der Wand auf die Flüssigkeit und damit auf die Verdampfung.

Der Wärmeübergang von der Umgebung auf die Behälteraußenwand im Bereich der Flüssigphase erfolgt überwiegend durch Konvektion.

$$\dot{q_a} = \alpha_a \big(T_u - T_{wa,fl} \big)$$

Die Umgebungstemperatur verändert sich während der Versuchsdauer nicht und kann daher als konstant angenommen werden.

$$T_u = konst.$$

Die Außenwandtemperatur des Druckgasbehälters im Bereich der Flüssigphase $(T_{wa,fl})$ verändert sich hingegen schon. Die berechnete Außenwandtemperatur für die verschiedenen Blasensiedemodelle wird in Abbildung 91 dargestellt.



Abbildung 91: Außenwandtemperatur des Druckgasbehälters (Blasensiedemodelle)

Die Abbildung verdeutlicht, dass zwischen der niedrigsten und der höchsten berechneten Außenwandtemperatur ein Temperaturunterschied von ca. 4 °C besteht. Eine Abkühlung der Außenwand führt ebenfalls zu einer Abkühlung der Innenwandtemperatur.

$$T_{wa,fl} \downarrow \Rightarrow T_{wi,fl} \downarrow$$

Der Wärmebergang von der Behälterinnenwand auf die Flüssigkeit erfolgt ausschließlich durch Konvektion.

$$\dot{q}_{i,fl} = -\alpha_{i,fl} (T_{wi,fl} - T_{fl}) = \alpha_{i,fl} (T_{fl} - T_{wi,fl})$$

Die Berechnung der Temperatur der Flüssigphase (T_{fl}) in Abbildung 92 zeigt im Vergleich aller Modelle nur vernachlässigbar kleine Abweichungen voneinander. Diese haben keinen merklichen Einfluss auf die unterschiedlichen Massenstromverluste.



Abbildung 92: Temperatur der Flüssigphase (Blasensiedemodelle)

Eine abnehmende Temperatur der Behälterinnenwand führt gemäß der zuvor aufgeführten Formel zu einer Vergrößerung der Wärmestromdichte.

$$T_{wi,fl} \downarrow \Rightarrow \dot{q}_{i,fl} \uparrow$$

Mit steigender Wärmestromdichte steigt auch der Wärmeübergangskoeffizient von der Behälterinnenwand auf die Flüssigkeit ($\alpha_{i,fl}$).

$$\alpha_{i,fl} = \frac{\dot{q}_{i,fl}}{(T_{fl} - T_{wi,fl})} \qquad \dot{q}_{i,fl} \uparrow \Rightarrow \alpha_{i,fl} \uparrow$$

Die nachfolgende Abbildung 93 zeigt den berechneten Verlauf des inneren Wärmeübergangskoeffizienten. Es ist deutlich zu erkennen, dass in dem Zeitbereich in dem Blasensieden eine dominierende Rolle spielt (0 bis 120 Sekunden), der höchste Wärmeübergangskoeffizient berechnet wurde. Zwischen dem kleinsten Maximum und dem größten Maximum ist einen Unterschied von 2700 $\frac{W}{m^2 K}$ zu verzeichnen. Nach den ersten Minuten stellt sich ein konstanter Wärmeübergangskoeffizient ein.



Abbildung 93: Verlauf des Wärmeübergangskoeffizienten $\alpha_{i,fl}$ (Blasensiedemodelle)

Die Ergebnisse der in den Abbildungen 91 und 93 dargestellten Berechnungen bestätigen die zuvor getroffenen Aussagen. $T_{wa,fl}$ ist umgekehrt proportional zu $\alpha_{i,fl}$.

Ein größerer Wärmeübergangskoeffizient führt zu einem größeren Wärmestrom der von der Wand auf die Flüssigphase übertragen wird. Dies wiederrum führt zu einer stärkeren Verdampfung der Flüssigkeit und damit zu einem größeren absoluten Massenverlust. Die Abbildungen 89 und 90 verdeutlichen diesen Zustand.

 $\alpha_{i,fl} \uparrow \Rightarrow \dot{q}_{i,fl} \uparrow \Rightarrow Masseverlust \uparrow$

5.2. Ausbreitungsversuche

In diesem Unterkapitel werden die experimentellen Ergebnisse der Ausbreitungsversuche mit Berechnungen verglichen. Als Vergleichsmodelle wurden die VDI 3783, Blatt 2, das Breitenmodell von Britter, Austal 2000 sowie auf CFX verwendet.

5.2.1. VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2

In diesem Kapitel werden die in Kap. 3.4.2.1.1. dargestellten experimentellen Ergebnisse zur Länge der Schwergaswolke mit Berechnungen nach der VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2 (Kap. 4.2.1.) miteinander verglichen. Ziel dieser Untersuchungen ist eine Überprüfung und Bewertung der Funktionsweise der VDI 3783, Blatt 2. Im ersten Teil werden die experimentellen Ergebnisse mit dem Standardberechnungsverfahren (Kap. 4.2.1.1) der

Richtlinie verglichen. In einem zweiten Teil erfolgt der Vergleich mit der modifizierten Richtlinie (Kap. 4.2.1.2).

5.2.1.1. Länge des Schwergasbereichs

Insgesamt wurden drei Berechnungen zur Länge der Schwergaswolke vorgenommen und mit experimentellen Ergebnissen verglichen. Hiervon wird eine exemplarisch in diesem Kapitel aufgeführt und erläutert. Die verbleibenden zwei Berechnungen können dem Anhang 8 entnommen werden.

Die Berechnung basiert hierbei auf der Standardbestimmung der Länge der Schwergaswolke nach der VDI 3783, Blatt 2 (Kap. 4.2.1.1). Zur Berechnung der Länge der Schwergaswolke wurde das kommerzielle Programm ProNuSs [90] verwendet, welches die VDI Richtlinie 3783 beinhaltet. In ProNuSs kann bei Bekanntheit der Wetterbedingungen (Temperaturschichtung, Windgeschwindigkeit, usw.) eine Ausbreitungsberechnung mit einer speziellen Wetterlage durchgeführt werden [89]. In den nachfolgenden Berechnungen wird jeweils die den Experimenten entsprechende spezielle Wetterlage verwendet und mit den experimentellen Ergebnissen verglichen. Die in Abb. 94 dargestellte Geschwindigkeit entspricht der Windgeschwindigkeit in einer Höhe von 10m. Die lokale Windgeschwindigkeit v_z , welche im Kapitel 3.4.2. dargestellt ist, wurde mittels der Umrechnungsformel (63) aus Kapitel 4.2.1.2 auf eine Windgeschwindigkeit in einer Höhe von 10 m $(v_{10m,VDI})$ umgerechnet.



Abbildung 94: Länge der Schwergaswolke – VDI 3783, Blatt 2

Abbildung 94 beschreibt hierbei den maximalen Konzentrationsverlauf über die Entfernung zur Quelle in Windrichtung. Die durchgezogene Linie beschreibt den experimentell gemessenen Verlauf, die gestrichelte Linie die Berechnung nach der VDI 3783, Blatt 2. Die gelb markierten Marker beschreiben jeweils das Erreichen der 1 Vol.-% Grenze und damit das Ende des Schwergasbereichs.

Es ist festzustellen, dass die Berechnung der VDI 3783, Blatt 2 den Nahbereich der Schwergaswolke ($x \le 3$ m) in keinster Weise konservativ abbildet, sondern den experimentell gemessenen Verlauf unterschätzt. Der Fernbereich der Schwergaswolke (x > 3 m) hingegen wird von der VDI 3783, Blatt 2 sehr konservativ abgebildet. Die nachfolgend dargestellte Tabelle 28 soll hierbei verdeutlichen, in welchem Maße die VDI 3783, Blatt 2 die Länge der Schwergaswolke für die drei durchgeführten Versuche überschätzt.

	Länge der Schw	Überschätzung	
Massenstrom [g/s]	Experiment VDI 3783, Blatt 2		VDI 3783, Blatt 2 [%]
12,4	5,6	12,2	117,86
24,9	6,9	16,1	133,33
36,6	8,2	18,8	129,27

Tabelle 28: Länge des Schwergasbereichs – Vergleich VDI 3783, Blatt 2 mit Experiment

Die Tabelle 28 verdeutlicht, dass die Berechnungen der VDI 3783, Blatt 2 zur Länge der Schwergaswolke den realen Verlauf bis zu 133 % überschätzen. Die VDI 3783, Blatt 2 stellt somit, bezogen auf die Länge des Schwergasbereichs, eine sehr konservative Abschätzungsmethode dar.

Die Unterschätzung des Nahbereichs der Schwergaswolke durch die VDI 3783, Blatt 2 lässt sich relativieren, wenn der Anwendungsbereich der Richtlinie berücksichtigt wird. Die VDI 3783 ist eine Berechnungsmethode zur Abschätzung der Ausbreitung bei störfallbedingter Freisetzung. Für diese Abschätzung ist der Nahbereich weniger von Interesse, wo hingegen die Länge der Schwergaswolke von enormem Interesse ist. Die Zielstellung der VDI 3783, Blatt 2 ist nach Schalau et al. [101] die Generierung konservativer Abschätzungen.

Die zuvor getroffenen Schlussfolgerungen spiegeln sich in ähnlicher Art und Weise auch in den zwei weiteren Berechnungsvergleichen in Anhang 8 wieder.

5.2.1.2. Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die Länge des Schwergasbereichs

In diesem Kapitel wird der Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die Länge der Schwergaswolke nach der modifizierten VDI 3783, Blatt 2 (Kap. 4.2.1.2.) untersucht. Die im Rahmen der Berechnungen verwendeten Windgeschwindigkeiten stammen aus verschiedenen Windquellen, die während der experimentellen Untersuchungen zur Verfügung standen. Diese Windquellen sind in der nachfolgenden Tabelle 29 dargestellt.

Quelle	Geschwindigkeit [m/s]	Definition
Lokale Messung	V _{10m. VDI}	Luftgeschwindigkeit in 10m Höhe nach VDI während des
		Auswertezeitraumszeitraums
Lokale Messung	V _{10m, VDI} (10min)	Luftgeschwindigkeit in 10m Höhe nach VDI (10 Minuten mittel)
Wetterstation DWD	V _{10m, DWD} (10min)	Luftgeschwindigkeit in 10m Höhe nach DWD (10 Minuten mittel)

Tabelle 29: Windgeschwindigkeiten aus verschiedenen Bezugsquellen

Der Einfluss der verschiedenen Windquellen auf die Breite der Schwergaswolke ist in der Abbildung 95 dargestellt. Alle drei angegebenen Winddaten stammen aus dem jeweiligen Versuchszeitraum. Während der Wetterdienst hierbei die Winddaten nur in einem 10 Minuten Mittelwert zur Verfügung gestellt hat, konnten die eigenen Messungen, mit dem in Kapitel 3.1.3.1 beschriebenen Ultraschallanemometer (USA). den Mittelwert der Windgeschwindigkeit über den Versuchszeitraum direkt abbilden. Die Hochrechnung der Windgeschwindigkeit auf eine Höhe von 10 m erfolgte hierbei für die USA-Daten von der lokalen Geschwindigkeit am Ausbreitungsort. Die Winddaten des Deutschen Wetterdienstes (DWD) wurden von einer etwa 500 m entfernten Wetterstation geliefert. Die Berechnung der Länge der Schwergaswolke (c > 1 Vol. -%) erfolgte nach der modifizierten VDI 3783, Blatt 2 aus Kapitel 4.2.1.2.



Abbildung 95: Länge der Schwergaswolke – Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die VDI 3783, Blatt 2

Abbildung 95 verdeutlicht, dass die Berechnung der modifizierten VDI 3783, Blatt 2 zu einer verschlechterten Abbildung des Nahbereichs der Schwergaswolke führt. Lag die Unterschätzung des Nahbereichs ohne Windeinfluss noch innerhalb der ersten 3 m, so sind es mit Berücksichtigung des Windeinflusses bereits 6 m. Der Fernbereich der Schwergaswolke wird im Gegenzug besser abgebildet. Lag die Länge der Schwergaswolke bei der Berechnung ohne Wind noch bei 16,1 m (im Vergleich zum Experiment bei 6,9 m) so ist diese, durch die Berücksichtigung der Windgeschwindigkeit, nur noch ca. 9,2 m lang und bildet die reale Länge der Schwergaswolke damit entsprechend besser ab. Der Einfluss der verschiedenen Windgeschwindigkeiten auf die Länge des Schwergasbereichs sowie die Abweichungen der Berechnungen der modifizierten VDI 3783, Blatt 2 von den experimentellen Ergebnissen sind in der nachfolgenden Tabelle 30 dargestellt.

Tabelle 30: Länge des Schwergasbereichs – Vergleich VDI 3783, Blatt 2 (modifiziert) mit Experiment

		v	VDI 3783, Blatt 2 (modifiziert)			
Massenstrom [g/s]	Experiment	v10m, VDI v10m, VDI (10min) v10m, DWD (10min)			VDI 3783, Blatt 2 [%]	
12,4	5,6	7,04	7,06	6,91	26,13	
24,9	6,9	9,15	9,15	9,18	33,09	
36,6	8,2	10,57	10,57	10,64	29,71	

Die Tabelle 30 verdeutlicht, dass die Berechnungen der modifizierten VDI 3783, Blatt 2 zur Länge der Schwergaswolke den realen Verlauf mit bis zu 33 % überschätzen. Im Vergleich zu der Überschätzung der Länge der Schwergaswolke aus Kapitel 5.2.1.1. von bis zu 133 %, stellt die modifizierte VDI 3783, Blatt 2 eine bessere und insgesamt eine moderatere konservative Abschätzung dar. Darüber hinaus ist zu erkennen, dass die Windgeschwindigkeit an sich im Rahmen der Berechnung der modifizierten VDI 3783, Blatt 2 nur geringen Einfluss auf die Länge der Schwergaswolke hat.

Die zuvor getroffenen Schlussfolgerungen spiegeln sich in ähnlicher Art und Weise auch in den zwei weiteren Berechnungsvergleichen in Anhang 9 wieder.

5.2.2. VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2 gekoppelt mit Breitenmodell von Britter

In diesem Kapitel werden die in Kap. 3.4.2.1.2. dargestellten experimentellen Ergebnisse zur Breite der Schwergaswolke mit Berechnungen eines gekoppelten Modells der VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2 (Kap. 4.2.1.) und dem Breitenmodell von Britter (Kap. 4.2.2) miteinander verglichen. Ziel dieser Untersuchungen ist herauszufinden, ob das Breitenmodell eine geeignete Erweiterung für die VDI 3783, Blatt 2 sein kann. Die VDI-Richtlinie ermöglicht

bisher nur Angaben zur Länge der Schwergaswolke, nicht jedoch zur Breite und Höhe. Die Angabe der Breite soll mit einer Kopplung des Breitenmodells von Britter ergänzt werden.

5.2.2.1. Breite des Schwergasbereichs

Insgesamt wurden drei Berechnungen zur Breite der Schwergaswolke vorgenommen und mit experimentellen Ergebnissen verglichen. Hiervon wird eine exemplarisch in diesem Kapitel aufgeführt und erläutert. Die verbleibenden zwei Berechnungen können dem Anhang 10 entnommen werden.

Die Berechnung basiert hierbei auf der Standardbestimmung der Länge der Schwergaswolke (c > 1 Vol. -%) nach VDI 3783, Blatt 2, die als x(1 Vol. -%) in das Breitenmodell von Britter einfließt. In der VDI 3783, Blatt 2 werden schwere Gase nicht durch die Bewegung der Luft weiter getragen und verteilt, sondern besitzen als Schwergaswolke eine ausgeprägte Eigendynamik [125]. Die Windgeschwindigkeit findet ausschließlich Einfluss in die Berechnungen der Breite nach Britter. Die in Abb. 96 dargestellten Geschwindigkeiten entsprechen Windgeschwindigkeit in einer Höhe 10m. der von Die lokale Windgeschwindigkeit v_z , welche im Kapitel 3.4.2. dargestellt ist, wurde mittels der Umrechnungsformel (63) aus Kapitel 4.2.1.2 auf eine Windgeschwindigkeit in einer Höhe von 10 m ($v_{10m,VDI}$) umgerechnet.



Abbildung 96: Breite der Schwergaswolke – VDI 3783, Blatt 2 gekoppelt mit Breitenmodell nach Britter

Die Breite der Wolke y(1 Vol. -%) konnte nur etappenweise ermittelt werden. Zu jedem Messpunkt herrschten geringfügig unterschiedliche Umgebungsbedingungen. Wie die experimentellen Untersuchungen gezeigt haben, hat die Breite eine starke Abhängigkeit von der Windgeschwindigkeit. Eine langsame Windgeschwindigkeit ermöglicht die Ausbildung einer breiten Schwergaswolke, wo hingegen eine hohe Windgeschwindigkeit zu einer schmalen Schwergaswolke führt. Die maximale Breite der Schwergaswolke und damit das Worst-Case-Szenario bildet sich also bei der geringsten Windgeschwindigkeit aus. Diese ist in der Abbildung 96 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die gemessene Breite des Schwergasbereichs hierbei durch die Berechnung gut abgebildet werden kann. Die Berechnung ist hierbei nicht konservativ, sondern bildet den realen Verlauf der Breite adäquat ab. Insgesamt ist die Fläche der berechneten Schwergaswolke bei der Berechnung deutlich größer als die gemessene Fläche. Grund hierfür ist die Überschätzung der Länge der Schwergaswolke durch die VDI 3783, Blatt 2. Wie die Berechnungsvergleiche in Kapitel 5.2.1.1. zeigen, findet eine ein- bis zweifache Überschätzung der realen Länge des Schwergasbereichs statt, welche sich dementsprechend in der Breitenberechnung wiederspiegelt.

Zur Überprüfung der richtigen Funktionsweise des Modells wurde die experimentell gemessene Länge des Schwergasbereichs $x_{gemessen}$ anstatt der VDI-Berechnung in das Breitenmodell von Britter eingesetzt. Das neue Berechnungsergebnis ist in Abbildung 97 dargestellt.



Abbildung 97: Breite der Schwergaswolke – gemessene Länge des Schwergasbereichs mit Breitenmodell nach Britter
Hierbei lässt sich erkennen, dass die Berechnung die experimentellen Ergebnisse auch unter Berücksichtigung der Fehlergröße unterschätzt. Eine ähnliche Beobachtung hat Moody [78] gemacht. Im Rahmen seiner experimentellen Untersuchungen zur Breite der Schwergaswolke hat er festgestellt, dass die Berechnungen nach Britter die experimentellen Ergebnisse leicht unterschätzen. Grund für diese Unterschätzung sehen Stein und Humann [116] in der Bildung des Breitenmodells. Die Bildung der Berechnungsformeln basiert auf Experimenten im Labormaßstab, die den Einfluss realer Umgebungsbedingungen nicht ausreichend wiederspiegeln.

Der Einfluss der Windgeschwindigkeit verdeutlicht sich an der Berechnung der mittleren Windgeschwindigkeit. Diese wurde aus den für die Breite relevanten Versuchen gebildet. Es zeigt sich, dass diese mittlere Windgeschwindigkeit sowohl in Abbildung 96 als auch in Abbildung 97 zu einer deutlichen Unterschätzung der Breite der Wolke führt. Die Kenntnis der exakten Windgeschwindigkeit ist daher Grundvoraussetzung für eine korrekte Ermittlung der Breite der Schwergaswolke.

Britter und McQuaid [11] beschreiben in ihrer Veröffentlichung, dass ihre Ausbreitungsmodelle nicht den Anspruch einer besseren Genauigkeit als Faktor 2 haben. Darüber hinaus schreiben sie, dass die Berechnungen bessere Ergebnisse bei größeren Massenströmen liefern. Die im Rahmen dieser Messreihen verwendeten Massenströme von bis zu 35 g/s liegen eher am unteren Ende der Skala. Bei höheren Massenströmen, wie sie im Rahmen von Störfällen auftreten, kann daher mit einer besseren Übereinstimmung gerechnet werden.

Die zuvor getroffenen Schlussfolgerungen spiegeln sich in ähnlicher Art und Weise auch in den zwei weiteren Berechnungsvergleichen in Anhang 10 wieder.

5.2.2.2. Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die Breite des Schwergasbereichs

In diesem Kapitel wird der Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die Breite der Schwergaswolke untersucht. Der erste Teil der Untersuchungen widmet sich ausschließlich dem Einfluss der Windgeschwindigkeit auf das Breitenmodell von Britter. Der zweite Teil widmet sich gleichermaßen dem Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die modifizierte VDI 3783, Blatt 2 sowie dem Breitenmodell von Britter. Die angegebenen Windgeschwindigkeiten stammen hierbei aus unterschiedlichen Quellen.

5.2.2.2.1. Breitenmodell von Britter

Wie bereits im Kapitel 5.2.2.1. angedeutet, hat die Windgeschwindigkeit starke Auswirkungen auf die Breite der Schwergaswolke. Im Rahmen der durchgeführten Versuche standen dabei verschiedene Windquellen zur Verfügung. Diese Windquellen sind in Kapitel 5.2.1.2 in Tabelle 29 dargestellt.

Der Einfluss der verschiedenen Windquellen auf die Breite der Schwergaswolke ist in der Abbildung 98 dargestellt. Die Berechnung der Länge der Schwergaswolke (c > 1 Vol. -%) erfolgte nach dem Standardverfahren der VDI 3783, Blatt 2, die als x(1 Vol. -%) in das Breitenmodell von Britter einfließt.



Abbildung 98: Breite der Schwergaswolke – Einfluss der Windgeschwindigkeit auf das Breitenmodell von Britter

Abbildung 98 verdeutlicht eindrucksvoll, wie wichtig akkurate Winddaten für die Berechnung der Breite der Schwergaswolke sind. Die lokal während der Versuchsdauer aufgenommen Windgeschwindigkeit umrechnet auf eine Höhe von 10m liefert erwartungsgemäß das beste Ergebnis. $v_{10m,VDI}$ bildet die exakten Winddaten am Ausbreitungsort ab und erreicht dementsprechend das genauste Resultat. $v_{10m,VDI}(10 \text{ min})$ erreicht das zweitbeste Ergebnis. Grund für das schlechtere Ergebnis ist der längere Mittelungszeitraum. In den Mittelungszeitraum sind Windgeschwindigkeiten eingeflossen, die keinen Einfluss auf die Ausbreitung im Experiment hatten und somit das Ergebnis verfälschen. $v_{10m,DWD}(10 \text{ min})$ schlechteste Ergebnis. liefert das Grund hierfür ist neben dem verlängerten

Mittelungszeitraum die örtliche Anordnung der Messstation. Da die Windmessstation des DWD mehrere 100 m vom eigentlichen Ausbreitungsgeschehen entfernt war, stimmen die gemessenen Geschwindigkeiten nur noch entfernt mit der örtlichen Geschwindigkeit überein. Im Rahmen von Störfallauswirkungsbetrachtungen steht in den wenigsten Fällen eine lokale Messstation zur Verfügung. Zur Abschätzung der Ausbreitung wird dann auf Winddaten des DWD zurück gegriffen. Die VDI 3783, Blatt 1 empfiehlt explizit die Anfrage der Wetterdaten beim DWD [124]. Wie vorgehend erläutert sollte die Anwendung dieser Daten dann kritisch erfolgen.

Die zuvor getroffenen Schlussfolgerungen spiegeln sich in ähnlicher Art und Weise auch in den zwei weiteren Berechnungsvergleichen in Anhang 11 wieder.

5.2.2.2. VDI 3783, Blatt 2 (modifiziert) und Breitenmodell von Britter

Der in Kapitel 5.2.2.2.1. dargestellte Einfluss der Windgeschwindigkeit auf das Breitenmodell von Britter wird in diesem Kapitel erweitert. Während die Windgeschwindigkeit dort nur Einfluss auf das Breitenmodell hatte, so hat die Windgeschwindigkeit in diesem Kapitel auch Einfluss auf die Berechnung der Länge der Schwergaswolke. Die Längenberechnung unter Berücksichtigung der Windgeschwindigkeit wurde im Rahmen der modifizierten VDI-Richtlinie (siehe Kap. 4.2.1.2.) durchgeführt. In der modifizierten VDI-Richtlinie verändert sich die Länge des Schwergasbereichs mit sich ändernder Windgeschwindigkeit. Zum Vergleich des Einflusses der Windgeschwindigkeit auf die Breite der Schwergaswolke werden hierzu die in Kapitel 5.2.1.2. dargestellten Windquellen verwendet. Der Einfluss der verschiedenen Windquellen auf die Breite der Schwergaswolke ist in der Abbildung 99 Winddaten dargestellt. Alle drei angegebenen stammen aus dem jeweiligen Versuchszeitraum.



Abbildung 99: Breite der Schwergaswolke – Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die VDI 3783, Blatt 2 (modifiziert) und Breitenmodell von Britter

Abbildung 99 verdeutlicht im Wesentlichen die im Kap. 5.2.2.2.1. getroffenen Aussagen. Somit liefert die lokal gemessene Windgeschwindigkeit hochgerechnet auf eine Höhe von 10 das beste Resultat. Die Windgeschwindigkeit der DWD-Messstation m $v_{10m,VDI}$ $v_{10m DWD}(10 min)$ liefert aufgrund des zu langen Mittelungszeitraums und der örtlichen Entfernung zum Ausbreitungsort das schlechteste Ergebnis. Die mit der modifizierten VDI-Richtlinie neu berechnete Länge der Schwergaswolke beschreibt mit etwa 30 % Überschätzung der realen Länge der Schwergaswolke die Breite und insbesondere die Fläche der Schwergaswolke genauer. Bei der Verwendung der lokalen Geschwindigkeit $v_{10m,VDI}$ kann die reale Breite der Schwergaswolke unter Berücksichtigung der Fehlergröße gut abgebildet werden. Insgesamt macht sich aber auch hier der Einfluss der Windgeschwindigkeit deutlich bemerkbar.

Die zuvor getroffenen Schlussfolgerungen spiegeln sich in ähnlicher Art und Weise auch in den zwei weiteren Berechnungsvergleichen in Anhang 12 wieder.

5.2.3. Austal 2000

In diesem Kapitel werden die in Kap. 3.4.2.2. dargestellten Ergebnisse zur Länge des Schwerund Neutralgasbereichs mit Berechnungen des Programms Austal 2000 (Kap. 4.2.3.) verglichen. Austal 2000 ist hierbei nur für die Berechnung des Neutralgasbereichs anwendbar. Ziel dieser Untersuchungen ist es herauszufinden, ob das Programm Austal 2000 akkuratere Ergebnisse liefert als die VDI 3783, Blatt 1. Die VDI 3783, Blatt 1 basiert auf einem Gaußmodell und das Programm Austal 2000 auf einem Lagrangeschen Partikelmodell. Darüber hinaus werden der Einfluss der Bodenrauigkeit sowie der Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die Länge des Neutralgasbereichs untersucht.

5.2.3.1. Länge des Neutralgasbereichs

Insgesamt wurden drei Berechnungen zur Länge des Neutralgasbereichs vorgenommen und mit experimentellen Ergebnissen verglichen. Hiervon wird eine exemplarisch in diesem Kapitel aufgeführt und erläutert. Die verbleibenden zwei Berechnungen können dem Anhang 13 entnommen werden.

Sämtliche Berechnungen wurden hierbei mit Austal 2000 [121] vorgenommen, welches in das kommerzielle Programm ProNuSs [90] integriert wurde. Startpunkt der Austal-Berechnungen stellte hierbei jeweils eine Flächenquelle nach dem Ende des Schwergasbereichs (c = 1 Vol. -%) dar. Die im Rahmen der Berechnungen verwendete Größe (Höhe und Breite) der Flächenquelle wurde messtechnisch bestimmt. Alternativ hätte diese aber auch mit dem im Kap. 4.2.2. dargestellten Berechnungsverfahren zur Breite der Schwergaswolke sowie mit der Abschätzungsformel zur Höhe der Schwergaswolke aus Kap. 5.2.5.1 abgeschätzt werden können. Der Verlauf des Schwer- und Neutralgasbereichs sowie die Flächenquelle sind in der nachfolgenden Abbildung 100 dargestellt.



Abbildung 100: Konzentrationsverlauf Schwer- und Neutralgas – Ansatzpunkt für Austal 2000

Abbildung 100 beschreibt den experimentell gemessenen Konzentrationsverlauf der Schwerund Neutralgaswolke in Windrichtung zur Freisetzungsquelle. Die jeweilige Länge des Schwergasbereichs und damit der Startpunkt der Neutralgasausbreitung sowie die Höhe (z_{Wolke}) und Breite (y_{Wolke}) der Flächenquelle bei einer Konzentration von 1 Vol.-% für alle drei Versuche sind in der nachfolgenden Tabelle 31 dargestellt.

Windgeschwin-	Massenstrom	Länge der Schwer-	Breite der Schwer-	Höhe der Schwer-		
digkeit [m/s]	[g/s]	gaswolke [m]	gaswolke [m]	gaswolke [cm]		
2,26	48,4	7,2	11,90	9,91		
2,68	47,9	7,5	11,83	9,21		
3,37	48,8	7,7	11,97	9,94		

 Tabelle 31: Startpunkt der Neutralgasausbreitung und Quellgeometrie

Die in der Tabelle 31 angegebene Geschwindigkeit entspricht hierbei der Windgeschwindigkeit in einer Höhe von 10m. Diese wurde aus den im Kap. 3.4.2.2. dargestellten lokal gemessenen Geschwindigkeiten mit Hilfe der Umrechnungsformel der VDI 3783, Blatt 1 [124] gebildet.

Der Vergleich der Austal 2000 Berechnungen mit den experimentellen Ergebnissen ist in Abbildung 101 dargestellt. Die in blau dargestellten Punkte beschreiben die experimentellen Ergebnisse, die zu den blauen Punkten hinzugefügten schwarzen Balken die Messungenauigkeit der jeweiligen Sensoren. Die gestrichelte Linie stellt die Berechnungen nach Austal 2000 dar. Der gelb dargestellte Messpunkt beschreibt die 1 Vol.-% Grenze und damit den Beginn der Neutralgasausbreitung.



Abbildung 101: Konzentrationsverlauf Neutralgas – Austal 2000

Die Berechnungen mit Austal 2000 stimmen mit dem experimentellen Verlauf gut überein. Die Ergebnisse für den Neutralgasbereich sind hierbei nicht konservativ, sondern bilden den gemessenen Konzentrationsverlauf unter Berücksichtigung der Messungenauigkeit akkurat ab. Der Abfall des Konzentrationsverlaufs der Berechnung stimmt mit dem experimentellen Konzentrationsabfall über den Abstand zur Quelle überein. Insgesamt zeigen alle drei durchgeführten Berechnungen eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen, so dass Austal 2000 als Erweiterung der VDI 3783 zu empfehlen ist. Die weiteren zwei Berechnungsergebnisse sind in Anhang13 dargestellt.

5.2.3.2. Einfluss der Bodenrauigkeit auf die Länge des Neutralgasbereichs

In Rahmen der Berechnungen wurde festgestellt, dass die Variation der Bodenrauigkeit starken Einfluss auf die Berechnung des Konzentrationsverlaufs hat. Die im Rahmen der durchgeführten Ausbreitungsversuche vorliegende Ausbreitungsfläche war sehr flach und wenig rau, so dass für alle Berechnungen eine Oberflächenrauigkeit von 0,02 m angenommen wurde. Der Einfluss der Bodenrauigkeit soll in der nachfolgenden Abbildung 102 verdeutlicht werden.



Abbildung 102: Konzentrationsverlauf Neutralgas: Einfluss der Bodenrauigkeit auf Austal 2000

Abbildung 102 zeigt, dass eine Variation der Rauigkeit von 0,01 m bis 0,05 m zu einer Veränderung der Konzentration von bis zu 1300 ppm führen kann. Diese Konzentrationsveränderung ist bei der Betrachtung der Ausbreitung toxischer Gase nicht vernachlässigbar und führt zu einer deutlichen Unterschätzung der von einer Person aufgenommenen Dosis. Die Auswahl der richtigen Rauigkeit spielt daher bei der Anwendung von Austal 2000 eine wichtige Rolle.

5.2.3.3. Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die Länge des Neutralgasbereichs

Neben der Oberflächenrauigkeit spielt die Windgeschwindigkeit eine wichtige Rolle bei der Bestimmung des Konzentrationsverlaufs. Um den Einfluss der Windgeschwindigkeit zu verdeutlichen, wurden verschiedene Berechnungen mit den jeweils während der Messung zur Verfügung stehenden Windquellen durchgeführt. Der Ursprung der jeweiligen Quellen kann der Tabelle 29 aus Kapitel 5.2.1.2. entnommen werden. Die Berechnungen sind in Abbildung 103 dargestellt.



Abbildung 103: Konzentrationsverlauf Neutralgas: Einfluss der Windgeschwindigkeit auf Austal 2000

Alle drei angegebenen Windquellen stammen aus dem jeweiligen Versuchszeitraum. Es ist deutlich zu erkennen, dass die lokal gemessene Windgeschwindigkeit $v_{10m,VDI}$ die beste Übereinstimmung liefert. Die DWD-Windgeschwindigkeit $v_{10m,DWD}$ (10min) liefert das schlechteste Ergebnis. Grund hierfür sind einerseits die weite räumliche Entfernung (> 500 m) der Wetterstation vom Ausbreitungsgelände und andererseits der größere Mittlungszeitraum für die Windgeschwindigkeit. Es zeigt sich damit deutlich, dass eine akkurate Windquelle sehr wichtig für genaue Berechnungen mit Austal 2000 ist. Die Windgeschwindigkeit muss hierbei so quellnah wie möglich erfasst und möglichst genau über den Freisetzungszeitraum gemittelt werden. Größere Mittlungszeiträume führen zu einer Verfälschung des Ergebnisses.

5.2.4. ANSYS CFX

In diesem Kapitel wird exemplarisch der in Kapitel 3.4.2.2. dargestellte Versuch mit einer Windgeschwindigkeit von 1,25 m/s sowie einem Massenstrom von 47,9 g/s mit Berechnungen des kommerziellen CFD-Programms ANSYS CFX (Kap. 4.2.4.) verglichen. Der Vergleich findet hierbei sowohl für den Schwer- als auch für den Neutralgasbereich statt. Ziel dieser Untersuchungen ist es herauszufinden, ob CFX bessere Ergebnisse liefert als die zuvor getesteten empirischen und halbempirischen Modelle oder das Lagrangesche Partikelmodell. Die CFX-Berechnungen im Rahmen dieser Arbeit wurden unterstützend von Habib [41] durchgeführt.

5.2.4.1. Länge der Schwergaswolke (Schwer- und Neutralgas)

Im Rahmen dieser Untersuchungen wurden insgesamt drei verschiedene CFX-Berechnungen zur Länge des Schwer- und Neutralgasbereichs durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Berechnungen sind in Abbildung 104 dargestellt. Es wurden zwei stationäre und eine instationäre Berechnung durchgeführt. Alle Berechnungen basieren auf einer mittleren Windgeschwindigkeit, einem mittleren Massenstrom, einer mittleren Umgebungstemperatur sowie einer mittleren Quellaustrittstemperatur des Schwergases. Im Vergleich zu den stationären Berechnungen, werden bei der instationären Berechnung die Windrichtungsänderungen während der Versuchsdauer berücksichtigt.



Abbildung 104: Konzentrationsverlauf Schwer- und Neutralgas – CFX

140

In der ersten Berechnung "CFX (stationär, standard $\overline{k}-\overline{\varepsilon}$)" wurde das in CFX in den Voreinstellungen vorhandene $\overline{k}-\overline{\varepsilon}$ -Modell verwendet. Wie der Abbildung 104 entnommen werden kann, findet mit dieser Einstellung eine deutliche Unterschätzung des Schwergasbereichs und eine deutliche Überschätzung des Neutralgasbereichs statt. Die zahlenmäßige Abweichung ist in Tabelle 32 dargestellt. Hierbei kann festgestellt werden, dass der Schwergasbereich im Mittel um 77 % unterschätzt und der Neutralgasbereich um 145 % überschätzt wird. Insgesamt lässt sich feststellen, dass weder der Schwergas- noch der Neutralgasbereich, auch unter Berücksichtigung des Messfehlers, zufriedenstellend abgebildet werden.

Tabelle 32: Länge des Schwergasbereichs – Vergleich CFX (stationär, standard \overline{k} - $\overline{\epsilon}$) mit Experiment

Bereich	x-Abstand	Experiment	stationär, standard \overline{k} - $\overline{\epsilon}$	Abweichung [%]]
Schwergas	1,5	210521	96839	-54	
Schwergas	3	119892	18392	-85	
Schwergas	4,5	69523	9468	-86	Mittlere Abw. [%]:
Schwergas	6	38948	6639	-83	-77
Neutraglas	9	3592	4786	33	
Neutraglas	11	2208	4464	102	
Neutraglas	13	1590	4230	166	Mittlere Abw. [%]:
Neutraglas	15	1049	3968	278	145

Um eine Verbesserung des CFX–Ergebnisses zu erhalten, wurden in der zweiten Berechnung "CFX (stationär, \overline{k} - $\overline{\epsilon}$ angepasst)" die Turbulenzparameter \overline{k} und $\overline{\epsilon}$ aus dem Geschwindigkeitsprofil der Ultraschallanemometeraufzeichnungen während des Experiments ermittelt und bei der Berechnung vorgegeben. Wie der Abbildung 104 sowie der Tabelle 33 zu entnehmen ist, führt dies allerdings nur zu einer geringen Verbesserung. Der Schwergasbereich wird im Mittel immer noch um 67 % unterschätzt und der Neutralgasbereich wird sogar noch um weitere 5 % überschätzt.

Tabelle 33: Länge des Schwergasbereichs – Vergleich CFX (stationär, \overline{k} - $\overline{\epsilon}$ angepasst) mit Experiment

Bereich	x-Abstand	Experiment	stationär, \overline{k} - $\overline{\epsilon}$ angepasst	Abweichung [%]	
Schwergas	1,5	210521	123289	-41	
Schwergas	3	119892	28862	-76	
Schwergas	4,5	69523	15178	-78	Mittlere Abw. [%]:
Schwergas	6	38948	10310	-74	-67
Neutraglas	9	3592	6233	74	
Neutraglas	11	2208	5043	128	
Neutraglas	13	1590	4158	162	Mittlere Abw. [%]:
Neutraglas	15	1049	3521	236	150

Der stationäre Ansatz ist nicht geeignet die experimentellen Ergebnisse realitätsnah abzubilden. Die empirischen und halbempirischen Modelle sowie das Lagrangesche Partikelmodell liefern bei gleichen Eingangsparametern insgesamt bessere Abschätzungen. Grund hierfür liegt sicherlich in der konservativen Auslegung dieser Modelle, um vorliegende Konzentrationen nicht zu unterschätzen. Um die experimentellen Ergebnisse so gut wie möglich abzubilden wurden in der dritten Messreihe "CFX (instationär, \bar{k} - $\bar{\epsilon}$ angepasst)" neben der Anpassung der Turbulenzparameter auch die Windrichtungsänderungen während der gesamten Versuchszeit berücksichtigt. Wie in der Abbildung 104 und der Tabelle 34 ersichtlich, führt die Berücksichtigung der Windrichtung zu einer akkuraten Abbildung des Schwergasbereichs. Mit einer Überschätzung von 41 % bildet die instationäre Berechnung den Schwergasbereich konservativ ab. Der Neutralgasbereich hingegen wird deutlich schlechter abgebildet. Mit einer mittleren Überschätzung von 756 % wird der Neutralgasbereich in keinster Weise realitätsnah wiedergegeben. Grund für diese Abweichungen kann durch das Windfeld während der Versuche verursacht worden sein. Die Erfassung der Windparameter erfolgte nahe der Quelle, also im Schwergasbereich. Es liegen keine Angaben zum Windfeld in Neutralgasgebiet vor, sondern es wurde angenommen, dass das Windfeld im Schwergasbereich auf den Neutralgasbereich übertragbar ist. Kleine Windrichtungsänderungen nach dem Ultraschallanemometer jedoch hätten große Auswirkungen auf die Gasausbreitung und könnten zu den geringeren experimentellen Konzentrationswerten im Neutralgasbereich geführt haben.

Bereich	x-Abstand	Experiment	instationär k-ē angepasst	Abweichung [%]]
Schwergas	1,5	210521	384998	83	
Schwergas	3	119892	162732	36	
Schwergas	4,5	69523	85850	23	Mittlere Abw. [%]:
Schwergas	6	38948	47186	21	41
Neutraglas	9	3592	23627	558	
Neutraglas	11	2208	18084	719	
Neutraglas	13	1590	13685	761	Mittlere Abw. [%]:
Neutraglas	15	1049	11391	986	756

Tabelle 34: Länge des Schwergasbereichs – Vergleich CFX (instationär, \overline{k} - $\overline{\epsilon}$ angepasst) mit Experiment

Die durchgeführten Berechnungen haben gezeigt, dass der Konzentrationsverlauf nur instationär akzeptabel abgebildet werden kann. Die Ermittlung der Breite und der Höhe erfolgte etappenweise. Bei jedem Teilversuch herrschten geringfügig unterschiedliche mittlere Windgeschwindigkeiten und ein unterschiedliches Windrichtungsfeld. Da für die instationäre

Berechnung ein einheitliches Windfeld benötigt wird, können zur Höhe und Breite keine Berechnungsvergleiche erstellt werden.

5.2.5. Abschätzungsformeln

In diesem Kapitel werden Abschätzungsformeln zur Höhe und Breite des Schwergasbereichs sowie zum Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des Schwergasbereichs gebildet. Um eine allgemeingültige Abschätzungsformel zu bestimmen, werden zunächst die in Kapitel 3.4.2 dargestellten experimentellen Ergebnisse mittels der charakteristischen Länge L_{cc} der VDI 3783, Blatt 2 [125] dimensionslos dargestellt.

5.2.5.1. Breite und Höhe des Schwergasbereichs und Kopplung Austal 2000

Die experimentellen Ergebnisse zur Breite der Schwergaswolke sind in Kapitel 3.4.2.1.2. beschrieben. Die zur dimensionslosen Darstellung der Breite benötigten charakteristischen Längen L_{cc} sind in der Tabelle 35 aufgeführt. Mit Hilfe dieser charakteristischen Größen werden die experimentellen Ergebnisse in der Abbildung 105 dimensionslos dargestellt. Es ist festzustellen, dass die dargestellten Werte unabhängig vom Massenstrom ein Maximum der Breite zwischen 54 · *Lcc* und 63 · *Lcc* liefern. Britter und McQuaid [11] haben im Rahmen ihrer experimentellen Untersuchungen festgestellt, dass sich bei einer Quellentfernung von $\frac{2}{3} \cdot x(1 \text{ Vol.} - \%)$ die maximale Breite der Schwergaswolke ausbildet. Diese Feststellung wird durch die experimentellen Ergebnisse dieser Arbeit annähernd bestätigt.

Messreihe	Mittlerer Massenstrom [g/s]	Charakteristische Länge Lcc [cm]
1	35	7,8
2	23	6,6
3	9	4,6

Tabelle 35: Charakteristische Länge der VDI 3783, Blatt 2 (Breite der Schwergaswolke)



Abbildung 105: Abschätzung zur maximalen Breite der Schwergaswolke

Wird davon ausgegangen, dass die maximale dimensionslose Breite einen allgemeingültigen Sachverhalt beschreibt, so lässt sich die größtmögliche Breite der Schwergaswolke (71) mit nachfolgender Formel abschätzen.

$$y(1 \, Vol. -\%) = 63 \cdot Lcc \tag{71}$$

Ein ähnlicher dimensionsanalytischer Zusammenhang bildet sich bei der Höhe der Schwergaswolke ab. Hierzu wurden die experimentellen Ergebnisse zur Höhe der Schwergaswolke aus Kapitel 3.4.2.1.3. mittels der charakteristischen Länge L_{cc} dimensionslos gemacht. Die charakteristischen Längen zur Höhe der Schwergaswolke sind in Tabelle 36 dargestellt und die dimensionslos dargestellten experimentellen Ergebnisse in Abbildung 106. Es ist festzustellen, dass die dargestellten Werte unabhängig vom Massenstrom einen annähernd gleichen Verlauf beschreiben. Die abgebildeten Schwankungen ergeben sich aus Windgeschwindigkeitsänderungen sowie einer leichten Schwankung des Massenstroms während der Versuchsdurchführung.

Tahalla 364	Charakteristische	I änge der	VDI 3783	Rlatt 2	Höho dor	Schwarge	wolko)
I abelle 30.		Lange uer	VDI 5765,	Diati 4		Schweiga	SWUINC)

Messreihe	Mittlerer Massenstrom [g/s]	Charakteristische Länge Lcc [cm]
1	50	9,0
2	28	7,2
3	18	5,9
4	10	4,9



Abbildung 106: Abschätzung zur maximalen Höhe der Schwergaswolke

Britter und McQuaid [11] haben festgestellt, dass sich die maximale Breite der Schwergaswolke bei $\frac{2}{3} \cdot x(1 \text{ Vol.} - \%)$ ausbildet. Bei einer Übertragung dieser Feststellung auf die Höhe der Schwergaswolke ergibt sich an dieser Stelle unabhängig vom Massenstrom ein Maximum der Höhe zwischen $0,3 \cdot Lcc$ und $0,41 \cdot Lcc$. Wird auch hierbei davon ausgegangen, dass die maximale dimensionslose Höhe am Punkt $\frac{2}{3} \cdot x(1 \text{ Vol.} - \%)$ einen allgemeingültigen Sachverhalt beschreibt, so lässt sich die größtmögliche Höhe der Schwergaswolke (72) mit nachfolgender Formel abschätzen.

$$z(1 \, Vol. -\%) = 0.41 \cdot Lcc \tag{72}$$

Zur Kopplung von Austal 2000 mit der VDI 3783, Blatt 2 wird eine Flächenquelle am Ende des Schwergasbereichs benötigt. Um den konservativen Anforderungen der VDI 3783 gerecht zu werden wird die in Abbildung 107 dargestellte Vorgehensweise zur Beschreibung der Flächenquelle empfohlen. Wie dieser Abbildung zu entnehmen ist, wird die maximale Fläche der Schwergaswolke am Ort $\frac{2}{3} \cdot x(1 \text{ Vol.} - \%)$ auf das Ende der Länge des Schwergasbereichs x(1 Vol. - %) projiziert. Die Kopplungsfläche (73) an diesem Punkt lässt sich wie folgt beschreiben.

$$A_{Kopplung} = 2 \cdot y(1 \, Vol. -\%) \cdot z(1 \, Vol. -\%)$$
(73)

Die Kopplungsfläche ist mit dieser Vorgehensweise im Sinne der Konservativität der VDI 3783 bewusst überdimensioniert.



Abbildung 107: Flächenquelle zur Kopplung von VDI 3783, Blatt 2 und Austal 2000

5.2.5.2. Einfluss der Quellhöhe auf den Schwergasbereich

Die experimentellen Ergebnisse zum Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des Schwergasbereichs sind im Kapitel 3.4.2.3. dargestellt. Die zur dimensionslosen Darstellung des Einflusses der Quellhöhe verwendeten charakteristischen Längen sind in Tabelle 37 aufgeführt. Abbildung 108 beschreibt die umgerechneten experimentellen Ergebnisse. Es ist festzustellen, dass sich die Länge der Schwergaswolke x(1Vol. -%) mit zunehmender Quellhöhe (z_q) verringert. Wird ein Bereich von $10 \cdot L_{cc}$ zugebilligt, in dem mit dem Auftreten von Schwergaskonzentrationen (c > 1 Vol. -%) jederzeit gerechnet werden muss, so ergibt sich eine kritische Quellhöhe $(z_{q,krit})$ die zwischen $14,5 \cdot L_{cc}$ und $16,5 \cdot L_{cc}$ liegt.

Tabelle 37: Charakteristische Länge der VDI 3783, Blatt 2 (Einfluss der Quellhöhe)

Messreihe	Mittlerer Massenstrom [g/s]	Charakteristische Länge Lcc [cm]
1	39	8,2
2	36	7,9
3	24	6,7
4	14	5,4



Abbildung 108: Abschätzung zur kritischen Quellhöhe

Wird davon ausgegangen, dass die dimensionslose kritische Quellhöhe einen allgemeingültigen Sachverhalt beschreibt, so lässt sich die kritische Quellhöhe (74) mit nachfolgender Formel abschätzen.

$$z_{q,krit} = 16,5 \cdot Lcc \tag{74}$$

Bei der Bestimmung der Ausbreitung eines toxischen Schwergases müssen die Blätter 1 und 2 der VDI 3783 miteinander gekoppelt werden, da sowohl eine Schwergas- als auch eine Neutralgasausbreitung betrachtet werden muss. Für Freisetzungshöhen über der kritischen Quellhöhe ist der Schwergaseffekt vernachlässigbar. Es bildet sich am Boden keine relevante Schwergaswolke mehr aus, so dass auf die Berechnung des Blattes 2 und die Kopplung verzichtet werden kann. Die Ergebnisse hierzu wurden ebenfalls in Schalau et al. veröffentlicht [101].

6. Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

Die Freisetzung von schweren Gasen kann im Rahmen eines Unfalls oder durch eine Freisetzung durch Unbefugte erfolgen. Zur Abschätzung der daraus resultierenden Gefahren müssen Auswirkungsbetrachtungen angestellt werden. Wesentliche Elemente dieser Auswirkungsbetrachtungen sind die Berechnung des freigesetzten Massenstroms sowie der Gasausbreitung. In der vorliegenden Arbeit wurden daher einerseits der Freisetzungsprozess von schweren Gasen aus handelsüblichen Druckgasflaschen und andererseits der Ausbreitungsprozess schwerer Gase untersucht. Auf die daraus resultierenden Ergebnisse und Schlussfolgerungen wird nachfolgend eingegangen.

Im Rahmen des Freisetzungsprozesses von schweren Gasen aus handelsüblichen Druckgasflaschen wurde ein mathematisches Modell zur Vorhersage des zeitabhängigen Massenstroms weiterentwickelt. Dieses Modell beinhaltet die Berechnung der instationären Wärmeleitung in der Flaschenwand, eine ausführliche Beschreibung der Energie- und Massenbilanzen sowie die eventuelle Berücksichtigung einer Zweiphasenströmung. In Anbetracht des Freisetzungsszenarios kann das Schwergas sowohl einphasig (gasförmig, flüssig) als auch zweiphasig freigesetzt werden. Zur Validierung des Berechnungsverfahrens wurden eine Vielzahl experimenteller Untersuchungen mit verschiedenen Gasen, Gasflaschengrößen und –typen durchgeführt.

Der Vergleich der experimentellen Ergebnisse mit den Berechnungen zeigt hierbei, dass eine einphasige Strömung mit hoher Genauigkeit vorhergesagt werden kann. Die Untersuchungen der Zweiphasenströmung zeigten, dass die Modellberechnungen um einen maximalen Fehler von \pm 13 % von den experimentell ermittelten Ergebnissen abweichen. Die Annahme einer reinen Gasströmung anstatt einer Zweiphasenströmung hätte zu einem Fehler von \pm 90 % geführt. Grundlage für die möglichst genaue Vorhersage des Massenstroms ist hierbei die Bekanntheit aller notwendigen Eingangsparameter.

Die bisherigen Versuche wurden ausschließlich mit dem Kältemittel R134a durchgeführt. Um die Übertragbarkeit des Berechnungsverfahrens auf andere Gase zu beweisen, wurde eine weitere Versuchsreihe mit CO₂ durchgeführt. Die Berechnungsergebnisse zeigten hierbei eine ebenso gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen.

Im Rahmen einer theoretischen Parameterstudie wurde der Einfluss verschiedener Einflussparamater auf den Massenstrom handelsüblicher Gasflaschen für den Stoff Chlor untersucht. Als zentrales Ergebnis ergab sich hierbei, dass der Massenaustrag bei konstantem Füllgrad und Flaschenvolumen mit zunehmendem Höhe/Innendurchmesser-Verhältnis steigt. Grund hierfür sind neben der Vergrößerung des Oberfläche-Volumen-Verhältnisses und der damit verbundenen größeren Wärmeübertragungsfläche die Verringerung der Phasengrenzfläche. Über diese kann je Zeiteinheit nur eine begrenzte Menge an Energie und Masse abgeführt werden. Eine Verringerung des Durchmessers führt somit zu einem stärkeren Ansteigen des Gemischpegels und damit zu einer verlängerten Zweiphasenströmung. In einer weiteren Untersuchung wurde der Einfluss der Flaschengröße bei konstantem Füllgrad untersucht. Es wurde festgestellt, dass Gasflaschen mit größeren Anfangsvolumen zu einem größeren Massenverlust führen. Grund hierfür sind eine höhere Anfangsmasse sowie ein größeres Höhe/Innendurchmesser –Verhältnis.

Der Einfluss des Blasensiedens spielt eine wichtige Rolle bei der Vorhersage des Massenstroms. Um diesen Einfluss akkurat abzubilden wurden verschiedene Blasensiedemodelle ausprobiert. Dabei zeigte sich, dass alle verwendeten Modelle recht gute Ergebnisse lieferten. Die Blasensiedemodelle von Cooper sowie Stephan und Abdelsalam lieferten die beste Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen.

Im Rahmen des Ausbreitungsprozesses von schweren Gasen wurde die VDI 3783 untersucht. Hierbei ging es einerseits um die Überprüfung der Genauigkeit dieser Richtlinie und andererseits um die Erweiterung. Die VDI 3783 macht derzeit ausschließlich Angaben zur Länge der Schwergaswolke, nicht jedoch zur Breite und Höhe. Neben Modellen zur Ergänzung der Breiten- und Höhenangabe wurde die Funktionsweise eines Lagrangeschen-Gaußmodells Partikelmodells anstelle des aktuellen für den Bereich der Neutralgasausbreitung getestet und bewertet. Die Ergebnisse sollen hierbei bei der Überarbeitung der VDI-Richtlinie helfen und werden im nachfolgenden aufgeführt.

In einem ersten Schritt wurde die VDI 3783, Blatt 2 untersucht. Das Blatt 2 beschreibt hierbei die Schwergasbereichs dient Länge des und als Kopplungspunkt für die Neutralgasausbreitung. Hierbei wurde neben dem Standardverfahren der VDI-Richtlinie auch eine von Schalau [100] vorgeschlagene modifizierte Version betrachtet. Als Ergebnis des Standardverfahrens wurde festgestellt, dass die VDI 3783, Blatt 2 die Länge der Schwergaswolke mit einer Überschätzung von bis zu 133 % sehr konservativ darstellt. Der Konzentrationsverlauf in Windrichtung wird leicht unterschätzt. Die modifizierte Version, welche den Einfluss der Windgeschwindigkeit berücksichtigt, liefert mit einer Überschätzung von maximal 33 % eine deutlich bessere Vorhersage der Länge der Schwergaswolke. Der Konzentrationsverlauf in Windrichtung verschlechtert sich hingegen aber deutlich.

Mit der Kopplung der VDI 3783, Blatt 2 mit einem Breitenmodell von Britter [10] wurde untersucht, ob somit die fehlende Breitenangabe ergänzt werden kann. Als Ergebnis ergab sich, dass das Breitenmodell stark windabhängig ist. Die Vorhersage einer akkuraten Breite ist somit nur unter der Voraussetzung der Bekanntheit genauer Winddaten am Ausbreitungsort möglich. Da diese Daten in den wenigsten Fällen zur Verfügung stehen, ist eine Anwendung des Breitenmodells kritisch zu sehen. Wenn akkurate Winddaten zur Verfügung stehen, bildet die Kopplung die Breite der Wolke realitätsnah ab.

Zur Kopplung eines Lagrangeschen-Partikelmodells (Austal 2000) mit der VDI 3783, Blatt 2 müssen Angaben zur Höhe und Breite der Schwergaswolke am Ende des Schwergasbereichs bekannt sein. Die dadurch beschriebene Flächenquelle stellt den Kopplungspunkt des Partikelmodells sowie den Startpunkt der Neutralgasausbreitung dar. Zur Überprüfung der Genauigkeit von Austal 2000 wurden Berechnungen zur Länge des Neutralgasbereichs durchgeführt und mit experimentellen Ergebnissen verglichen. Hierbei ergab sich, dass die Berechnungen mit dem experimentellen Verlauf gut übereinstimmten. Die Ergebnisse für den Neutralgasbereich sind hierbei nicht konservativ, sondern bilden den gemessenen Konzentrationsverlauf unter Berücksichtigung der Messungenauigkeit akkurat ab. Auf Grundlage dieser Ergebnisse ist Austal 2000 als Erweiterung der VDI 3783 zu empfehlen.

Zur Bestimmung der Höhe der Schwergaswolke konnte kein geeignetes Modell gefunden werden. Um dennoch eine Abschätzungsformel zur Höhe der Schwergaswolke zur Verfügung stellen, wurden mehrere Versuchsreihen mit unterschiedlichen Massenströmen zu durchgeführt. Mit der gebildeten Abschätzungsformel lassen sich Aussagen zur Höhe der Schwergaswolke auf Grundlage der charakterlichen Länge L_{cc} der VDI 3783, Blatt 2 [125] treffen. Die gleiche Betrachtungsweise wurde auf die experimentellen Ergebnisse der Breite übertragen. Die dargestellten dimensionsanalytischen Zusammenhänge der Breite und Höhe der Schwergaswolke ermöglichen eine Erweiterung der VDI 3783 um die fehlenden Angaben. Die vorgestellten experimentellen und theoretischen Untersuchungen stellen Vorschläge zur Erweiterung der VDI 3783 dar. In einem weiteren Schritt wurde die Länge der Schwergaswolke exemplarisch mit ANSYS CFX berechnet. Hierbei wurden stationäre und instationäre Simulationen durchgeführt. Im Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen stellte sich heraus, dass der stationäre Ansatz nicht geeignet ist. Die instationäre Simulation hingegen konnte den Schwergasbereich gut abbilden. Der Neutralgasbereich wurde mit einem Faktor 8 deutlich überschätzt und bildet den Konzentrationsverlauf in keinster Weise realitätsnah ab. Als Eingangsparameter für die stationären CFX-Berechnungen wurden die gleichen Werte, die auch in die empirischen und halbempirischen Modelle oder in das Lagrangesche Partikelmodell einfließen, verwendet. Bei den instationären Berechnungen wurde zusätzlich die Windrichtungsänderung über die Versuchsdauer berücksichtigt. Die Berechnungszeit für die instationäre Simulation mit 32 CPUs betrug in etwa 42 Std., was die Anwendung von CFD im Rahmen von zeitkritischen Auswirkungsbetrachtungen im Rahmen von Störfallen ausschließt. Um akkurate Ergebnisse mit CFD zu erzeugen muss das Windfeld während der Ausbreitung bekannt sein. In der Regel wird bei Auswirkungsbetrachtungen auf die Wetterdaten das DWD zurückgegriffen, welche jedoch die lokalen Ausbreitungsbedingungen nur eingeschränkt wiederspiegeln.

Im Rahmen der experimentellen Untersuchungen wurde ebenfalls der Einfluss der Quellhöhe auf die Länge der Schwergaswolke für verschiedene Freisetzungsmassenströme untersucht. Hierbei konnte festgestellt werden, dass der Schwergasbereich sich mit zunehmender Quellhöhe verringert und ab einer kritischen Quellhöhe kein Schwergasbereich am Boden mehr vorliegt. Beim Überschreiten der kritischen Quellhöhe ist der Schwergaseffekt somit vernachlässigbar und die Berechnung nach der VDI 3783, Blatt 2 kann entfallen.

Das im Rahmen dieser Arbeit weiterentwickelte Modell zur Bestimmung des Massenstroms aus handelsüblichen Gasflaschen stellt ein wichtiges Element für Auswirkungsbetrachtungen dar. Die Voraussetzung einer akkuraten Vorhersage der Gasausbreitung sowie der daraus resultierenden Schadstoffdosis, der ein Mensch im Schadensfall ausgesetzt wurde, setzt die Kenntnis des Massenstroms voraus. Diese Arbeit macht konkrete Vorschläge zur Erweiterung und Überarbeitung der VDI-Richtlinie 3783, welche zu einer verbesserten Berechnung der Gasausbreitung führen und wichtige Informationen für die quantitative Risikoanalyse liefern.

7. Ausblick auf zukünftige Untersuchungen

Das mathematische Modell zur Vorhersage des zeitabhängigen Massenstroms aus handelsüblichen Gasflaschen wurde mit experimentellen Untersuchungen der Gase R134a und CO₂ verifiziert. Im Rahmen dieser Untersuchungen fanden Berechnungsvergleiche mit der Freisetzung aus der Gasphase und der Flüssigphase statt. Hierbei setzten eine reine Gas-, Flüssigkeits- oder Zweiphasenströmung ein, die mit dem Modell gut abgebildet werden konnten. Um die Allgemeingültigkeit des Modells zu überprüfen, sollten weitere experimentelle Untersuchungen mit anderen Gasen durchgeführt werden. Darüber hinaus sollte geprüft werden, ob sich das mathematische Modell und insbesondere der Ansatz zur Zweiphasenströmung auf Behälter im industriellen Maßstab übertragen lässt. Hierzu müssten experimentelle Untersuchungen im mittel- oder großskaligen Maßstab mit Freisetzungen aus der Gas- und der Flüssigphase durchgeführt und mit den Berechnungen verglichen werden.

Voraussetzung für die Anwendung der VDI-Richtlinie 3783 sind kontinuierliche und impulsfreie Freisetzungen. Der im Rahmen der Ausbreitungsversuche zur Verfügung stehende Verdampfer konnte hierbei einen maximalen Gasstrom von 55 g/s zur Verfügung stellen. Hiermit konnte ein höchstmöglicher Schwergasbereich von 8 m hergestellt werden. Die VDI 3783 besteht aus zwei Blättern. Das Blatt 1 basiert auf einem Gaußmodell und beschreibt die Ausbreitung leichter und dichteneutraler Gase. Das Blatt 2 beschreibt die Schwergasausbreitung und basiert auf Windkanalexperimenten für 25 Ausbreitungsgebiete mit unterschiedlichen Strömungshindernissen. Bei der Berechnung der Ausbreitung eines toxischen Schwergases erfolgt eine gekoppelte Berechnung beider Modelle, bei der im Übergangsbereich eine Interpolation der Konzentrationen erfolgt. Aufgrund des zu geringen Quellstroms und der damit verbundenen Unterschreitung der Anwendungsgrenzen der VDI-Richtlinie konnten weder der Übergangs- noch der Neutralgasbereich experimentell bestimmt und mit den Berechnungen verglichen werden. Da die zur Beurteilung von Störfällen herangezogenen ERPG- oder AEGL-Werte teilweise im Interpolationsbereich liegen, sollte durch experimentelle Untersuchungen die Anwendbarkeit der bestehenden Modellierung überprüft werden. Voraussetzung für diese Untersuchungen ist hierbei die Bereitstellung größerer Freisetzungsmengen.

In weiteren Untersuchungen sollten die Ausbreitungsgebiete der VDI 3783, Blatt 2 untersucht werden, welche sich mit dem Einfluss von Hindernissen auf den Ausbreitungsprozess beschäftigen. Die im Windkanal ermittelten Konzentrationsprofile sollten mittels experimenteller Freilandversuche auf ihre Übertragbarkeit auf die Realität überprüft werden.

152

Auf der Grundlage der experimentellen Untersuchungen wurden Abschätzungsformeln zur Höhe und Breite des Schwergasbereichs sowie zur kritischen Quellhöhe beschrieben. Die Grundlage für diese Abschätzungsformeln sind durchgeführte experimentelle Untersuchungen mit einer maximalen Freisetzungsmenge von 50 g/s. Um die Abschätzungsformeln zu verifizieren, sollten weitere experimentelle Untersuchungen mit größeren Massenströmen durchgeführt werden.

8. Literaturverzeichnis

- 1. Acikalin H.A.: *Dynamische Simulation thermisch initiierter Domino-Effekte*. Technische Universität Berlin, Fakultät III Prozesswissenschaften, 2003
- 2. AD-A2: Sicherheitseinrichtungen gegen Drucküberschreitungen Sicherheitsventile AD-Merkblatt A2. Berlin: Beuth Verlag GmbH, 1993.
- 3. Beynon G.V.; Cowley L.T.; Small L.M.; Williams I.: Fire Engulfment of LPG Tanks: Heatup, a Predictive Model. *In: Journal of Hazardous Materials* 20 (1988) S. 227-238
- 4. Bezirksregierung Düsseldorf: *Informationen der Bezirksregierung Düsseldorf zum CO*₂-*Unfall in Mönchengladbach am 16. August 2008.* URL www.bezreg-duesseldorf.nrw.de /umweltschutz/immissionsschutz/pdf/Informationen_der_Bezirksregierung.pdf. -06.02.2011
- 5. Blackmore D.R.; Herman M.N.; Woodward J.L.: Heavy gas dispersion models. *In: Journal of Hazardous Materials* 6 (01/1982) S. 107-128
- Boccardi G.; Bubbico R.; Celata G.P.; Di Tosto F.: Geometry influence on safety valves sizing in two-phase flow. *In: Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 21 (01/2008) Nr. 1, S. 66-73
- 7. Bonnet P.; Bricout P.; Jamois D.; Meunier P.: *Description of experimental large scale two-phase release jets. FLIE project.* 02/2005.
- Brandes E.; Dietlen S.; Hieronymus H.; Krause U.; Plewinsky B.; Redeker T.; Schröder V.: Eigenschaften reaktionsfähiger Gase und Dämpfe von Flüssigkeiten (Kenngrößen). *Handbuch des Explosionsschutzes*. Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH, 04/2000. -ISBN 3527298487
- Brighton P.W.M.; Byrne A.J.; Cleaver R.P.; Courtiade P.; Crabol B.; Fitzpatrick R.D.; Girard A.; Jones S.J.; Lhomme V.; Mercer A.; Nedelka D.; Proux C.; Webber D.M.: Comparison of heavy gas dispersion models for instantaneous releases. *In: Journal of Hazardous Materials* 36 (01/1994) S. 193-208
- 10. Britter R.: The ground level extent of a negatively buoyant plume in a turbulent boundary layer. *In: Atmospheric Environment* 14 (05/1979) S. 779-785
- 11. Britter R.E.; McQuaid J.: *Workbook on the dispersion of dense gases.* Bootle: Eigenverlag Health & Safety Executive, 1988. ISBN 0-7176-0327-X
- 12. Bundesminsterium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit: *Vollzugshilfe zur Störfall-Verordnung vom März 2004*. URL www.bmu.de/files/pdfs/allgemein/application/pdf/vollzugshilfe_stoerfall_vo.pdf. 25.07.2012
- Carn K.K.: Estimates of the mean concentration and variance for the Thorney Island phase I dense gas dispersion experiments. *In: Journal of Hazardous Materials* 16 (04/1987) S. 75-101
- 14. Cooper M.G.: Saturation nucleate pool boiling a simple correlation. *IChemE Symposium No. 86.* 1984, S. 785-793
- 15. Cormier B.R.; Qi R.; Yun G.; Zhang Y.; Mannan M.S.: Application of computational fluid dynamics for LNG vapor dispersion modeling: A study of key parameters. *In: Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 22 (2009) S. 332–352
- 16. Dancer D.; Sallet D.W.: Pressure and temperature response of liquefied gases in containers and pressure vessels which are subjected to accidental heat input. *In: Journal of Hazardous Materials* 25 (1990) S. 3-18

- 17. Dandrieux A.; Dusserre G.; Ollivier J.: Small scale field experiments of chlorine dispersion. *In: Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 15 (2002) S. 5-10
- Delpha C.; Siadat M.; Lumbreras M.: An electronic nose for the identification of Forane R134a in an air conditioned atmosphere. *In: Sensors and Actuators B* 69 (02/2000) S. 243-247
- 19. Delpha C.; Siadat M.; Lumbreras M.: Humidity dependence of a TGS gas sensor array in an air-conditioned atmosphere. *In: Sensors and Actuators B* 59 (1999) S. 255-259
- Dharmavaram S.; Hanna S.R.; Hansen O.R.: Atmospheric dispersion modelling development of a CFD model for industrial sites and its evaluation with field data. Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries - 11th International Symposium. 2004, S. 3101-3108
- 21. Diener R.; Schmidt J.: Sizing of throttling devices for gas liquid two-phase flow, part 1: safety valves. *In: Process Safety Progress* 23 (2004) Nr. 4, S. 335-344
- 22. DIN EN 50104: Elektrische Geräte für die Detektion und Messung von Sauerstoff Anforderungen an das Betriebsverhalten und Prüfverfahren. 4. Auflage. Berlin: VDE-Verlag GmbH, 12/2010.
- 23. Dräger Safety AG & Co. KGaA: *DrägerSensor O2 6809720. Gebrauchsanweisung.* 07/2005.
- 24. Eidsvik K.J.: Heavy gas dispersion model with liquified release. *In: Atmospheric Environment Atmospheric Environment* 15 (1981) Nr. 7, S. 1163-1164
- Endregard M.; Reif B.A.P.; Vik T.; Busmundrud O.: Consequence assessment of indoor dispersion of sarin - A hypothetical scenario. *In: Journal of Hazardous Materials* (2010) Nr. 176, S. 381–388
- Ermak D.; Chan S.; Morgan D.; Morris L.: A comparison of dense gas dispersion model simulations with Burro Series LNG spill test results. *In: Journal of Hazardous Materials* 6 (01/1982) S. 129-160
- 27. EXAM BBG Prüf- und Zertifizier GmbH Prüflaboratorium für Grubenbewetterung: *Prüfbericht PFG-Nr. 41300504P.* 06/2005.
- 28. Figaro USA, Inc.: TGS 832 for the detection of chlorofluorocarbons (CFC's). Product information. 09/2002.
- 29. Fischer-Bruns I.: Untersuchungen zur Ausbreitung spontan freigesetzter schwerer Gase. Universität Hamburg, Fachbereich Geowissenschaften, 1987
- Friedel L.: Siede- und Entlöseverzug in Zweiphasensystemen bei der plötzlichen Entlastung von Druckbehältern. In: Chemie Ingenieur Technik 59 (1987) Nr. 4, S. 340-341
- 31. Friedel L.; Molter E.: Entlöseverzug in gesättigten Gas/Flüssigkeits-Systemen unterschiedlicher Viskosität bei plötzlicher Druckentlastung. *In: Chemie Ingenieur Technik* 58 (1986) Nr. 1, S. 40-43
- Friedel L.; Molter E.; Purps S.: Siedeverzug in Kältemitteln bei plötzlicher Druckentlastung aus dem Gleichgewichtszustand. *In: Chemie Ingenieur Technik* 57 (1985) Nr. 2, S. 154-155
- 33. Friedel L.; Molter E.; Purps S.: Untersuchung von Sicherheitseinrichtungen an Druckbehältern zur Druckentlastung bei Gas/Dampf-Flüssigkeitsreaktionen. BMFT Forschungsbericht 01VD0819. 12/1985.

- 34. Friedel L.; Purps S.: Druckentlastung von Gas/Dampf-Flüssigkeits-Systemen. *In: Chemie Ingenieur Technik* 54 (1982) Nr. 3, S. 256-257
- Friedel L.; Purps S.: Modelle und Berechnungsverfahren f
 ür die plötzliche Druckentlastung von Gas/Dampf-Flüssigkeits-Reaktionssystemen. *In: Chemie Ingenieur Technik* 56 (1984) Nr. 5, S. 361 – 369
- Gavelli F.; Bullister E.; Kytomaa H: Application of CFD (Fluent) to LNG spills into geometrically complex environments. *In: Journal of Hazardous Materials* 159 (02/2008) S. 158–168
- 37. Genske P.: Numerische Modellierung und Simulation des Wärmeübergangs beim Blasensieden. Universität Stuttgart, Fakultät Maschinenbau, 12/2006
- Gilham S.; Deaves D.M.; Woodburn P.: Mitigation of dense gas releases within buildings: validation of CFD modelling. *In: Journal of Hazardous Materials* 71 (2000) S. 193–218
- Gotaas Y.: Heavy gas dispersion and environmental conditions as revealed by the Thorney Island experiments. *In: Journal of Hazardous Materials* 11 (01/1985) S. 399-408
- 40. Griffiths R.F.; Fryer L.S.: A comparison between dense-gas and passive tracer dispersion estimates for near-source toxic effects of chlorine releases. *In: Journal of Hazardous Materials* 19 (05/1988) S. 169-181
- 41. Habib K. Mitarbeiter des Arbeitsgebiets "Explosionsschutz und Störfallsimulation" der BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung: *ANSYS CFX-Berechnungen*. 08/2012.
- 42. Hanna S.; Strimaitis D.; Chang J.: Evaluation of fourteen hazardous gas models with ammonia and hydrogen fluoride field data. *In: Journal of Hazardous Materials* 26 (06/1991) S. 127-158
- 43. Hardekopf F.; Mewes D.: Theoretische und experimentelle Untersuchungen zur Druckentlastung von chemischen Reaktoren. *In: Chemie Ingenieur Technik* 61 (1989) Nr. 10, S. 834-835
- 44. Hardekopf F.: Zweiphasenströmung infolge der Druckentlastung eines chemischen Reaktors. Universität Hannover, Fakultät für Maschinenwesen, 1988
- 45. Hartwig S.; Heudorfer W.; Kirsch J.; Schmidt G.; Schnatz G.: *Experimentelle und* theoretische Untersuchungen zur Ausbreitung schwerer Gase. BMFT Forschungsbericht RGB8011. 09/1986.
- 46. Hartwig S.: Improved understanding of heavy gas dispersion due to the analysis of the Thorney Island trails data. *In: Journal of Hazardous Materials* 11 (01/1985) S. 417-423
- 47. Hartwig S.; Klumpe G.: Ermittlung, Bewertung und Vorschläge zur Minderung der Risiken bei der Produktion, Lagerung, Transport und Verarbeitung schwerer Gase, insbesondere: Stoffzyklus Chlor. BMBF Forschungsbericht 13RG9005. 06/1996.
- 48. Hartwig S.: Schwere Gase bei Störfallfreisetzung. Grundlagen zur Strömungsmechanik bei Sicherheitsanalysen. Düsseldorf: VDI-Verlag GmbH, 1989. ISBN 3-18-400874-6
- Heinrich M.; Gerhold E.; Wietfeldt P.: Large scale propane release experiments over land at different atmospheric stability classes. *In: Journal of Hazardous Materials* 20 (08/1988) S. 287-301

- 50. Heinrich M.; Gerhold E.; Wietfeldt P.: *Praxisgerechte Bestimmung der* Zündentfernungen bei der Freisetzung schwerer Gase (LPG). BMFT Forschungsbericht 01RG8402. 1988.
- 51. Heinrich M.; Scherwinski R.: Feldversuche zur Ausbreitung von Propan als schweres Gas. *In: Promet* 29 (06/2003) Nr. 1-4, S. 112-116
- 52. Heinrich M.; Scherwinski R.: Propanfreisetzungen unter praxisnahen Bedingungen -Ermittlung von Gaskonzentrationen mit und ohne Hindernissen. BMFT Forschungsbericht 13RG8807. 03/1991.
- Hoff A.; Neumann J.; Deerberg G.; Steiff A.: Untersuchungen zur Druckentlastung siedend aufwallender, reaktiver und nichtreaktiver, viskoser Stoffsysteme. *In: Chemie Ingenieur Technik* 73 (05/2001) S. 542 – 546
- 54. Honeywell Refrigerants Europe: *R-134a*. URL www.klimavision.ch/pdf/kaeltemittel_ R134a.pdf. - 08.08.2011
- 55. ISO 4126-10: Safety devices for protection against excessive pressure Sizing of safety valves for gas/liquid two-phase flow. Berlin: Beuth Verlag GmbH, 10/2010.
- 56. Janicke L.; Janicke U.: Entwicklung eines modellgestützten Beurteilungssystems für den anlagenbezogenen Immissionsschutz. Abschlussbericht des UFO-Vorhabens 20043256. 02/2003.
- 57. Khan F. I.; Abbasi S.A.: Modelling and control of the dispersion of hazardous heavy gases. *In: Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 12 (1999) Nr. 3, S. 235–244
- 58. Kirtzel H.-J.: *Mitschrift Schulung METEK Meteorologische Messtechnik GmbH in Elmshorn*. 05/2010.
- 59. König G.: Windkanalmodellierung der Ausbreitung störfallartig freigesetzter Gase schwerer als Luft. Hamburger Geophysikalische Einzelschriften: Reihe A, Heft 85. 1987.
- 60. König-Langlo G.; Schatzmann M.: Ausbreitung von störfallbedingten Freisetzungen schwerer Gase. *In: Staub Reinhaltung der Luft* 49 (1989) S. 241-247
- Koopman R.; Cederwall R.; Ermak D.; Goldwire H.; Hogan W.; McClure J.; McRae T.; Morgan D.; Rodean H.; Shinn J.: Analyses of Burro Series 40-m³ LNG spill experiments. *In: Journal of Hazardous Materials* 6 (11/1982) S. 43-83
- 62. Koopman R.; Ermak D.: Lessons learned from LNG safety research. *In: Journal of Hazardous Materials* 140 (10/2007) S. 412–428
- 63. Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz Nordrhein-Westfalen: *Modellgrundlagen der TA Luft*. URL www.lanuv.nrw.de/luft/ausbreitung/taluft_ grundl.htm#1. - 19.07.2012
- 64. Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen: Leitfaden zur Erstellung von Immissionsprognosen mit AUSTAL2000 in Genehmigungsverfahren nach TA Luft und der Geruchsimmissions-Richtlinie. Merkblatt 56. 2006.
- 65. Leung J.C.; Nazario F.N.: Two-phase flashing flow methods and comparisons. *In: Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 3 (04/1990) Nr. 2, S. 253-260
- 66. Lohse V. Leiter des Arbeitsgebiets "Prüfung und Einsatzgrundsätze von Gaswarngeräten" der BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung: *Expertenschätzung*. 11/2010.
- 67. Luketa-Hanlin A.: A review of large-scale LNG spills: Experiments and modeling. *In: Journal of Hazardous Materials* A132 (01/2006) S. 119–140

- 68. Mannan S.: Lee's Loss Prevention in the Process Industries. Hazard identification, assessment and control 3rd edition. London: Butterworth Heinemann, 2005. ISBN 978-0750675550
- 69. Marinescu-Pasoi L.; Sturm B.: Messung der Ausbreitung einer Wasserstoff- und Propangaswolke in bebautem Gelände und "Gasspezifische Ausbreitungsversuche". Abschlussbericht zu den Aufträgen: BAM-Nr. 408289 und 412254. 11/1994.
- 70. Marotzke K.: *Physikalische Modellierung der Ausbreitung störfallartig freigesetzter schwerer Gase zur Abschätzung von Gefahrenbereichen im bebauten Gelände.* Universität Hamburg, Fachbereich Geowissenschaften, 1993
- 71. Maurus R.: *Bestimmung des Blasenverhaltens beim unterkühlten Strömungssieden mit der digitalen Bildfolgenanalyse*. Technische Universität München, Fakultät für Maschinenwesen, 03/2003
- 72. McQuaid J.; Roebuck B.: Large scale field trials on dense vapour dispersion. Final report EUR 10029 EN. 1985.
- 73. Meilhaus Electronic GmbH: *Der "Fahrtenschreiber" für Temperatur und relative Feuchte. ME-ZauberDisk.* URL www.meilhaus.de/fileadmin/upload/pdf/Datasheets_deutsch/mezauberdisk.pdf. 08.08.2011
- 74. Meroney R.N.: Validation of fluid modeling techniques for assessing hazards of dense gas cloud dispersion. *In: Journal of Hazardous Materials* 15 (01/1987) S. 377-417
- 75. METEK Meteorologische Messtechnik GmbH: USA-1 Ultraschall Anemometer. Benutzerhandbuch Version 4.42. 10/2008.
- 76. Ministerie van VROM: Methods for the calculation of physical effects -due to releases of hazardous materials (liquids and gases)- Yellow Book. 2005.
- Mohann M.; Panwar T.; Singh M.: Development of dense gas dispersion model for emergency preparedness. *In: Atmospheric Environment* 29 (05/1995) Nr. 16, S. 2075-2087
- 78. Moodie K.: The use of water spray barriers to disperse spills of heavy gasses. *In: Plant/Operations Progress* 4 (10/1985) Nr. 4, S. 234-241
- Nabert K.; Schön G.; Redeker T.: Sicherheitstechnische Kenngrößen brennbarer Gase und Stäube. Bände 1 und 2. Braunschweig: Deutscher Eichverlag, 2004. - ISBN 3-8064-9946-2
- 80. Newport Electronics GmbH: *Temperatur-Messtechnik*. URL www.technische-revue.eu/ uploads/tx_etim/page2_newport_02.pdf. - 11.08.2011
- 81. Nielsen D.S.: Validation of two-phase outflow model. *In: Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 4 (07/1991) S. 236-241
- 82. Nielsen M.; Heinrich M.; Scherwinski R.: Research on continuous and instantaneous gas clouds. Part 2. *In: Journal of Hazardous Materials* 26 (01/1991) S. 219-224
- 83. Nielsen M.; Ott S.: A collection of data from dense gas experiments. Roskilde: Eigenverlag Risø National Laboratory, 12/1995. - ISBN 87-550-2113-1
- Nielsen M.; Ott S.; Jørgensen H.; Bengtsson R.; Nyrén K.; Winter S.; Ride D.; Jones C.: Field experiments with dispersion of pressure liquefied ammonia. *In: Journal of Hazardous Materials* 56 (02/1997) S. 59-105
- 85. Patankar S.V.: Computation of conduction and duct flow heat transfer. A textbook featuring the computer programm CONDUCT. 01/1991.

- 86. Pereira J.C.F.; Chen X.-Q.: Numerical calculations of unsteady heavy gas dispersion. *In: Journal of Hazardous Materials* 46 (01/1996) S. 253-272
- 87. Poli M.: Untersuchungen zu Druckentlastungsvorgängen nicht-schäumender, schäumender sowie reaktiver dreiphasiger Systeme. Technische Universität Berlin, Fakultät III - Prozesswissenschaften, 2008
- Pontiggia M.; Derudi M.; Alba M.; Scaioni M.; Rota R.: Hazardous gas releases in urban areas: Assessment of consequences through CFD modelling. *In: Journal of Hazardous Materials* 176 (2010) S. 589-596
- 89. ProNuSs 7: *Programm zur numerischen Störfallsimulation. Bedienungsanleitung.* URL www.pronuss.de/binary/Bedienungsanleitung.pdf. 11.08.2012
- 90. ProNuSs 7: *Programm zur numerischen Störfallsimulation*. URL www.pronuss.de. 21.07.2012
- 91. Puttock J.S.; Blackmore D.R.; Colenbrander G.W.: Field experiments on dense gas dispersion. *In: Journal of Hazardous Materials* 6 (01/1982) S. 13-41
- 92. Puttock J.S.; Colenbrander G.W.: Thorney Island data and dispersion modelling. *In: Journal of Hazardous Materials* 11 (01/1985) S. 381-397
- 93. Raj P.K.: Exposure of a liquefied gas container to an external fire. *In: Journal of Hazardous Materials* A122 (2005) S. 37–49
- 94. Rottman J.W.; Hunt J.C.R.; Mercer A.: The initial and gravity-spreading phases of heavy gas dispersion: Comparison of models with phase I data. *In: Journal of Hazardous Materials* 11 (08/1985) S. 261-279
- 95. Sarry F.; Lumbreras M.: Discrimination of carbon dioxide and forane R134a using Figaro-type sensors TGS 832. *In: Sensors and Actuators B* 57 (01/1999) S. 142-146
- 96. Sarry F.; Lumbreras M.: Evaluation of a commercially available fluorocarbon gas sensor for monitoring air pollutants. *In: Sensors and Actuators B* 47 (12/1997) S. 113-117
- 97. Sartorius AG: *Betriebsanleitung*. *Sartorius Combics 3*. URL www.automatic-scale.de/ Download/Industrie/Anleitungen/MAN-Combics_3_Komplettwaagen-d.pdf. -11.05.2011
- 98. Scargiali F.; Grisafi F.; Busciglio A.; Brucato A.: Modeling and simulation of dense cloud dispersion in urban areas by means of computational fluid dynamics. *In: Journal of Hazardous Materials* 197 (09/2011) S. 285–293
- 99. Schalau B.; Acikalin A.; Grätz R.; Steinbach J.: Entwicklung eines Berechnungsverfahrens zur instationären Simulation einer Behältererwärmung. *In: Technische Überwachung* 43 (2002) Nr. 10, S. 53-57
- 100. Schalau B.: Programmbeschreibung 7-036 ProNuSs. 04/2011.
- 101. Schalau B.; Rauchegger C.; Schmidt D.; Thévenin D.: Einfluss der Quellhöhe auf die Ausbreitung schwerer Gase. *In: Technische Sicherheit* 2 (10/2012) Nr. 10, S. 35-37
- 102. Schatzmann M.: Auftriebsstrahlen in natürlichen Strömungen Entwicklung eines mathematischen Modells. Universität Karlsruhe, Fakultät für Bauingenieur- und Vermessungswesen, 1976
- 103. Schatzmann M.; König G.; Lohmeyer A.: Dispersion modeling of hazardous materials in the wind tunnel. *Air Pollution Modeling and Its Application V*. London: Plenum Press, 1985. - ISBN 0-306-42293-X, S. 641-652

- 104. Schatzmann M.; König G.; Lohmeyer A.: Physikalische Modellierung mikrometeorologischer Vorgänge im Windkanal. *In: Meteorologische Rundschau* 39 (04/1986) S. 44-59
- 105. Schatzmann M.; König-Langlo G.; Marotzke K.: *Experimentelle Bestimmung des Einflusses von Gebäudeformationen auf die Ausbreitung schwerer Gase. BMFT Forschungsbericht 13RG86031.* 06/1990.
- 106. Schmidt J.: Auslegung von Sicherheitsventilen bei einer Druckentlastung von Gas/Flüssigkeitsgemischen nach ISO 4126-10. In: Technische Sicherheit 1 (06/2011) Nr. 6, S. 37-45
- 107. Schmidt J.: Sizing of safety valves for multi-purpose plants according to ISO 4126-10. *In: Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 25 (2012) S. 181-191
- 108. Schmidt J.; Westphal F.: Praxisbezogenes Vorgehen bei der Auslegung von Sicherheitsventilen und deren Abblaseleitungen für die Durchströmung mit Gas/Dampf-Flüssigkeitsgemischen - Teil 1. In: Chemie Ingenieur Technik 69 (06/1997) S. 776-792
- 109. Schnatz G.; Hartwig S.: Schwere Gase. Modelle, Experimente und Risikoanalyse. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 1986. - ISBN 3-540-16579-7
- 110. Seidel P.: *Dünnschichtphysik I*. URL www.physik.uni-jena.de/~tief/Lehre/SS2006/ DS1_02_Grundlagen%20Vakuumphysik_Seidel.pdf. - 10.11.2010
- 111. Sklavounos S.; Rigas F.: Simulation of Coyote series trials Part I: CFD estimation of non-isothermal LNG releases and comparison with box-model predictions. *In: Chemical Engineering Science* 61 (01/2006) S. 1434-1443
- 112. Sklavounos S.; Rigas F.: Validation of turbulence models in heavy gas dispersion over obstacles. *In: Journal of Hazardous Materials* A108 (01/2004) S. 9–20
- 113. Spicer T.O.; Havens J.A.: Field test validation of the DEGADIS model. *In: Journal of Hazardous Materials* 16 (02/1987) S. 231-245
- 114. Spicer T.O.; Havens J.A.: Modeling the phase I Thorney Island experiments. *In: Journal* of Hazardous Materials 11 (01/1985) S. 237-260
- 115. Spiegel Online: *Explosion in Viareggio. Zahl der Toten steigt.* URL www.spiegel.de/ panorama/0,1518,633872,00.html. 12.12.2011
- 116. Stein W.A.; Humann W.: Wasserschleier zum Verdünnen von Schwergaswolken. In: Technische Überwachung 32 (10/1991) Nr. 10, S. 355-365
- 117. Stephan K.; Abdelsalam M.: Heat-transfer correlations for natural convection boiling. *In: International Journal of Heat and Mass Transfer* 23 (1980) S. 73-87
- 118. Stephan K.; Preußer P.: Wärmeübergang und maximale Wärmestromdichte beim Behältersieden binärer und ternärer Flüssigkeitsgemische. VDI-Berichte 349. Düsseldorf: VDI-Verlag GmbH, 1979. - ISBN 3-18-090349-X, S. 397-411
- 119. Storvik I.E.; Yildiz D.; van Beeck J.; Bonnet P. Holdø A.E.; Calay R.K.: *FLIE Final Report. European Commission project number EVG1-2000-22022.* 04/2005.
- 120. Umweltbundesamt, Ingenieurbüro Janicke: *Austal 2000*. URL www.austal2000.de/ de/downloads.html. - 21.07.2012
- 121. Umweltbundesamt, Ingenieurbüro Janicke: *TA Luft / AUSTAL2000*. URL www.austal2000.de/de/home.html. 20.07.2012
- 122. VDI-Wärmeatlas: VDI-Wärmeatlas. 10. Auflage. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 10/2006. - ISBN 3-540-29646-8

- 123. VDI 3782, Blatt 3: Ausbreitung von Luftverunreinigungen in der Atmosphäre. Berechnung der Abgasfahnenüberhöhung. Berlin: Beuth Verlag GmbH, 06/1985.
- 124. VDI 3783, Blatt 1: Ausbreitung von störfallbedingten Freisetzungen -Sicherheitsanalyse. Berlin: Beuth Verlag GmbH, 05/1987.
- 125. VDI 3783, Blatt 2: Ausbreitung von störfallbedingten Freisetzungen schwerer Gase Sicherheitsanalyse. Berlin: Beuth Verlag GmbH, 07/1990.
- 126. VDI 3783, Blatt 2 (Anlage): Ausbreitung von störfallbedingten Freisetzungen schwerer Gase Sicherheitsanalyse. Berlin: Beuth Verlag GmbH, 09/1992.
- 127. VDI 3783, Blatt 8: Umweltmeteorologie. Messwertgestützte Turbulenzparametrisierung für Ausbreitungsmodelle. Berlin: Beuth Verlag GmbH, 12/2002.
- 128. VDI 3784, Blatt 2: Umweltmeteorologie. Ausbreitungsrechnung bei Ableitung von Rauchgasen über Kühltürme. Berlin: Beuth Verlag GmbH, 03/1990.
- 129. VDI 3945, Blatt 3: Umweltmeteorologie. Atmosphärische Ausbreitungsmodelle. Partikelmodell. Berlin: Beuth Verlag GmbH, 09/2000.
- 130. Vergison E.; van Diest J.; Basler J.C.: Atmospheric dispersion of toxic gases in a complex environment. *In: Journal of Hazardous Materials* 22 (06/1989) S. 331-357
- 131. Wagner E.: Hochauflösende Messungen beim Blasensieden von Reinstoffen und binären Gemischen. Technische Universität Darmstadt, Fachbereich Maschinenbau, 2009
- 132. Wehmeier G.: Theoretische und experimentelle Untersuchung der Vorgänge bei der Druckentlastung von Chemiereaktoren. Düsseldorf: VDI-Verlag GmbH, 08/1994. -ISBN 3-18-337303-3
- 133. Wehmeier G.; Westphal F.; Friedel L.: Pressure relief system design for vapour or two-phase flow? *In: Transactions of the Institution of Chemical Engineers / B* 72 (08/1994)
 S. 142-148
- 134. Welt Online: *Bhopal-Katastrophe. Erstes Urteil nach Giftgas-Unglück vor über 25 Jahren.* URL www.welt.de/vermischtes/weltgeschehen/article7950009/Erstes-Urteil-nach-Giftgas-Unglueck-vor-ueber-25-Jahren.html. 12.12.2011
- 135. Woodward J.L.; Havens J.A.; McBride W.C.; Taft J.R.: A comparison with experimental data of several models for dispersion of heavy vapor clouds. *In: Journal of Hazardous Materials* 6 (01/1982) S. 161-180
- 136. Zhaohu S.; Maoqiong G.; Zhijian L.; Jianfeng W.: Nucleate pool boiling heat transfer coefficients of pure HFC134a, HC290, HC600a and their binary and ternary mixtures. *In: International Journal of Heat and Mass Transfer* 50 (09/2006) S. 94-104

Anhang A

					Art der Fr	eisetzung			
LfdNr.:	Versuchsreihe	Durchführende	Jahr	Versuchsanzahl	Spontan/ schlagartig/ instantan	Kontinuierlich	Freisetzungsdauer	Strömungshindernisse	Literaturquellen
1	Mines I	au of Mines	016	51	0,038-0,473 m ³ (flüssig)		quasi schlagartig		09, 45]
	Bureau of	U.S. Bures (BM)	16	4		0,2-0,3 m ³ /min (flüssig)	Ø		[68, 1
2	Esso/API – Matagorda Bay	Esso Research and Engineering American Petrolium Institute (API)	1261	17	0,76-10,2 m ³ (flüssig)		6-35 sec quasi schlagartig		[91, 109, 45, 67]
3	Bureau of Mines II	U.S. Bureau of Mines (BM)	1972	6		3,8-22,7 l/s (flüssig)	bis zu 10 min		[68, 109, 45]
		ec		40	bis 3 m ³ (flüssig)		quasi schlagartig		:5]
4	Gaz de Franc Bay Nantes	Gaz de Franc	1972	1		10 m ³ /h (flüssig)	4,5 min		[109, 68, 4
5	Shell – SS Gadila	Shell	1973	6		162-1188 m ³ /h (flüssig)	10 min		[91, 109, 48]
6	DGL – Holland	Directorate General of Labour (DGL) of the Dutch Ministry of Social Affairs	1973	1	1000 kg (flüssig)		quasi schlagartig		[68, 48]

A 1: Überblick über bisherige Experimentalreihen zur Schwergasausbreitung

					Art der Fr	eisetzung			
LfdNr.:	Versuchsreihe	Durchführende	Jahr	Versuchsanzahl	Spontan/ schlagartig/ instantan	Kontinuierlich	Freisetzungsdauer	Strömungshindernisse	Literaturquellen
7	Battelle/AGA – Capistrano Test Site	Battelle Columbus Laboratory American Gas Association (AGA)	1974	42	0,4-53 m ³ (flüssig)		20-30 sec quasi schlagartig		[68, 109, 74]
8	HSE – Porton Down	British Health and Safety Executive (HSE)	1976-1978	42	40 m ³ (gasförmig)		quasi schlagartig		[109, 68, 48]
9	LLNL – China Lake 'Avocet'	Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL)	1978	4	4,5 m ³ (flüssig)		1 min quasi schlagartig		[68, 109]
10	LLNL – China Lake 'Burro'	Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL)	1980	9		11,3-18,4 m ³ /min (flüssig)	2,2-3,5 min		[48, 68, 62, 26, 61]
11	Shell – Maplin Sands	Shell Research Ltd.	0861	10 24	5-27 m ³ (flüssig)	1-5,6 m ³ /min (flüssig)	quasi schlagartig 1,5-10,7 min		[68, 109, 91, 77]
12	LLNL – China Lake Coyote´	Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL)	1981	10		6-19,4 m ³ /min. (flüssig)	0,2-2,3 min		[68, 48, 111, 83]

						Art der Fr	eisetzung			
LfdNr.:	Versuchsreihe		Durchführende	Jahr	Versuchsanzahl	Spontan/ schlagartig/ instantan	Kontinuierlich	Freisetzungsdauer	Strömungshindernisse	Literaturquellen
12	q	Phase 1	/e (HSE)	1982-1983	15	1320-2100 m ³ (gasförmig)		quasi schlagartig		4, 114, 72]
15	E – Thorney Islan	Phase 2	nd Safety Executiv	1983	10	1400-2050 m ³ (gasförmig)		quasi schlagartig	W and, durchlässige W and, Gebäude	, 39, 92, 46, 13, 94
	ISH	Phase 3	British Health ar	1984	3		250-260 m ³ /min. (gasförmig)	5,7-7,8 min		[68, 109, 48,
14	LLNL – Nevada Test Site (NTS) `Desert	Tortoise`	Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL)	1983	4		7,0-11,7 m ³ /min. (flüssig)	2,1-6,4 min		[68, 48, 42, 84]
15	LLNL – NTS `Eagle`		Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL)	1983	6		0,5-1,75 m ³ /min. (flüssig)	Ø		[68, 48, 113]
16	TÜV Nord – Lathen I		Technischer Überwachungsverein Norddeutschland e.V. (TÜV Nord)	1985-1986	60		2,4-61 kg/s (flüssig)	Ø		[50, 49, 83]
17	LLNL and Amoco – NTS `Goldfish´		Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) Amoco Corporation	1986	6		0,123-1,77 m ³ /min (flüssig)	2,1-16 min		[68, 48, 42]

						Art der Fr	eisetzung			
LfdNr.:	Versuchsreihe		Durchführende	Jahr	Versuchsanzahl	Spontan/ schlagartig/ instantan	Kontinuierlich	Freisetzungsdauer	Strömungshindernisse	Literaturquellen
			Ideutschland		40		10-15 kg/s (flüssig)	160-660 sec	Wand, durchlässige Wand, Schlucht	
18	- Lathen II		hungsverein Nord tory	1989-1990	3	121-40 kg (flüssig)		1-2,5 sec quasi schlagartig	Wand, durchlässige Wand, Schlucht	[52, 82, 51]
	V Nord und Risø -		hnischer Überwac (TÜV Nord) 5 National Labora		5		0,17-0,77 kg/s (gasförmig)	105-330 sec	W and, durchlässige W and, Schlucht	
	TÜV		Tech e.V. Risg		3		2,9-3,0 kg/s (flüssig)	250-420 sec		
10	hausen	Propan	urtechnik	4	2		250 g/s (flüssig)	7 min	Häusergasse	
19	Battelle – Drachl	Wasserstoff	Battelle Ingeniev GmbH	199	6		0,8 kg/s (flüssig)	1-2 min	Häusergasse	[69]
20	shing tustrial	(FLIE)	al de industriel (INERIS)	+	74		1-5 kg/s (flüssig)	Ø		7]
	INERIS – Flas Liquids in Indu Environments Institut nationa		Environments Institut nations l'environment : et des risques (2004		20		1-5 kg/s (flüssig)	Ø	Wand	[119,
21	MKOPSC – Brayton Fire	Training Field	Mary Kay O'Connor Process Safety Center (MKOPSC)	2007	21		0,63-0,84 m ³ /min. (flüssig)	619-763 sec		[15]

A 2: Ziel- und Fragestellungen bisheriger Experimentalreihen zur Schwergasausbreitung

1+3) U.S. Bureau of Mines I und II (1970 und 1972)

Anlass für die Initiierung dieser beiden Versuchsreihen war die Besorgnis, dass LNG bei einem Schiffsunfall auf Wasser freigesetzt werden und sich eine große zündfähige Kohlenwasserstoffwolke bilden könnte. Um die Auswirkungen der Verdampfung und der Dispersion zu quantifizieren, wurden in der ersten Versuchsreihe "Bureau of Mines I" 55 Ausbreitungsversuche auf einem kleinen Teich durchgeführt [48]. Diese 55 Versuche spalteten sich auf in 51 Versuche mit quasi schlagartiger Freisetzung von 0,038 bis 0,473 m³ (flüssig) und in 4 Versuche mit kontinuierlicher Freisetzung von 0,2 bis 0,3 m³/min (flüssig). Im Rahmen der schlagartigen Freisetzungen wurden die LNG-Ausdehnung auf der Wasseroberfläche und die Verdampfung gemessen, jedoch nicht die Gasdispersion – anders als in den vier kontinuierlichen Versuchen [68]. Ziel dieser Versuchsreihe war es, eine gaußartige Dispersionsgleichung zu entwickeln, um die Folgen bei einer LNG-Unfallfreisetzung zu ermitteln. Während der Versuche ereigneten sich immer wieder Methandampfexplosionen, dessen Gefährlichkeit in der zweiten Versuchsserie "Bureau of Mines II" ermittelt werden sollte [48]. Hierbei wurden insgesamt 6 Versuche mit kontinuierlicher Freisetzung von 3,8 bis 22,7 1/s durchgeführt. Als Ergebnis der Experimente der zweiten Versuchsreihe wurden einerseits die Form und Größe der sichtbaren Wolke ausgewertet sowie die durchgeführten Konzentrationsmessungen analysiert [45].

2) Esso/API – Matagorda Bay (1971)

Mit den Ergebnissen der durchgeführten Versuche sollten gaußartige analytische Modelle verifiziert werden. Das Ausgangsszenario war ein Unfall eines havarierten Tankers [48]. Alle 17 Versuche wurden auf dem Meer nahe einer Halbinsel durchgeführt. Die LNG-Versuche wurden immer quasi schlagartig mit Freisetzungsmengen von 0,76 bis 10,2 m³ (flüssig) durchgeführt. Ziel der Versuche war es, sowohl den genauen Quellstärkenverlauf als auch die Konzentrationen in Ausbreitungsrichtung sowie die seitliche Ausdehnung der Wolke über mehrere hundert Meter zu bestimmen [45].

4) Gaz de France – Bay Nantes (1972)

Mit den durchgeführten Versuchen sollten spezielle Unfallsituationen nachgestellt werden, die bei dem Betrieb eines LNG-Terminals passieren könnten. Die aus den Experimenten entstehenden Erkenntnisse sollten genutzt werden, um mögliche Konsequenzen abschätzbar zu machen. Hierzu gehörte insbesondere die Ausdehnung der Gefahrenzone bei Unfallfreisetzung [48]. Die Gefahrenzone endete hierbei mit der Unterschreitung von 5 Vol.-%. Darüber hinaus standen das Verdampfungsverhalten, die Dispersion und das Brandverhalten von LNG im Fokus der Betrachtungen. Im Rahmen der Versuche wurden unterschiedliche Mengen LNG in unterschiedliche geometrische Deiche (z.B. quadratisch, rechteckig) mit einer Fläche von 9 bis 200 m² freigesetzt [109]. Insgesamt wurden 41 Versuche durchgeführt. Von diesen wurden in 40 Fällen quasi schlagartige Freisetzungen von bis zu 3 m³ (flüssig) durchgeführt. Ergänzend gab es auch eine kontinuierliche Freisetzung mit 10 m³/h über 4,5 Minuten. Im Umfeld der Freisetzungen wurden die Konzentration und die Temperatur gemessen und mit einem einfachen modifizierten Gaußmodell verglichen [45].

5) Shell – SS Gadila (1973)

Diese Experimentalserie beschäftigte sich mit einer speziellen Fragstellung und zwar, ob es möglich ist, tiefkaltes LNG aus einen Tankschiff als Jet aus einer Düse freizusetzen, ohne das schwimmende Tankschiff damit zu gefährden [48]. Die Freisetzungen fanden über das Heck des Schiffes 18 Meter über dem Wasser statt [91]. Im Rahmen dieser Versuchsreihe wurden insgesamt sechs Versuche durchgeführt, wobei kontinuierliche Freisetzungsraten von 162 bis 1188 m³/h (flüssig) über zehn Minuten erreicht wurden. In zwei Versuchen wurde das LNG stationär freigesetzt, also in ruhendem Zustand des Tankschiffes und in weiteren vier in bewegtem Zustand mit bis zu 10,5 Knoten Geschwindigkeit [67]. Aus Sicherheitserwägungen wurden keine Konzentrationsmessungen vorgenommen. Die Größe der Wolke wurde durch Videoaufnahmen und Augenschein geschätzt, wobei angenommen wurde, dass der sichtbare Bereich der 0,5 Vol.-% Methankonzentration entsprechen würde. Es bildeten sich wenige kleine Lachen auf der Flüssigkeitsoberfläche. Das meiste LNG verdampfte bereits vor oder beim Erreichen der Wasseroberfläche [109]. Aus den sechs Versuchen wurde der Schluss gezogen, dass man LNG im Störfall entladen kann [48].

6) DGL – Holland (1973)

Um eine quasi stationäre Freisetzung einer Freon-Schwergaswolke unter Umgebungsdruck und -temperatur zu erzeugen, wurden 1000 kg druckverflüssigtes Freon in einen Tank geleitet, der mit heißem Wasser gefüllt war. So konnte ermöglicht werden, dass das flüssige Freon schlagartig verdampfte und sich innerhalb von kürzester Zeit eine Gaswolke mit einem Anfangsvolumen von ca. 2400 m³ bildete [68]. Ziel der Versuche war es, den Radius und die
Höhe der Wolke als Funktion der Zeit zu ermitteln, um so einen einfachen Modellansatz von van Ulden zur Schwergasausbreitungsphase zu verifizieren [109].

7) Battelle/AGA – Capistrano Test Site (1974)

Diese Versuchsreihe wurde durchgeführt, um den Einfluss von Tanktassen auf das Ausbreitungsverhalten zu untersuchen [45]. Insgesamt wurden hierfür 42 quasi schlagartige Freisetzungen mit 0,4 bis 53 m³ (flüssig) in die Tanktassen über 20 bis 30 Sekunden vorgenommen [48]. Der Boden der Tanktassen wurde so mit einer bis zu 150 mm dicken Schicht bedeckt [109]. Die Hauptziele der Freisetzungen waren die Untersuchung des Verhaltens von Freisetzungen auf festem Boden, die Dispersion von LNG-Freisetzungen auf Wasser sowie die Ermittlung des Ausmaßes von Gasexplosionen nach der Freisetzunge. Die Tanktassen hatten unterschiedlich hohe Begrenzungswälle, um dessen Effekt auf die Verdünnung zu ermitteln [48]. Von den insgesamt 42 Versuchen wurden in 14 Fällen das LNG gezündet, sodass die Untersuchung des Dispersionsverhaltens nur in den verbleibenden 28 Versuchen eine Rolle gespielt hat. Es ist jedoch auch nicht selten vorgekommen, dass LNG über die Begrenzungswälle hinausgetreten ist und somit die Messung unbrauchbar gemacht hat [68].

8) HSE – Porton Down (1976-1978)

Bei diesen Versuchen wurde Schweres Gas bei Umgebungstemperatur instantan freigesetzt. Um diese schlagartige Freisetzung technisch zu realisieren, musste ein faltbarer 3,5 m Kantenlänge-Kubus aufgebaut werden, in den das Gas gefüllt werden konnte. Kurz vor der Freisetzung wurden die Wände heruntergelassen, so dass kurzzeitig eine Schwergassäule vorhanden war [68]. Mit dieser Art der Versuchsdurchführung wollte man verhindern, dass Temperatureffekte die Messbarkeit der reinen Schwergaseffekte beeinflussen. Der Freisetzungsvorgang sollte nur eine möglichst geringe Störung auf den Ausbreitungsprozess haben. Die Versuche wurden auf unterschiedlichen Geländen durchgeführt. Hierzu gehören zwei flache Gelände mit kurzem Gras, ein flaches Gelände mit höherem Gras sowie zwei abschüssige Gelände mit kurzem Gras. Bei den Versuchen wurden im Wesentlichen Dosismessungen vorgenommen, die in vier unterschiedlichen Quelldistanzen gemessen wurden. Zusätzlich wurden Fotos gemacht, nachdem das Gas zuvor mit Rauch orange eingefärbt wurde [109]. Insgesamt wurden 42 schlagartige Freisetzungen von jeweils 40 m³ gasförmigen Freons durchgeführt. Ziel der Versuche war die Untersuchung der Gravitationsausbreitung einer anfangs relativ hohen Schwergaswolke unter dem Einfluss verschiedener Umgebungsparameter wie z.B. Rauigkeit, Stabilität und Windgeschwindigkeit [48].

9) LLNL – China Lake 'Avocet' (1978)

Zur Vorbereitung zweier großskaliger Versuchsreihen (Burro und Avocet) wurden auf dem Testgelände des Naval Weapons Center (NWC) am China Lake in Kalifornien vier Schwergasversuche durchgeführt [66]. Im Rahmen dieser Versuche wurde LNG (flüssig) auf einem kleinen Teich verteilt [109]. In jedem der vier Versuche wurden ca. 4,5 m³ über einen Zeitraum von einer Minute freigesetzt. Der Großteil der Ausbreitung spielte sich jedoch nach der Freisetzung über Land ab. Ein wesentliches Ziel dieser Versuchsreihe war die Planung und Erprobung der Versuchsanlage, sodass diese in den Folgeserien problemlos funktionieren würde [68].

10) LLNL – China Lake 'Burro' (1980)

Insgesamt wurden in dieser Versuchsreihe neun Ausbreitungsversuche durchgeführt. Bei einem dieser Experimente wurden 35 m³ flüssiger Stickstoff kontinuierlich auf eine Teichoberfläche gegossen, um Wasserdampf-Korrekturfaktoren für die Infrarotsensoren zu ermitteln, die dann den nachfolgenden acht LNG-Freisetzungen zunutze kommen sollten [48]. Ebenso waren die acht weiteren Freisetzungen kontinuierlich und hatten Freisetzungsraten von 11,3 bis 18,4 m³/min [61]. Im Rahmen dieser Versuchsreihe wurden erstmals Turbulenzmessungen und die Messung hochfrequenter Konzentrations-schwankungen in der Gaswolke vorgenommen [109]. Hauptziel der Versuche war es, das Verhalten von LNG bei Unfallfreisetzung zu untersuchen. Ebenso wurden die Auswirkungen der Gemischzusammensetzung des LNG auf das Ausbreitungsverhalten untersucht. LNG besteht zu einem Großteil aus Methan, zu einem gewissen Prozentsatz aber auch aus anderen Kohlenwasserstoffen wie z.B. Ethan oder Propan [48].

11) Shell – Maplin Sands (1980)

Zur Untersuchung des Ausbreitungs- sowie des Abbrandverhaltens wurden von Shell insgesamt 34 Freisetzungsexperimente durchgeführt [48]. Diese unterteilten sich in 14 Versuche mit Propan und in 20 Versuche mit LNG. Die Propanversuche unterteilen sich in 11 kontinuierliche Freisetzungen mit Freisetzungsraten von 2,3 bis 5,6 m³/min (flüssig) über 3,3 bis 7,8 Minuten und in 3 schlagartige Freisetzungen mit bis zu 27 m³ Flüssigfreisetzung. Die LNG-Versuche unterteilten sich in 13 kontinuierliche Freisetzungen mit Freisetzungen mit bis zu 27 m³ Flüssigfreisetzung.

von 1,0 bis 4,5 m³/min (flüssig) über 1,5 bis 10,7 Minuten und in sieben schlagartige Freisetzungen mit bis zu 10 m³ Flüssigfreisetzung [91]. Neben dem Ausbreitungs- und Abbrandverhalten spielte insbesondere die Entfernung der unteren Zündgrenze eine wichtige Rolle bei der Beurteilung der Versuche [48]. Die Schwergase wurden mittels einer Pipeline unmittelbar auf Wasser freigesetzt. In einem Fall wurde sogar eine Unterwasserfreisetzung durchgeführt. Von den 34 durchgeführten Versuchen gab es in elf Fällen auch eine Zündung des freigesetzten Gases [68]. Shell war der Meinung, dass ein Bedarf an Versuchsergebnissen mit gut ausgestatteter Messtechnik und unter definierten Bedingungen besteht [91]. Im Rahmen der experimentellen Durchführung wurden 200 Gassensoren, 70 Temperaturfühler und 45 meteorologische Messinstrumente eingesetzt [109]. Diese wurden auf Schwimmpontons rund um den Freisetzungsort angebracht [74].

12) LLNL – China Lake 'Coyote' (1981)

Wesentliches Ziel dieser Versuchsreihe war die Untersuchung von Rapid Phase Transitions (RPTs), also der Untersuchung der Prozesse bei schnellen Phasenübergängen. Darüber hinaus stand die Zündung der Wolke im Fokus der Betrachtungen. Bei insgesamt zehn Versuchen stand in fünf Fällen die Untersuchung der RPTs im Vordergrund und in den verbleibenden fünf Versuchen die Zündung der Schwergaswolke [48]. Sämtliche Versuche hatten ein kontinuierliches Ausströmverhalten von 6 bis 19,4 m³/min (flüssig) über einen Zeitraum von 0,2 bis 2,3 Minuten [68]. Im Wesentlichen lehnt sich die Versuchsdurchführung an die der Burro-Versuchsreihe an.

13) HSE – Thorney Island (1982-1984)

Auch aus heutiger Sicht gehört die Thorney Island-Versuchsreihe zu den bedeutendsten bisher durchgeführten Versuchsreihen der Schwergasausbreitung. Grund hierfür sind unter anderem eine sehr gute Versuchsvorbereitung und -durchführung und eine exzellente Dokumentation der Ergebnisse. Insgesamt wurde die Versuchsreihe in drei Phasen unterteilt. Ziele der Phase 1 waren die Erzeugung von Schwergaskonzentrationsdaten in Raum und Zeit, um Schwergasmodelle zu verifizieren sowie die Ermittlung von Skalierungsgrößen. Darüber hinaus sollten genauere Informationen über das Turbulenzspektrum innerhalb und außerhalb der Schwergaswolke ermittelt werden. Im Rahmen der Phase 1 wurden in 15 Versuchen zwischen 1320 bis 2100 m³ gasförmiges Freon schlagartig freigesetzt. Diese Versuche wurden in Anlehnung an die "HSE – Porton Down"-Versuchsreihe durchgeführt, nur mit einem wesentlich größeren Freisetzungsvolumen [72]. Ziel der Phase 2 war die Untersuchung des Strömungsverhaltens einer Schwergaswolke unter Berücksichtigung von Hindernissen. Zu diesem Untersuchungsziel wurden zehn schlagartige Freisetzungen von 1400 bis 2050 m³ (gasförmig) durchgeführt. Um den Einfluss verschiedener Hindernisse aufzuzeigen, wurden insgesamt drei Hindernistypen verwendet (Wand, poröse Wand, Gebäude). Die Ziele der Phase 3 entsprechen denen der Phase 1. Die Phase 3 unterscheidet sich von der Phase 1 nur dadurch, dass das Schwergas (gasförmig) kontinuierlich freigesetzt wurde. Hindernisse wurden in der Phase 3 nicht berücksichtigt. In insgesamt drei Versuchen wurden 250 bis 260 m³/min gasförmig über einen Zeitraum von 5,7 bis 7,8 Minuten freigesetzt [48].

14) LLNL – Nevada Test Site (NTS) 'Desert Tortoise' (1983)

Im Rahmen dieser Versuchsreihe wurden Ammoniakfreisetzungen in großem Maßstab durchgeführt. Diese hatten zum Ziel, das Ausbreitungsverhalten von Ammoniak bei Unfallfreisetzung zu untersuchen. Hierbei stand, anders als in den bisherigen Versuchsreihen, also die Ausbreitung toxischer Gase im Fokus der Betrachtungen. In insgesamt vier Versuchen wurde flüssiges Ammoniak kontinuierlich mit einer Freisetzungsrate von 7 bis 11,7 m³/min über 2,1 bis 6,4 Minuten durch einen Freistrahl freigesetzt. In einem der Versuche bildete sich auch einen Lache, die allerdings nur einen kleinen Teil des freigesetzten Ammoniaks darstellte. Ammoniakkonzentrationen wurden noch in einer Höhe von 0,5 % in einer Entfernung von bis zu 2,8 km gemessen [48].

15) LLNL – NTS `Eagle' (1983)

Ziel dieser Versuchsreihe war es, das Dispersionsverhalten von Distickstofftetroxid (N_2O_4) zu untersuchen. Eine besondere Rolle spielte hierbei die chemische Reaktivität dieses Schwergases. Schon unmittelbar nach der Freisetzung entstanden Reaktionsprodukte wie NO_2 oder HNO₃, die den Ausbreitungsprozess des Schwergases um ein Vielfaches komplizierter machen. Insgesamt wurden in sechs Versuchen Freisetzungen mit Freisetzungsraten von 0,5 bis 1,75 m³/min Flüssigphase durchgeführt [48].

16) TÜV Nord – Lathen I (1985-1986)

Wesentliches Ziel dieser Versuchsreihe war die praxisgerechte Bestimmung der unteren Zünddistanz (UZD) bei der Freisetzung schwerer Gase. Die UZD ist der Abstand zwischen dem Freisetzungspunkt und im Falle von Propan der 2,1 Vol.-% Konzentrationslinie. Nach dem damals bekannten Wissensstand hatte Propan eine untere Explosionsgrenze von 2,1 Vol.-%, heutzutage liegt diese bei 1,7 Vol.-% und ist bei der Unterschreitung dieser nicht mehr

zündfähig [51]. Darüber hinaus sollten die aus den Freilandversuchen gewonnenen Messdaten zur Verifizierung von numerischen Schwergasdispersionsmodellen verwendet werden [49]. Ein weiteres wichtiges Ziel der Untersuchungen war es, die Abhängigkeit der Zünddistanzen von der atmosphärischen Stabilität herauszufinden. Bei der Ermittlung der Zünddistanzen wurde immer mindestens solange Schwergas freigesetzt, bis sich ein stationärer Zustand der Wolke eingestellt hatte. Aufgrund der guten technischen Ausstattung der Versuchsreihe konnten Austrittsraten über lange Zeiträume konstant gehalten werden. In allen Versuchen wurde stets Propan aus der Flüssigphase freigesetzt. Einerseits wurde das Propan impulsbehaftet in Richtung der abziehenden Wolke, andererseits aber auch mittels eines Zyklons impulsfrei freigesetzt. Bei der impulsbehafteten Freisetzung verdampfte in allen Fällen das gesamte Propan. Bei den Versuchen mit impulsfreier Freisetzung jedoch bildete sich stets auch eine Lache die aus ca. 30 % des freigesetzten Propans bestand [50]. Insgesamt wurden im Rahmen dieser Versuchsreihe 60 Freilandversuche mit kontinuierlichen Ausströmraten von 2,4 bis 61 kg/s durchgeführt.

17) LLNL and Amoco – NTS `Goldfish' (1986)

Im Rahmen dieser Versuchsreihe sollte das Dispersionsverhalten von Fluorwasserstoff (HF) untersucht werden. HF spielt in der Industrieproduktion eine bedeutende wirtschaftliche Rolle und wird in großen Mengen hergestellt und verarbeitet. Auf den Sachverhalt, dass HF zur Polymerisation neigt und durch nachfolgende Reaktionsprozesse stark abkühlen kann, wurde bei den Untersuchungen ein besonderes Augenmerk gelegt. Die Abkühlung würde zu einer Verstärkung des Schwergaseffektes führen. In dieser Versuchsreihe wurden sechs Versuche mit Freisetzungsraten von 0,123 bis 1,77 m³/min über einen Zeitraum von 2,1 bis 16 Minuten durchgeführt [48].

18) TÜV Nord und Risø – Lathen II (1989-1990)

Im Fokus dieser Versuchsreihe stand eine Vielzahl von Untersuchungszielen. Primäres Untersuchungsziel war, den Einfluss von Hindernissen auf die Schwergasausbreitung zu untersuchen. Für unterschiedliche Freisetzungsbedingungen wurden Konzentrationsfelder mit und ohne Hindernisse ermittelt [52]. Damit die Versuche mit und ohne Hindernisse auch unter vergleichbaren Randbedingungen, z.B. unter gleicher atmosphärischer Stabilitätsklasse oder gleicher Windgeschwindigkeit, durchgeführt werden konnten, wurden die Versuche mit und ohne Hindernisse unmittelbar nacheinander durchgeführt [82]. Hierbei wurden dann die Hindernisse innerhalb kürzester Zeit beseitigt und der Versuch ohne Hindernisse wiederholt,

so war eine direkte Vergleichbarkeit gegeben. Die hieraus gewonnen Erkenntnisse, insbesondere die der impulsfreien Versuche, wurden dann zur Erweiterung der VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2, verwendet. Somit kann mit der Richtlinie nun auch eingeschränkt der Einfluss von Hindernissen bei der Bestimmung von Sicherheitsabständen berücksichtigt werden. Darüber hinaus soll das gewonnene Datenmaterial auch dafür verwendet werden, neue Ausbreitungsmodelle zu entwickeln, die Hindernisse berücksichtigen. Insgesamt wurden im Rahmen dieser Versuchsreihen 51 Versuche durchgeführt. Von diesen 51 Versuchen waren 40 kontinuierliche Freisetzungen aus der Flüssigphase von 0,10 bis 15 kg/s über 160 bis 660 Sekunden, drei schlagartige Freisetzungen aus der Flüssigphase von 12 ℓ bis 40 kg über 1 bis 2,5 Sekunden und fünf kontinuierliche Freisetzungen aus der Gasphase von 0,17 bis 0,77 kg/s über 105 bis 330 Sekunden alle mit Hindernissen im Ausbreitungsfeld [52]. Insgesamt gab es drei Hindernistypen: Wand, durchlässige Wand, Schlucht [51]. Weiterhin gab es drei kontinuierliche Freisetzungen aus der Flüssigphase ohne Strömungshindernisse im Strömungsfeld. Diese hatten eine Freisetzungsrate von 2,9 bis 3,0 kg/s über 250 bis 420 Sekunden [52].

19) Battelle – Drachhausen (1994)

Das primäre Ziel dieser Versuchsreihe war der sicherheitstechnische Vergleich von Wasserstoff und Propan. Die Untersuchungen sollten zeigen, dass der Umgang mit Wasserstoff nicht gefährlicher ist als der Umgang mit dem weitverbreiteten Propan. Hierfür wurden Ausbreitungsmessungen von Wasserstoff- und Propangaswolken in bebautem Gelände durchgeführt. Insgesamt wurden acht Versuche initiiert. Von diesen acht Versuchen wurden zwei mit Propan durchgeführt. Diese hatten kontinuierliche Freisetzungsraten aus der Flüssigphase von jeweils 250 g/s über einen Zeitraum von 7 Minuten. Die verbleibenden sechs Versuche wurden mit Wasserstoff durchgeführt und hatten kontinuierliche Freisetzungsraten aus der Flüssigphase von 0,8 kg/s über 1 bis 2 Minuten. Ein weiteres wesentliches Ziel war der Einfluss von Gebäuden auf das Ausbreitungsverhalten einer Wasserstoffbzw. Propangaswolke, daher wurden messtechnisch aufwendige Ausbreitungsversuche in einer Häusergasse durchgeführt. Die Gasse zwischen den Wohnhäusern war 24 Meter breit und die Häuser etwa 11 Meter hoch. Aus sicherheitstechnischer Sicht ist es enorm wichtig, zuverlässige Informationen über die räumliche Verteilung des explosionsfähigen Gemisches in Abhängigkeit von Ort und Zeit zu erhalten, daher wurden bei dieser Versuchsreihe Messungen in verschiedenen Höhen über dem Boden vorgenommen. Diese spielen insbesondere bei bebautem Gelände eine wichtige

173

Rolle, da der Konzentrationsverlauf in der Höhe stark durch die Häusergasse beeinflusst werden kann. Darüber hinaus wurden in einigen Wasserstoffversuchen auch die Bildung und das Verhalten von Wasserstofflachen auf festen Oberflächen und Wasser untersucht [69].

20) INERIS – Flashing Liquids in Industrial Environments (FLIE) (2004)

Im Rahmen des europäischen Projektes FLIE, welches in sieben Arbeitspakete aufgeteilt wurde. nahmen die Planung und die Durchführung von großskaligen Schwergasfreifeldversuchsreihen zwei Arbeitspakete ein. Auf diese wird im Folgenden speziell eingegangen. Die Versuchsreihen hatten zum Ziel, das Wissen über unter Druck stehende brennbare Flüssiggase und deren Ausströmung im Störfall zu verbessern. Der Fokus wurde hierbei auf das Verstehen der Quellprozesse gelegt. Im Rahmen der Untersuchungen wurde hierbei insbesondere auf den Tankdruck, die Art des freigesetzten LPGs (hier: Propan und Butan), auf die Form der Düse (rund, rechteckig oder schlitzförmig) und auf Hindernisse im Ausströmgebiet mit unterschiedlicher Entfernung zur Düse geachtet [119]. Die Messung des Einflusses von Hindernissen stellt im Rahmen des Aufgabenspektrums eine wichtige Aufgabe dar. Hierfür wurden einige Versuche unter gleichen Randbedingungen einmal mit und einmal ohne Hindernis durchgeführt. Anhand der Messergebnisse der Sensoren konnte nun beurteilt werden, welchen Einfluss das Hindernis auf das Ausströmund Ausbreitungsverhalten hat [7]. Da von Propan und Butan Explosionsgefahren ausgehen, wurde der Bereich am genauesten betrachtet, in dem mit großer Wahrscheinlichkeit eine Explosionsfähigkeit vorliegt – also im Nahbereich. Mit zunehmender Entfernung zur Quelle nimmt die Brenngaskonzentration schnell ab und eine Zündfähigkeit wird immer unwahrscheinlicher. Bei der Durchführung und dem Aufbau der Versuche wurde darauf geachtet, dass diese so praxisnah wie möglich gestaltet waren, um übertragbare Ergebnisse für die Industrie zu erhalten. Die Messergebnisse sollten ebenfalls dafür dienen, neue Modelle zur Strahlfreisetzung von unter Druck stehendem Flüssiggas zu entwickeln und bestehende Modelle zu verifizieren [119]. Insgesamt wurden 94 kontinuierliche Ausströmversuche mit Ausströmraten von 1 bis 5 kg/s durchgeführt, von denen 20 Versuche Hindernisse in Form einer Wand in Freisetzungsrichtung hatten. Der Freistrahl wurde frontal auf die Wand gerichtet. In einigen Versuchen kann es zur Lachenbildung [7].

21) MKOPSC – Brayton Fire Training Field (2007)

Mit dieser Versuchsreihe sollten die Unfallauswirkungen von LNG-Freisetzungen untersucht werden. Einerseits wurde das LNG auf Wasser freigesetzt und anderseits auf Beton. Die weitere Ausbreitung des Schwergases erfolgte auf festem ebenem Boden. Das Schwergas wurde in ein geschlossenes Becken entlassen, das entweder mit Wasser gefüllt war oder nur einen Betonboden hatte. Der Beckenrand war höher als der Wasserstand, sodass dieser als zusätzliches Hindernis für die Ausbreitung fungierte. Die Versuchsreihe wurde bei unterschiedlichen Wetterlagen wiederholt, um eventuelle Einflüsse zu ermitteln. Darüber hinaus wurde in allen Fällen die untere Zündgrenze ermittelt. Insgesamt wurden 21 Versuche mit Freisetzungsraten von 0,63 bis 0,84 m3/min aus der Flüssigphase durchgeführt, welche sich über Freisetzungszeiträume von 619 bis 763 Sekunden erstreckten [15].

									-			
	Mass	ensens	strom 3	6,3 g/s	Massensenstrom 24,9 g/s Massensenstrom 12,4 g/s						12,4 g/s	
Sensor	x [m]	y [m]	z [m]	c(max) [ppm]	x [m]	y [m]	z [m]	c(max) [ppm]	x [m]	y [m]	z [m]	c(max) [ppm]
0 ₂ -S1	1	0	0	218739	1	0	0	167063	1	0	0	79646
0 ₂ -S2	2	0	0	124533	2	0	0	103484	2	0	0	48916
0 ₂ -S3	3	0	0	84089	3	0	0	71764	3	0	0	43648
0 ₂ -S4	4	0	0	59452	4	0	0	45484	4	0	0	29858
0 ₂ -S5	5	0	0	35949	5	0	0	31359	5	0	0	18030
0 ₂ -S6	6	0	0	22369	6	0	0	19461	6	0	0	5015
0 ₂ -S7	7	0	0	17049	7	0	0	9232	7	0	0	2536
0 ₂ -S8	8	0	0	10711	8	0	0	2621	8	0	0	3156

A 3: Länge der Schwergaswolke – Anordnung der Messpunkte

A 4: Breite der Schwergaswolke – Anordnung der Messpunkte

	Mass	ensenstrom 35 g,	/s	Masse	ensenstrom 23 g/	/s	Massensenstrom 9 g/s				
Versuch	x [m]	y (1Vol%) [m]	z [m]	x [m]	y (1Vol%) [m]	z [m]	x [m]	y (1Vol%) [m]	z [m]		
1	0	±0,3	0	0	±0,3	0	0	±0,3	0		
2	1	±2,4	0	1	±1,9	0	1	±1,5	0		
3	2	±3,6	0	2	±3,1	0	2	±2,3	0		
4	3	±4,0	0	3	±3,6	0	3	±2,8	0		
5	4	±4,9	0	4	±2,0	0	4,5	0	0		
6	5	±3,8	0	6	0	0					
7	7,1	0	0								

	Mass	ensens	trom 50 g/s	Mass	ensens	trom 28 g/s	Mass	ensens	strom 18 g/s	Massensenstrom 10 g/s			
Versuch	x [m]	y [m]	z(1Vol%) [cm]	x [m]	y [m]	z(1Vol%) [cm]	x [m]	y [m]	z(1Vol%) [cm]	x [m]	y [m]	z(1Vol%) [cm]	
1	1	0	0,24	1	0	0,19	1	0	0,14	1	0	0,11	
2	2	0	0,20	2	0	0,16	2	0	0,09	2	0	0,06	
3	3	0	0,15	3	0	0,11	3	0	0,05	3	0	0,02	
4	4	0	0,11	4	0	0,08	4	0	0,02	5	0	0,00	
5	5	0	0,06	5	0	0,03	5,5	0	0,00				
6	6	0	0,03	6,6	0	0,00							
7	8,4	0	0										

A 5: Höhe der Schwergaswolke – Anordnung der Messpunkte

A 6: Länge des Schwer- und Neutralgasbereichs – Anordnung der Messpunkte

	Massenstrom 47,9 g/s					enstro	m 48,4	g/s	Massenstrom 48,8 g/s				
Sensor	x [m]	y [m]	z [m]	c(max) [ppm]	x [m]	y [m]	z [m]	c(max) [ppm]	x [m]	y [m]	z [m]	c(max) [ppm]	
0 ₂ -S1	1,5	0	0	210521	1	0	0	237617	1	0	0	263617	
0 ₂ -S2	3	0	0	119892	2	0	0	159998	2	0	0	186824	
0 ₂ -S3	4,5	0	0	69523	3	0	0	105032	3	0	0	135007	
0 ₂ -S4	6	0	0	38948	4	0	0	75732	4	0	0	106925	
F1	9	-1	0	3611	9	-1	0	3153	9	-1	0	4807	
F2	9	0	0	3289	9	0	0	3483	9	0	0	4667	
F3	9	1	0	3876	9	1	0	2879	9	1	0	3778	
F4	11	-1	0	1976	11	-1	0	2345	11	-1	0	1848	
F5	11	0	0	2225	11	0	0	1393	11	0	0	2689	
F6	11	1	0	2424	11	1	0	1947	11	1	0	2995	
F7	13	-1	0	1224	13	-1	0	906	13	-1	0	1187	
F8	13	0	0	1852	13	0	0	1207	13	0	0	2159	
F9	13	1	0	1694	13	1	0	1362	13	1	0	1985	
F10	15	-1	0	897	15	-1	0	946	15	-1	0	859	
F11	15	0	0	966	15	0	0	823	15	0	0	1221	
F12	15	1	0	1285	15	1	0	559	15	1	0	1341	

A 7: Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des Schwergasbereichs – Anordnung der Messpunkte

	Massensenstrom 39 g/s					Massensenstrom 36 g/s				Massensenstrom 24 g/s				Massensenstrom 14 g/s			
Versuch	zq [m]	x(1 Vol%) [m]	y [m]	z [m]	zq [m]	x(1 Vol%) [m]	y [m]	z [m]	zq [m]	x(1 Vol%) [m]	y [m]	z [m]	zq [m]	x(1 Vol%) [m]	y [m]	z [m]	
1	0,02	8,4	0	0	0,02	8,2	0	0	0,02	7	0	0	0,02	5,6	0	0	
2	0,25	8,5	0	0	0,25	7,7	0	0	0,25	6,5	0	0	0,25	5,2	0	0	
3	0,5	8,1	0	0	0,5	7,7	0	0	0,5	4,6	0	0	0,5	3,7	0	0	
4	0,75	6,3	0	0	0,75	6	0	0	0,75	4,2	0	0	0,75	1	0	0	
5	1	4	0	0	1	2,6	0	0	1	1	0	0					
6	1,25	1,5	0	0	1,25	1	0	0									

A 8: Länge der Schwergaswolke – VDI 3783, Blatt 2



Länge Schwergas – 12,4 g/s





A 9: Länge der Schwergaswolke – VDI 3783, Blatt 2 (modifiziert)



Länge Schwergas – 12,4 g/s





A 10: Breite der Schwergaswolke – VDI 3783, Blatt 2 gekoppelt mit Breitenmodell von Britter



Breite Schwergas – 10 g/s

Breite Schwergas – 35 g/s



A 11: Breite der Schwergaswolke – Einfluss der Windgeschwindigkeit auf das Breitenmodell von Britter



Breite Schwergas – 10 g/s

Breite Schwergas – 35 g/s



A 12: Breite der Schwergaswolke – Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die VDI 3783, Blatt 2 (modifiziert) und Breitenmodell von Britter



Breite Schwergas – 10 g/s

Breite Schwergas - 35 g/s







Länge Neutralgas – 48,4 g/s

Länge Neutralgas – 48,8 g/s



Abbildungsverzeichnis

0	<i>S</i> .
Abbildung 1: Versuchsaufbau Ermittlung Massenstrom	15
Abbildung 2: Versuchsaufbau Verdampfer	17
Abbildung 3: Kalibrierfunktion für die Messung von R134a17	17
Abbildung 4: Temperaturabhängigkeit für die Messung von R134a	. 21
Abbildung 5: Abhängigkeit der R134a-Messung von der relativen Feuchte	22
Abbildung 6: Umrechnung O2- in R134a-Konzentration	26
Abbildung 7: Ultraschallanemometer USA-1	. 27
Abbildung 8: MEgicDisk-Messfühler	. 29
Abbildung 9: Dampfdruckverlauf R134a	30
Abbildung 10: Versuchsaufbau Freisetzung aus der Gasphase	32
Abbildung 11: Schematisches Messkonzept bei der Freisetzung aus der Gasphase	34
Abbildung 12: Anbringung Thermoelemente und Druckaufnehmer	35
Abbildung 13: Anbringung der Thermoelemente bei der Tiefenmessung (Draufsicht)	36
Abbildung 14: Versuchsaufbau Freisetzung aus der Flüssigphase	. 37
Abbildung 15: Schematisches Messkonzept bei der Freisetzung aus der Flüssigphase	37
Abbildung 16: Versuchsaufbau Freisetzung aus einer liegenden Flasche	39
Abbildung 17: Schematisches Messkonzept bei der Freisetzung aus einer liegenden Flasche	e.39
Abbildung 18: Versuchsaufbau Länge der Schwergaswolke	41
Abbildung 19: Messkonzept Sauerstoffsensoren	. 41
Abbildung 20: Versuchsaufbau Breite der Schwergaswolke	. 43
Abbildung 21: Versuchsaufbau Höhe der Schwergaswolke	. 44
Abbildung 22: Anordnung der Höhenmesspunkte	. 44
Abbildung 23: Versuchsaufbau Länge des Schwer- und Neutralgasbereichs	45
Abbildung 24: Anordnung der Neutralgassensoren im Messfeld	. 46
Abbildung 25: Versuchsaufbau Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des	
Schwergasbereichs	47
Abbildung 26: Druckverläufe 2-l-Flasche (Freisetzung aus der Gasphase)	49
Abbildung 27: Druckverläufe 10-ℓ-Flasche (Freisetzung aus der Gasphase)	49
Abbildung 28: Druckschwankung zu Entlastungsbeginn (Freisetzung aus der Gasphase)	50
Abbildung 29: Fotoaufnahme Zweiphasenströmung (Freisetzung aus der Gasphase)	. 52
Abbildung 30: Massenverlust 2- <i>l</i> -Flasche (Freisetzung aus der Gasphase)	53
Abbildung 31: Massenverlust 10-ℓ-Flasche (Freisetzung aus der Gasphase)	54
Abbildung 32: Masseverlust in der Anfangsphase (Freisetzung aus der Gasphase)	54
Abbildung 33: Temperaturverlauf 2- <i>l</i> -Flasche 11.10.10 (Freisetzung aus der Gasphase)	. 55
Abbildung 34: Temperaturverlauf 2- <i>l</i> -Flasche 16.06.11 (Freisetzung aus der Gasphase)	. 56
Abbildung 35: Temperaturverlauf 10-ℓ-Flasche 11.10.10 (Freisetzung aus der Gasphase)	. 56
Abbildung 36: Temperaturverlauf 10-l-Flasche 16.06.11 (Freisetzung aus der Gasphase)	. 57
Abbildung 37: Horizontale Temperaturverteilung in der Gasphase (Freisetzung aus der	
Gasphase)	58
Abbildung 38: Druckverlauf (Freisetzung aus der Flüssigphase)	. 59
Abbildung 39: Fotoaufnahme Flüssigkeitsfreisetzung (Freisetzung aus der Flüssigphase)	60
Abbildung 40: Massenverlust (Freisetzung aus der Flüssigphase)	. 60
Abbildung 41: Temperaturverlauf (Freisetzung aus der Flüssigphase)	61
Abbildung 42: Druckverläufe (Liegende Flasche)	. 62

Abbildung 43: Druckverläufe Nahansicht (Liegende Flasche)	. 62
Abbildung 44: Fotoaufnahme Flüssig- bzw. Zweiphasenströmung (Liegende Flasche)	. 63
Abbildung 45: Massenverlust (Liegende Flasche)	. 64
Abbildung 46: Massenverlust durch Flüssigphase (Liegende Flasche)	. 64
Abbildung 47: Temperaturverlauf 2-l-Flasche (Liegende Flasche)	. 65
Abbildung 48: Temperaturverlauf 10-l-Flasche (Liegende Flasche)	. 65
Abbildung 49: Länge der Schwergaswolke für verschiedene Massenströme	. 67
Abbildung 50: Breite der Schwergaswolke für verschiedene Massenströme	. 68
Abbildung 51: Höhe der Schwergaswolke für verschiedene Massenströme	69
Abbildung 52: Länge des Schwer- und Neutralgasbereichs für verschiedene	
Windgeschwindigkeiten	70
Abbildung 53: Länge des Schwergasbereichs für verschiedene Windgeschwindigkeiten	71
Abbildung 54: Länge des Neutralgasbereichs für verschiedene Windgeschwindigkeiten	71
Abbildung 55: Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des Schwergasbereichs für	
verschiedene Massenströme	72
Abbildung 56: Charakteristische Längen einer stehenden Flasche bei freier Konvektion	75
Abbildung 57: Thermodynamische Prozesse innerhalb der Gasflasche	81
Abbildung 58: Phasen des Gemischpegelstands während des Aufwallens	82
Abbildung 59: Kritischer Füllgrad in Abhängigkeit der dimensionslosen Blasen-	
Aufstiegsgeschwindigkeit	. 84
Abbildung 60: Ausbreitungsgebiet I der VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2: (a) Aufsicht,	
(b) Normierte Konzentration χ als Funktion der Quellentfernung bei	
kontinuierlicher Freisetzung	. 91
Abbildung 61: Abhängigkeit der normierten Maximalkonzentration von der normierten	
Windgeschwindigkeit an vier verschiedenen Messorten	93
Abbildung 62: Darstellung der Breite der Wolke nach Britter und McQuaid	94
Abbildung 63: Ausflussziffer einer reinen Gasströmung für R134a	99
Abbildung 64: Ausflussziffer einer reinen Flüssigkeitsströmung für R134a	. 100
Abbildung 65: Druckverlauf 2- <i>l</i> -Flasche (14,2 °C) mit Berechnungsvergleich	101
Abbildung 66: Druckverlauf 2-l-Flasche (33,25 °C) mit Berechnungsvergleich	102
Abbildung 67: Druckverlauf 10- <i>l</i> -Flasche (12,4 °C) mit Berechnungsvergleich	102
Abbildung 68: Druckverlauf 10-ℓ-Flasche (32,82 °C) mit Berechnungsvergleich	103
Abbildung 69: Massenverlust 2- <i>l</i> -Flasche mit Berechnungsvergleich	. 105
Abbildung 70: Massenverlust 10-ℓ-Flasche mit Berechnungsvergleich	. 105
Abbildung 71: Temperaturverlauf 2-l-Flasche mit Berechnungsvergleich	. 107
Abbildung 72: Temperaturverlauf 10- <i>l</i> -Flasche mit Berechnungsvergleich	. 107
Abbildung 73: Ausflussziffer einer reinen Gasströmung für CO ₂	109
Abbildung 74: Ausflussziffer einer reinen Flüssigkeitsströmung für CO ₂	109
Abbildung 75: Massenverlust $10-\ell$ -Flasche CO ₂ mit Berechnungsvergleich	. 110
Abbildung 76: Abhängigkeit des Massenverlusts vom Ventildurchmesser	112
Abbildung 77: Abhängigkeit des Massenverlusts von der Wanddicke	
Abbildung 78: Abhängigkeit des Massenverlusts von der Ausflussziffer (gas)	114
Abbildung 79: Abhängigkeit des Massenverlusts von der Ausflussziffer (flüssig)	.114
Abbildung 80: Abhängigkeit des Massenverlusts von der Umgebungstemperatur	115
Abbildung 81: Abhängigkeit des Massenverlusts von der Anfangsgastemperatur	116
Abbildung 82: Abhängigkeit des Massenverlusts von der Anströmgeschwindigkeit	116

Abbildung 83: Schematische Darstellung eines unterschiedlichen Füllgrads / einer	
unterschiedlichen Anfangsmasse bei konstantem Flaschenvolumen	117
Abbildung 84: Abhängigkeit des Massenverlusts von dem Füllgrad / der Anfangsmasse	
bei konstantem Flaschenvolumen	118
Abbildung 85: Schematische Darstellung eines unterschiedlichen h/d _i – Verhältnisses	
bei konstantem Füllgrad und Flaschenvolumen	118
Abbildung 86: Abhängigkeit des Massenverlusts vom unterschiedlichem h/di -Verhältnis b	ei
konstantem Füllgrad und Flaschenvolumen	119
Abbildung 87: Schematische Darstellung unterschiedlicher handelsüblicher Chlorgasflasch	ien-
größen bei konstantem Füllgrad	120
Abbildung 88: Abhängigkeit des Massenverlusts von der handelsüblichen Größe der	
Chlorgasflasche bei konstantem Füllgrad	121
Abbildung 89: Massenverlust – Untersuchung verschiedener Blasensiedemodelle	122
Abbildung 90: Massenverlust Nachansicht – Untersuchung verschiedener	
Blasensiedemodelle	122
Abbildung 91: Außenwandtemperatur des Druckgasbehälters (Blasensiedemodelle)	123
Abbildung 92: Temperatur der Flüssigphase (Blasensiedemodelle)	124
Abbildung 93: Verlauf des Wärmeübergangskoeffizienten α _{i,fl} (Blasensiedemodelle)	125
Abbildung 94: Länge der Schwergaswolke – VDI 3783, Blatt 2	126
Abbildung 95: Länge der Schwergaswolke – Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die	
VDI 3783, Blatt 2	128
Abbildung 96: Breite der Schwergaswolke – VDI 3783, Blatt 2 gekoppelt mit	
Breitenmodell nach Britter	130
Abbildung 97: Breite der Schwergaswolke – gemessene Länge des Schwergasbereichs	
mit Breitenmodell nach Britter	131
Abbildung 98: Breite der Schwergaswolke – Einfluss der Windgeschwindigkeit auf das	
Breitenmodell von Britter	133
Abbildung 99: Breite der Schwergaswolke – Einfluss der Windgeschwindigkeit auf die	
VDI 3783, Blatt 2 (modifiziert) und Breitenmodell von Britter	135
Abbildung 100: Konzentrationsverlauf Schwer- und Neutralgas – Ansatzpunkt für	
Austal 2000	136
Abbildung 101: Konzentrationsverlauf Neutralgas – Austal 2000	137
Abbildung 102: Konzentrationsverlauf Neutralgas: Einfluss der Bodenrauigkeit auf	
Austal 2000	138
Abbildung 103: Konzentrationsverlauf Neutralgas: Einfluss der Windgeschwindigkeit	
auf Austal 2000	139
Abbildung 104: Konzentrationsverlauf Schwer- und Neutralgas – CFX	140
Abbildung 105: Abschätzung zur maximalen Breite der Schwergaswolke	144
Abbildung 106: Abschätzung zur maximalen Höhe der Schwergaswolke	145
Abbildung 107: Flächenquelle zur Kopplung von VDI 3783, Blatt 2 und Austal 2000	146
Abbildung 108: Abschätzung zur kritischen Quellhöhe	147

Tabellenverzeichnis

	<i>S</i> .
Tabelle 1: Freigesetztes Gas und Ausbreitungsterrain bisheriger Experimentalreihen	10
Tabelle 2: Gaszustand bei der Freisetzung bisheriger Experimentalreihen	12
Tabelle 3: Arbeitsspannung Verteilerboxen	.18
Tabelle 4: Messgrößen USA-1	. 28
Tabelle 5: Physikalische Eigenschaften von R134a	.31
Tabelle 6: Geometrie Gasflaschen	32
Tabelle 7: Abfüllprotokoll für die Freisetzung aus der Gasphase	.33
Tabelle 8: Umgebungsbedingungen bei der Freisetzung aus der Gasphase	35
Tabelle 9: Abfüllprotokoll für die Freisetzung aus der Flüssigphase	38
Tabelle 10: Umgebungsbedingungen bei der Freisetzung aus der Flüssigphase	. 38
Tabelle 11: Abfüllprotokoll für die Freisetzung aus der liegenden Flasche	40
Tabelle 12: Umgebungsbedingungen bei der Freisetzung aus der liegenden Flasche	. 40
Tabelle 13: Umgebungsbedingungen Länge der Schwergaswolke	.42
Tabelle 14: Umgebungsbedingungen Breite der Schwergaswolke	.43
Tabelle 15: Umgebungsbedingungen Höhe der Schwergaswolke	. 45
Tabelle 16: Umgebungsbedingungen Länge des Schwer- und Neutralgasbereichs	46
Tabelle 17: Umgebungsbedingungen Einfluss der Quellhöhe auf die Länge des	
Schwergasbereichs	. 48
Tabelle 18: Entlöseverzugszeit 2-ℓ-Flasche (Freisetzung aus der Gasphase)	.51
Tabelle 19: Entlöseverzugszeit 10-ℓ-Flasche (Freisetzung aus der Gasphase)	.51
Tabelle 20: Zeitraum Zweiphasenströmung (Freisetzung aus der Gasphase)	.53
Tabelle 21: CFX-Rechenzeit und verwendete CPUs	97
Tabelle 22: Zeitraum Zweiphasenströmung für Experiment und Berechnung	. 104
Tabelle 23: Massenstrom während der Zweiphasenströmung bei p \approx konst	104
Tabelle 24: Vergleich kritischer Grenzfüllgrad mit Anfangsfüllgrad	. 106
Tabelle 25: Flaschengeometrie und Füllmasse CO ₂ -Versuche	. 108
Tabelle 26: Umgebungsbedingungen und Anfangsgastemperatur CO2-Versuche	110
Tabelle 27: Geometrie und Füllmasse der handelsüblichen Chlorgasflaschen	. 120
Tabelle 28: Länge des Schwergasbereichs – Vergleich VDI 3783, Blatt 2 mit Experiment	127
Tabelle 29: Windgeschwindigkeiten aus verschiedenen Bezugsquellen	128
Tabelle 30: Länge des Schwergasbereichs – Vergleich VDI 3783, Blatt 2 (modifiziert) mit	
Experiment	. 129
Tabelle 31: Startpunkt der Neutralgasausbreitung und Quellgeometrie	137
Tabelle 32: Länge des Schwergasbereichs – Vergleich CFX (stationär, standard \overline{k} - $\overline{\epsilon}$) mit Experiment	. 141
Tabelle 33: Länge des Schwergasbereichs – Vergleich CFX (stationär, \bar{k} - $\bar{\epsilon}$ angepasst) mit	
Experiment	. 141
Tabelle 34: Länge des Schwergasbereichs – Vergleich CFX (instationär, \bar{k} - $\bar{\epsilon}$ angepasst) mit	t
Experiment	. 142
Tabelle 35: Charakteristische Länge der VDI 3783, Blatt 2 (Breite der Schwergaswolke)	143
Tabelle 36: Charakteristische Länge der VDI 3783, Blatt 2 (Höhe der Schwergaswolke)	
Tabelle 37: Charakteristische Länge der VDI 3783, Blatt 2 (Einfluss der Quellhöhe)	146