

# **Forschungsbericht 194**

**Ein Beitrag zur mathematischen Modellierung  
des Ablaufs von Explosionen**

von Dr.-Ing. Ulrich Krause

40 Seiten, 28 Abbildungen, 6 Tabellen

Herausgegeben von der  
Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)  
Unter den Eichen 87, 12205 Berlin  
Telefon (030) 8104-0 Telex 183 261 bamb d  
Telefax (030) 811 20 29

Copyright © 1993 by Wirtschaftsverlag NW  
Verlag für neue Wissenschaft GmbH, Bremerhaven

Verlag und Vertrieb:  
Wirtschaftsverlag NW  
Verlag für neue Wissenschaft GmbH  
Postfach 10 11 10, 27511 Bremerhaven 1  
Telefon (0471) 460 93-95

## Vorwort

Die umfangreichen experimentellen Untersuchungen zu Entstehung, Ablauf und Auswirkungen von Explosionen in technischen Systemen haben eines gezeigt: Die Kompliziertheit des Explosionsvorganges macht es unmöglich, allein auf experimentellem Wege den Einfluß der vielen bedeutsamen physikalischen Parameter auf den Explosionsvorgang zu untersuchen und auf diese Weise zu verallgemeinerungsfähigen und für den praktischen Explosionsschutz relevanten Aussagen zu kommen. Die Anwendung der mathematischen Simulation als ergänzendes Instrumentarium zur experimentellen Methode scheint ein Erfolg versprechender Weg zu sein, die Möglichkeiten von Parametervariationen zu vervielfachen und die Übertragbarkeit von Labormessungen in andere Maßstäbe zu prüfen.

Die vorliegende Arbeit verfolgt deshalb zwei Ziele. Erstens soll ein mathematisches Modell geschaffen werden, daß bei möglichst weitgehender Begrenzung des numerischen Aufwandes noch detaillierte Aussagen zur zeitlichen Entwicklung der lokalen Parameterverteilungen gibt. Zweitens sollen mit diesem Modell erste Voraussetzungen geschaffen werden, um in der Zukunft technische Regelwerke und Konstruktionsunterlagen zum praktischen Explosionsschutz auf eine verbesserte mathematische Grundlage zu stellen und so aus dem Stadium reiner Empirie hinauszuführen.

Der Verfasser möchte an dieser Stelle den Herren Professoren Dr. Steen und Dr. Hattwig sowie Herrn Dr. Hensel von der Abteilung "Chemische Sicherheitstechnik" der BAM danken, die diese Arbeit angeregt und die damit zusammenhängenden Untersuchungen unterstützt und kritisch begleitet haben.

Einen großen Teil der Zeichnungen hat Herr Dipl.-Ing. John, BAM-4.12, ausgeführt. Dafür sei hier herzlich gedankt.

Der Verfasser möchte sich auch für die Unterstützung bedanken, die er durch Herrn Dipl.-Math. Amthor, BAM-7.24, und seine Mitarbeiter Frau Ing. Moratz und Herrn Dipl.-Math. Fritz erfahren hat.

## Kurzfassung

Explosionen in technischen Systemen stellen einen sehr komplexen Prozeß mit einer großen Zahl von Einflußgrößen dar. Der Ablauf und die Wirkungen von Explosionen werden gegenwärtig vorwiegend experimentell untersucht. Durch den Einsatz geeigneter mathematischer Modelle lassen sich aber experimentelle Arbeiten unterstützen und der materielle Aufwand erheblich reduzieren. Darüberhinaus ermöglicht die mathematische Simulation von Explosionsvorgängen eine verbesserte Übertragbarkeit von Meßergebnissen im Labormaßstab auf Großanlagen.

Die vorliegende Arbeit enthält eine kurze Erläuterung der Methodik der Modellbildung. Es wird gezeigt, wie ausgehend von den allgemeinen Erhaltungssätzen für den Massen-, Impuls-, Energie- und Speziestransport durch physikalisch begründete Vereinfachungen dem jeweiligen Fall angepaßte Modelle entwickelt werden können. Die Grundlagen aus der Literatur bekannter Modelle werden erläutert und deren Leistungsfähigkeit verglichen.

Es wird ein zweidimensionales Modell vorgestellt, das einerseits den Explosionsvorgang in einem technischen System genügend genau wiedergibt, andererseits aber leicht handhabbar sein und eine große Zahl von Rechnungen in angemessener Zeit ermöglichen soll.

Dieses Modell wird anhand einer Reihe von Beispielen für Strömungsvorgänge mit und ohne Ablauf chemischer Reaktionen getestet, um seine Eignung für die Behandlung der hier interessierenden Probleme unter Beweis zu stellen.

## Abstract

Explosions in technical systems are very complex processes being influenced by a large number of parameters. At the moment course and effects of explosions are investigated mostly by experiments. However suitable mathematical models may supplement the experimental work in a reasonable manner and by this way help to reduce the costs of research considerably. Furthermore by mathematical simulation scaling of lab-scale experiments to original-scale equipment might be improved.

The present work contains a short explanation of the method of modelling. Starting from the general balance equations for mass, momentum, energy and species transport simplified models are derived which are adapted to the case of special interest. Several models taken from literature are reviewed.

Finally a two-dimensional model is introduced which on the one hand side should compute the course of an explosion with sufficient accuracy. On the other hand it should be easily to handle and allow a large number of program runs with low requirements of computer resources. The model is tested against a number of examples of flow problems with and without chemical reactions. By this way the capability of the model to describe the problems in question is proved.

# Inhalt

	Seite
1. Einleitung	7
1.1. Darstellung des Problems	7
1.2. Methodische Grundsätze der Modellbildung	7
2. Die allgemeinen Transportgleichungen	9
3. Herleitung eines vereinfachten Modells	10
3.1. Bewertung bestehender Modelle	10
3.2. Das "kubische Gesetz"	13
3.3. Herleitung eines zweidimensionalen Modells	15
4. Die konstitutiven Gleichungen	18
4.1. Turbulenzansätze	18
4.2. Die Reaktionsrate	18
5. Ein einfaches numerisches Lösungsverfahren	22
5.1. Ein modifizierter Lax-Wendroff-Ansatz	22
5.2. Die Rand- und Anfangsbedingungen	24
5.3. Das Rechenprogramm CHARLES	25
6. Testbeispiele für Strömungen ohne chemische Reaktionen	26
6.1. Das Stoßrohr-Problem	26
6.2. Stoßwellenausbreitung in einem z-förmigen Tunnel	27
7. Testbeispiele zu Strömungen mit chemischen Reaktionen	28
7.1. Flammenausbreitung in einer laminaren Rohrströmung	28
7.2. Turbulente Flammenausbreitung in homogenen Gas/Luft-Gemischen	28
7.3. Gasexplosionen in geschlossenen Behältern	31
7.4. Gasexplosionen in druckentlasteten Behältern	32
8. Zusammenfassung	34
Literatur	35
Anhang 1 Vollständiges Gleichungssystem zur zweidimensionalen Modellierung des Explosionsvorganges	36
Anhang 2 Das k-ε-Turbulenzmodell	36

## Formelzeichen

A	m <sup>2</sup>	Fläche
a	m <sup>2</sup> /s	Temperaturleitkoeffizient
a	m/s	Schallgeschwindigkeit
C	kg/m <sup>3</sup>	Konzentration
c <sub>T</sub>		Turbulenzkoeffizient
d	m	charakteristische Abmessung
F	N	äußere Kraft
h	kJ/kg	spezifische Enthalpie
k	m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>	kinetische Energie eines Wirbels
m	kg	Masse
p	bar	Druck
Q	J	Wärmeenergie
q <sub>R</sub>	J/m <sup>3</sup>	Strahlungswärme
R	J·mol <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup>	universelle Gaskonstante
r	m	Radius
Re		Reynoldszahl
S		Quellterm
S <sub>R</sub>	m/s	Flammengeschwindigkeit
S <sub>L</sub>	m/s	laminare Verbrennungsgeschwindigkeit
S <sub>T</sub>	m/s	turbulente Verbrennungsgeschwindigkeit
T	K	Temperatur
t	s	Zeit
V	m <sup>3</sup>	Volumen
u } v } w	m/s	Strömungsgeschwindigkeiten
x } y	m	Ortskoordinaten

## Griechische Symbole

δ <sub>R</sub>	m	Dicke der Reaktionszone
ε	m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup>	Dissipationsrate der kinetischen Wirbelenergie
Φ		Vektor der abhängigen Variablen
Γ		Molekularer Transportkoeffizient
æ		Adiabatexponent
π <sub>s</sub>		Druckverhältnis an der Stoßfront
ρ	kg/m <sup>3</sup>	Dichte
ϑ	m <sup>2</sup> /s	kinematische Zähigkeit

## Indizes

x	bezüglich der x-Richtung
y	bezüglich der y-Richtung
k	Index der chemischen Spezies
Fl	Flamme
Φ	bezüglich der abhängigen Variable Φ
n	Index des Zeitschrittes
Br	Brennstoff

# 1. Einleitung

## 1.1. Darstellung des Problems

Die explosionsartige Verbrennung eines Brennstoff/Luft-Gemisches stellt einen sehr komplexen Naturprozeß dar, bei dem sich chemische und physikalische Effekte überlagern und zum Teil gegenseitig beeinflussen.

Einerseits bestimmt der Reaktionsmechanismus die Geschwindigkeit der Stoffumwandlung und damit in diesem Fall die Geschwindigkeit der Freisetzung von Reaktionswärme, d.h. die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Störung des thermischen Gleichgewichts.

Andererseits beeinflussen die Strömungsverhältnisse und die Temperatur wiederum die Geschwindigkeit der chemischen Reaktion.

Die in den zurückliegenden Jahrzehnten durchgeführten umfangreichen Untersuchungen zur Entstehung und Ausbreitung von Explosionen in technischen Systemen haben zu der Schlußfolgerung geführt, daß es unmöglich ist, allein auf experimentellem Weg die Wirkung der technisch wichtigen Parameter auf den Explosionsverlauf zu untersuchen. Insbesondere Versuche in Pilotanlagen im Originalmaßstab sind mit enormem Kosten- und Zeitaufwand verbunden und erlauben dennoch nur bedingt verallgemeinerungsfähige Aussagen.

Die Verknüpfung gezielter experimenteller Untersuchungen mit mathematischen Modellen ist eine, zum Beispiel in der Sicherheitstechnik von Kernreaktoren, seit langem erfolgreich angewandte Methode zur Risikoanalyse. Es erscheint daher naheliegend, diese Methode auch auf explosionsgefährdete Anlagen anzuwenden. Dabei muß allerdings angemerkt werden, daß die bereits erwähnte Komplexität des Problems die mathematische Simulation von Explosionsvorgängen lange Zeit unmöglich gemacht hat. Erst durch die rasante Entwicklung der Rechentechnik ist das Phänomen der Explosion einer detaillierten mathematischen Behandlung zugänglich geworden.

Eine große Zahl technischer Prozesse läßt sich auf Strömungsfelder, die eine exotherme Reaktion erfahren, zurückführen. Genannt seien hier die Vorgänge in Verbrennungsmotoren, in technischen Feuerungen, in Reaktoren der stoffwandelnden Industrie und auch Explosionen in technischen Apparaten und Anlagen. Für alle diese Prozesse gelten die gleichen Erhaltungssätze und es ist im Prinzip möglich, dasselbe mathematische Modell auf alle diese Probleme anzuwenden.

Die Berücksichtigung möglichst aller denkbaren Fälle führt jedoch zu Algorithmen, die sehr aufwendig und praktisch kaum handhabbar sind. Deshalb wird im allgemeinen mit auf die jeweilige Fragestellung zugeschnittenen Lösungen gearbeitet.

Im Abschnitt 3 dieser Arbeit wird näher darauf eingegangen, wie mit Hilfe sinnvoller und physikalisch gerechtfertigter Annahmen und Vereinfachungen aus einem allgemeinen Ansatz ein dem interessierenden Fall angepaßtes Modell abgeleitet wird.

## 1.2. Methodische Grundsätze der Modellbildung

Zur Schaffung mathematischer Modelle für die Beschreibung

physikalischer Effekte gibt es zwei Wege: den deduktiven und den induktiven.

Der Ausgangspunkt für ein deduktives Vorgehen ist stets das System der Erhaltungssätze der Physik. Für phänomenologische Probleme, auf die wir uns hier beschränken wollen, sind dies die Gleichgewichtsbeziehungen für den Massen-, Energie- und Impulstransport. Diese allgemeinen Bilanzgleichungen werden dann für den speziell interessierenden Fall modifiziert und mit Hilfe der sogenannten konstitutiven Gesetze mathematisch geschlossen. Diese konstitutiven Gesetze beschreiben z.B. die Quellterme in den Bilanzgleichungen oder enthalten Funktionen für die verschiedenen Transportkoeffizienten und thermophysikalischen Stoffeigenschaften.

Die Modellbildung auf induktivem Weg erfolgt so, daß durch Auswertung von Experimentaldaten versucht wird, empirische Zusammenhänge für bestimmte interessierende Parameter zu finden. So lassen sich zum Beispiel aus Meßdaten mittels Regressionsrechnung funktionale Zusammenhänge zwischen physikalischen Größen ableiten.

Allerdings sind sowohl der Gültigkeitsbereich als auch die Genauigkeit dieser empirischen Funktionen begrenzt und in der Regel stark von den Versuchsbedingungen abhängig.

Es ist anzumerken, daß sich auch deduktiv abgeleitete Modelle meistens derartiger empirischer Funktionen bedienen, die dann zum Beispiel in den Beziehungen für die Berechnung der Quellterme enthalten sind. Wie weiter unten gezeigt wird, ist es sogar oft so, daß die Qualität dieser empirischen Beziehungen über die Genauigkeit des deduktiven Modells entscheidet.

In der vorliegenden Arbeit wird ein deduktiv abgeleitetes Modell vorgestellt. Deshalb beziehen sich die weiteren Ausführungen auch auf die deduktive Methode.

Wie bereits erwähnt wird zunächst das System der Bilanzgleichungen für ein differentielles Volumenelement  $dV$  formuliert. Dabei besteht die Wahl zwischen einem mit der Strömung mitbewegtem (Lagrange-Darstellung) und einem ruhenden Koordinatensystem (Euler-Darstellung). Im weiteren wird die Euler-Darstellung bevorzugt, da sie für die Behandlung der Innenströmung in ortsfesten Anordnungen zweckmäßiger ist. Da es zwar im Prinzip möglich aber weder sinnvoll noch numerisch zu bewältigen ist, ein für alle denkbaren Fälle universell einzusetzendes Modell aufzustellen, ist man gezwungen, das Gleichungssystem soweit wie möglich zu vereinfachen.

Dies geschieht durch physikalisch sinnvolle und im Rahmen der geforderten Genauigkeit vertretbare Annahmen und Vereinfachungen. Die Art dieser Vereinfachungen hängt in erster Linie von den Besonderheiten des zu untersuchenden Prozesses ab. Das Ziel ist die Aufstellung eines möglichst einfachen Algorithmus, der allerdings entsprechende Experimente oder Referenzrechnungen mit hinreichender Genauigkeit wiedergibt. Die größere Übersichtlichkeit vereinfachter Modelle ermöglicht zudem ein vertieftes Studium spezieller Probleme.

Die erwähnten Vereinfachungen lassen sich im wesentlichen unterteilen in

- i) Vereinfachung der Transportgleichungen bezüglich der Anzahl der Raumrichtungen,

- ii) Reduzierung der Anzahl der Erhaltungsgrößen durch Mischungsansätze, quasistatische oder quasistationäre Ansätze,
- iii) Vereinfachung der Formulierungen für die Quellterme durch empirische oder halbempirische Ansätze,
- iv) Vernachlässigung von Termen, die keinen merklichen Beitrag zur Lösung des Gleichungssystems liefern,
- v) Vernachlässigung der Zeitabhängigkeit.

Der Fall i) ist immer dann gegeben, wenn der Gradient einer Erhaltungsgröße nach einer Raumrichtung sehr viel kleiner ist als nach den anderen Raumrichtungen. Beispielsweise können alle rotationssymmetrischen Probleme zweidimensional behandelt werden, weil keine Änderungen der abhängigen Variablen entlang der Azimutalen auftreten.

Fall ii) ist anzunehmen, wenn Stoff- oder Phasenumwandlungsprozesse oder thermodynamische Zustandsänderungen sehr viel schneller ablaufen als sich die zu betrachtende thermische oder mechanische Störung ausbreitet. Die Zustandsänderung wird dann als quasistatisch bezeichnet. Die in Frage kommenden Größen sind dann durch thermodynamische Zustandsfunktionen verknüpft, die jeweils eine Differentialgleichung ersetzen. Diese Voraussetzungen sind aber i.a. selbst bei transsonischer Strömung gegeben. (Im Falle detonativer Flammenausbreitung müssen Nichtgleichgewichtseffekte im Zustandsverhalten u.U. berücksichtigt werden.)

Im allgemeinen Fall stellen die Quellterme der Transportgleichungen Funktionen der gesuchten Variablen dar. Dies kann dazu führen, daß der Gleichungstyp (elliptisch, parabolisch oder hyperbolisch) des Differentialgleichungssystems nicht mehr eindeutig bestimmbar ist und daß starke Nichtlinearitäten auftreten. Beides erschwert die numerische Lösung der Transportgleichungen enorm. Zur Umgehung dieser Schwierigkeiten werden häufig vereinfachte Beziehungen benutzt, die auf der Auswertung gezielter Experimente beruhen und die realen Verhältnisse mit akzeptabler Genauigkeit approximieren. Dies charakterisiert den Fall iii).

Der Fall iv) trifft zu, wenn einzelne physikalische Effekte für einen bestimmten Vorgang keine Rolle spielen. In einer stark beschleunigten Gasströmung dürfte z.B. die Gravitation zu vernachlässigen sein. Ebenso ist zu erwarten, daß in einer stark turbulenten Strömung die Wärmeleitung im Fluid keinen merklichen Anteil zum thermischen Energietransport liefert.

Fall v) ist dann gegeben, wenn die Dynamik des Stoffumwandlungsprozesses vernachlässigbar ist. Hierunter ist zu verstehen, daß die lokalen Verteilungen der interessierenden Parameter keinen oder vernachlässigbar kleinen zeitlichen Veränderungen unterliegen.

Ob die hier dargestellten Überlegungen für das zu untersuchende Problem gelten, muß anhand von physikalisch sinnvollen Abschätzungen und Beispielrechnungen quantitativ überprüft werden.



## 2. Die allgemeinen Transportgleichungen

In der Euler-Darstellung lautet das System der allgemeinen Bilanzgleichungen für die zeitliche Änderung des Systeminhalts eines alle Bilanzgrößen enthaltenden Vektors  $\Phi$  in einem differentiellen Volumenelement  $dV$ , siehe Hjertager [1],

$$\frac{\delta \Phi}{\delta t} + \frac{\delta u_i \Phi}{\delta x_i} = - \left[ \Gamma_{\Phi} \frac{\delta \Phi}{\delta x_j} \right] + S_{\Phi} \quad (1)$$

Die zeitliche Änderung der lokalen Verteilungen der im Vektor  $\Phi$  enthaltenen Parameter wird demnach bestimmt durch den konvektiven und den molekularen Transport sowie den Vektor der Quelldichten  $S_{\Phi}$  im betrachteten Volumenelement.  $u_i$  ist dabei die Komponente der Strömungsgeschwindigkeit in der korrespondierenden Raumrichtung  $x_i$ ,  $\Gamma_{\Phi}$  ist die Matrix der molekularen Transportkoeffizienten. Der Vektor  $\Phi$  enthält alle zu bilanzierenden skalaren Größen, d.h. also die abhängigen Variablen. Die Anzahl der Komponenten des Vektors  $\Phi$  hängt dabei von der Güte des gewählten Modells ab.

Es ist im Prinzip vorstellbar, die Bilanzgleichungen für den Massen-, Energie- und Impulstransport in drei Raumrichtun-

gen für jede einzelne an der Reaktion beteiligte chemische Spezies getrennt zu lösen. Beträgt die Anzahl der beteiligten Spezies  $k$ , dann ergeben sich allerdings  $5 \times k$  Transportgleichungen. Selbst wenn nur wenige Spezies berücksichtigt werden, ist der sich ergebende numerische Aufwand kaum zu bewältigen.

Es ist daher üblich nur die Massen-, Energie- und Impulsbilanzen des Stoffgemisches zu betrachten (siehe Fall ii) im vorangegangenen Abschnitt). Das auf diese Weise entstehende Gleichungssystem wird ergänzt durch zusätzliche Massenbilanzen der  $k$  für den Stoffumsatz wesentlichsten chemischen Spezies. Der Vektor  $\Phi$  liegt dann in folgender Form vor:

$$\Phi = [\rho, \rho u, \rho v, \rho w, \rho h, C_1, C_2, \dots, C_k]^T \quad (2)$$

Hierin bedeuten  $\rho$  die Dichte des Stoffgemisches,  $u$ ,  $v$  und  $w$  die Komponenten der Strömungsgeschwindigkeit in  $x$ -,  $y$ - und  $z$ -Richtung,  $h$  die spezifische Enthalpie des Stoffgemisches und die  $C_i$  die Massenkonzentrationen der zu berücksichtigenden Spezies.

Wird angenommen, daß insgesamt  $N$  Spezies an der Reaktion teilnehmen, darf  $k$  höchstens  $N-1$  betragen.

### 3. Herleitung eines vereinfachten Modells

#### 3.1. Bewertung bestehender Modelle

Die ersten Versuche, von chemischen Reaktionen betroffene Strömungen mit deduktiven Ansätzen mathematisch zu simulieren und dabei lokale Verteilungen der Zustandsparameter zu berücksichtigen, liegen etwa zwanzig Jahre zurück (Spalding [2], Butler und O'Rourke [3]). Mittlerweile existieren große, sehr fortgeschrittene Computercodes, die als best-estimate-Modelle bewertet werden können und sich durch folgende Eigenschaften auszeichnen:

- dreidimensionale Berechnung des Strömungsfeldes,
- fortgeschrittenes Turbulenzmodell,
- modernes numerisches Lösungsverfahren,
- Kopplung an mechanische Spannungsberechnung (structural response),
- moderne, häufig interaktive Ein- und Ausgabestruktur.

Als Beispiele für Programme, die diese Charakteristika aufweisen, seien hier der norwegische FLACS-3D- [4] und der britische FLOW-3D-Code [5] genannt.

Diese Programme erlauben die mathematische Simulation turbulenter Verbrennungsvorgänge mit der wahrscheinlich besten im Moment erreichbaren Genauigkeit.

Die damit verbundenen Genauigkeitsanforderungen verursachen allerdings einen beträchtlichen numerischen Aufwand. Die Berücksichtigung der dreidimensionalen Verteilungen relativ vieler Zustandsgrößen führt bei der rechnerischen Auswertung zu sehr großen Gleichungssystemen, deren Lösung im Moment nur auf Supercomputern möglich ist. Selbst dann nehmen die Aufbereitung der Ein- und Ausgabedaten sowie die eigentliche Rechnung noch sehr viel Zeit - unter Umständen mehrere Tage pro Rechnung - in Anspruch.

In der schwierigen und aufwendigen Handhabung besteht der wesentliche Nachteil dieser Programme. Somit lassen sich mit diesen Programmen nur relativ wenige, ausgewählte Beispiele bearbeiten, wobei dem Nutzer erhebliche Kosten entstehen.

Daraus folgt ein Bedarf an vereinfachten, leichter handhabbaren Modellen, die Rechenergebnisse - möglicherweise mit eingeschränkter Genauigkeit - schneller und mit geringerem Aufwand bereitstellen. Die best-estimate-Modelle bieten dann allerdings eine ausgezeichnete Möglichkeit, einfachere Modelle zu verifizieren.

Die Ableitung vereinfachter Modelle aus den allgemeinen Bilanzgleichungen erfolgt nun zuerst nach Überlegungen zum Anwendungsgebiet des aufzustellenden Modells. Hier lassen sich schon prinzipielle Unterschiede in der Modellbildung zwischen verschiedenen Anwendungsgebieten ausmachen, wie sie in *Tabelle 1* für die Fälle technische Feuerung und Explosion in einer technischen Anlage dargestellt sind.

Tabelle 1 enthält damit bereits wesentliche Hinweise für die Ableitung vereinfachter Modelle, die dem jeweiligen Anwendungsfall angepaßt sind. In technischen Feuerungen kann

*Tabelle 1  
Spezifikationen in den Modellierungsansätzen turbulenter Verbrennung in Strömungen für die Fälle technische Feuerung und Explosion*

techn. Feuerung	Explosion
<ul style="list-style-type: none"> <li>- stationäre Strömung</li> <li>- isobare Zustandsänderung</li> <li>- hydrodynamisch (inkompressibel)</li> <li>- große Zahl von Spezies und Elementarreaktionen zu berücksichtigen</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- transiente Strömung</li> <li>- polytrope Zustandsänderung</li> <li>- gasdynamisch (kompressibel)</li> <li>- nur wenige Spezies und Reaktionen bestimmen die Explosionswirkungen</li> </ul>

man im allgemeinen von stationären Strömungsverhältnissen ausgehen. Somit entfallen alle Zeitableitungen in den Bilanzgleichungen. Zudem sind die lokalen Druckunterschiede vernachlässigbar, so daß die Strömung als hydrodynamisch betrachtet werden kann.

Im Unterschied dazu sind Explosionen transiente Vorgänge, die mit starken Kompressibilitätseffekten verbunden sind. Es gelten deshalb die gasdynamischen Gleichungen.

Andererseits ist in technischen Feuerungen eine große Zahl von chemischen Spezies und Elementarreaktionen zu berücksichtigen, um den Verbrennungsablauf zu optimieren und auch quantitative Aussagen über die Schadstoffentstehung zu gewinnen. Dieser Aspekt tritt im Falle von Explosionen in den Hintergrund. Hier sind nur die Energiefreisetzung aus der Reaktion und der summarische Verbrauch an Brennstoff und Sauerstoff interessant.

Zur Feuerraumberechnung haben beispielsweise Görner und Zinser [6] und Bockhorn [7] stationäre Modelle eingeführt, die einen ausführlichen Reaktionsmechanismus enthalten. Für die Oxidation von Kohlenmonoxid mit feuchter Luft gibt Bockhorn 72 Elementarreaktionen zwischen 15 chemischen Spezies an.

Da das Anliegen der hier vorliegenden Arbeit in der Modellierung des Ablaufs von Explosionen besteht, soll die Betrachtung stationärer Probleme an dieser Stelle beendet werden. Die Charakteristika fortgeschrittener, dreidimensionaler Rechenprogramme für die Simulation von Explosionsvorgängen wurden bereits eingangs dieses Kapitels aufgeführt. Es wurde auch auf Schwierigkeiten hingewiesen, die die Arbeit mit diesen Programmen bereitet.

Eine wesentliche Reduzierung des numerischen Aufwandes bei der Lösung der Erhaltungsgleichungen kann erreicht werden, wenn man sich auf eine zweidimensionale Analyse des Explosionsvorganges beschränkt. Dies kann dann geschehen, wenn zu erwarten ist, daß die Änderungen der lokalen Zustandsparameter in einer Raumrichtung sehr viel kleiner als in den beiden anderen Richtungen sind. Das ist häufig der Fall, wenn geometrische Anordnungen mindestens eine Symmetrieachse haben und die Anregung der Störung ebenfalls symmetrisch erfolgt.

Auf diese Weise wird das Gleichungssystem um eine Impulsbilanz reduziert. Gleichzeitig entfallen in den anderen Transportgleichungen alle Ableitungen nach der vernachlässigten Richtung. Wie weiter unten noch gezeigt wird, gestaltet sich nun die numerische Lösung der verbliebenen Gleichungen

bedeutend einfacher, da im zweidimensionalen Fall natürlich wesentlich weniger Gitterpunkte benötigt werden als bei der dreidimensionalen Analyse.

Beispiele für zweidimensionale Analysen liefern die Modelle von Hjertager [1], eine frühe Version des FLACS-Codes, oder von Butler und O'Rourke [3]. Mit Hilfe der zweidimensionalen FLACS-Version gelang Hjertager beispielsweise die Nachrechnung von Experimenten von Moen u.a. [8], bei denen die turbulente Flammenbeschleunigung durch ein Rohr mit Strömungshindernissen untersucht wurde, siehe [1] und [18]. Auf dieses Beispiel wird in Abschnitt 7 noch näher eingegangen.

Allerdings sind noch weitere Vereinfachungen bei der Modellierung dieser Prozesse denkbar. Für Rohrströmung ohne die Flammenfront störende Strömungshindernisse wie Blenden, Drosselorgane etc. ist unter Umständen eine eindimensionale Berechnung der lokalen Verteilungen ausreichend. Dies zeigen die Arbeiten von Reitz [9] und von Cant und Bray [10].

Letztere gehen zwar von einem allgemeiner formulierten Modell aus, aber zur Untersuchung spezieller Einflüsse - hier ihres sehr ausführlichen Turbulenzmodells - wird dann ein leichter handhabbares, eindimensionales Modell verwendet. Bei allen bisher erwähnten Modellen zur Simulation der Ausbreitung von Explosionen werden lediglich drei chemische Spezies in Betracht gezogen, nämlich Brennstoff, Oxidator und Reaktionsprodukte. Es werden demzufolge insgesamt vier Massenbilanzen gelöst.

In der zurückliegenden Zeit hat es auch Versuche gegeben, die numerisch seinerzeit nicht beherrschbare Wechselwirkung von Strömungsfeld und chemischer Reaktion aus entsprechenden Modellen zu eliminieren. Dies geschieht durch die Vorgabe eines zeitlich unveränderlichen Strömungsfeldes, wobei im einfachsten Fall die Geschwindigkeiten zu null gesetzt werden. Auf die Lösung der Impulsbilanzen kann dann verzichtet werden.

In einem weiteren Schritt der Vereinfachung wird dann das betrachtete thermodynamische System in eine gewisse Zahl von Zonen eingeteilt, innerhalb derer die lokalen Verteilungen vernachlässigt werden. Es ergeben sich dann integrale Bilanzgleichungen, die einfacher numerisch auswertbar sind als die partiellen Differentialgleichungen für die lokalen Verteilungen der Transportgrößen.

Lewis und von Elbe [11] haben aus einer Energiebilanz für einen geschlossenen Behälter unter Verwendung einer Reihe von gasdynamischen Beziehungen einen Zusammenhang zwischen zeitlichem Druckanstieg und laminarer Verbrennungsgeschwindigkeit abgeleitet. Damit läßt sich der zeitabhängige Druckverlauf in geschlossenen Behältern bei ideal sphärischer Flammenausbreitung in einem ideal homogenen Brennstoff/Luft-Gemisch gut wiedergeben. Nagy u.a. [12] verwendeten diese Beziehung zur Auswertung von Gas- und Staubexplosionen in Behältern verschiedener Volumina. Heinrich [13] konnte mit diesem Ansatz die zeitliche Druckentwicklung von Methanexplosionen in Behältern bis zum Ansprechen der Druckentlastung berechnen.

Das Modell von Lewis und von Elbe [11] kann als Zwei-Zonen-Modell bezeichnet werden, da es von einer geschlossenen Flammenfront vernachlässigbarer Dicke ausgeht, die die Grenzfläche der beiden Zonen verbranntes und unverbranntes Gemisch bildet (s. Abb. 1).

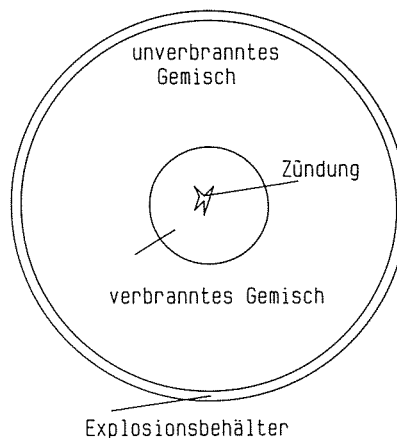
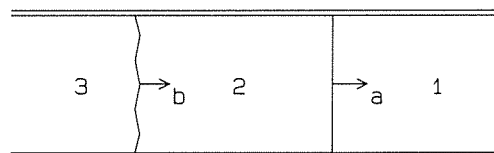


Abb. 1  
Zur Veranschaulichung des Zwei-Zonen-Modells für Explosionen im geschlossenen Behälter

Es gibt auch einige Versuche, Mehr-Zonen-Modelle auf den Explosionsablauf in druckentlasteten Behältern und Rohrleitungen anzuwenden. In jüngerer Zeit wurden dazu Arbeiten von Clark und Smoot [14], Gruber u.a. [15] und Canu u.a. [16] veröffentlicht.

Clark und Smoot untersuchen die Flammenausbreitung durch ein glattes Rohr, das in drei Zonen unterteilt ist. Zone 1 umfaßt den ungestörten Bereich, der durch die bei der Explosion erzeugte Stoßfront von Zone 2 getrennt ist. Mit Zone 2 ist der Bereich der unverbrannten, aber vorkomprimierten Gase gemeint.

Die Flammenfront bildet die Grenze zwischen Zone 2 und Zone 3, die den von den Verbrennungsprodukten eingenommenen Bereich kennzeichnet (s. Abb. 2). Diese Einteilung entspricht der "klassischen" Darstellung von Bartlmä [17].



a - Stoßfront	1 ungestörtes Gebiet
b - Flammenfront	2 vorkomprimiertes, unverbranntes Gas
	3 verbranntes Gas

Abb. 2  
Zoneneinteilung bei der Stoßwellen- und Flammenausbreitung im geraden Rohr (nach Bartlmä [17])

Voraussetzung für die Anwendung dieses Modells ist, daß Stoßfront und Flammenfront ideal planar sind und eine vernachlässigbare Dicke haben.

Die Mehr-Zonen-Modelle gehen dann von der Konstanz der Zustandsparameter innerhalb dieser Zonen aus, d.h. lokale Verteilungseffekte können nicht berücksichtigt werden. Die Transportgleichungen vereinfachen sich dann zu integralen Bilanzen. Diese liegen als gewöhnliche Differentialgleichungen vor, die ungleich einfacher numerisch zu lösen sind als die partiellen Differentialgleichungen gemäß Gl. (1).

Wenn der zeitliche Verlauf der Druckentwicklung nicht interessant ist und nur die sich in den verschiedenen Zonen einstellenden Maximaldrücke ermittelt werden sollen, läßt sich nach Bartlmä [17] sogar eine analytische Lösung der Impulstransportgleichung angeben. Das ist, wie weiter unten

gezeigt wird, sehr hilfreich, um Näherungsverfahren auf numerische Ungenauigkeiten zu testen.

Während das Modell von Clark und Smoot [14] für die eindimensionale Rohrströmung angewendet wurde, haben Gruber u.a. [15] und Canu u.a. [16] versucht, mit Hilfe eines Zwei-Zonen-Modells die zeitliche Druckentwicklung in druckentlasteten Behältern zu beschreiben. Auch hier gelten integrale Bilanzgleichungen für jede Zone.

Das Modell von Gruber u.a. ist dahingehend weiter vereinfacht, daß es keinen Ansatz für die Reaktionsrate enthält. Vielmehr wird der als bekannt vorausgesetzte maximale Explosionsdruck im geschlossenen Behälter als Maß für die bei der Explosion freiwerdende Energie eingesetzt. Der Nachteil dieses Verfahrens ist, daß keine zeitlichen Konzentrationsverteilungen der beteiligten Spezies berechnet werden. Somit können für die Druckentlastung nur die zwei Zustände Ausströmen nur unverbrannten bzw. Ausströmen nur verbrannten Gases unterschieden werden.

Bei der in [15] dargestellten Nachrechnung der Experimente von Heinrich [13] zur Druckentlastung von Methanexplosionen

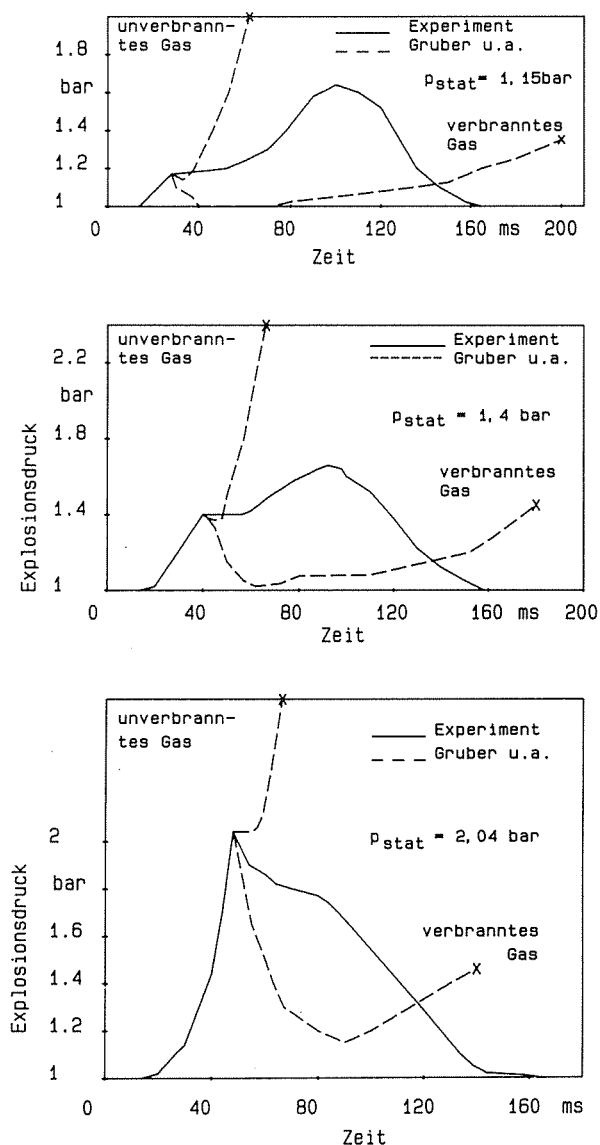


Abb. 3  
Druck-Zeit-Verläufe für druckentlastete Explosionen bei verschiedenen statischen Ansprechdrücken - Vergleich der Rechnungen von Gruber u.a. [15] mit Meßdaten von Heinrich [13]

zeigt sich, daß mit dem Modell von Gruber u.a. keine realistische Wiedergabe der zeitlichen Druckentwicklung möglich war. Es konnten lediglich zwei Grenzkurven berechnet werden, die die experimentell ermittelte Kurve einschließen. Die von Gruber u.a. berechneten Maximaldrücke - sie treten auf, wenn nur unverbranntes Gas ausströmt - liegen dabei bis zu 50% über den von Heinrich gemessenen Drücken, so daß dieses Modell keinen realistischen Anhaltspunkt für die Dimensionierung von Druckentlastungsöffnungen verspricht (s. Abb. 3).

Canu u.a. [16] hingegen beziehen in ihr Modell den Reaktionsmechanismus mit ein. Bis auf geringfügige Modifikationen ist der Aufbau dieses Modells ansonsten der gleiche wie bei Gruber u.a.

Canu u.a. konnten ebenso wie Gruber u.a. mit ihrem Modell eine gute Übereinstimmung mit Meßdaten für den Bereich bis zum Ansprechen der Druckentlastung erzielen. Der Druckverlauf nach der Freigabe der Entlastungsöffnung ist in [16] jedoch mit nur einem Druck-Zeit-Verlauf repräsentiert, der zudem keine Angaben zu einem Vergleich mit Meßdaten enthält und somit nur bedingt als Nachweis der Leistungsfähigkeit des Modells dienen kann.

Der für den Test eines mathematischen Modells für die Druckentlastung von Explosionen interessante Fall ist der einer unzureichend bemessenen Entlastungsöffnung. Bei hinreichend großer Entlastungsöffnung wird der Ansprechdruck nicht überschritten und der Ausströmvorgang dominiert die zeitliche Druckentwicklung deutlich. Ist die Entlastungsöffnung hingegen zu klein bemessen, passiert folgendes:

Nach dem Ansprechen der Entlastungsöffnung sinkt der Druck zunächst durch das Ausstoßen von Gas aus dem Behälter. Das Einsetzen des Strömungsvorganges führt aber zu einer Vergrößerung der Oberfläche der Flammenfont und damit zu einer deutlichen Erhöhung der Reaktionsrate. Infolgedessen steigt der Druck im Behälter wieder an, unter Umständen sogar über den Ansprechdruck der Entlastungsöffnung hinaus. Es gibt hier eine Überlagerung gegenläufiger Effekte, der Druckminderung durch den Ausströmvorgang einerseits und der Druckerhöhung durch die Beschleunigung der Reaktion andererseits. Diesen Zusammenhang konnte Heinrich [13] in seinen Versuchen eindrucksvoll nachweisen. In der Arbeit von Canu u.a. [16] bleibt offen, ob das dort vorgestellte Modell diese Vorgänge realistisch wiedergeben kann.

Die Versuche von Heinrich [13] und entsprechende Nachrechnungen werden in Abschnitt 7 noch näher betrachtet.

Schließlich sei noch auf einige auf induktivem Wege gefundene Beziehungen zur Vorhersage von Explosionswirkungen eingegangen. Hier wird, wie bereits weiter oben erwähnt, versucht, durch Anpassung an Meßdaten funktionale Zusammenhänge zwischen den Parametern zu finden, die für den Explosionsvorgang maßgeblich sind.

Baker and Tang [19] verwenden mehr als vierzig empirische Ähnlichkeitskennzahlen, um die Übertragbarkeit von Laborergebnissen auf Explosionsvorgänge in Anlagen im Originalmaßstab zu ermöglichen. Diese Ähnlichkeitskennzahlen umfassen die Bereiche Geometrie, Stoffeigenschaften (bei Stäuben auch granulometrische Eigenschaften), Zündbedingungen, Umgebungsbedingungen sowie Explosionswirkung im Inneren und außerhalb der zu untersuchenden Anordnung.

Durch Einführen einer dimensionslosen Entlastungsfläche

$$A' = A\sqrt{V^{2/3}}$$

beispielsweise wird es möglich, Meßdaten für die reduzierten maximalen Explosionsdrücke in verschieden geformten Explosionsbehältern zu vergleichen. Es ist dann nicht mehr die Entlastungsfläche allein maßgebend, sondern das Verhältnis dieser Entlastungsfläche zum Behältervolumen in der Potenz zwei Drittel.

Baker und Tang [19] beziehen weiterhin den maximalen Explosionsdruck auf den Anfangsdruck und bilden auf diese Weise einen dimensionslosen maximalen Explosionsdruck. Dadurch wird eine Übertragbarkeit von gemessenen Explosionsdrücken bei verschiedenen Anfangsdrücken möglich.

Die Einführung dimensionsloser Parameter bietet den Vorteil, aus entsprechenden Meßwerten zu findende empirische Funk-

tionen ebenfalls dimensionslos darstellen zu können. Dadurch werden Zahlenwertgleichungen vermieden, die bei möglicherweise unkorrekter Angabe der verwendeten physikalischen Einheiten zu Irrtümern führen.

Die von Baker und Tang [19] verwendeten Ähnlichkeitskennzahlen sind wertvolle Hilfsmittel zur Auslegung von sicherheitstechnischen Schutzmaßnahmen und zur Berücksichtigung explosionschutztechnischer Belange bei der Planung und beim Bau explosionsgefährdeter Anlagen. Sie sind aber nicht geeignet, den Explosionsablauf in seiner zeitlichen Entwicklung detailliert wiederzugeben.

Technische Regelwerke und Richtlinien zum Explosionsschutz versuchen häufig empirische Funktionen anzugeben, mit denen sich konstruktive Parameter auf einfache Weise berechnen lassen, siehe [41]. Diese Formeln haben jedoch einen sehr begrenzten Gültigkeitsbereich und eine eingeschränkte Genauigkeit. Sie erlauben ebenfalls keine detaillierten Angaben über die sich tatsächlich abspielenden Vorgänge.

Zusammenfassend gibt *Tabelle 2* einen Überblick über die in diesem Abschnitt erwähnten Modelle und die Überlegungen, die zu ihrer Herleitung geführt haben.

*Tabelle 2*

*Charakteristika und Erläuterung bestehender Modelle zur Beschreibung des Explosionsablaufes*

Modellcharakteristik	Bemerkungen	Beispiele
<b>1. Deduktive Modelle</b>		
<b>1.1. lokale Bilanzgleichungen</b>		
3D-Strömung turb. Verbrennung	best-estimate-Modelle Berechnung ausgewählter Explosions-szenarien	FLACS-3D [4], FLOW-3D [5]
2D-Modelle	Vereinfachung aufgrund von Symmetrie, geringerer numerischer Aufwand	FLACS-2D [1] RICE [3] CHARLES [27]
1D-Modelle	Rohrströmung ohne Hindernisse	Reitz [9] Cant u. Bray [10]
<b>1.2. integrale Bilanzgleichungen</b>		
Mehrzonenmodelle	– Einteilung des Reaktionsraumes in Zonen – idealisierte Form der Flammenfront – vorgegebenes Geschwindigkeitsfeld	Lewis u. von Elbe [11] Nagy [12] Heinrich [13] Clark [14] Gruber [15]
<b>1.3. thermodynamische Zustandsgleichungen</b>		
stationäres Mehrzonen-Modell	nur Anfangs und Endzustand betrachtet	Bartlmä [17]
<b>2. Induktive Modelle</b>		
empirische Ähnlichkeitskennzahlen	dimensionslose Parameter zur Skalierung ähnlicher Vorgänge	Baker und Tang [19]
„Faustformeln“	empirische Funktionen aus Meßdaten	VDI-RL 3673 [41]

### 3.2. Das „kubische Gesetz“

Einige explosionsschutztechnische Aufgaben, zum Beispiel Druckentlastung und Explosionsunterdrückung, benötigen Angaben über den zu erwartenden zeitlichen Ablauf der Explosion. Im vorangegangenen Abschnitt wurde gezeigt, daß diese Angaben nur über die Lösung der instationären Bilanzgleichungen zu erlangen sind. Dies wurde aber erst mit der Entwicklung und breiten Einführung der Rechentechnik möglich.

In der Vergangenheit war es deshalb üblich, Annahmen zu treffen und Bedingungen festzulegen, unter denen sich die Transportgleichungen soweit vereinfachen ließen, daß sie mit den zur Verfügung stehenden Mitteln mathematisch auswertbar wurden.

Dies führte schließlich zur Ableitung des sogenannten „kubischen Gesetzes“. Wegen seiner besonderen Bedeutung für den praktischen Explosionsschutz soll dieses „kubische Gesetz“ hier in einem gesonderten Abschnitt erörtert werden. Das „kubische Gesetz“ besagt, daß unter gewissen Voraussetzungen das Produkt aus zeitlichem Druckanstieg und dritter Wurzel des Behältervolumens eine Konstante ist.

$$(dp/dt) \cdot V^{1/3} = \text{const.} \quad (3)$$

Wie im folgenden gezeigt wird, läßt sich das „kubische Gesetz“ deduktiv ableiten. Dabei ist allerdings stets zu berücksichtigen, inwieweit gedankliche Idealisierungen des Explosionsablaufes den Gültigkeitsbereich einschränken.

Auf dem „kubischen Gesetz“ beruhen derzeit einige weit verbreitete Berechnungsmethoden für konstruktive Explosionsschutzmaßnahmen. Dabei zeigt sich, daß die Bedingungen, unter denen das kubische Gesetz strenggenommen gilt, in der Praxis häufig nicht eingehalten werden können. In Ermangelung einer besseren mathematischen Methode zur Erfassung der komplexen Prozesse während einer Explosion hat es zahlreiche Versuche gegeben, die näherungsweise

Gültigkeit des kubischen Gesetzes für von den ursprünglichen Voraussetzungen abweichende Bedingungen auf experimentellem Wege nachzuweisen [20].

Hierauf wird weiter unten noch näher eingegangen. Zunächst soll jedoch gezeigt werden, wie zur Ableitung des kubischen Gesetzes der Explosionsablauf durch Lewis und von Elbe [11] soweit wie möglich idealisiert wurde.

Tabelle 3 enthält die von Lewis und von Elbe getroffenen Annahmen und Voraussetzungen einerseits sowie andererseits die sich daraus ergebenden Konsequenzen für das mathematische Modell.

Tabelle 3  
Annahmen zum Gültigkeitsbereich des "kubischen Gesetzes" und Konsequenzen für die mathematische Modellierung

Annahmen und Voraussetzungen	Konsequenzen
- Problem ist nulldimensional	- keine lokale Verteilungen
- Brenngas/Luft-Gemisch ist ideal homogen	- Reaktionskinetik geschwindigkeitsbestimmung
- Strömung ist ruhend, Behälter ist geschlossen	- Navier-Stokes-Gleichungen entfallen, kein Stofftransport
- Flammenfront ist ideal sphärisch, Flammenausbreitung ist laminar	- kein Stofftransport durch die Flammenzone, kein Turbulenzmodell
- Flammenfront ist von vernachlässigbarer Dicke	

Schließlich bleibt eine integrale Energiebilanz für den geschlossenen Behälter, welche unter Berücksichtigung der in Tabelle 3 dargestellten Vereinfachungen lautet

$$m_G c_{V,G} (dT/dt) = H_{o,Br} (dm_{Br}/dt) \quad (4)$$

Während der Index G die dem Brenngas/Luft-Gemisch zugeordneten Größen bezeichnet, charakterisiert der Index Br die Parameter des Brenngases. Ersetzt man die unbekannte Temperatur T unter der Annahme einer isochoren Zustandsänderung durch den Druck p so erhält man

$$m_G c_{V,G} (T_i/p_i) (dp/dt) = H_{o,Br} (dm_{Br}/dt) \quad (5)$$

Der Index i bezeichnet hier den Anfangszustand. Gl. (5) sagt dann die bekannte Tatsache aus, daß der zeitliche Druckanstieg unter den oben genannten Bedingungen proportional der Wärmefreisetzung durch die Verbrennungsreaktion ist.

Der Umsatz an Brenngas pro Zeit läßt sich für das Zwei-Zonen-Modell durch eine Kontinuitätsgleichung ausdrücken.

$$(dm_{Br}/dt) = \rho_{Br} A_{Fl} S_L \quad (6)$$

worin  $A_{Fl}$  die Oberfläche des "Flammenballes" und  $S_L$  die laminare Verbrennungsgeschwindigkeit sind. Letztere ist eine im wesentlichen von den chemischen Eigenschaften des Brenngas/Luft-Gemisches abhängige Größe.

Wird die Masse des Gemisches  $m_G$  nun ersetzt durch  $m_G = \rho_G V$ , so ergibt sich schließlich aus Gl. (5)

$$\rho_G c_{V,G} V (T_i/p_i) (dp/dt) = H_{o,Br} \rho_{Br} A_{Fl} S_L \quad (7)$$

Gl. (7) muß selbstverständlich für kugelförmige Explosionsbehälter beliebiger Größe gelten. Es ergibt sich daraus

$$\left[ \frac{\rho_G c_{V,G} V (T_i/p_i) (dp/dt)}{H_{o,Br} \rho_{Br} A_{Fl} S_L} \right]_1 = \left[ \frac{\rho_G c_{V,G} V (T_i/p_i) (dp/dt)}{H_{o,Br} \rho_{Br} A_{Fl} S_L} \right]_2 \quad (8)$$

Die Indizes 1 und 2 in Gl. (8) deuten Behälter verschiedener Größe an. Handelt es sich dabei jeweils um das gleiche Brenngas/Luft-Gemisch, so lassen sich alle Stoffgrößen in Gl. (7) kürzen. Hierzu zählt auch die laminare Verbrennungsgeschwindigkeit  $S_L$ . Werden darüber hinaus in den Behältern 1 und 2 gleiche Anfangsbedingungen eingehalten, so bleibt schließlich

$$\frac{V_1}{A_{Fl,1}} \frac{dp}{dt} = \frac{V_2}{A_{Fl,2}} \frac{dp}{dt} \quad (9)$$

Als Maß für die Explosionswirkungen sicherheitstechnisch interessant ist das Maximum des zeitlichen Druckanstiegs. Wie aus Gl. (7) hervorgeht, wird es dann eintreten, wenn die Oberfläche der Flammenfront ebenfalls ihren Maximalwert eingenommen hat, d.h. wenn die Flamme die innere Wandung des Behälters gerade erreicht, ohne daß es bereits zu einem Wärmeverlust durch die Behälterwand gekommen ist.

Der Quotient aus Behältervolumen  $V_B$  und innerer Behälteroberfläche  $A_B$  beträgt für eine Kugel nun gerade

$$V_B/A_B = r_B/3 \quad (10)$$

Somit erhält man aus Gl. (9)

$$(dp/dt)_1 r_{B,1} = (dp/dt)_2 r_{B,2} \quad (11)$$

beziehungsweise ausgedrückt durch das Behältervolumen

$$(dp/dt)_1 V_1^{1/3} = (dp/dt)_2 V_2^{1/3} = \text{const.} \quad (12)$$

Eine analoge Ableitung dieses Zusammenhangs ist bereits in der Arbeit von Heinrich [13] enthalten. In [21] konnte gezeigt werden, daß das kubische Gesetz auch dann abgeleitet werden kann, wenn die Energiegleichung (5) noch um einen Term für den Wärmeverlust durch Konvektion erweitert wird.

Die sich aus Gl. (12) ergebende Konstante wird in der Literatur häufig als "dimensionslose Druckanstiegsgeschwindigkeit"  $K_G$  bezeichnet, wobei der Index G andeutet, daß es sich um einen für ein brennbares Gas gefundenen Wert handelt. Unter den in Tabelle 3 zusammengefaßten Voraussetzungen - und nur unter diesen - kann  $K_G$  durchaus als stoffspezifische Konstante angesehen werden.

Aus der Kenntnis des  $K_G$ -Wertes von homogenen Brenngas/Luft-Gemischen und aus gasdynamischen Beziehungen zum Ausströmvorgang aus Öffnungen zur Druckentlastung hat Heinrich in [13] Beziehungen zur Berechnung des Flächenbedarfs von Entlastungsöffnungen abgeleitet, auf deren Grundlage die heute weit verbreiteten Nomogramme zur Druckentlastung explosionsgefährdeter Anlagen beruhen, s. VDI-Richtlinie 3673 [22].

Die schlüssige Ableitung in der Arbeit von Heinrich und die gute Handhabbarkeit dieser Beziehungen und Nomogramme

fürten Bartknecht [20] zu der Überlegung, die für Gasexplosionen geltenden Gesetze auch auf Staubexplosionen anzuwenden. Analog zum  $K_G$ -Wert definierte Bartknecht einen  $K_{St}$ -Wert, der als das Produkt aus maximalem zeitlichen Druckanstieg einer Staubexplosion und der dritten Wurzel des Behältervolumens definiert ist.

Der  $K_{St}$ -Wert dient dann als Maß für die Reaktionsfreudigkeit eines explosionsfähigen Staub/Luft-Gemisches und führt zur Einteilung brennbarer Stäube in Explosionsklassen gemäß der VDI-Richtlinie 2263 [23].

Der  $K_{St}$ -Wert hat sich im praktischen Explosionsschutz durchgesetzt als wesentlicher Parameter für die Dimensionierung von Entlastungsflächen für die Druckentlastung von Staubexplosionen [22]. Es muß anerkannt werden, daß er damit eine hilfreiche sicherheitstechnische Kenngröße ist.

Dennoch sollten einige Aspekte, die das dem  $K_{St}$ -Wert zugrundeliegende gedankliche Konzept in Frage stellen, nicht übersehen werden. Dafür sei nochmals auf die in Tabelle 3 enthaltenen Voraussetzungen für die Herleitung des  $K_G$ -Wertes verwiesen. Der  $K_G$ -Wert gilt demnach exakt für die Ausbreitung einer laminaren Flamme vernachlässigbarer Dicke in einem ideal homogenen, ruhenden Brenngas/Luft-Gemisch in sphärischer Geometrie. Nur dann ist er ein Maß für die Reaktionsfreudigkeit eines Brenngases. Anderenfalls treten Effekte auf, die den Reaktionsverlauf in mit einfachen Mitteln nicht mehr quantifizierbarer Weise beeinflussen.

Verbrennungsreaktionen von dispergiertem Staub in Luft vollziehen sich, soweit heute bekannt ist, nach einem anderen Mechanismus als Gasreaktionen. Während bei Reaktionen in homogenen Brenngas/Luft-Gemischen die chemische Kinetik als der geschwindigkeitsbestimmende Schritt angesehen wird, ist für die Oxidation von Feststoffpartikeln der Transport des Sauerstoffs an die Phasengrenze (Partikeloberfläche) maßgebend. Damit sind bei der Staubverbrennung nicht mehr kinetische - und damit weitgehend stoffspezifische - sondern die Transportvorgänge bestimmende, also strömungsmechanische und granulometrische Parameter entscheidend für den Reaktionsablauf. Die Reaktionsrate als Maß für den zeitlichen Druckverlauf kann unter diesen Bedingungen nicht mehr als Funktion stoffspezifischer Größen angesehen werden.

Üblicherweise wird der  $K_{St}$ -Wert eines explosionsfähigen Staub/Luft-Gemisches in einer Explosionsapparatur experimentell ermittelt. Zur Erzeugung einer Staubdispersion wird eine Staubschüttung aus einem Vorratsgefäß mittels Druckstoß in den Explosionsbehälter eingeblasen. Diese Art und Weise der Erzeugung einer Staubdispersion in Luft wird als das sogenannte Normeinblaseverfahren bezeichnet, siehe [20], [22] und [23].

Es kann dann allerdings keinesfalls von einem ruhenden Gemisch ausgegangen werden. Durch den Einblasevorgang werden im Explosionsgefäß Turbulenzzustände erzeugt, die bisher nicht quantitativ ausgewertet werden konnten. Die dem "kubischen Gesetz" zugrunde liegende Bedingung der Homogenität des Brennstoff/Luft-Gemisches ist damit ebenfalls nicht erfüllt. Um zu einem wenigstens einigermaßen reproduzierbaren Turbulenzzustand zu gelangen, wurde von Bartknecht [20] eine sogenannte Zündverzögerungszeit eingeführt. Darunter wird hier allerdings nicht wie ansonsten üblich die Zeit zwischen dem Einsetzen der thermischen Störung und dem Beginn eines merklichen Anstiegs der Reaktionsrate verstanden. Im Sinne der experimentellen Unter-

suchung von Staubexplosionen ist die Zündverzögerungszeit die Zeit zwischen dem Beginn des Einblasens der Staubschüttung in den Explosionsraum nach dem Normverfahren und der Zündung des Staub/Luft-Gemisches durch einen pyrotechnischen Zünder.

Die Zündverzögerungszeit wurde für einen  $1\text{ m}^3$ -Explosionsbehälter so festgelegt, daß der Explosionsraum möglichst vollständig mit Staub ausgefüllt ist, aber die Sedimentation der Staubpartikeln noch nicht merklich eingesetzt hat.

Bartknecht [20] fand eine für seine Zwecke geeignete Zündverzögerungszeit durch visuelle Beobachtung des Ausblasevorganges.

In der VDI-Richtlinie 2263 [23] ist festgelegt, daß als  $K_{St}$ -Wert eines explosionsfähigen Staub/Luft-Gemisches jener Wert anzusehen ist, der unter diesen genau definierten Bedingungen experimentell ermittelt wurde. In [20] hat Bartknecht Diagramme für die Abhängigkeit des  $K_{St}$ -Wertes von der Zündverzögerungszeit im  $1\text{ m}^3$ -Behälter angegeben. Es zeigte sich, daß der zeitliche Druckanstieg bei kleinen Zündverzögerungszeiten, d.h. bei intensiver Wirbelbewegung, wesentlich höher ist als bei größeren Zündverzögerungszeiten.

Darüber hinaus hängt die Ausformung des Staub/Luft-Gemisches sehr stark von der Behältergeometrie und den übrigen Versuchsbedingungen ab. Eckhoff hat in [24] gemessene  $K_{St}$ -Werte verschiedener Autoren für Maisstärke/Luft-Gemische zusammengefaßt. Die Meßdaten streuen dabei von  $3\text{ bar m s}^{-1}$  in einem  $26\text{ l}$ -Gefäß bis  $209\text{ bar m s}^{-1}$  in einem  $6,7\text{ m}^3$ -Behälter, d.h. um nahezu zwei Größenordnungen. Die Erfahrung zeigt, daß der  $K_{St}$ -Wert selbst unter völlig gleichen Versuchsbedingungen nur mit ca. 30 bis 40 % Fehler zu reproduzieren ist, siehe [25].

Der zeitliche Druckanstieg bei Explosionen von Staub/Luft-Gemischen hängt also nachweisbar in erster Linie von der Strömungsform und dem Turbulenzfeld ab. Die Reaktionskinetik ist hier nur von untergeordneter Bedeutung. Deshalb läßt sich dieser zeitliche Druckanstieg auch nicht als Funktion stoffspezifischer Parameter angeben.

Damit ist klar, daß das dem  $K_G$ -Wert zugrunde liegende gedankliche Konzept sich aus prinzipiellen Gründen nicht auf einen  $K_{St}$ -Wert übertragen läßt. Es ist deshalb nicht sinnvoll, experimentellen Aufwand zur Verbesserung der Reproduzierbarkeit des  $K_{St}$ -Wertes zu betreiben. Die dadurch gewonnenen Ergebnisse sind aus den oben genannten Gründen ohnehin nicht auf andere geometrische Anordnungen übertragbar.

Es ist die Aufgabe der Forschung auf dem Gebiet des Staubexplosionsschutzes, den  $K_{St}$ -Wert zu gegebener Zeit durch eine oder mehrere die tatsächlichen physikalischen Verhältnisse widerspiegelnde Kenngrößen abzulösen.

### 3.3 Herleitung eines zweidimensionalen Modells

In Abschnitt 3.1 wurde auf die Schwierigkeiten hingewiesen, die die Arbeit mit den bestestimate-Modellen hinsichtlich des numerischen und zeitlichen Aufwandes bereitet. Im Abschnitt 3.2 wurde hingegen gezeigt, daß stark vereinfachte Modelle den komplizierten physikalischen Prozess einer Explosion nicht realistisch wiedergeben können. Die Zweckbestimmung des im folgenden vorgestellten Modells besteht deshalb darin,

- i) die zeitliche Entwicklung von chemischen Reaktionen in Strömungsfeldern mit hinreichender Genauigkeit zu berechnen,
- ii) eine große Anzahl von Programmläufen in kurzer Zeit und auf herkömmlichen Rechenanlagen zu ermöglichen, um den Einfluß physikalischer und geometrischer Bedingungen auf den Explosionsvorgang durch "numerische Experimente" zu klären.

Während der Punkt i) ein möglichst genaues Modell erfordert, erlegt der Punkt ii) dem aufzustellenden Rechenprogramm Beschränkungen auf. Folgende vereinfachende Annahmen werden deshalb getroffen:

- i) das Strömungsfeld ist zweidimensional,
- ii) es werden nur die Spezies Brennstoff und Sauerstoff betrachtet.

Der Vektor der abhängigen Variablen  $\Phi$  aus Gl. (1) vereinfacht sich dadurch zu

$$\Phi = [\rho, \rho u, \rho v, \rho h, C_{Br}, C_{O_2}]^T \quad (13)$$

und das Gleichungssystem (1) enthält dann nur noch sechs Bilanzgleichungen. Das hier verwendete vollständige Gleichungssystem für den zweidimensionalen Massen-, Energie-, Impuls- und Speziestransport ist in Anhang 1 enthalten.

Die dort angeführten Gleichungen enthalten allerdings noch Terme, von denen zu erwarten ist, daß sie keinen Einfluß auf den Ablauf einer Explosion ausüben.

Die Größen  $F_x$  und  $F_y$  in den Impulsbilanzen Gln. (A1-4) und (A1-5) bezeichnen die Komponenten der äußeren Kräfte auf das betrachtete System längs der Wirkungslinien in x- beziehungsweise y-Richtung. Im allgemeinen wird dies lediglich die Auftriebskraft heißer Gase sein, welche jedoch im Falle von Explosionen keine Rolle spielt.

Die Energietransportgleichung (A1-6) enthält auf der rechten Seite Terme, die den Wärmetransport durch Wärmeleitung beschreiben. Als Beispiel für die mögliche Vereinfachung der Transportgleichungen soll nun abgeschätzt werden, ob die Wärmeleitung im Brennstoff/Luft-Gemisch für den Explosionsvorgang von Bedeutung ist. Hierfür werden die Relaxationszeiten für die Einstellung des thermischen Gleichgewichts verschiedener Transportvorgänge verglichen. Dies sei am Beispiel der Relaxationszeiten für den Wärmetransport durch Wärmeleitung und durch erzwungene Konvektion näher ausgeführt.

Der Anteil der Wärmeleitung an einer Erhöhung der Temperatur des Mediums im betrachteten Volumenelement  $dV$  betrage für örtlich konstante Transportkoeffizienten

$$\frac{\delta T}{\delta t} = \frac{\delta}{\delta x} \left( a \frac{\delta T}{\delta x} \right) \quad (14)$$

Für einen kleinen Bereich  $\Delta x$  vor der Reaktionsfront wird näherungsweise der Temperaturverlauf nach Abb. 4 angesetzt.  $T_F$  ist dabei die Temperatur in der Flammenfront,  $T_0$  die Temperatur des unverbrannten Gases. Die zweite Ableitung der Temperatur nach dem Ort lautet dann näherungsweise

$$\frac{\delta^2 T}{\delta x^2} = \frac{2}{\Delta x^2} (T_F - T_0) \quad (15)$$

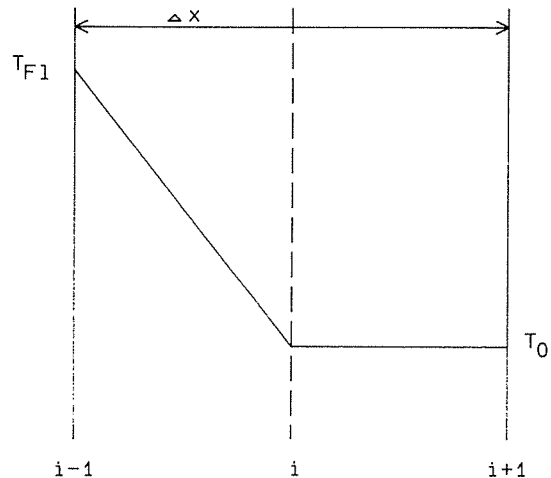


Abb. 4  
Idealisierter Temperaturverlauf vor der Flammenfront zur Abschätzung von Relaxationszeiten des Wärmetransports

Die Temperaturerhöhung im Bereich  $x$  soll von der Temperatur des unverbrannten Gases auf die Flammentemperatur innerhalb eines kleinen Zeitintervalls  $t$  erfolgen.

$$\frac{\delta T}{\delta t} = \frac{T_F - T_0}{\Delta t} \quad (16)$$

Die diskretisierte Bilanzgleichung lautet dann schließlich

$$\frac{T_F - T_0}{\Delta t} = \frac{2a}{\Delta x^2} (T_F - T_0) \quad (17)$$

Das Zeitintervall zum Erreichen der Flammentemperatur am Punkt  $i$  in Abb.4, d.h. die Relaxationszeit des thermischen Gleichgewichts bei Wärmeleitung ergibt sich dann zu

$$\Delta t_{WL} = \frac{\Delta x^2}{2a} \quad (18)$$

Analog wird nun zur Bestimmung der Relaxationszeit für die Einstellung des thermischen Gleichgewichts durch konvektiven Transport angesetzt

$$\frac{\delta T}{\delta t} = -u \frac{\delta T}{\delta x} \quad (19)$$

mit  $u$  als Strömungsgeschwindigkeit längs der hier betrachteten Koordinate  $x$ . Die Diskretisierung von Gl. (19) ergibt

$$\frac{T_F - T_0}{\Delta t_K} = u \frac{T_F - T_0}{\Delta x} \quad (20)$$

Daraus folgt für die Relaxationszeit bei Konvektion  $\Delta t_K$  nach Abb. 4

$$\Delta t_K = \frac{\Delta x}{2u} \quad (21)$$



Nun können die Relaxationszeiten für die beiden Transportphänomene verglichen werden.

$$\frac{\Delta t_k}{\Delta t_{WL}} = \frac{2a}{\Delta x \cdot u} \quad (22)$$

Gl. (22) entspricht formal der Fourier-Zahl mit der charakteristischen Länge  $\Delta x/2$ . Tabelle 4 enthält die Fourier-Zahl in Abhängigkeit von einer angenommenen Strömungsgeschwindigkeit. Der Temperaturleitkoeffizient  $a$  wurde mit  $2 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  angesetzt, die Entfernung  $x$  soll  $0,01 \text{ m}$  betragen.

Aus *Tabelle 4* geht hervor, daß bei einer Strömungsgeschwindigkeit von  $0,001 \text{ ms}^{-1}$  der Temperaturausgleich durch Konvektion über die Distanz von einem Zentimeter viermal langsamer erfolgt als durch Wärmeleitung. Schon bei einer Strömungsgeschwindigkeit von  $0,1 \text{ ms}^{-1}$  bewegt sich jedoch die Flammenfront durch Konvektion fünfundsanzigmal schneller vorwärts, als wenn reine Wärmeleitung vorläge.

*Tabelle 4*  
Abhängigkeit der Fourier-Zahl von der Strömungsgeschwindigkeit

u m/s	0,001	0,01	1,0	10	100
Fo	4	0,4	0,04	0,0004	0,00004

In Anbetracht der zu erwartenden Verhältnisse bei einer Explosion kann somit davon ausgegangen werden, daß der Energietransport durch Wärmeleitung gegenüber dem konvektiven Anteil schon bei kleinen Strömungsgeschwindigkeiten vernachlässigt werden kann. Gleichung (A1-6) in Anhang 1 vereinfacht sich damit durch Wegfall der Glieder zweiter Ordnung.

Das nun übriggebliebene Gleichungssystem lt. Anhang 1 bildet die Grundlage für das im weiteren betrachtete Modell, dessen mathematische Schließung durch die Einführung konstitutiver Gesetze im nächsten Abschnitt beschrieben wird.

## 4. Die konstitutiven Gleichungen

### 4.1. Turbulenzansätze

Das aus Anhang 1 hervorgehende System der Bilanzgleichungen erlaubt noch keine mathematisch geschlossene Lösung. Hierfür sind weitere Gleichungen erforderlich, die die Quellterme und die thermophysikalischen Stoffeigenschaften beschreiben. Diese Beziehungen werden konstitutive Gesetze genannt.

Für die Wirkungen und den zeitlichen Ablauf einer Explosion sind vor allem zwei Effekte maßgebend:

- i) der Turbulenzzustand der Strömung und
- ii) der Reaktionsmechanismus.

Beide Effekte beeinflussen sich gegenseitig. In den Bilanzgleichungen ist der Turbulenzzustand in den Transportkoeffizienten enthalten, während der Reaktionsmechanismus in der zeitabhängigen Reaktionsrate in Gl. (A1-7) beziehungsweise in der Queldichte der freigesetzten Reaktionswärme in Gl. (A1-6) auftritt.

Zur Beschreibung der turbulenten Transportvorgänge geht man im allgemeinen von der Vorstellung aus, daß zu den molekularen Transportkoeffizienten ein entsprechender turbulenter Anteil hinzuaddiert werden kann. Für die kinematische Zähigkeit erhält man beispielsweise

$$\nu_{\text{eff}} = \nu_l + \nu_t \quad (23)$$

worin  $\nu_l$  die laminare, kinematische Zähigkeit bedeutet.  $\nu_t$  hingegen ist die sogenannte Wirbelzähigkeit, welcher die modellhafte Vorstellung zugrunde liegt, daß die Wirbelbewegung ähnlich wie die molekulare Reibung behandelt werden kann. Im Gegensatz zur laminaren, kinematischen Zähigkeit ist die Wirbelzähigkeit allerdings keine stoffspezifische Größe, sondern abhängig von den Turbulenzparametern.

$$\nu_t = u' l \quad (24)$$

In Gl. (24) bedeuten  $u'$  die mittlere Schwankung der Geschwindigkeitskomponente  $u$  und  $l$  den charakteristischen Längenmaßstab eines Wirbels. Voraussetzung für die Gültigkeit von Gl. (24) ist ein homogenes, isotropes Wirbelfeld. Zur Ermittlung der Wirbelzähigkeit sind somit die Schwankungsgeschwindigkeiten und die charakteristischen Längen der Wirbel zu bestimmen. Hierfür haben sich zwei Verfahren durchgesetzt:

- i) das Wirbelzerfallskonzept (eddy-break-up model),
- ii) die Berechnung von Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen (probability density functions, pdf).

Die meisten Rechenprogramme zur Simulation turbulenter Verbrennungsvorgänge enthalten das eddy-break-up-Modell, welches gegenüber dem pdf-Ansatz den Vorteil relativer Einfachheit in Bezug auf die Anzahl der freien Parameter aufweist. Auch wenn dieses Modell im weiter unten beschriebenen Rechenprogramm CHARLES momentan noch nicht enthalten ist, sei es an dieser Stelle kurz beschrieben.

Das Wirbelzerfallskonzept wird häufig als sogenanntes Zwei-Gleichungs-Modell realisiert, wobei die zwei abhängigen Variablen die kinetische Energie eines Wirbels  $k$  sowie deren

Dissipationsrate  $\epsilon$  sind. Im folgenden wird das Zwei-Gleichungs-Modell kurz als  $k$ - $\epsilon$ -Modell bezeichnet.

Durch Einführung dieser beiden Größen kann nun analysiert werden, in welcher Weise energiereiche Makrowirbel (large eddies) zerfallen und dabei kinetische Energie dissipieren. Der Zeitmaßstab ist somit die Zerfallszeit der Makrowirbel, der Längenmaßstab ihr mittlerer Durchmesser. Es sei nochmals angemerkt, daß diese Annahmen nur für das homogene, isotrope Wirbelfeld gelten.

Wie von Shih und Mansour in [28] beschrieben, läßt sich die turbulente Schwankungsgeschwindigkeit  $u'$  als Funktion der kinetischen Energie des Wirbels ausdrücken, während der Längenmaßstab des Wirbels zusätzlich noch von der Dissipationsrate  $\epsilon$  abhängt. Für die Wirbelzähigkeit ergibt sich schließlich

$$\nu_t = C_D k^2 / \epsilon \quad (25)$$

mit  $C_D$  als einer empirischen Konstanten. Gl. (25) wird zum Beispiel auch von Hjertager in [1] verwendet.

Das Problem ist nunmehr zurückgeführt auf die Bestimmung der kinetischen Energie des Wirbels sowie deren Dissipationsrate. Beim  $k$ - $\epsilon$ -Modell werden für diese Größen nun ebenfalls Bilanzgleichungen angesetzt, die der Form der Gl. (1) entsprechen. Im einzelnen ergeben sich die im Anhang 2 dargestellten Gleichungen, siehe auch [1], [28] und [29].

Obwohl das  $k$ - $\epsilon$ -Modell weit verbreitet ist und für viele Probleme turbulenter Strömungen erfolgreich eingesetzt wird, weist es dennoch Besonderheiten auf, die nicht außer acht gelassen werden sollten. Beim Einsatz des  $k$ - $\epsilon$ -Modells entstehen gewisse Schwierigkeiten bei Strömungen mit kleinen Reynoldszahlen. Dies betrifft einerseits das Übergangsgebiet vom laminaren zum turbulenten Fließen in der Grundströmung als auch andererseits die wandnahen Bereiche in vollausgebildeter turbulenter Strömung.

Im Fall einer Explosionsausbreitung in einem zunächst ruhenden Brennstoff/Luft-Gemisch entsteht die Strömung durch lokale Druckunterschiede, die von der Explosion hervorgerufen werden. In diesem Fall durchläuft die Strömungsgeschwindigkeit von null beginnend zunächst den laminaren Bereich und dann das Übergangsgebiet laminar zu turbulent.

Das  $k$ - $\epsilon$ -Modell erfordert hingegen die Vorgabe einer Anfangsturbulenz, deren Niveau abgeschätzt werden muß, siehe [1]. Die Strömung wird dann als von Beginn an turbulent betrachtet. Dies führt dazu, daß der Explosionsablauf als wesentlich schneller berechnet wird, als es den tatsächlichen Verhältnissen entspricht (siehe auch Abschnitt 7).

Eine beträchtliche Zahl von Arbeiten zur Turbulenzmodellierung befaßt sich wegen der erwähnten Schwierigkeiten mit der Modifikation des  $k$ - $\epsilon$ -Modells für kleine Reynoldszahlen, siehe [28], [29], [30] und [31].

### 4.2. Die Reaktionsrate

Im Falle eines Explosionsvorganges liefert die Wärmefreisetzung durch die chemische Reaktion den entscheidenden Beitrag zur Störung des thermodynamischen und mechanischen Gleichgewichts. Die realistische numerische Simulation dieser Prozesse setzt deshalb ein geeignetes Modell für die Reaktionsrate voraus.

Um den in der Umgebung der Flammenfront auftretenden großen Temperaturgradienten direkt zu berechnen, wären Gitterschritt-weiten des numerischen Schemas notwendig, die um etwa eine Größenordnung kleiner als die Dicke der Flammenfront sind. Bei den in technischen Anlagen üblichen Abmessungen müßte die numerische Integration dann über eine Anzahl von Ortsschritten erfolgen, die rechentechnisch nicht zu verkraften wäre. Eine direkte numerische Erfassung des lokalen Temperaturverlaufes in der Umgebung der Flammenfront ist daher unzumutbar. Das gilt selbst für adaptive Gitter.

In diesem Abschnitt seien zwei Wege zur Modellierung der Reaktionsrate unter Umgehung dieser Schwierigkeit angegeben: erstens eine Methode, die unmittelbar aus dem  $k$ - $\epsilon$ -Modell folgt und zweitens ein vereinfachtes Verfahren, welches auf geometrischen Beziehungen zur Berechnung der Flammenkontur beruht.

Während der erstgenannte Ansatz zusammen mit dem  $k$ - $\epsilon$ -Modell eine geschlossene Darstellung des Reaktionsmechanismus aus den Turbulenzparametern erlaubt und deshalb mit vergleichsweise wenigen Annahmen und Vereinfachungen auskommt, wird beim zweiten Ansatz die Lösung der Bilanzgleichungen (A2-1) und (A2-2) eingespart und damit der Rechenaufwand erheblich reduziert. In diesem Fall sind dann allerdings die verwendeten empirischen Gleichungen mit größeren Unsicherheiten hinsichtlich ihres Gültigkeitsbereiches behaftet.

Der Bestimmung der Reaktionsrate aus dem  $k$ - $\epsilon$ -Modell liegt die Überlegung zugrunde, daß bei turbulenten Verbrennungsprozessen der Stofftransport an die "Reaktionsoberfläche" der geschwindigkeitsbestimmende Schritt ist. Die Reaktionsrate hängt so in erster Linie vom Turbulenzzustand des reagierenden Systems ab.

Spalding [2] geht z. B. von der Vorstellung aus, daß sich auch bei ursprünglich homogenen Stoffgemischen durch den turbulenten Transport "Ballen" von unverbranntem Brennstoff, Sauerstoff und Verbrennungsprodukten bilden und somit eine heterogene Konzentrationverteilung entsteht.

Für das  $k$ - $\epsilon$ -Modell berechnen Magnussen und Hjertager [32] den zeitlichen Stoffumsatz aus

$$C_k = - \frac{\epsilon}{k} C_k \quad (26)$$

wobei für  $C_k$  jeweils die Konzentration der den Reaktionsablauf limitierenden Spezies einzusetzen ist.  $C_3$  ist eine hier nicht näher spezifizierte Konstante.

In [1] berücksichtigt Hjertager die Spezies Brennstoff, Sauerstoff und Reaktionsprodukte.

Die Berechnung der Reaktionsrate aus den Turbulenzparametern  $\epsilon$  und  $k$  erfordert noch die Angabe eines Kriteriums für die Zündung beziehungsweise das Erlöschen des Brennstoff/Luft-Gemisches. Das Kriterium für die Zündung ist nach Hjertager [1] beziehungsweise Hjertager u. a. [26] erfüllt, wenn die Lebensdauer eines Makrowirbels größer ist als die Induktionszeit der chemischen Reaktion. Die mittlere Lebensdauer eines Wirbels ist dabei

$$t_o = l/u' \quad (27)$$

Aus Abschnitt 4.1 geht hervor, daß Gl. (27) sich in Werten von  $k$  und  $\epsilon$  ausdrücken läßt.

$$t_o = C_4 k/\epsilon \quad (28)$$

worin  $C_4$  wiederum eine in Anpassung an Vergleichsmessungen gefundene Konstante ist.

Die Induktionszeit der chemischen Reaktion kann aus

$$t_{ch} = k_o^{-1} C_{Br}^a C_{O_2}^b \exp[-E/(RT)] \quad (29)$$

berechnet werden.

Mit Hilfe der Gleichungen (26) bis (29) läßt sich nun die Reaktionsrate aus den Turbulenzparametern  $k$  und  $\epsilon$  eindeutig bestimmen.

Um numerischen Aufwand zu vermindern und die oben erwähnten Schwierigkeiten des  $k$ - $\epsilon$ -Modells bezüglich kleiner Reynoldszahlen zu umgehen, wird im folgenden ein Ansatz vorgestellt, der auf einer Analyse der geometrischen Form der Flammenfront beruht. Ein solches Verfahren geht zurück auf Dery, zitiert in [11], der unter der Voraussetzung eines bekannten Profils der Strömungsgeschwindigkeit die Form laminarer Flammen über der Öffnung eines Brenners untersuchte. Die dem Verfahren zugrunde liegenden Überlegungen sind in [27] dargestellt und seien hier nur kurz skizziert.

Für die numerische Lösung der Gleichungen (A1-3) bis (A1-7) wird die zu untersuchende geometrische Anordnung in diskrete Abschnitte (Maschen) unterteilt (siehe Abschnitt 5). Die Reaktionsrate einer Spezies  $k$  innerhalb einer dieser Maschen wird bestimmt durch die Masse an Spezies  $k$ , die in die Flammenzone hineintransportiert wird beziehungsweise - im Umkehrschluß dazu - durch die Vorwärtsbewegung der Flammenfront in die Zone unverbrannten Mediums.

Die Reaktionsrate wird dann ausgedrückt durch

$$\frac{dm_k}{dt} = C_k \frac{dV_{Fl}}{dt} \quad (30)$$

worin  $V_{Fl}$  das Volumen ist, welches von der Flamme innerhalb eines Volumenelements  $dV$  eingenommen wird. Für den zweidimensionalen Fall, der hier betrachtet werden soll, erhält man

$$\frac{dC_k}{dt} = \frac{C_k}{\Delta x \Delta y} \frac{dA_{Fl}}{dt} \quad (31)$$

wobei  $\Delta x$  und  $\Delta y$  die Ortsschrittweiten des Maschengitters in den entsprechenden Richtungen sind.  $A_{Fl}$  ist in diesem Fall die Fläche in der  $x$ - $y$ -Ebene, die von der Flamme innerhalb einer Masche überstrichen wird. Sie ist nicht identisch mit der Oberfläche der Flammenfront im Sinne von Abschnitt 3.2.

Die Berechnung der Reaktionsrate ist damit zurückgeführt auf die Berechnung des Fortschreitens der Flammenfront durch die betrachtete Masche (s. Abb. 5).

Die Wärmequellendichte innerhalb einer Masche wird aus der Reaktionsrate und dem Brennwert des Brennstoffs berechnet. Bei einer Reaktionsrate größer null führt die Wärmeerzeugung zu einer Anhebung der mittleren Temperatur des Mediums innerhalb der Masche. Der steile Temperaturgra-

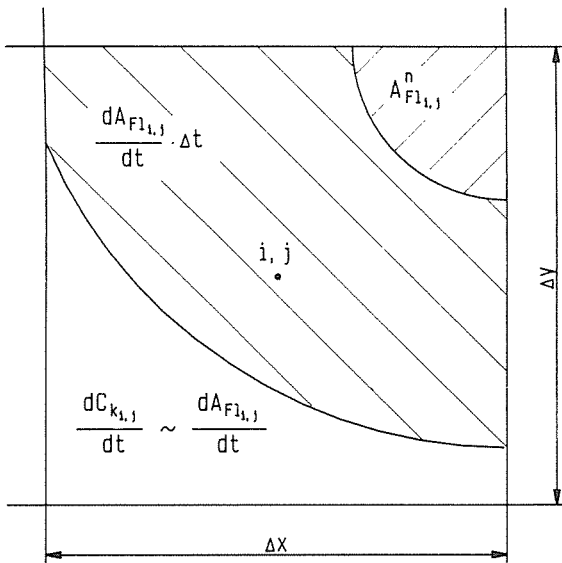


Abb. 5  
Zur Veranschaulichung der Abhängigkeit der Reaktionsrate vom Fortschreiten der Flammenfront durch eine Masche  $i, j$

dient unmittelbar vor der Flammenfront taucht damit nicht im numerischen Lösungsschema auf. Dadurch kann die eventuelle Divergenz der Lösung der Energietransportgleichung (A1-6), verursacht durch zu große Gradienten im lokalen Temperaturverlauf, vermieden werden.

Zur Berechnung der Reaktionsrate muß nun allerdings die Kontur der Flammenfront ermittelt werden. Wie in [27] dargestellt, geschieht dies hier auf folgende Weise. Zunächst wird eine "Zündzone" definiert. Deren Form hängt ab von der Art des Zündinitials. Hier sei ein Kreis mit dem Radius  $z$  betrachtet.

$z$  ist dabei ein Maß für die Energie des Zündinitials. Nun wird auf der Peripherie der "Zündzone" eine gewisse Anzahl von Punkten numeriert (s. Abb. 6). Jeder dieser Punkte bewegt sich nach der Zündung mit seiner individuellen Geschwindigkeit  $S_{pi}$

$$S_{pi} = [(dx_{ifl}/dt)^2 + (dy_{ifl}/dt)^2]^{1/2} \quad (32)$$

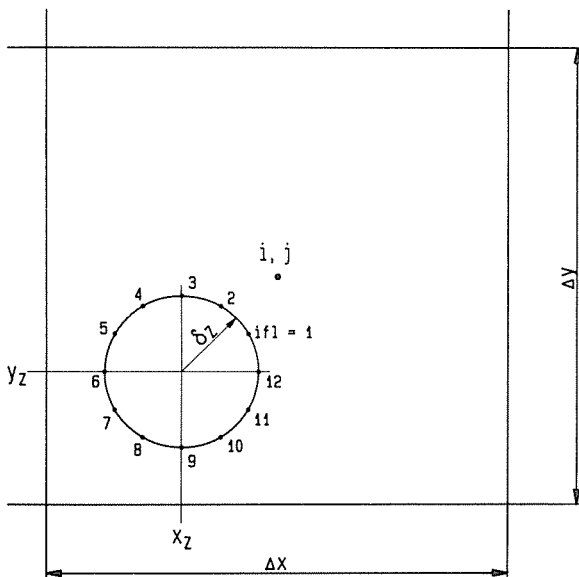


Abb. 6  
Definition einer "Zündzone" mit Peripheriepunkten

Die Geschwindigkeitskomponenten in x- beziehungsweise y-Richtung setzen sich zusammen aus den Anteilen laminare Verbrennungsgeschwindigkeit, turbulente Verbrennungsgeschwindigkeit und Strömungsgeschwindigkeit.

$$\frac{dx_{ifl}}{dt} = S_{L_{xifl}} + S_{T_{xifl}} + u_{ifl} \quad (33)$$

$$\frac{dy_{ifl}}{dt} = S_{L_{yifl}} + S_{T_{yifl}} + v_{ifl} \quad (34)$$

Die laminare und die turbulente Verbrennungsgeschwindigkeit erhält man aus empirischen beziehungsweise halbempirischen Beziehungen, z. B. aus [11], [12], [33], [34].

Hier wurden folgende Beziehungen gewählt

$$S_L = S_{L_0} \left(\frac{T_u}{T_0}\right)^2 \left(\frac{p_0}{p}\right)^{0.25} \quad (35)$$

$$S_T = c_T S_L d^{0.26} Re^{0.24} \quad (36)$$

$S_{L_0}$  ist dabei die laminare Verbrennungsgeschwindigkeit unter Standardbedingungen. Diese ist eine fundamentale charakteristische Größe für ein gegebenes Brenngas/Luft-Gemisch. Sie kann durch Messung bestimmt werden und ist für viele Brennstoff/Luft-Gemische in der Literatur tabelliert.

$T_u$  ist die Temperatur der unverbrannten, aber vorkomprimierten Gase, während  $T_0$  und  $p_0$  die Anfangstemperatur und den Anfangsdruck bedeuten.  $c_T$  stellt eine empirische Konstante dar, deren Bestimmung im Abschnitt 7 erläutert wird.

Die Strömungsgeschwindigkeiten  $u$  und  $v$  in den Gln. (33) und (34) ergeben sich aus den Lösungen der Navier-Stokes'schen Gleichungen (A1-4) und (A1-5).

Die einzelnen Anteile an der Fortpflanzungsgeschwindigkeit der Flammenfront müssen nun in ihre Komponenten längs der x- und y-Richtung aufgesplittet werden. Da die laminare Flammenausbreitung im ruhenden Medium in alle Richtungen gleichmäßig erfolgt, erhält man

$$S_{L_{xifl}} = |S_{L_{ifl}}| \cos\left(\frac{ifl}{n_{ifl}} \pi\right) \quad (37)$$

$$S_{L_{yifl}} = |S_{L_{ifl}}| \sin\left(\frac{ifl}{n_{ifl}} \pi\right) \quad (38)$$

worin  $n_{ifl}$  die Gesamtzahl aller Punkte  $i_{ifl}$  auf der Peripherie der Flammenzone ist.

Die Komponenten der turbulenten Flammengeschwindigkeit folgen aus

$$S_{T_{xifl}} = |S_{T_{ifl}}| \frac{u}{w} \quad (39)$$

$$S_{T_{yifl}} = |S_{T_{ifl}}| \frac{v}{w} \quad (40)$$

mit  $w = (u^2 + v^2)^{1/2}$ .

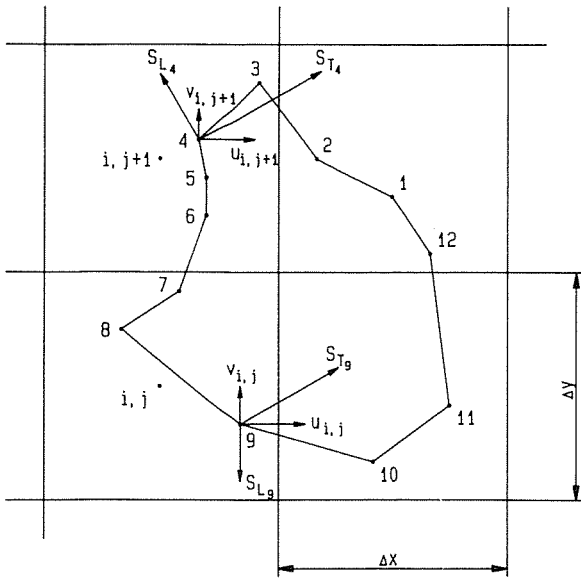


Abb. 7  
Komponenten der Geschwindigkeit der Flammenausbreitung für verschiedene Punkte auf der Flammenkontur

Auf diese Weise bewegt sich jeder Punkt  $i_n$  auf der Flammenkontur mit seiner individuellen Geschwindigkeit (s. Abb. 7).

Zur Berechnung der Reaktionsrate, d.h. zur Bestimmung der Fläche innerhalb einer Masche, die von der Flammenkontur überstrichen wird, muß nun ermittelt werden, welche Punkte  $i_n$  sich innerhalb einer Masche befinden und wo deren Nachbarn liegen.

Die Verbindungen zwischen den Punkten werden in erster Näherung als Geraden angenommen, so daß die Flammenkontur schließlich durch einen Polygonzug wiedergegeben wird. Abb. 8 zeigt als Beispiel einen Ausschnitt aus einer Flammenkontur, die die Masche  $i, j$  durchläuft. Zur Bestimmung der von der Flamme eingenommenen Fläche sind folgende Punkte zu berücksichtigen:

- 1) der Schnittpunkt der Verbindungslinie 3-4 mit dem oberen Maschenrand, Punkt 1',
- 2) die Punkte  $i_n = 4, 5$  und 6 mit den neuen Bezeichnungen 2', 3', und 4',
- 3) der Schnittpunkt der Verbindungslinien 6-7 mit dem unteren Maschenrand, Punkt 5',

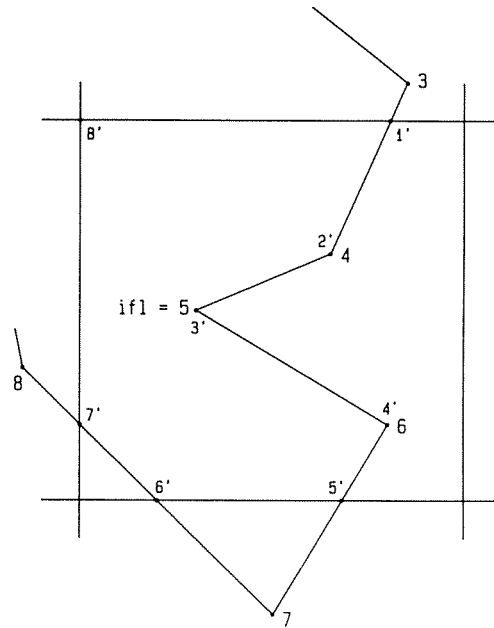


Abb. 8  
Darstellung der Punkte auf der Flammenkontur, die in der Masche  $i, j$  berücksichtigt sind.

- 4) die Schnittpunkte der Verbindungslinie 7-8 mit dem unteren und dem linken Maschenrand, Punkte 6' und 7',
- 5) die linke obere Ecke, Punkt 8'.

Zusätzlich ist ein Punkt 9' zu definieren. Dieser Punkt erhält die Koordinaten von Punkt 1', womit eine geschlossene Kontur erzeugt wird.

Wenn dem unteren Maschenrand der Wert  $y_{\min}$  zugewiesen wird, ergibt sich die von der Flamme überstrichene Fläche in der Masche  $i, j$  schließlich zu

$$A_{n_{ij}} = \sum_{n=1}^{8'} [-(y_n + y_{n+1}) - y_{\min}] (x_n - x_{n+1}) \quad (41)$$

Verläuft die Flammenkontur durch eine Masche, die keinen der Punkte  $i_n$  enthält, so werden in der Nähe der Schnittpunkte der Flammenkontur mit den Maschenrändern "virtuelle" Punkte auf der Flammenkontur erzeugt. Die Fläche  $A_{n_{ij}}$  in dieser Masche wird dann mit Hilfe dieser "virtuellen" Punkte berechnet. Deren Bewegung durch das Strömungsfeld wird allerdings nicht beobachtet. Hierfür werden nur die ursprünglich festgelegten Punkte  $i_n$  verwendet.

## 5. Ein einfaches numerisches Lösungsverfahren

### 5.1. Ein modifizierter Lax-Wendroff-Ansatz

Zur numerischen Lösung des Differentialgleichungssystems (1) gibt es die Möglichkeit entweder ein implizites oder ein explizites Diskretisierungsschema für die partiellen Differentiale zu verwenden. Beim impliziten Schema werden die Ortsableitungen mit den abhängigen Variablen zum aktuellen Zeitschritt gebildet. Es ergibt sich dann ein simultan zu lösendes algebraisches Gleichungssystem, dessen Größe von der Anzahl der verwendeten Bilanzgleichungen und der Anzahl der verwendeten Gittermaschen abhängt. Bei sechs unbekannt Zustandsparametern, wie es dem in Anhang 1 dargestellten Gleichungssystem entspricht, und einem Maschennetz von 100 Maschen in jeder der beiden betrachteten Raumrichtungen sind dann pro Zeitschritt 60.000 Unbekannte zu ermitteln. Es ergibt sich damit ein beträchtlicher numerischer Aufwand durch die notwendigen Operationen mit großen Matrizen.

Der Vorteil impliziter Lösungsverfahren für partielle Differentialgleichungen besteht darin, daß die Schrittweite der Zeitintegration im Prinzip nicht limitiert ist. Sie kann nach der gewünschten Genauigkeit der Wiedergabe des physikalischen Geschehens festgelegt werden, unterliegt aber keinen Einschränkungen hinsichtlich der numerischen Stabilität.

Explizite Diskretisierungsschemata berechnen die gesuchten Zustandsparameter zum aktuellen Zeitschritt ausschließlich aus den bekannten Verteilungen vom vorangegangenen Zeitschritt. Die unbekannt Verteilungen lassen sich somit schrittweise errechnen. Die Anzahl der zu lösenden Gleichungen ist zwar gleich der beim impliziten Lösungsverfahren, aber es entfallen die erwähnten zeitraubenden Operationen mit großen Matrizen.

Allerdings ist bei expliziten Verfahren die Zeitschrittweite limitiert. Numerische Stabilität kann nur dann erzeugt werden, wenn die Zeitschrittweite höchstens gleich der Zeit ist, die die physikalische Störung benötigt, um eine Masche zu durchlaufen. Für ein zweidimensionales Strömungsproblem, bei dem mit der Ausbreitung von Stoßwellen gerechnet werden muß, lautet das Kriterium für numerische Stabilität nach Courant, Friedrichs und Levy [35]

$$\Delta t \leq \frac{\Delta s_{\min}}{1.41(|w_i|+a)} \quad (42)$$

$\Delta s_{\min}$  ist darin die kleinste Ortsschrittweite,  $w$  die Strömungsgeschwindigkeit und  $a$  die Schallgeschwindigkeit.

Zur Lösung des Gleichungssystems (A1-3) bis (A1-7) wird hier wegen der oben beschriebenen Vorteile und der einfachen Programmierbarkeit ein explizites Verfahren bevorzugt. Der Nachteil einer begrenzten Zeitschrittweite muß dafür in Kauf genommen werden.

Das verwendete Lösungsverfahren entspricht einem Ansatz nach Lax-Wendroff und ist in [36] für den eindimensionalen Fall ausführlich beschrieben. Es ist hier allerdings noch in geeigneter Weise für den zweidimensionalen Fall zu modifizieren.

Eine besonders elegante Methode zur expliziten Lösung der Transportgleichungen mit hoher numerischer Genauigkeit

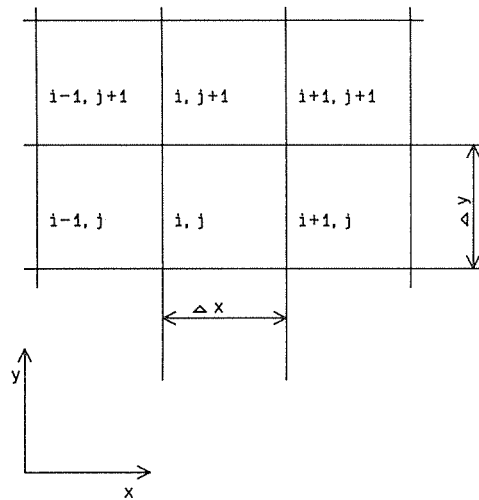


Abb. 9  
Maschennetz  
für die Diskretisierung  
von Gl.(1)

und gleichzeitiger Umgehung der Nichtlinearität beschreiben Gentry u.a. [37]. Angewendet wird diese Methode z.B. auch in [3] und [38]. Im einzelnen handelt es sich um ein maschenzentriertes Euler-Verfahren mit einem versetzten Gitter und einem "donor cell"-Ansatz für die Stromgrößen, dessen numerische Stabilität durch die Einführung von Zwischenschritten der Zeitintegration verbessert wird. Die Diskretisierung erfolgt nach Abb. 9.

Darüberhinaus ist allerdings zu beachten, daß in [36] und [37] stets quellfreie Felder modelliert werden, was nicht den Gegebenheiten des hier vorliegenden Problems entspricht.

Die den Systemzustand beschreibenden Größen werden im Maschenmittelpunkt definiert, die den Transport über die Maschenränder beschreibenden Größen am Maschenrand. Auf diese Weise entsteht ein versetztes Gitter ("staggered grid").

Im Gegensatz zum in [37] verwendeten numerischen Schema kann hier allerdings auf die Einführung einer "künstlichen Viskosität" verzichtet werden, da die Gln. (A1-4) und (A1-5) bereits Terme zweiter Ordnung, d.h. "natürliche" Viskositäts-terme aufweisen. Somit enthält die diskretisierte Form der Gln. (A1-4) und (A1-5) bereits alle zur Anwendung des Lax-Wendroff-Schemas notwendigen Gitterpunkte.

Zunächst werden die "flux"-Terme an den Maschenrändern zum Zeitpunkt  $n+1/2$  gebildet. Da es sich um ein explizites Verfahren handelt, werden hierzu lediglich die zum Zeitpunkt  $n$  berechneten Größen verwendet. Das Maschennetz aus Abb. 9 wird dabei von einem weiteren Gitter überlagert, in welchem nun die Ecken des ersten Gitters gerade die Mittelpunkte des zweiten Gitters bilden. Für die x-Richtung ist die entsprechende Anordnung in Abb. 10 dargestellt. Diese Art der Diskretisierung wird üblicherweise als Mehr-Gitter-Verfahren (multi-grid-method) bezeichnet.

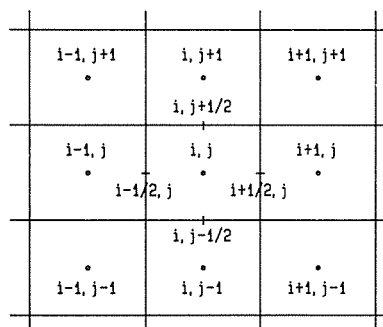


Abb. 10  
Überlagerung der Gitter-  
netze für das Zwischen-  
schrittverfahren



$$\frac{\Delta t}{\Delta y} - [(\rho v v)_{i,j+1/2}^{n+1/2} - (\rho v v)_{i,j-1/2}^{n+1/2}] +$$

$$\frac{4 v \Delta t}{\Delta y^2} [(\rho v)_{i+1/2,j}^{n+1/2} + (\rho v)_{i-1/2,j}^{n+1/2} - 2(\rho v)_{i,j}^{n+1/2}] +$$

$$\frac{(v+\mu) \Delta t}{\Delta x \Delta y} [(\rho u)_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2} - (\rho u)_{i+1/2,j-1/2}^{n+1/2} -$$

$$(\rho u)_{i-1/2,j+1/2}^{n+1/2} + (\rho u)_{i-1/2,j-1/2}^{n+1/2}] +$$

$$\frac{4 v \Delta t}{\Delta x^2} [(\rho v)_{i+1/2,j}^{n+1/2} + (\rho v)_{i-1/2,j}^{n+1/2} - 2(\rho v)_{i,j}^{n+1/2}] -$$

$$\frac{(\rho_{i,j+1/2}^{n+1/2} - \rho_{i,j-1/2}^{n+1/2}) \Delta t}{\Delta y}$$

Schließlich erhält man für die Energiebilanz

$$(\rho h)_{i,j}^{n+1} = (\rho h)_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [(\rho h u)_{i+1/2,j}^{n+1/2} - (\rho h u)_{i-1/2,j}^{n+1/2}] -$$

$$\frac{\Delta t}{\Delta y} [(\rho h v)_{i,j+1/2}^{n+1/2} - (\rho h v)_{i,j-1/2}^{n+1/2}] +$$

$$(\rho_{i,j}^{n+1} - \rho_{i,j}^n) \Delta t + (\dot{Q}_R + \dot{Q}_{Sv}) \Delta t$$

Zur Diskussion der zeitabhängigen Berechnung der Quellterme in Gl. (52) sei auf Abschnitt 4 verwiesen. Weiterhin sind in Gl. (52) bereits die die Wärmeleitung beschreibenden Terme gemäß der Ausführungen in Abschnitt 4 vernachlässigt.

Analog zur Kontinuitätsgleichung des Brennstoff/Luft-Gemisches ergibt sich die Kontinuitätsgleichung der Komponente k zu

$$C_{k,i,j}^{n+1} = C_{k,i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [(C_k u)_{i+1/2,j}^{n+1/2} - (C_k u)_{i-1/2,j}^{n+1/2}] -$$

$$\frac{\Delta t}{\Delta y} [(C_k v)_{i,j+1/2}^{n+1/2} - (C_k v)_{i,j-1/2}^{n+1/2}] + (C_k)_{i,j} \Delta t$$

Damit ist das numerische Schema zur näherungsweise Integration der Differentialgleichungen (A1-3) bis (A1-7) festgelegt. Zusammenfassend sei bemerkt, daß es sich um ein explizites Zwischenschrittverfahren mit Orts- und Zeitdiskretisierung zweiter Ordnung handelt, welches mit einem staggeredgrid-Ansatz und unter Verwendung der donor-cell-Methode modifiziert wurde. Numerische Stabilität kann erwartet werden, wenn die Bedingung (42) unter Einsetzen des kleinsten Ortsschrittes erfüllt ist.

## 5.2. Die Rand- und Anfangsbedingungen

Die im vorangegangenen Abschnitt beschriebene Lösung des Systems der Transportgleichungen setzt die Festlegung von Rand- und Anfangsbedingungen voraus.

Als "Rand" im mathematischen Sinne gelten dabei die Grenzen des betrachteten thermodynamischen Systems. Im speziellen Fall sind dies hier

- feste Begrenzungsflächen,
- Ein- und Austrittsöffnungen,
- Strömungshindernisse, Einbauten etc.

Die Randbedingungen sind die Verteilungen der interessierenden physikalischen Parameter, die diese an den Rändern annehmen.

Für die Eintrittsöffnungen richten sich diese Werte nach den Bedingungen, denen das Fluid vor dem Eintritt in das betrachtete System unterliegt. Für die Randbedingungen an den Austrittsöffnungen ist der Systemzustand im Behälterinneren beziehungsweise dessen Abweichung vom Umgebungszustand maßgebend.

Die Randbedingungen an den Begrenzungsflächen leiten sich ebenfalls vom inneren Systemzustand ab. Im einzelnen gilt an festen Begrenzungsflächen

- für die Strömungsgeschwindigkeiten die Haftbedingung
- $$u = 0 ; v = 0 \quad (54)$$

- für Druck, Temperatur, Dichte und Konzentration

$$\frac{\delta p}{\delta n} = 0 ; \frac{\delta T}{\delta n} = 0 ; \frac{\delta o}{\delta n} = 0 ; \frac{\delta C}{\delta n} = 0 \quad (55)$$

worin n die Normalenrichtung zur Begrenzungsfläche bezeichnet. Mit den Bedingungen (54) und (55) wird eine "Quasi-Grenzschicht" simuliert.

An einer Eintrittsöffnung ist die Kenntnis von zwei Randwerten für das Strömungsfeld erforderlich. Bei Stoßwellenproblemen beispielsweise werden meistens der Druck am Eintritt in das Stoßrohr und die Temperatur beziehungsweise die spezifische Enthalpie des Fluids bekannt sein. Die Strömungsgeschwindigkeit am Eintritt kann dann aus diesen beiden Werten berechnet werden.

An einer Austrittsöffnung ist die Angabe von nur einer Randbedingung für das Strömungsfeld ausreichend. Bei hydrodynamischer Strömung wird dies im allgemeinen der Druck in der Austrittsöffnung sein, der dem Umgebungsdruck außerhalb des betrachteten Systems entspricht. Die Strömungsgeschwindigkeit in der Austrittsöffnung folgt dann aus der Bernoulli-Gleichung

$$w_{aus} = [2(p_i - p_u)/\rho]^{1/2} \quad (56)$$

$p_i$  ist hier der Druck im Behälterinneren,  $p_u$  ist der Umgebungsdruck.

Für gasdynamische Strömung ist zu berücksichtigen, ob das kritische Druckverhältnis überschritten wird. Dieses beträgt

$$\frac{p_{kr}}{p_u} = \frac{\chi + 1}{2} \chi^{2/\chi} \quad (57)$$



Ist der Behälterinnendruck kleiner als  $p_{kr}$ , ergibt sich die Ausströmgeschwindigkeit aus der Gleichung von De Saint Venant und Wenzel, siehe [39], zu

$$w_{aus} = \left\{ \frac{2 \chi p_i}{\chi - 1} \frac{p_i}{\rho U} \left[ 1 - \left( \frac{p_i}{p_U} \right)^{\frac{1}{\chi}} \right] \right\}^{1/2} \quad (58)$$

Wird das kritische Druckverhältnis überschritten, so strömt das Fluid mit Schallgeschwindigkeit aus dem Behälter und es gilt

$$w_{aus} = a = (\chi RT_i)^{1/2} \quad (59)$$

Damit sind die Randbedingungen festgelegt. Das den Explosionsablauf beschreibende Gleichungssystem ist nunmehr mathematisch vollständig geschlossen.

Die Anfangsbedingungen sind entsprechend dem stabilen Gleichgewichtszustand festzulegen, den das betrachtete thermodynamische System eingenommen hatte, bevor die äußere Störung (z.B. eine Energiezufuhr durch die Zündung) einsetzte.

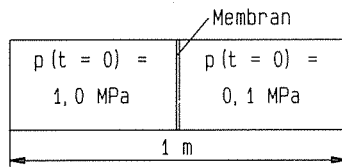
### 5.3. Das Rechenprogramm CHARLES

Das in den vorangegangenen Abschnitten vorgestellte mathematische Modell wurde in einem FORTRAN-Programm CHARLES (Chemistry And fluid flow for Reactions in Laboratory and Large-scale Explosion Systems) verwirklicht und auf einer DEC-Workstation vom VAX-Typ implementiert. Im folgenden Abschnitt werden nun einige Testbeispiele beschrieben.

## 6. Testbeispiele für Strömungen ohne chemische Reaktionen

### 6.1. Das Stoßrohr-Problem

Als erstes Testbeispiel für den in den vorangegangenen Abschnitten vorgestellten Algorithmus wurde die Untersuchung der Ausbreitung einer Stoßwelle in einem geraden, an beiden Enden verschlossenen Rohr untersucht. Die geometrischen Verhältnisse sowie die Anfangsbedingungen gehen aus *Abb. 11* hervor.



*Abb. 11*  
Geometrie und Anfangsbedingungen für das eindimensionale Stoßrohrproblem

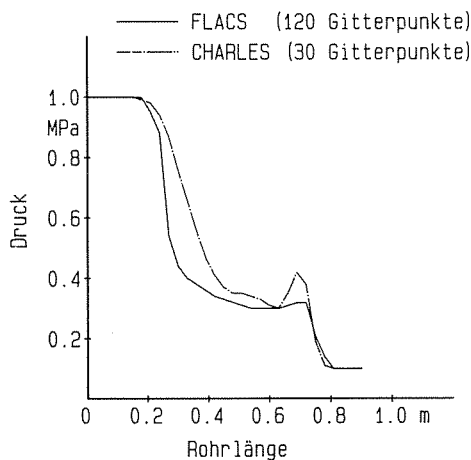
In Rohrmitte ist eine Berstmembran angebracht, die das Rohr in einen Hoch- und einen Niederdruckabschnitt teilt. Das Rohr ist mit Luft gefüllt, die im Hochdruckteil auf einen Druck von 1 MPa komprimiert ist.

Zum Zeitpunkt  $t_0$  wird die Berstmembran zerstört und eine Druckwelle breitet sich im Niederdruckteil aus, während eine Expansionswelle in den Hochdruckteil wandert. Das Strömungsfeld wird als eindimensional betrachtet, die Stoßwelle ist planar.

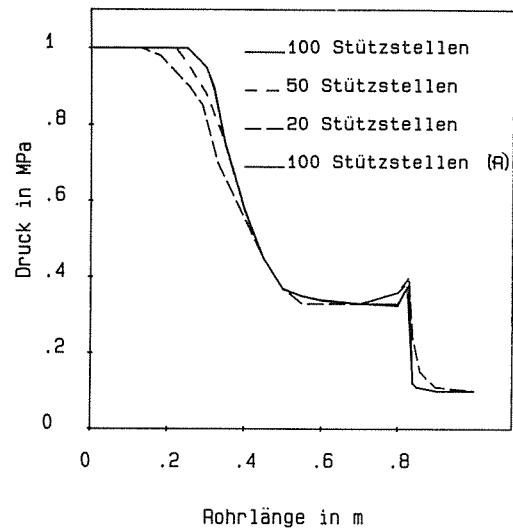
*Abb. 12* zeigt die lokale Druckverteilung im Stoßrohr nach 0,59 ms. Zu diesem Zeitpunkt hat die Stoßfront etwa zwei Drittel des Niederdruckteils passiert, d.h. es sind noch keine Reflexionswellen zu beobachten.

Die Expansionswelle befindet sich bei etwa 0,3 m. *Abb. 12* zeigt den mit Hilfe des Programmes CHARLES berechneten Druckverlauf im Vergleich zu den von Hjertager in [1] veröffentlichten, mit dem Programm FLACS ermittelten Ergebnissen. Die Kurven zeigen eine gute Übereinstimmung sowohl bezüglich der Lage der Stoßfront als auch der lokalen Drücke. Zu beachten ist hier, daß in der CHARLES-Rechnung lediglich 30 Gitterpunkte verwendet wurden, im Gegensatz zu 120 Gitterpunkten bei FLACS.

Um die Konsistenz der Lösung bezüglich der numerischen Genauigkeit zu testen, wurde die Anzahl der Stützstellen vari-



*Abb. 12*  
Lokale Druckverteilung im Stoßrohr nach 0,59 ms - Vergleich der Rechnungen von FLACS [1] und CHARLES



*Abb. 13*  
Stoßrohr-Problem: Variation der Anzahl der Stützstellen zur Überprüfung der Konsistenz der Lösung

iert. *Abb. 13* zeigt den lokalen Druckverlauf nach 0,59 ms bei Variation der Stützstellenzahl, d.h. der Schrittweite des Maschengitters.

Der Vergleich zeigt, daß der lokale Druckverlauf selbst mit einem sehr groben Gitter von nur 20 Punkten bereits recht gut abgebildet wird. Die Kurven für 100 Gitterpunkte (Maschenweite 1 cm) und 200 Gitterpunkte (Maschenweite 0,5 cm) liegen praktisch aufeinander. Damit ist die Konsistenz der Lösung nachgewiesen. Das ergab auch eine im folgenden erläuterte Rückwärtsrechnung mit 100 Gitterpunkten, die in *Abbildung 13* mit (R) gekennzeichnet ist.

*Tabelle 5* zeigt einen Vergleich der berechneten Strömungsgeschwindigkeiten für verschiedene Gitterschrittweiten  $x$ . Auch aus *Tabelle 5* geht hervor, daß mit zunehmender Anzahl von Gitterpunkten, d.h. mit kleiner werdender Maschenweite die Abweichung der Lösung abnimmt.

Die rechte, mit einem (R) versehene Spalte in *Tabelle 5* gibt die berechneten Strömungsgeschwindigkeiten für eine Rechnung mit 100 Gitterpunkten an, bei der die Ausbreitung der Stoßwelle entgegen der Richtung des Koordinatensystems erfolgte. Dies wurde erreicht, indem Hoch- und Niederdruckteil vertauscht wurden. Es ergibt sich auch in diesem Fall eine gute Übereinstimmung mit der Rechnung in Vorwärtsrichtung.

*Tabelle 5*  
Stoßrohr-Problem: Strömungsgeschwindigkeiten an verschiedenen Punkten im Stoßrohr zum Zeitpunkt  $t=0,59 \text{ ms}$  in Abhängigkeit von der Gitterschrittweite (Anzahl der Stützstellen)

x m	Anzahl der Stützstellen				
	20	50	100	200	100 (R)
0,2	1,145	0,507	0,009	0	0,013
0,4	80,84	132,89	131,09	129,82	132,259
0,6	278,78	281,79	277,83	273,59	275,92
0,8	319,28	341,88	313,701	316,59	313,84
1,0	1,87	0	0	0	0

Damit ist sichergestellt, daß z.B. bei der Programmierung entstandene Vorzeichenfehler weitgehend ausgeschlossen werden können.

## 6.2. Stoßwellenausbreitung in einem z-förmigen Tunnel

Das zweite Berechnungsbeispiel umfaßt die Ausbreitung einer Stoßwelle in einem nicht chemisch reagierenden Gas durch einen z-förmigen Tunnel. Dieses Beispiel wurde ausführlich von Gentry u.a. in [37] beschrieben. Die untersuchte geometrische Anordnung geht aus Abb. 14 hervor. Sie besteht aus einem Einlaufkanal sowie zwei rechtwinklig zueinander angeordneten Armen von 80 und 88 mm Länge.

Der Einlaufkanal und der abwärts gerichtete Arm sind zum Zeitpunkt  $t_0$  durch eine Berstmembran getrennt. Das andere Ende des Tunnels ist geschlossen.

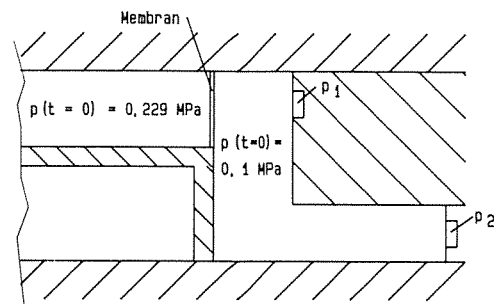


Abb. 14  
Z-förmiger Tunnel: Geometrie und Anfangsbedingungen

An den in Abb. 14 mit P1 und P2 bezeichneten Punkten sind Meßwertaufnehmer für den Druck angebracht.

Der Anfangsdruck im Einlaufkanal beträgt 0,229 MPa.

Wie schon im vorangegangenen Beispiel wird zum Zeitpunkt  $t_0$  die Berstmembran zerstört und der Niederdruckteil freigegeben. Abb. 15 gibt den zeitlichen Druckverlauf am Meßpunkt P1 wieder, Abb. 2 jenen am Meßpunkt P2.

Die mit CHARLES berechneten Ergebnisse werden hier mit den Rechnungen von Gentry u.a. [37] sowie mit dort veröffentlichten Experimentaldaten verglichen.

Es zeigt sich, daß die erste Druckspitze, die nach etwa  $50 \mu\text{s}$  am Punkt P1 auftritt, von den Rechnungen nicht wiedergegeben wird. Die Ursache hierfür konnte bislang nicht aufgeklärt werden. Nach circa  $100 \mu\text{s}$  erreicht der Druck am Punkt P1 einen Wert von 0,35 MPa, wobei eine gute Übereinstimmung beider Rechnungen mit dem Experiment besteht. Schließlich ist nach etwa  $200 \mu\text{s}$  ein vorläufiger Beharrungszustand (bis zum Eintreffen von Reflexionswellen) erreicht. Der Druck am Punkt P1 entspricht dann dem zeitlich konstant gehaltenen Druck im Einlaufkanal.

Aus Abb. 16 geht hervor, daß nach etwa  $300 \mu\text{s}$  die Stoßfront das Ende des z-förmigen Tunnels erreicht. Der Druck am Punkt P2 steigt dann sehr schnell auf ein Maximum von etwa 0,48 MPa und fällt dann auf etwa 0,3 MPa nach  $600 \mu\text{s}$  wieder ab. Die Oszillationen des Druckverlaufes entstehen durch Reflexion am geschlossenen Ende.

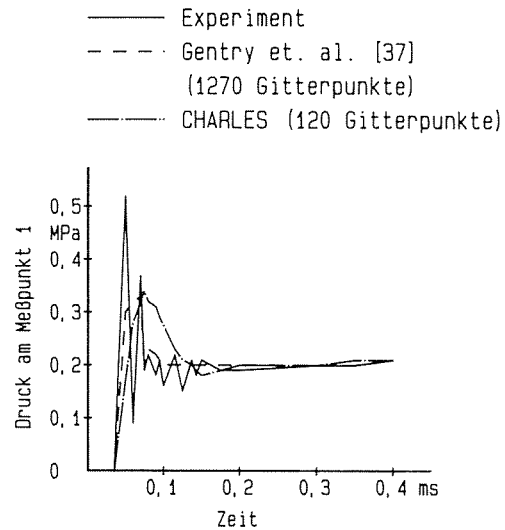


Abb. 15  
Zeitlicher Druckverlauf am Meßpunkt 1 - Vergleich der Rechnungen von Gentry u.a. [37] und von CHARLES mit experimentellen Werten

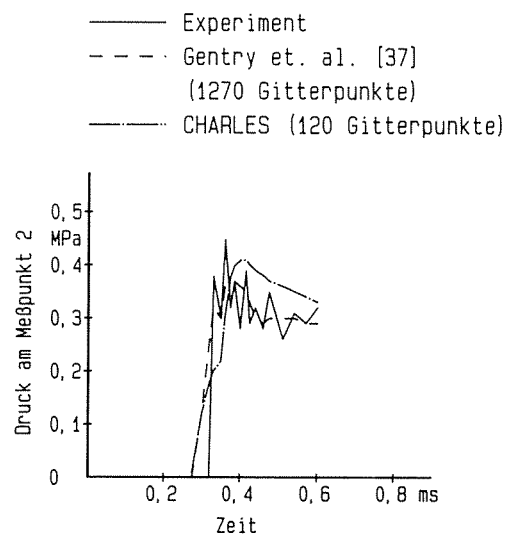


Abb. 16  
Zeitlicher Druckverlauf am Meßpunkt 2

Die Rechnungen können den experimentell ermittelten zeitlichen Druckverlauf befriedigend wiedergeben, wenn auch sowohl bei Gentry u.a. als auch bei den CHARLES-Rechnungen ein um etwa 10 % geringeres Druckmaximum berechnet wird.

Es ist anzumerken, daß das hier gewählte Beispiel extreme Verhältnisse wiedergibt, da es sich um einen Kurzzeitprozeß handelt. Bei Kurzzeitprozessen dürfte der Grenzbereich erreicht sein, bei dem noch von quasistatischem Zustandsverhalten ausgegangen werden kann.

Explosionsvorgänge, die im Mittelpunkt der vorliegenden Arbeit stehen, vollziehen sich mit deutlich geringeren Ausbreitungsgeschwindigkeiten. (Detonationen werden hier nicht betrachtet.) In Anbetracht dessen sollten die hier erkennbaren Abweichungen der Rechnungen vom Experiment nicht überbewertet werden.

## 7. Testbeispiele zu Strömungen mit chemischen Reaktionen

### 7.1 Flammenausbreitung in einer laminaren Rohrströmung

Zum Test des hier vorliegenden Modells für die Berechnung von Strömungen, in denen chemische Reaktionen ablaufen, wird zunächst die Ausbreitung einer laminaren Flamme in einem senkrechten Strömungskanal untersucht. Die gewählten Parameter entsprechen den Bedingungen der Experimente von Proust und Veyssi re [40] zur Flammenausbreitung in laminar str menden Staub/Luft-Gemischen.

Das Geschwindigkeitsprofil im Str mungskanal lautet f r die Hagen-Poiseulle-Str mung

$$v(r) = v(r=0) \cdot [1 - (r/r_R)^2] \quad (60)$$

worin  $r$  die Koordinate quer zur Str mungsrichtung und  $r_R$  der Rohrradius sind.

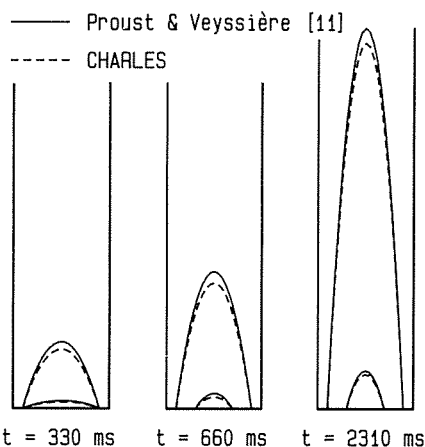
Die "Z ndzone" (siehe Abschnitt 4.2) wird bei  $r = 0$  in einer den experimentellen Bedingungen entsprechenden H he des Rohres definiert. Damit sind die Punkte  $i_n$  erstmalig festgelegt und die Flamme breitet sich nun mit einer Geschwindigkeit aus, die der Gl. (32) gehorcht.

Die laminare Verbrennungsgeschwindigkeit wurde von Proust und Veyssi re [40] zu  $0,25 \text{ ms}^{-1}$  gemessen.

Gl. (35) braucht hier nicht ber cksichtigt zu werden, da das obere Ende der Rohrstrecke offen blieb und die Verbrennung langsam genug ablief, um isobare Bedingungen einzuhalten. *Abb. 17* zeigt die Flammenkontur im Rohr zu verschiedenen Zeitpunkten. Die gestrichelten Kurven repr sentieren die Rechnungen mit dem Programm CHARLES w hrend die ausgezogenen Kurven das ungef hre Aussehen der Flammenkontur auf den photographischen Aufnahmen von Proust und Veyssi re wiedergeben.

Die  bereinstimmung der berechneten mit der aus den Aufnahmen hervorgehenden Form der Flammenfront sowie die Genauigkeit der Berechnung hinsichtlich der Ausbreitungsgeschwindigkeit kann als gut bewertet werden.

Die laminare Verbrennungsgeschwindigkeit liegt hier in der Gr Benordnung der Str mungsgeschwindigkeit in der Rohr-



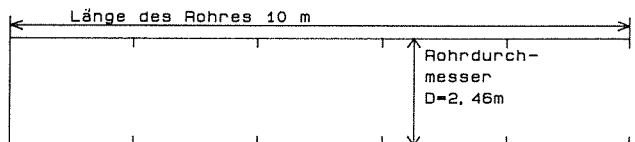
*Abb. 17*  
Flammenkonturen f r die laminare Flammenausbreitung in einem senkrechten Rohr (nach Proust und Veyssi re [40])

achse. F r die Punkte auf dem unteren Ast der Flammenkontur ist der Richtungssinn der Flammenausbreitung negativ, d.h. entgegen der Str mungsrichtung. Deshalb sind diese Punkte nahezu zu fixiert beziehungsweise bewegen sich nur langsam. F r die Punkte  $i_n$  auf dem oberen Ast der Kontur addieren sich laminare Verbrennungsgeschwindigkeit und Str mungsgeschwindigkeit. Die Flamme wird auf diese Weise "auseinandergezogen".

Ist die Str mungsgeschwindigkeit f r einen der Punkte auf dem unteren Ast der Kontur kleiner als die laminare Verbrennungsgeschwindigkeit, so kommt es zum sogenannten "flashback". Die Flamme breitet sich dann entgegen der Str mungsrichtung aus, sofern dort ein Brennstoff/Luft-Gemisch vorgefunden wird.

### 7.2 Turbulente Flammenausbreitung in homogenen Gas/Luft-Gemischen

Das n chste Berechnungsbeispiel ist von etwas komplexerer Art und umfa t die Flammenausbreitung in einem Str mungsfeld, welches erst durch den Verbrennungsproze  erzeugt wird. Es wurde zuerst von Moen u.a. [8] ver ffentlicht. Ein Rohr von 10 m L nge und einem Durchmesser von 2,5 m (Volumen  $50 \text{ m}^3$ ) ist mit f nf  quidistanten, ringf rmigen Blenden best ckt. Diese Anordnung ist in *Abb. 18* dargestellt. Das Rohr ist mit einem zun chst ruhenden Gemisch aus Methan und Luft bei st chiometrischer Konzentration gef llt. Ein Rohrende ist geschlossen, das andere Rohrende ist offen, aber mit einer d nnen Berstfolie versehen, die das Entweichen des Gasgemisches vor der Z ndung verhindern soll.



*Abb. 18*  
Rohr mit eingebauten Str mungshindernissen zur Untersuchung der turbulenten Flammenbeschleunigung (nach Hjertager [18])

Die Z ndung erfolgt am geschlossenen Rohrende durch eine Anordnung von Z ndern, welche die Z ndenergie m glichst gleich-m Big  ber den Querschnitt verteilt. Die Flamme breitet sich dann in Richtung des offenen Endes aus. Die Str mungshindernisse im Rohr bewirken dabei eine Erh hung des Turbulenzgrades der Str mung. Daraus resultiert eine turbulenzinduzierte Flammenbeschleunigung.

Dieses Beispiel wurde von Hjertager [1] benutzt, um eine fr he Version des Rechenprogrammes FLACS zu testen. Wegen seiner Anschaulichkeit wurde dieses Beispiel auch hier zum Test des CHARLES-Programmes verwendet.

*Abb. 19* zeigt den von Moen u.a. [8] gemessenen sowie die von Hjertager [1] und mit CHARLES berechneten Druck-Zeit-Verl ufe f r das offene und das geschlossene Rohrende.

Nach der Z ndung am geschlossenen Ende steigt der  rtliche Druck dort verh ltnism Big langsam an, w hrend die Druck-Zeit-Kurve am offenen Ende wesentlich steiler verl uft.

Infolge der Kompression des Gasgemisches ist der maximale Druck am offenen Ende  ber 50 % h her als derjenige am geschlossenen Ende. Die Druck-Zeit-Kurven in *Abb. 19* zeigen weiterhin gewisse Oszillationen infolge von Str mungsinstabilit ten. Diese k nnen folgenderma en erkl rt werden:

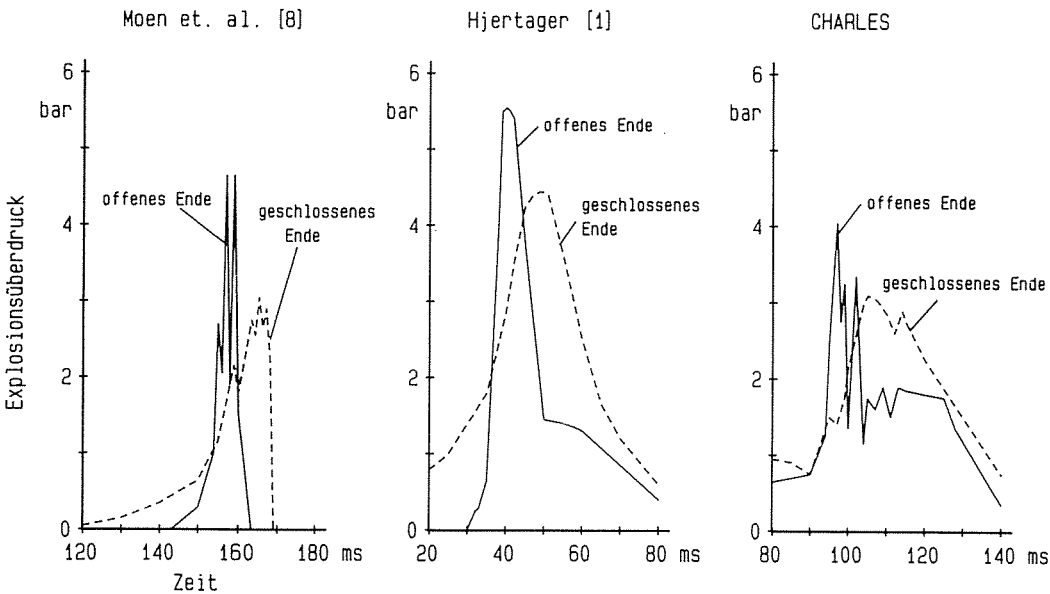


Abb. 19  
Druck-Zeit-Verläufe für eine Methan/Luft-Explosion im Rohr mit Strömungshindernissen - Vergleich der Rechnungen von Hjertager [1] und mit CHARLES mit Experimenten von Moen u.a. [8]

Die Strömung wird durch lokale Druckgradienten angetrieben. Ein örtlicher Druckanstieg infolge der Wärmefreisetzung durch die chemische Reaktion verursacht einen Massentransport in die Bereiche mit geringerem örtlichen Druck. Im Gebiet höheren Drucks sinkt dann die Dichte. Dadurch wiederum sinkt dort der Druck nach einer gewissen Verzögerungszeit. Das Absinken des Druckes und der Dichte hat nun zwei Konsequenzen. Sinkt der lokale Druck unter den Wert des Druckes im stromabwärts gelegenen Rohrabschnitt (dieser erhöht sich durch die Zufuhr von Reaktionswärme), wird erstens eine Strömungsumkehr hervorgerufen und zweitens steigt die örtliche Temperatur aufgrund der geringeren Wärmekapazität. Beide Effekte, sowohl die Strömungsumkehr als auch der Temperaturanstieg bewirken nun wiederum ein erneutes Ansteigen des Druckes.

Aus Abb. 19 geht hervor, daß beide Berechnungsmodelle die wesentlichen Geschehnisse gut wiedergeben können. Sowohl die berechnete Dauer der Druckstörung als auch deren Amplitude am offenen und geschlossenen Ende entsprechen dem experimentellen Befund. Ungeachtet dessen zeigen sich im Detail einige nicht zu vernachlässigende Abweichungen. In den Berechnungen von Hjertager [1] setzt ein merklicher Druckanstieg am offenen Ende bereits nach 30 ms ein, während dies experimentell erst nach 155 ms beobachtet wird. Die Erklärung hierfür liefert die Natur des  $k-\epsilon$ -Modells. Dieses Modell versagt im Bereich laminarer Strömung und erfordert deshalb die Vorgabe einer Anfangsturbulenz (siehe auch die Abschnitte 4.1 und 4.2). Da aber im Experiment das Gasgemisch vor der Zündung ruhte und erst durch die Verbrennung eine Strömung induziert wurde, setzte hier der Druckanstieg wesentlich später ein.

Die weiter oben erwähnten Druckoszillationen werden vom FLACS-Modell ebenfalls nicht wiedergegeben. Diese Tatsache ist sicherlich dem impliziten Lösungsschema zuzuschreiben, das im FLACS-Programm zur numerischen Auswertung der Transportgleichungen verwendet wird. Da die Schrittweite der Zeitintegration bei impliziten Lösungen nicht durch ein Stabilitätskriterium limitiert wird, kann die Lösung unter Umständen "verschmiert" werden, d.h. in diesem Fall, daß die Steilheit der Stoßfront vermindert und Oszillationen nicht erfaßt werden.

Der maximale Explosionsüberdruck am offenen Ende wird von Hjertager mit etwa 5,7 bar berechnet, derjenige am

geschlossenen Ende mit 4,4 bar. Die Experimente ergaben 4,63 bar für das offene Ende und 3,1 bar für das geschlossene Ende. Die Druckwirkung wird vom FLACS-Modell also um 23 % am offenen und um 42 % am geschlossenen Ende überschätzt.

Das in CHARLES eingesetzte, explizite Lösungsschema gibt einige Details des Druck-Zeit-Verlaufes wieder. Für den maximalen Explosionsüberdruck am offenen Ende ergab die Rechnung einen Wert von 4,15 bar, d.h. einen im Vergleich zum Experiment um etwa 10 % niedrigeren Wert. Am geschlossenen Ende wurden 3,1 bar berechnet, was genau dem im Experiment gefundenen Wert entspricht.

Trotzdem vollzieht sich der Explosionsablauf auch in der CHARLES-Rechnung schneller als experimentell beobachtet. Am offenen Ende wird der Maximaldruck hier nach 97 ms erreicht, am geschlossenen Ende nach 105 ms. Die Erklärung dafür ist auch hier in der Unzulänglichkeit des Turbulenzmodells zu suchen, worauf weiter unten näher eingegangen wird.

Die Zeitspanne zwischen dem Eintreten der Druckmaxima am offenen beziehungsweise am geschlossenen Ende betrug im Experiment 11 ms während die Rechnung 8 ms ergab. Bei der Rechnung mit dem CHARLES-Programm ließ sich auch eine gewisse Abhängigkeit der Zeit bis zum Eintreffen des

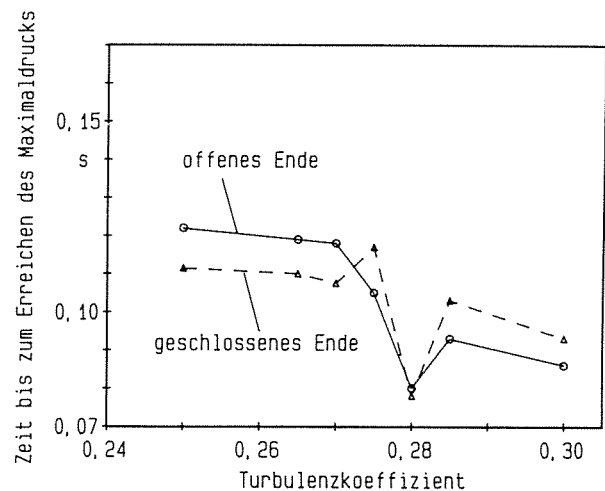
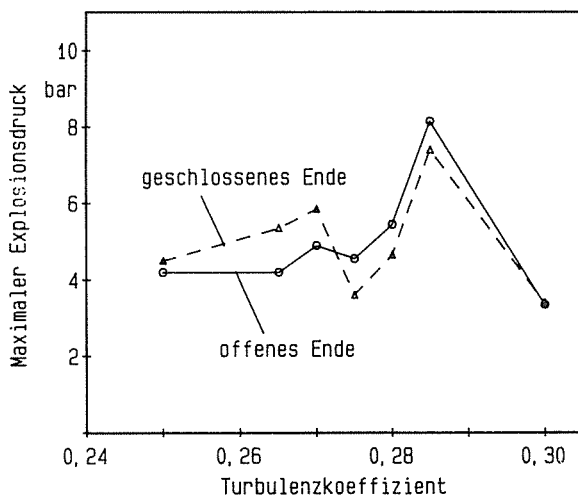


Abb. 20  
Einfluß des Turbulenzkoeffizienten  $c_T$  auf die zeitliche Entwicklung der Explosion im Rohr mit Strömungshindernissen

Druckmaximums vom Turbulenzansatz feststellen. Für verschiedene Werte des Turbulenzfaktors  $c_t$  in der Bestimmungsgleichung für die turbulente Verbrennungsgeschwindigkeit, Gl. (36), ergab sich die in *Abb. 20* dargestellte Abhängigkeit. Bei zu geringen Werten für  $c_t$  ist der turbulente Transport zu schwach, um eine Flammenbeschleunigung zu erzeugen. Infolgedessen erscheint das Druckmaximum am geschlossenen Ende eher als jenes am offenen Ende.

Nur bei einem Wert für den Turbulenzkoeffizienten größer als 0,27 wird Flammenbeschleunigung berechnet und das Druckmaximum erscheint zuerst am offenen Ende. Bei Werten für  $c_t$  größer als 0,28 wird allerdings ein anderer Effekt sichtbar. Die Flammenfortpflanzung wird dann als zu schnell berechnet, der turbulente Einfluß wird überschätzt. Die plötzliche, rapide Wärmefreisetzung erzeugt einen sehr schnellen Druckanstieg am geschlossenen Ende. Das Druckmaximum taucht dann wiederum hier zuerst auf.

In diesen Fällen zu hoher Turbulenzkoeffizienten wurden die Druckmaxima beträchtlich höher berechnet, als es der experimentelle Befund auswies. *Abb. 21* zeigt die Abhängigkeit der berechneten Druckmaxima am offenen und am geschlossenen Ende vom Turbulenzkoeffizienten.



*Abb. 21*  
Einfluß des Turbulenzkoeffizienten  $c_t$  auf den maximalen Explosionsdruck am offenen und geschlossenen Ende

Im Falle von Turbulenzkoeffizienten kleiner als 0,27 wurde der Druck am geschlossenen Ende höher als der am offenen Ende berechnet. Bei Turbulenzkoeffizienten größer als 0,28 nahmen die Druckmaxima unrealistisch hohe Werte an.

Die in *Abb. 19* wiedergegebenen Kurven wurden bei einem Turbulenzkoeffizienten von 0,275 gefunden. Hier ergab sich die beste Übereinstimmung mit Experimentaldaten.

Es ist anzumerken, daß die Wahl des Turbulenzkoeffizienten recht willkürlich erscheinen mag. Dieser einfache Turbulenzansatz ist auch tatsächlich die wesentliche Schwäche des in CHARLES enthaltenen Modells. Wie in Abschnitt 4.2 bereits erwähnt, ist hier ein Kompromiß zu finden zwischen der weitgehenden Reduzierung des Rechenaufwandes und den Ansprüchen an die Genauigkeit des Modells.

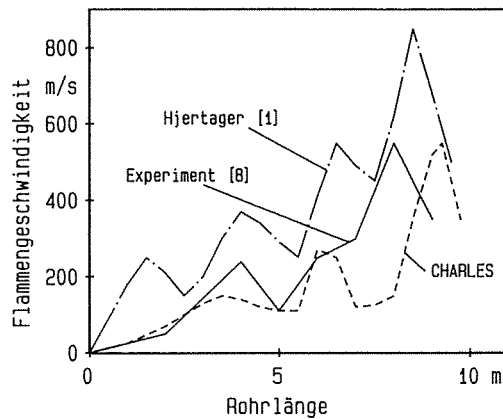
Die beim Test dieses Modells gewonnenen Erfahrungen lassen jedoch folgenden Schluß zu:

Der Turbulenzkoeffizient ist dann richtig bestimmt, wenn

- i) das Druckmaximum zuerst am offenen Ende erscheint, d.h. Flammenbeschleunigung berechnet wird,
- ii) das Druckmaximum am offenen Ende höher ist als jenes am geschlossenen Ende und die Druck-Zeit-Kurve am offenen Ende steiler verläuft.

Sowohl das FLACS- als auch das CHARLES-Modell geben einen relativ sanften Druckabfall wieder, nachdem die Flammenfront das offene Ende erreicht hat. Hjertager [1] erklärt den scharfen Druckabfall im Experiment damit, daß die am offenen Ende angebrachte Blende aus Sperrholz anstatt aus Stahl gefertigt war und deshalb durch die Druckwelle zerstört wurde. Somit wurde ein größerer Entlastungsquerschnitt freigegeben. Dieser Umstand wurde in beiden Rechnungen nicht berücksichtigt.

*Abb. 22* zeigt nun die von FLACS und CHARLES berechneten Flammengeschwindigkeiten längs der Rohrachse im Vergleich mit den gemessenen Werten. Allen Kurven ist gemeinsam, daß sie die Schwankungen in der Flammengeschwindigkeit wiedergeben, die dadurch entstehen, daß die Strömung aufgrund der wiederholten Querschnittsänderungen wechselweise beschleunigt oder verzögert wird.



*Abb. 22*  
Verteilung der Flammengeschwindigkeiten längs der Rohrachse - Vergleich der Experimente von Moen [8] mit den Rechnungen von Hjertager [1] und CHARLES

Während Hjertagers Modell die Extrempunkte nahezu an gleicher Stelle berechnet, wie im Experiment bestimmt, zeigt die CHARLES-Rechnung Abweichungen in der Lage der Extrema von knapp einem Meter. Die Ursache hierfür liegt möglicherweise darin, daß in den CHARLES-Rechnungen wegen der Besonderheiten der geometrischen Erfassung der Flammenfront die Zündquelle nicht exakt an das geschlossene Ende gelegt werden konnte, sondern 0,1 m stromabwärts lag.

Andererseits haben die mit CHARLES berechneten Flammengeschwindigkeiten nahezu die gleichen Beträge wie die experimentell ermittelten. In den FLACS-Rechnungen wird die Flammengeschwindigkeit überschätzt.

Über das eben erwähnte Beispiel hinausgehend veröffentlichten Moen u.a. [8] eine Serie weiterer Experimente mit stöchiometrischen Methan/Luft-Gemischen im 50 m<sup>3</sup>-Rohr. Sie variierten dabei die Anzahl und die Öffnungsweite der Blenden und untersuchten den Einfluß dieser geometrischen Veränderungen auf den Reaktionsablauf. In [18] publizierte Hjertager analoge Experimente mit stöchiometrischen Propan/Luft-Gemischen. Er konnte dann seine eigenen Rechnungen mit

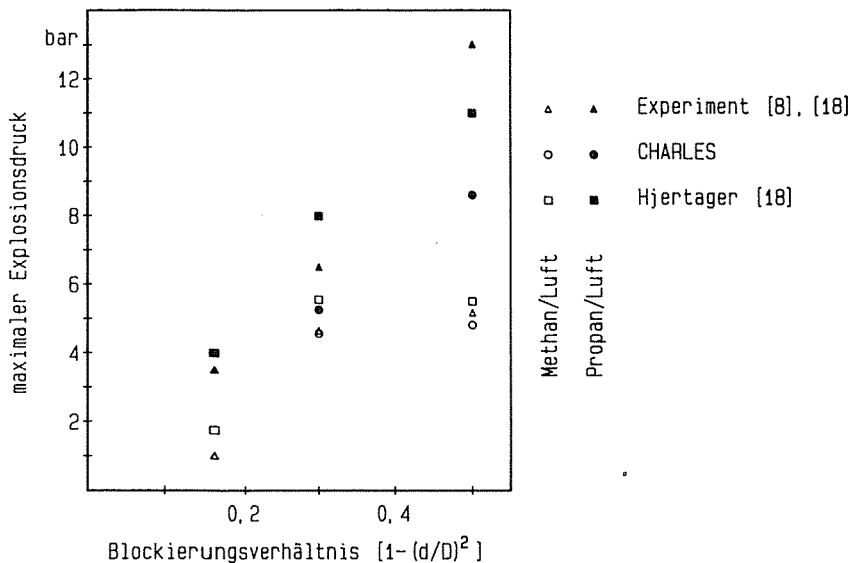


Abb. 23  
Maximale Explosionsdrücke im 50 m<sup>3</sup>-Rohr für stöchiometrische Methan/Luft- und Propan/Luft-Gemische bei verschiedenen Öffnungsweiten der Blende

den experimentellen Ergebnissen vergleichen. Diese Beispiele wurden auch mit dem Programm CHARLES untersucht.

Abb. 23 zeigt nun die maximalen Explosionsdrücke im 50 m<sup>3</sup>-Rohr für verschiedene Öffnungsweiten bei Einsatz von fünf Blenden.

Im Falle von Methan/Luft-Gemischen erzielen die Rechnungen eine gute Annäherung an die gemessenen Maximaldrücke. Bei Propan/Luft-Gemischen zeigen sich allerdings insbesondere bei einem Öffnungsverhältnis von 0,5 gewisse Abweichungen.

Während FLACS mit einer Ausnahme höhere Drücke berechnet, liegen die mit CHARLES ermittelten Drücke häufig niedriger als die gemessenen.

### 7.3 Gasexplosionen in geschlossenen Behältern

Es soll nun im folgenden untersucht werden, inwieweit sich das hier vorgestellte Modell zur Simulation des Ablaufs von Explosionen eignet, experimentelle Untersuchungen zu ergänzen oder gegebenenfalls teilweise zu ersetzen. Könnte aus einer hinreichenden Anzahl von Testbeispielen eine solche Eignung abgeleitet werden, dann ließe sich ein solches Simulationsmodell möglicherweise zukünftig als Teil der Standarduntersuchungsverfahren zur Ermittlung sicherheitstechnischer Kenngrößen etablieren, womit experimenteller Aufwand eingespart werden kann.

Ein solches Standarduntersuchungsverfahren zur Ermittlung der sicherheitstechnischen Kenngrößen maximaler Explosionsdruck und maximaler zeitlicher Druckanstieg ist der Test der zu untersuchenden Substanz in einem 1 m<sup>3</sup>-Explosionsgefäß, siehe [19] und [20]. Im hier dargestellten Beispiel wurde die Explosion eines stöchiometrischen Methan/Luft-Gemisches im 1 m<sup>3</sup>-Behälter berechnet. Der entsprechende Druck-Zeit-Verlauf ist in Abb. 24 dargestellt. Abb. 24 enthält auch die Tangente im Wendepunkt der Druck-Zeit-Kurve, die der Berechnung des K<sub>G</sub>-Wertes zugrunde liegt.

Zum Vergleich des Berechnungsergebnisses können Experimente von Nagy u. a. [12] herangezogen werden. Nagy u. a. veröffentlichten Meßdaten, die für ein stöchiometrisches Methan/Luft-Gemisch in einem würfelförmigen Explosionsgefäß von 28 Liter (1 cu ft) Rauminhalt erhalten wurden.

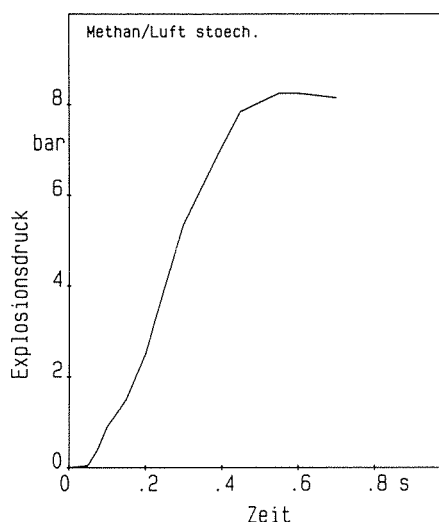


Abb. 24  
Druck-Zeit-Verlauf bei einer Explosion eines stöchiometrischen Methan/Luft-Gemisches im geschlossenen 1 m<sup>3</sup>-Behälter

Für die diesem Beispiel zugrunde liegenden Bedingungen - sphärische Flammenausbreitung in einem homogenen, ruhenden Gasgemisch - kann die Gültigkeit des "kubischen Gesetzes" angenommen werden. Die Berechnungen mit CHARLES lassen sich deshalb über dieses Gesetz mit den Experimentaldaten von Nagy u. a. vergleichen.

Tabelle 6 enthält die entsprechenden Werte für den maximalen Explosionsdruck, den maximalen zeitlichen Druckanstieg sowie den lt. Gl. (12) definierten K<sub>G</sub>-Wert. Zusätzlich ist ein Wert K<sub>G</sub><sup>\*</sup> angegeben, den man erhält, wenn der maximale zeitliche Druckanstieg nicht mit der dritten Wurzel aus dem Volumen, sondern mit dem Verhältnis von Volumen zu Oberfläche des Behälters gebildet wird.

$$K_G^* = \frac{V_B}{A_B} \left( \frac{dp}{dt} \right)_{\max} \quad (61)$$

Zum weiteren Vergleich gibt Tabelle 6 Daten aus der Literatur an, die von Baker und Tang [19] zitiert werden. Hier fehlen allerdings sämtliche Angaben über das Volumen des Explosionsraumes sowie über die sonstigen Versuchsbedingungen.

Der von CHARLES berechnete Explosionsdruck liegt wie erwartet höher als das Versuchsergebnis von Nagy u. a.; der

Tabelle 6

Maximaler Explosionsdruck sowie maximaler zeitlicher Druckanstieg von stöchiometrischen Methan/Luft-Gemischen. Vergleich der Experimente von Nagy u.a. [12] mit den Rechnungen mit CHARLES

[19]	Nagy u.a. [12]	CHARLES	Baker und Tang
$P_{max}$ bar	7,70	9,10	8,83
$(dp/dt)_{max}$ bar · s <sup>-1</sup>	100	39	
V m <sup>3</sup>	0,0283 (1 cuft)	1	
$V_B/A_B$ m	0,0508	0,1765	
$K_G$ bar·m·s <sup>-1</sup>	30,5	39	64
$KG^*$ bar·m·s <sup>-1</sup> [Gl. (61)]	5,08	6,88	

Fehler beträgt hier 18%. Die Abweichung zum von Baker und Tang angegebenen theoretischen Wert von 8,83 bar beträgt allerdings nur 3%. Die Abweichungen sowohl des maximalen Explosionsdruckes als auch des  $K_G$ -Wertes liegen innerhalb der experimentell reproduzierbaren Genauigkeit. Auf die Schwierigkeiten und Fehlerquellen bei der experimentellen Bestimmung von Explosionskenngrößen wurde bereits weiter oben verwiesen. In Anbetracht dessen ist eine Genauigkeit von 20% durchaus als befriedigend zu betrachten.

Das in diesem Abschnitt erwähnte Beispiel umfaßt den einfachsten denkbaren Fall einer Explosion. Die laminare sphärische Flammenausbreitung in einem ideal homogenen, ruhenden Medium läßt sich auch mit verhältnismäßig einfachen Modellen gut beschreiben.

Ein Mehrzonen-Modell, wie es auch von Nagy u.a. [12] verwendet wurde, liefert bereits eine gute Widerspiegelung der tatsächlichen Verhältnisse. Das im Programm CHARLES enthaltene Modell, welches die Berechnung zweidimensionaler Verteilungen einschließt, ist mit diesem Beispiel eigentlich unterfordert. Dennoch wurde dieses Beispiel hier aufgenommen, da ein detailliertes Modell selbstverständlich auch relativ einfache Prozesse wiedergeben muß.

## 7.4 Gasexplosionen in druckentlasteten Behältern

Als nächstes Testbeispiel wurden Experimente gewählt, die Heinrich [13] mit Methan/Luft-Gemischen bei stöchiometrischen Verhältnissen durchgeführt hat. Heinrich verwendete eine würfelförmige Explosionskammer von 12 Liter Rauminhalt. An einer Seite der Kammer war eine Öffnung zum Anbringen von Druckentlastungseinrichtungen verschiedener Größe vorgesehen.

Bei einer Entlastungsfläche von 41,5 cm<sup>2</sup> war eine ausreichende Druckentlastung der Explosionskammer gewährleistet. Der mittlere Druck in der Kammer stieg nicht über den statischen Ansprechdruck der Entlastungseinrichtung von 1,4 bar an.

Im Fall einer Entlastungsfläche von nur 10 cm<sup>2</sup> ergaben sich andere Verhältnisse. Nach der Zündung breitete sich eine

laminare Explosionsflamme aus, bis im Behälter der statische Ansprechdruck erreicht wurde. Mit der Freigabe der Entlastungsöffnung setzte dann zunächst ein Absinken des Druckes im Explosionsraum infolge des Ausströmens ein. Das Einsetzen der Strömung hingegen führte nun wiederum zur Beschleunigung der Reaktion und damit zu einer erhöhten Wärmefreisetzung. Der damit verbundene Anstieg des Innendrucks überstieg den Druckabfall infolge des Ausströmens, so daß insgesamt eine Erhöhung des Druckes im Explosionsraum registriert wurde. Erst nach dem Ende des Verbrennungsvorganges sank der Druck im Behälterinneren auf den Umgebungsdruck.

Heinrich untersuchte in [13] weiterhin die Abhängigkeit des hier beschriebenen Vorganges vom statischen Ansprechdruck der Entlastungsöffnung. In den Abb. 25, 26 und 27 sind die entsprechenden Druck-Zeit-Verläufe für eine Fläche der Entlastungsöffnung von 10 cm<sup>2</sup> dargestellt. Dabei variiert der Ansprechdruck von 1,15 bar auf 1,45 bar und 2,04 bar.

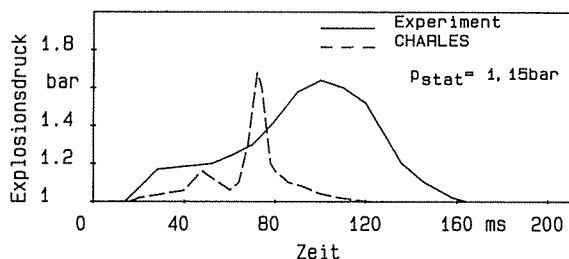


Abb. 25

Druck-Zeit-Verlauf bei einer Explosion eines stöchiometrischen Methan/Luft-Gemisches in einem 12-Liter-Behälter mit Druckentlastung  $p_{stat} = 1,15$  bar;  $A_{Druckentlastung} = 10$  cm<sup>2</sup>

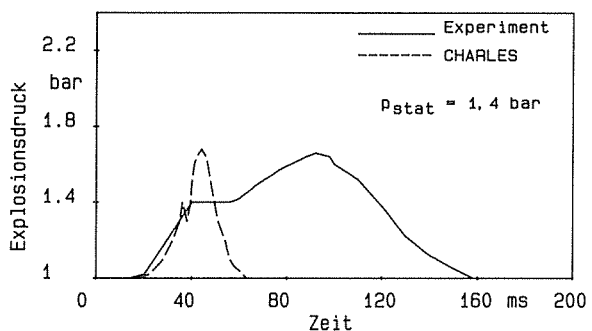


Abb. 26

Druck-Zeit-Verlauf bei einer Explosion eines stöchiometrischen Methan/Luft-Gemisches in einem 12-Liter-Behälter mit Druckentlastung  $p_{stat} = 1,45$  bar;  $A_{Druckentlastung} = 10$  cm<sup>2</sup>

Den experimentellen Ergebnissen sind jeweils die mit dem Rechenprogramm CHARLES ermittelten Druck-Zeit-Kurven gegenübergestellt. Für alle drei Fälle lassen sich die Ergebnisse der Rechnungen folgendermaßen zusammenfassen: Der zeitliche Druckverlauf wird von den Rechnungen qualitativ richtig wiedergegeben. Wie schon im Beispiel zur turbulenten Flammenausbreitung im Rohr (siehe Abschnitt 7.2) stimmt jedoch der Zeitmaßstab nicht. Nach dem Ansprechen der Druckentlastung wird das Ausströmen aus dem Behälter als viel zu schnell berechnet.

Dabei konnte bis jetzt nicht völlig zweifelsfrei geklärt werden, ob der austretende Impulsstrom selbst überschätzt wird, oder ob die Verbrennung durch eine Überschätzung der turbulenten Flammengeschwindigkeit in der Rechnung zu schnell beendet ist. Der letzte Fall ist dabei jedoch der wahrscheinli-



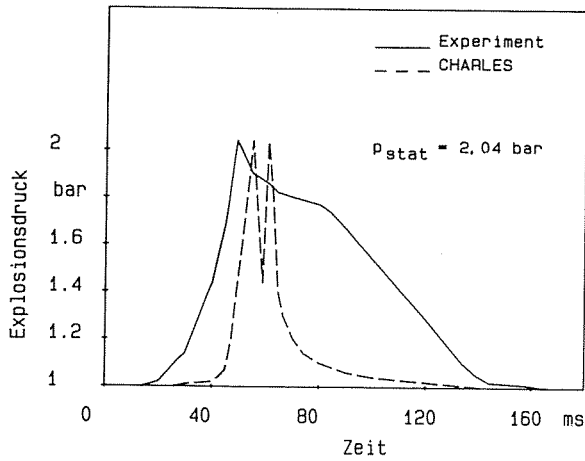


Abb. 27  
 Druck-Zeit-Verlauf bei einer Explosion eines stöchiometrischen Methan/Luft-Gemisches in einem 12-Liter-Behälter mit Druckentlastung  $p_{stat} = 2,04 \text{ bar}$ ;  $A_{Druckentlastung} = 10 \text{ cm}^2$

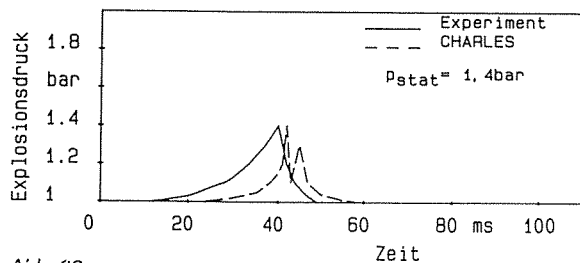


Abb. 28  
 Druck-Zeit-Verlauf bei einer Explosion eines stöchiometrischen Methan/Luft-Gemisches in einem 12-Liter-Behälter mit Druckentlastung  $p_{stat} = 1,4 \text{ bar}$ ;  $A_{Druckentlastung} = 41,5 \text{ cm}^2$

chere, da die das Ausströmen beschreibenden Gleichungen bekannt sind und kaum Fehlerquellen enthalten dürften.

Im Gegensatz dazu enthält das Turbulenzmodell mehrere Ungewißheiten, auf die weiter oben bereits verwiesen wurde. Auch die verhältnismäßig geringen Konzentrationen von Brenngas und Sauerstoff am Ende der Rechnung weisen auf einen dominanten Einfluß des Verbrennungsmodells hin.

Allerdings werden die maximalen Explosionsdrücke in allen drei Fällen mit nur geringem Fehler wiedergegeben. Die Bewertung der Rechnungen kann daher dieselbe sein wie beim Beispiel in Abschnitt 7.2. Die vom Programm CHARLES berechneten Explosionsdrücke spiegeln die experimentellen Ergebnisse gut wider, der Zeitmaßstab ist aber verzerrt.

Abb. 28 zeigt den zeitlichen Druckverlauf für Verhältnisse, bei denen eine ausreichend große Fläche zur Druckentlastung ( $41,5 \text{ cm}^2$ ) eingesetzt wurde. Der Druck im Inneren des Explosionsbehälters steigt dabei nicht über den statischen Ansprechdruck von  $1,4 \text{ bar}$  an. Nach der Freigabe der Entlastungsöffnung bewirkt der ausströmende Impuls einen relativ steilen Druckabfall.

Dieser Vorgang wird vom Programm CHARLES mit den Experimenten gut übereinstimmend berechnet. Da hier der Ausströmvorgang eindeutig dominiert, gibt es auch keinen zeitlichen Versatz zwischen dem experimentell ermittelten und dem berechneten Druckmaximum. Die gute Übereinstimmung der Kurven in diesem Beispiel bestätigt die Vermutung, daß der Ansatz für die turbulente Verbrennung zu den erwähnten Abweichungen bei den weiter oben dargestellten Beispielen führt.

## 8. Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde gezeigt, wie ein mathematisches Modell abgeleitet werden kann, mit dessen Hilfe sich Explosionsvorgänge mathematisch simulieren lassen. Dabei ist es möglich, durch Einsetzen von Idealisierungen und physikalisch begründeten Annahmen für den Explosionsablauf das zunächst sehr aufwendige System der Erhaltungsgleichungen soweit zu vereinfachen, daß es numerisch relativ leicht auswertbar wird.

Das Ziel bestand darin, einen Rechenalgorithmus aufzubauen, der auf Workstations installierbar ist und entsprechende Beispielrechnungen mit verhältnismäßig kurzen Rechenzeiten erlaubt.

Damit sollte ein Werkzeug zur Verfügung stehen, mit dessen Hilfe "numerische Experimente" ausgeführt werden können. Darunter sind Beispielrechnungen zu verstehen, bei denen der Einfluß bestimmter Parameter auf den Explosionsablauf gezielt untersucht werden kann. Derartige "numerische Experimente" sind in der hier vorliegenden Arbeit allerdings noch nicht enthalten. Im Ansatz ist eine solche Möglichkeit aus der Variation der Entlastungsfläche im Beispiel von Abschnitt 7.4 erkennbar.

Im Mittelpunkt dieser Arbeit standen nur die grundsätzlichen Überlegungen, die zur Ableitung eines solchen Modells führen, das zwar möglichst weitgehend vereinfacht ist, aber dennoch recht detaillierte Informationen über die Flammenausbreitung im Strömungsfeld liefert. Die Berechnung lokaler Verteilungen von Dichte, Druck, Temperatur, Konzentrationen und Geschwindigkeiten ermöglicht dabei die Berücksichtigung komplizierterer geometrischer Verhältnisse, als es beispielsweise die Mehr-Zonen-Modelle zulassen.

Die mit dem Programm CHARLES durchgeführten Beispielrechnungen weisen nach, das das darin enthaltene Modell

durchaus geeignet ist, die wesentlichen Phänomene im Explosionsverlauf wiederzugeben. Sowohl bei den Beispielen zu Explosionen im geschlossenen Behälter als auch beim mit Strömungshindernissen versehenen Rohr werden die sich einstellenden maximalen Explosionsdrücke mit guter Übereinstimmung zum Experiment wiedergegeben. Im letztgenannten Fall gelang sogar die Berücksichtigung der recht komplizierten turbulenten Flammenbeschleunigung. Damit ist das Modell in der Lage, die sicherheitstechnisch bedeutsamste Aussage - den zu erwartenden maximalen Explosionsdruck - zu liefern.

Abweichungen vom experimentellen Befund zeigen sich bei der Wiedergabe des zeitlichen Ablaufs der Explosionen. Hier besteht offensichtlich ein systematischer Fehler, der sich darin äußert, das die Explosion in der Rechnung viel schneller verläuft, als es den experimentellen Ergebnissen entspricht. Es ergeben sich hier ganz ähnliche Schwierigkeiten, wie sie von Hjertager [1] bei den Rechnungen mit FLACS mitgeteilt werden.

Offensichtlich gibt das hier eingesetzte Turbulenzmodell die tatsächlichen Verhältnisse nur unzureichend wieder. Dies betrifft insbesondere das Übergangsbereich laminar zu turbulent.

Die Betrachtung lediglich der laminaren Flammenausbreitung ist in diesem Bereich nicht mehr ausreichend. Die herkömmlichen Turbulenzansätze hingegen überschätzen den turbulenten Transport in diesem Gebiet.

Der Umschlag von laminarer zu turbulenter Flammenausbreitung ist nun aber gerade ein sehr wichtiger Bereich bei der Behandlung von Strömungen, die durch eine chemische Reaktion hervorgerufen werden. Es ist daher für die mathematische Simulation dieser Vorgänge außerordentlich bedeutsam, einen geeigneten Ansatz zu finden, der die tatsächlichen Verhältnisse realistisch wiedergibt.

## Literatur

- [1] Hjertager, B.H.; *Comb.Sci.Techn.* 27: 159-170 (1982)
- [2] Spalding, D.B.; *Sixteenth Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1976, pp. 1657-1663
- [3] Butler, T.D., O'Rourke, P.J.; *Sixteenth Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1976, pp. 1503-1515
- [4] Bakke, J.R.; Bjerketvedt, D.; Bjorkhaug, M.; Sorheim, H.R.; *Sixth Int. Symp. "Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries" vol. I*, pp. 24-1 - 24-11, Oslo, 1989
- [5] Wilkes, N.S.; Guilbert, P.W.; Shepherd, C.M.; Simcox, S.; *AERE R13508*
- [6] Görner, K., Zinser, W.; *Chem.-Ing.-Techn.* 59: 834-844 (1987)
- [7] Bockhorn, H.; *Chem.-Ing.-Techn.* 63: 715-724 (1991)
- [8] Moen, I.O.; Lee, J.H.S.; Hjertager, B.H.; Fuhre, K.; Eckhoff, R.K.; *Comb. and Flame* 42: 31-52 (1982)
- [9] Reitz, R.; *Eighteenth Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1981, pp. 433-442
- [10] Cant, R.S., Bray, K.N.C.; *Comb. Flame* 76: 243-263 (1989)
- [11] Lewis, B., von Elbe, G.; *Combustion, Flames and Explosion of Gases*, Academic Press, New York, 1961
- [12] Nagy, J.; Seiler, E.C.; Conn, J.W.; Verakis, H.C.; *Bureau of Mines Report 7507* (1971)
- [13] Heinrich, H.J.; *Chem.-Ing.-Techn.* 38: 1125-1133 (1966)
- [14] Clark, D.P.; Smoot, L.D.; *Comb. Flame* 62: 255-269 (1985)
- [15] Gruber, U.; Puppich, P.; Noll, E.; Mewes, D.; *Chem.-Ing.-Techn.* 59: 918-926 (1987)
- [16] Canu, P.; Rota, R.; Carra, S.; *Comb. Flame* 80: 49-64 (1990)
- [17] Bartmä, F.; *Gasdynamik der Verbrennung*, Springer Verlag, Wien, 1975
- [18] Hjertager, B.H.; *J. of Hazardous Materials* 9: 315-346 (1984)
- [19] Baker, W.E.; Tang, M.J.; *Gas, Dust and Hybrid Explosions*, Elsevier, Amsterdam, 1991
- [20] Bartknecht, W.; *Staubexplosionen - Ablauf und Schutzmaßnahmen*, Springer Verlag, Berlin, 1987
- [21] Krause, U.; *Chemische Technik* 43: 268-272 (1991)
- [22] VDI-Richtlinie 3673, 1986
- [23] VDI-Richtlinie 2263, 1986
- [24] Eckhoff, R.K.; *Dust Explosions in the Process Industries*, Butterworth-Heinemann, Oxford, 1991
- [25] Barthel, U.; Krause, U.; *Fourth Int. Colloq. on Dust Explosions*, 11,4-9, 1990, Porabka-Kozubnik, Poland
- [26] Hjertager, B.H.; Solberg, T.; Nymoen, K.O.; *J. Loss Prev. Process Ind.* 5: 165-175 (1992)
- [27] Krause, U.; submitted for publication in *Comb. Flame*
- [28] Shih, T.H.; Mansour, N.N.; *Engineering Turbulence Modelling and Experiments* (W. Rodi and E.N. Ganic eds.), Elsevier, New York, 1991, pp. 13-22
- [29] Michelassi, V.; Martelli, F.; *Engineering Turbulence Modelling and Experiments* (W. Rodi and E.N. Ganic eds.), Elsevier, New York, 1991, pp. 215-224
- [30] Bray, K.N.C.; Libby, P.A.; Moss, J.B.; *Comb. Flame* 61: 87-102 (1985)
- [31] Fujisawa, M.; *Engineering Turbulence Modelling and Experiments* (W. Rodi and E.N. Ganic eds.), Elsevier, New York, 1991, pp. 23-32
- [32] Magnussen, B.F.; Hjertager, B.H.; *Sixteenth Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1976, pp. 719-730
- [33] Williams, F.A.; *Combustion Theory*, Addison-Wesley, Reading, 1986
- [34] Andrews, G.E.; Bradley, D.; Lwakabamba, S.B.; *Comb. Flame* 24: 285-304 (1975)
- [35] Courant, O.R.; Friedrichs, K.; *Supersonic Flow and Shock Waves*, Interscience Publ., New York, 1948
- [36] Press, W.H.; Flannery, B.P.; Teukolsky, S.A.; Vetterling, W.T.; *Numerical Recipes*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1987
- [37] Gentry, R.A.; Martin, R.E.; Daly, B.J.; *J. Comp. Phys.* 1: 87-118 (1966)
- [38] Enderle, G.; *KfK-Report 2679*, Karlsruhe, 1979
- [39] Albring, W.; *Angewandte Strömungslehre*, Akademie-Verlag, Berlin, 1978
- [40] Proust, C.; Veyssiere, B.; *Comb.Sci.Techn.* 62: 149-172 (1988)
- [41] VDI-Richtlinie 3673, überarbeitete Fassung (Gründruck), 1992

## Anhang 1 Vollständiges System der zweidimensionalen Transportgleichungen

$$\frac{\delta \Phi}{\delta t} + \frac{\delta u_i \Phi}{\delta x_i} = - \left( \Gamma_{\Phi} \frac{\delta \Phi}{\delta x_i} \right) + S_{\Phi} \quad (\text{A1-1})$$

mit

$$\Phi = [\rho, \rho u, \rho v, \rho h, C_{Br}, C_{O_2}]^T \quad (\text{A1-2})$$

Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\delta \rho}{\delta t} + \frac{\delta \rho u}{\delta x} + \frac{\delta \rho v}{\delta y} = 0 \quad (\text{A1-3})$$

Impulstransportgleichungen:

$$\frac{\delta \rho u}{\delta t} + \frac{\delta \rho u^2}{\delta x} + \frac{\delta \rho uv}{\delta y} = - \frac{\delta p}{\delta x} + \eta \left[ 2 \frac{\delta^2 u}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 u}{\delta y^2} + \frac{\delta^2 v}{\delta x \delta y} \right] + F_x \quad (\text{A1-4})$$

$$\frac{\delta \rho v}{\delta t} + \frac{\delta \rho v^2}{\delta y} + \frac{\delta \rho vu}{\delta x} = - \frac{\delta p}{\delta y} + \eta \left[ 2 \frac{\delta^2 v}{\delta y^2} + \frac{\delta^2 v}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 u}{\delta x \delta y} \right] + F_y \quad (\text{A1-5})$$

Energietransportgleichung:

$$\frac{\delta \rho h}{\delta t} + \frac{\delta \rho uh}{\delta x} + \frac{\delta \rho vh}{\delta y} = - \frac{\delta p}{\delta t} + \dot{Q}_R + \phi + \frac{\delta}{\delta x} \left( \lambda \frac{\delta T}{\delta x} \right) + \frac{\delta}{\delta y} \left( \lambda \frac{\delta T}{\delta y} \right) \quad (\text{A1-6})$$

Stofftransportgleichung der Komponente k:

$$\frac{\delta C_k}{\delta t} + \frac{\delta C_k u}{\delta x} + \frac{\delta C_k v}{\delta y} = C_k \quad (\text{A1-7})$$

## Anhang 2 Das k-ε-Turbulenzmodell (vgl. [1], [28], [29] u.a.)

kinetische Energie eines Wirbels:

$$\frac{\delta \rho k}{\delta t} + \frac{\delta \rho u_i k}{\delta x_i} = - \left( \frac{\delta v_{eff} \rho k}{\delta x_i \sigma_k} \right) + G - \rho \epsilon \quad (\text{A2-1})$$

Dissipationsrate der kinetischen Wirbelenergie:

$$\frac{\delta \rho \epsilon}{\delta t} + \frac{\delta \rho u_i \epsilon}{\delta x_i} = - \left( \frac{\delta v_{eff} \rho \epsilon}{\delta x_i \sigma_{\epsilon}} \right) + C_1 G \frac{\epsilon}{k} - C_2 \rho \frac{\epsilon^2}{k} \quad (\text{A2-2})$$

Produktionsrate der kinetischen Wirbelenergie aus der Grundströmung:

$$G = \sigma_{ij} \frac{\delta u_i}{\delta x_j} \quad (\text{A2-3})$$

Reynolds'scher Spannungstensor:

$$\sigma_{ij} = \nu_t \left( \frac{\delta u_i}{\delta x_j} + \frac{\delta u_j}{\delta x_i} \right) \quad (\text{A2-4})$$

$C_1$ ,  $C_2$ ,  $\sigma_{\epsilon}$  und  $\sigma_k$  sind empirische Konstanten, die jeweils für die Fälle hoher oder niedriger Reynoldszahlen der Grundströmung angegeben werden.

## Bisher erschienene Forschungsberichte der BAM

Nr. 1/1968

Forschung und Entwicklung in der Bundesanstalt für Materialprüfung (BAM)  
Rechenschaftsbericht für den Bundesminister für Bildung und Wissenschaft

Nr. 2/1970 (vergriffen)

G. Andreas  
Zum Problem des Feuchtigkeitsschutzes von Dehnungsmeßstreifen und Halbleitergebern

Nr. 3/1970

J. Ziebs  
Über das mechanische Verhalten von Aluminium-Stahl-Freileitungsseilen als Beispiel für Verbundbauteile

Nr. 4/1970 (vergriffen)

A. Burmester  
Formbeständigkeit von Holz gegenüber Feuchtigkeit - Grundlagen und Vergütungsverfahren

Nr. 5/1971

N. Steiner  
Die Bedeutung der Netzstellenart und der Netzwerkket-tendiche für die Beschreibung der elastischen Eigen-schaften und des Abbaus von elastomeren Netzwerken

Nr. 6/1971

P. Schneider  
Zur Problematik der Prüfung und Beurteilung des Luftschallschutzes von Bauelementen bei unter-schiedlichen Einbaubedingungen

Nr. 7/1971

H.-J. Petrowitz  
Chromatographie und chemische Konstitution - Untersuchungen über den Einfluß der Struktur organischer Verbindungen auf das Verhalten bei der Dünnschicht-Chromatographie

Nr. 8/1971

H. Veith  
Zum Spannungs-Drehungs-Verhalten von Baustählen bei Wechselbeanspruchung

Nr. 9/1971

K.-H. Möller  
Untersuchung über die sichernde Wirkung poröser Massen in Acetylenflaschen

Nr. 10/1972

D. Aurich, E. Martin  
Untersuchungen über die Korngrößenbestimmung mit Ultraschall zur Entwicklung einer für die Praxis geeigneten zerstörungsfreien Meßmethode

Nr. 11/1972

H.-J. Krause  
Beitrag zur Kenntnis der Schnittriefenbildung und Schnittgütwerte beim Brennschneiden

Nr. 12/1972

H. Feuerberg  
Über Veränderungen von Nylon-6-Fasern beim Texturieren

Nr. 13/1972

K.-H. Habig, K. Kirschke, W.-W. Maennig, H. Tischer  
Festkörpergleitreibung und Verschleiß von Eisen, Kobalt, Kupfer, Silber, Magnesium und Aluminium in einem Sauerstoff-Stickstoff-Gemisch zwischen 760 und  $2 \cdot 10^{-7}$  Torr

Nr. 14/1972

E. Fischer  
Untersuchungen zur Amplitudenabhängigkeit der Ultraschalldämpfung in Metallen bei 20 kHz

Nr. 15/1972

H. Pohl  
Studie und Probleme der chemischen Edelmetall-Analyse

Nr. 16/1972

E. Knublauch  
Über Ausführung und Aussagefähigkeit des Norm-brandversuches nach DIN 4102, Blatt 2, im Hinblick auf die Nachbildung natürlicher Schadenfeuer

Nr. 17/1972

P. Reimers  
Aktivierungsanalyse mit schnellen Neutronen, Photonen und geladenen Teilchen

Nr. 18/1973

W. Struck  
Das Spröbruchverhalten des Baustahles R St 37-2 N in geschweißten Konstruktionen, dargestellt mit Hilfe der Methode des Temperaturvergleiches

Nr. 19/1973

K. Kaffanke, H. Czichos  
Die Bestimmung von Grenzflächentemperaturen bei tribologischen Vorgängen

Nr. 20/1973

R. Rudolphi  
Brandrisiko elektrischer Leitungen und Installationen in Wänden

Nr. 21/1973

D. Klaffke, W. Maennig  
Die kontinuumsmechanische Erfassung des zeitlichen Ablaufs der elastisch-plastischen Dehnungen bei der Zerrütung

Nr. 22/1973

R. Rudolphi, E. Knublauch  
Untersuchungen für ein Prüfverfahren zur Bemessung der Brandschutzbekleidung von Stahlstützen

Nr. 23/1973

W. Ruske  
Reichs- und preußische Landesanstalten in Berlin. Ihre Entstehung und Entwicklung als außeruniversitäre Forschungsanstalten und Beratungsorgane der politischen Instanzen

Nr. 24/1973

J. Stanke, E. Klement, R. Rudolphi  
Das Brandverhalten von Holzstützen unter Druckbeanspruchung

Nr. 25/1973

E. Knublauch  
Über das Brandgeschehen vor der Fassade eines brennenden Gebäudes unter besonderer Berücksichtigung der Feuerbeanspruchung von Außenstützen

Nr. 26/1974

P. Jost, P. Reimers, P. Weise  
Der Elektronen-Linearbeschleuniger der BAM - Eigenschaften und erste Anwendungen

Nr. 27/1974

H. Wüstenberg  
Untersuchungen zum Schallfeld von Winkelprüfköpfen für die Materialprüfung mit Ultraschall

Nr. 28/1974

H. Heinrich  
Zum Ablauf von Gasexplosionen in mit Rohrleitungen verbundenen Behältern

Nr. 29/1974

P. Schneider  
Theorie der dissipativen Luftschalldämmung bei einem Idealisotropen porösen Material mit starrem Skelet für senkrechten, schrägen und allseitigen Schalleinfall

Nr. 30/1974 (vergriffen)

H. Czichos, G. Salomon  
The Application of Systems Thinking and Systems Analysis to Tribology

Nr. 31/1975

G. Fuhrmann  
Untersuchungen zur Klärung des Verhaltens thermoplastischer Kunststoffe bei Wechseldehnungsbeanspruchung

Nr. 32/1975

R. Rudolphi, B. Böttcher  
Ein thermo-elektrisches Netzwerkverfahren zur Berechnung stationärer Temperatur- und Wärmestromverteilungen mit Anwendungsbeispielen

Nr. 33/1975

A. Wagner, G. Kieper, R. Rudolphi  
Die Bestimmung der Temperaturleitfähigkeit von Baustoffen mit Hilfe eines nichtstationären Meßverfahrens

Nr. 34/1976 (vergriffen)

H.-J. Deppe  
Untersuchungen zur Vergütung von Holzwerkstoff

Nr. 35/1976

E. Limberger  
Der Widerstand von Platten, die als Beplankungs-material leichter Wände verwendet werden, gegenüber dem Aufprall harter Körper - Vorschlag für ein Prüfverfahren -

Nr. 36/1976 (vergriffen)

J. Hundt  
Wärme- und Feuchtigkeitsleitung in Beton unter Einwirkung eines Temperaturgefälles

Nr. 37/1976

W. Struck  
Die stoßartige Beanspruchung leichter, nichttragender Bauteile durch einen mit der Schulter gegenprallenden Menschen  
- Vorschlag für ein Prüfverfahren -

Nr. 38/1976

K.-H. Habig  
Verschleißuntersuchungen an gas-, bad- und ionitriertem Stahl 42 CrMo 4

Nr. 39/1976

K. Kirschke, G. Kempf  
Untersuchung der viskoelastischen Eigenschaften von Flüssigkeiten (mit Nicht-Newton'schem Fließverhalten) insbesondere bei höherer Schwerbeanspruchung

Nr. 40/1976

H. Hantsche  
Zum Untergrundabzug bei energiedispersiven Spektren nach verschiedenen Verfahren

Nr. 41/1976

B. Böttcher  
Optische Eigenschaften cholesterinischer Flüssigkeiten

Nr. 42/1976

S. Dietlen  
Ermittlung der Mindestzündenergie brennbarer Gase in Mischung mit Luft

Nr. 43/1976

W. Struck  
Das Spröbruchverhalten geschweißter Bauteile aus Stahl mit zäh-sprödem Übergang im Bruchverhalten, dargestellt mit Hilfe der Methode des Temperaturvergleiches

Nr. 44/1976

W. Matthees  
Berechnung von räumlichen, linear elastischen Systemen, die aus finiten Stab- und Balkenelementen zusammengesetzt sind, unter Verwendung des Programms "Stab-Werk"

Nr. 45/1976

W. Paatsch  
Untersuchung des Elektrodenverhaltens im Vakuum aufgedampfter Metallschichten

Nr. 46/1977 (vergriffen)

G. Schickert, H. Winkler  
Versuchsergebnisse zur Festigkeit und Verformung von Beton bei mehraxialer Druckbeanspruchung  
Results of Test Concerning Strength and Strain of Concrete Subjected to Multiaxial Compressive Stresses

Nr. 47/1977

A. Plank  
Bautechnische Einflüsse auf die Tragfähigkeit von Kunststoffdübeln für Fassadenbekleidungen

Nr. 48/1977

U. Holzlöhner  
Setzung von Fundamenten infolge dynamischer Last, angewendet auf die Fundamente einer geplanten Schnellbahn

Nr. 49/1977

G. Wittig  
Untersuchungen zur Anwendung von Mikrowellen in der zerstörungsfreien Prüfung

Nr. 50/1978 (vergriffen)

N. Czaika, N. Mayer, C. Amberg, G. Magiers, G. Andrae, W. Markowski  
Zur Meßtechnik für die Sicherheitsbeurteilung und Überwachung von Spannbeton-Reaktordruckbehältern

Nr. 51/1978

J. Sickfeld  
Auswirkung von chemischen und physikalisch-technologischen Einflußfaktoren auf das Beständigkeitsverhalten von Oberflächenbeschichtungen auf der Basis von Reaktionsbeschichtungsstoffen

Nr. 52/1978

A. Tomov  
Zum Einfluß der Gleitgeschwindigkeit auf das tribologische Verhalten von Werkstoffen hoher Härte bei reiner Festkörperreibung

- Nr. 53/1978  
R.-G. Rohrmann, R. Rudolphi  
Bemessung und Optimierung beheizbarer Straßen- und Brückenbeläge
- Nr. 54/1978  
H. Sander  
Magnetisches Verhalten dünner Eisenschichten bei mechanischer Wechselbeanspruchung
- Nr. 55/1978  
D. Klaffke  
Beobachtung und Orientierungsbestimmung der Oberflächenkristalle polykristalliner 99,999 %-A1-Proben bei Biegewechselbeanspruchung
- Nr. 56/1979  
W. Brünner, C. Langlie  
Stabilität von Sandwichbauteilen
- Nr. 57/1979  
M. Stadthaus  
Untersuchungen an Prüfmitteln für die Magnetpulverprüfung  
Investigations on Inspection-Media for Magnetic Particle-Testing
- Nr. 58/1979  
W. Struck  
Ermittlung des Bauteilwiderstandes aus Versuchsergebnissen bei vereinbartem Sicherheitsniveau
- Nr. 59/1979  
G. Plauk  
Ermittlung der Verformungen biegebeanspruchter Stahlbetonbalken mit der Methode der Finiten Elemente unter besonderer Berücksichtigung des Verbundes zwischen Beton und Stahl
- Nr. 60/1979  
H. Spreckelmeyer, R. Helms, J. Ziebs  
Untersuchungen zur Erfassung der Kaltformbarkeit von Feinblechen beim Strecken
- Nr. 61/1979  
K. Richter  
Beschreibung von Problemen der höheren Farbmatrik mit Hilfe des Gegenfarbensystems
- Nr. 62/1979  
W. Gerisch, G. Becker  
Geomagnetobiologisch bedingter Zusammenhang zwischen der Fraßaktivität von Termiten und der Zahl der Sterbefälle
- Nr. 63/1979  
E. Behrend, J. Ludwig  
Untersuchungen an Stopfbuchsen von Ventilen und Schiebern für Gase
- Nr. 64/1980  
W. Rücker  
Ermittlung der Schwingungserregung beim Betrieb schienengebundener Fahrzeuge in Tunneln sowie Untersuchung des Einflusses einzelner Parameter auf die Ausbreitung von Erschütterungen im Tunnel und dessen Umgebung
- Nr. 65/1980  
P. Schmidt, D. Aurich, R. Helms, H. Veith, J. Ziebs  
Untersuchungen über den Einfluß des Spannungszustandes auf bruchmechanische Kennwerte
- Nr. 66/1980  
M. Hattwig  
Auswirkung von Druckentlastungsvorgängen auf die Umgebung
- Nr. 67/1980  
W. Matthees  
Beitrag zur dynamischen Analyse von vorgespannten und vorbelasteten Feder-Masse-Systemen mit veränderlicher Gliederung unter stoßartiger Beanspruchung
- Nr. 68/1980  
D. Petersohn  
Oberflächenmeßverfahren unter besonderer Berücksichtigung der Stereomeßtechnik.  
Entwicklung eines volleuzentrischen Präzisions-Goniometers
- Nr. 69/1980  
F. Buchhardt, P. Brandl  
Untersuchungen zur Integrität den Liners von Reaktorsicherheitschillen (Containments) in Stahlbeton- und Spannbetonbauweise
- Nr. 70/1980 (vergriffen)  
G. Schickert  
Schwellenwerte beim Betondruckversuch
- Nr. 71/1980  
W. Matthees, G. Magiera  
Untersuchungen über durch den Boden gekoppelte dynamische Wechselwirkungen benachbarter Kernkraftwerksbauten großer Masse unter seismischen Einwirkungen
- Nr. 72/1980  
R. Rudolphi  
Übertragbarkeit der Ergebnisse von Brandprüfungen am Beispiel von Stahl- und Holzstützen
- Nr. 73/1980  
P. Wegener  
Vergleichende Untersuchungen zum Tragverhalten von Klemmkupplungen für Stahrohrgerüste nach bestehenden deutschen Prüfvorschriften und geplanten europäischen bzw. internationalen Prüfnormen
- Nr. 74/1980  
R. Rudolphi, R. Müller  
ALGOL-Computerprogramm zur Berechnung zweidimensionaler instationärer Temperaturverteilungen mit Anwendungen aus dem Brand- und Wärmeschutz
- Nr. 75/1980  
H.-J. Heinrich  
Beitrag zur Kenntnis des zeitlichen und örtlichen Druckverlaufs bei der plötzlichen Entlastung unter Druck stehender Behälter und Behälterkombinationen
- Nr. 76/1980  
D. Klaffke, W.-W. Maennig  
Deformationsverhalten von Rein- und Reinstaluminium sowie Cu 99,9 und St 37 bei Biegewechselbeanspruchung im Rasterelektronenmikroskop
- Nr. 77/1981  
M. Gierloff, M. Mautzsch  
Untersuchung des Verhaltens von Lagerzementen
- Nr. 78/1981  
W. Rücker  
Dynamische Wechselwirkung eines Schienen-Schwellensystems mit dem Untergrund
- Nr. 79/1981  
V. Neumann  
Ein Beitrag zur Untersuchung der wasserstoffbeeinflussten Kaltrißneigung höherfester niedriglegierter Feinkornbaustähle mit dem Implantversuch
- Nr. 80/1981  
A. Plank, W. Struck, M. Tzschätzsch  
Ursachen des Teileinsturzes der Kongreßhalle in Berlin-Tiergarten
- Nr. 81/1981  
J. Schmidt  
Graphisch-rechnerisches Verfahren zum Erfassen der Zündhäufigkeit zündbarer Stoffe; Anwendung auf Datenmaterial aus dem Bereich der Statistik
- Nr. 82/1982  
R. Helms, H.-J. Kühn, S. Ledworowski  
Zur werkstoffmechanischen Beurteilung des Kerbschlagbiegeversuches  
Assement of the mechanical behaviour of materials in the notched bar impact test
- Nr. 83/1982  
H. Czichos, P. Feinle  
Tribologisches Verhalten von thermoplastischen Kunststoffen  
- Kontaktdeformation, Reibung und Verschleiß, Oberflächenuntersuchungen -
- Nr. 84/1982  
R. Müller, R. Rudolphi  
Übertragbarkeit der Ergebnisse von Brandprüfungen im Kleinprüfstand (Vergleichsversuche)
- Nr. 85/ISBN 3-88314-231-X/1982  
H. Czichos  
Technische Materialforschung und -prüfung - Entwicklungstendenzen und Rahmenvorschläge für ein EG-Programm "Basic Technological Research" Materials Research and Testing - Development Trends and Outline Proposals for a Community Programme "Basic Technological Research" -
- Nr. 86/ISBN 3-88314-232-8/1982  
K. Niesel, P. Schimmelwitz  
Zur quantitativen Kennzeichnung des Verwitterungsverhaltens von Naturwerksteinen anhand ihrer Gefügemerkmale
- Nr. 87/ISBN 3-88314-240-9/1982  
B. Isecke, W. Stichel  
Einfluß baupraktischer Umgebungsbedingungen auf das Korrosionsverhalten von Spannstählen vor dem Injizieren
- Nr. 88/ISBN 3-88314-254-9/1983  
A. Erhard  
Untersuchungen zur Ausbreitung von Longitudinalwellen an Oberflächen bei der Materialprüfung mit Ultraschall
- Nr. 89/ISBN 3-88314-263-8/1983  
D. Conrad, S. Dietlen  
Untersuchungen zur Zerfallsfähigkeit von Distickstoffoxid
- Nr. 90/ISBN 3-88314-264-6/1983  
K. Brandes, E. Limberger, J. Herter  
Kinetische Grenztragfähigkeit von stoßartig belasteten Stahlbetonbauteilen  
Kinetic Load Bearing Capacity of Impulsively Loaded Reinforced Concrete Members
- Nr. 91/ISBN 3-88314-265-4/1983  
M. Weber  
Dreidimensionale Analyse von unbewehrtem Beton mit nichtlinear-elastischem Materialgesetz
- Nr. 92/ISBN 3-88314-266-2/1983  
L. Auersch  
Ausbreitung von Erschütterungen durch den Boden
- Nr. 93/ISBN 3-88314-283-2/1983  
P. Studt  
Unterdrückung stick-slip-induzierter Kurvengeräusche schienengebundener Fahrzeuge durch eine physikalisch-chemische Oberflächenbehandlung der Schienen
- Nr. 94/ISBN 3-88314-284-0/1983  
Xian-Quan Dong  
Untersuchungen der Störschwingungen beim Kerbschlagbiegeversuch und deren Abschwächungen
- Nr. 95/ISBN 3-88314-289-1/1983  
M. Römer  
Über die Fokussierung des Schallfeldes von Ultraschall-Prüfköpfen mit Fresnelschen Zonenplatten
- Nr. 96/ISBN 3-88314-296-4/1983  
H. Eifler  
Verbundverhalten zwischen Beton und geripptem Betonstahl sowie sein Einfluß auf inelastische Verformungen biegebeanspruchter Stahlbetonbalken
- Nr. 97/ISBN 3-88314-297-2/1983  
G. Fuhrmann, W. Schwarz  
Typische Bruchflächenbildung thermoplastischer Kunststoffe nach wechselnder mechanischer Beanspruchung
- Nr. 98/ISBN 3-88314-312-X/1983  
E. Schnabel  
Bestimmung des elastischen Verhaltens von Maschinenwaren  
- Stretch- und Erholungsvermögen -
- Nr. 99/ISBN 3-88314-317-0/1983  
K. Brandes, E. Limberger, J. Herter  
Kinetische Grenztragfähigkeit von stoßartig belasteten Stahlbetonbauteilen  
Kinetic Load Bearing Capacity of Impulsively Loaded Reinforced Concrete Members
- Nr. 100/ISBN 3-88314-298-0/1984  
G. Klamrowski, P. Neustupny  
Untersuchungen zur Prüfung von Beton auf Frostwiderstand
- Nr. 101/ISBN 3-88314-327-8/1984  
P. Reimers, J. Goebbels, H. Heidt, P. Weise, K. Wilding  
Röntgen- und Gammastrahlen-Computer-Tomographie
- Nr. 102/ISBN 3-88314-335-9/1984  
G. Magiers  
Weiterentwicklung des hydraulischen Kompensationsverfahrens auf Druckspannungsmessung in Beton
- Nr. 103/ISBN 3-88314-328-6/1984  
D. Schnitger  
Radiographie mit Elektronen aus Metallverstärkerfolien
- Nr. 104/ISBN 3-88314-339-1/1984  
M. Gierloff  
Beeinflussung von Betoneigenschaften durch Zusatz von Kunststoffdispersionen
- Nr. 105/ISBN 3-88314-345-6/1984  
B. Schulz-Forberg  
Beitrag zum Bremsverhalten energieumwandelnder Aufsetzpuffer in Aufzugsanlagen
- Nr. 106/ISBN 3-88314-360-X/1984  
J. Lehnert  
Setzung von Fundamenten infolge dynamischer Last

- Nr. 107/ISBN 3-88314-361-8/1984  
J. Stichel, J. Ehreke  
Korrosion von Stahlradiatoren
- Nr. 108/ISBN 3-88314-363-4/1984  
L. Auersch  
Durch Bodenerschütterungen angeregte Gebäude-schwingungen - Ergebnisse von Modellrechnungen
- Nr. 109/ISBN 3-88314-381-2/1985  
M. Omar  
Zur Wirkung der Schrumpfbinderung auf den Schweißspannungszustand und das Sprödbruchverhalten von unterpulvergeschweißten Blechen aus St E 460 N
- Nr. 110/ISBN 3-88314-382-0/1985  
H. Walde, B. Kropp  
Wasserstoff als Energieträger
- Nr. 111/ISBN 3-88314-383-9/1985  
K. Ziegler  
Über den Einfluß der Initiierung auf die detonative Umsetzung von Andex-Sprengstoffen unter Berücksichtigung sicherheitstechnischer Gesichtspunkte
- Nr. 112/ISBN 3-88314-409-6/1985  
W. Lützow  
Zeitstandverhalten und strukturelle Veränderungen von vielfach wiederverarbeiteten Polyethylenen
- Nr. 113/ISBN 3-88314-410-X/1985  
R. Helms, H. Henke, G. Oelrich, T. Saito  
Untersuchungen zum Frequenzeinfluß auf die Schwingungskorrosion von Offshore-Konstruktionen
- Nr. 114/ISBN 3-88314-419-3/1985  
P. Rose, P. Raabe, W. Daum, A. Szameit  
Neue Verfahren für die Prüfung von Reaktorkomponenten mittels Röntgen- und Gammastrahlen
- Nr. 115/ISBN 3-88314-420-7/1985  
K. Richter  
Farbempfindungsmerkmal Elementarblau und Buntheitsabstände als Funktion von Farbart und Leuchtdichte von In- und Umfeld
- Nr. 116/ISBN 3-88314-460-6/1985  
F.-J. Kasper, R. Müller, R. Rudolphi, A. Wagner  
Theoretische Ermittlung des Wärmedurchgangskoeffizienten von Fensterkonstruktionen unter besonderer Berücksichtigung der Rahmenproblematik
- Nr. 117/ISBN 3-88314-468-1/1985  
H. Czichos, G. Sievers  
Materials Technologies and Techno-Economic Development  
A Study for the German Foundation for International Development (Deutsche Stiftung für Internationale Entwicklung)
- Nr. 118/ISBN 3-88314-469-X/1985  
H. Treumann, H. Andre, E. Blossfeld, N. Pfeil, M.-M. Zindler  
Brand- und Explosionsgefahren explosionsgefährlicher Stoffe bei Herstellung und Lagerung - Modellversuche mit pyrotechnischen Sätzen und Gegenständen
- Nr. 119/ISBN 3-88314-472-X/1985  
J. Herter, K. Brandes, E. Limberger  
Kinetische Grenztragfähigkeit von stoßartig belasteten Stahlbetonbauteilen  
Versuche an Stahlbetonplatten, Teil 1  
Kinetic Load Bearing Capacity of Impulsively Loaded Reinforced Concrete Members  
Tests on Reinforced Concrete Slabs, Part 1
- Nr. 120/ISBN 3-88314-514-9/1986  
A. Hecht  
Zerstörungsfreie Korngrößenbestimmung an austenitischen Feinblechen mit Hilfe der Ultraschallrückstreuung
- Nr. 121/ISBN 3-88314-530-0/1986  
P. Feinle, K.-H. Habig  
Versagenskriterien von Stahlgleitpaarungen unter Mischreibungsbedingungen; Einflüsse von Stahlzusammensetzung und Wärmebehandlung
- Nr. 122/ISBN 3-88314-521-1/1986  
J. Mischke  
Entsorgung kerntechnischer Anlagen  
Sonderkolloquium der Bundesanstalt für Materialprüfung (BAM) am 10. 12. 1985 mit Beiträgen von B. Schulz-Forberg, K. E. Wieser und B. Droste
- Nr. 123/ISBN 3-88314-531-9/1986  
D. Rennoch  
Physikalisch-chemische Analyse sowie toxische Beurteilung der beim thermischen Zerfall organisch-chemischer Baustoffe entstehenden Brandgase
- Nr. 124/ISBN 3-88314-538-6/1986  
H.-M. Thomas  
Zur Anwendung des Impuls-Wirbelstromverfahrens in der zerstörungsfreien Materialprüfung
- Nr. 125/ISBN 3-88314-540-8/1986 (vergriffen)  
B. Droste, U. Probst  
Untersuchungen zur Wirksamkeit der Brandschutzisolation von Flüssiggas-Lagertanks
- Nr. 126/ISBN 3-88314-547-5/1986  
W. Stichel  
Korrosion und Korrosionsschutz von Metallen in Schwimhallen
- Nr. 127/ISBN 3-88314-564-5/1986 (vergriffen)  
E. Limberger, K. Brandes, J. Herter, K. Berner  
Kinetische Grenztragfähigkeit von stoßartig belasteten Stahlbetonbauteilen  
Kinetic Load Bearing Capacity of Impulsively Loaded Reinforced Concrete Members  
Versuche an Stahlbetonbalken, Teil 1  
Tests on Reinforced Concrete Beams, Part 1
- Nr. 128/ISBN 3-88314-568-8/1986 (vergriffen)  
E. Limberger, K. Brandes, J. Herter, K. Berner  
Kinetische Grenztragfähigkeit von stoßartig belasteten Stahlbetonbauteilen  
Kinetic Load Bearing Capacity of Impulsively Loaded Reinforced Concrete Members  
Versuche an Stahlbetonbalken, Teil 11  
Tests on Reinforced Concrete Beams, Part 11
- Nr. 129/ISBN 3-88314-569-6/1980 (vergriffen)  
K. Brandes, E. Limberger, J. Herter, K. Berner  
Kinetische Grenztragfähigkeit von stoßartig belasteten Stahlbetonbauteilen  
Kinetic Load Bearing Capacity of Reinforced Concrete Members under Impact Load  
Zugversuche an Betonstahl mit erhöhter Dehnungsgeschwindigkeit  
Reinforcing Steel Tension Tests with high strain rates
- Nr. 130/ISBN 3-88314-570-X/1986  
W. Struck  
Einfache Abschätzung der Durchbiegung und der Energieaufnahme von Trägern aus duktilem Material
- Nr. 131/ISBN 3-88314-585-8/1986  
E. Limberger, K. Brandes, J. Herter  
Kinetische Grenztragfähigkeit von stoßartig belasteten Stahlbetonbauteilen  
Kinetic Load Bearing Capacity of Reinforced Concrete Members under Impact Load  
Versuche an Stahlbetonplatten, Teil 11  
Tests on Reinforced Concrete Slabs, Part 11
- Nr. 132/ISBN 3-88314-595-5/1987  
Chr. Herold, F.-U. Vogdt  
Ermittlung der Ursachen von Schäden an bituminösen Dachabdichtungen unter besonderer Berücksichtigung klimatischer Beanspruchungen
- Nr. 133/ISBN 3-88314-609-9/1987 (vergriffen)  
M. Woydt, K.-H. Habig  
Technisch-physikalische Grundlagen zum tribologischen Verhalten keramischer Werkstoffe
- Nr. 134/ISBN 3-88314-615-3/1987  
G. Andreas, G. Niessen  
Über den Kernstrahlungseinfluß auf Dehnungsmeßstreifen
- Nr. 135/ISBN 3-88314-618-8/1987  
J. Ludwig, W.-D. Mischke, A. Ulrich  
Untersuchungen über das Verhalten von Tankcontainern für unter Druck verflüssigte Gase bei Fallbeanspruchungen
- Nr. 136/ISBN 3-88314-636-6/1987  
H.-J. Deppe, K. Schmidt  
Untersuchung zur Beurteilung von Brettschichtverleimungen für den Holzbau
- Nr. 137/ISBN 3-88314-637-4/1987  
D. Aurich  
Analyse und Weiterentwicklung bruchmechanischer Versagenskonzepte auf der Grundlage von Forschungsergebnissen auf dem Gebiete der Komponentensicherheit
- Nr. 138/ISBN 3-88314-635-8/1987  
M. Dogurike, F. Buchardt  
Zur geowissenschaftlichen Einordnung des Gebietes der Bundesrepublik Deutschland und einer sicheren Auslegung technischer Systeme gegen den Lastfall Erdbeben
- Nr. 139/ISBN 3-88314-658-7/1987  
J. Olschewski, S.-P. Scholz  
Numerische Untersuchung zum Verhalten des Hochtemperaturwerkstoffes Nimonic PE 16 unter monotoner und zyklischer Belastung bei Verwendung verschiedener plastischer und viskoplastischer Materialmodelle
- Nr. 140/ISBN 3-86314-643-9/1987  
K. Brandes, E. Limberger, J. Herter  
Kinetische Grenztragfähigkeit von stoßartig belasteten Stahlbetonbauteilen  
Kinetic Load Bearing Capacity of Impulsively Loaded Reinforced Concrete Members
- Nr. 141/ISBN 3-88314-694-3/1987  
F. Buchardt, W. Matthees, G. Magiera, F. Mathiak  
Zum Einfluß des Sicherheits- und Auslegungserdebens auf die Bemessung von Kernkraftwerken
- Nr. 142/ISBN 3-88314-695-1/1987  
H. Treumann, G. Krüger, N. Pfeil, S. von Zahn-Ullmann  
Sicherheitstechnische Kenndaten und Gefährzahlen binärer Mischungen aus oxidierenden und verbrennlichen Substanzen
- Nr. 143/ISBN 3-88314-701-X/1987  
K. Brandes, E. Limberger, J. Herter  
Kinetische Grenztragfähigkeit von stoßartig belasteten Stahlbetonbauteilen  
Kinetic Load Bearing Capacity of Impulsively Loaded Reinforced Concrete Members  
Experimentelle und numerische Untersuchungen zum Trag- und Verformungsverhalten von Stahlbetonbauteilen bei Stoßbelastung  
Experimental and numerical investigations concerning Load Bearing Behaviour of Reinforced Concrete Members under Impact Load
- Nr. 144/ISBN 3-88314-702-8/1987  
F. Buchardt, G. Magiera, W. Matthees, M. Weber, J. Altes  
Nichtlineare dynamische Berechnungen zum Penetrationsverhalten des AVR- Reaktorgebäudes
- Nr. 145/ISBN 3-88314-711-7/1987  
U. Holzlöhner  
Untersuchung selbstähnlicher Systeme zur Bestimmung von Materialeigenschaften von Reibungsböden
- Nr. 146/ISBN 3-88314 714-1/1987  
W. Schon, M. Mallon  
Untersuchungen zur Wirksamkeit von Wasserberieselungseinrichtungen als Brandschutzmaßnahme für Flüssiggas-Lagertanks
- Nr. 147/ISBN 3-88314-720-6/1987  
H.-D. Kleinschrodt  
Lösung dynamischer Biege- und Torsionsprobleme von Stabsystemen aus dünnwandigen elastischen Stäben mit offenem Querschnitt mittels frequenzabhängiger Ansatzfunktionen
- Nr. 148/ISBN 3-88314-774-5/1988  
W. Müller  
Theoretische Untersuchung von Variationsprinzipien für elastoplastisches Materialverhalten sowie Entwicklung und numerische Erprobung von Finite-Element-Verfahren für den ebenen Spannungszustand
- Nr. 149/ISBN 3-88314-775-3/1988  
U. Holzlöhner  
Bestimmung baugrunderdynamischer Kenngrößen aus der Untersuchung von Bodenproben
- Nr. 150/ISBN 3-88314-776-1/1988  
M. Weber  
VG3D Zeichenprogramm für vektorgraphische Darstellung dreidimensionaler Strukturen
- Nr. 151/ISBN 3-88314-785-0/1988  
L. Auersch-Saworski  
Wechselwirkung starrer und flexibler Strukturen mit dem Baugrund insbesondere bei Anregung durch Bodenerschütterungen
- Nr. 152/ISBN 3-88314-796-6/1988  
G. Plauk, G. Kretschmar, R.-G. Rohrmann  
Untersuchung des baulichen Zustandes und der Tragfähigkeit vorgespannter Riegel von Verkehrszeichenbrücken der Berliner Stadtautobahn
- Nr. 153/ISBN 3-88314-797-4/1988  
H. Sander, W.-V. Maennig  
Magnetisches Verhalten von Eisenproben bei mechanischer Wechselbeanspruchung
- Nr. 154/ISBN 3-88314-822-9/1988  
K. Breitkreutz, P.-J. Uttech, K. Haeddecke  
Druckgesinterte Stähle als zertifiziertes Referenzmaterial für die Spektrometrie

- Nr. 155/ISBN 3-88314-825-3/1988  
L. Auersch  
Zur Entstehung und Ausbreitung von Schienenverkehrserschütterungen: Theoretische Untersuchungen und Messungen am Hochgeschwindigkeitszug Intercity Experimental
- Nr. 156/ISBN 3-88314-887-3/1989  
G. Klamrowski, P. Neustupny, H.-J. Deppe, K. Schmidt, J. Hundt  
Untersuchungen zur Dauerhaftigkeit von Faserzementen
- Nr. 157/ISBN 3-88314-888-1/1989  
E. Limberger, K. Brandes  
Versuche zum Verhalten von Stahlbetonbalken mit Übergreifungsstößen der Zugbewehrung unter stoßartiger Belastung
- Nr. 158/ISBN 3-88314-889-X/1989  
R. Wäsche, K.-H. Habig  
Physikalisch-chemische Grundlagen der Feststoffschmierung - Literaturübersicht
- Nr. 159/ISBN 3-88314-890-3/1989  
R. Müller, R. Rudolphi  
Berechnung des Wärmedurchlaßwiderstandes und der Temperaturverteilung im Querschnitt von Hausschornsteinen nach DIN 18160, Teil 6
- Nr. 160/ISBN 3-88314-917-9/1989  
W. Matthees  
Entwicklung eines Makroelementes durch Kondensation am Beispiel der Lastfälle Flugzeugabsturz und Erdbeben bei Boden-Bauwerk-Wechselwirkung mit biegeweichen Fundamenten
- Nr. 161/ISBN 3-88314-920-9/1989  
G. Meilmann, M. Maultzsch  
Untersuchung zur Ermittlung der Biegefestigkeit von Flachglas für bauliche Anlagen
- Nr. 162/ISBN 3-88314-921-7/1989  
W. Brünner  
Untersuchungen zur Tragfähigkeit großer Glasscheiben
- Nr. 163/ISBN 3-88314-922-5/1989  
W. Brünner, G. Meilmann, W. Struck  
Biegefestigkeit und Tragfähigkeit von Scheiben aus Flachglas für bauliche Anlagen
- Nr. 164/ISBN 3-88314-934-9/1989  
R. Helms, B. Jaenicke, H. Wolter, C.-P. Bork  
Zur Schwingfestigkeit großer geschweißter Stahlträger
- Nr. 165/ISBN 3-88314-935-7/1989  
P. Gobel, L. Meckel, W. Schiller  
Untersuchung zur Erarbeitung von Kennwerten bei Einrichtungsmaterialien (Holzwerkstoffen, Möbeln und Textilien) hinsichtlich der Formaldehyd-Emission - Teil B: Textilien
- Nr. 166/ISBN 3-88314-936-5/1989  
K. Breitzkreutz  
Modelle für Stereologische Analysen
- Nr. 167/ISBN 3-88314-937-3/1989  
A. Mitakidis, W. Rucker  
Erschütterungsausbreitung im elastischen Halbraum bei transienten Belastungsvorgängen
- Nr. 168/ISBN 3-88314-958-6/1990  
F.-J. Kasper, R. Müller, R. Rudolphi  
Numerische Untersuchung geometriebedingter Wärmebrücken (Winkel und Ecken) unter Einsatz hochauflösender Farbgraphik bei Berücksichtigung der Tauwasserproblematik und des Mindestluftwechsels
- Nr. 169/ISBN 3-88314-959-4/1990  
Chr. Kohl, W. Rucker  
Integration der Untergrunddynamik in das Programmsystem MEDYNA, dargestellt am Beispiel des Intercity Experimental (ICE)
- Nr. 170/ISBN 3-88314-960-8/1990  
P. Studt, W. Kerner, Tin Win  
Untersuchung der mikrobiologischen Schädigung wassergemischter Kühlschmierstoffe mit dem Ziel der Verbesserung der Arbeitshygiene, der Minderung der Geruchsbelastung und der Menge zu entsorgender Emulsionen
- Nr. 171/ISBN 3-88314-997-7/1990  
F. Buchhardt  
Ein Operator zur Koppelung beliebig benachbarter dynamischer Systeme am Beispiel der Boden-Bauwerk-Wechselwirkung
- Nr. 172/ISBN 3-88314-998-5/1990  
J. Vielhaber, G. Plauk  
Grenztragfähigkeit großer Verbundprofilstützen
- Nr. 173/ISBN 3-88314-999-3/1990  
B. Droste, J. Ludwig, B. Schulz-Forberg  
Höherwertige Transporttechnik und ihre Konsequenzen für die Beförderung gefährlicher Güter
- Nr. 174/ISBN 3-88429-021-8/1990  
D. Aurich  
Analyse und Weiterentwicklung bruchmechanischer Versagenskonzepte
- Nr. 175/ISBN 3-88429-022-6/1990  
W. Brocks, D. Klingbeil, J. Olschewski  
Lösung der HRR-Feld-Gleichungen der elastisch-plastischen Bruchmechanik
- Nr. 176/ISBN 3-88429-035-6/1990  
W. Matthees, G. Magiera  
Iterative Dekonvolution der seismischen Basiserregung für den Zeitraum
- Nr. 177/ISBN 3-89429-090-0/1991  
G. Schickert, M. Krause, H. Wiggenshauser  
Studie zur Anwendung zerstörungsfreier Prüfverfahren bei Ingenieurbauwerken
- Nr. 178/ISBN 3-89429-429-9/1991  
G. Andreae, J. Knapp, G. Niessen  
Entwicklung und Untersuchung eines kapazitiven Hochtemperatur-Dehnungsaufnehmers für Einsatztemperaturen bis ca. 1000 °C
- Nr. 179 / ISBN 3-89429-100-1/1991  
H. Eifler  
Die Drehfähigkeit plastischer Gelenke in Stahlbeton-Plattenbalken, bewehrt mit naturhartem Betonstahl BST 500 S im Bereich negativer Biegemomente
- Nr. 180/ISBN 3-89429-101-X/1991  
E. Klement, G. Wieser  
Zur numerischen Übertragbarkeit von Prüfungsergebnissen an Hausschornsteinen auf Schornsteine mit anderen lichten Querschnitten
- Nr. 181/ISBN 3-89429-105-2/1991  
H. Czichos, R. Helms, J. Lexow  
Industrial and Materials Technologies Research and Development Trends and Needs
- Nr. 182/ISBN 3-89429-145-1/1992  
M. Weber  
Bestimmung von Wärmeübergangskoeffizienten im Bereich geometriebedingter Wärmebrücken
- Nr. 183/ISBN 3-89429-163-X/1992  
F. Buchhardt  
Zur Dekonvolution im Zeitbereich
- Nr. 184/ISBN 3-89429-164-8/1992  
M. Maultzsch, W. Stichel, E.-M. Vater  
Feldversuche zur Einwirkung von Auftaumitteln auf Verkehrsbauwerke (im Rahmen des Großversuchs "Umweltfreundlicheres Streusalz")
- Nr. 185/ISBN 3-89429-165-6/1992  
Renate Müller  
Ein numerisches Verfahren zur simultanen Bestimmung thermischer Stoffeigenschaften oder Größen aus Versuchen  
Anwendung auf das Heißdraht-Parallelverfahren und auf Versuche an Hausschornsteinen
- Nr. 186/ISBN 3-89429-211-3/1992  
B. Löffelbein, M. Woydt, K.-H. Habig  
Reibungs- und Verschleißuntersuchungen an Gleitpaarungen aus Ingenieurkeramischen Werkstoffen in wässrigen Lösungen
- Nr. 187/ISBN 3-89429-216-4/1992  
Th. Schneider, E. Santner  
Mikrotribologie: Stand der Forschung und Anwendungsmöglichkeiten. Literaturübersicht
- Nr. 188/ISBN 3-89429-243-1/1992  
K. Mallwitz  
Verfahren zur Vorausermittlung der Setzung von Fundamenten auf geständerten Strecken infolge zyklischer Beanspruchung
- Nr. 189/ISBN 3-89429-244-X/1992  
W. Matthees, G. Magiera  
Impedanzeigenschaften von Finiten Elemente Modellen bei Integration im Zeitraum
- Nr. 190/ISBN 3-89429-245-8/1992  
G. Zachariev  
Untersuchung des Versagens thermoplastischer Kunststoffe im Kurzzeit-Zugversuch und Retardations-Zugversuch
- Nr. 191/ISBN 3-89429-246-6/1992  
H.-M. Bock, S. Erbay, J. With  
Kritische Stahltemperatur als charakteristischer Kennwert für die Feuerwiderstandsdauer von Bauwerkssystemen aus Stahl
- Nr. 192/ISBN 3-89429-329-2/1993  
D. Aurich  
Analyse und Weiterentwicklung bruchmechanischer Versagenskonzepte; Lokales Rißwachstum, Ermittlung des Rißwiderstandsverhaltens aus der Kerbschlagarbeit
- Nr. 193/3-89429-291-1/1993  
W. Gerisch, Th. Fritz, S. Steinborn  
Statistical Consulting in the Frame of VAMAS. The Role of the Technical Working Arfea/Advisory Group. Statistical Techniques for Interlaboratory Studies and Related Projects (VAMAS Report No. 13)
- Nr. 194/ISBN 3-89429-330-6/1993  
U. Krause  
Ein Beitrag zur mathematischen Modellierung des Ablaufs von Explosionen
- Nr. 195/ISBN 3-89429-331-4/1993  
U. Schmidtchen, G. Würsig  
Lagerung und Seetransport großer Mengen flüssigen Wasserstoffs am Beispiel des "Euro-Québec Hydro-Hydrogen Pilot Projekts. Überblick über die in Deutschland anzuwendenden Gesetze, Verordnungen und technischen Regeln
- Nr. 196/ISBN 3-89429-362-4/1993  
D. Lietze  
Untersuchungen über das Anlaufen von Detonationen im Innern geschlossener Systeme