

Ausgewählte Berechnungsmodelle zur Beschreibung von Gefahrstoffexpositionen an Arbeitsplätzen

- Ergänzende Erläuterungen -

F. Pillar

Bei der Gefährdungsbeurteilung von Tätigkeiten mit Gefahrstoffen dürfen nach GefStoffV [1] Berechnungsmodelle zur Expositionsabschätzung angewendet werden. Neben sog. generischen Expositionsmodellen (z.B. EMKG - Einfaches Maßnahmenkonzept Gefahrstoffe [2]) haben sich zur Expositionsermittlung im Arbeitsschutz Modellkonzepte etabliert, die einzelne physikalische Vorgänge realitätsbezogen und ohne Kategorisierung beschreiben.

Neben den im Arbeitsschutz bekannten Modellen nutzen andere ingenieurwissenschaftliche Bereiche Modelle, mit denen ebenfalls entsprechende Größen (z.B. Luftkonzentrationen) abgeschätzt werden können. Je nach Konzeption ist ein Einsatz ggf. auch für Betrachtungen des Arbeitsschutzes denkbar.

Das vorliegende Manuskript ergänzt die in Druckfassung erschienene Veröffentlichung "Ausgewählte Berechnungsmodelle zur Beschreibung von Gefahrstoffexpositionen an Arbeitsplätzen" (Zeitschrift "Gefahrstoffe - Reinhaltung der Luft", VDI-Springer-Verlag, Ausgabe Oktober 2014). Die Erläuterungen ergänzen die dortige Zusammenfassung mit weiterführenden Informationen zu den zugrundeliegenden physikalischen Abläufen und Detaillierungen der aufgeführten Modelle.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Vorgänge des stofflichen Transports	4
2.1	Vorgänge der Stoffemission	5
2.2	Vorgänge der luftgetragenen Stoffausbreitung	7
2.3	Vorgänge der Stoffimmission und -resorption	9
3	Modelle zur rechnerischen Expositionsabschätzung	11
3.1	Spezifizierung der stoffbezogenen Gefährdungsbeurteilung	12
3.2	Informationsermittlung und -strukturierung: Arbeitssystem-Modell	15
3.3	Emissionsmodelle	16
3.3.1	Unmittelbare Abschätzung von Emissionsströmen	17
3.3.2	Modell zur Gas-Emission aus Behältern	18
3.3.3	Verdunstungs- und Verdampfungsmodelle für Flüssigkeitsoberflächen	20
3.4	Ausbreitungsmodelle	26
3.4.1	Diffusionsmodell	27
3.4.2	Zonenmodelle	28
3.4.3	Modell des Freistrahls (Strahlgesetze)	31
3.4.4	Abschätzung des dichtebedingten Auf- bzw. Abtriebs	33
3.5	Methodische Anmerkung zu kombinatorischen Expositionsmodellen	35
3.6	Generische Expositions-Modelle	36
3.7	Konzepte zur Bewertung von Gefahrstoffkonzentrationen am Arbeitsplatz	36
3.7.1	Mathematische Grundbewertung	38
3.7.2	Methodische Anmerkung: Detaillierung der Bewertung	40
4	Ergänzende Ansätze: Brandschutzingenieurmodelle zur Rauchausbreitung	40
4.1	Handrechenverfahren	41
4.1.1	Plume-Modelle	41
4.1.2	Ceiling-Jet-Modelle	42
4.1.3	Modelle zur Entrauchung über Raumöffnungen	42
4.1.4	Zusammenfassung Handrechenverfahren	43
4.2	Computerbasierte Rechenverfahren	44
4.2.1	Konzept der Zonenmodelle am Beispiel CFAST (Version 6)	45
4.2.2	Feldmodelle	49

Übersicht verwendeter Symbole und Formelzeichen

A_{Em} [m^2]	allgemeine Emissionsfläche
$A_{\text{Öff}}$ [m^2]	Öffnungsfläche Behälter
A_i [m^2]	Oberfläche Flüssigkeit i
Ar [-]	Archimedes-Zahl
C_D [-]	Koeffizient Öffnungscharakteristik
c [mg/m^3]	Stoffkonzentration
c_P [$kJ/(kg K)$]	spezifische isobare Wärmespeicherkapazität
$c_{P,\infty}$ [$kJ/(kg K)$]	spezifische isobare Wärmespeicherkapazität Umgebungsluft
$D_{i,g}$ [cm^2/s]	Diffusionskoeffizient Stoff i in Umgebungsluft
D_i [m^2/h]	Diffusionskoeffizient Stoff i in Umgebungsluft
d [m]	Durchmesser Emissionsdüse
H [m]	horizontaler Abstand Strömungshindernis zu Brandfläche
GW [mg/m^3]	Grenzwert Bewertung
GW_{korrr} [mg/m^3]	korrigierter Grenzwert Bewertung
g [m/s^2]	Erdbeschleunigung
\vec{g} [m/s^2]	dreidimensionales Erdbeschleunigungsfeld (Vektordarstellung)
k [cm/s]	Stofftransportkoeffizient
M [g/mol]	Molare Stoffmasse
M_i [g/mol]	Molare Stoffmasse Flüssigkeit i
m [-]	Mischzahl
\dot{m} [g/s]	Stoffmassenstrom
$\dot{m}_{BG,i}$ [kg/s]	Stoffmassenstrom gasförmige Behälter-Emission
\dot{m}_P [kg/s]	Rauchmassenstrom in Plume-Mittelachse
\dot{m}_i [g/h]	Emissions-Massenstrom Verdunstung
$\dot{m}_{i,A}$ [$g/(cm^2 s)$]	flächenbezogener Emissions-Massenstrom Verdunstung
$\dot{m}_{i,Diff}$ [mg/h]	Emissions-Massenstrom diffundierender Stoff
$\dot{m}_{i,Em}$ [mg/h]	Emissions-Massenstrom Stoff i
$\dot{m}_V(t)$ [kg/s]	zeitabhängiger Emissions-Massenstrom Verdampfung bzw. Sublimation
\dot{n} [mol/s]	Stoffmolstrom
p [Pa]	lokaler Druck
p_{atm} [Pa]	Umgebungsdruck
$p_{e,i}$ [kPa]	Sättigungsdampfdruck Flüssigkeit i
$p_{evap,i}$ [Pa]	Sättigungsdampfdruck Flüssigkeit i
p_B [Pa]	Behälterdruck
p_∞ [Pa]	Umgebungsdruck
ppm_A [$ppm \hat{=} ml/m^3$]	Konzentration Stoff A in Umgebungsluft
\dot{Q} [kW]	Wärmefreisetzungsrate Brandherd
$\dot{Q}_\infty(t)$ [$kJ/(m^2 s)$]	zeitabhängige Wärmestromdichte auf Oberfläche
R [$(Pa m^3)/(mol K)$]	allgemeine Gaskonstante
r [m]	Betrachtungsabstand Diffusion zu Emissionspunkt
r_{rad} [m]	radialer Abstand Betrachtungspunkt zu Plume-Mittelachse
Sc [-]	Schmidt-Zahl
T [K]	Umgebungstemperatur
T_∞ [K]	Temperatur Umgebungsluft
T_V [K]	Verdunstungs- (bzw. Flüssigkeits-) Temperatur
T_{max} [K]	maximale Rauchtemperatur in Ceiling Jet
t [s]	Einwirkungsdauer bzw. Zeit (allg.)
t_0 [h]	Zeitpunkt Emissionsbeginn
t_1 [h]	Betrachtungszeitpunkt
t_{Bezug} [h]	Bezugsdauer Grenzwert
$t_{\text{Exposition}}$ [h]	Expositionsdauer
t_{gesamt} [h]	Gesamt-Expositionsdauer (Summe Einzelexpositionen)
u [m/s]	Strömungsgeschwindigkeit Rauch in Plume-Mittelachse
u_{max} [m/s]	maximale Strömungsgeschwindigkeit in Ceiling Jet
\dot{V} [m^3/s]	Volumenstrom Stoff
\dot{V}_{air} [m^3/h]	Volumenstrom Zu- bzw. Abluft Betrachtungsraum
\dot{V}_{em} [m^3/s]	Emissions-Volumenstrom
\dot{V}_x [m^3/s]	abstandsabhängiger Volumenstrom in Freistrahlmittelachse
$V_{A,liq}$ [m^3]	Volumen Flüssigkeit A
V_R [m^3]	Volumen Betrachtungsraum
\vec{v} [m/s]	dreidimensionales Geschwindigkeitsfeld (Vektordarstellung)
v_A [m/s]	Emissionsgeschwindigkeit durch Emissionsfläche A
v_{air} [cm/s]	Luftgeschwindigkeit oberhalb der Flüssigkeitsoberfläche
v_a [m/h]	Luftgeschwindigkeit oberhalb der Flüssigkeitsoberfläche
v_x [m/s]	Strömungsgeschwindigkeit in Freistrahlmittelachse
v_0 [m/s]	Strömungsgeschwindigkeit Emission

W [(mg s)/m ³]	biologische Wirkung
X [m]	Länge Flüssigkeitsoberfläche
x [m]	Abstand Betrachtungs- zu Emissionspunkt auf Freistrahlmittelachse
x_0 [m]	Kernlänge Freistrahlmittelachse
$x_{Mittel,t}$ [mg/m ³]	zeitlich gewichtete, gemittelte Luftkonzentration
x_i [-]	Molenbruch Komponente i in Flüssigkeit
$x_{i,Exp}$ [mg/m ³]	ortsabhängige Luftkonzentration Exposition
$x_{i,m}$ [mg/m ³]	volumengewichtete Luftkonzentration Stoff i
$x(r,t)$ [mg/m ³]	zeit- und abstandsabhängige Stoffkonzentration in Luft durch Diffusion
Z [m]	Betrachtungshöhe in Plume-Mittelachse
ΔT [K]	Differenz Rauch- zu Umgebungstemperatur in Plume-Mittelachse
Δh_c [kJ/kg]	Verdampfungsenthalpie
Δh_{Sub} [kJ/kg]	Sublimationsenthalpie
Δz [cm]	Länge Luft-Flüssigkeits-Grenze in Strömungsrichtung
η [g/(cm s)]	dynamische Viskosität Umgebungsluft
γ [-]	Isentropenexponent
γ_i [-]	Aktivitätskoeffizient Komponente i in Flüssigkeit
λ [W/(m K)]	spezifische Wärmeleitfähigkeit
λ_R [1/h]	Luftwechselzahl Betrachtungsraum
μ [kg/(m s)]	dynamische Viskosität
ν [m ² /h]	kinematische Viskosität Umgebungsluft
ρ [g/m ³]	Stoffdichte
ρ_l [kg/m ³]	lokale Stoffdichte
ρ_i [g/m ³]	Stoffdichte Gas i
$\rho_{A,liq}$ [g/l]	Dichte Flüssigkeit A
ρ_∞ [g/l = kg/m ³]	Dichte Umgebungsluft
∂ [-]	Formalsymbol zur Gradientendarstellung
∇ [-]	Operator zur Darstellung partieller, dreidimensionaler Ableitungsfunktionen
Δ [-]	Formalsymbol zur Darstellung zeitlicher Änderungen

1 Einleitung

Zur Ermittlung und Bewertung stoffspezifischer Gefährdungen stehen für betriebliche Arbeitsschutz-Betrachtungen gemäß Gefahrstoffverordnung (GefStoffV) [1] mit Messverfahren, Analogiebetrachtungen und Berechnungsmodellen¹ verschiedene Ansätze zur Verfügung. Rechnerische Betrachtungen ermöglichen die Ableitung von Schutzmaßnahmen für Beschäftigte ohne empirische Messung der Arbeitssituation vor Ort.

In der Disziplin des Brandschutzes werden in einigen Fällen ebenfalls Gefährdungen durch brandbedingt freigesetzte Stoffe mit Berechnungsmodellen untersucht. Im Vergleich zum Arbeitsschutz fokussieren sich die Betrachtungen jedoch auf kurzfristige Expositionen während des Verlassens eines von einem Brandereignis betroffenen Bereichs durch die Gebäudenutzer, um eine sichere Flucht bzw. Rettung zu gewährleisten.

Dementsprechend unterscheiden sich die rechnerischen Ansätze vor dem Hintergrund verschiedener (gesetzlicher) Rahmenbedingungen und Anforderungen. Es liegen voneinander abweichende Strategien und prinzipielle Modellvorstellungen der mathematischen Beschreibung der Verhältnisse zugrunde. U.a. betrifft dies die grundlegenden Modellannahmen zur Darstellung der relevanten Vorgänge und die Erfassung zugehöriger Stoff-, Umgebungs- oder weiterer Randbedingungen.

Als Ergänzung zur Veröffentlichung "Ausgewählte Berechnungsmodelle zur Beschreibung von Gefahrstoffexpositionen an Arbeitsplätzen" [3] werden nachfolgend die genannten Modellkonzepte des Arbeitsschutzes detailliert dargestellt. Gleichmaßen erläutern die Ausführungen beispielhaft Konzepte des Brandschutzes, um eine mögliche Verwendung für Arbeitsschutz-Betrachtungen abzugrenzen. Dazu werden zunächst die unterschiedlichen physikalischen Vorgänge des Stofftransports vorgestellt. Es folgt je Modell die Zusammenfassung

- der Modellkonzeptionen und -annahmen,
- der berücksichtigten physikalischen Phänomene sowie
- der Anwendungsbereiche und -grenzen samt erforderlicher Parameter.

¹ Abbildungen der Wirklichkeit, die dadurch mit mathematischen Gleichungen beschreibbar wird

Die Erläuterungen beschränken sich bei den genannten und hier detaillierten Modellen auf inhalative Gefährdungen durch Gase bzw. gasförmige Stoffe. Die Einschränkung dient der Darstellung eines Überblicks von Modellen. Die angeführte beispielhafte Auswahl soll dem Leser einen Eindruck der verfügbaren grundlegenden Konzeptionen verschaffen, die auch in anderen - nicht aufgezeigten Modellen - Verwendung finden. Durch den Verweis auf Ergänzungen aus anderen Disziplinen soll gezeigt werden, inwieweit übergreifende Nutzungen bereits erfolgen bzw. dass dies Überlegungen zur tatsächlichen Anwendbarkeit erfordert. Zur Vollständigkeit führen die Erläuterungen auch nicht betrachtete Transportvorgänge auf, die in den an dieser Stelle beschriebenen Modellen unberücksichtigt bleiben.

2 Vorgänge des stofflichen Transports

Dem Transport von Stoffen in der Umgebungsluft innerhalb von Räumen liegen verschiedene physikalische Vorgänge zugrunde. Die Raumluft bildet dabei das Medium, mit dem der Stoff interagiert. Der Transportverlauf von der Freisetzung bis hin zur Aufnahme in den menschlichen Körper unterteilt sich in die drei grundlegenden Schritte der

- Stoffemission (Freisetzung eines Gefahrstoffes in die räumliche Umgebungsluft),
- Stoffausbreitung (Verbreitung in der Raumluft und Bildung ortsabhängiger Konzentrationen², auch als Stofftransmission bezeichnet) und
- Stoffimmission (Ablagerung und Aufnahme eines Stoffes in Organismen) [4].

Innerhalb dieser Schritte ist der Ablauf verschiedener physikalischer Transportvorgänge³ möglich. Das tatsächliche Auftreten der Vorgänge hängt von den jeweiligen Stoffeigenschaften (z.B. Vorgänge nicht für alle Aggregatzustände gleichsam möglich) ab, weiteren Einfluss bilden die physikalischen Rahmenbedingungen (z.B. Lufttemperatur und -geschwindigkeit). Diese Einflussfaktoren, welche die Transportvorgänge theoretisch beschreiben und eindeutig voneinander abgrenzen, stellen charakteristische Parameter dar. Verschiedene Vorgänge treten ggf. nur singular (d.h. nur ein Vorgang ist für den Transportschritt maßgeblich) und einander ausschließend, andere wiederum in Kombination miteinander auf.

Die Vorgänge des stofflichen Transports beruhen allesamt auf den grundsätzlichen Prinzipien

- der Massenerhaltung⁴,
- der Energieerhaltung⁵ sowie
- der Impulserhaltung⁶ [5].

Diese Prinzipien gehen davon aus, dass die Summe der in ein System oder eine Betrachtungseinheit (z.B. in einem Raum) freigesetzten und abgeführten sowie der innerhalb gespeicherten Masse, der Energie bzw. des Impulses immer gleich Null sein muss. Daraus ergibt sich, dass entsprechende Anteile nicht frei entstehen oder vernichtet werden können, sondern lediglich ein Übergang ineinander möglich ist⁷. Die Einhaltung der Massen-, Energie- und Impulserhaltung erfolgt dabei über Systeme unterschiedlicher Größenordnungen hinweg, so dass diese ebenso für einzelne Vorgänge und deren Übergänge ineinander als auch für bspw. gesamte Räume gelten. Die Formulierung der Erhaltungsprinzipien ermöglicht die theoretische Darstellung der verschiedenen Transportvorgänge, wobei Parameter der einzelnen Erhaltungsformulierungen einander beeinflussen und Änderungen verantworten [6].

² Masse eines Gefahrstoffes je Volumen, z.B. $[mg/m^3]$

³ Konkrete physikalische Vorgänge, die einen Massentransport bewirken und geschlossen - mit spezifischen Einflussgrößen - beschreibbar sind (z.B. Vorgang der Verdunstung aus Flüssigkeiten).

⁴ Erhaltung chemischer Elemente und somit der spezifischen Massen sowie der Gesamtmasse eines Vorgangs

⁵ Erhaltung von Energie durch Umwandlungen zwischen verschiedenen Energieformen (z.B. Umsetzung elektrische Energie in Wärme)

⁶ Erhaltung der Ausprägung und Richtung von Bewegungen

⁷ Beispiel: Kann die freigesetzte thermische Energie in einem Raum nicht durch die Umfassungsbauteile und Öffnungen vollständig abgeführt werden, so folgt eine Temperaturerhöhung als Merkmal der verbleibenden bzw. im System "gespeicherten" Energie.

Grundlage der Erläuterungen bildet die in Abschn. 2.1 aufgeführte Übersicht der physikalischen Vorgänge, die während der Stofffreisetzung, -ausbreitung und -immission den Transport bewirken können. Im Anschluss werden die Vorgänge zur Darstellung der verschiedenen Modellkonzepte aus Sicht des Arbeitsschutzes aufgegriffen, welche den Stofftransport ggf. rechnerisch nachempfinden.

2.1 Vorgänge der Stoffemission

Sowohl die Menge als auch die Charakteristik der Stofffreisetzung bilden bereits wesentliche Einflussfaktoren auf die Ausbreitung und die Entwicklung ortsbezogener Luftkonzentrationen. Der Stofftransport in die Raumluft erfolgt - in Abhängigkeit von verschiedenen Rahmenbedingungen - durch unterschiedliche Emissionsvorgänge (z.B. Verdampfung einer Flüssigkeit), wobei ggf. ein Wechsel des Aggregatzustands auftritt.

Grundlegend untergliedert sich die Emission in tätigkeitsspezifische und -unspezifische Vorgänge. Die Unterteilung nimmt Bezug auf die Ursachen der Freisetzung: Tätigkeitsspezifische Vorgänge beruhen auf der - absichtlichen oder unbewussten - Freisetzung von Stoffen an die Umgebungsluft infolge eines Arbeitsverfahrens. Die maßgeblichen Parameter bilden verfahrensbedingte Größen (bspw. Geschwindigkeit einer Abluftführung) und stoffspezifische Eigenschaften (z.B. Stoffdichte). Im Gegensatz dazu werden tätigkeitsunspezifische Emissionsvorgänge nicht bzw. nicht hauptsächlich von verfahrensbedingten Größen beeinflusst, sondern hängen von den Stoffeigenschaften (z.B. Siedepunkt einer Flüssigkeit) in Verbindung mit allgemeinen Umgebungsbedingungen (bspw. Umgebungstemperatur und Luftgeschwindigkeit) ab. Die tätigkeitsunspezifische Freisetzung wird somit durch die Vorgänge der "freien" Emission⁸ gebildet.

Die konkreten Stoffeigenschaften beeinflussen die Emissionsvorgänge wesentlich. Die verschiedenen Vorgänge unterscheiden sich in Abhängigkeit zum jeweils vorliegenden (Ausgangs-) Aggregatzustand, einzelne Vorgänge sind lediglich bei bestimmten Aggregatzuständen aufgrund des physikalischen und chemischen Verhaltens möglich. Tab. 1 fasst die für Gefahrstoffe im Arbeitsschutz relevanten Transportvorgänge im Überblick zusammen.

Aggregatzustand	Emissionsvorgang	Anfangszustand	Beschreibung
Gasförmig	Fluidströmung mit niedriger Geschwindigkeit ⁹ (impulsarm)	Gasförmige Einströmung	Unmittelbare Stofffreisetzung als gasförmiger Zustrom (z.B. bei Lüftungstechnischen Maßnahmen) in die Raumluft infolge von Druckdifferenzen ¹⁰ ; durch niedrige Strömungsgeschwindigkeiten kommt es zu keiner Bildung einer Vorzugsrichtung der Stoffausbreitung, der emittierte Stoff wird direkter Luftbestandteil.
	Fluidströmung mit hoher Geschwindigkeit ¹¹ (impulsbehaftet)	Gasförmige Einströmung	Gasförmige Stofffreisetzung unter Ausbildung eines sog. Freistrahls ¹² in eine bestimmte Vorzugsrichtung, maßgebliche Beeinflussung der Stoffausbreitung; kein direkter Übergang als Komponente der Raumluft, sondern Bildung eigenständiger Strömung, die in alle Raumrichtungen ausgerichtet sein kann (Abhängigkeit zur Ausrichtung der Emissionsfläche).
Flüssig	Verdampfung	Flüssigkeit als Tropfen oder Lache	Phasenübergang vom flüssigen in den gasförmigen Aggregatzustand nach Überschreitung des spez. Siedepunkts durch Eigentemperatur; Zuführung der Energiemenge erforderlich, die der sog. Verdampfungsenthalpie entspricht; Dampf bzw. Gas verfügt über erhöhte Temperatur, dadurch ggf. dichtebedingte, aufwärts gerichtete Vorzugsrichtung; Übergang als Komponente der Raumluft.

⁸ Emissionsvorgänge, die ohne technische Einflussnahme natürlich-physikalisch erfolgen können. Eine Beeinflussung kann über künstliche Veränderungen der äußeren Bedingungen (z.B. Temperaturerhöhung) erfolgen.

⁹ Keine Turbulenzbildung an Emissionsöffnung

¹⁰ Fluidströmungen resultieren physikalisch aus Druckunterschieden: der Massentransport erfolgt von Bereichen hoher Drücke in Bereiche mit niedrigeren Drücken

¹¹ Mit Turbulenzbildung an Emissionsöffnung

¹² Ausbildung einer gerichteten, kegelförmigen Strömung, an deren Randfläche infolge von Turbulenzen eine Einmischung umgebender Luft erfolgt. Es kommt somit zu einer kompakten Stoffemission, deren Kernbereich bis weit in die umgebende Atmosphäre reichen kann ([7], vgl. auch S. 8 und Abb. 1).

Aggregatzustand	Emissionsvorgang	Anfangszustand	Beschreibung
	Verdunstung	Flüssigkeit als Tropfen oder Lache	Von Umgebungstemperatur abhängiger Zustandswechsel in die Gasphase, sofern Nahbereich der Raumluft keine stoffspezifische Dampfsättigung ¹³ aufweist; Verdunstung erfolgt durch temperaturabhängige Überwindung molekularer Bindungskräfte innerhalb der Flüssigkeit.
	Versprühen	Flüssigkeit als Tropfen	Kraft- bzw. geschwindigkeitsbedingte (strömungsmechanische) Freisetzung einzelner Flüssigkeitstropfen unmittelbar in die Raumluft. Bei feiner Verteilung als Nebel erfolgt im Anschluss ein gasähnliches Verhalten, sonst steht die Emission unter maßgeblichem Einfluss der Schwerkraft (abwärtsgerichtete Orientierung); ggf. Sekundäremission durch Verdunstung oder Verdampfung aus Tropfen (siehe oben).
Fest	Strömungsmechanische Partikelemission	Partikel in Luftströmung	Primäremission luftgetragener Partikel in den Betrachtungsraum innerhalb von Luftströmungen bzw. mit entsprechender Eigengeschwindigkeit, wobei Partikelmasse die Vorzugsrichtung der Emission (große Masse: abwärts gerichtet, kleine Masse: entsprechend Richtung der Luftströmung) bestimmt; Emission kann sowohl impulsarm als auch -behaftet erfolgen.
	Partikelaufwirbelung	Abgelagerte Partikel auf Oberflächen	Sekundäremission durch Wiederaufwirbelung von auf Oberflächen abgelagerten Partikeln (Staubablagerungen) als erneute Freisetzung an die Raumluft. Die erneute Emission wird dabei durch Luftströmungen, welche die abgelagerten Partikel mitreißen, hervorgerufen, wobei die durch die Strömungsgeschwindigkeit erzeugte Kraft die Schwer- und Massenträgheitskräfte der Partikel überschreiten muss.
	Sublimation	Feststoff als Partikel oder Oberfläche	Für einzelne Stoffe spezifischer Phasenübergang vom festen in den gasförmigen Aggregatzustand (Auslassen des flüssigen Zustands als Schmelze) nach Überschreitung des spez. Sublimationspunkts durch Eigen-temperatur; Zuführung der Energiemenge erforderlich, die der sog. Sublimationsenthalpie entspricht; Dampf bzw. Gas verfügt über erhöhte Temperatur, dadurch ggf. dichtebedingte, aufwärts gerichtete Vorzugsrichtung; Übergang als Komponente der Raumluft.
	Pyrolyse	Feststoff mit flüchtigen Bestandteilen	Phasenübergang einzelner (flüchtiger) Komponenten von Feststoffen in den gasförmigen Zustand infolge thermischer Beanspruchung; dabei Sublimation oder Zwischenstadium einer Schmelze innerhalb des Feststoffs möglich.

Tabelle 1: Überblick relevanter Emissionsvorgänge von Gefahrstoffen in die Raumluft

Die aufgeführten Emissionsvorgänge treten - je nach Aggregatzustand der eingesetzten Gefahrstoffe - prinzipiell allesamt im betrieblichen Umfeld auf. In Abhängigkeit zu Stoffeigenschaften, Umgebungsbedingungen und tätigkeitsspezifischen Randparametern verantwortet i.d.R. je Stoff und Emissionsquelle ein wesentlicher Vorgang die Stofffreisetzung, die übrigen Vorgänge treten als untergeordnet bzw. vernachlässigbar in den Hintergrund. Die zeitlichen Verläufe der Stofffreisetzung haben weiterhin Auswirkungen auf die Ausbildung und den Verlauf ortsabhängiger Konzentrationen: Emissionen werden in plötzliche bzw. einmalige, zeitlich-variiierende und zeitlich-konstante Stofffreisetzungen unterschieden, die zu verschiedenen Ausbreitungstendenzen und zeitlichen Maxima der Konzentrationen führen¹⁴.

Die brandinduzierte Stofffreisetzung bezieht dagegen nicht alle Emissionsvorgänge ein: Bei einer Verbrennung¹⁵, als exotherme (Wärme emittierende) Reaktion bilden gasförmige Komponenten den Hauptanteil der entstehenden

¹³ Maximale Konzentration, bis zu der ein Stoff in einem anderen gelöst werden kann

¹⁴ Vgl. [8]

¹⁵ Oxidationsreaktion, die je nach Sauerstoffverfügbarkeit vollständig oder unvollständig ablaufen kann; abhängig von Reaktanden und Vollständigkeit werden verschiedene Reaktionsprodukte in Gasform, als Flüssigkeit oder als Feststoff freigesetzt.

Produkte. Der Begriff "Brandrauch" fasst diese Gase mit den übrigen flüssigen und festen Anteilen zusammen¹⁶. Die gasförmigen Rauchkomponenten weisen durch die Wärmeemission bei der Freisetzung erhöhte Temperaturen auf. Dies führt zu geringen Stoffdichten, so dass eine aufwärts gerichtete Thermik mit einer Strömungsgeschwindigkeit von bis zu mehreren Metern je Sekunde entsteht. Die Emission der Verbrennungsprodukte verfügt somit über eine aufwärts gerichtete, impulsbehaftete Vorzugsrichtung, die sich auf die anschließenden Vorgänge der Rauchausbreitung¹⁷ auswirkt. Der entstehende Rauchstrom führt die festen und flüssigen Komponenten aufgrund ihres untergeordneten Anteils mit. Ergänzend kann eine Stofffreisetzung von nicht unmittelbar am Brand beteiligten Stoffen infolge der thermischen Einwirkungen durch Verdampfungs-, Verdunstungs- oder Pyrolysevorgänge an Objekten der Umgebung erfolgen.

2.2 Vorgänge der luftgetragenen Stoffausbreitung

Die Stoffausbreitung in der Luft, die sich an die Freisetzung anschließt, beruht ebenfalls auf unterschiedlichen physikalischen Vorgängen. Der Stofftransport unterscheidet sich dabei in das stoffinhärente Bestreben zum Ausgleich von Konzentrationsunterschieden (sog. Diffusion) und in strömungsmechanische Vorgänge (Bildung von Gasströmungen mit entsprechenden Komponenten).

Analog zur Emission wirken sich neben Stoffeigenschaften ebenso die Umgebungs- und Verfahrensbedingungen auf den luftgebundenen Massentransport aus. Die entstehende Stoffausbreitung resultiert aus den Relationen zwischen den Stoffeigenschaften und den thermodynamischen (z.B. Temperatur- und Dichteunterschiede), strömungsmechanischen (bspw. Luftgeschwindigkeiten von Lüftungstechnischen Maßnahmen) und geometrischen (z.B. Senken und Gruben) Umgebungsbedingungen. Das Zusammenwirken der Faktoren führt zur Bildung einer Ausbreitungsrichtung, die sich ggf. ortsabhängig (bspw. in verschiedenen Raumhöhen oder in der Nähe von Öffnungen raumlufttechnischer Anlagen) unterscheidet und z.B. durch Turbulenzen verändert. Verschiedene Emissionsparameter (bspw. Eigengeschwindigkeiten eines gasförmigen Einstroms) stellen ebenfalls Einflussfaktoren auf die räumliche Stoffausbreitung dar.

Im Gegensatz zu den Vorgängen der Emission, bei denen der Aggregatzustand das maßgebliche Einteilungskriterium darstellt, tritt dieser für die Vorgänge der Stoffausbreitung in den Hintergrund. Vielmehr können die für den Arbeitsschutz relevanten Vorgängen, die zusammenfassend in Tab. 2 dargestellt sind, mit Ausnahme der Diffusion¹⁸ in allen Aggregatzuständen auftreten.

Ausbreitungsvorgang	Grundvorgang	Beschreibung
<i>Reine Diffusion</i>	Brown'sche Molekularbewegung	Stoffausbreitung durch Ausgleichsbestreben von Konzentrationsgradienten in Umgebungsluft auf Grundlage von Brown'scher Molekularbewegung (erhöhte Wahrscheinlichkeit des Aufeinandertreffens von gasförmigen Molekülen ¹⁹ bei höheren Konzentrationen in Abhängigkeit zur Temperatur); in alle Richtungen gleichmäßige Ausbreitung, deren Geschwindigkeit von der Höhe der ortsabhängigen Konzentrationsunterschiede abhängt [10].

¹⁶ Exakte Komponenten des Brandrauches und deren Massenanteile hängen vom Brennstoff sowie der Vollständigkeit der Verbrennung ab. Leitkomponenten sind z.B. Kohlendioxid, Kohlenmonoxid, Salzsäure, Blausäure, Wasserdampf, Russ etc., die verschiedene akut toxische und bzw. oder narkotisierende Wirkungen aufweisen [9].

¹⁷ Vgl. S. 8

¹⁸ Die Vorgänge der Diffusion sind prinzipiell auch in allen Aggregatzuständen möglich. Diese tritt bei der Betrachtung der Ausbreitung in einer gasförmigen Umgebungsatmosphäre aufgrund der wirkenden Schwerkraften jedoch nur für Gase oder Stoffformen mit gasähnlichen Eigenschaften (Nebel, feine Partikel) auf.

¹⁹ Die luftgebundene Diffusion ist nur bei gasförmigen Stoffen mit vergleichbarer Dichte zur Umgebungsluft bzw. bei Stoffen mit gasähnlichem Verhalten (z.B. Aerosole) möglich. Bei anderen Aggregatzuständen wirkt die Schwerkraft entgegen, bei großen Dichteunterschieden der entstehende Auf- oder Abtrieb.

Ausbreitungsvorgang	Grundvorgang	Beschreibung
<i>Turbulente Diffusion</i> ²⁰	Brown'sche Molekularbewegung in Verbindung mit konvektiven Wärmeströmungen	Verstärkung der Diffusion durch geringfügige konvektive Wärmeübertragung, die zu einem erheblich beschleunigten Ablauf führt (sog. turbulente Diffusion); Entstehung Konzentrationsgefälle mit wachsendem Abstand zur Emissionsquelle (keine Ausbildung einer gerichteten (Luft-) Strömung, vgl. [6]).
<i>Dichtebedingter Auf- oder Abtrieb</i>	Eigenströmung infolge stoff- oder temperaturbedingter Dichtedifferenz	Ausbildung vertikaler Stoffströmungen durch Dichteunterschied zwischen emittiertem Stoff und Umgebungsluft aufgrund von stoffinhärenter oder temperaturbedingter Dichte; Bestimmung Ausbreitungsgeschwindigkeit durch Höhe der Dichtedifferenz ²¹ .
<i>Eigenströmung infolge impulsbehafteter Emission</i>	Impulsbehaftete Ausbreitung hoher Strömungsgeschwindigkeit	Fortschreitende Ausbreitung in Emissionsrichtung aufgrund hoher Freisetzung- bzw. Strömungsgeschwindigkeit (hoher Impuls der Strömung); Einmischung von Umgebungsluft an den Grenzflächen durch Turbulenzbildung, so dass Strömung verlangsamt wird; gleichzeitige Vergrößerung des absoluten Massenstroms und des Querschnitts der Strömung (Bildung sog. Freistrahls).
<i>Mitführung in Luftströmungen</i>	Luftströmung durch Druckunterschiede aufgrund äußerer Kräfte	Einmischung und Mitführung von Stoffen in Luftströmungen der Umgebung (z.B. Lüftungsmaßnahmen, Maschinenabluft etc.); Einfluss durch Geschwindigkeit (bzw. Impuls) infolge von Druckunterschieden verschiedener Raumbereiche, Stoffeinmischung durch Querströmungen an den Grenzflächen der Luftbewegungen.
<i>Kleinskalige Verwirbelungen</i>	Druckunterschiede durch "kleine" Bewegungen	Lokal begrenzte Ausbreitung, verursacht durch geringe externe Kräfte (z.B. Bewegungen von Personen).

Tabelle 2: Relevante Ausbreitungsvorgänge von Gefahrstoffen (vgl. [11, 12])

Im Gegensatz zur Stoffemission, bei der abhängig von den Rahmenbedingungen i.d.R. ein Freisetzungsvorgang als wesentlich heraustritt, treten Ausbreitungsvorgänge

- einzeln,
- kombinatorisch oder
- einander ausschließend

auf. Die tatsächliche Relevanz und das Zusammenwirken der Vorgänge hängt von den ortsbezogenen Umgebungsbedingungen ab, die Vorgänge beeinflussen sich untereinander gegenseitig: Die Diffusion tritt z.B. nur in einer weitgehend in Ruhe befindlichen Umgebung bzw. wenn keine weiteren Luftströmungen vorliegen auf. Dagegen überlagert eine Luftströmung die Diffusion samt ihrer relativ langsamen Stoffausbreitung. Im Gegensatz dazu können die übrigen Vorgänge ineinander übergehen bzw. aneinander anschließen (z.B. dichtebedingter Aufstrom und Überführung in aus Lüftungsmaßnahmen resultierenden Luftstrom). Überlagerungen treten bei übermäßig hoher Ausprägung eines Vorgangs (bspw. bei Luftbewegungen mit hoher Geschwindigkeit) auf.

Die Vorgänge liegen in Räumen ungleichmäßig und mit ortsabhängigen Änderungen (z.B. aufgrund der geometrischen Bedingungen oder Zuluftführungen) vor. Das Zusammenwirken der auftretenden Ausbreitungsvorgänge führt zur ortsabhängigen Konzentrationsbildung in der Raumluft, die weiterhin zeitlichen Schwankungen, bspw. durch einen unregelmäßigen Zeitverlauf von Emissionen oder externen Kräften, unterliegen.

Analog zu den Emissionsvorgängen bestehen zwischen der Ausbreitung von Gefahrstoffen allgemein und Brandrauch ebenfalls Unterschiede: In Abhängigkeit zu den vorliegenden Stoffeigenschaften (z.B. der Temperatur) sind beim betrieblichen Umgang mit Gefahrstoffen prinzipiell alle dargestellten Vorgänge möglich. Für die Ausbreitung des Brandrauchs und dessen Komponenten (vgl. S. 7) sind dagegen die anzutreffenden physikalischen Effekte eingeschränkt. Aufgrund der bei der Emission ausgebildeten hohen Freisetzungsgeschwindigkeit von Reaktionsprodukten,

²⁰ Die reine Diffusion tritt theoretisch auf, praktisch kommt es nahezu immer zur Ausbildung geringfügiger konvektiver Wärmeströme mit Einfluss auf die Stoffausbreitung.

²¹ Verschiedene Aggregatzustände unterscheiden sich maßgeblich durch die Dichte; der Vorgang ist daher für alle Aggregatzustände gültig. Aus der Dichte kann u.a. die an den Molekülen ansetzende Schwerkraft ermittelt werden.

die aus thermisch bedingten Dichte- und somit Druckunterschieden in Abhängigkeit zur Höhe der Wärmefreisetzungsrates des Brandes resultieren, entsteht im Rahmen der primären Ausbreitung ein sog. Plume. Phänomenologisch entspricht dieser einem nach oben gerichteten Freistrah (vgl. Tab. 2). Aufgrund des Temperaturgradienten zwischen den Reaktionsprodukten und der turbulent eingemischten Umgebungsluft kommt es mit fortschreitender Aufstiegs- höhe zu einer Abkühlung der gesamten transportierten Masse²². Weiterhin verringert sich die Aufstiegs- geschwindigkeit (vgl. schematische Darstellung in Abb. 1). Somit hängt der resultierende Rauch-Massenstrom einerseits von der Wärmefreisetzungsrates, die zur Ausbildung der Strömungsgeschwindigkeit führt, andererseits von der freien Aufstiegs- höhe, über deren Strecke sich Umgebungsluft turbulent einmischt, ab.

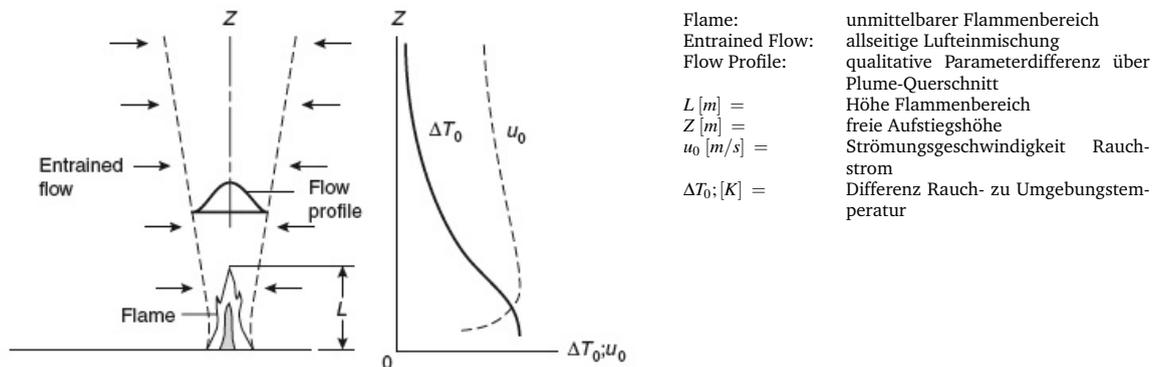


Abbildung 1: Idealisierte Strömungs-, Temperatur- und Geschwindigkeitsprofile im Plume [9]

Behindert ein Hindernis (bspw. die Raumdecke) den vertikalen Rauchaufstieg und kann keine Umströmung (z.B. bei Emporen) erfolgen, kommt es zur Umlenkung und radialen Rauchausbreitung (sog. Ceiling Jet). Wie auch inner- halb des Plumes bestimmt das Verhältnis von Rauch- und Umgebungstemperatur die Ausbreitungsgeschwindigkeit. Durch Querströmungen an der Grenzfläche der Unterseite des Ceiling Jets mischt sich Umgebungsluft ein, welche die Rauchgastemperatur abkühlt und die Ausbreitungsgeschwindigkeit verlangsamt; die strömungsmechanischen Para- meter sind abstandsabhängig. Weist das Hindernis eine geringere Temperatur auf, trägt auch dies zur Abkühlung des Rauchs bei.

Bei Begrenzung der radialen Ausbreitung (z.B. durch Wände) staut sich der Brandrauch unterhalb des Hindernisses zu einer sog. Rauchsicht, die aufgrund der Thermik im oberen Raumbereich verbleibt. Unterhalb ist die sog. rauch- arme Schicht²³ angeordnet [9].

Neben der temperaturbedingten Eigenströmung beeinflussen strömungsmechanische Druckunterschiede (bspw. durch Lüftungstechnische Maßnahmen oder offenstehende Fenster und Türen) die Rauchausbreitung. Diese Einflüsse lenken den Brandrauch ggf. in Richtungen ab, die nicht der dichtebedingten Strömung entsprechen. Weitere Ausbreitungs- vorgänge (z.B. Diffusion) verfügen im Brandfall über keine weitere Relevanz [13].

2.3 Vorgänge der Stoffimmission und -resorption

Eine Gesundheitsschädigung der Beschäftigten setzt die Stoffaufnahme aus der Umgebungsluft in den Körper vor- aus. Dementsprechend muss ein Stofftransport aus der Luft in den menschlichen Organismus erfolgen, der durch verschiedene Vorgänge eintreten kann. Prinzipiell tritt die Aufnahme (sog. Resorption²⁴) über

- die Haut,

²² Entsprechend dem Prinzip des Freistrahls erfolgt beim Aufstrom der Reaktionsprodukte eine turbulente Einmischung von Umgebungsluft, die im Weiteren den maßgeblichen Anteil der im Brandrauch enthaltenen Komponenten ausmacht [9].

²³ Das Prinzip der Ausbildung zweier übereinanderliegender Schichten geht von einer ausreichend großen Temperaturdifferenz aus, die zu einer geringeren Dichte des Brandrauches führt. Ist die Differenz nicht ausreichend (z.B. bei einer Ausbreitung über große Strecken hinweg), so resultiert ein Absinken des Brandrauches und die Ausbildung einer sog. diffusen Verrauchung ohne Schichtbildung.

²⁴ "Aufnahme des Stoffes aus dem Raum außerhalb des Organismus (...) in das Blut." [14]

- verschiedene Schleimhäute,
- die Lunge oder
- eine unmittelbare Injektion mit entsprechenden Gegenständen²⁵

ein. Dabei ist die übertragene Stoffmasse von der Luft in den Organismus von einer Vielzahl von Faktoren, bspw. der Stoffkonzentration in der Luft, der Durchblutung der resorbierenden Stelle oder auch unterschiedlichen Stoffeigenschaften (z.B. Fett- oder Wasserlöslichkeit) abhängig [14, 15].

Nach der Resorption erfolgt innerhalb des Körpers sowohl eine sog. Stoffverteilung²⁶ über die Blutbahn als auch die sog. Stoffelimination²⁷. Von der Ausprägung der verschiedenen Abläufe hängt die Stoffkonzentration, die am jeweiligen Wirkungsort (z.B. wirkungsspezifische Organe) Schädigungen verursachen kann, ab [15].

Die Stoffaufnahme bedingt eine luftgetragene Zufuhr zu den jeweiligen Resorptionsorten²⁸ (sog. Stoffimmission). Die Arten der Zufuhr, die in den entsprechenden Bereichen des Organismus zu einer Resorption führen, werden in sog. Wirkungspfade²⁹ unterschieden. Als Wirkungspfade sind

- die inhalative Stoffaufnahme (über die Lunge beim Einatmen),
- die dermale Stoffaufnahme (über die Haut und Schleimhäute bei unmittelbarem Kontakt oder Ablagerungen) sowie
- die orale Stoffaufnahme (über die Mundschleimhaut und den Magen-Darm-Trakt nach Verschlucken)

voneinander abgegrenzt [15]. Unterschiedliche Transportvorgänge charakterisieren die für den Arbeitsschutz relevanten inhalativen und dermalen Wirkungspfade. Die Erläuterungen lassen die orale Stoffaufnahme außer Acht³⁰. Innerhalb der Wirkungspfade tritt die Stoffimmission an den Resorptionsort und von dort in die Blutbahn über unterschiedliche Vorgänge und Mechanismen³¹ auf. Die verschiedenen Vorgänge weisen dabei unterschiedliche Abhängigkeiten, sowohl zu stoff- und umgebungsspezifischen Eigenschaften (z.B. Temperatur, Stoffkonzentration, Größenverteilung etc.) als auch zu Bedingungen des Organismus (bspw. Atemfrequenz und -volumen, vorhandene Blutkonzentration etc.), auf. Darüber hinaus hängt das Eintreten von Schädigungen vom Verlauf der Verteilungs- und Eliminationsprozesse innerhalb des Organismus ab, deren Relevanz und Ausprägung ebenfalls verschiedene Parameter bestimmen³².

Die vorhandenen arbeitsschutzspezifischen Grenzwertkonzepte (insbesondere der toxikologisch abgeleitete Arbeitsplatzgrenzwert - AGW - nach TRGS 900 [16]), die bei der Bewertung unmittelbar Bezug auf Stoffkonzentrationen in der Luft am Arbeitsplatz nehmen³³, schließen die Vorgänge der Stoffimmission, -resorption und -verteilung sowie -metabolisierung pauschalisiert ein. Die als Grenzwerte vorliegenden Luftkonzentrationen beachten somit diese Aspekte unmittelbar, so dass eine detaillierte Betrachtung der unterschiedlichen Vorgänge im Rahmen einer Gefährdungsbeurteilung nicht weiter notwendig ist. Auf die Beschreibung einzelner Vorgänge innerhalb der Wirkungspfade, die einen Stofftransport bewirken, wird daher an dieser Stelle verzichtet.

²⁵ Nicht gültig als Vorgang der unmittelbaren Übertragung aus der Arbeitsplatzluft in den menschlichen Körper.

²⁶ Ggf. Umwandlung in einen schädigenden Sekundärstoff sowie Ausbreitung innerhalb des Organismus.

²⁷ Verringerung der vorhandenen Stoffkonzentration durch die Vorgänge der unmittelbaren Ausscheidung (Verlassen des Körpers) bzw. der Metabolisierung (Umwandlung eines Stoffes in nicht schädigende Sekundärprodukte) innerhalb des Körpers.

²⁸ Unterschiedliche Stoffe werden an verschiedenen Stellen des Organismus verschieden stark resorbiert. Dementsprechend können spezifische Wirkungen bereits aufgrund der Art der Aufnahme resultieren.

²⁹ Örtlicher Verlauf des Massentransportes von der Luft über unterschiedliche Bereiche des Organismus mit entsprechenden resorptiven Flächen in das Blut.

³⁰ Ein Verschlucken von Umgebungsluft ist mit Ausnahme der allgemeinen Hintergrundbelastung unwahrscheinlich, so dass keine Resorption über den Magen-Darm-Trakt eintritt.

³¹ Eine Immission erfolgt bspw. über die Vorgänge der Kondensation oder Abscheidung oder über aktives Einatmen. Eine Resorption tritt z.B. durch Diffusionsvorgänge ein.

³² Z.B. erforderliche Bedingungen zur Metabolisierung

³³ Vgl. Definition des AGW [16]

3 Modelle zur rechnerischen Expositionsabschätzung

Zur Durchführung einer stoffspezifischen Gefährdungsbeurteilung mit Hilfe von rechnerischen Verfahren stehen grundsätzlich Modelle unterschiedlicher Ausrichtungen zur Verfügung (z.B. Unterschiede im Anwendungsbereich, in berücksichtigten physikalischen Vorgängen, in den berücksichtigten Parametern etc.). Die verschiedenen Ansätze sind dabei nicht zwangsläufig für Arbeitsschutzbetrachtungen abgeleitet worden, vielmehr entstammen auch etablierte Konzepte anderen Disziplinen (z.B. Produktsicherheit, Lüftungstechnik etc.). Somit besteht in vielen Fällen eine methodische Übertragung von Ansätzen³⁴ mit Anwendungsbedingungen, die sich in der ursprünglichen Modellausrichtung begründen.

Um zur Verfügung stehende Modelle und Konzepte effektiv anzuwenden, muss eine Einbindung in den Ablauf einer Gefährdungsbeurteilung nach TRGS 400 [17] bzw. TRGS 402 [18] erfolgen. Für möglichst wirklichkeitsnahe Berechnungen bzw. Ergebnisse sollten dabei sowohl die wesentlichen Bedingungen und Parameter des Stoffes sowie der Arbeitssituation als auch die Anwendungsgrenzen und Schwächen der angewandten Modelle bekannt sein und Beachtung finden. Rechnerische Expositionsabschätzungen sind demzufolge Einzelfallbetrachtungen von Arbeitsbedingungen.

Rechnerische Betrachtungen erfassen unterschiedliche Massentransportvorgänge, die die Stoffemission und -ausbreitung bewirken und sich u.U. gegenseitig beeinflussen³⁵. Zur Ermittlung des gesamten Ablaufs bis hin zur Bildung ortsabhängiger Konzentrationen in Arbeitsräumen ist es daher erforderlich, dass entsprechende Modelle die verschiedenen Vorgänge einbeziehen. Greifen Modelle ineinander, muss die Anwendung im Rahmen einer Gefährdungsbeurteilung aufeinander abgestimmt sein (bspw. hinsichtlich Anwendungsgrenzen, berücksichtigter Parameter sowie Ein- und Ausgangsgrößen).

Den Verwendung findenden Modellen liegen verschiedene Konzeptionen zugrunde, die die charakteristischen Parameter der jeweiligen Transportvorgänge unterschiedlich berücksichtigen. Generell werden sog. physikalische (auch: deterministische) von empirischen Modellen unterschieden:

Physikalische Modelle vereinfachen die physikalisch auftretenden Vorgänge, um diese anhand von Gleichungen bzw. ineinander greifenden Gleichungssystemen mathematisch zu beschreiben. Die Ableitung ist auf genauen Betrachtungen von naturwissenschaftlichen Gesetzmäßigkeiten begründet, die anhand verschiedener Größen in die Gleichungen eingehen.

Empirische Verfahren basieren dagegen auf Erfahrungswerten, z.B. aus Messungen. Aus diesen sind Modellgleichungen, teilweise mit Hilfsgrößen³⁶ und Korrelationsfaktoren, abgeleitet, um die Vorgänge erfassbar zu machen. Die Gleichungen sind dabei so angepasst, dass sie die zugrunde liegenden Erfahrungswerte (möglichst genau) wiedergeben. Bei enger Abstimmung auf wenige oder ausgewählte Referenzen erfolgen damit bereits Beschränkungen der Anwendbarkeit auf die bei den Ermittlungen herrschenden Rahmenbedingungen und Umgebungsparameter. Dies erschwert die Übertragung auf andere Situationen, die Gültigkeit der Ansätze unterliegt ggf. der Beschränkung auf gewisse Anwendungsbereiche.

Eine Differenzierung von Berechnungsansätzen besteht weiterhin in ihrem Betrachtungsumfang: Einerseits existieren singuläre Modelle, die nur auf einen Transportschritt (Stoffemission oder -ausbreitung) ausgerichtet sind und einen oder mehrere Vorgänge wiedergeben. Diese Modelle bilden lediglich Teilschritte einer Gesamtbetrachtung und sind zur vollständigen Expositionsabschätzung zu verknüpfen. Andererseits existieren kombinatorische Modelle, mit denen eine unmittelbare (interne) Verknüpfung der Gleichungen zu den Transportschritten als allein stehende Anwendung erfolgt. Die Verwendung dieses Modelltyps setzt die Einbindung in die Gefährdungsbeurteilung an geeigneter Stelle voraus.

³⁴ Die Übertragung aus anderen Disziplinen kann erfolgen, sofern die Anforderungen der GefStoffV bzw. der TRGS eingehalten sind [1].

³⁵ Vgl. Abschn. 2

³⁶ Größen, die nicht auf physikalischen Werten bzw. Einheiten beruhen (bspw. Bewertungsfaktor für Persönliche Schutzausrüstungen gemäß [19]).

3.1 Spezifizierung der stoffbezogenen Gefährdungsbeurteilung

ArbSchG [20] und GefStoffV [1] stellen die Anforderung an den Unternehmer, eine Gefährdungsbeurteilung der betrieblichen Tätigkeiten durchzuführen, die die stofflichen Rahmenbedingungen einbezieht. TRGS 400 ("Gefährdungsbeurteilung für Tätigkeiten mit Gefahrstoffen") und TRGS 402 ("Ermitteln und Beurteilen der Gefährdungen bei Tätigkeiten mit Gefahrstoffen: Inhalative Exposition") [17, 18] als untergesetzliche Regelwerke der GefStoffV stellen konkrete Schrittfolgen zur Durchführung vor. Als Teilschritte ergeben sich u.a.

- die Beschaffung erforderlicher Informationen zu Tätigkeit und Gefahrstoff,
- die Analyse (Ermittlung) und Bewertung (Beurteilung) vorliegender inhalativer Expositionen bzw. Gefährdungen,
- die Dokumentation der gewonnenen Parameter und Erkenntnisse,
- die Feststellung eines sog. Befunds, ob Schutzmaßnahmen erforderlich bzw. ausreichend sind,
- die Ableitung geeigneter Schutzmaßnahmen für Beschäftigte sowie
- die Wirksamkeitsüberprüfung der Maßnahmen (vgl. Abb. 2),

die für verschiedene Fälle näher beschrieben³⁷ werden. Die Wirksamkeitsüberprüfung muss dabei einmal im Anschluss an die eigentliche Gefährdungsbeurteilung³⁸ sowie in erforderlichen Abständen zur Überprüfung und Revision der Gefährdungssituation³⁹ anhand von Bewertungskriterien durchgeführt werden. Das Vorgehen greift somit das bereits durch das ArbSchG vorgesehene Verfahren zur Analyse (Informationsermittlung), Bewertung (Ermittlung von Expositionen sowie Wirksamkeitsüberprüfung) und Gestaltung (Ergreifung von Maßnahmen) im Hinblick auf stoffspezifische Betrachtungen auf und erweitert dieses.

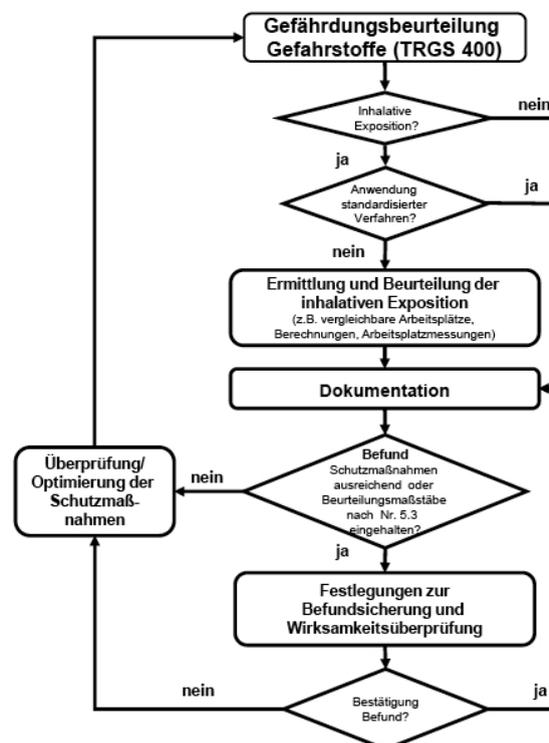


Abbildung 2: Schrittfolge zur Gefährdungsbeurteilung nach TRGS 402 [18]

³⁷ Z.B. Detailierung der Informationsermittlung

³⁸ Überprüfung der tatsächlichen Eignung ergriffener Schutzmaßnahmen

³⁹ Z.B. technische Begutachtung ergriffener Maßnahmen

Die Teilschritte der Expositionsermittlung und der Wirksamkeitsüberprüfung zielen auf die Ermittlung von Gefährdungen durch Quantifizierung der Gefahrstoffexposition sowie deren Bewertung ab. Methodisch wird der Teilbereich der Analyse und Bewertung der Arbeitsbedingungen abgebildet. In diesen Schritten ist die Verwendung von Berechnungsverfahren als sog. "qualifizierte Expositionsabschätzungen" möglich. Die Bewertung von Gefährdungen erfolgt allgemein auf der Grundlage ortsabhängig ermittelter Konzentrationen eines Gefahrstoffs an relevanten Stellen in der Luft am Arbeitsplatz (z.B. im Atembereich Beschäftigter) unter Berücksichtigung der jeweiligen Expositionszeit. Der Bezug beruht auf den verwendeten Grenzwertkonzepten (z.B. Definition des AGW).

Die Vorgänge zur Bildung ortsabhängiger Stoffkonzentrationen stehen dabei im Zusammenhang mit Stoff- und Umgebungsparametern (vgl. Abschn. 2), die somit Einfluss auf die Expositionshöhe der Beschäftigten haben. Die Anwendung rechnerischer Verfahren setzt die Annahme voraus, dass die Modelle die auftretenden (relevanten) Vorgänge sowie die damit zusammenhängenden Stoff- und Umgebungsparameter ausreichend genau erfassen und wiedergeben. Die in konkreten Fällen vorliegenden Vorgänge und Eingangsgrößen sind dementsprechend im Rahmen einer Gefährdungsbeurteilung zu ermitteln und zu berücksichtigen. Es bietet sich daher die Ergänzung bzw. Konkretisierung des generellen Ablaufs einer auf Gefahrstoffe ausgerichteten und Berechnungsmodelle verwendenden Gefährdungsbeurteilung an.

Die Anwendung von rechnerischen Verfahren im Rahmen einer stofflichen Gefährdungsbeurteilung macht zusätzlich die nachstehenden Teilschritte zweckmäßig, welche die allgemeine Schrittfolge nach TRGS 400 bzw. 402 methodisch spezifizieren und die Abb. 3 als resultierenden Gesamtablauf einer ausschließlich rechnerisch basierten Gefährdungsbeurteilung vorschlägt:

- Strukturierung des Betrachtungsgegenstands sowie Erfassung vorliegender Transportvorgänge, Rahmenbedingungen sowie Parameter des Stoffs, der Tätigkeit und der Umgebung (Schritt der Informationsermittlung) als Hazard-Beschreibung,
- Auswahl geeigneter rechnerischer Verfahren anhand der ermittelten Parameter und relevanten Vorgänge samt der zugehörigen Eingangsgrößen (Schritt der Informationsermittlung),
- rechnerische Teilbetrachtung der Stoffemission entsprechend des Arbeitsverfahrens (Schritt der Analyse der Arbeitssituation),
- rechnerische Teilbetrachtung der Stoffausbreitung entsprechend der Emission und der Umgebungsbedingungen durch Abschätzung ortsabhängiger Luftkonzentrationen (Schritt der Analyse der Arbeitssituation),
- rechnerische Teilbetrachtung der zeitlichen Exposition von Beschäftigten entsprechend der Arbeitsorganisation und Tätigkeitsdauern (Schritt der Analyse der Arbeitssituation),
- Bewertung der Arbeitssituation anhand bestehender AGW⁴⁰ als abschließende Schutzzielkonkretisierung (Schritt der Bewertung der Arbeitssituation.).

Für die Identifizierung geeigneter Berechnungsmodelle wird aus wissenschaftlicher Sicht ein weiterer Teilschritt erforderlich. Dieser gewährleistet, dass die im Rahmen einer Gefährdungsbeurteilung ermittelten Ergebnisse den allgemeinen wissenschaftlichen Ansprüchen (sog. Gütekriterien der wissenschaftlichen Forschung)

- der Objektivität⁴¹,
- der Reliabilität⁴² sowie
- der Validität⁴³

entsprechen (vgl. [22]). Ziel dessen ist die möglichst genaue Wiedergabe der zu erwartenden stofflichen Verhaltensweisen durch die verwendeten Modelle. Daraus folgt die Notwendigkeit der Validierung der verwendeten Modelle, aller erfassten Eingangsdaten sowie der Zwischen- und der Endergebnisse rechnerischer Betrachtungen (Schritt der

⁴⁰ Sofern vorhanden, sonst Verwendung anderer Grenzwert- oder Beurteilungskonzepte

⁴¹ Keine Beeinflussung der Ergebnisse durch unbegründete Auswahl von Parametern.

⁴² Wiederholbarkeit der Untersuchungen als Nachweis der eindeutigen, nicht willkürlichen Aussage rechnerischer Betrachtungen.

⁴³ Grad der Genauigkeit, der durch ein Verfahren im Hinblick auf messtechnisch ermittelte Ergebnisse erreicht wird.

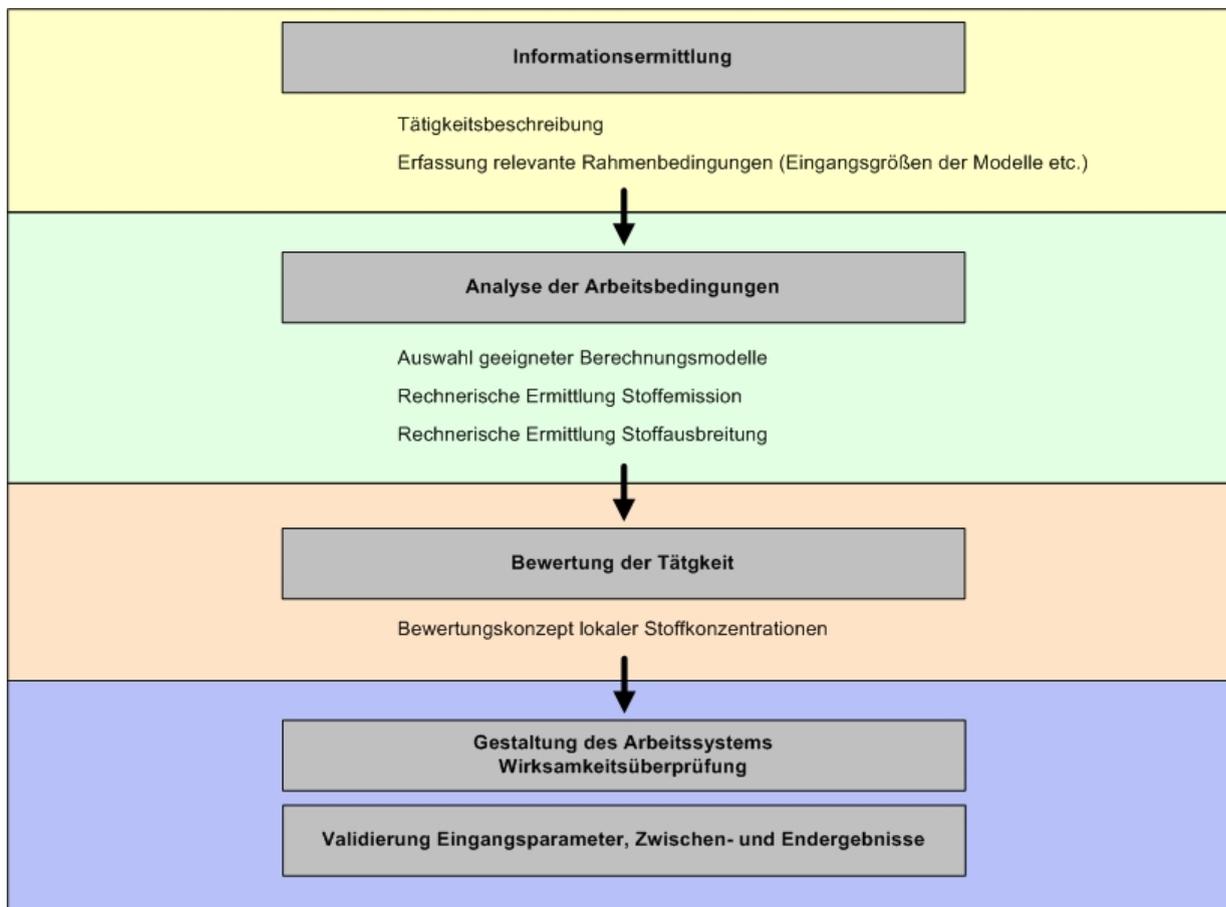


Abbildung 3: Gesamtablauf einer stoffspezifischen, auf rechnerischen Verfahren beruhenden Gefährdungsbeurteilung [21]

Analyse der Arbeitssituation). Die Validierung der Modelle umfasst dabei den Vergleich von (Berechnungs-) Ergebnissen mit Referenzwerten (z.B. Messungen), um die Genauigkeit von deren Wiedergabe zu ermitteln. Auf dieser Grundlage beruht die Anwendung eines Verfahrens, für das von der Berechnung ausreichend genauer Ergebnisse ausgegangen wird. Die Untersuchungen erfolgen dementsprechend im Vorfeld des praktischen Einsatzes (z.B. bei der Modellableitung, -beschreibung und Veröffentlichung). In der Anwendung der Modelle bezieht sich die Validierung in der Gefährdungsbeurteilung auf die logisch-kritische Auseinandersetzung, ob Eingangswerte und Ergebnisse (physikalisch) sinnvoll und nachvollziehbar sind. Dadurch soll die korrekte Verwendung der Ansätze gesichert werden. Über die Validierung der Ergebnisse hinaus müssen ebenfalls Parameter festgelegt werden, die im Zuge der Wirksamkeitsüberprüfung entweder direkt anhand des Stoffes selbst (z.B. über Konzentrationen) oder indirekt durch technische Überprüfungen (z.B. Volumenstrom Lüftungstechnischer Anlagen) überwacht werden können.

Wie bereits in der Druckfassung der Veröffentlichung "Ausgewählte Berechnungsmodelle zur Beschreibung von Gefahrstoffexpositionen an Arbeitsplätzen" [3] aufgezeigt, stehen zur rechnerischen Expositionsabschätzung im Rahmen der Gefährdungsbeurteilung verschiedene Modelle zur Verfügung. Die Anwendung benötigt die Abstimmung der Modelle aufeinander. Zur Auswahl geeigneter Ansätze durch den Anwender muss im Rahmen der Informationsermittlung ein Abgleich mit den in der jeweiligen Arbeitssituation auftretenden Massentransportvorgängen stattfinden. Modellspezifische Eingangsparameter sollten ebenfalls im Zuge der Informationsermittlung festgestellt und dokumentiert werden.

3.2 Informationsermittlung und -strukturierung: Arbeitssystem-Modell

Die Gefährdungsbeurteilung beginnt zunächst aus praktischen Gesichtspunkten mit der Abgrenzung des jeweiligen Betrachtungsgegenstands (bspw. einer Tätigkeit). Die vollständigen gefährdungsrelevanten Einflüsse beschreiben die Tätigkeit umfassend: Stoffbezogene Betrachtungen müssen die potentiellen Massentransportvorgänge, die auf den Stoff selbst oder auf vorliegende Umgebungsbedingungen zurückzuführen sind, erfassen. Auch ist die Feststellung aller relevanten Stoff- und Umgebungsparameter erforderlich. Die ermittelten Parameter bilden die Grundlage einer strukturierten und umfassenden Gefährdungsbeurteilung, welche die relevanten Vorgänge erfasst sowie alle Einflussgrößen und Wechselwirkungen berücksichtigt [23].

Das Arbeitssystem⁴⁴ stellt als Gedankenmodell in der betrieblichen Praxis oftmals die Grundlage systematischer Detailuntersuchungen im Rahmen der Gefährdungsbeurteilung dar. Dieses für die Belange des Arbeitsschutzes entwickelte methodische Hilfsmittel charakterisiert mit der Gesamtheit seiner Systemelemente die zu beurteilende Tätigkeit und erstellt eine umfassende, methodische Beschreibung. Dazu kategorisiert der Ansatz die Arbeitsbedingungen und Tätigkeitsparameter als sog. Arbeitssystemelemente. Im Idealfall sollten alle zur Beurteilung notwendigen Parameter erfasst werden, so dass diese als Eingangsinformationen zur angeschlossenen Analyse und Bewertung potentieller Gefährdungen vorab zur Verfügung stehen. Weiterhin identifiziert die strukturierte Darstellung der Bedingungen bereits mögliche Anknüpfungspunkte⁴⁵ erforderlicher Schutzmaßnahmen [23].

Grundlage der Tätigkeitsbeschreibung mit Hilfe des Arbeitssystems stellt die eindeutige Definition des Ansatzpunktes der Betrachtungen (bspw. über das Systemelement der Arbeitsaufgabe oder des Arbeitsplatzes) dar. Der Gegenstand der Untersuchungen wird festgelegt und abgegrenzt. Darauf aufbauend folgt die Erfassung und Kategorisierung weiterer Tätigkeitsbedingungen auf Basis der Arbeitssystemelemente, wobei der Detaillierungsgrad der Darstellung (und somit auch die Tiefe der anschließenden Analyse) dem Anwender - z.B. durch konkretisierende Untergliederungen der Systemelemente - vorbehalten bleibt. Die Kategorien

- der Arbeitsaufgabe,
- des Arbeitsgegenstands,
- der eingesetzten Arbeitsmittel,
- des Menschens,
- des Arbeitsablaufs,
- der Ein- und Ausgabe der Arbeitsaufgabe sowie
- der Umgebungs- und Umwelteinflüsse

fassen die Arbeitsbedingungen zusammen. Die Arbeitssystemelemente sind über gegenseitige Verknüpfungen und Wechselwirkungen miteinander vernetzt, die gleichfalls erfasst und beschrieben werden müssen: So nutzt z.B. der Mensch ein Arbeitsmittel zur Bewältigung der Arbeitsaufgabe an einem Arbeitsgegenstand. An das Arbeitsmittel ergeben sich aus beiden Wirkungsrichtungen (Mensch und Arbeitsgegenstand) Anforderungen, die zur Funktionalität erforderlich sind (bspw. Leistung und ergonomische Handhabung). Gleichzeitig beeinflusst die Umgebung das Arbeitsmittel (z.B. klimatische Bedingungen des Arbeitsraumes). Die definierten Arbeitssystemelemente und Wechselwirkungen sind in Abb.4 zusammengefasst. Diese kann gleichermaßen zur Orientierung bei Durchführung und Dokumentation der Untersuchungen genutzt werden [24].

Die allgemeine Gedankenanlage des Arbeitssystem-Modells ermöglicht die flexible Anwendbarkeit für alle Gefährdungsfaktoren. Bei Konkretisierung und Erhöhung des Detaillierungsgrads der Arbeitssystemelemente auf den Betrachtungsfokus (hier: Gefährdungsfaktor Gefahrstoffe) gewinnt der Anwender einen umfassenden Eindruck über die Gesamtsituation. Dabei ist zusätzlich die graphische Darstellung des Ansatzes und der Ergebnisse von Vorteil, die

⁴⁴ Andere Ansätze sind zumeist an dieses Konzept angelehnt und berücksichtigen andere (ähnliche) Kategorisierungen.

⁴⁵ Bedingungen der Tätigkeit bzw. Parameter in der Darstellung des Arbeitssystems, die einen möglichen Einsatz von Schutzmaßnahmen erkennen lassen (z.B. Lärmemission eines bestimmten Arbeitsmittels, deren Verminderung eine Verbesserung der Gesamtsituation bewirkt).



Abbildung 4: Modell des Arbeitssystems - Systemelemente und Wechselwirkungen [24]

Zusammenhänge zwischen Systemelementen und gegenseitige Wechselwirkungen aufzeigt.

Der zunächst abstrakte Aufbau bildet ggf. auch einen Nachteil: Die Genauigkeit einzelner Systemelemente samt entstehender Wechselwirkungen hängt von der Sorgfalt der Analysen und Detailierung durch den Anwender ab, da keine genaueren Aspekte zur Begutachtung vorgegeben werden. Es besteht die Möglichkeit der unvollständigen Durchführung der Untersuchungen, die ggf. wesentliche Rahmenbedingungen bzw. Parameter vernachlässigen. Dies führt einerseits zu einer unsachgemäßen Gefährdungsbeurteilung, andererseits können Anknüpfungspunkte möglicher Gestaltungsmaßnahmen verkannt werden.

Die Vorbereitung einer stoffspezifischen, auf Berechnungen fussenden Gefährdungsbeurteilung mithilfe des Arbeitssystems erfordert die Anpassung der Arbeitssystemelemente. Bspw. könnten die erforderlichen Eingangsparameter verschiedener Modelle als detaillierte Vorlage in den Systemelementen kategorisiert und zur Ermittlung vorgegeben werden. Neben der Feststellung der modellbedingten Eingangsgrößen könnte das Arbeitssystem gleichzeitig die Grundlage einer angepassten Auswahl von Berechnungsmodellen bilden. Eine Möglichkeit dazu wäre das Hinterlegen spezifischer Anwendungsgrenzen und bereits an dieser Stelle der Vergleich mit den vorliegenden Rahmenbedingungen.

3.3 Emissionsmodelle

Zur Beschreibung der Freisetzung eines betrieblich eingesetzten Gefahrstoffs an die Umgebungsluft stehen verschiedene Berechnungsmodelle zur Verfügung. Diese ermitteln in Abhängigkeit zum ursprünglichen Aggregatzustand und zum auftretenden Transportvorgang die freigesetzte Stoffmasse. Die Ergebnisse dienen z.B. als Eingangsgrößen nachfolgender Abschätzungen zur Stoffausbreitung. Grundlegend sind plötzliche bzw. einmalige von längerfristigen, zeitlich-konstanten oder -variierenden Stofffreisetzungen zu unterscheiden (vgl. [8]). Nachfolgend werden beispielhaft die ausgewählten, in [3] angeführten Modelle aus dem Gebrauch im Arbeitsschutz sowie Emissionsbeschreibungen von Modellen des Brandschutzes beschrieben. Die Darstellung geht auf Einzelfallbetrachtungen und die erforderlichen Rahmenbedingungen ein.

Die Zusammenfassungen der Modellansätze erfolgen zur einschlägigen Darstellung und Vergleichsmöglichkeit i.d.R. in tabellarischer Form. Diese beinhalten gleichbleibende Merkmale, welche die Modelle bzw. beinhaltete Grundgleichungen verdeutlichen. Folgende Merkmale werden aus nachstehenden methodischen Erwägungen aufgeführt und auch für die spätere Charakterisierung von Ausbreitungsmodellen herangezogen:

- Herkunft des Modells: Benennung der ursprünglichen Disziplin des Modells, aus der ggf. Besonderheiten des Verfahrens, der eingebundenen Parameter sowie der Ergebnisdarstellung resultieren;
- Anwendungs- bzw. Gültigkeitsbereich: Bedingungen der Anwendung sowie erforderliche Einschränkungen, damit die Formulierungen Gültigkeit besitzen;
- Berücksichtigte physikalische Vorgänge: Vorgänge, die über die Modellansätze beschrieben werden sollen;
- Eingebundene Erhaltungsgleichungen: Beachtung der zentralen Erhaltungsgleichung (vgl. S. 4) zur Berücksichtigung von Parallelvorgängen etc.;
- Grundlage der Modellkonzeption: Berücksichtigung zentraler Ansätze und Grundlagen der Betrachtungen, auf denen die Ableitung des Modells basiert;
- Grundannahmen des Modells: Vereinfachungen der Realität, unter denen eine Modellableitung stattgefunden hat, die ggf. den Anwendungs- und Gültigkeitsbereich mitbestimmen und die Besonderheiten der Betrachtungen aufzeigen;
- Eingebundene Eingabeparameter: Darstellung der erforderlichen Ausgangsgrößen der Betrachtung sowie Einbeziehung von umgebungs-, stoff- und verfahrens- bzw. tätigkeitsspezifischen Eigenschaften, die ggf. Anknüpfungspunkte an vorgelagerte oder ergänzende Betrachtungen darstellen;
- Empirischer Einfluss über Hilfsfaktoren: Beeinflussung der Ergebnisse durch empirische Einschränkungen bzw. Ergänzungen, die bspw. aus spezifischen Betrachtungen resultieren;
- Ergebnisparameter und Bezugspunkt: Ergebnisgrößen und potentielle Anknüpfungspunkte zu nachgeschalteten oder ergänzenden Betrachtungen;
- Vor- und Nachteile der Anwendung: bekannte bzw. ersichtliche Aspekte aus den prinzipiellen Modellansätzen, die einen Einsatz im Rahmen einer Gefährdungsbeurteilung unter Berücksichtigung der Anforderungen von GefStoffV und TRGS qualitativ begünstigen oder einschränken.

In die Beschreibung der Emissionsmodelle sind auch kombinatorische Modelle⁴⁶ eingeordnet, da diese ebenfalls Bezüge auf jeweils einen konkreten Freisetzungsvorgang besitzen.

3.3.1 Unmittelbare Abschätzung von Emissionsströmen

Die Stofffreisetzung in die Luft kann allgemein über den zeitabhängigen Massenstrom⁴⁷ bzw. Volumenstrom⁴⁸ ausgedrückt werden. Die stoffspezifische Dichte verknüpft beide Größen miteinander, die bei Ausbreitungsrechnungen ggf. als Eingabeparameter⁴⁹ dienen[25].

Neben der Ermittlung von Massen- oder Volumenstrom mit Hilfe von Berechnungsmodellen zur gasförmigen Emission ist ggf. eine Annahme oder eine anderweitige Abschätzung möglich bzw. sinnvoll. In diesem Fall verzichtet die Gefährdungsbeurteilung auf die modellbasierte Abschätzung der Emission. Die Ermittlung ohne Berechnungen bietet sich insbesondere dann an, wenn Daten zur Stofffreisetzung bereits aus anderen Quellen vorliegen. Dies kann z.B.

- aus vorgelagerten Messungen,
- aus zeitabhängigen Massenverlustrechnungen⁵⁰,
- aus tätigkeits- und stoffspezifischen Literaturangaben⁵¹ oder

⁴⁶ Unmittelbare numerische Verknüpfung mehrerer Teilvorgänge der Stoffemission und -ausbreitung, vgl. Abschn. 3.5

⁴⁷ Strömende Masse eines Stoffes pro Zeit [kg/s].

⁴⁸ Strömendes Volumen pro Zeit [m³/s].

⁴⁹ Vgl. Erläuterungen zu Ausbreitungsmodellen ab S. 26

⁵⁰ Sog. Massenbilanzen, die z.B. aus der gesamten eingesetzten Stoffmasse oder dem Vergleich von Leitungsdurchflüssen abgeleitet werden können.

⁵¹ Stehen entsprechende Literaturdaten zur Verfügung, muss vor einer Verwendung zur Überprüfung der Gültigkeit bzw. des übereinstimmenden Anwendungsbereichs festgestellt werden, ob diese unter vergleichbaren betrieblichen Bedingungen ermittelt wurden.

- aus der Übertragung vergleichbarer Untersuchungen (sog. Analogiebetrachtungen)

der Fall sein. Weiterhin ist eine Abschätzung notwendig, wenn Modelle nicht oder nur mit großen Unsicherheiten einsetzbar oder Worst-Case-Abschätzungen⁵² beabsichtigt sind.

Sowohl der Massen- oder Volumenstrom als auch zusammenhängende Größen sind zur Vorgabe der Stoffemission sinnvolle Werte, deren Zusammenhang Gl. 1 zeigt. Die miteinander verknüpften Größen können außerdem voneinander abgeleitet werden, sofern ein vollständiger Datensatz vorliegt [25, 26].

$$\dot{m} = \dot{n} \cdot M = \dot{V} \cdot \rho = A_{em} \cdot v_A \cdot \rho \quad (1)$$

Durch die direkte Vorgabe von Emissionsparametern besteht die Möglichkeit, die weitere Stoffausbreitung innerhalb eines Raumes zu ermitteln. Die Annahme von Werten entspricht dem Verknüpfungspunkt zwischen Emissions- und Ausbreitungsmodellen, den Ausbreitungsberechnungen als Eingangsparameter weiterverwenden. Um eine realitätsnahe Beurteilung durchzuführen ist es jedoch erforderlich, die angenommenen Emissionswerte auf gesicherten Erkenntnissen zu begründen.

3.3.2 Modell zur Gas-Emission aus Behältern

Eine potentielle Emission ist der Austritt eines Gases (allgemein: eines Fluids⁵³) aus Behältern, die in der betrieblichen Praxis häufig an Arbeitsplätzen zur Entnahme, zur Lagerung oder zum Transport vorzufinden sind. Eine Freisetzung eines bevorrateten Gases⁵⁴ ist aufgrund des betriebsbedingten Drucks innerhalb des Behälters durch eine Öffnung oder einen Defekt möglich (z.B. bei Druckgasflaschen); die Emission ist verfahrensbedingt. Darüber hinaus können in Behältern auch Vorgänge mit Wechsel des Aggregatzustands eintreten, die nicht von Verfahrensparametern, sondern von den globalen Rahmenbedingungen abhängen (z.B. Verdampfung einer Flüssigkeit bei Fasslagerung, beeinflusst durch Umgebungstemperatur). Im Anschluss kann ebenfalls ein Gasaustritt erfolgen. Die Art der Emission, insbesondere die Ausbildung des Impulses, beeinflusst weiterhin die angeschlossenen Vorgänge der Stoffausbreitung⁵⁵.

Physikalisch erfolgt der Gasausstrom aufgrund des Druckausgleichs zwischen Behälter-Innerem und der Umgebungsluft. Das Druckverhältnis des Behälters zur Umgebung und die Gasdichte bestimmen die Strömungsgeschwindigkeit der Freisetzung. Darüber hinaus beeinflussen Öffnungsgröße und -geometrie (mögliche Turbulenzbildung mit Einschränkung der Effektivität) den eintretenden Emissions-Massenstrom.

Die Abschätzung der Gas-Ausströmung beruht auf den theoretischen Überlegungen der sog. Bernoulli-Gleichung⁵⁶. Die Formulierungen leiten sich unmittelbar aus dieser Gleichung ab:

Bei Ausströmungen werden zwei grundsätzliche Strömungsverläufe unterschieden. Die sog. überkritische Strömung ist durch die gleichbleibende Ausstromgeschwindigkeit gekennzeichnet, die maximal die spezifische Schallgeschwindigkeit des Gases erreicht. Ein anhaltender Ausstrom bewirkt, dass in dessen Verlauf der Überdruck innerhalb des Behälters abnimmt. Dazu proportional verringert sich auch der austretende Massenstrom. Unterschreiten Behälter- und Umgebungsdruck ein kritisches Verhältnis zueinander, geht die Ausströmung in den sog. unterkritischen Bereich über. Charakteristisch für den zeitlichen Verlauf dieses Falls ist neben abnehmendem Behälterdruck und Emissionsmassenstrom auch die Abnahme der Strömungsgeschwindigkeit. Der Ausstrom endet, wenn der Behälterdruck den Umgebungsdruck erreicht hat [8].

⁵² Gedankliches Szenario, das den ungünstigsten Zustand einer Situation beschreibt und somit die kritischsten Ergebnisse liefert.

⁵³ Phänomenologische Zusammenfassung von Gasen und Flüssigkeiten, die druckbedingte Strömungen bilden [5].

⁵⁴ Die druckbedingte Freisetzung von Flüssigkeiten ist ebenfalls möglich, die entweder zu Tropfen in der Luft oder zu einer Bodenlache führt. Da kein unmittelbarer Übergang in die Gasphase stattfindet, werden die Vorgänge an dieser Stelle jedoch nicht betrachtet.

⁵⁵ Vgl. Tab. 1

⁵⁶ Beschreibung strömungsmechanischer Größen auf Basis des Drucks für inkompressible, reibungsfreie und stationäre Strömungen. Grundlage bildet die sog. Stromfadentheorie in Verbindung mit den zentralen Erhaltungsgleichungen [5]. Mit Hilfe der Bernoulli-Gleichung findet eine relative Betrachtung strömungsmechanischer Größen in verschiedenen Zuständen, z.B. über Öffnungen hinweg, statt.

Die rechnerische Abschätzung von Ausströmungen aus Behältern dient bspw. der Beurteilung von Störsituationen und möglichen stoffbezogenen Gefährdungen für Beschäftigte. In der Anwendung der Modellgleichungen muss zunächst ermittelt werden, ob eine unter- oder überkritische Strömung vorliegt. Dazu beinhaltet die Konzeption ein Übergangs- bzw. Entscheidungskriterium, dass sich am Verhältnis des Behälterdrucks p_B zum Umgebungsdruck p_∞ orientiert. Herrscht ein Druckverhältnis unterhalb des Entscheidungskriteriums, liegt eine unterkritische Strömung (Gl. 2) vor. Andernfalls ist die Ausströmung überkritisch (Gl. 3).

$$\frac{p_B}{p_\infty} < \left(\frac{\gamma + 1}{2} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma+1}} \quad (2)$$

bzw.

$$\frac{p}{p_\infty} \geq \left(\frac{\gamma + 1}{2} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma+1}} \quad (3)$$

Nach der Bestimmung des Strömungszustands ermöglichen die Gl. 4 (unterkritische Strömung) bzw. Gl. 5 (überkritische Strömung) die Berechnung des jeweiligen Emissions-Massenstroms:

$$\dot{m}_{BG,i} = C_d \cdot A_{\text{Öff}} \cdot \sqrt{\rho_i \cdot p_B \cdot \gamma \cdot \left(\frac{2}{\gamma - 1} \right)} \cdot \sqrt{\left[\left(\frac{p_\infty}{p_B} \right)^{\frac{2}{\gamma}} - \left(\frac{p_\infty}{p_B} \right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma}} \right]} \quad [\text{kg/s}] \quad (4)$$

$$\dot{m}_{BG,i} = C_d \cdot A_{\text{Öff}} \cdot \sqrt{\rho_i \cdot p_B \cdot \gamma} \cdot \sqrt{\left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{(\gamma+1)/(\gamma-1)}} \quad [\text{kg/s}] \quad (5)$$

Da die Öffnungscharakteristik (Geometrie, Kanten der Ränder) durch mögliche Einschnürungseffekte⁵⁷ den Ausstrom beeinflusst, beziehen die Gleichungen diesen Faktor über den Koeffizienten C_D ein. Es wird somit lediglich der strömungsmechanisch wirksame Öffnungsquerschnitt berücksichtigt. Der dimensionslose Parameter γ (sog. Isentropenexponent⁵⁸) stellt den thermodynamischen Zusammenhang zwischen Druck und Volumen eines Gases dar. Die Annahmen und implizierten Rahmenbedingungen des Modells führt Tab. 3 auf. Das Modell eignet sich sowohl für die Verwendung bei direkten Gasausströmungen als auch für die Freisetzung von Flüssigkeitsdämpfen (z.B. nach Verdunstung oder Verdampfung innerhalb des Behälters⁵⁹).

Merkmale	Eigenschaft Modellkonzeption
<i>Herkunft des Modells</i>	Allgemeine Strömungsmechanik
<i>Anwendungs- bzw. Gültigkeitsbereich</i>	Emission von Fluiden aus Behältern, hier: Gase
<i>Berücksichtigte physikalische Vorgänge</i>	Druckbedingte, gasförmige Stoffemission aus Behältern
<i>Eingebundene Erhaltungsgleichungen</i>	Massenerhaltung, Impulserhaltung
<i>Grundlage der Modellkonzeption</i>	Bernoulli-Gleichung mit Erweiterungen zur Beschreibung von Gas- und Öffnungsverhalten
<i>Grundannahmen des Modells</i>	Inkompressible, reibungsfreie, stationäre Strömungen von Gasen aus Behälteröffnungen
<i>Eingebundene Eingabeparameter</i>	Stoffeigenschaften: Isentropenexponent (Druck-Volumen-Zusammenhang), Stoffdichte; Umgebungsbedingungen: Umgebungsdruck, Erdbeschleunigung; Strömungsmechanische Größen: Öffnungsfläche, Strömungsbeiwert der Öffnung (Berücksichtigung Einschnürungseffekte), Behälterdruck
<i>Empirischer Einfluss über Hilfsfaktoren</i>	Beschreibung tatsächlich zur Verfügung stehende Öffnungsfläche über Korrekturfaktor C_d (Festlegung aus geometriespezifischer, empirischer Ermittlung)
<i>Ergebnisparameter und Bezugspunkt</i>	Emissions-Massenstrom zur unmittelbaren Verwendung in luftbezogenen Ausbreitungsbetrachtungen (Gase und Dämpfe)
<i>Vorteile in der Anwendung</i>	Abschätzung des Emissions-Massenstroms aufgrund eindeutiger Parameter möglich; Begründung in physikalisch-theoretischen Ableitungen; Verknüpfung zu nachgeschalteten Ausbreitungsmodellen möglich

⁵⁷ Bei der Durchströmung von Öffnungen stellen sich durch Kanten und Verwirbelungen an den Rändern Einschnürungen ein, so dass nicht die gesamte Öffnungsfläche zur Verfügung steht. Die Ausprägung ist abhängig von der Öffnungsgeometrie [27].

⁵⁸ Verhältnis der stoffspezifischen Wärmespeicherkapazitäten für konstanten Druck und konstantes Volumen eines Gases.

⁵⁹ In diesen Fällen muss der Druck der Dämpfe oberhalb des Flüssigkeitsspiegels geeignet abgeschätzt werden.

Merkmale	Eigenschaft Modellkonzeption
Nachteile in der Anwendung	Berücksichtigung von Druckveränderungen nur indirekt bzw. in Sprüngen möglich (Rüchrechnung des Behälterdrucks über Volumenstrom und ideale Gasgleichung)

Tabelle 3: Zusammenfassung: Modell zur Emission aus Behältern

3.3.3 Verdunstungs- und Verdampfungsmodelle für Flüssigkeitsoberflächen

Das Auftreten der Verdunstung⁶⁰ bzw. Verdampfung⁶¹ von Flüssigkeiten bzw. flüssigen Phasen innerhalb eines Feststoffes hängt von den Umgebungsbedingungen ab. Diese stehen untereinander in Verbindung und beeinflussen die Höhe des resultierenden Massenstroms. Verdunstung und Verdampfung unterscheiden sich jedoch in den wesentlichen physikalischen Parametern, die den Phasenübergang charakterisieren (z.B. Sättigungsdampfdruck und Verdampfungsenthalpie).

Zur Berechnung von Verdunstungs- und Verdampfungsvorgängen stehen unterschiedliche Modelle zur Verfügung, die sich durch Annahmen, Rahmenbedingungen und Anwendungsgrenzen differenzieren. Aufgrund der Vielfalt werden exemplarisch Ansätze⁶² aufgezeigt und voneinander abgegrenzt. Die Modelle beziehen sowohl Stoff- als auch Umgebungsparameter in die Betrachtungen ein.

Modell des Sättigungsdampfdrucks (SVP-Modell)

Die Flüssigkeitsverdunstung beruht auf dem Bestreben, ein sog. Phasengleichgewicht (gleich hoher Partialdruck von flüssiger und gasförmiger Phase eines Stoffes an der Grenzfläche) einzustellen. Dieses Gleichgewicht tritt unmittelbar an der Grenzfläche auf, die räumliche Ausbreitung (z.B. durch Luftströmungen oberhalb der Flüssigkeitsoberfläche) stört dieses jedoch. Der Verdunstungs-Massenstrom hängt daher u.a. von den Bedingungen der Umgebung (z.B. Umgebungstemperatur und Luftgeschwindigkeit) ab, welche die Konzentration der gasförmigen Phase (Dampf) oberhalb einer Flüssigkeit beeinflussen [10, 29].

Das kombinatorische SVP-Modell⁶³ ist auf die Verdunstung aus Oberflächen und die unmittelbare Ermittlung eintretender Luftkonzentrationen ausgelegt. Es basiert auf dem sog. Sättigungsdampfdruck⁶⁴ als wesentlichem Eingangsparameter. Dieser charakterisiert als stoffspezifische Eigenschaft das Bestreben einer Flüssigkeit zum Phasenübergang in die Gasphase. Erreicht die entstehende gasförmige Phase den Sättigungsdampfdruck, so ist der statistische Stoffaustausch zwischen Flüssig- und Gasphase gleich Null⁶⁵.

Die Berechnung erfolgt unter Annahme verschiedener Rahmen- und Verwendungsbedingungen (vgl. Tab. 4) aufgrund des Verhältnisses von Sättigungsdampfdruck und Umgebungsdruck ohne die Einbeziehung weiterer Umgebungsbedingungen. Es wird die maximale Stoffemission bestimmt:

$$ppm_A = \frac{p_{evap,i}}{p_{atm}} \cdot 10^6 [ppm \hat{=} ml/m^3] \quad (6)$$

Gl. 6 schätzt unmittelbar eine Stoffkonzentration (Einheit: $[ppm]$ ⁶⁶ bzw. $[ml/m^3]$), die sich maximal in der Raumluft

⁶⁰ Langsamer Phasenübergang einer Flüssigkeit in die Dampfform (gasförmiger Aggregatzustand) ohne Erreichen des Siedepunktes durch die Flüssigkeitstemperatur [25].

⁶¹ Phasenübergang einer Flüssigkeit in den gasförmigen Aggregatzustand nach Erreichen des Siedepunktes (Aufwendung der sog. Verdampfungsenthalpie erforderlich, endothermer Vorgang) [25].

⁶² Die exemplarische Auswahl der Modelle orientiert sich an der Verwendung unterschiedlicher Parameter, die im Rahmen der betrieblichen Praxis mit angemessenem Aufwand ermittelbar sind, sowie der Darstellung verschiedener prinzipieller Modellkonzeptionen. Über die dargestellten Ansätze hinaus bestehen weitere Modelle, die ähnlichen Konzeptionen folgen und sich z.B. durch die Berücksichtigung anderer Basiswerte empirischer Anpassungen unterscheiden (vgl. bspw. [28, 29]).

⁶³ Aus dem Englischen: Saturation Vapor Pressure Model (SVP)

⁶⁴ Druck der gas- bzw. dampfförmigen Phase eines Stoffes, wenn sich die flüssige sowie die gas- bzw. dampfförmige Phase bei gleichzeitigem Auftreten im thermodynamischen Gleichgewicht befinden. Ein Stoffaustausch ist im statistischen Mittel nicht gegeben [10].

⁶⁵ Im weiteren Verlauf werden lediglich gleich hohe Massenströme des Phasenübergangs von flüssig nach gasförmig und umgekehrt eintreten.

aufbaut, ab. Die verschiedenen Rahmenbedingungen und Annahmen, die in Tab. 4 zusammengefasst sind, ergeben somit ein sog. Einzonenmodell ohne Lüftung, das eine homogene Stoffkonzentration annimmt (vgl. Abschn. 3.4.2).

Merkmale	Eigenschaft Modellkonzeption
<i>Herkunft des Modells</i>	Arbeitsschutz (Abschätzung maximaler Konzentrationen in Räumen)
<i>Anwendungs- bzw. Gültigkeitsbereich</i>	Verdunstung aus Flüssigkeitsoberfläche bis zum Erreichen der Sättigungskonzentration in der Raumluft
<i>Berücksichtigte physikalische Vorgänge</i>	Verdunstung einer Flüssigkeit aus Oberfläche konstanter Größe, keine Unterscheidung Reinstoffe und Stoffgemische
<i>Eingebundene Erhaltungsgleichungen (vgl. Abschn. 2)</i>	Massenerhaltung
<i>Grundlage der Modellkonzeption</i>	Bilanzierung Druckverhältnisse (Charakterisierung Verdunstung bzw. Phasengleichgewicht durch Sättigungsdampfdruck)
<i>Grundannahmen des Modells</i>	Annahme ausreichend langer Verdunstungszeit, bis Phasengleichgewicht hergestellt wird (Voraussetzung: ausreichend Flüssigkeit vorhanden); vollständig geschlossener Raum ohne Ventilation (keine Abfuhr der transportierten Stoffmasse); konstante Umgebungstemperatur; Annahme des idealen Gasverhaltens ⁶⁷
<i>Eingebundene Eingabeparameter</i>	Stoffeigenschaft: Sättigungsdampfdruck; Umgebungsbedingung: Umgebungsdruck
<i>Empirischer Einfluss über Hilfsfaktoren</i>	kein Korrektur-Faktor
<i>Ergebnisparameter und Bezugspunkt</i>	Maximale Konzentration (gleich Sättigungskonzentration) innerhalb des Raumes in [$ppm \hat{=} ml/m^3$] (keine potentielle Eingangsgröße zu Ausbreitungsbetrachtungen, potentielle Eingangsgröße zur Bewertung)
<i>Vorteile in der Anwendung</i>	einfache Überschlagung maximaler, über Betrachtungsraum gemittelter Konzentrationen; (temperaturabhängige) Eingangswerte für eine Vielzahl von Stoffen bekannt und dokumentiert
<i>Nachteile in der Anwendung</i>	Vernachlässigung von Umgebungsbedingungen mit teils erheblichem Einfluss; Ausschluss der Betrachtung des weiteren Stofftransports; Annahme homogener Verteilung in Umgebungsraum; keine Berücksichtigung zeitlicher und thermodynamischer Variabilitäten; große Überschätzung wahrscheinlich; Generierung von Eingangsdaten in Betrachtungen der Stoffausbreitung nicht möglich (keine Formulierung eines Emissions-Massenstroms)

Tabelle 4: Zusammenfassung: kombinatorisches SVP-Modell der Verdunstung [29]

Modell der vollständigen Verdunstung (CE-Modell)

Ebenfalls auf die maximal auftretende Luftkonzentration in Räumen durch Verdunstung bezieht sich das CE-Modell⁶⁸. Im Gegensatz zum SVP-Modell wird jedoch nicht die Konzentration des Phasengleichgewichts zwischen Flüssigkeits- und Gasphase ermittelt, sondern von einem vollständigen Phasenübergang ausgegangen. Voraussetzung dazu ist, dass durch den entstehenden Dampf kein Sättigungsdampfdruck erreicht werden kann, der Raum im Verhältnis zum Flüssigkeitsvolumen also ausreichend groß ist. Weitere Voraussetzung ist eine für den vollständigen Massenübergang ausreichend lange Zeitdauer.

Die Berechnung der Maximal-Konzentrationen basiert auf der kombinatorischen Zusammenführung verschiedener Stoffeigenschaften und Umgebungsbedingungen. Die Berechnungsgleichung ermöglicht eine Abschätzung auf Grundlage der sog. idealen Gasgleichung, wobei (im gleichen Schritt) eine Berechnung der Stoffmasse mit Bezug auf das Raumvolumen aus dem ursprünglichen Flüssigkeitsvolumen erfolgt. Eine Abschätzung des zur vollständigen Verdunstung erforderlichen Zeitraumes nimmt das Modell jedoch nicht vor [29]:

$$ppm_A = \frac{V_{A,liq} \cdot \rho_{A,liq} \cdot R \cdot T}{M \cdot p_{atm} \cdot V_R} \cdot 10^6 \quad [ppm \hat{=} ml/m^3] \quad (7)$$

⁶⁶ Engl. Parts per Million, Konzentrationsangabe mit Bezug auf Stoffmengen

⁶⁷ Keine Beeinflussung von Gasmolekülen untereinander, z.B. durch schwache Bindungskräfte auf molekularer Ebene.

⁶⁸ Aus dem Englischen: Complete Evaporation Model (CEM)

Grundlage der unmittelbaren Konzentrationsabschätzung bildet ebenfalls ein Einzonenmodell⁶⁹ ohne Berücksichtigung lüftungstechnischer Maßnahmen. Der Ansatz stellt eine Worst-Case-Abschätzung dar, deren Grundlagen und Annahmen Tab. 5 zusammenfasst.

Merkmale	Eigenschaft Modellkonzeption
<i>Herkunft des Modells</i>	Arbeitsschutz (Worst-Case-Abschätzung maximaler Luft-Konzentrationen in Räumen)
<i>Anwendungs- bzw. Gültigkeitsbereich</i>	Vollständige Verdunstung eines Flüssigkeitsvolumens in nicht-ventiliertem Betrachtungsraum bei homogener Temperatur
<i>Berücksichtigte physikalische Vorgänge</i>	Verdunstung aus konstanter Flüssigkeitsoberfläche, keine Unterscheidung Reinstoffe und Stoffgemische
<i>Eingebundene Erhaltungsgleichungen (vgl. Abschn. 2)</i>	Massenerhaltung
<i>Grundlage der Modellkonzeption</i>	Spezifische ideale Gasgleichung unter Verwendung von Stoffeigenschaften, Umgebungsbedingungen und Raumvolumen; idealisierter Ansatz des Flüssigkeitsvolumens als ursprüngliches Gasvolumen; Einzonenmodell ohne Lüftung (vgl. Abschn. 3.4.2)
<i>Grundannahmen des Modells</i>	vollständige Verdunstung des Flüssigkeitsvolumens; kein Erreichen des Phasengleichgewichts im Raum; ausreichend langer Betrachtungszeitraum zur Erreichung homogener Stoffkonzentrationen im Raum; Gültigkeit der idealen Gasgleichung
<i>Eingebundene Eingabeparameter</i>	Stoffeigenschaften: Flüssigkeitsvolumen, Stoffdichte, Molekulargewicht; Umgebungsbedingungen: Umgebungsdruck, Umgebungstemperatur, Raumvolumen; Strömungsmechanische Größe: allgemeine Gaskonstante
<i>Empirischer Einfluss über Hilfsfaktoren</i>	kein Korrektur-Faktor
<i>Ergebnisparameter und Bezugspunkt</i>	Maximale Konzentration innerhalb des Betrachtungsraumes in [$ppm \hat{=} ml/m^3$] infolge einer vollständigen Verdunstung (keine potentielle Eingangsgröße zu Ausbreitungsbetrachtungen, potentielle Eingangsgröße zur Bewertung)
<i>Vorteile in der Anwendung</i>	einfache Abschätzung maximaler, über den Betrachtungsraum gemittelter Konzentrationen; Eingangsgrößen bekannt bzw. leicht zu erfassen
<i>Nachteile in der Anwendung</i>	Annahme vollständiger unmittelbarer Verdunstung; Vernachlässigung von Umgebungsgrößen als bestimmende Faktoren der Verdunstungsgeschwindigkeit; keine Abbildung des eigentlichen Verdunstungsvorgangs; Ausschluss des weiteren Stofftransports bzw. der Ventilation des Raumes; Annahme homogener Verteilung im Umgebungsraum; keine Berücksichtigung zeitlicher Variabilitäten; Generierung von Eingangsdaten in Betrachtungen der Stoffausbreitung nicht möglich (keine Formulierung eines Emissions-Massenstroms)

Tabelle 5: Zusammenfassung: kombinatorisches CE-Modell der Verdunstung [29]

Verdunstungsmodell nach Mackay und Matsugu [30, 31]

Die Höhe des Verdunstungsmassenstroms hängt von Stoffeigenschaften, Umgebungsbedingungen und der an die Freisetzung anschließenden Ausbreitung oberhalb der Flüssigkeitsoberfläche ab [8]: Findet kein Abtransport der Flüssigkeitsdämpfe statt, kann der Sättigungsdampfdruck in der Nähe des Freisetzungsorts schnell erreicht werden; die Emission stoppt. Breiten sich die Dämpfe dagegen in andere Raumbereiche aus, wird der Sättigungsdampfdruck nur direkt an der Flüssigkeitsoberfläche erreicht, die entsprechenden Konzentrationen jedoch abtransportiert.

Das Verdunstungsmodell nach Mackay und Matsugu bestimmt den Emissions-Massenstrom unter Berücksichtigung der Umgebungsbedingungen sowie der potentiellen Ausbreitung der freigesetzten Dämpfe. Der Ansatz geht von einem gleichförmigen Phasenübergang über eine konstante Grenzfläche aus, der allgemein gemäß Gl. 8 berechnet wird:

$$\dot{m}_{i,A} = k \cdot \frac{Pe_i}{R \cdot T_V} \cdot M_i \left[\frac{g}{(cm^2 s)} \right] \quad (8)$$

Der eingeführte Stofftransportkoeffizient dient der Zusammenfassung des Einflusses der Umgebungsbedingungen, die u.a. die Luftausbreitung charakterisieren. Der Koeffizient bestimmt sich nach Mackay und Matsugu aus unterschiedlichen Parametern, deren Zusammenhänge aus experimentellen Untersuchungen für die Stoffe Wasser und

⁶⁹ Vgl. Abschn. 3.4.2

Cumol⁷⁰ abgeleitet und aus diesen heraus für andere Stoffe verallgemeinert wurden. Anhand von Verdunstungsversuchen mit offenen Wannen unter freiem Himmel und Luftgeschwindigkeiten zwischen 0 und ca. 6,7 m/s wurde die nachstehende Formulierung des Stofftransportkoeffizienten ermittelt:

$$k = 0,022 \frac{v_{air}^{0,78}}{\Delta z^{0,11} \cdot Sc^{0,67}} [cm/s] \quad (9)$$

Die Zusammenführung beider Gleichungen ergibt die vollständige Berechnungsgleichung (vgl. Gl. 10). Die Anwendungsbedingungen, für die bspw. die verwendeten Korrekturfaktoren gelten, leiten sich aus den Bedingungen der Referenzversuche ab.

$$m_{i,A} = 2,65 \cdot 10^{-6} \frac{M_i \cdot p_{e,i} \cdot v_{air}^{0,78}}{\Delta z^{0,11} \cdot Sc^{0,67} \cdot T_V} \left[\frac{g}{(cm^2 s)} \right] \quad (10)$$

Die dimensionslose Schmidt-Zahl ($Sc = \eta / (\rho D_{i,g})$) bindet die Parameter der Dichte ρ und der dynamischen Viskosität η der Umgebungsluft sowie des Diffusionskoeffizienten ein. Während die übrigen Parameter durch den Anwender ggf. auch direkt (z.B. durch orientierende Messungen) ermittelt werden können, sind die Größen der Schmidt-Zahl abzuschätzen. Dazu eignen sich bspw. die in Gl. 11 und Gl. 12 aufgeführten Korrelationen nach Arnold und Engel [31], die nach [28] im Arbeitsschutz häufig Verwendung finden. Eine andere Ermittlungsmöglichkeit bieten entsprechende Tabellenwerke. Die hinter den Gleichungen bzw. Tabellenwerten stehenden empirischen Ermittlungen verantworten ggf. weitere Anwendungsgrenzen. Tab. 6 fasst Anwendungs- und Rahmenbedingungen des Modells zusammen.

$$\eta = -9,426 \cdot 10^{-5} + 1,610 \cdot 10^{-5} \sqrt{T} \quad (11)$$

$$D_{i,g} = \frac{4,09 \cdot 10^{-5} T^{1,9}}{p_{atm} \cdot M_i^{0,33}} \cdot \left(\frac{1}{28,97} + \frac{1}{M_i} \right)^{0,5} [cm^2/s] \quad (12)$$

Merkmale	Eigenschaft Modellkonzeption
<i>Herkunft des Modells</i>	Bevölkerungs- bzw. Umweltschutz: Freisetzung gefährlicher Stoffe im Freien (z.B. durch Havarien)
<i>Anwendungs- bzw. Gültigkeitsbereich</i>	Verdunstung aus Flüssigkeitsoberflächen mit Luftgeschwindigkeiten oberhalb der Oberfläche zwischen 0 und 6,7 m/s
<i>Berücksichtigte physikalische Vorgänge</i>	Verdunstung aus konstanter Flüssigkeitsoberfläche von Reinstoffen
<i>Eingebundene Erhaltungsgleichungen (vgl. Abschn. 2)</i>	Massenerhaltung
<i>Grundlage der Modellkonzeption</i>	Mathematische Formulierung zu empirischer Versuchen als Erweiterung der idealen Gasgleichung
<i>Grundannahmen des Modells</i>	isothermes Stoffverhalten (keine Abkühlung durch Verdunstung), Vergleichbarkeit zu Betrachtungen im Freien sowie mit Wasser und Cumol (Abschätzungen stellen gemittelte experimentelle Daten dar); unmittelbarer Abtransport Dampf oberhalb der Oberfläche, Stoffausbreitung mit direkter Abhängigkeit zur Luftgeschwindigkeit; kein Einfluss Dampfkonzentration in Luft auf resultierenden Verdunstungs-Massenstrom; konstante Flüssigkeitsoberfläche; zeitlich-stationäre Umgebungsbedingungen
<i>Eingebundene Eingabeparameter</i>	Stoffeigenschaften: Molekulargewicht, Sättigungsdampfdruck, Schmidt-Zahl (Zusammenfassung dynamische Viskosität der Umgebungsluft, Dichte des Stoffs und stoffspezifischer Diffusionskoeffizient); Umgebungsbedingungen: Umgebungstemperatur; Strömungsmechanische Größen: Strömungsgeschwindigkeit, Länge der Flüssigkeitsoberfläche in Strömungsrichtung, allgemeine Gaskonstante
<i>Empirischer Einfluss über Hilfsfaktoren</i>	Ableitung und Einbindung empirischer Korrekturfaktoren aus Referenzbetrachtungen von Wasser und Cumol; dementsprechender Einfluss der jeweiligen stoffspezifischen Parameter
<i>Ergebnisparameter und Bezugspunkt</i>	flächenbezogener Emissions-Massenstrom der Verdunstung in Abhängigkeit zur Luftgeschwindigkeit (potentielle Eingangsgröße zu Ausbreitungsbetrachtungen)

⁷⁰ Isopropylbenzol: aromatischer Kohlenwasserstoff, chemische Summenformel C₉H₁₂.

Merkmale	Eigenschaft Modellkonzeption
<i>Vorteile in der Anwendung</i>	einfach zu bestimmende Parameter mit entsprechender Anwendung; überschlägige Bestimmung des Emissions-Massenstrom als Anknüpfung zu Ausbreitungsmodellen möglich
<i>Nachteile in der Anwendung</i>	Modell an Referenzuntersuchungen mit lediglich zwei Stoffen orientiert, somit Allgemeingültigkeit fraglich; pauschale Unterstellung der luftgebundenen Stoffausbreitung mit direkter Abhängigkeit zur Luftgeschwindigkeit; keine Darstellung von Zeitabhängigkeiten; teilweise nur Abschätzung erforderlicher Eingangsparameter möglich

Tabelle 6: Zusammenfassung: Verdunstungsmodell nach Mackay und Matsugu [30]

Verdunstungsmodell nach Weidlich und Gmehling [32]

Das Verdunstungsmodell nach Weidlich und Gmehling ist eine aus ergänzenden experimentellen Ergebnissen zur Lösemittelverdunstung weiterentwickelte Form des grundlegenden Ansatzes nach Mackay und Matsugu. Aus Umformungen resultiert die nachstehende Berechnung für Reinstoffe und Stoffgemische:

$$\dot{m}_i = 0,0111 D_{i,g}^{0,19} \cdot v^{-0,14} \cdot v_a^{0,96} \cdot X^{-0,04} \cdot \frac{P_{evap,i}}{R \cdot T_V} M_i \cdot A \cdot x_i \cdot \gamma_i \text{ [g/h]} \quad (13)$$

Die einbezogenen Korrekturfaktoren setzen im Vergleich zu theoretischen Betrachtungen die Einflussgrößen in Relation zueinander, die funktional dem Stofftransportkoeffizienten⁷¹ entsprechen. Die Referenzbetrachtungen beruhen auf am Arbeitsschutz orientierten Untersuchungen im Windkanal für Luftgeschwindigkeiten zwischen 0,2 und 0,7 m/s, die somit den Anwendungsbereich kennzeichnen. Der Aktivitätskoeffizient dient der Charakterisierung des in Stoffgemischen veränderten spezifischen Sättigungsdampfdrucks einer Gemischkomponente, den das Mischungsverhältnis beeinflusst. Die Verdunstungstemperatur stellt die Flüssigkeitstemperatur dar und skizziert deren Einfluss auf die Freisetzungsgeschwindigkeit. Da Umgebungstemperaturen in Arbeitsräumen i.d.R. zeitlich relativ konstant sind bzw. lediglich in einem schmalen Bereich variieren, ermöglicht die Annahme gleich hoher Umgebungs- und Flüssigkeits- (Verdunstungs-) Temperaturen eine zulässige Näherung. Ausnahmen bilden Einsatzfälle, in denen die Flüssigkeit aktiv beheizt oder gekühlt ist. Die weiteren Rahmenbedingungen und Eigenschaften des Modells sind in Tab. 7 zusammengefasst.

Merkmale	Eigenschaft Modellkonzeption
<i>Herkunft des Modells</i>	Arbeitsschutz: Emission von Lösemitteln
<i>Anwendungs- bzw. Gültigkeitsbereich</i>	Verdunstung aus Flüssigkeitsoberflächen mit Luftgeschwindigkeiten oberhalb der Oberfläche zwischen 0,2 und 0,7 m/s
<i>Berücksichtigte physikalische Vorgänge</i>	Verdunstung aus konstanter Flüssigkeitsoberfläche eines Reinstoffes oder Stoffgemisches
<i>Eingebundene Erhaltungsgleichungen (vgl. Abschn. 2)</i>	Massentransport
<i>Grundlage der Modellkonzeption</i>	Mathematische Formulierung zu empirischen Versuchen als Erweiterung der idealen Gasgleichung; methodische Ergänzung des Verdunstungsmodell nach Mackay und Matsugu
<i>Grundannahmen des Modells</i>	isothermes Stoffverhalten (keine Abkühlung Flüssigkeit durch Verdunstung) für vergleichbare Bedingungen zur Lösemittel-Verdunstung (Abschätzungen stellen gemittelte experimentelle Daten dar); Vernachlässigung Wärmebilanz zwischen Flüssigkeit und Umgebung; unmittelbarer Abtransport Dampf oberhalb der Oberfläche, Stoffausbreitung mit direkter Abhängigkeit zur Luftgeschwindigkeit; kein Einfluss Dampfkonzentration in Luft auf resultierenden Verdunstungs-Massenstrom; konstante Flüssigkeitsoberfläche; zeitlich-stationäre Umgebungsbedingungen
<i>Eingebundene Eingabeparameter</i>	Stoffeigenschaften: Sättigungsdampfdruck, Molekulargewicht, Molenbruch betrachtete Komponente, Verdunstungstemperatur Flüssigkeit, stoffspezifischer Diffusionskoeffizient, empirischer Aktivitätskoeffizient; Umgebungsbedingung: kinematische Viskosität der Umgebungsluft; Strömungsmechanische Größen: Strömungsgeschwindigkeit, Oberfläche, Länge der Oberfläche in Strömungsrichtung, allgemeine Gaskonstante

⁷¹ Vgl. Abschn. 3.3.3

Merkmale	Eigenschaft Modellkonzeption
<i>Empirischer Einfluss über Hilfsfaktoren</i>	Ableitung und Einbindung empirischer Korrekturfaktoren aus Referenzbetrachtungen von Lösemitteln; empirischer Aktivitätskoeffizient zur Charakterisierung des Sättigungsdampfdrucks in Stoffgemischen
<i>Ergebnisparameter und Bezugspunkt</i>	Emissions-Massenstrom der Verdunstung u.a. in Abhängigkeit zur Luftgeschwindigkeit (potentielle Eingangsgröße zu Ausbreitungsbetrachtungen)
<i>Vorteile in der Anwendung</i>	Einfache Abschätzung eines Emissionsmassenstroms unter Beachtung von Umgebungsbedingungen; aus Experimenten abgeleitete, validierte Verwendung; Generierung von Eingangsdaten für Betrachtungen der Stoffausbreitung möglich (Schnittstelle: Emissions-Massenstrom der Verdunstung)
<i>Nachteile in der Anwendung</i>	Abschätzung der Eingangsgrößen zum Teil schwierig (z.B. Diffusionskoeffizient eines Stoffes in Luft); lediglich Betrachtung stationärer Bedingungen

Tabelle 7: Zusammenfassung: Verdunstungsmodell nach Weidlich und Gmehling [32]

Theoretisches Verdampfungs- und Sublimationsmodell

Während die Verdunstungsvorgänge ein temperaturabhängiger, statistischer Phasenübergang nicht-siedender Flüssigkeiten sind, tritt die Verdampfung nach Überschreiten des stoffspezifischen Siedepunkts durch die Flüssigkeitstemperatur ein. Weiterhin benötigt die Verdampfung als Phasenübergang die Aufwendung eines wesentlichen Energiebetrags (Aufbringen der sog. Verdampfungsenthalpie), welcher der Flüssigkeit von außen, aus der Umgebung zugeführt werden muss (sog. endothermer Vorgang). Nach Erreichen des Siedepunktes, was bereits eine Energiezufuhr⁷² mit einhergehender Temperaturerhöhung⁷³ erfordert, bleibt die Flüssigkeitstemperatur konstant. Die von außen weiter zugeführte Energie wirkt sich auf die Verdampfungs-Geschwindigkeit aus. Auftreten und Geschwindigkeit der Verdampfung hängen maßgeblich von den äußeren Umgebungsbedingungen der Flüssigkeit ab. Weiterhin hat die stoffspezifische Wärmeübertragung auf die Flüssigkeit sowie deren Durchwärmung (Wärmeverteilung innerhalb der Flüssigkeit) erheblichen Einfluss auf die Ausprägung des entstehenden Massenstroms [25, 33].

Vergleichbar mit der Verdampfung erfolgt die Gasfreisetzung unmittelbar aus Feststoffen (ohne zwischenzeitlichen Wechsel in den flüssigen Aggregatzustand) durch die sog. Sublimation. Diese tritt nicht bei allen Stoffen auf, sondern stellt einen stoffspezifischen Sonderfall dar, bei dem besondere Relationen zwischen Druck und Temperatur die Voraussetzung bilden können. Analog zur Verdampfung ist das Aufbringen eines Gesamtenergieaufwands, der sog. Sublimationsenthalpie⁷⁴, erforderlich.

Das Verdampfungsmodell zur Berechnung des Emissions-Massenstroms basiert auf der allgemeinen Wärmetheorie. Gl. 14 verknüpft die Parameter der eingebrachten Energie in die Flüssigkeit, der stoffspezifischen Verdampfungsenthalpie, der Größe der Oberfläche sowie des Verdampfungs-Massenstroms⁷⁵. Die entsprechende Korrelation leitet den theoretisch möglichen, maximalen Emissions-Massenstrom her.

$$\dot{m}_V(t) = \frac{\dot{Q}_\infty(t)}{\Delta h_c} A_{Em} \text{ [kg/s]} \quad (14)$$

Die spezifische Verdampfungsenthalpie ist für eine Vielzahl an Stoffen bekannt (z.B. aus der Stoff-Analytik). Zur Verwendung des Ansatzes muss die einwirkende Wärmestromdichte der Umgebung (flächenbezogener Wärmeübergang auf die Flüssigkeit je Zeiteinheit) bestimmt werden. Die Wärmestromdichte setzt sich aus den Anteilen der Strahlungswärme der Umgebung, der konvektiven Wärmeübertragung aus der Umgebungsluft sowie des konduktiven Übergangs aus den angrenzenden Bauteilen (z.B. beheizten Behälterwandungen) zusammen. Eine Bestimmung kann daher lediglich in Anbetracht der konkret vorliegenden Gegebenheiten erfolgen, die die Parameter der thermodynamischen Umgebungsbedingungen (insbesondere der Temperatur) und weiterer Einfluss nehmender Stoff- bzw.

⁷² I.d.R. erfolgt die Zufuhr in Form von Wärme, z.B. über Strahlungsvorgänge.

⁷³ Die Größe der stoffspezifischen Wärmespeicherkapazität gibt die zur Temperaturerhöhung einer Flüssigkeit erforderliche, von außen einzubringende Energie an.

⁷⁴ Der Gesamtenergieaufwand für einen Phasenübergang von einem Feststoff direkt zu einem Gas ist gleich hoch wie bei der vorherigen Umsetzung in eine Flüssigkeit. Aus der Thermodynamik folgt, dass die Sublimationsenthalpie der Summe aus Schmelz- und Verdampfungsenthalpie eines Stoffes entspricht [34, 35].

⁷⁵ Vgl. [33, 36, 37]

Materialeigenschaften der Umgebung (bspw. Wärmeleitfähigkeit der Umgebungsluft), einbezieht⁷⁶.

Analog zur Verdampfung bestimmt Gl. 14 den freigesetzten Sublimations-Massenstrom, wenn diese Möglichkeit des Phasenübergangs unter den jeweiligen Umgebungsbedingungen (Druck und Temperatur) gegeben ist. Dazu wird anstelle der Verdampfungsenthalpie die ebenfalls i.d.R. bekannte Sublimationsenthalpie Δh_{Sub} herangezogen.

Die Rahmenbedingungen des theoretischen Modells zur Ermittlung des Verdampfungs-Massenstroms sind in Tab. 8 zusammengefasst. Weitere Annahmen, Bedingungen und ggf. Einschränkungen ergeben sich aus den zu beachtenden Formulierungen des Wärmetransports im Anwendungsfall.

Merkmale	Eigenschaft Modellkonzeption
<i>Herkunft des Modells</i>	Physikalische Wärmetheorie (allgemeine Betrachtungsansätze)
<i>Anwendungs- bzw. Gültigkeitsbereich</i>	Verdampfung von Flüssigkeiten aus Oberflächen in Abhängigkeit zu Umgebungsbedingungen (insbesondere: Wärmeübertragung auf die Flüssigkeit) bzw. Sublimation von Feststoffen in die Gasphase
<i>Berücksichtigte physikalische Vorgänge</i>	Verdampfung aus Flüssigkeitsoberflächen nach Überschreitung des Siedepunkts durch die Flüssigkeitstemperatur bzw. Sublimation von Feststoffen (sofern bei entsprechendem thermodynamischen Zustand möglich)
<i>Eingebundene Erhaltungsgleichungen (vgl. Abschn. 2)</i>	Massenerhaltung
<i>Grundlage der Modellkonzeption</i>	Grundlagen der Wärmetheorie, massenbezogene Umformulierung der Wärmebilanz
<i>Grundannahmen des Modells</i>	konstante Oberfläche, Verdampfung bzw. Sublimation nicht von Konzentration der gasförmigen Phase oberhalb der Flüssigkeit beeinflusst, Flüssigkeitstemperatur entspricht Siedepunkt
<i>Eingebundene Eingabeparameter</i>	Stoffeigenschaft: Verdampfungs- oder Sublimationsenthalpie; Umgebungsbedingung: zeitabhängige Wärmestromdichte; Strömungsmechanische Größe: Flüssigkeitsoberfläche
<i>Empirischer Einfluss über Hilfsfaktoren</i>	keine empirische Korrektur
<i>Ergebnisparameter und Bezugspunkt</i>	Ermittlung des maximalen Verdampfungs- bzw. Sublimations-Massenstroms (potentielle Eingangsgröße zu Ausbreitungsbetrachtungen)
<i>Vorteile in der Anwendung</i>	Theoretisch basierte, allgemein gültige Abschätzung ohne Einbeziehung von Korrekturfaktoren (keine Einschränkung der Anwendbarkeit); Ermittlung des Emissions-Massenstroms zur Verknüpfung mit nachgeschalteten Ausbreitungsmodellen; Zeitabhängigkeit über Wärmestromdichte darstellbar
<i>Nachteile in der Anwendung</i>	Separate Ermittlung der auf die Flüssigkeit bzw. den Feststoff einwirkenden Wärmestromdichte in eigenständigen Modellen erforderlich; kein Einbezug der Konzentration der gasförmigen Phase oberhalb der Oberfläche

Tabelle 8: Zusammenfassung: theoretisches Verdampfungs- bzw. Sublimationsmodell

3.4 Ausbreitungsmodelle

Ausbreitungsmodelle dienen der rechnerischen Ermittlung ortsbezogener Luftkonzentrationen, anhand derer eine Beurteilung der Tätigkeit erfolgt. Eingangswerte bzw. Einflüsse auf das Ausbreitungsverhalten sind u.a.

- der Emissions-Massenstrom des Stoffes (Anknüpfungspunkt der Emissionsmodelle),
- verschiedene intensive und extensive Stoffeigenschaften (z.B. Stofftemperatur und -dichte),
- verfahrensspezifische Parameter (bspw. Strömungsgeschwindigkeiten) und
- die Umgebungsbedingungen (z.B. Raumlufttemperatur und relative Luftfeuchtigkeit).

Realitätsgetreue Rechenergebnisse erfordern eine umfangreiche Berücksichtigung der Parameter und der relevanten Ausbreitungsvorgänge⁷⁷. Dementsprechend ist die Verwendung von Modellen notwendig, welche geeignete stoff-

⁷⁶ Für unterschiedliche Bedingungen steht hierzu ebenfalls ein detailliertes Formelwerk der Wärmetheorie zur Verfügung (vgl. z.B. [36]), auf das an dieser Stelle nicht weiter eingegangen wird.

⁷⁷ Vgl. Abschn. 2.2, Tab. 2

und tätigkeitsspezifische Parameter der Transportvorgänge einbeziehen und auf die Bestimmung von Stoffmassenströmen und Luftkonzentrationen abzielen. Aus verschiedenen Modellkonzepten und berücksichtigten Eingangswerten und Annahmen ergeben sich die jeweiligen Anwendungsgrenzen, die einen Modellvergleich ermöglichen.

Nachfolgend werden verschiedene praxisrelevante Ausbreitungsmodelle samt Anknüpfungspunkten zu im Rahmen einer Gefährdungsbeurteilung erforderlichen Emissionsabschätzungen und Bewertung dargestellt. Dabei wird eine Unterteilung in grundlegende Modellkonzeptionen vorgenommen, die unterschiedliche Umsetzungen der zentralen Ausbreitungsvorgänge formulieren. Die Erläuterung der Verfahren grenzt diese untereinander anhand ihrer Anwendungsbereiche (insbesondere Gültigkeit für verschiedene Transportvorgänge) und zentralen Annahmen ab.

3.4.1 Diffusionsmodell

Die Diffusion von Gasen oder Stoffen mit gasförmigem Verhalten⁷⁸ (z.B. Nebel⁷⁹) kann auftreten, wenn deren Emission impulsarm erfolgt und keine weiteren (Luft-) Strömungen auftreten. Voraussetzung ist dass der diffundierende Stoff eine ähnliche Dichte wie die Umgebungsluft aufweist (kein verstärkter Auf- oder Abtrieb). Durch die Brown'sche Molekularbewegung und ggf. geringe konvektive Wärmeströmungen ("turbulente Diffusion") tritt allmählich der Ausgleich lokaler Konzentrationsgradienten ein.

Das Diffusionsmodell betrachtet ausschließlich die räumliche Stoffausbreitung durch Diffusion und vernachlässigt andere Ausbreitungsvorgänge. Es beruht auf den zentralen Annahmen, dass die Stoffdiffusion gleichmäßig in alle Raumrichtungen erfolgt. Liegt der Emissionspunkt auf dem Boden, entsteht ein halbkugelförmiger Betrachtungsraum, der keine Anfangskonzentration des betrachteten Stoffs aufweist. Die Annahmen machen die Bestimmung ortsabhängiger Konzentrationen, die auf dem Emissionsmassenstrom basieren und sich in einem bestimmten Abstand zum Emissionsort einstellen, mit Hilfe der sog. Fick'schen Gesetze möglich.

Die Berechnung stationärer Betrachtungen⁸⁰ nutzt das sog. erste Fick'sche Gesetz, das den Stoffmengenfluss über eine Fläche in Abhängigkeit zum vorliegenden Konzentrationsunterschied sowie dem sog. Diffusionskoeffizienten⁸¹ als Proportionalitätskonstante beschreibt. Das zweite Fick'sche Gesetz ergänzt das Diffusionsmodell um die Möglichkeit sog. instationärer Berechnungen⁸². Für den Fall einer halbkugelförmigen Ausbreitung und unter Einbeziehung der bekannten Größen des in den Raum emittierten Stoffmassenstroms $\dot{m}_{i,Diff}$, der überströmten Oberfläche des Betrachtungsraumes (bekannt aus dem Abstand r), sowie dem Diffusionskoeffizienten D_i berechnet Gl. 15 die abstands- und zeitabhängige diffusive Konzentration $x(r,t)$. Die sog. Gauß'sche Fehlerfunktion⁸³ $erf()$ empfindet dabei den all-gemeingültigen Konzentrationsverlauf aufgrund empirischer Erkenntnisse nach [28].

$$x(r,t) = \frac{\dot{m}_{i,Diff}}{2 \pi \cdot D_i \cdot r} \cdot \left(1 - erf\left(\frac{r}{\sqrt{4 D_i \cdot t}}\right) \right) \quad (mg/m^3) \quad (15)$$

Die rechnerische Betrachtung der turbulenten Diffusion erfolgt prinzipiell mit den gleichen Modellansätzen, wobei jedoch angepasste turbulente Diffusionskoeffizienten Verwendung finden. Diese sind im Vergleich mit den herkömmlichen, stoffspezifischen Diffusionskoeffizienten deutlich größer. Eine Bestimmung ist jedoch nicht aus anderen (Stoff-) Größen, sondern lediglich empirisch unter konkreten Umgebungsbedingungen möglich [28].

Mit Hilfe des Diffusionsmodells bzw. den Fick'schen Gesetzen besteht die mathematische Möglichkeit, Stoffausbreitungen in Folge der Diffusion zu ermitteln. Es bleibt festzustellen, dass die getroffenen Vereinfachungen für reale

⁷⁸ Anderen Stoffen wirkt der massen- bzw. dichtebedingte vertikale Stoffstrom einer diffusiven Ausbreitung entgegen, das Auftreten der Diffusion bleibt begrenzt.

⁷⁹ Soll eine Anwendung für Flüssigkeitstropfen oder Partikel mit geringem Durchmesser erfolgen, so muss das Verhalten in der Raumluft (langfristiges Verweilen gegenüber Absinken) - ggf. mit weiteren rechnerischen Verfahren - untersucht werden.

⁸⁰ Gleichbleibende Betrachtungsbedingungen, so dass keine Zeitabhängigkeit besteht. Für Ausbreitungsbetrachtungen ist dies bei gleichbleibenden Emissionen unter Vernachlässigung der Aufbauphase von ortsbezogenen Konzentrationen nach Emissionsbeginn der Fall (vgl. [28]).

⁸¹ Stoffspezifische, aus weiteren Eigenschaften (z.B. dynamische Viskosität) zusammengefasste Größe zur Beschreibung der "Grundströmungsgeschwindigkeit". Eine rechnerische Abschätzung kann z.B. unter Verwendung von Gl. 12 stattfinden.

⁸² Zeitabhängigkeit kann durch Anfangsbedingungen nicht ausgeschlossen werden, z.B. unmittelbar nach Einsetzen der Emission oder zeitlich verschiedener Stofffreisetzung.

⁸³ Vgl. [38]

Fälle nicht gelten, so dass eine genaue Abbildung der Realität nicht zu erwarten ist [39]. Das Modell berücksichtigt darüber hinaus keine weiteren Ausbreitungsvorgänge, die eine Diffusion ggf. überlagern. Die wesentlichen Aspekte des Diffusionsmodells führt Tab. 9 auf.

Merkmale	Eigenschaft Modellkonzeption
<i>Herkunft des Modells</i>	Physikalische Analyse (allgemeine Grundgleichungen)
<i>Anwendungs- bzw. Gültigkeitsbereich</i>	Gase bzw. Stoffe mit gasähnlichem Verhalten und einer der Umgebungsluft ähnlichen Dichte; kein Auftreten überlagernder Luftströmungen
<i>Berücksichtigte physikalische Vorgänge</i>	(Turbulente) Diffusion
<i>Eingebundene Erhaltungsgleichungen (vgl. Abschn. 2)</i>	Massenerhaltung
<i>Grundlage der Modellkonzeption</i>	Fick'sche Gesetze zur Beschreibung des Stofftransports (z.B. über die Oberfläche einer Halbkugel hinweg, vgl. Gl. 15)
<i>Grundannahmen des Modells</i>	Gleichmäßige Diffusion in alle Richtungen (halbkugelförmige Ausbreitung bei Emissionspunkt am Boden); keine Anfangskonzentration in Arbeitsraum
<i>Eingebundene Eingabeparameter</i>	Stoffeigenschaft: (turbulenter) Diffusionskoeffizient; Emissions-Eigenschaft: Emissions-Massenstrom; tätigkeitsspezifische Eigenschaft: Abstand Betrachtungspunkt zur Emissionsquelle (führt zur Halbkugel-Oberfläche)
<i>Empirischer Einfluss über Hilfsfaktoren</i>	Diffusionskoeffizient (Proportionalitätskonstante) als Zusammenfassung physikalischer Größen (z.B. Viskosität) bzw. turbulenter Diffusionskoeffizient aus empirischen Ermittlungen zur Einbeziehung der Umgebungsbedingungen; ggf. Gauß'sche Fehlerfunktion
<i>Ergebnisparameter und Bezugspunkt</i>	ortsabhängige Stoffkonzentration durch Diffusion im Abstand zum Emissionen (potentielle Eingangsgröße zur Bewertung)
<i>Vorteile in der Anwendung</i>	Teilweise Handhabung von Handrechengleichungen; einfache Modellkonzeption; Anbindung an Emissionsmodelle über Verwendung des Emissions-Massenstroms (unter Beachtung der Grundannahmen)
<i>Nachteile in der Anwendung</i>	Anwendungsbedingungen und Annahmen schwer aufrechtzuerhalten, Diffusion meist durch andere Ausbreitungsvorgänge überlagert, keine Erfassung der Impuls- und Energieerhaltung, turbulente Diffusionskoeffizienten in der Realität nicht gleichförmig (Abhängigkeit zu Abstand und Luftgeschwindigkeit)

Tabelle 9: Zusammenfassung: Konzept des Diffusionsmodells

3.4.2 Zonenmodelle

Zonenmodelle fassen allgemein die Stoffausbreitung innerhalb von Räumen zusammen, ohne auf einzelne Transportvorgänge (z.B. die Diffusion) mit detaillierten Beschreibungen einzugehen. Dementsprechend werden alle Vorgänge als pauschale Raumströmungen⁸⁴ zusammengefasst. Die Struktur unterschiedlicher Modellformen lässt allerdings eine weitere Differenzierung zu. Trotz verschiedener Ausprägungen sind Zonenmodelle auf gleiche Grundstrukturen zurückzuführen:

Das Berechnungskonzept beruht grundlegend auf der Einteilung des Raumes in gedankliche Kontrollvolumen (sog. Zonen), die sich bspw. zwiebelartig um die Emissionsquelle orientieren. Die genaue Anordnung nimmt der Anwender vor. Die Konzentration innerhalb der Kontrollvolumen ergibt sich aus der enthaltenen gesamten Stoffmasse, der jeweiligen räumlichen Ausprägung (Volumeninhalt) und dem Luft- und Konzentrationsaustausch mit der Umgebung. Charakteristisch für alle Zonenmodelle ist die Annahme gleich hoher, örtlich homogener Konzentrationen für jedes Kontrollvolumen. Die Annahme vernachlässigt somit lokale Konzentrationsunterschiede. Sog. Quellterme verknüpfen die Kontrollvolumen untereinander und mit der Umgebung, die die Strömungen und die interagierenden Stoffmassenströme (z.B. durch Strömungsgeschwindigkeiten, Hüllflächen der Volumen zueinander, transportierte Stoffmassen etc.) beschreiben. Auch die Stofffreisetzung ist ein Quellterm, so dass allgemein das Prinzip der Massenerhaltung als fortlaufender Prozess⁸⁵ über alle Zonen hinweg Berücksichtigung findet. Die Konzentrationsabschätzung beruht auf

⁸⁴ Strömungen, die aus Druckunterschieden entstehen und weite Strecken durchlaufen bzw. zu Luftbewegungen führen, die den ganzen Betrachtungsraum erfassen (vgl. [13]).

⁸⁵ Aufteilung der einströmenden Masse in ein Kontrollvolumen in ortsbezogene Konzentration und ausströmende Masse.

der Aufstellung von Massenbilanzen für stationäre oder instationäre Bedingungen⁸⁶.

Die Konzentrationsermittlung im stationären Zustand erfolgt über die Bildung des Verhältnisses der in einer Zone befindlichen Stoffmasse sowie dem zugehörigen Volumen, so dass sich eine gemittelte Konzentration ergibt. Der Emissions-Massenstrom und die Raumlüftung in Form des Luftwechsels charakterisieren dabei die zu- und abgeführten Stoffmassen. Die Abschätzung ist alleine auf Maximalwerte ausgerichtet.

Die instationären Betrachtungen beziehen darüber hinaus die Zeitdauer zwischen Emissionsbeginn und dem Betrachtungszeitpunkt ein. Die Gleichungen berücksichtigen den zeitabhängigen Konzentrationsaufbau bis hin zu einem Gleichgewichtszustand, den das Verhältnis des Emissions-Massenstroms zu den Lüftungsbedingungen wesentlich prägt. Zusätzlich können durch Ergänzungen der Gleichungen Konzentrationen zu Betrachtungsbeginn oder in der Zuluft Berücksichtigung finden. Die mathematische Beschreibung erfolgt u.a. mit der Euler'schen Funktion. Ergänzend besteht ein Übergangskriterium, welches den Betrachtungszeitpunkt einer instationären oder stationären Betrachtung zuordnet. Zeitlich variierende Emissionen können über die Aneinanderreihung unterschiedlicher Berechnungen unter Einbeziehung von Anfangskonzentrationen innerhalb der Zonen betrachtet werden (vgl. [28]).

Umsetzungen des Zonenmodell-Konzepts unterscheiden sich bspw. durch die Zeitabhängigkeit berücksichtigter Parameter, (Konzentrations-) Bedingungen zu Betrachtungsbeginn oder die Einbeziehung extern (über die Lüftung) eingebrachter Luftbelastungen. Aus diesen unterschiedlichen Annahmen resultieren voneinander abweichende mathematische Lösungswege und -bedingungen. Als Eindruck der Berechnungssystematik führt Gl. 16 exemplarisch die instationäre Bilanzierung für ein Kontrollvolumen bei konstanten Emissions- und Frischluftmassenströmen ohne Konzentration zu Emissionsbeginn oder in der Frischluft auf.

$$x_{i,m} = \frac{\dot{m}_{i,Em}}{\dot{V}_{air}} \left(1 - e^{-\lambda_R (t_1 - t_0)} \right) [mg/m^3] \quad (16)$$

Über die Differenzierung der Anfangs- und Rahmenbedingungen hinaus untergliedern Anzahl und Ausprägung angelegter Kontrollvolumen die Zonenmodelle. Auch diese folgen prinzipiell gleichen Annahmen und Verfahrensweisen. Als relevant werden dabei

- Einzonenmodelle,
- Zweizonenmodelle und
- Mehrzonenmodelle

voneinander abgegrenzt. Das Einzonenmodell stellt dabei die einfachste Variante dar, da keine Unterteilung des betrachteten Raumes in mehrere gedankliche Kontrollvolumen erfolgt. Es wird eine gleichmäßige Stoffausbreitung über den gesamten Raum angenommen. Die errechneten Stoffkonzentrationen der Ausbreitung mitteln sich somit unter Berücksichtigung der Lüftungsbedingungen über das gesamte Raumvolumen, so dass die Ergebnisse geringe Aussagekraft in Bezug auf ortsbezogene Bedingungen aufweisen. Eine Anwendung kommt daher im Allgemeinen für Worst-Case-Betrachtungen in Frage.

Das Zweizonenmodell geht von der Anordnung eines sog. Nahfeldes und eines Fernfeldes um die Emissionsquelle herum aus, wobei das Nahfeld den Arbeitsplatz eines unmittelbar betroffenen Beschäftigten umfassen sollte (z.B. Halbkugel mit Radius des Abstands zwischen Emissionsquelle und Atembereich). Der übrige Raum bildet das sog. Fernfeld. Durch die stark voneinander abweichenden Volumen entstehen ebenso abweichende gemittelte Konzentrationen, welche die abstandsabhängige Konzentrationsabnahme nachempfinden. Die Festlegung der jeweiligen Zonenvolumen weisen einen unmittelbaren Einfluss auf die Ergebnisse auf. Darüber hinaus ist die Abschätzung der für die rechnerischen Betrachtungen erforderlichen Quellterme, die Strömungen zwischen den Kontrollvolumina beschreiben, nur schwer - unter Einbeziehung der am Arbeitsplatz auftretenden Verhältnisse - zu realisieren.

Die Mehrzonenmodelle sind in verschiedenen Formen und Umfängen denkbar: Einerseits kann die Ausbildung mehrerer Zonen innerhalb eines Arbeitsraumes frei erfolgen, so dass eine räumlich detailliertere, jedoch weiterhin von der Größe der Kontrollvolumen abhängige Konzentrationsermittlung ermöglicht wird (vgl. Abb. 5). Durch den bspw. zwiibelartigen Modellaufbau, der zu sich vergrößernden Volumen führt, und abnehmende Massenströme innerhalb

⁸⁶ Vgl. Abschn. 3.4.1

der Quellterme folgt die Wiedergabe einer abstandsabhängigen Konzentrationsverringering. Der prinzipielle Ansatz, der eingeschränkt auch für das Zweizonenmodell verwendet wird, samt Interaktionen wird exemplarisch in Abb. 5 dargestellt.

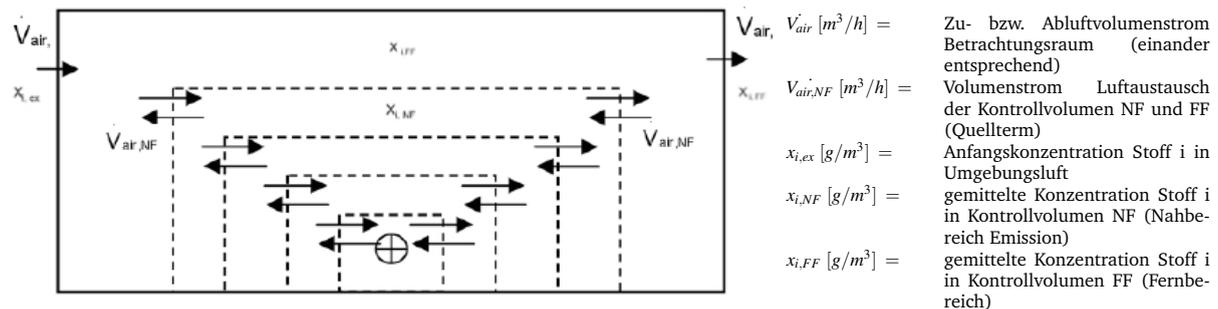


Abbildung 5: Grundstruktur der Zonenmodelle [28]

Weiterhin können Mehrzonenmodelle auch mehrere Räume in die Betrachtungen einbeziehen, die für sich jeweils ein eigenständiges Kontrollvolumen darstellen. Neben der schwierigen Abschätzung der erforderlichen Quellterme wird die mathematische Handhabung mit jedem Kontrollvolumen zunehmend komplexer.

Zonenmodelle bieten eine Abschätzung globaler Stoffausbreitungen, ohne jedoch ortsbezogene Konzentrationen zu ermitteln. Darüber hinaus sind die Ergebnisse in Frage zu stellen, da eine unmittelbare Abhängigkeit zur getroffenen Konfiguration der Kontrollvolumen besteht. Aussagen sind somit größenordnungsmäßig möglich. Zusammenfassend führt Tab. 10 allgemeine Merkmale der Zonenmodelle auf.

Merkmale	Eigenschaft Modellkonzeption
Herkunft des Modells	Arbeitsschutz: Grundsatzüberlegungen zur Massenbilanzierung
Anwendungs- bzw. Gültigkeitsbereich	Ausbreitung luftgetragener Stoffe
Berücksichtigte physikalische Vorgänge	Pauschale Zusammenfassung der Transportvorgänge zu Gesamt- (Raum-) Strömung zwischen Kontrollvolumen; keine Detaillierung Einzelvorgänge
Eingebundene Erhaltungsgleichungen (vgl. Abschn. 2)	Massenerhaltung
Grundlage der Modellkonzeption	Gedankliche Anordnung von Zonen frei definierbaren Volumens, in dem sich emittierter Stoff verteilt; Interaktion über Quellterme; Differenzierung in instationäre und stationäre Bedingungen
Grundannahmen des Modells	homogene Konzentrationsverteilung innerhalb der Kontrollvolumen; keine Ausbildung ortsbezogener Konzentrationsmaxima; Übergang zwischen instationären und stationären Bedingungen, Gültigkeit eines entsprechenden Übergangskriteriums; keine Notwendigkeit zur Detaillierung von Einzelvorgängen (die ggf. allgemeiner Ausbreitungsrichtung entgegenlaufen)
Eingebundene Eingabeparameter	Umgebungsbedingungen: geometrische Rahmenbedingungen; Emissions-Eigenschaften: Emissions-Massenstrom, ggf. Anfangskonzentrationen; Strömungsmechanische Größen: Luftwechsel zur Umgebung, Luft- und Stoffmassenaustausch zwischen Kontrollvolumen (Quellterme); tätigkeitsspezifische Eigenschaften: Anordnung und Volumen der Zonen
Empirischer Einfluss über Hilfsfaktoren	Abbildung Konzentrationsbildung bei instationären Verhältnissen in Kontrollvolumen durch Euler'sche Funktion als Formulierung empirischer Erkenntnisse (Anpassung Berechnungssystematik "aus Erfahrung", aber ohne konkreten physikalischen Hintergrund)
Ergebnisparameter und Bezugspunkt	Gemittelte Luftkonzentration in verschiedenen Zonen, die für Kontrollvolumen als homogen angesehen werden (potentielle Eingangsgrößen zur Bewertung)
Vorteile in der Anwendung	Mathematisch strukturierte Anwendbarkeit; bei Einführung mehrerer Kontrollvolumen: Nachbildung abstandsabhängige Konzentrationsabnahme möglich; Einbeziehung von Anfangs- und Zuluftkonzentrationen möglich

Merkmale	Eigenschaft Modellkonzeption
Nachteile in der Anwendung	Gemittelte Luftkonzentration unmittelbar von Größe der Kontrollvolumen abhängig, d.h., dass Berechnungsergebnis direkt von der Anordnung der Zonen durch den Nutzer beeinflusst wird; problematische Ermittlung der Luftwechselzahl zur Abschätzung der Quellterme; bei mehr als zwei Zonen: komplexe mathematische Lösungen (keine Lösung von Hand)

Tabelle 10: Zusammenfassung: Grundkonzept der Zonenmodelle [28]

3.4.3 Modell des Freistrahls (Strahlgesetze)

Impulsbehaftete Emissionen⁸⁷ von Gasen oder gasähnlichen Stoffen bilden in der Umgebungsluft einen sog. Freistrahls aus⁸⁸. Durch die entstehenden Turbulenzen kommt es zu einer Einmischung von Umgebungsluft in den Stoff-Massenstrom, der dadurch zunimmt. Die gleichzeitig eintretende Geschwindigkeitsabnahme begrenzt die Reichweite des Ausbreitungsvorgangs, so dass ggf. eine Überlagerung durch andere Vorgänge (bspw. dichtebedingter Auf- bzw. Abtrieb) eintritt.

Freistrahlen werden unabhängig von der Geometrie der Emissionsquelle ausgebildet, von der aber das Aussehen des Strahlbildes abhängt⁸⁹. Das Strahlbild unterteilt sich prinzipiell - unabhängig vom geometrischen Aussehen - in zwei Bereiche: Unmittelbar an die Emissionsquelle schließt sich der sog. Kernbereich an, in dem keine Geschwindigkeitsabnahme eintritt und somit eine Strömung mit der Emissions-Geschwindigkeit unter beginnender Einmischung von Umgebungsluft erfolgt. Auf den Kernbereich folgt der sog. Ähnlichkeitsbereich, welcher durch eine Abnahme der Strömungsgeschwindigkeit bei fortlaufender Einmischung von Umgebungsluft über die Grenzflächen hinweg gekennzeichnet ist. Der fließende Übergang beider Bereiche wird aufgrund der seitlichen Lufteinmischung bereits kegelförmig ausgebildet (vgl. Abb. 6). Die Möglichkeit der seitlichen Lufteinmischung, die z.B. Wände oder andere Hindernisse behindern, hat ebenfalls Einfluss auf die Strahlgeometrie und den Übergang der Bereiche.

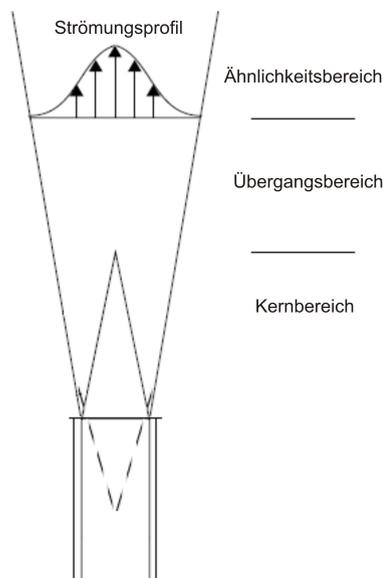


Abbildung 6: Strömungsbereiche von Freistrahlen (hier: punktförmige Emission) [28]

Die Strahlgesetze dienen als mathematisches Modell der Beschreibung des Strahlverlaufs und der dabei auftretenden strömungsmechanischen Größen. Grundlage sind theoretische Ableitungen unter Berücksichtigung der zentra-

⁸⁷ Einstrom mit im Vergleich zur Umgebung hohen Geschwindigkeiten

⁸⁸ Vgl. Abschn. 2.2, Tab. 2

⁸⁹ Z.B. Kegelform bei punktförmiger Emission gegenüber länglichem Strahl bei linienförmiger Emissionsquelle

len Erhaltungsgleichungen der Strömungsmechanik⁹⁰, die mit empirisch ermittelten Versuchsergebnissen angepasst wurden. Die Formulierungen unterscheiden sich nach den geometrischen Verhältnissen der Emissionsquelle und des daraus resultierenden Strahlbildes und gehen grundsätzlich von einer allseitigen Lufteinströmung aus der Umgebung aus. Für eine punktförmige Emission⁹¹ schätzt Gl. 17 die Länge des Kernbereichs in der Mittelachse des Freistrahls ab [40].

$$x_0 = \frac{d}{m} [m] \quad (17)$$

Die Betrachtungen verwenden die sog. Mischzahl m als Kenngröße. Dieser semi-empirische Parameter dient der Berücksichtigung der Emissionsart bzw. -geometrie und der dadurch entstehenden Turbulenz⁹². Die Reynoldszahl⁹³ schätzt dazu den Turbulenzgrad ab.

Auf der Längenbestimmung des Kernbereichs bauen Berechnungen weiterer Parameter des Ähnlichkeitsbereiches auf, die für isotherme⁹⁴ und nicht-isotherme Freistrahlen differenzieren. Dabei erfolgt zunächst die Ermittlung der jeweiligen Geschwindigkeit v_x auf der Mittelachse des isothermen (Gl. 18) bzw. des nicht-isothermen (Gl. 19) Freistrahls am betrachteten Abstand x zum Emissionspunkt und im Verhältnis zur Emissionsgeschwindigkeit v_0 [40].

$$\frac{v_x}{v_0} = \frac{x_0}{x} = \frac{d}{m \cdot x} [-] \quad (18)$$

$$\frac{v_x}{v_0} = \frac{x_0}{x} \pm \sqrt{\frac{Ar}{m} \left(1 + \ln \frac{2x}{x_0} \right)} [-] \quad (19)$$

Die prinzipielle Unterscheidung umfasst die weitere Annahme, dass bei isothermen Freistrahlen weitergehende strömungsmechanische Einflüsse (z.B. Ausrichtung der Emissionsöffnung, Schwerkrafteinfluss auf den eingebrachten Strahl etc.) vernachlässigt werden können. Dementsprechend dient der Wurzelterm in Gl. 19 dem Ausdruck einer Beschleunigung oder Abbremsung des Freistrahls, die im Vorfeld von Berechnungen unter Berücksichtigung von Temperatur- und Geometrieverhältnissen abgeschätzt werden muss.

Ergänzend kann der bewegte Volumenstrom an einem Punkt in der Strahlmittelachse ermittelt werden (vgl. Gl. 20). Unter Berücksichtigung der eingebrachten Stoffmasse am Emissionspunkt berechnet sich die Mittenkonzentration unter der Annahme, dass diese vollständig im Freistrahle erhalten bleibt und nicht in die Umgebung gelangt. Dazu muss von einer konstanten und gleichförmigen Emission ausgegangen werden, die zu einem kontinuierlichen Transport innerhalb des Freistrahls führt.

$$\frac{\dot{V}_x}{\dot{V}_{em}} = 2 \frac{x}{x_0} = 2 m \frac{x}{d} [-] \quad (20)$$

Ergänzend bestehen Ansätze zur rechnerischen Ermittlung der Temperaturänderungen innerhalb nicht-isothermer Freistrahlen sowie der Ablenkung der Strahlbahn durch thermische Einflüsse. Mit den Strahlgesetzen ist es somit möglich, eine Erfassung von Konzentrationen innerhalb des Freistrahls durchzuführen. Eine Beurteilung der Überlagerung durch andere Effekte sowie die Rückkopplungen zu anderen Bedingungen des Betrachtungsraumes (z.B. Strömung gegen ein Hindernis) besteht dagegen nicht.

Das Modell des Freistrahls zielt nicht unmittelbar auf die Berechnung ortsabhängiger Konzentrationen ab, vielmehr wird der gesamte, mit der Strahllänge anwachsende Volumenstrom bestimmt. Zur Abschätzung ortsbezogener Konzentrationen innerhalb des Strahls bedarf es einer entsprechenden Ergänzung. Unter der Annahme, dass der emittierte Stoffmassenstrom vollständig im Strahl verbleibt sowie eine Ausbreitung entsprechend der Strahlgeschwindigkeit erfolgt, kann eine Konzentration über das Verhältnis des Emissions-Massenstroms und des lokalen Volumenstroms ermittelt werden.

⁹⁰ Vgl. Abschn. 2, S. 4

⁹¹ An dieser Stelle werden beispielhaft die Formulierungen für eine punktförmige Emission dargestellt, weitere geometrische Anordnungen können ebenso betrachtet werden (vgl. [40])

⁹² Für Düsen mit rundem Querschnitt ist bspw. $m = 0,14 \sim 0,17 \text{ m/s}$ zu verwenden.

⁹³ Dimensionslose Kennzahl als Ausdruck des Turbulenzzustandes einer Strömung. Dabei ist auch die Abschätzung des Übergangs von laminaren zu turbulenten Strömungen (in Abhängigkeit zur Strömungsgeometrie) möglich [41].

⁹⁴ Annahme gleich hoher und -bleibender Temperatur der Emission und der Umgebungsbedingungen

Eine Übersicht des Modells zur rechnerischen Betrachtung von Freistrahlen samt enthaltenen Annahmen und Rahmenbedingungen gibt Tab. 11.

Merkmale	Eigenschaft Modellkonzeption
<i>Herkunft des Modells</i>	Lüftungstechnik (strömungsmechanische Betrachtungen)
<i>Anwendungs- bzw. Gültigkeitsbereich</i>	Ausbreitung isothermer und nicht-isothermer Freistrahlen in Abhängigkeit zur Geometrie der Emissionsquelle; Anpassung nach Ausrichtung der Emissionsquelle erforderlich (vorgegebene Kriterien); Formulierungen gültig für Ähnlichkeitsbereich ($x > x_0$ und $x > 40 d \sim 300 d$)
<i>Berücksichtigte physikalische Vorgänge</i>	Impulsbehaftete Emission von Strömungen in Betrachtungsraum, die zur Freistrahlausbildung führen
<i>Eingebundene Erhaltungsgleichungen (vgl. Abschn. 2)</i>	Massenerhaltung; Energieerhaltung; bedingt: Impulserhaltung (keine Erfassung externer Einflüsse)
<i>Grundlage der Modellkonzeption</i>	Theoretische Berücksichtigung der Massen-, Energie- und Impulserhaltung mit semi-empirischer Anpassung an Emissionsgeometrie und Turbulenzverhalten samt angeschlossener Einmischung von Umgebungsluft
<i>Grundannahmen des Modells</i>	Gleichförmige Emission; freie Strahlausbildung und Ausbreitung ohne Hindernisse; allseitiger Einstrom von Umgebungsluft möglich (gesonderte Betrachtungen für Freistrahlen an Wänden vorhanden); kein Einfluss externer Strömungen; isothermer Freistrah: kein Einfluss durch Temperaturgradienten bzw. Beschleunigung oder Abbremsung durch Dichtegradienten; Ergänzungsbetrachtung: vollständiger Verbleib der emittierten Stoffmasse in Freistrah, Stoffausbreitung mit Strahlgeschwindigkeit
<i>Eingebundene Eingabeparameter</i>	Emissions-Eigenschaften: Strömungsdynamik (Geschwindigkeit), Geometrie der Emissionsöffnung, Mischzahl als semi-empirischer Parameter der Emissionsgeometrie und -turbulenz, Emissions-Massenstrom (für Ergänzungsbetrachtung); strömungsmechanische Größe: Archimedes-Zahl ⁹⁵ zur Berücksichtigung bzw. Fortsetzung der Impulserhaltung; tätigkeitsspezifische Eigenschaft: Abstand des Betrachtungspunktes zur Emissionsquelle
<i>Empirischer Einfluss über Hilfsfaktoren</i>	Mischzahl zur Erfassung der Emissionsgeometrie und des Turbulenzverhaltens an der Emissionsquelle
<i>Ergebnisparameter und Bezugspunkt</i>	Ermittlung relativer Geschwindigkeiten und Gesamtvolumenströme in der Strahl-Mittellachse zu Emissionsgrößen; ergänzende Formulierung zur Konzentrationsermittlung über emittierten Massenstrom (mit Ergänzungsbetrachtung: potentielle Eingangsgröße zur Bewertung)
<i>Vorteile in der Anwendung</i>	Grundlegende Ableitung aus theoretisch-basierten Betrachtungen unter Berücksichtigung der zentralen Erhaltungsgleichungen; Erfassung und Berechnung strömungsmechanischer Parameter; Parameterermittlung abstandsabhängig
<i>Nachteile in der Anwendung</i>	Ergänzungsschritt zur Konzentrationsbestimmung erforderlich (nur bei stationärer Betrachtung mit gleichförmiger Emission möglich); Betrachtung der Größen lediglich in Mittelachse des Freistrahls vorgesehen; keine Berücksichtigung des Einflusses anderer Strömungen innerhalb des Raumes; keine Aussage zur Auflösung des Strahlverhaltens vorgesehen bzw. möglich

Tabelle 11: Zusammenfassung: Strahlgesetze bzw. Modell des Freistrahls [40]

3.4.4 Abschätzung des dichtebedingten Auf- bzw. Abtriebs

Durch den Schwerkrafteinfluss lagern sich innerhalb von Fluiden (Gase und Flüssigkeiten) Teilvolumen in der Reihenfolge abnehmender Dichte horizontal übereinander ab. Auslöser ist ein ggf. vorhandener stoffspezifischer Dichteunterschied verschiedener Elemente und Verbindungen. Innerhalb eines Stoffes bzw. bei vergleichbarer Stoffdichte rufen weiterhin Temperaturunterschiede eine Schichtung hervor. Auf diese Weise entsteht über die Höhe des Raumes ein Dichtegradient. Eine dauerhafte Schichtung tritt nur auf, wenn alle Bestandteile den gleichen Aggregatzustand aufweisen - Flüssigkeiten und Feststoffe unterstehen erhöhtem Schwerkrafteinfluss, der zu einer Sedimentationsbewegung führt. Ausnahme bilden fein verteilte Partikeln, die sich gasähnlich verhalten.

⁹⁵ Dimensionslose Kennzahl als Ausdruck der Auftriebskraft zur Reibung eines Fluides am Umgebungsmedium (Aufrechterhaltung der Strömung durch Impuls), vgl. u.a. [42].

Aufgrund der dichtebedingten Schichtbildung sind im Zuge der Ausbreitungsbewegung verschiedene Stoffverhalten möglich. Zum Einen führen Verwirbelungen (z.B. infolge von Luftströmungen) ggf. zur Störung des Gleichgewichtszustands einer bereits erreichten Schichtung, so dass sich eine Stoffströmung zur erneuten Erreichung des Schichtungszustandes einstellt. Zum Anderen bilden Dichteunterschiede von in den Raum eingebrachten Stoffen einen Auftrieb (geringere Dichte als Umgebung an Emissionsquelle) oder Abtrieb (höhere Dichte als Umgebung an Emissionsquelle) aus, um einen stabilen Zustand zu erreichen. In Abhängigkeit zu einem bereits vorhandenen Dichtegradienten bestehen Anlagerungsmöglichkeiten sowohl an Boden und Decke, aber ggf. auch in einer anderen Höhenlage. An diese Anlagerung schließt die radiale Stoffausbreitung an.

Eine rechnerische Ermittlung der entstehenden Stoffströme der dichtebedingten Stoffausbreitung samt Konzentrationsermittlung erfolgt eingeschränkt durch die Betrachtung der Dichteverhältnisse des Raumes. Durch die Ermittlung der höhenbezogenen Dichteverteilung in Verbindung mit der Stoffdichte des Emittenten kann die angestrebte vertikale Position festgestellt werden. Dazu wird entweder ein unmittelbarer Vergleich der vorhandenen Stoffdichten oder die Betrachtung der stoffmengenspezifischen Massen⁹⁶ vorgenommen. Die Abschätzungen erfordern die Einbeziehung von Randparametern, insbesondere von Luft- bzw. Stofftemperatur und -druck, wozu die ideale massenbezogene Gasgleichung genutzt werden kann [33, 36].

Da i.A. keine einfachen rechnerischen Mittel zur Abschätzung der Wirkung von Verwirbelungen auf dichtebedingte Schichten bestehen bzw. diese unregelmäßig und mit variierender Intensität auftreten, ist eine Beurteilung lediglich für die kontrollierte Emission möglich. In diesem Fall ist eine Berechnung von Massenströmen, die während der rein dichtebedingten Ausbreitung transportiert werden, nicht erforderlich. Die entsprechenden Emissionsbetrachtungen ermitteln bereits den Emissions-Massenstrom, der aufgrund des Ansatzes, dass ein Auf- oder Abtrieb im Gesamten erfolgt, weiterhin Verwendung findet. In Verbindung mit der Dichte des Emittenten folgt daraus der Volumenstrom⁹⁷ des Auf- oder Abtriebs, um die zeitabhängige Ausbildung des Stoffvolumens und die Tendenz zur weiteren Ausbreitung (z.B. bei einem Abtrieb seitlich über Grenzen von Senken o.ä. hinweg) abzuschätzen.

Die unmittelbare Berechnung von Konzentrationen ist durch die Annahme der dichtebedingten Stoffausbreitung nicht möglich. Vielmehr gibt die Verknüpfung der einfach zu ermittelnden Parameter eine Tendenz an, in welchen Bereichen rein dichtebedingte Strömungen zu erwarten sind. Zusätzlich skizzieren die Überlegungen die zeitliche Entwicklung des sich aufbauenden Stoffvolumens.

Tab. 12 fasst den prinzipiellen Ansatz, der keine eigenständige Ausbreitungsberechnung darstellt, mitsamt von Verwendungsmöglichkeiten (als besonderes Übersichtsmerkmal⁹⁸) zusammen.

Merkmale	Eigenschaft Modellkonzeption
<i>Herkunft des Modells</i>	Physikalische Analyse (allgemeine Grundgleichungen)
<i>Anwendungs- bzw. Gültigkeitsbereich</i>	Abschätzung der dichtebedingten, vertikalen Schichtung von gasförmigen Stoffen, die in Räumen emittiert werden
<i>Berücksichtigte physikalische Vorgänge</i>	dichtebedingter Auf- oder Abtrieb von Stoffen im Verhältnis zur Dichte der Raumluft
<i>Eingebundene Erhaltungsgleichungen (vgl. Abschn. 2)</i>	Massenerhaltung
<i>Grundlage der Modellkonzeption</i>	Dichteverhältnis eines Stoffes zur Raumluft: Auftrieb für Stoffe mit niedrigerer Dichte, Abtrieb für Stoffe mit höherer Dichte
<i>Grundannahmen des Modells</i>	Verhalten als ideales Gas; homogene Dichte eines Stoffes bzw. Teilvolumens; vollständige dichtebedingte Ausbreitung ohne Beeinflussung durch andere Vorgänge
<i>Eingebundene Eingabeparameter</i>	Stoffeigenschaften: Stoffdichte, Stofftemperatur; Umgebungsbedingungen: Dichte Raumluft, Umgebungstemperatur (jeweils Untervolumen möglich); Emissions-Eigenschaften: Emissions-Massenstrom
<i>Empirischer Einfluss über Hilfsfaktoren</i>	kein Einfluss

⁹⁶ Umgebungsluft in standardisierter Zusammensetzung verfügt über ein spezifisches Gewicht von ca. 29,00 g/mol; bei gleicher Temperatur weisen Stoffe mit niedrigerer Molmasse einen Aufstrom, Stoffe mit höherer Molmasse einen Abstrom auf.

⁹⁷ Vgl. Gl. 1

⁹⁸ Die aufgezeigten Verwendungsmöglichkeiten stellen Bezüge zu anderen Ausbreitungsmodellen her, in die die Abschätzungen ggf. eingehen.

Merkmale	Eigenschaft Modellkonzeption
<i>Ergebnisparameter und Bezugspunkt</i>	Vertikale Position in Relation zu Raumluft; zeitabhängige Ermittlung der entstehenden Volumen bzw. der Stoffmasse im Raum zur Erfassung ggf. kritischer Bereiche (potentielle Eingangsgröße weiterer Ausbreitungsbeurteilungen, keine Eingangsgröße zur Bewertung, da eigenständige Analyse)
<i>Möglichkeiten der Verwendung</i>	Verknüpfung zu Zonenmodellen als Positionsbestimmung kritischer Bereiche, mit dem betrachtete Kontrollvolumen festgelegt werden können; Abschätzung der zeitlichen Volumenentwicklung kritischer Bereiche
<i>Vorteile in der Anwendung</i>	einfache Gegenüberstellung leicht zu ermittelnder Parameter; unmittelbare Interpretation der Ergebnisse; Bestimmung aus bekannten Parametern; Einfügen in Gesamtkonzept (insbesondere zur Detaillierung des Zonenmodells) sinnvoll
<i>Nachteile in der Anwendung</i>	keine eigenständige Konzentrationsberechnung, sondern lediglich Verhältnisbetrachtung; keine Beachtung anderer Vorgänge der Stoffausbreitung sowie Beeinflussung durch andere Strömungen; keine Berücksichtigung des Emissionsimpulses

Tabelle 12: Zusammenfassung: Abschätzung der dichtebedingten Stoffausbreitung

3.5 Methodische Anmerkung zu kombinatorischen Expositionsmodellen

Neben Modellen, die einzelne Vorgänge der Emission und Ausbreitung von Stoffen in der Umgebungsluft betrachten, existieren weiterhin Ansätze mit Formulierungen, die Emissionsdaten in Verbindung mit Parametern der Umgebung zu Stoffkonzentrationen verknüpfen⁹⁹ (sog. kombinatorische Modelle). Ziel dieser generellen Modellausrichtung ist dabei die Verbindung von Emissions- und Ausbreitungsparametern und Ausgabe einer unmittelbaren Expositionsbeschreibung. Einzelbetrachtungen unterschiedlicher Vorgänge durch den Anwender werden nicht erforderlich. Diese Betrachtungsweise fasst oftmals verschiedene Schritte zusammen und behandelt die verschiedenen Transportvorgänge durch das Modell im Gesamten.

Die Zusammenfassung mehrerer Betrachtungsschritte und der erforderlichen Parameter legt kombinatorische Expositionsmodelle¹⁰⁰ oftmals - noch mehr als singuläre Modelle - auf eng gefasste Anwendungsrahmen fest. Diese resultieren als Gesamtheit aus den eingeschlossenen Ansätzen bzw. Untermodellen. In diesem Zusammenhang ist einerseits der Vorteil einer genauen Abstimmung dieser Teilbetrachtungen aufeinander begründet, andererseits kann eine Abänderung der Abschätzungen und der einbezogenen Modelle - sofern nicht als Alternativen vorgesehen (z.B. im Rahmen rechnerischer Umsetzungen) - durch den Anwender nicht vorgenommen werden. Daraus folgt eine deutliche Einschränkung der Anwendbarkeit bzw. der Gültigkeit ermittelter Ergebnisse. In der eigentlichen Anwendung der Modelle ist i.A. kein Eingriff oder Verknüpfung verschiedener Betrachtungen (z.B. Verdampfung in Verbindung mit einer Stoffausbreitung durch Diffusion) vorgesehen, da dies bereits die Gesamtanlage vorgibt. Dementsprechend erfolgt die unmittelbare Ausgabe von Konzentrationen als Ergebnisparameter.

Für die Anwendung im Rahmen von Betrachtungen des Arbeitsschutzes stehen verschiedene kombinatorische Modelle zur Verfügung, die zu einem Großteil auf den in den vorherigen Abschnitten erläuterten Teilmodellen und -betrachtungen oder verwandten Ansätzen beruhen. Dabei unterscheiden sich die kombinatorischen Modelle durch die verwendeten Untermodelle, prinzipielle Ansätze und zu berücksichtigende Annahmen. Durch die Konzeption zur direkten Abschätzung von Luftkonzentrationen aus Emissionsparametern ist kein Verknüpfungspunkt zu singulären Modellen gegeben. Bei einer Verwendung muss der Anwender genau den Anwendungsrahmen sowie die Modellgrenzen überprüfen, sofern Validerungsuntersuchungen diese aufzeigen.

⁹⁹ Vgl. bspw. S. 20 (SVP-Modell) und S. 21 (CEM-Modell)

¹⁰⁰ Z.B. BG Spray nach [28], EASE etc., vgl. bspw. [28, 43, 44]

3.6 Generische Expositions-Modelle

Neben rechnerischen Betrachtungen zur möglichst genauen Prognose von Stoffkonzentrationen und Expositionen betroffener Personen¹⁰¹ existieren verschiedene Modell-Ansätze, die Konzentrationen bzw. Expositionen über physikalisch nicht vorliegende Bewertungsfaktoren erfassen. Die Grundlage wird durch Empirie gebildet, die zu einem probabilistischen Verfahren, das quantitativ bzw. subquantitativ¹⁰² aufgebaut ist, führt. Dabei werden neben Emissions- und Expositionsdaten weitere Größen, wie bspw. die Hazard-Kriterien eines Stoffes über die Einstufung und Kennzeichnung oder verschiedene Arten an Schutzmaßnahmen, unmittelbar in die Betrachtungen einbezogen.

Entsprechenden Verfahren, wie z.B. dem "Einfache Maßnahmenkonzept Gefahrstoffe" (EMKG¹⁰³) aus dem Bereich des Arbeitsschutzes, liegt das sog. "Denken in Bändern" zugrunde. Dieses Grundkonzept beinhaltet keine detaillierte Betrachtung des Stoffweges und des Massentransportes, sondern vielmehr eine Kategorisierung innerhalb verschiedener wesentlicher Gefährdungs-Aspekte (z.B. Hazard-Kriterien über Stoffeigenschaften und Grenzwerte, Expositions-Kriterien über verwendete Menge, Verwendungsform etc.), mit denen Faktoren verbunden sind. Die Verknüpfung der Hazard- und Expositions-Informationen schließt unter Verwendung von Skalierungs- und Bewertungsfaktoren (sog. Bänder) unmittelbar auf erforderliche Maßnahmen (-gruppen) in Bezug auf die betrachtete Tätigkeit. Dieser Rückschluss bewirkt eine implizierte Beurteilung und Beeinflussung stoffspezifischer Gefährdungen für Beschäftigte, die im Rahmen der Anwendung durch den Modellansatz nicht unmittelbar sichtbar wird¹⁰⁴.

Generische Expositionsmodelle führen Betrachtungen zur Stoffemission und -ausbreitung nicht auf physikalischer Ebene durch, sondern fassen die signifikanten Hazard- und Expositions-Kriterien eines Stoffes oder Gemisches zusammen. Über die Zusammenführung der jeweiligen Faktoren erfolgt somit eine mathematische Betrachtung von Hilfsgrößen, die nicht detailliert die jeweils vorliegenden Arbeitsbedingungen samt auftretendem Stofftransport und resultierenden Luftkonzentrationen wiedergibt. Weiterhin sehen die verschiedenen Modellansätze als in sich geschlossene Verfahren keine Interaktion mit anderen (singulären) Modellen vor. Daher wird an dieser Stelle auf eine weitere Erläuterung verzichtet.

3.7 Konzepte zur Bewertung von Gefahrstoffkonzentrationen am Arbeitsplatz

Nach der Ermittlung ortsbezogener Stoffkonzentrationen müssen Tätigkeiten entsprechend ihres Gefährdungscharakters für Beschäftigte bewertet werden. Grundlage bilden geeignete Bewertungsfaktoren und -verfahren. Das Vorgehen zur Tätigkeitsbewertung wird an dieser Stelle der Vollständigkeit halber erläutert, um die gesamten Berechnungsschritte einer stoffspezifischen Gefährdungsbeurteilung darzustellen.

Die Bewertung berücksichtigt verschiedene allgemeine, tätigkeitsspezifisch-charakteristische Parameter. Das konkrete Vorgehen beruht daher auf folgenden Einflussfaktoren: Einerseits ist das inhärente Gefahrenpotential eines Stoffes einzubeziehen (sog. "Hazard" im allgemeinen Gefährdungsmodell). Andererseits müssen die Höhe der Konzentration sowie die Expositionsdauer Beschäftigter als Maß für das Ausgesetzt-Sein und somit mögliche Belastungen (sowie die Auswirkungen) auf den menschlichen Organismus (sog. "Exposition" im allgemeinen Gefährdungsmodell) berücksichtigt werden. Diese werden zu einer Gefährdungsaussage zusammengeführt.

Die Bewertung von Tätigkeiten mit Gefahrstoffen kann grenzwertorientiert durchgeführt werden, sofern stoffspezifische Werte bestehen. Sind für einen Stoff keine Grenzwerte veröffentlicht, so ist eine Bewertung anhand von grenzwertfreien Konzepten (z.B. durch Überprüfung betriebstechnischer Parameter) notwendig.

Eine grenzwertorientierte Bewertung beruht auf dem Vergleich des stoffspezifischen Arbeitsplatzgrenzwertes (AGW)

¹⁰¹ Entsprechende Ansätze sind aus verschiedenen Disziplinen bekannt, wie z.B. unmittelbar aus dem Arbeitsschutz (vgl. nachfolgend EMKG), der Produktsicherheit oder dem Verbraucher- und Umweltschutz. Betroffene Personen sind dementsprechend im herkömmlichen Sinne der verschiedenen Ansätze nicht zwangsweise Beschäftigte, sondern können bspw. auch Verbraucher etc. sein.

¹⁰² "Berechnung" auf Grundlage von Bewertungsfaktoren ohne physikalischen Hintergrund.

¹⁰³ Vgl. [2]

¹⁰⁴ Vgl. [45, 46]

sowie der zugehörigen Kurzzeitwerte gemäß TRGS 900 [16] mit der tatsächlichen Exposition. Liegt für einen betrachteten Stoff kein AGW vor, sieht die GefStoffV im Rahmen ergänzender Betrachtungen die Nutzung anderweitiger Grenzwertkonzepte zur Beurteilung vor. Die Grenzwerte beruhen dabei i.d.R. auf toxikologisch-basierten Ableitungen über die Gefährlichkeit verschiedener Konzentrationen in der Luft, so dass die Werte gleichermaßen die spezifischen gefährlichen Stoffeigenschaften ("Hazard") und den Einfluss von Immissions- und Resorptionsvorgängen¹⁰⁵ ("Exposition") in die Betrachtungen einbeziehen. Aufgrund dessen ist eine detaillierte Betrachtung von Immissionsvorgängen der auftretenden Gefahrstoffe im Rahmen der Gefährdungsbeurteilung nicht erforderlich. Rechnerische Konzepte, die diesen Bereich erfassen und darstellen sollen, sind nicht notwendig (siehe Abschn. 2.3).

Das (staatliche) Grenzwertkonzept entsprechend TRGS 900 [16] untergliedert sich in verschiedene Teilbewertungen, die unterschiedliche zeitliche Bezüge aufweisen. Einerseits bestehen stoffspezifische AGW als sog. maximale Schichtmittelwerte, die über den Zeitraum einer normalen Schichtdauer von acht Stunden¹⁰⁶ im Mittel nicht überschritten werden dürfen. Andererseits bestehen stoffspezifisch ggf. sog. Kurzzeitwerte, die mit Überschreitungsfaktoren¹⁰⁷ die zeitbewerteten Mittelwerte in den maximalen Konzentrationen begrenzen. Die Kurzzeitwerte schränken die höchstzulässige Überschreitung des Schichtmittelwertes, der maximal 4 Mal pro Arbeitsschicht für höchstens 15 Minuten als Mittelwert erreicht werden darf. Zusätzlich können darüber hinaus für verschiedene Stoffe mit den sog. Momentanwerten weitere spezifische Spitzenbegrenzungen bestehen, die durch die auftretenden Luftkonzentrationen zu jedem Zeitpunkt der Tätigkeit eingehalten werden müssen.

Existiert für einen Stoff kein AGW mit den zugehörigen Spitzenbegrenzungen, lässt die GefStoffV andere Grenzwertkonzepte als gleichwertige Beurteilungsverfahren¹⁰⁸ (z.B. DNEL aus Betrachtungen der Produktsicherheit, internationale Grenzwerte¹⁰⁹ etc.) im Rahmen von Analogiebetrachtungen oder Worst-Case-Annahmen zu. Diese beinhalten möglicherweise ebenfalls stoffspezifische Schichtmittelwerte oder Spitzenbegrenzungen, die zu keinem Zeitpunkt einer Tätigkeit überschritten werden dürfen.

Entsprechend der Verknüpfung der Aspekte "Hazard" und "Exposition" erfordert die Bewertung die Einbeziehung des zeitlich-räumlichen Aufeinandertreffens von Beschäftigten und Gefahrstoffen (sog. Koinzidenz). Dementsprechend muss eine Untersuchung erfolgen, in welcher Relation ortsbezogene Konzentrationen, Zeitpunkte des Auftretens und Beschäftigten-Aufenthalte stehen. Durch diese Betrachtungen erfolgt nicht nur eine Bewertung einer einzelnen Tätigkeit, ebenso ist die Untersuchung einer ganzen (Regel-) Arbeitsschicht mit unterschiedlichen Vorgängen möglich. In diesem Rahmen muss daher ebenso ermittelt werden, wie eine bestimmungsgemäße Aufeinanderfolge unterschiedlicher Tätigkeiten innerhalb einer Schichtdauer verläuft, so dass die stoffbezogene Gefährdungsbeurteilung lediglich für diesen betrachteten Fall gilt.

Für eine Reihe an Stoffen stehen keine Grenzwerte - weder als AGW nach TRGS 900 noch aus weiteren Konzepten - zur Verfügung. In diesen Fällen verbleibt die vergleichende Betrachtung unterschiedlicher Arbeitsplätze oder der Vergleich verschiedener Maßnahmen als Maßstab. Dabei hat eine Bewertung unter dem Gesichtspunkt zu erfolgen, auftretende Stoffkonzentrationen so weit wie möglich zu minimieren und für das entsprechende Verfahren den jeweiligen Stand der Technik einzuhalten¹¹⁰. Ebenso ist eine Zusammenführung von "Hazard-" und "Exposition-" Aspekten erforderlich.

Vor dem Hintergrund der unterschiedlichen Zeitbezüge des AGW und der Spitzenbegrenzungen bzw. ggf. erforderlicher anderer Grenzwertkonzepte muss die Tätigkeitsbewertung die ermittelten ortsbezogenen Stoffkonzentrationen mit den Zeitbezügen der Exposition sinnvoll verknüpfen. Weiterhin müssen die Abfolge unterschiedlicher Tätigkeiten, entstehende zeitliche Variationen der stofflichen Belastungen sowie individuelle Abweichungen der Expositionsdauern von Beschäftigten Berücksichtigung finden, um einen fundierten Grenzwertvergleich - ggf. über gemittelte

¹⁰⁵ Z.B. Beeinflussung der tatsächlichen inhalativen Stoffaufnahme in den Körper durch Atemfrequenz und -tiefe.

¹⁰⁶ Im Rahmen der Ableitung der vorhandenen AGW wird von einer achtstündigen Schichtdauer an 5 Arbeitstagen je Woche über die Gesamt-Lebensarbeitszeit hinweg ausgegangen (vgl. [16]). Andere Schichtdauern sind prinzipiell möglich, wobei Anpassungen erforderlich werden (vgl. S. 39).

¹⁰⁷ Faktor, der als Umrechnung mit dem jeweiligen AGW multipliziert wird und somit den Kurzzeitwert ergibt (vgl. [16]).

¹⁰⁸ Grenzwertorientierte Betrachtungen, die jedoch nicht im Sinne der GefStoffV, die eindeutigen Bezug zu den AGW nimmt, erfolgen. Die entsprechenden Grenzwerte sind dabei mit "zumutbarem Aufwand aus zugänglichen Quellen" zu eruieren [1].

¹⁰⁹ Vgl. bspw. Grenzwerte des National Institute for Occupational Health and Safety (NIOSH, GB) u.a. [47].

¹¹⁰ Vgl. [1]

Angaben - als Bewertungsgrundlage durchzuführen. Das Ergebnis bildet den Befund der Gefährdungsbeurteilung. Das im Rahmen der Grenzwertableitung implementierte Zeitkonzept kann bei einer definierten mathematischen Vorgehensweise unmittelbar zur Bewertung herangezogen werden. Weitere Umsetzungen, z.B. durch verschiedene Programme, beruhen elementar auf diesen Betrachtungen und unterscheiden sich ggf. durch zeitorientierte Genauigkeiten etc.. Aus diesem Grund werden nachfolgend die mathematischen Grundlagen erläutert, auf eine spezielle Umsetzung wird nicht eingegangen.

3.7.1 Mathematische Grundbewertung

Die Tätigkeitsbewertung unterscheidet verschiedene Fälle der zeitlichen Exposition von Beschäftigten, die ein mathematischer Ansatz betrachtet und auswertet. Folgende generelle Expositions- und resultierende Belastungscharakteristiken grenzen sich voneinander ab:

- Zeitlich gleichbleibende Stoffkonzentration in der Arbeitsplatzluft, wobei sich Beschäftigte dauerhaft in dieser aufhalten¹¹¹.
- Zeitlich gleichbleibende Stoffkonzentration in der Arbeitsplatzluft, wobei sich Beschäftigte nur in verschiedenen Zeitspannen mit Unterbrechungen in dieser aufhalten¹¹².
- Zeitlich variable Stoffkonzentration in der Arbeitsplatzluft, wobei sich Beschäftigte dauerhaft oder in verschiedenen Zeitspannen in dieser aufhalten¹¹³.

Auf der Definition der Betrachtungsfälle beruhen verschiedene mathematische Vorgehensweisen, die die zuvor ermittelten Daten zu ortsbezogenen Konzentrationen einbeziehen und als Eingabewerte berücksichtigen. Darüber hinaus sind die Aufenthaltsdauern der Beschäftigten in den betroffenen Bereichen als Eingabewerte erforderlich.

Die mathematischen Betrachtungen basieren auf der sog. Haber'schen Regel (vgl. Gl. 21), die einen Zusammenhang zwischen biologischer Wirkung W eines Stoffes, der entsprechenden Konzentration c sowie der Einwirkungsdauer t beschreibt.

$$W = c \cdot t \text{ [(mg s)/m}^3\text{]} \quad (21)$$

Die Korrelation zwischen Konzentration und Exposition ist jedoch nicht für alle Stoffe und Gefährdungspotentiale korrekt, vielmehr existieren oftmals spezifische Wirkschwellen, ab denen keine Anwendbarkeit mehr vorliegt. Darüber hinaus existieren Stoffe, die nicht der Haber'schen Regel folgen und in unterschiedlichen Konzentrationen schädigende Wirkungscharakteristiken aufweisen[15].

Der Ansatz des AGW geht als Annahme von der Gültigkeit der Haber'schen Regel aus¹¹⁴. Zur Berücksichtigung von Stoffen, für die dies nicht zutrifft, nehmen Kurzzeit- oder Momentanwerte als Spitzenbegrenzungen die Beschränkung der maximalen Stoffkonzentrationen in der Arbeitsplatzluft vor (vgl. [16]).

Fall I: Konstante Luftkonzentration bei ständigem Aufenthalt

Tritt während eines ständigen Aufenthalts von Beschäftigten eine gleichbleibende Luftkonzentration über maximal die dem AGW (Schichtmittelwert) zugrunde liegende Zeitdauer (8 Stunden Dauer der Arbeitsschicht) auf, basiert die Tätigkeitsbewertung auf dem direkten Vergleich. Ist kein stoffspezifischer AGW veröffentlicht und damit die Verwendung eines alternativen Grenzwertkonzepts mit Spitzenbegrenzung erforderlich, bleibt ebenfalls der direkte Vergleich von ermittelter Konzentration und Grenzwert möglich.

Die Grenzwerte werden eingehalten, sofern das Kriterium der Unterschreitung von Schichtmittel- bzw. Spitzenwerten durch die jeweilige Luftkonzentration erfüllt ist. In diesem Fall liegt eine sichere Tätigkeit vor, die Betrachtung ggf. vorhandener Kurzzeitwerte entfällt.

¹¹¹ Im Folgenden Fall I

¹¹² Im Folgenden Fall II

¹¹³ Im Folgenden Fall III

¹¹⁴ Für andere, ggf. internationale, Grenzwertkonzepte kann keine pauschale Aussage zur Annahme der Haber-Regel getroffen werden, da sich die zugrundeliegende toxikologischen Ableitungen ggf. erheblich unterscheiden [48]. Wird im Zuge der Gefährdungsbeurteilung die Anwendung eines nicht-staatlichen Grenzwertkonzeptes erforderlich, ist die Anwendbarkeit der nachfolgend dargestellten mathematischen Ansätze vor diesem Hintergrund zu überprüfen und ggf. anzupassen.

Fall II: Konstante Luftkonzentration bei wechselndem Aufenthalt

Bei einer verringerten Aufenthaltsdauer in betroffenen Bereichen unterhalb der Zeitbasis des AGW's ist ggf. eine Überschreitung des relevanten Grenzwertes durch die auf die Beschäftigten einwirkende Luftkonzentration zulässig. Sofern die ortsabhängigen Konzentrationen über die gesamte Betrachtungsdauer gleich hoch bleiben, bezieht die Überprüfung der Zulässigkeit die Haber'sche Regel mit verändertem Zeitbezug ein. Existiert für einen Stoff kein AGW und zieht die Bewertung einen anderen Grenzwert heran, muss ebenfalls der zugehörige Zeitbezug (Schichtmittelwert mit Zeitbasis oder maximaler Spitzenwert) berücksichtigt werden.

Bei der Bewertung einer Arbeitssituation mit einer nicht durchgängigen Exposition von Beschäftigten begründen einerseits die Art des herangezogen Grenzwertes, andererseits das ermittelte Niveau ortsbezogener Konzentrationen im Vergleich zum Grenzwert das weitere (mathematische) Vorgehen:

Sieht der stoffspezifische AGW einen Momentanwert vor bzw. findet im Rahmen der Gefährdungsbeurteilung ein Grenzwertkonzept mit Spitzenbegrenzung Anwendung oder liegt die errechnete Konzentration unterhalb des AGW's als Schichtmittelwert, reicht die unmittelbare Gegenüberstellung der Werte¹¹⁵ aus. Bei Nutzung eines Grenzwerts mit definiertem Zeitbezug, den die ermittelte Luftkonzentration überschreitet, erfordert die Feststellung der Zulässigkeit eine zeitorientierte Anpassung. Dazu bildet Gl.22 anhand der Summe der Expositionszeiten einen angepassten, äquivalenten Grenzwert [49].

$$GW_{korr} = GW \cdot \frac{t_{Bezug\ GW}}{\sum t_{Exposition}} \quad (22)$$

Neben der Ermittlung eines korrigierten Grenzwertes beinhaltet die Bewertung mit einem AGW eine Überprüfung, ob Luftkonzentrationen trotz Einhaltung des angepassten Schichtmittelwertes ggf. Momentan- oder Kurzzeitwerte, die nur unter bestimmten Voraussetzung auf einen anderen Zeitbezug skaliert werden dürfen¹¹⁶, überschreiten.

Fall III: Variable Luftkonzentration bei ständigem oder wechselndem Aufenthalt

Sofern während des Beschäftigten-Aufenthalts in Arbeitsräumen bei durchgeführten Tätigkeiten unterschiedlich hohe ortsbezogene Konzentrationen von Gefahrstoffen an relevanten Positionen auftreten, erfordert die Bewertung die entsprechende Berücksichtigung. Gleichermaßen gehen in die Betrachtungen möglicherweise wechselnde Aufenthaltsorte und -zeiten der Beschäftigten ein. Dabei ist erneut die unterschiedliche Anlage verschiedener Grenzwerte zu beachten: Zunächst nimmt die Bewertung die Prüfung der Überschreitung von Momentan- bzw. Spitzenwerten vor. Weiterhin muss für über bestimmte Zeiträume gemittelte Grenzwerte (z.B. AGW: Schichtmittelwert und Kurzzeitwert) überprüft werden, ob eine Überschreitung des zeitlichen Mittels stattfindet.

Der unmittelbare Vergleich von Luftkonzentration und Grenzwert beinhaltet die Feststellung der Einhaltung bzw. Überschreitung. Bei Verwendung gemittelter Grenzwerte führt ein Vergleichs-Mittelwert die unterschiedlichen Konzentrationen zusammen, der anhand von Gl. 23 die Expositionen bei einzelnen Tätigkeiten einbezieht. Die zeitliche Wichtung berücksichtigt dabei den Einfluss unterschiedlich langer Teil-Expositionen. Die berechnete Vergleichskonzentration ermöglicht eine Aussage bezüglich der Zulässigkeit von Arbeitsbedingungen [49].

$$x_{Mittel,t} = \frac{1}{t_{gesamt}} \sum x_{i,Exp} t_i [mg/m^3] \quad (23)$$

Die Berechnung des zeitlich gewichteten Mittelwertes umfasst alle Arbeitsphasen und Stoffkonzentrationen, so dass neben den Dauern unterschiedlich hoher Stoffkonzentrationen ebenso Phasen ohne Exposition, z.B. durch wechselnden Aufenthalt der Beschäftigten, Beachtung finden. Die Gesamt-Expositionsdauer entspricht der Dauer einer Arbeitsschicht. Zusätzlich kann es erforderlich werden, den entsprechenden Grenzwert im Hinblick auf die zeitliche Beurteilungsbasis zu korrigieren (vgl. Gl. 22).

¹¹⁵ Sofern die Bewertung mit einem Momentanwert eine Grenzwerteinhaltung ergibt, muss darüber hinaus ebenso eine Betrachtung des Schichtmittelwertes durchgeführt werden.

¹¹⁶ Vgl. [16]

3.7.2 Methodische Anmerkung: Detaillierung der Bewertung

Die zuvor dargestellten Ansätze, die auf den Zeitbezügen von Grenzwerten beruhen, bilden die mathematische Grundlage der Bewertung von Gefährdungen bei Tätigkeiten mit Gefahrstoffen. Dabei kann eine Erfassung der relevanten Parameter, die Berechnung der Expositionsgrößen sowie die anschließende Bewertung in unterschiedlichen Zeitskalen durchgeführt werden. Je nach Anzahl und Genauigkeit der Konzentrationen und Zeitdauern sowie der angestrebten Präzision basiert eine Berechnung auf relativ geringem (z.B. Charakterisierung in der Größe "Stunden") oder hohem Aufwand (Untersuchungen in der Größe "Minuten" oder "Sekunden"). Je detaillierter eine Untersuchung erfolgt, umso genauer ist das Ergebnis (z.B. hinsichtlich des Konzentrations-Mittelwertes einer Arbeitsschicht). Gleichzeitig legt eine steigende Genauigkeit die Aufenthaltsbedingungen von Beschäftigten innerhalb von Arbeitsräumen fest, die zu zeit- und ortsabhängigen Expositionen führen und in die auch zeitabhängige Schwankungen einfließen.

4 Ergänzende Ansätze: Brandschutzingenieurmodelle zur Rauchausbreitung

Wesentliche Gefährdungen bei Bränden resultieren für Gebäudenutzer aus dem entstehenden Brandrauch, der sich ausbreitet¹¹⁷. Die Planung oder Umgestaltung von Gebäuden benötigt daher ggf. Aussagen zur Bemessung und Installation von natürlichen oder maschinellen Rauchabzugsgeräten, die der gezielten Rauchableitung dienen. In die Dimensionierung gehen verschiedene objektspezifische Parameter (z.B. Geometrie, Nutzung, vorhandene Brandlasten, besondere Sachwerte etc.) im Hinblick auf Schutzzielkonkretisierungen (bspw. Höhe der sich ausbildenden raucharmen Schicht, Konzentration besonderer Komponenten des Brandrauches o.ä.) unter Verwendung angepasster Brandszenarien¹¹⁸ ein [51]. Die Leistungsmerkmale der Geräte müssen an die Verrauchung bzw. Rauchausbreitung angepasst sein.

Zur Ermittlung der potentiellen Rauchausbreitung innerhalb von Gebäuden stehen verschiedene sog. Brandschutzingenieurmodelle¹¹⁹ zur Verfügung, die im Rahmen eines Brandschutznachweises¹²⁰ u.U. Verwendung finden. Den Modellen liegen unterschiedliche methodische Konzepte zur Erfassung der im Brandfall ablaufenden Rauchausbreitungsvorgänge samt einer entsprechenden mathematischen Formulierung zugrunde.

Modellbasierte Untersuchungen unterscheiden sich - analog zu den Untersuchungen der Stoffausbreitung des Arbeitsschutzes¹²¹ - prinzipiell in stationäre und instationäre Betrachtungen. Die Differenzierung bezieht sich auf die zeitliche Entwicklung der Wärmefreisetzungsrate¹²² als maßgeblichen Teil des Brandszenarios: Bei stationären Betrachtungen bleibt die Wärmefreisetzungsrate unverändert, so dass sich eine konstante Schichtbildung einstellt. Demgegenüber wird im Rahmen instationärer Betrachtungen die Wärmefreisetzungsrate des verwendeten Brandszenarios verändert, so dass sich ein realistischer Brandverlauf ergibt und z.B. die Schichtbildung mit der Zeit eintritt [50, 51].

Im Folgenden werden die bei Brandschutzbetrachtungen genutzten und für Modelle grundlegenden Konzepte erläutert und an Beispielen¹²³ dargestellt. Diese verfügen ggf. als Gesamtlösung über zum Teil ebenfalls relevante

¹¹⁷ Vgl. Abschn. 2.2, S. 8

¹¹⁸ Annahme eines potentiellen Brandverlaufs, wie er im ungünstigsten Fall anhand der Nutzung etc. eines Gebäudes mit hinreichender Wahrscheinlichkeit eintritt (vgl. [50]).

¹¹⁹ Neben Modellen zur Beschreibung der Rauchausbreitung und -abführung stehen Modelle für weitere brandschutztechnische Fragestellungen zur Verfügung (z.B. Bemessung erforderlicher Feuerwiderstandsdauer von Bauteilen [52] etc.). Diese bleiben aufgrund des thematischen Zusammenhangs an dieser Stelle unberücksichtigt.

¹²⁰ Konzeption zur Sicherstellung brandschutztechnischer Schutzziele, die bauliche, aber auch anlagentechnische und organisatorische Maßnahmen beschreibt bzw. festlegt.

¹²¹ Vgl. Abschn. 3.4.2

¹²² Die Wärmefreisetzungsrate beeinflusst unmittelbar den entstehenden Rauch-Massenstrom, so dass ebenso eine Beeinflussung der entstehenden Gesamt-Rauchmasse eintritt (vgl. Abschn. 2.2).

¹²³ Es erfolgt eine beispielhafte Einschränkung auf unterschiedliche relevante mathematische und konzeptionelle Umsetzungen, da eine gemeinsame Grundlage der jeweiligen Konzepte besteht.

zusätzliche Untermodelle (bspw. Erfassung von Verdampfungsvorgängen), die ebenfalls in die Darstellungen eingehen.

4.1 Handrechenverfahren

Handrechenverfahren sind "einfache" Modellgleichungen, welche einzelne Parameter (bspw. Rauchgas-Massenstrom und -temperatur) innerhalb des Plume (sog. Plume-Modelle) oder bei einer Rauchausbreitung unter der Raumdecke (sog. Ceiling-Jet-Modelle) zu definierten Zeitpunkten und in bestimmten Abständen zur Brandquelle beschreiben. Die Gleichungen resultieren einerseits aus der theoretischen Betrachtung thermodynamischer Prozesse, deren Abgleich mit Versuchswerten andererseits zu Erweiterungen und Konkretisierungen führte. Aus der Verwendung unterschiedlicher Daten resultieren voneinander abweichende Modellgleichungen, die teils auf bestimmte Anwendungsbereiche eingegrenzt sind (bspw. Anwendung für Flüssigkeitsbrände in Wannen) und verschiedene Eingangsparameter des Brandereignisses zugrunde legen. Von diesen Ansätzen werden im Folgenden einige exemplarisch dargestellt, wobei der Fokus weniger auf konkreten Formulierungen, sondern vielmehr auf den zumeist ähnlichen Vorgehensweisen sowie generellen Ansatzpunkten liegt.

4.1.1 Plume-Modelle

Der Plume bezeichnet die aufwärts gerichtete Rauchströmung, die oberhalb der Brandfläche entsteht. Aufgrund des Zusammenhangs von Wärmefreisetzungsrate und freier Aufstiegshöhe¹²⁴ erfolgt in diesem Bereich eine geschwindigkeitsabhängige Einmischung von Umgebungsluft in den entstandenen Brandrauch, so dass sich

- der Rauchgas-Massenstrom mit wachsendem Aufstieg vergrößert und
- Geschwindigkeit und Temperatur verringern¹²⁵.

Die Entwicklung der Parameter hängt daher u.a. von der betrachteten Höhenlage - der freien Aufstiegshöhe - ab [9].

Die Rauchausbreitung kann mit den genannten Parametern allgemein beschrieben werden. Zu deren Bestimmung stehen unterschiedliche Formulierungen zur Verfügung. Die Verhältnisse können beispielsweise anhand der zusammengehörenden Gl. 24 bis 26 des sog. "Idealen Plumes"¹²⁶ bestimmt werden, der ausschließlich aus thermodynamischen Grundsatzbetrachtungen abgeleitet wurde. Die Ergebnisse gelten nur für die jeweils angesetzte Höhe oberhalb der Brandfläche.

$$\dot{m}_P = 0,20 \left(\frac{\rho_\infty^2 \cdot g}{c_{P,\infty} \cdot T_\infty} \right) \cdot \dot{Q}^{1/3} \cdot Z^{5/3} \text{ [kg/s]} \quad (24)$$

$$u = 1,94 \left(\frac{g}{c_{P,\infty} \cdot T_\infty \cdot \rho_\infty} \right) \cdot \dot{Q}^{1/3} \cdot Z^{-1/3} \text{ [m/s]} \quad (25)$$

$$\Delta T = 5,00 \left(\frac{T_\infty}{g \cdot c_{P,\infty}^2 \cdot \rho_\infty^2} \right) \cdot \dot{Q}^{2/3} \cdot Z^{-5/3} \text{ [K]} \quad (26)$$

Allgemein verknüpfen Plume-Modelle verschiedene Eingangsgrößen, welche der mathematischen Formulierung der allgemeinen Verläufe von Rauchgas-Massenstrom, Strömungsgeschwindigkeit und Plume-Temperatur dienen¹²⁷. Die Ergebnisse stellen Einzelwerte der verwendeten Höhe über dem (gedachten) Brandmittelpunkt dar, Positionen außerhalb dieser Mittelachse erfassen ggf. empirische Korrekturen. Grundsätzlich berücksichtigen Plume-Formeln folgende Einflussbedingungen:

- Bedingungen des Brandes (hier: Wärmefreisetzungsrate \dot{Q}) zur Beschreibung des thermisch bedingten Aufstroms,

¹²⁴ Vgl. Abschn. 2.2

¹²⁵ Siehe Abb. 1

¹²⁶ Vgl. [53]

¹²⁷ In angepassten Formulierungen (z.B. Plume nach Zukoski, vgl. [53]) werden verschiedene Eingangsgrößen zu Gesamtwerten zusammengefasst, so dass diese nicht unmittelbar erkennbar sind. Weiterhin sind verschiedene Anwendungsbedingungen (z.B. vorgegebene Umgebungstemperatur) zu beachten.

- Umgebungsbedingungen (hier: Umgebungstemperatur und -dichte) zur Erfassung der thermodynamischen Effekte der Lufteinmischung,
- betrachtete Aufstiegshöhe zur Berücksichtigung der Strecke, über die eine Lufteinmischung erfolgt und die somit die eingemischte Luftmasse mitbestimmt.

Über die Ermittlung von Einzelwerten hinaus ist es für die Abschätzung einer zeitlichen Entwicklung der Ergebnisparameter erforderlich, die Berechnungen mit veränderten Eingangsgrößen zu wiederholen, was ggf. einen hohen Aufwand mit sich bringt. Darüber hinaus bleiben die sich möglicherweise ändernden Verhältnisse innerhalb des Brandraumes (z.B. Temperaturerhöhung, Ausbildung einer Rauchsicht etc.) unbeachtet. Plume-Modelle eignen sich durch die Anlage als Handrechenverfahren daher hauptsächlich für überschlägige Worst-Case-Abschätzungen im Sinne von singulären Betrachtungen.

4.1.2 Ceiling-Jet-Modelle

Trifft der aufwärts gerichtete Rauchstrom eines Brandes auf ein horizontales Hindernis (bspw. die Raumdecke), erfolgt eine radiale Ausbreitung oberhalb des Brandes unter dem Hindernis hinweg (sog. Ceiling Jet¹²⁸). Analog zu den Formulierungen von Plume-Modellen existieren verschiedene Ansätze zur Beschreibung der relevanten Verhältnisse innerhalb eines Ceiling Jets. Die Strömungsparameter ermitteln sich ebenfalls aus zusammengehörenden Formulierungen, welche abstandsabhängig die Temperaturen und Geschwindigkeiten beschreiben. Die beispielhaft vorgestellten Gl. 27 und 28 nach Alpert¹²⁹ beruhen auf Versuchsergebnissen und thermodynamischen Grundlagenbetrachtungen.

für $r_{rad}/H \leq 0,15$:

$$u_{max} = 0,960 \left(\frac{\dot{Q}}{H} \right)^{1/3} \cdot \frac{m/s \cdot m^{1/3}}{kW^{1/3}} [m/s] \quad (27)$$

$$T_{max} - T_{\infty} = \frac{16,9 \dot{Q}^{2/3}}{H^{5/3}} \frac{K \cdot m^{5/3}}{kW^{2/3}} [K]$$

für $r_{rad}/H \geq 0,15$:

$$u_{max} = 0,195 \frac{\dot{Q}^{1/3} \cdot H^{1/2}}{r_{rad}^{5/6}} \cdot \frac{m/s \cdot m^{1/3}}{kW^{1/3}} [m/s] \quad (28)$$

$$T_{max} - T_{\infty} = \frac{5,38 (\dot{Q}/r_{rad})^{2/3}}{H} \frac{K \cdot m^{5/3}}{kW^{2/3}} [K]$$

Die Beschreibung eines Ceiling Jets bezieht prinzipiell die Parameter eines Plumes ein. Als weitere Größe verwenden die Relationen den Abstand zwischen dem Betrachtungspunkt und dem Auftreffpunkt auf das Hindernis, der die Distanz, über die die Abkühlung und Verlangsamung der Strömung stattfindet, charakterisiert [53].

Wie auch die Plume-Modelle dienen Ansätze zu Ceiling Jets lediglich der Berechnung von Einzelergebnissen, die für eine bestimmte Position gelten. Die zeitabhängige Berechnung der Verhältnisse oder die Schaffung eines Überblicks ist mit erheblichem Aufwand verbunden. Die (Umgebungs-) Bedingungen innerhalb des Brandraumes bleiben ebenso unberücksichtigt. Formulierungen zur Berechnung relevanter Parameter von Ceiling Jets sind daher vornehmlich für Detailbetrachtungen geeignet, z.B. zur Auslösedauer von Brandmeldern in bestimmten Abständen zu einem potentiellen Brandherd.

4.1.3 Modelle zur Entrauchung über Raumöffnungen

Die Rauchausbreitung zwischen Räumen bzw. ins Freie tritt durch Öffnungen im Anschluss an Plume und Ceiling Jet (z.B. aus einer definierten Rauchsicht nach Unterschreitung der Öffnungsoberkante) ein. Die Durchströmung

¹²⁸ Vgl. Abschn. 2.2

¹²⁹ Vgl. [9]

erfolgt an der am höchsten gelegenen Stelle, verursacht durch die thermisch bedingte, geringe Dichte des Rauches. Durch die Massenerhaltung bzw. den resultierenden Unterdruck innerhalb des Raums strömt gleichzeitig Umgebungsluft durch den unteren Teil der Öffnung oder andere Verbindungen ein. Die Strömungsgeschwindigkeit hängt einerseits von der brandbedingten Temperatur der Rauchgase, die zum Aufbau eines entsprechenden hydrodynamischen Drucks führt, und der zur Verfügung stehenden Fläche (resultierend aus der Öffnungsbreite sowie der Höhe der Überströmung durch die Rauchschrift) ab. Andererseits beeinflussen die Einströmfläche und die Dichte der Umgebungsluft die Strömung [51].

Zur Berechnung der ein- und ausströmenden Massenströme steht ein aus thermodynamischen Gleichgewichts-betrachtungen¹³⁰ resultierender Ansatz zur Verfügung, der verschiedene Fälle

- der Verhältnisse innerhalb des Raumes (z.B. homogene und heterogene Raumtemperatur),
- der Ausbildung von Druckzonen über die Öffnung hinweg und
- der Lage der Öffnung (in der Wand oder an der Decke)

unterscheidet¹³¹. Allgemein erfolgen die angestellten Berechnungen der Massenströme auf Basis verschiedener Beziehungen, die miteinander verknüpft werden und auf der Bernoulli-Gleichung¹³² beruhen. Die resultierenden Gleichungen sind konzeptionell - mit Anpassungen auf Verhältnisse in Brandräumen und auf Zu- und Abluftflächen - mit den Betrachtungen nach Abschn. 3.3.2 vergleichbar. Die Berechnungssystematik beinhaltet die nachstehende Abfolge:

- Ermittlung des hydrodynamischen, thermisch bedingten Drucks, der aus der Rauchschrift auf die Öffnung wirkt, dabei Berücksichtigung der Schichthöhe zwischen Unterkante der Rauchschrift und Unterkante der Öffnung sowie des Druckverhältnisses zwischen Rauch und Umgebung;
- Ermittlung der auf dem hydrodynamischen Druck beruhenden Strömungsgeschwindigkeit des Rauchausstroms;
- Ermittlung bzw. Einbeziehung der zur Durchströmung zur Verfügung stehenden Fläche der Öffnung (z.B. aus Öffnungsbreite und Abstand zwischen den Unterkanten der Rauchschrift sowie der Öffnung), so dass in Verbindung mit der Geschwindigkeit der Volumenstrom des Rauchaustritts ermittelt werden kann;
- Abschätzung des Massenstroms unter Verwendung der Rauchdichte, basierend auf Parametern des Brandereignisses (z.B. über Plumeformeln, vgl. Abschn. 4.1.1);
- analoge Ermittlung des Massenstroms der einströmenden Umgebungsluft bei Verwendung der entsprechenden Stoffgrößen. [9, 51]

Die Ermittlung der ein- und austretenden Massenströme bildet für verschiedene Anordnungen (z.B. Entrauchung im Dachbereich, Zuluftöffnungen in Seitenwänden) ein Verfahren zur Festlegung geeigneter Entrauchungsflächen. Dies setzt jedoch bekannte Verhältnisse innerhalb des Brandraumes voraus (Temperaturen der Rauchschrift etc.). Ergänzend zu den Verfahren der Plume- und Ceiling-Jet-Modelle ist für die Entrauchungsverhältnisse eine zeitabhängige Berechnung ebenfalls schwer durchzuführen, da sich die Ergebnisse untereinander beeinflussen. Die Modellgleichungen schätzen im Wesentlichen die Verhältnis ab oder dienen der rückwärts gerichteten Berechnung.

4.1.4 Zusammenfassung Handrechenverfahren

Die vorgestellten Handrechenverfahren zur Bestimmung der Verhältnisse innerhalb des Plumes, des Ceiling-Jets sowie zur Entrauchung über Raumöffnungen bestehen allesamt als singuläre Modelle, die sich mit Detailbetrachtungen einzelner, bei einem Brandereignis eintretender Bedingungen befassen. Aufgrund der fehlenden Verknüpfung untereinander sowie der Betrachtung einzelner Zeitpunkte ist es mit erheblichem Aufwand verbunden, sich unter

¹³⁰ Zentrale Annahme: Massenerhaltung innerhalb des Raumes, vgl. Abschn. 2.

¹³¹ Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird an dieser Stelle auf die exakte Darstellung der unterschiedlichen Fallbetrachtungen sowie der Modellgleichungen verzichtet und stattdessen die einheitliche Vorgehensweise bzw. die Grundlage der Betrachtungen erläutert.

¹³² Vgl. [5]

Einbeziehung aller Ansätze einen Überblick aller Phänomene sowie einen Anhaltspunkt der zeitabhängigen Entwicklung der Verhältnisse zu verschaffen. Weiterhin bleiben unterschiedliche Beeinflussungen untereinander bzw. Interaktionen mit dem betrachteten Raum (z.B. Temperaturerhöhung infolge von Wärmestrahlung) unberücksichtigt, so dass ggf. weitere Modelle für eine vollständige, zusammenhängende Betrachtung implementiert werden müssten. Innerhalb der Betrachtungspunkte bestehen weiterhin unterschiedliche Formulierungen, die an verschiedene Rahmenbedingungen geknüpft sind. Dies schränkt ggf. die Gültigkeit von Berechnungsergebnissen ein bzw. erfordert eine situationspezifische Auswahl.

Übertragungen von Modellen in die Gefährdungsbeurteilung sind nur dann möglich, wenn Luftkonzentrationen erfasst und berechnet werden. Brandschutztechnische Handrechenmodelle verfolgen keine Erfassung und Berechnung der Ausbreitung kritischer Komponenten, die durch das Brandereignis freigesetzt werden und sich im Folgenden als Rauchbestandteil ausbreiten. Eine derartige Betrachtung ist nicht unmittelbar implementiert und könnte somit lediglich durch Verknüpfung mit anderen Ansätzen (z.B. Annahme freigesetzter Massen bzw. zusätzliche Modell-Konstruktion und Ermittlung von Volumen der sich ausbildenden Rauchsicht etc.) einbezogen werden, wobei ein erheblicher Aufwand aus der Anlage der statischen, nicht miteinander verknüpften Modelle entsteht. Dementsprechend bietet sich eine Verwendung für Betrachtungen des Arbeitsschutzes nicht an.

4.2 Computerbasierte Rechenverfahren

Neben den Handrechenverfahren greift die Analyse der Rauchausbreitung und der sich einstellenden Verhältnisse auf computerbasierte Rechenverfahren zurück. Grundsätzlich werden die Konzepte

- der Zonenmodelle sowie
- der Feldmodelle

unterschieden, die von unterschiedlichen Grundannahmen ausgehen. Daraus folgen verschiedene Vorgehensweisen und Konzepte¹³³.

Verschiedene Programme setzen die Konzepte konkret um. Zur Verdeutlichung der mathematischen und logischen Zusammenhänge stützen sich die Erläuterungen dieses Abschnitts auf konkrete Programmkonzepte¹³⁴. Als Beispiele werden folgende Verfahren beschrieben, die jeweils vom National Institute of Standards and Technology (NIST), USA als im Brandschutz anerkannte Forschungseinrichtung veröffentlicht und weiterentwickelt werden:

- CFAST - Consolidated Model of Fire Growth and Smoke Transport, Version 6 (Zonenmodell [54, 55]),
- FDS - Fire Dynamics Simulator, Version 5¹³⁵ (Feldmodell [56–59]).

Die grundlegenden Ansätze der Modellkonzepte sind analog zur Zusammenfassung der Verfahren in Abschn. 3 als tabellarische Übersichten dargestellt, die einen Vergleich sowie potentielle Rückschlüsse auf eine weitere Übertragung in Arbeitsschutz-Betrachtungen ermöglichen. Die Zusammenfassungen verwenden folgende Merkmale mit nachstehenden methodischen Hintergründen:

- Anwendungs- bzw. Gültigkeitsbereich: Bedingungen der Anwendung sowie erforderliche Einschränkungen, damit Formulierungen Gültigkeit besitzen;
- Eingebundene Erhaltungsgleichungen: Umfang der Beachtung der zentralen Erhaltungsgleichungen (entsprechend Abschn. 2) zur genauen Beschreibung der auftretenden thermodynamischen Bedingungen und Strömungsverhältnisse;

¹³³ Vgl. [51]

¹³⁴ Die im Folgenden genannten Beispiele werden aufgrund ihrer eindeutigen Dokumentation der verwendeten Algorithmen, der allgemeinen Akzeptanz und Etablierung im Rahmen einer weltweiten Anwendung sowie der vorhandenen Validierungsstudien angeführt. Neben den genannten Verfahren existieren weitere Umsetzungen, die ähnliche Lösungsverfahren verwenden.

¹³⁵ Seit Oktober 2013 ist das Modell in der Version 6 veröffentlicht. Diese verfügt über weitergehende Funktionen und Anpassungen in Details der mathematischen Lösungsstrategien, die grundsätzliche Konzeption ist jedoch deckungsgleich.

- Grundannahmen des Modells: Vereinfachungen der Realität, unter denen eine Modellableitung stattgefunden hat und die ggf. den Anwendungs- und Gültigkeitsbereich mitbestimmen sowie Besonderheiten der Betrachtungen aufzeigen;
- Konzept der Ausbreitungsrechnung und Grundlage der Modellkonzeption: konzeptionelle Umsetzung der Abbildung der eintretenden Rauchausbreitung sowie prinzipielle Umsetzung im Berechnungsalgorithmus;
- Interaktion der Kontrollvolumen: Verknüpfung der unterschiedlichen Berechnungsgebiete innerhalb der Modelle sowie resultierende Einschränkung der Anwendung;
- Eingebundene Eingabeparameter: Darstellung der erforderlichen Eingangsgrößen der Berechnungen sowie Einbeziehung von umgebungs-, stoff- und brandspezifischen Eigenschaften, die ggf. Anknüpfungspunkte an vorgelagerte oder ergänzende Betrachtungen darstellen;
- Empirischer Einfluss: Beeinflussung der Ergebnisse durch empirische Einschränkungen bzw. Ergänzungen, die bspw. aus spezifischen Betrachtungen resultieren;
- Ergebnisparameter: Ergebnisgrößen und potentielle Anknüpfungspunkte zu nachgeschalteten oder ergänzenden Betrachtungen.

Vorhandene Untermodelle werden gleichermaßen als tabellarische Übersicht dargestellt, die jedoch auf direkte Vergleichsaspekte verzichten.

4.2.1 Konzept der Zonenmodelle am Beispiel CFAST (Version 6)

Das Grundkonzept brandschutztechnischer Zonenmodelle beruht auf der zentralen Annahme, dass sich im Brandfall eine Schichtung des Rauches unterhalb der Decke (sog. Rauchschiicht, engl. "hot layer"; vgl. Abb. 7) sowie eine raucharme Schicht in Bodennähe (engl. "cold layer"; vgl. Abb. 7) einstellt und - ohne weitere Verwirbelungen - aufrecht erhalten bleibt. Die Ausprägung der Zonen hängt von der Rauchbildung - resultierend aus dem verwendeten Brand-szenario - und den Ventilationsbedingungen ab. Im Gegensatz zu den im Rahmen des Arbeitsschutzes verwendeten Zonenmodellen (siehe Abschn. 3.4.2) sind die zwei Kontrollvolumen verbindlich übereinander angeordnet. Innerhalb dieser Zonen liegen aufgrund der thermischen Bedingungen unterschiedliche, durch eine volumenbezogene Mittelung als jeweils homogen angenommene Stoffeigenschaften vor. Dies gilt insbesondere für ermittelte Temperaturen, die Rauchgasdichte, die innere Energie, den Druck und die Rauchgaskonzentration¹³⁶.

Die Berechnungen während des Brandverlaufs erfordern mathematische Interaktionen der Zonen, um die jeweiligen Stoffeigenschaften zu ermitteln. Sog. Quellterme beschreiben den Plume bis zum Eintritt in die Rauchschiicht¹³⁷. Dabei werden die Erkenntnisse und mathematischen Verhältnisse der Plume-Modelle aus den Handrechenverfahren zeitabhängig und mit variabel verknüpften Eingangsdaten verwendet. Die Plume-Modelle bilden die Grundlage der Algorithmen bzw. der Berechnungssystematik. Zonenmodelle erzwingen dadurch gewissermaßen eine aufwärts gerichtete Rauchströmung, welche die Prinzipien der Massen- und Energieerhaltung berücksichtigt. Das konzeptionelle Prinzip der Zonenmodelle verdeutlicht Abb. 7.

Weitere Quellterme beschreiben die Interaktion unmittelbar zwischen den Kontrollvolumen innerhalb eines Raumes oder Rauchströmungen in andere Räume. Dabei kommen z.B. Ansätze des Handrechenverfahrens zur Entrauchung über Raumöffnungen, empirische Anteilsrechnungen oder modifizierte Plume-Modelle zum Einsatz. Ebenso besteht die generelle Möglichkeit, aus den vereinheitlichten Parametern der Kontrollvolumen thermische Bedingungen, z.B. zur Wärmeübertragung auf Umfassungsbauteile, abzuleiten.

Konkrete Umsetzungen brandschutztechnischer Zonenmodelle basieren auf verschiedenen Annahmen und Vorgehensweisen, die zu unterschiedlichen Anwendungsgrenzen, Ein- und Ausgabewerten und empirischen Einflussnahmen etc. führen. Die gemeinsame zentrale Anlage brandschutztechnischer Zonenmodelle ist in Tab. 13 zusammengefasst.

¹³⁶ Die Verwendung des Konzepts der räumlichen Mittelung führt zu einer geometrischen Begrenzung der Anwendbarkeit der Zonenmodelle, da eine Abhängigkeit der Größen zum Abstand des Brandherdes besteht (vgl. Abschn. 4.1.1 und Abschn. 4.1.2).

¹³⁷ Die Bestimmung der freien Höhe (entspricht der Aufstiegshöhe) ist durch Ermittlung des Rauchvolumens in Verbindung mit der für die Rauchschiicht gemittelten Temperatur möglich.

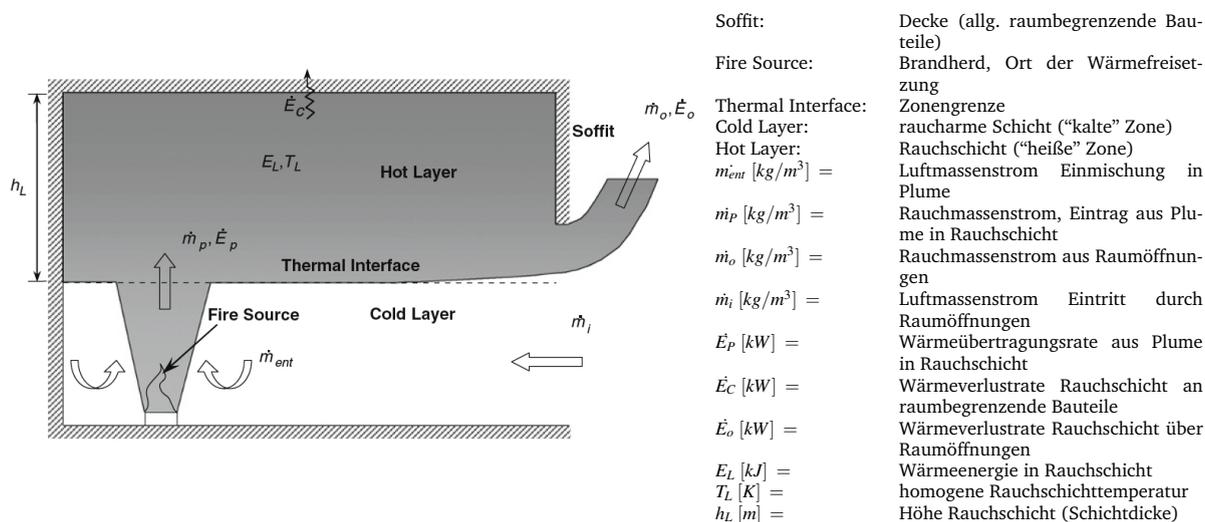


Abbildung 7: Konzeptioneller Ansatz brandschutztechnischer Zonenmodelle [9]

Aspekt	Eigenschaft Modellkonzeption
Anwendungs- bzw. Gültigkeitsbereich	Ausbreitung Brandrauch innerhalb von Räumen; geometrische Begrenzung durch Schichtbildung; Anwendungsgrenzen durch verwendete Quellterme für Plume ¹³⁸
Eingebundene Erhaltungsgleichungen (vgl. Abschn. 2)	Massen- und Energieerhaltung über richtungsabhängige Quellterme
Grundannahmen des Modells	Ausbildung raucharme Schicht und Rauchschicht übereinander durch thermische Verhältnisse; Kontrollvolumen weisen jeweils homogene Eigenschaften auf; Rauchaufstieg über Brandherd in Rauchschicht; Verbleib Rauch in Rauchschicht (keine diffusive Verrauchung durch Absinken)
Konzept der Ausbreitungsrechnung und Grundlage der Modellkonzeption	Ermittlung des in die Rauchschicht eintretenden Rauchgasmassenstroms, der im Folgenden als flächige Rauchschicht angenommen wird; keine Ermittlung der ortsgenaue Rauchausbreitung (ggf. Ausnahme: Ceiling Jet in langen Räumen, vgl. Tab. 14); Berechnung der Rauchausbreitung in andere Räume bzw. ins Freie
Interaktion der Kontrollvolumen	Verwendung Quellterme (Brandherd und Rauchschicht bzw. zwischen Räumen oder Räumen und dem Freien) sowie Anteile von Strömungen (zwischen Zonen innerhalb eines Raumes)
Eingebundene Eingabeparameter	Geometrische Rahmenbedingungen; thermodynamische Umgebungsbedingungen; Stoffeigenschaften auftretender Brennstoffe, Komponenten und Bauteile sowie Bauteile; Parameter des Brandszenarios samt massenbezogener Anteile der Rauchgaskomponenten; strömungsmechanische Rahmenbedingungen (z.B. Zuluftführung)
Empirischer Einfluss	Verwendung empirisch angepasster Quellterme (Plume-Modelle) mit ggf. konkreten Anwendungsgrenzen; Verwendung empirischer Faktoren der Kontrollvolumen-Interaktion
Ergebnisparameter	Höhe, zeitliche Entwicklung und massenbezogene Zusammensetzung der raucharmen Schicht bzw. der korrespondierenden Rauchschicht; Temperaturentwicklung in Kontrollvolumen; ggf. weitere Daten (z.B. Wärmeübertragung) gem. Untermodelle ¹³⁹ (potentielle Eingangsgröße zur Bewertung über Massenanteile bzw. Konzentrationen der ermittelten Rauchzusammensetzung)

Tabelle 13: Zusammenfassung: Konzeptionelle Anlage brandschutztechnischer Zonenmodelle

Verschiedene programmatische Umsetzungen beinhalten zudem weitere Untermodelle, welche die grundlegende

¹³⁸ Plume-Modelle sind ggf. an Versuchsdaten angepasst, die die jeweiligen Versuchs- bzw. Brandbedingungen und somit auch die Anwendungsgrenzen beeinflussen.

¹³⁹ Siehe Tab. 14

Vorgehensweise untersetzen oder weitere Betrachtungen (z.B. zum Ceiling Jet) ergänzen. Wie auch die konkrete mathematischen Umsetzung der Grundlage können sich diese zwischen den verschiedenen Programmen unterscheiden. Beim als Beispiel herangezogenen Modell CFAST, Version 6 finden die in Tab. 14 angeführten Untermodelle¹⁴⁰ Verwendung, die dementsprechende Eingabewerte (unmittelbar durch Nutzer oder durch programmatische Ergebnisverknüpfung) erfordern.

<i>Untermodell</i>	Phänomenologische Notwendigkeit und Nutzen	Programmatische Umsetzung
<i>Verbrennungsmodell</i>	Ableitung Wärmefreisetzungsrate in Abhängigkeit zur Sauerstoffverfügbarkeit	Ermittlung Wärmefreisetzungsrate über Indikator des in Verbrennungsreaktion mit vorhandenem Brennstoff umgesetzten Sauerstoffs
	Darstellung Verbrennungsreaktion in Abhängigkeit zu zeitlich variabler Pyrolyserate des Brennstoffs und der Sauerstoffverfügbarkeit (aus Brennstoff und Zuluft)	Ermittlung Vollständigkeit und Sauerstoffverbrauch der Oxidation sowie Massenstrom der Verbrennungsprodukte anhand Brennstoff und Massenanteilen; Vorgabe der Brennstoffzusammensetzung
	Darstellung des Weitertransports von unverbranntem Brennstoff in Rauchmassenstrom	Möglichkeit der Zündung im unterventilierten Fall ¹⁴¹ , wenn an anderer Stelle (Übergang in anderen Raum oder ins Freie) Sauerstoff- und Zündenergie ausreichen
	Alternative Berücksichtigung vorgegebener Wärmefreisetzungsrate	Vorgabe vollständiges Brandszenario (Angabe von zeitabhängiger Wärmefreisetzungsrate und Brandfläche) durch Nutzer ohne Verwendung implementierter (Kontroll-) Funktionen, ggf. Nachteil: keine Betrachtung Verbrennungsreaktion und entstehender Massenanteile möglich
<i>Plume-Modell</i>	Berücksichtigung Massen- und Energietransport vom Brand in die Rauchschicht	Verwendung Korrelationen nach McCaffrey ¹⁴² und Heskestad ¹⁴³ unter Ansatz der konvektiven Wärmefreisetzungsrate; Annahme einer hinreichenden Ausprägung (ausreichender brandbedingter Rauchaufstieg) zur Gewährleistung einer vollständigen Überführung zwischen den Zonen; Grundlage zur thermodynamischen Beschreibung des Kontrollvolumens der Rauchschicht
	Ermittlung der Vergrößerung des Rauchmassenstroms während der Aufstiegsströmung durch Turbulenz	
	Ermittlung der Entwicklung von Temperatur und Geschwindigkeit bei Eintritt in Rauchschicht	
<i>Ceiling-Jet-Modell</i>	Darstellung der Verlangsamung der Durchströmung und Rauchschichtbildung in langgestreckten Räumen	Berücksichtigung des Einflusses der Abkühlung des Massenstroms auf zeitliche Ausbildung einer Rauchschicht durch Zugriff auf Datenbank vorgerechneter Verzögerungswerte; manuelle Ausweisung als langgestreckter Raum erforderlich
<i>Schicht-Modell</i>	Berücksichtigung der zeitlich-dynamischen Entwicklungen der Kontrollvolumen	Ermittlung Rauchschicht-Volumen als Platzbedarf über maximalen Rauchmassenstrom und Dichte (Abhängigkeit zu homogener Temperatur der Rauchschicht) sowie Raumvolumen (korrespondierende Ermittlung Volumen der raucharmen Schicht)
<i>Strömungsmodell für Öffnungen</i>	Erfassung Rauchausbreitung in andere Räume sowie Einströmung von Umgebungsluft in Brandraum	Ermittlung Strömungsgeschwindigkeit durch Öffnungen anhand Bernoulli-Gleichung; Ermittlung Ventilationsbedingungen in Verbindung mit Verbrennungsmodell (Sauerstoffbedarf zur Oxidation der Pyrolyseprodukte)
	Darstellung Entrauchung von Räumen mittels natürlicher Rauchabzugsanlagen	Ermittlung Strömungsgeschwindigkeit und Massenstrom ins Freie über Bernoulli-Gleichung; Verknüpfung mit Schichtmodell zur Darstellung des Einflusses auf die Zonen-Volumen
	Darstellung Entrauchung von Räumen mittels maschinell betriebener Rauchabzugsanlagen	Vorgabe statischer Abführung eines definierten Volumens an definierter Position; Ermittlung des entsprechend abgeführten Massenstroms über Dichte (aus Temperatur) des jeweiligen Kontrollvolumens; gleichsame Darstellung der Zuluftführung bzw. Lüftungstechnischen Verbindung von Räumen möglich

¹⁴⁰ Die verschiedenen Untermodelle sind lediglich hinsichtlich ihrer Nutzung aufgeführt. Detaillierte Erläuterungen und mathematische Zusammenhänge stellt [54] dar.

¹⁴¹ Unzureichende Sauerstoffverfügbarkeit zum vollständigen Ablauf einer Verbrennungsreaktion des vorhandenen Brennstoffs.

¹⁴² Die Formulierungen nach McCaffrey beruhen auf Untersuchungen von kontrollierten Methan-Bränden [53].

¹⁴³ Die Formulierungen nach Heskestad beruhen auf der Auswertung von Bränden unterschiedlicher "exemplarischer" Brennstoffe, so dass das Modell eine Zusammenfassung verschiedener Bedingungen darstellt [9].

<i>Untermmodell</i>	Phänomenologische Notwendigkeit und Nutzen	Programmatische Umsetzung
	Darstellung Massenströme und schichtbezogener Konzentrationen von Verbrennungsprodukten	Berechnung der stoffbezogenen Ausbreitung innerhalb der Schichten unter Berücksichtigung möglicher Wirbelungen und Interaktionen in vertikalen Öffnungen durch gegensätzliche Strömungen; Konzentrationen über Rauchkomponenten (Vorgabe von Massenanteilen bei Verbrennung) und Vermischung
	Berücksichtigung Massenstrom-Erhöhung durch ggf. erneuten Aufstieg in angeschlossenem Raum	Verwendung eines äquivalenten Plume-Modells nach McCaffrey (Anpassung über Reduzierung der freien Aufstieghöhe)
<i>Modelle der Wärmeübertragung</i>	Berücksichtigung konvektive Wärmeübertragung innerhalb des Plume-Modells in die Rauchgasschicht	Ansatz von festzulegendem Wert der Gesamtwärmefreisetzungsrate (Vorgabe eines Strahlungswärmeanteils) des Brandes zur Verwendung in Plume-Modell
	Berücksichtigung Wärmestrahlung der Flamme in Raum	Ansatz von festzulegendem Wert der Gesamtwärmefreisetzungsrate des Brandes (Vorgabe eines Strahlungswärmeanteils); Verwendung der Konzepte der Konfigurationsfaktoren ¹⁴⁴ , des diffusen grauen Strahlers ¹⁴⁵ für Objekte sowie der Charakterisierung der Erwärmung der Umgebungsluft anhand festgelegter Absorption bzw. Transmission; Annahme des quasi-stationären Zustands (langsame Erwärmung des Raumes)
	Berücksichtigung Wärmeleitung innerhalb von Bauteilen	Ansatz der eindimensionalen Wärmeleitung in Normalrichtung zur Oberfläche in Interaktion mit beidseitiger Konvektion und Wärmestrahlung, Verknüpfung zu thermodynamischen Bedingungen angrenzender Kontrollvolumen als Bereiche unterschiedlicher Temperaturen
	Berücksichtigung Wärmestrahlung raumbegrenzender Bauteile auf andere Räume	Erfassung analog zu Brandraum (Konfigurationsfaktoren etc., siehe oben), Einteilung Fläche in Temperaturbereiche entsprechend anderseitigem Kontakt mit Rauchgasschicht
	Zeitabhängige Wärmebilanzierung jedes Gegenstands und Bauteils zur Erfassung von Erwärmungen	Verknüpfung der Einzelmodelle der Konvektion, Wärmestrahlung und -leitung als Emissions- und Immissionsgrößen; Annahme stationärer Zustand (langsame Erwärmung und Beachtung thermodynamischer Größen)
<i>Modell der Ausbreitung von Verbrennungsprodukten</i>	Ermittlung zonenbezogener Konzentrationen entstehender Stoffe	Berechnung der zeitlichen, stoffbezogenen Ausbreitung in (homogenes) Kontrollvolumen; Ergänzung des Strömungsmodells für Öffnungen; Grundlage: Angabe von Massenanteilen in Brennstoff bzw. Rauch; Bezug: Volumen der jeweiligen Zone
	Berücksichtigung Senke für Salzsäuregas durch Abscheidung an Gegenständen	Berechnung der Senkung der Salzsäure-Konzentration über Gleichgewichtsreaktion an Bauteilen und Objekten
<i>Modelle für Sprinkler und Brandmelder</i>	Ableitung Auslösezeitpunkt von Sprinklerköpfen und Brandmeldern der Kenngröße Wärme im Brandraum	Bestimmung des Zeitraums durch empirische Korrelation zwischen ortsabhängiger Temperatur in Deckennähe (siehe Konvektion) und Response Time Index (RTI-Wert ¹⁴⁶)
	Beachtung Beeinflussung des Brandverlaufs durch eingebrachtes Tropfenspektrum (Sprinklerauslösung)	Empirische Erfassung der Verminderung der Wärmefreisetzungsrate anhand spezifischer Tropfendichte und -spektrum aus Konstruktion; Annahme der Auslösung lediglich eines Sprinklers

Tabelle 14: Beispielhafte Darstellung möglicher Untermodelle in Zonenmodellen (CFAST, Version 6) [54, 55]

Zur Nutzung des Modells CFAST, Version 6 werden unterschiedliche Parameter als Eingabewerte durch den Anwender erforderlich. Dazu steht eine graphische Eingabe-Oberfläche zur Verfügung, über die z.B. die Parametrisierung der geometrischen Verhältnisse, der Eigenschaften von Einrichtungen zur Rauchableitung sowie des berücksichtigten Brandszenarios erfolgt.

Brandschutztechnische Zonenmodelle bieten eine etablierte Möglichkeit zur Analyse der Rauchausbreitung innerhalb von Gebäuden mit einer Reihe von weitergehenden Betrachtungen (z.B. Wärmeübertragung auf Bauteile). Aufgrund

¹⁴⁴ Bestimmung der eintreffenden Wärmestrahlung auf einen Punkt in Abhängigkeit zum Abstand und zum Raumwinkel als seitliche Versetzung über Pauschalwerte, die für verschiedene geometrische Anordnungen tabelliert sind (vgl. [9, 36]).

¹⁴⁵ Keine Annahme vollständiger Wärmestrahlungsabsorption durch Bauteile und Objekte, sondern Verwendung pauschalisierter Absorptionskoeffizienten zur Beschreibung der Energieerhaltung (vgl. [9]).

¹⁴⁶ Aus dem Englischen: Index der Auslösezeit; Wert zur zusammengefassten Beschreibung des thermischen Verhaltens der verwendeten Stoffe und der Konstruktion thermischer Auslösemechanismen.

der weitreichenden Annahmen (z.B. Bildung homogener Zonen) ist eine Durchführung der Berechnungen in relativ kurzer Zeit möglich. Aufgrund dessen eignen sich Zonenmodelle vor allem für sog. Parameterstudien, die Eingangsgrößen gezielt variieren und den Einfluss auf die Ergebnisse untersuchen.

Analog zu den Ansätzen der Zonenmodelle des Arbeitsschutzes beruhen brandschutztechnische Zonenmodelle auf der angenommenen Ausbildung von Kontrollvolumen mit homogenen Stoffeigenschaften. Die Festlegung der einzelnen Kontrollvolumen geschieht allerdings zeitabhängig-variabel und durch das Programm selbstständig, ein Eingriff durch den Anwender ist nicht möglich. Die Möglichkeit zur Ermittlung der ortsgenauen Rauchausbreitung und eingehender Stoffkonzentrationen besteht jedoch nicht. Weiterhin weichen Ergebnisse durch die volumenbezogene Mittelung der relevanten Parameter in Abhängigkeit zur Größe der Kontrollvolumen teils erheblich von der Realität ab (abstandsabhängige Parameterbeeinflussung). Somit konnte im Rahmen von Validierungsarbeiten eine angemessene Genauigkeit innerhalb bestimmter Anwendungsgrenzen erzielt werden¹⁴⁷. Für große Geometrien sind die Ergebnisse jedoch kritisch zu hinterfragen. Weiterhin besteht eine Abhängigkeit der Ergebnisse zur jeweiligen Datengrundlage der verwendeten Quellterme (hier: Plume-Modelle nach McCaffrey und Heskestad) und ggf. erforderlichen Einschränkungen der Anwendbarkeit.

Entsprechend der Erläuterung in [3] sind brandschutztechnische Zonenmodelle nicht zur Verwendung für Betrachtungen des Arbeitsschutzes geeignet. Vornehmlich ist dies die verbindliche Einbindung eines Brandereignisses in den Berechnungsgang geschuldet, wobei Konzentrationen lediglich über vorzugebende Massenanteile angegeben werden können. Weiterhin ist die Unterteilung in zwei übereinanderliegende Kontrollvolumen i.A. ohne praktische Relevanz.

4.2.2 Feldmodelle

Neben brandschutztechnischen Zonenmodellen, die speziell für die Betrachtung von brandbedingten Verhältnissen in Räumen abgeleitet und entwickelt wurden, stehen zur Ausbreitungsrechnung von Rauch und Verbrennungsprodukten sog. Feldmodelle zur Verfügung. Deren Grundlage bilden die Ansätze der sog. Computational Fluid Dynamics (CFD), die als rechnerische Strömungsmechanik in verschiedenen wissenschaftlichen Disziplinen Anwendung finden (z.B. Aerodynamik im Flugzeugbau, Maschinenkonstruktion etc.). Die im Brandschutz verwendeten Modelle sind auf brandtypische Bedingungen angepasst (Vereinfachung von Berechnungssystematiken, zusätzliche Untermodelle etc.), so dass sich eine Spezialisierung der allgemeinen Grundlagen ergibt.

Entgegen der Einteilung übereinanderliegender Kontrollvolumen in Zonenmodellen mit jeweils homogenen Eigenschaften (raucharme Schicht und Rauchsicht) erfolgt für die Nutzung von Feldmodellen eine Unterteilung der zu betrachtenden Geometrie anhand einer Gitterstruktur. Aus der dreidimensionalen Anordnung dieser Struktur folgt eine Aufteilung des Raumes in würfelförmige Zellen mit definierten Kantenlängen (sog. räumliche Diskretisierung¹⁴⁸). Diese Kontrollvolumen (hier: "Felder") stehen mathematisch miteinander in Interaktion, wobei zeitabhängig die interessierenden Größen berechnet werden können. Es erfolgt somit nicht die Verknüpfung von lediglich zwei, sondern von einer in Abhängigkeit zur räumlichen Genauigkeit gewählten Anzahl an Kontrollvolumen, die sowohl über- als auch nebeneinander angeordnet sind. Da die Kantenlängen üblicherweise bei Dimensionen von ca. 0,20 m bis 0,50 m liegen, ergibt sich eine wesentlich verfeinerte Unterteilung des Betrachtungsraumes durch die Kontrollvolumen, die schnell bis zur Verwendung mehrerer Millionen Felder¹⁴⁹ führen. Durch die dreidimensionale Anordnung der Kontrollvolumen besteht mit verschiedenen Berechnungsansätzen und -modellen die Möglichkeit, verschiedene Größen für unterschiedliche Punkte des Betrachtungsraumes numerisch zu ermitteln. Die Größen sind ebenfalls dreidimensional aufgelöst.

Die verwendeten Modelle basieren auf den Prinzipien der Massen-, Energie- und Impulserhaltung, deren mathema-

¹⁴⁷ Vgl. [54]

¹⁴⁸ Unterteilung eines Betrachtungsraumes in Teilvolumen, für die mathematische Betrachtungen möglich sind.

¹⁴⁹ Bei der Verwendung einer Kantenlänge von 0,20 m erfolgt die Diskretisierung eines einzelnen m^3 über 125 Kontrollvolumen.

tische Umsetzung die sog. Navier-Stokes-Gleichungen¹⁵⁰ bilden. Die allgemeine Form der Gleichungen, die in numerischen Lösungsansätzen für alle drei Raumrichtungen gelöst werden, verwendet die in Gl. 29 bis 31 angeführten Relationen¹⁵¹ [5].

- Massenerhaltung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \cdot \vec{v}) = 0 \quad (29)$$

- Impulserhaltung:

$$\rho_l \cdot \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right) = -\nabla p + \mu \cdot \Delta \vec{v} - \rho_l \cdot \vec{g} \quad (30)$$

- Energieerhaltung:

$$\rho_l \cdot c_p \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla T \right) = \lambda \cdot \Delta T \quad (31)$$

Diese zentralen Gleichungen sind in Feldmodellen problemspezifisch auf brandschutztechnische Betrachtungen (u.a. durch verwendete Annahmen) angepasst. Auf Grundlage der Erhaltungsgleichungen wird u.a. die Ermittlung der Größen der Temperatur, der Dichte, des Drucks, der Geschwindigkeit sowie der stofflichen Zusammensetzung innerhalb der Kontrollvolumen, die wiederum volumenbezogen gemittelt angenommen werden, ermöglicht. Dazu implementieren Feldmodelle die Gleichungen in einer entsprechenden numerischen Umsetzung zur Lösung für alle drei Raumrichtungen. Im Gegensatz zu brandschutztechnischen Zonenmodellen benötigt dies nicht die Annahme bzw. Voraussetzung einer gerichteten Strömung (vgl. Einsatz von Plume-Modellen), vielmehr wird die "freie" Ausbreitung und Einstellung ortsbezogener Verhältnisse berechnet. Die Ermittlung lokaler Größen hängt vom Detaillierungsgrad bzw. der Feinheit des Betrachtungsraums und der einzelnen Felder ab. Die prinzipiellen Ansätze der Feldmodelle sowie allgemeine Grundlagen sind in Tab. 15 zusammengefasst.

Aspekt	Eigenschaft Modellkonzeption
Anwendungs- bzw. Gültigkeitsbereich	Brandbedingte, geometrieunabhängige Rauchausbreitung; Anpassung auf in Relation geringe Strömungsgeschwindigkeiten ¹⁵² ; Darstellung rechteckiger Geometrien bzw. Annäherung durch entsprechende Anordnung der Kontrollvolumen
Eingebundene Erhaltungsgleichungen (vgl. Abschn. 2)	Massen-, Energie- und Impulserhaltung über problemspezifische Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen; zeit- und ortsabhängige Darstellung unter Verwendung einer Turbulenzmodellierung ¹⁵³
Grundannahmen des Modells	Luft- bzw. Rauchströmung aufgrund eines Brandereignisses; räumliche Diskretisierung durch dreidimensionale Gitterstruktur; keine erzwungene Strömungsrichtung; Ausbildung geringer Strömungsgeschwindigkeiten ¹⁵⁴ ; Unterstellung einer unmittelbaren Verbrennung bei Aufeinandertreffen von Brenn- und Sauerstoff; Transport bzw. Ausbreitung von Brenn- und Sauerstoff sowie weiteren Komponenten (z.B. Verbrennungsprodukten) im Raum abhängig

¹⁵⁰ Grundgleichungen der numerischen Strömungsmechanik als sog. nichtlineare, partielle (dreidimensional räumliche) Differentialgleichungen zur mathematischen Beschreibung strömungsdynamischer Vorgänge. Die Gleichungen sind nur durch Verwendung unterschiedlicher Annahmen und damit verbundener Vereinfachungen lösbar, wobei die zentralen Erhaltungsgleichungen über verschiedene Faktoren in Abhängigkeit zueinander stehen (vgl. [5]).

¹⁵¹ Die aufgeführten Gleichungen sind bereits durch die sog. Boussinesq-Approximation vereinfacht, die auch das vorgestellte Feldmodell FDS verwendet. Dichteänderungen äußern sich dabei lediglich durch Wärmeausdehnungen, nicht jedoch durch Druckänderungen. Weiterhin erfolgt die Berücksichtigung lediglich zur Ermittlung des Auftriebs [5].

¹⁵² Bereich niedriger Mach-Zahlen ortsbezogener Verhältnisse (Geschwindigkeiten von wenigen Metern pro Sekunde); dies bedingt jedoch nicht einen gleichzeitigen Ausschluss von Turbulenzen, deren Einfluss auf die Ausbreitung berücksichtigt wird.

¹⁵³ Kleinskalige Turbulenzen können vor dem Hintergrund erforderlicher Rechendauern und -kapazitäten gegenüber benötigten kleinen Kontrollvolumen oftmals nicht in Gänze berechnet werden. Ein Ansatz zur Berücksichtigung bildet die anderweitige rechnerische Erfassung und Einbindung ("Modellierung von Turbulenzen") in die Betrachtungen (vgl. Tab. 16).

¹⁵⁴ Vgl. Tab. 16

Aspekt	Eigenschaft Modellkonzeption
Konzept der Ausbreitungsrechnung und Grundlage der Modellkonzeption	Ausbreitungsrechnung mittels angepasster Navier-Stokes-Gleichungen in dreidimensionaler Gitterstruktur (Felder als Kontrollvolumen) mit Turbulenzmodell; Unterstützung durch verschiedene Untermodelle zur Darstellung brandbedingter Randbedingungen und Effekte (z.B. Wärmestrahlung), vgl. Tab. 16; volumenbezogene Auflösung und Berechnung je Kontrollvolumen in Abhängigkeit zu Rahmen- und Ausbreitungsbedingungen; diskrete Ermittlung der Größen in Zeitschritten ¹⁵⁵ (modellintegrierte, parameterabhängige Anpassung der Zeitschrittweite), keine kontinuierliche Betrachtung der Verhältnisse
Interaktion der Kontrollvolumen	Orts- und zeitabhängige Lösung der Massen-, Energie- und Impulserhaltung als fortschreitende Ausbreitungsrechnung über Felder hinweg; unmittelbare Verknüpfung über Ein- bzw. Ausgabeparameter in alle Raumrichtungen; Lösung für alle Felder je Zeitschritt
Eingebundene Eingabeparameter	Geometrische Rahmenbedingungen samt getroffener Diskretisierung; thermodynamische Umgebungsbedingungen; Stoffeigenschaften auftretender Brennstoffe, Komponenten und Bausteine sowie Bauteile; Parameter brandschutztechnischer Maßnahmen (z.B. Sprinklerauslösung etc.); Parameter des Brandszenarios samt Zusammensetzung des Brennstoffes; strömungsmechanische Rahmenbedingungen (z.B. Zuluffführung) samt ergänzend emittierter Stoffe; Steuerparameter verschiedener Berechnungsteile und -formen ¹⁵⁶
Empirischer Einfluss	„Freie“ Rauchausbreitung ohne erzwungene Richtung (d.h. insbesondere keine Verwendung von Plume-Modellen); in Untermodellen teils empirische Einflussfaktoren zur Vereinfachung der Berechnungsschritte (vgl. Tab. 16)
Ergebnisparameter	Thermodynamische Parameter der Raumluft und Umfassungsbauteile sowie Ausbreitungs- und Konzentrationsparameter des auftretenden Brandrauches bzw. ergänzend eingeführter Komponenten an frei definierbaren Punkten des Betrachtungsraumes (Festlegung im Vorfeld der Berechnungen erforderlich); ggf. Größen des Brandszenarios und -verlaufs (soweit nicht vorgegeben); Ausgabe von Berechnungsparametern („Zwischenwerte“) eingebundener Untermodelle ¹⁵⁷ z.T. möglich (potentielle Eingangsgröße zur Bewertung über Massenanteile bzw. Konzentrationen der Rauchkomponenten sowie zusätzlich emittierter Stoffe)

Tabelle 15: Zusammenfassung: Konzeptionellen Anlage brandschutztechnischer Feldmodelle

Zur Anpassung der Algorithmen auf die im Brandfall spezifisch eintretenden Rahmenbedingungen, Vorgänge und Verhältnisse (z.B. Wärmestrahlung) bedarf es Ergänzungen allgemeinerer CFD-Betrachtungen. Verschiedene Untermodelle, die auf den in Tab. 15 dargestellten allgemeinen Annahmen und Vereinfachungen beruhen, schaffen die Möglichkeit zur Ermittlung dieser zusätzlichen Ergebnisparameter.

Das Modell FDS, Version 5, das als etabliertes Modell für brandschutztechnische Betrachtungen eingesetzt wird, beinhaltet die in Tab. 16¹⁵⁸ beschriebenen Konzepte zur numerischen Untersuchung der Brand- und Rauchausbreitung in Räumen. Diese wirken ergänzend bzw. vereinfachend zu den Algorithmen der Navier-Stokes-Gleichungen und erweitern gleichfalls den möglichen Betrachtungsrahmen auf eine umfassende Darstellung der eintretenden Verhältnisse. Die Untermodelle nehmen Bezug auf die konzeptionelle Anlage der Feldmodelle bzw. charakterisieren diese und grenzen brandschutztechnische Modelle von anderen CFD-Ansätzen ab¹⁵⁹.

Untermodell	Phänomenologische Notwendigkeit und Nutzen	Programmatische Umsetzung
Hauptmodell der Erhaltungsgleichungen (Ansatz der Navier-Stokes-Gleichungen)	Massenerhaltung aller Stoffe in betrachteter Raumanordnung bzw. Diskretisierung	Zeitlich differentielle, dreidimensionale Berechnung der eingehenden, ausgehenden und in Kontrollvolumen bestehenden Massen jedes in der Raumluft befindlichen Stoffes; Berücksichtigung eines Diffusionsterms für kleinskalige Ausbreitung

¹⁵⁵ Dauer zwischen zwei Zeitpunkten, für die diskrete Berechnungen erfolgen.

¹⁵⁶ Die Verwendung von Parametern steuert die Einbeziehung verschiedener Untermodelle (vgl. Tab. 16), fehlende Angaben führen zur Verwendung von voreingestellten Werten oder Abschaltung des Untermodells.

¹⁵⁷ Siehe Tab. 16

¹⁵⁸ Die verschiedenen Konzepte sind als Überblick mit Kurzbeschreibung aufgeführt. Die vollständige theoretische Darlegung samt mathematischer Umsetzung legt [56] dar. Über die Untermodelle sind Ansätze zur Betrachtung von Partikeln implementiert, die an dieser Stelle aufgrund der Ausrichtung auf Gase unberücksichtigt bleiben.

¹⁵⁹ Vgl. [60]

<i>Untermmodell</i>	Phänomenologische Notwendigkeit und Nutzen	Programmatische Umsetzung
	Energieerhaltung der brandbedingten Wärme (konvektiver Wärmetransport als ursächlicher Ausbreitungsvorgang, Berücksichtigung von Druckunterschieden zwischen Raumbereichen)	Zeitlich differentielle, dreidimensionale Berechnung des konvektiven Wärmetransports innerhalb von Strömungen sowie örtlicher Druckunterschiede (als Arbeit pro Zeit); Erfassung dissipativer Effekte ¹⁶⁰ als "Energieentzug" (Dissipationsrate = Anteil Umwandlung kinematische in thermische Energie)
	Impulserhaltung des dichteinduzierten Auftriebs sowie Berücksichtigung externer Kräfte; primär: Darstellung der aufwärtsgerichteten Plume-Strömung, weiterhin Ermittlung der Strömungsbildung im Raum	Zeitlich differentielle, dreidimensionale Berechnung der Ausbreitungsgeschwindigkeiten unter Erfassung externer Kräfte (z.B. überlagerter Strömungen); Berücksichtigung der Vereinfachung konstanter Dichtegradienten zwischen (Auftriebs-) Strömung und Umgebungsbedingungen (sog. Boussinesq-Approximation ¹⁶¹)
<i>Verbrennungsmodell</i>	Darstellung der Verbrennungsreaktion samt Reaktionsprodukten und Reaktionsorten (Abhängigkeit zu lokal auftretenden Temperaturen), Grundlage der Effektberechnungen	Variante 1 - Mischungsbruchkonzept: Berechnung der Verbrennungsreaktion anhand vorzugeber Stöchiometrie (entstehende Massenanteile ¹⁶² der Reaktion, Angabe Molekulargewicht der Komponenten) einer Leitkomponente (als alleiniger Brennstoff) unter Berücksichtigung der Sauerstoffverfügbarkeit und zur Zündung ausreichender Temperatur; Beachtung der phasenweisen Reaktion von Kohlenstoff über Kohlenmonoxid zu -dioxid
		Variante 2: Direkte Berechnung Reaktionskinetik bei ausreichend feiner Gitterstruktur, Grundlage: Diffusionsströme des Brennstoffs (Leitkomponente) und Sauerstoffs
	Ableitung Wärmefreisetzungsrate des Brandes	Variante 1: Ermittlung über Indikator des verbrauchten Sauerstoffs (für direkte Berechnungen ¹⁶³)
		Variante 2: Ermittlung über zellbezogene Verbrennungsrate (abh. zu Ventilationsbedingungen) und spez. Verbrennungswärme der Leitkomponente
	Vorgabe Wärmefreisetzungsrate und Brandfläche als unmittelbare Definition des Brandszenarios	
<i>Modell zur Vereinfachung der Massentransport-Berechnung</i>	Darstellung der räumlichen Ausbreitung von Verbrennungsprodukten, Voraussetzung: Verwendung des sog. Mischungsbruchkonzepts	Auffassung des Mischungsbruchs als ortsbezogene Größe der stofflichen Massenzusammensetzung; Beeinflussung durch Luftermischung in Massenstrom (Verdünnung) in Verbindung mit Turbulenzmodell; Vorteil: Berechnung nur einer Größe für alle auftretenden Verbindungen erforderlich, so dass beliebige Komponenten anhand ihrer Stoffeigenschaften betrachtet werden können
<i>Modell zur Berechnung der Tropfen- und Partikelausbreitung</i> ¹⁶⁴	Darstellung der räumlichen Ausbreitungen von Flüssigkeitstropfen und Partikeln	Erfordernis zusätzliches Untermmodell für Flüssigkeits- und Feststoffpartikeln, die kleiner als gewählte Gitterstruktur der Diskretisierung sind; Ausbreitungsberechnung unter Berücksichtigung der Ansätze Lagrange'scher Partikelmodelle ¹⁶⁵ unter Einbindung des Wärmeaustauschs; Berücksichtigung statistischer Größen und Steuerparameter zur Beeinflussung der berücksichtigten Partikelanzahl

¹⁶⁰ Verlust mechanischer (Bewegungs-) Energie durch Umwandlung in andere Energieformen [61].

¹⁶¹ Vgl. [62]

¹⁶² Massenanteile werden als empirischer Faktor eingeführt, der unmittelbar oder als Angabe aus verknüpften Untermodellen (z.B. Pyrolyse) vorgegeben wird.

¹⁶³ Siehe Turbulenz-Modell

¹⁶⁴ Laut Aussage des NIST im experimentellen Entwicklungszustand, vgl. [56, 59]

¹⁶⁵ Vgl. [63]

<i>Untermmodell</i>	Phänomenologische Notwendigkeit und Nutzen	Programmatische Umsetzung
<i>Modell zur Pyrolyse (s) bzw. Verdampfung (fl)</i>	Darstellung der zur Verbrennung erforderlichen Überführung des Brennstoffs in die Gasphase durch thermische Aufbereitung; Ableitung der Erhaltung des Initialbrandes und der Brandausbreitung unter Berücksichtigung jeweiliger Zündtemperaturen	Für Feststoffe: Erhaltungsgleichung zwischen Ursprung und Reaktion zu flüchtigen Produkten (Annahme unmittelbarer Freisetzung des Brennstoffs); Berücksichtigung gemittelter thermischer Parameter sowie Netto-Wärmestrom (siehe unten) samt Temperaturerhöhung zur Erfassung der Reaktionsrate (über Arrhenius- und Energiegleichung)
		Für Flüssigkeiten: Gleichgewichtsreaktion zwischen Flüssig- und Gasphase des Brennstoffs; Berücksichtigung thermischer Parameter, Siedepunkt sowie Netto-Wärmestrom samt Temperaturerhöhung
<i>Druck-Modell</i>	Berücksichtigung von örtlichen Druckunterschieden sowie thermisch bedingter Volumenzunahme von Gasen	Unterscheidung zwischen statischem (abhängig von Position und Ausgangsbedingungen, Eingangsgröße Energieerhaltung) und dynamischem Druck (abhängig von Strömung); Erfassung statischer Druck über ideale Gasgleichung mit Verknüpfung zu Erhaltungsgleichungen
<i>Turbulenz-Modell</i>	Berücksichtigung von Lufteinmischung, Abkühlung und Verwirbelung von Strömungen samt Stofftransport durch Turbulenzen (Abhängigkeit zur Strömungsgeschwindigkeit); Unterstützendes Modell zur Energie- und Massenerhaltung (Erfassung der Dissipationsrate)	Variante 1: Direkte Numerische Simulation (DNS) unter Erfassung sämtlicher Turbulenz- und Wirbelstrukturen samt dissipativer Effekte über hochauflösende Gitterstruktur; Ansatz kinematischer Theorien unter Einbeziehung der Temperatur
		Variante 2: Direkte Berechnung des Einflusses "großer" Wirbelstrukturen (größer als verwendete Feldgröße), Simulation Einfluss "kleiner" Strukturen über numerische Erhöhung der berücksichtigten dynamischen Viskosität (sog. Large-Eddy-Simulation (LES) als gewollte Überschätzung "großer" Wirbelstrukturen)
<i>Modelle der Wärmeübertragung</i>	Ansatz der Wärmestrahlungsemission aus der Verbrennungsflamme	Verwendung Anteil der Gesamtwärmefreisetzung je Zelle (Definition durch Verbrennungsmodell)
	Ansatz der Wärmestrahlungsemission aus Stoffen in der Raum	Ableitung der stoffspezifischen Strahlungsintensitäten durch wellenlängenabhängige Bewertung der Intensität des sog. schwarzen Körpers ¹⁶⁶ ; Einteilung der Wellenlängen in Bänder samt Zuweisung charakteristischer Werte und Stoffe
	Berücksichtigung der Strahlungsausbreitung im Luftraum	Finite-Volumen-Methode: Erfassung der Absorption, Emission und Streuung je Kontrollvolumen in Abhängigkeit zu enthaltenen Komponenten; Lösung Strahlungs-Transport-Gleichung über Zellflächen (mathematische "Weitergabe" Wärme über Oberflächen unter Berücksichtigung von Verlusten und Raumwinkeln zur Strahlungsquelle)
	Berücksichtigung der Wärmestrahlungsabsorption durch raumbegrenzende Bauteile und Objekte (Immission)	Ermittlung der Abstands- und Winkelabhängigkeit (über Bänder) zu Emittenten anhand Finite-Volumen-Methode; Berechnung des Netto-Wärmestroms zwischen Zellen des Luftraumes und des Materials; Erfassung der radiativen Eindringtiefe der Wärme über materialspezifische Eigenschaften (Absorption, Reflektion) und thermodynamische Werte (z.B. spezifische Wärmespeicherkapazität)
	Berücksichtigung der Konvektion zwischen raumbegrenzenden Bauteilen bzw. Objekten und Kontrollvolumen des Luftraums	Direkte Turbulenzmodellierung: Unmittelbare Berechnung des Wärmeübergangs über Gas-Wärmeleitfähigkeit und Temperaturgradient (unter Berücksichtigung der Gaskomponenten)
		Large-Eddy-Simulation: Berechnung anhand empirischer, über natürliche und erzwungene Konvektion gemittelter Gleichung bei Einbeziehung der örtlichen Temperatur und Strömungsgeschwindigkeit je Kontrollvolumen
Ansatz der Emission der Wärmestrahlung von Bauteilen und Objekten	Verwendung der maximalen Strahlungsemission des schwarzen Körpers unter Berücksichtigung der Emissivität sowie der Oberflächentemperatur auf angrenzende Kontrollvolumen	

¹⁶⁶ Im Gegensatz zum Modell des grauen Körpers Annahme der vollständigen Absorption sowie anschließender vollständiger Emission von Wärmestrahlung durch einen Körper, vgl. [36].

<i>Untermmodell</i>	Phänomenologische Notwendigkeit und Nutzen	Programmatische Umsetzung
	Berücksichtigung der Wärmeleitung innerhalb von raumbegrenzenden Bauteilen und Objekten	Verwendung der eindimensionalen Wärmeleitung entlang der Oberflächennormalen; Berücksichtigung der ortsbezogenen Wärmeübertragung angrenzender Felder des Luftraumes Für raumbegrenzende Bauteile: Möglichkeit der Charakterisierung als adiabatisch oder als am Wärmeaustausch beteiligt (Beeinflussung Temperaturentwicklung des Raumes)
<i>Modell der Auslösung brandschutztechnischer Maßnahmen</i>	Ableitung des Auslösezeitpunktes von Sprinklerköpfen und Brandmeldern der Kenngröße Wärme im Brandraum	Bestimmung des Zeitpunkts durch empirische Korrelation zwischen ortsabhängiger Gastemperatur und RTI-Wert vorhandener Sprinklerköpfe bzw. Wärmemelder
	Ableitung des Auslösezeitpunktes von Brandmeldern der Kenngröße Rauch	Bestimmung des Zeitpunkts über Geschwindigkeit des Massentransports und Verzögerungscharakteristik des Melders durch innere Geometrie; Empirische Erfassung des Melders erforderlich (Parametrisierung über Faktoren)
<i>Modell der Löschwirkung von Sprinklern</i>	Erfassung der veränderten Brandentwicklung nach Sprinklerauslösung durch Erwärmung und Verdampfung von Wasser	Beschreibung des Tropfenspektrums; Ableitung des Einflusses durch Massen- und Energietransport unter Einbeziehung der Austritts-Dynamik, Verwendung angepasstes Tropfenmodell zur Darstellung spezifischer Verhältnisse

Tabelle 16: Beispielhafte Darstellung möglicher Untermodelle in Feldmodellen (FDS, Version 5) [56, 59]

Ergänzend zu den unmittelbar im Programm implementierten Untermodellen stehen verschiedene erweiternde Ansätze zur Verfügung, die durch Dritte veröffentlicht werden¹⁶⁷. Ein derartiges Modul ist bspw. die Evakuierungssimulation durch das Programmpaket "FDS+Evac" [64], das die Abschätzung von Fluchtverhalten und -möglichkeiten von Personen unter Einfluss eines Brandereignisses ermöglicht. In diesem Rahmen besteht neben der Erfassung des Fluchtverhaltens insbesondere die Möglichkeit, die Wirkung des Brandes und des entstehenden Rauches - z.B. über die Ermittlung des Einflusses der Stoffkonzentrationen von Sauerstoff, Kohlenmonoxid und Kohlendioxid in Verbindung mit der Bewegungscharakteristik der Personen - zu erfassen. Die Modellgrundlagen beruhen auf unterschiedlichen Erkenntnissen zur Personendynamik¹⁶⁸ sowie dem sog. FED¹⁶⁹-Ansatz nach Purser¹⁷⁰.

Berechnungen mit brandschutztechnischen Feldmodellen erfordern eine Vielzahl an Eingangsgrößen und Parametern, die als Rahmenbedingungen und Steuergrößen dienen. Dabei stehen die Berechnungsergebnisse bzw. deren Realitätstreue im Verhältnis zur Genauigkeit der Eingabeparameter.

Die Parametrisierung des Programms FDS, Version 5 erfolgt über eine Texteingabedatei, in der eine eigenständige Syntax zur Modellsteuerung befolgt wird¹⁷¹. Die Auswertung der Ergebnisse kann einerseits quantitativ über zuvor festgelegte, zur Aufzeichnung interessierender Daten im Betrachtungsraum festgelegte "Messpunkte" erfolgen. Dazu ist die Definition der auszugebenden Parameter erforderlich, die Darstellung erfolgt in tabellarischer Form. Weiterhin ist eine qualitative Auswertung der Ergebnisse über Visualisierungen möglich, die die räumliche Verteilung festgelegter Ergebnisgrößen zwei- oder dreidimensional darstellt.

Mit brandschutztechnischen Feldmodellen besteht die Möglichkeit, ortsabhängige Detailuntersuchungen der Rauchausbreitung innerhalb von Gebäuden ohne Vorgabe einer bestimmten Ausbreitungsrichtung und ohne Verwendung anwendungsbegrenzender Plume-Modelle durchzuführen. Aufgrund der im Vergleich mit den Zonenmodellen kleineren Kontrollvolumen, die Feldmodelle in dreidimensionaler Anordnung verwenden, wird über die zentralen Erhaltungsgleichungen der Strömungsmechanik eine freie Ermittlung der Rauchausbreitung und des Strömungsverhaltens sowie die örtlich genaue Ermittlung von aus dem Brandereignis resultierenden Größen vorgenommen. Weiterhin

¹⁶⁷ Die Veröffentlichung erfolgt auf Grundlage der durch die ursprünglichen Entwickler freigegebenen Programmierungs-Codes auf Open-Source-Basis. Die Erweiterung der Algorithmen ist somit gewünscht, wird jedoch nicht aktiv durch das NIST unterstützt.

¹⁶⁸ Vgl. bspw. [65]

¹⁶⁹ Aus dem Englischen: Fractional Effective Dose

¹⁷⁰ Vgl. [9]

¹⁷¹ Die Eingabe über eine graphische Benutzeroberfläche ist prinzipiell durch Zusatzprogramme möglich, wird durch die Programmierer jedoch nicht unterstützt.

können brandspezifische Phänomene (z.B. Einflüsse der Wärmestrahlung) und ihre ortsabhängige Wirkung ermittelt werden. Für die unterschiedlichen Betrachtungen bestehen umfangreiche Validierungsstudien¹⁷², die aufgrund der Verwendung der allgemeinen Erhaltungsgleichungen ein breites Anwendungsfeld mit genauen Ergebnissen (in gewissen Abweichungsgrenzen) zulassen.

Berechnungsergebnisse hängen von den verwendeten Eingangsdaten ab, welche die Genauigkeit unmittelbar beeinflussen. Durch den komplexen Aufbau der Algorithmen sowie der Eingabedateien zur Modellparametrisierung sind diese negativen Einflüsse im Anschluss an eine Berechnung ohne umfassende Detailkenntnisse ggf. nicht mehr feststellbar. Darüber hinaus bedarf die vollständige Berechnung einer großen Feldanzahl einer relativ langen Simulationsdauer, so dass eine Verwendung vornehmlich für Detailstudien stattfindet. Die Durchführung von Parameterstudien ist nur mit großem (Berechnungs-) Aufwand zu realisieren. Weiterhin ist zur Schonung der Rechenressourcen die Festlegung von Punkten und Ebenen sowie der anzugebenden Parameter erforderlich, so dass kritische Bereiche im Vorfeld der Untersuchungen bekannt sein müssen.

Autor

M.Sc. Florian Pillar
Fachgebiet Sicherheitstechnik / Arbeitssicherheit
Bergische Universität Wuppertal

¹⁷² Vgl. [58]

Literatur

- [1] *Verordnung zum Schutz vor Gefahrstoffen (Gefahrstoffverordnung - GefStoffV)*. Fassung November 2010 (zuletzt geändert: Juli 2013), Bundesgesetzblatt I, S. 2514
- [2] KAHL, Anke ; WILMES, Annette ; GUHE, Christine ; PACKROFF, Rolf ; LOTZ, Gabriele ; TISCHER, Martin: *Einfaches Maßnahmenkonzept Gefahrstoffe (EMKG) - Version 2.2*. Bd. Version 2.2 (Mai 2012). Dortmund / Berlin / Dresden : Bundesanstalt für Arbeitsschutz und Arbeitsmedizin (BAuA), 2012
- [3] PILLAR, Florian: Ausgewählte Berechnungsmodelle zur Beschreibung von Gefahrstoffexpositionen an Arbeitsplätzen. In: *Gefahrstoffe - Reinhaltung der Luft* (2014)
- [4] BRAUER, Heinz: *Handbuch des Umweltschutzes und der Umweltschutztechnik - Band 1*. Berlin : Springer Berlin Heidelberg New York, 1996
- [5] OERTEL, Herbert jr. ; BÖHLE, Martin ; DOHRMANN, Ulrich: *Strömungsmechanik - Grundlagen, Grundgleichungen, Lösungsmethoden, Softwarebeispiele*. 5. Auflage. Wiesbaden : Vieweg + Teubner, GWV Fachverlage GmbH, 2009
- [6] BIRD, R. B. ; STEWART, Warren E. ; LIGHTFOOT, Edwin N.: *Transport Phenomena*. Second Edition. New York / Chichester / Weinheim / Brisbane / Singapore / Toronto : John Wiley & Sons, Inc., 2007
- [7] RINALDI, Piercristian: *Über das Verhalten turbulenter Freistrahlen in begrenzten Räumen*. Technische Universität München - Lehrstuhl für Hydraulik und Gewässerkunde, 2003
- [8] BOSCH, C.J.H. van d. (Hrsg.) ; WETERINGS, R.A.P.M. (Hrsg.): *Methods for the calculation of physical effects*. Third Edition - Second revised Print. Den Haag : Committee for the Prevention of Disasters, 2005
- [9] DINENNO, Philip J. (Hrsg.): *SFPE Handbook of Fire Protection*. 4th Edition. National Fire Protection Association, 2008
- [10] KOHLRAUSCH, Friedrich ; KLOSE, Volkmar (Hrsg.) ; WAGNER, S. (Hrsg.): *Praktische Physik*. 24 Auflage. Stuttgart : B.G. Teubner, 1996
- [11] *VDI-Richtlinie 2262 - Luftbeschaffenheit am Arbeitsplatz, Minderung der Exposition durch luftfremde Stoffe: Teil 4 - Erfassen luftfremder Stoffe*. Beuth Verlag Berlin : Verein deutscher Ingenieure, März 2006
- [12] FITZNER, Klaus: *Verteilung von Luftverunreinigungen und Temperaturen im Raum*. Berlin: Vortrag: Gesundheits-technische Gesellschaft, 16.10.2003
- [13] GERHARDT, Hans J.: *Entrauchungsnachweise - Kritische Diskussion von Methoden des Brandschutzingenieurwesens*. vfdb-Zeitschrift Ausgabe 03/2001. vfdb - Vereinigung zur Förderung des deutschen Brandschutzes, 2001
- [14] WELLHÖNER, Hans-Herbert: *Allgemeine und systematische Pharmakologie und Toxikologie*. Springer Berlin Heidelberg New York, 1997
- [15] ORTH, Wolfgang ; HENSCHLER, Dietrich ; RUMMEL, Walter ; STARKE, Klaus: *Allgemeine und spezielle Pharmakologie und Toxikologie*. 6. Auflage. Mannheim : BI Wissenschaftsverlag, 1993
- [16] *TRGS 900 - Arbeitsplatzgrenzwerte*. in: Gemeinsames Ministerialblatt Nr. 12, S.271-274 2014 : Ausschuss für Gefahrstoffe (AGS), Ausgabe: Januar 2006 (zuletzt geändert und ergänzt: April 2014)
- [17] *TRGS 400 - Gefährdungsbeurteilung für Tätigkeiten mit Gefahrstoffen*. in: Gemeinsames Ministerialblatt Nr. 40, S.715 2012 : Ausschuss für Gefahrstoffe (AGS), Ausgabe: Dezember 2010 (zuletzt geändert und ergänzt: September 2012)

- [18] TRGS 402 - Ermitteln und Beurteilen der Gefährdungen bei Tätigkeiten mit Gefahrstoffen: Inhalative Exposition. in: Gemeinsames Ministerialblatt Nr. 12, S.254-257 2014 : Ausschuss für Gefahrstoffe (AGS), Ausgabe: Januar 2010 (zuletzt geändert und ergänzt: April 2014)
- [19] FRANSMAN, Wouter ; CHERRIE, John ; TONGEREN, Martie van ; SCHNEIDER, Thomas ; TISCHER, Martin ; SCHINKEL, Jody ; MARQUART, Hans ; WARREN, Nick ; KROMHOUT, Hans ; TIELEMANN, Erik: *Development of a mechanistic model for the Advanced REACH Tool (ART)*. September 2009 (Beta Release)
- [20] Gesetz über die Durchführung von Maßnahmen des Arbeitsschutzes zur Verbesserung der Sicherheit und des Gesundheitsschutzes der Beschäftigten bei der Arbeit (Arbeitsschutzgesetz - ArbSchG). Fassung August 1996 (zuletzt geändert: Oktober 2013), in Bundesgesetzblatt I, 2009, S. 160
- [21] Abbildung erstellt durch Autor
- [22] STEINKE, I.: Gütekriterien qualitativer Forschung. In: *Qualitative Forschung. Ein Handbuch* (2000), Reinbek b. Hamburg, S. Rowohlt Taschenbuch S. 319–331
- [23] LEHDER, Günther ; SKIBA, Reinald: *Taschenbuch Arbeitssicherheit*. 11. Auflage. Berlin : Erich Schmidt Verlag GmbH & Co., 2005
- [24] KAHL, Anke: *Vorlesungsreihe Arbeitssicherheit - Abschnitt Inhalt und Umfang der Arbeitssicherheit*. Bergische Universität Wuppertal, 2013
- [25] LINDNER, Helmut ; SIEBKE, Wolfgang (Hrsg.) ; SIMON, Günter (Hrsg.) ; WUTTKE, Werner (Hrsg.): *Physik für Ingenieure*. 17. Auflage. München : Fachbuchverlag Leipzig im Carl Hanser Verlag, 2006
- [26] HOINKIS, Jan ; LINDNER, Eberhard: *Chemie für Ingenieure*. Wiley-VCH, 2001
- [27] TRUCKENBRODT, Erick: *Fluidmechanik: Band 1: Grundlagen und elementare Strömungsvorgänge*. 4. Auflage. München : Springer Berlin Heidelberg New York, 1996 (Nachdruck in veränderter Ausstattung 2008)
- [28] EICKMANN, Udo: *Methoden der Ermittlung und Bewertung chemischer Expositionen an Arbeitsplätzen*. Landsberg/Lech : Verlagsgruppe Hüthig Jehle Rehm GmbH, 2008
- [29] KEIL, Charles B.: *Mathematical Models for Estimating Occupational Exposure to Chemicals*. Fairfax, USA : American Industrial Hygiene Association (AIHA), 2000
- [30] MACKAY, Donald ; MATSUGU, Ronald S.: Evaporation Rates of liquid Hydrocarbon Spills on Land and Water. In: *The Canadian Journal of Chemical Engineering* 51 (1973), August, S. 434–439
- [31] Kapitel Evaporation of pure Liquids from open Surfaces. In: LINDERS, J.H.B.J. (Hrsg.): *Modelling of Environmental Chemical Exposure and Risk*. Kluwer Academic Publishers, Netherlands : Frederic C. Arnold and Alfred J. Engel, 2001, S. 61–71
- [32] WEIDLICH, U. ; GMEHLING, J.: *Expositionsabschätzung - Ein Methodenvergleich mit Hinweisen für die praktische Anwendung*. Dortmund : Wirtschaftsverlag NW - Verlag für neue Wissenschaft GmbH, 1986
- [33] MARZINKOWSKI, Joachim M.: *Vorlesungsreihe Chemie II*. Bergische Universität Wuppertal, 2008
- [34] ATKINS, Peter W. ; PAULA, Julio de: *Physikalische Chemie*. Bd. 4., vollständig überarbeitete Auflage. Weinheim : Wiley-VCH, 2006
- [35] ATKINS, Peter W. ; JONES, Loretta: *Chemie - Einfach alles*. Weinheim : Wiley-VCH, 2006
- [36] WITTBECKER, Friedrich-Wilhelm: *Vorlesungsreihe Grundlagen des Brand- und Explosionsschutzes*. Bergische Universität Wuppertal, 2008

- [37] JANY, Peter ; THIELEKE, Gerd ; LANGEHEINECKE, Klaus (Hrsg.): *Thermodynamik für Ingenieure - Ein Lehr- und Arbeitsbuch für das Studium*. 8. Auflage. Wiesbaden : Vieweg + Teubner, GWV Fachverlage GmbH, 2011
- [38] BRONSTEIN, Ilja N. ; SEMENDJAJEW, K.A. ; MUSIOL, Gerhard ; MUEHLIG, Heiner: *Taschenbuch der Mathematik*. Frankfurt am Main : Wissenschaftlicher Verlag Harri Deutsch GmbH, 2008
- [39] BENNETT, James S. ; FEIGLEY, Charles E. ; KHAN, Jamil ; HOSNI, Mohammad H.: Comparison of Emission Models with Computational Fluid Dynamic Simulation and a Proposed Improved Model. In: *AIHA Journal* (2003), November / Dezember, Nr. 64, S. 739–754
- [40] SCHRAMEK, Ernst-Rudolf ; RECKNAGEL, Hermann ; SPRENGER, Eberhard: *Taschenbuch für Heizung und Klimatechnik*. 74. Auflage. München : Oldenbourg Industrieverlag, 2008
- [41] SIEKMANN, Helmut E. ; THAMSEN, Paul U.: *Strömungslehre*. 2. Auflage. Springer Berlin Heidelberg New York, 2008
- [42] BAEHR, Hans D. ; STEPHAN, Karl: *Wärme- und Stoffübertragung*. 6. Auflage. Springer Berlin Heidelberg New York, 2008
- [43] EICKMANN, Udo ; EICKMANN, Jonas ; TISCHER, Martin: Exposure to sprays - comparison of the available exposure models. In: *Gefahrstoffe - Reinhaltung der Luft* 67 (2007), Juli / August, Nr. 7 / 8, S. 305 – 318
- [44] CREEELY, K.S. ; TICKNER, J. ; SOUTAR, A.J. ; HUGHSON, G.W. ; PRYDE, D.E. ; WARREN, N.D. ; RAE, R. ; MONEY, C. ; PHILLIPS, A. ; CHERRIE, F.W.: Evaluation and Further Development of EASE Model 2.0. In: *Annual occupational Hygiene* 49 (2005), Nr. 2, S. 135 – 145
- [45] *Einfaches Maßnahmenkonzept Gefahrstoffe - Fachliche Konzeption*. Dortmund : BAuA-Projektgruppe Einfaches Maßnahmenkonzept - Gefahrstoffe" (Koordinierung: Dr. Rolf Packroff), Bundesanstalt für Arbeitsschutz und Arbeitsmedizin (BAuA), 2005
- [46] *Einfaches Maßnahmenkonzept Gefahrstoffe - Empirische Zusammenhänge von Einstufung und Grenzwert*. Dortmund : BAuA-Gruppe 4.4 "Risiken durch Gefahrstoffe" (Leitung: Dr. Norbert Rupprich), Bundesanstalt für Arbeitsschutz und Arbeitsmedizin (BAuA), 2005
- [47] *National Institute for Occupational Safety and Health (NIOSH)*: <http://www.cdc.gov/niosh>
- [48] *Korrespondenz mit Gisela Stropp, Mitglied des Ausschuss für Gefahrstoffe (AGS) als Sachverständige; Mai bis Juni 2011*
- [49] KAHL, Anke: *Vorlesungsreihe Arbeitssicherheit - Abschnitt Gefahrstoffe*. Bergische Universität Wuppertal, 2012
- [50] HOSSER, Dietmar (Hrsg.): *Leitfaden Ingenieurmethoden des Brandschutzes*. Vereinigung zur Förderung des Deutschen Brandschutzes e.V. (vfdb), Technisch-Wissenschaftlicher Beirat (TWB), Referat 4, November 2013 (3., überarbeitete und ergänzte Auflage)
- [51] SCHNEIDER, Ulrich: *Ingenieurmethoden im Brandschutz*. 2. Auflage. Köln : Werner Verlag, 2009
- [52] *DIN 18230: Baulicher Brandschutz im Industriebau - Teil 1: Rechnerisch erforderliche Feuerwiderstandsdauer*. Berlin : Deutsches Institut für Normung e.V., Beuth Verlag, September 2010
- [53] KARLSSON, Björn ; QUINTIERE, James G.: *Enclosure Fire Dynamics*. Boca Raton, USA : CRC Press, 2000
- [54] PEACOCK, Richard D. ; RENEKE, Paul A. ; FORNEY, Glenn P.: *CFAST - Consolidated Model of Fire Growth and Smoke Transport (Version 6) - Technical Reference Guide*. Washington, USA : National Institute of Standards and Technologie, März 2013

- [55] PEACOCK, Richard D. ; FORNEY, Glenn P. ; ; RENEKE, Paul A.: *CFAST - Consolidated Model of Fire Growth and Smoke Transport (Version 6) - User's Guide*. Washington, USA : National Institute of Standards and Technologie, März 2013
- [56] MCGRATTAN, Kevin ; MCDERMOTT, Randall ; PRASAD, Kuldeep ; HOSTIKKA, Simo ; FLOYD, Jason: *Fire Dynamics Simulator (Version 5) - Technical Reference Guide, Volume 1: Mathematical Model*. Washington, USA : National Institute of Standards and Technologie, September 2010
- [57] MCGRATTAN, Kevin ; MCDERMOTT, Randall ; PRASAD, Kuldeep ; HOSTIKKA, Simo ; FLOYD, Jason: *Fire Dynamics Simulator (Version 5) - Technical Reference Guide, Volume 2: Verification*. Washington, USA : National Institute of Standards and Technologie, September 2010
- [58] MCGRATTAN, Kevin ; MCDERMOTT, Randall ; PRASAD, Kuldeep ; HOSTIKKA, Simo ; FLOYD, Jason: *Fire Dynamics Simulator (Version 5) - Technical Reference Guide, Volume 3: Validation*. Washington, USA : National Institute of Standards and Technologie, 2009
- [59] MCGRATTAN, Kevin ; MCDERMOTT, Randall ; HOSTIKKA, Simo ; FLOYD, Jason: *Fire Dynamics Simulator (Version 5) - User's Guide*. Washington, USA : National Institute of Standards and Technologie, September 2010
- [60] YEOH, Guan H. ; YUEN, Kwok K.: *Computational Fluid Dynamics in Fire Engineering - Theory, Modelling and Practice*. Oxford : Butterworth-Heinemann, 2009
- [61] HERWIG, Heinz: *Strömungsmechanik - Einführung in die Physik von technischen Strömungen*. Bd. 1. Auflage. Wiesbaden : Vieweg + Teubner, GWV Fachverlage GmbH, 2008
- [62] HERWIG, Heinz: *Strömungsmechanik A-Z - Eine systematische Einordnung von Begriffen und Konzepten der Strömungsmechanik*. 1. Auflage. Wiesbaden : Vieweg + Teubner, GWV Fachverlage GmbH, 2004
- [63] LAURIEN, Eckart ; JR., Herbert O.: *Numerische Strömungsmechanik - Grundgleichungen und Modelle - Lösungsmethoden - Qualität und Genauigkeit*. 4., überarbeitete und erweiterte Auflage. Wiesbaden : Vieweg + Teubner, GWV Fachverlage GmbH, 2011
- [64] KORHONEN, Timo ; HOSTIKKA, Simo: *Fire Dynamics Simulator with Evacuation: FDS+Evac - Technical Reference Guide and User's Guide*. VTT Technical Centre of Finland, 2009 und Juli 2014 (FDS Version 6)
- [65] KRETZ, T. ; GRUENEBOHM, A. ; KAUFMAN, M. ; MAZUR, F. ; SCHRECKENBERG, M.: Experimental Study of pedestrian counterflow in an corridor. In: *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* P10001 (2006)