

Berechnung der Explosionsbereiche von Alkoholen, Ketonen und halogenierten Kohlenwasserstoffen im Gemisch mit Inertgasen

Enis Askar¹, Aksam Abdelkhalik², Detlev Markus³, Thomas Stolz³, Elisabeth Brandes³

¹ Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung, Fachbereich 2.1 „Explosionsschutz, Gase, Stäube“, Berlin

² National Institute for Standards (NIS), Giza, Ägypten

³ Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Fachbereich 3.7 „Grundlagen des Explosionsschutzes“, Braunschweig

Die Explosionsbereiche für Dreistoffsysteme aus Brennstoff, Inertgas und Luft wurden nach dem Modell der konstanten adiabatischen Flammentemperaturprofile berechnet. Für die Parametrisierung des halbempirischen Modells muss der Explosionsbereich für ein bestimmtes Dreistoffsystem aus Brennstoff, Inertgas und Luft bekannt sein. Dann lassen sich Explosionsbereiche desselben Brennstoffs mit einem beliebigen Inertgas und bei einer beliebigen Temperatur berechnen. Ergänzend zu früheren Arbeiten, in denen die Explosionsbereiche für Brenngase aus der homologen Reihe der Alkane und Alkene berechnet worden sind, wurden nun die Berechnungen für 1-Propanol, Aceton und Difluormethan durchgeführt. Als Inertgase wurden neben Stickstoff und Kohlendioxid auch die Edelgase Argon und Helium berücksichtigt. Für die Berechnung der Explosionsbereiche in Systemen mit Helium, ist das Modell erweitert worden, so dass auch die Transporteigenschaften (d.h. Wärmeleitfähigkeit, Diffusionskoeffizient) der Komponenten berücksichtigt werden. Weiterhin ist eine Möglichkeit zur praxisnahen Berechnung der Spitze des Explosionsbereichs implementiert worden. Die Ergebnisse zeigen insgesamt, dass die Berechnung der Explosionsbereiche für Alkohole, Ketone und halogenierte Kohlenwasserstoffe mit ähnlicher Genauigkeit wie für Alkane und Alkene möglich ist. Die vorgenommenen Modifikationen sind geeignet, um auch eine Berechnung für Gasgemische mit Helium durchzuführen, dessen starke inertisierende Wirkung im Vergleich zu den Inertgasen Argon oder Stickstoff vor allem auf den stark unterschiedlichen Transporteigenschaften beruht.

1 Einleitung

Um den hohen Aufwand für die experimentelle Bestimmung von Explosionsbereichen zu reduzieren, wurden in der Vergangenheit immer wieder Berechnungsmodelle entwickelt bzw. weiterentwickelt. Das halbempirische Modell der konstanten Flammentemperaturen bietet einen Kompromiss zwischen den stark vereinfachenden empirischen Berechnungsmodellen, bei denen ein mathematischer Zusammenhang zwischen Ziel- und Einflussgrößen approximiert wird, ohne dass die physikalischen Zusammenhänge näher betrachtet werden, und komplexen Simulationsmodellen, die mit einem extrem hohen Rechenaufwand verbunden sind, um neben der Strömungsdynamik und der adäquaten Simulation der Zündquelle, auch die komplexe Reaktionskinetik bzw. eine geeignete vereinfachte Reaktionskinetik zu berücksichtigen. Das Modell der konstanten Flammentemperaturen kommt zwar nicht wie komplexere numerische Simulationsmodelle ohne experimentelle Daten für eine Parametrisierung aus. Jedoch hat es deutliche Vorteile in der praktischen Anwendung. Wenn die erforderlichen experimentellen Daten für ein Brenngas vorliegen, ist eine schnelle und einfache Abschätzung von Explosionsgrenzen möglich.

Grundlage dieses Modells ist die Annahme von Burgess/Wheeler [1], dass eine selbständige Flammenausbreitung dann möglich ist, wenn durch die erzwungene Verbrennung in einem Volumenelement die benachbarten Volumenelemente mindestens auf eine bestimmte Grenzflammentemperatur aufgeheizt werden. Diese Grenzflammentemperatur lässt sich bisher jedoch nicht theoretisch ableiten, sondern sie wird durch thermodynamische Berechnung der adiabatischen Flammentemperatur für ein Gasgemisch an einer experimentell bestimmten Explosionsgrenze ermittelt. Ist die Grenzflammentemperatur auf diese Weise bestimmt worden, lassen sich die Explosionsgrenzen für ähnliche Systeme, z.B. bei unterschiedlicher Temperatur oder unterschiedlichen Beimischungen von Inertgas berechnen, indem Gemischzusammensetzungen gesucht werden, welche dieselben adiabatischen Flammentemperaturen ergeben. Die Grenzflammentemperatur ist für unterschiedliche Brenngase unterschiedlich.

Das Modell der konstanten Flammentemperaturen wurde in früheren Arbeiten immer wieder weiterentwickelt und für die Berechnung der Explosionsgrenzen von Brenngasen unterschiedlicher Stoffklassen angewendet [2][3][4][5]. Insbesondere bei den homologen Reihen der Alkane und Alkene konnte gezeigt werden, dass das Modell für die Abschätzung von Explosionsbereichen gut geeignet ist. Durch die Berechnung mit konstanten brenngasspezifischen Referenzflammentemperaturprofilen entlang der Explosionsgrenzkurve anstelle einer einzelnen konstanten Referenztemperatur konnte zum einen eine höhere Genauigkeit der Berechnung erreicht werden, zum anderen konnten sogar die Explosionsgrenzen von Ethylenoxid berechnet werden, das auch explosionsartig zerfallen kann [6][7].

In Ergänzung zu früheren Arbeiten [6] [7] [12] wurde in weiteren Arbeiten die Anwendbarkeit des Modells der konstanten Flammentemperaturprofile für Brenngase der Stoffklassen der Alkohole, Ketone und halogenierten Kohlenwasserstoffe im Gemisch mit den Inertgasen Stickstoff, Kohlendioxid, Helium und Argon und unterschiedlichen Temperaturen untersucht.. Auf Basis des Modells wurden die Explosionsgrenzen in Dreistoffsystemen aus Brenngas, Inertgas und Luft in Abhängigkeit der Temperatur und der Art des Inertgases berechnet.

2 Berechnungsmodell

Für die Berechnung der Explosionsgrenzen entlang der Begrenzungslinie des Explosionsbereiches wurden adiabatische Flammentemperaturberechnungen für Gemische aus Brenngas, Inertgas und Luft mit der Software „GasEq“ [8] durchgeführt. Die dafür benötigten thermodynamischen Parameter wurden um Daten aus der Datenbank von NASA [9] und NIST [10] erweitert. Folgende Reaktionsprodukte wurden für die Berechnung berücksichtigt:

C, CH₄, CO, C₂H₆, C₃H₈, CH₃, C₂H₄O, CH₂O, H, H₂, OH, O, O₂, CH₃CHO, HCO, CH, CH₂, CO₂, N₂, H₂O, CN, NH₃, N, NO, NH₂, NH, C₈H₂, C₃H₈O, iso-C₃H₈O, C₄H₁₀O, C₃H₆O, Ar, He.

Für die Gemische mit den halogenierten Kohlenwasserstoffen wurden zusätzlich folgende Reaktionsprodukte berücksichtigt, darunter die in der Arbeit von Magnusson et al. [11] als Haupt-Reaktionsprodukte bei der Verbrennung von fluorierten Kohlenwasserstoffen identifizierten Substanzen:

C₃H₂F₄, COF₂, HF, F₂, F, CF₄, CF, CH₂F₂, C₂F₄, C₂F₆, C₂H₂, C₆H₆, FO, FO₂, C₂H₂F₂, C₂H₄.

Für die automatisierte Berechnung der Explosionsgrenzen nach dem Modell der konstanten Flammentemperaturprofile wurde ein Makro für Microsoft Excel® auf Basis des in „Visual Basic for Applications“ (VBA) programmierten Codes aus [7] verwendet. Das Excel-Makro greift über eine Schnittstelle auf die Software „GasEq“ [8] für die Flammentemperaturberechnung zurück. Die Berechnung der Explosionsgrenzen erfolgt mit dem Excel-Makro in zwei Schritten. Im ersten Schritt werden die Flammentemperaturen entlang der experimentell ermittelten Explosionsgrenzkurve für ein brenngasspezifisches Referenzsystem mit einem bestimmten Inertgas und bei einer bestimmten Temperatur berechnet (siehe Abbildung 1). Dieses Referenz-Flammentemperaturprofil wird dann im zweiten Schritt verwendet, um die Explosionsgrenzen für ein Zielsystem mit demselben Brenngas, aber im Gemisch mit unterschiedlichen Inertgasen bei beliebigen Temperaturen zu berechnen. Dazu werden für verschiedene Inertgasanteile im Zielsystem, iterativ die Brenngasanteile gesucht, bei denen die Flammentemperatur mit der entsprechenden Flammentemperatur des Referenzprofils übereinstimmt.

Gegenüber dem Algorithmus aus **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.** wurden zwei wesentliche Änderungen vorgenommen. Um eine Berechnung der Explosionsgrenzen auch für Stoffsysteme mit Helium zu ermöglichen, wurden auf Grundlage eines von Thiel-Böhm [3] beschriebenen Ansatzes für die Flammentemperaturberechnung, die mit „GasEq“ berechneten Flammentemperaturen gemäß Gleichung 2 korrigiert. Dazu wurden die Transporteigenschaften der Gase über die dimensionslose Lewis-Zahl Le für die Berechnung der Flammentemperatur berücksichtigt (siehe Gleichung 1).

$$Le = \frac{\lambda_m}{D_{k,m} * \rho_m * c_{p,m}} , \quad (1)$$

mit: λ_m : thermische Wärmeleitfähigkeit des Gasgemischs
 $D_{k,m}$: Diffusionskoeffizient des Brenngases im Gemisch
 ρ_m : Dichte des Gasgemischs
 $c_{p,m}$: molare Wärmekapazität des Gemischs

$$T_{F,corr} = T_0 + (T_F - T_0) * Le^{-0,564}, \quad (2)$$

mit: T_0 : Anfangstemperatur
 T_F : berechnete adiabatische Flammentemperatur
 $T_{F,corr}$: korrigierte Flammentemperatur

Die Transporteigenschaften der Gase wurden gemäß [14][15][16][17][18][19] mit Daten aus „GasEq“ [8], NASA [9] und NIST [10] berechnet. Der Exponent der Lewis-Zahl von -0,564 in Gleichung 2, wurde durch eine mathematische Anpassung gemäß der Methode der kleinsten Quadrate mit der GRG nichtlinearen Lösungsmethode [20] von Microsoft Excel® ermittelt. Dazu wurde das mit „GasEq“ [8] berechnete Temperaturprofil entlang der experimentell bestimmten Explosionsgrenzkurve im Dreistoffsystem aus 2-Propanol, Helium und Luft bei 130 °C an das mit „GasEq“ [8] berechnete Temperaturprofil entlang der experimentell bestimmten Explosionsgrenzkurve im Dreistoffsystem aus 2-Propanol, Argon und Luft bei 130 °C mit dem Exponenten der Lewis-Zahl als Parameter angepasst.

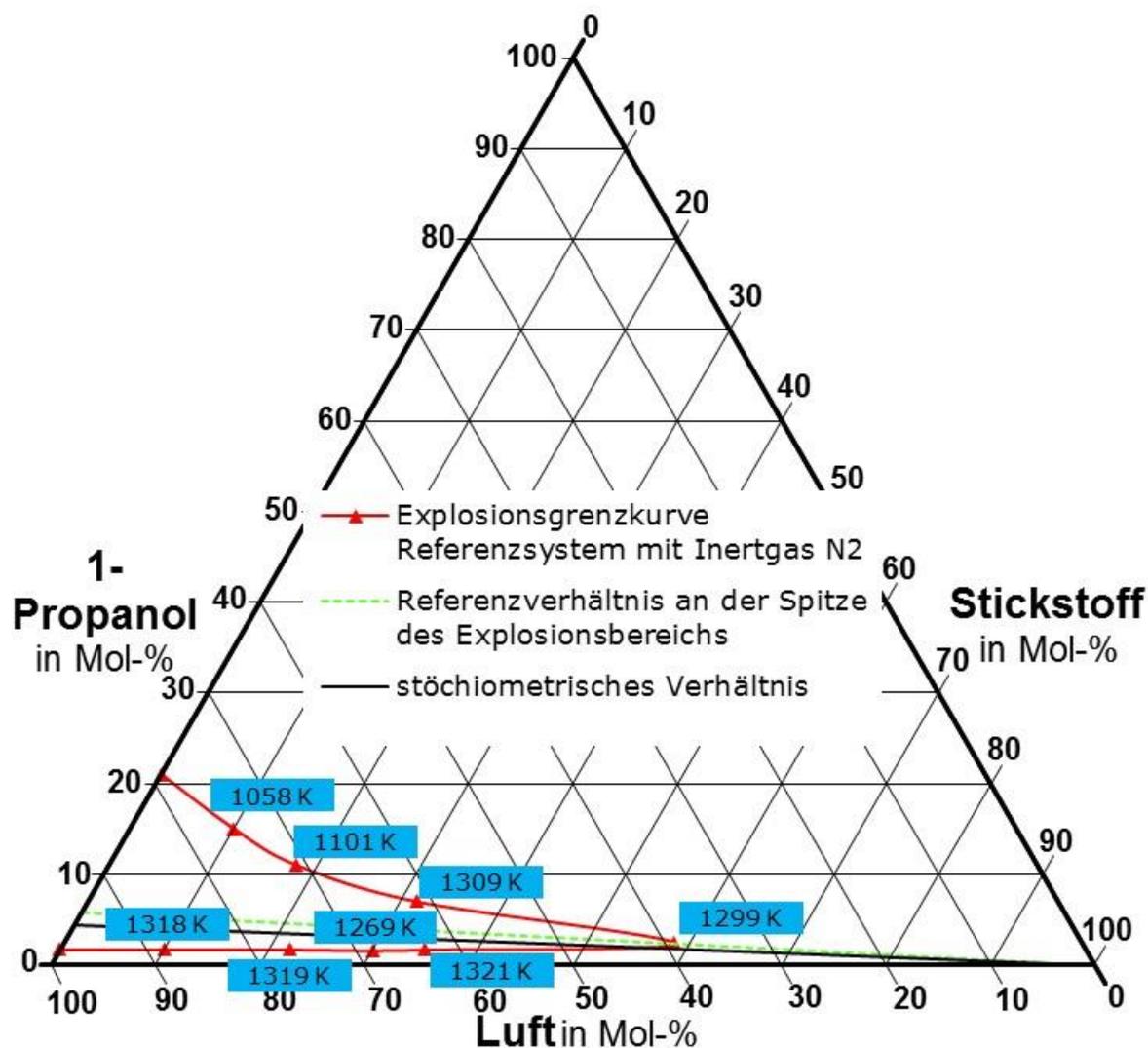


Abbildung 1: Referenzflammentemperaturprofil
Referenzsystem: 1-Propanol, Stickstoff und Luft bei 130 °C

Die zweite Änderung, die gegenüber dem Algorithmus aus [7] vorgenommen worden ist, betrifft die Berechnung der Spitze des Explosionsbereichs im Dreiecksdiagramm. Bei der Berechnung der Spitze der Explosionsbereiche wurde angenommen, dass das Verhältnis aus Brenngas und Luft für ein bestimmtes Brenngas an der Spitze unabhängig von der Art des Inertgases oder Temperatur konstant ist. Dieses Verhältnis wurde jeweils aus den experimentellen Daten im Referenzsystem berechnet (Referenzverhältnis) und dann für die Berechnung der Spitzen in den Zielsystemen mit gleichem Brenngas, aber unterschiedlichen Inertgasen bzw. Temperaturen verwendet.

3 Ergebnisse und Diskussion

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Berechnung der Explosionsbereiche für Dreistoffsysteme aus Brennstoff, Inertgas und Luft mit den Brennstoffen 1-Propanol, Aceton, Difluormethan und Ethan vorgestellt. Für die Berechnungen wurden jeweils experimentelle Ergebnisse für Dreistoffsysteme mit Stickstoff als Inertgas verwendet, um für jeden der

betrachteten Brennstoffe ein Referenzflammentemperaturprofil zu ermitteln. Mit diesen Referenzflammentemperaturprofilen wurden dann die Explosionsbereiche für Dreistoffsysteme mit einem der Inertgase Argon, Helium oder Kohlendioxid bei 20 °C bzw. 130 °C berechnet. In Abbildung 2 bis Abbildung 5 sind die Ergebnisse der Berechnung sowie experimentelle Ergebnisse für alle untersuchten Brennstoffe in Dreiecksdiagrammen dargestellt. Die experimentellen Ergebnisse sind in der Datenbank CHEMSAFE [21] zu finden. In Tabelle 1 sind die maximalen sowie die durchschnittlichen Abweichungen der Berechnungen von den experimentellen Werten zusammengefasst.

Es ist zu erkennen, dass sich die Explosionsgrenzen mit der angewandten Berechnungsmethode für alle untersuchten Brennstoffe mit ähnlicher Genauigkeit berechnen lassen. In der europäischen Norm EN 1839 [22] werden Toleranzspannen für die Verifizierung von Prüfeinrichtungen mit verschiedenen Kalibriergasen von bis zu 0,2 Mol-% an den unteren Explosionsgrenzen und bis zu 0,7 Mol-% an den oberen Explosionsgrenzen vorgegeben. Unter Berücksichtigung dessen wurde mit der angewandten Berechnungsmethode eine hohe Genauigkeit für die Berechnung der unteren und oberen Explosionsgrenzen erreicht mit einer durchschnittlichen Abweichung von 0,5 Mol-% über alle untersuchten Systeme. Die Genauigkeit der Berechnung der Spitzen der Explosionsbereiche ist in absoluten Werten zwar deutlich niedriger. Es ist allerdings zu berücksichtigen, dass die experimentelle Reproduzierbarkeit für die Bestimmung der Spitze des Explosionsbereichs weitaus schlechter ist als für die Bestimmung der unteren oder oberen Explosionsgrenze in Luft. Bezieht man die Abweichungen an den Spitzen der Explosionsbereiche nicht auf den Anteil der „Pseudokomponente“ Luft, sondern auf den Anteil an Sauerstoff, der eigentlichen Mangelkomponente für eine Explosion im Bereich der Spitze, so sind die beobachteten Abweichungen zwischen Berechnungen und Experimenten vergleichbar mit den Abweichungen an den unteren und oberen Explosionsgrenzen. Vor diesem Hintergrund wird auch im Bereich der Spitze eine hohe Genauigkeit mit der angewandten Berechnungsmethode erreicht.

Die Berechnung der Spitzen der Explosionsbereiche mit dem Inertgas Kohlendioxid ist signifikant ungenauer als die Berechnung aller anderen Explosionsgrenzen. Die Explosionsbereiche in den Dreistoffsystemen mit Kohlendioxid werden an den Spitzen offensichtlich systematisch überschätzt. Die Ursache konnte hier nicht abschließend geklärt werden. Die Spitzen der Explosionsbereiche in den Dreistoffsystemen mit Argon und Helium hingegen, konnten mit einer sehr hohen Genauigkeit berechnet werden.

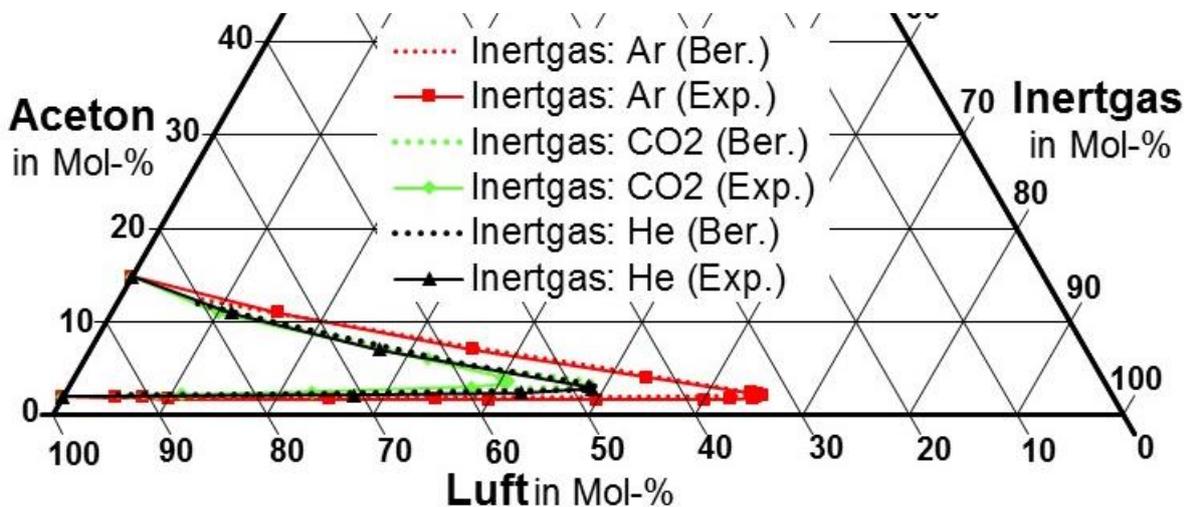


Abbildung 2: Experimentell ermittelte und berechnete Explosionsbereiche von Aceton bei 130 °C im Dreistoffsystem mit Luft und verschiedenen Inertgasen

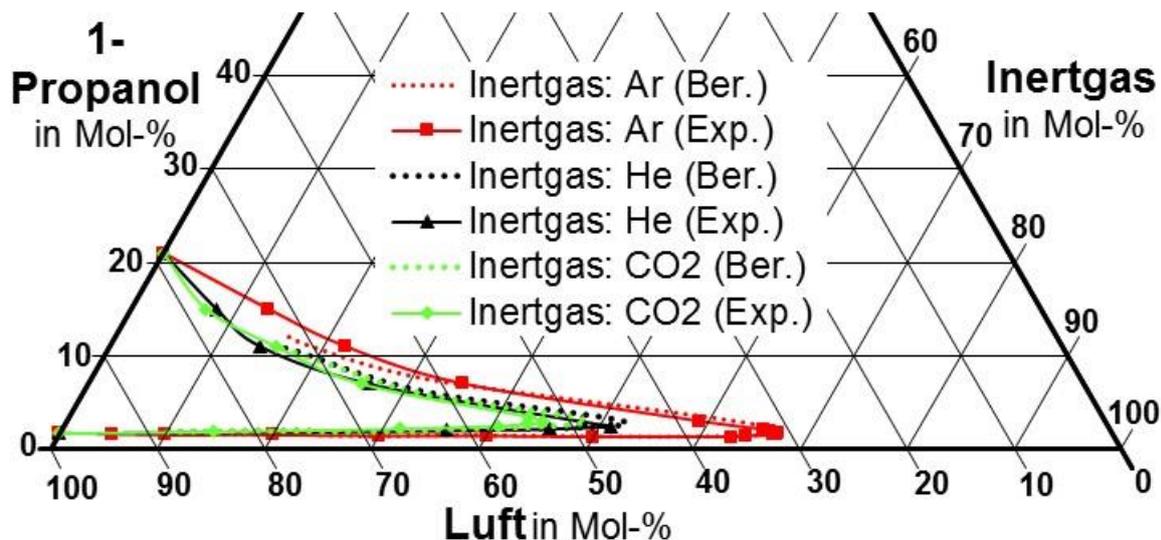


Abbildung 3: Experimentell ermittelte und berechnete Explosionsbereiche von 1-Propanol bei 130 °C im Dreistoffsystem mit Luft und verschiedenen Inertgasen

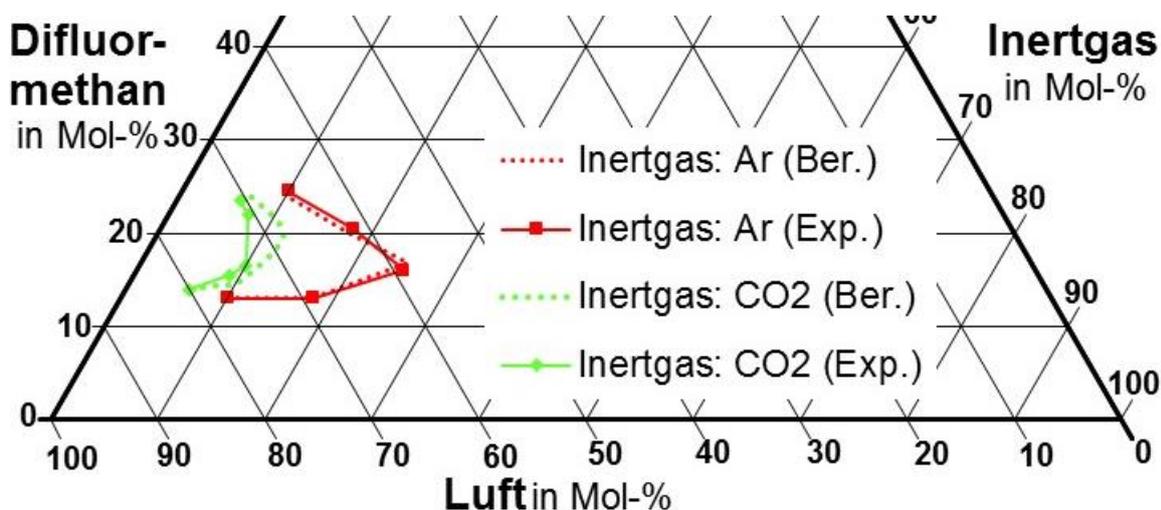


Abbildung 4: Experimentell ermittelte und berechnete Explosionsbereiche von Difluormethan bei 40 °C im Dreistoffsystem mit Luft und verschiedenen Inertgasen

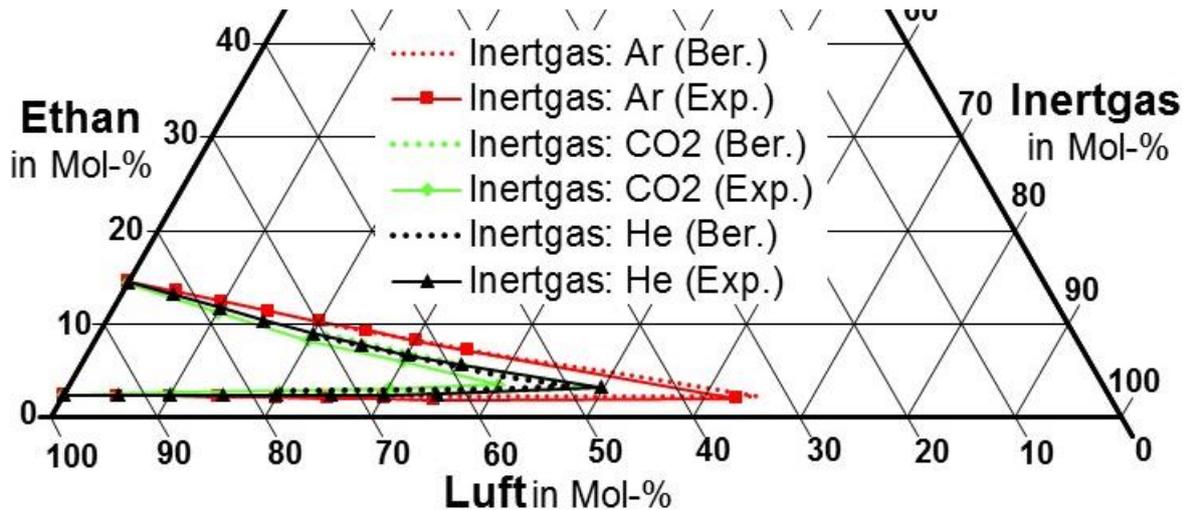


Abbildung 5: Experimentell ermittelte und berechnete Explosionsbereiche von Ethan bei 20 °C im Dreistoffsystem mit Luft und verschiedenen Inertgasen

Tabelle 1: durchschnittliche und maximale Abweichungen der berechneten von den experimentell ermittelten Explosionsgrenzen über alle in Abbildung 1 bis Abbildung 4 dargestellten Explosionsbereiche

	Explosionsgrenzen entlang der Begrenzungslinie des Explosionsbereichs ohne Spitze (Brenngasanteil)	Spitze des Explosionsbereichs (Luftanteil)	Spitze des Explosionsbereichs (Sauerstoffanteil)
durchschnittliche Abweichung (absolut)	0,5 Mol-%	2,7 Mol-%	0,6 Mol-%
maximale Abweichung (absolut)	2,6 Mol-%	7,8 Mol-%	1,6 Mol-%

4 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

Das Modell der konstanten Flammentemperaturprofile wurde in den hier vorgestellten Arbeiten für die Berechnung der Explosionsbereiche von 1-Propanol, Aceton und Difluormethan im Dreistoffsystem mit einem beliebigen Inertgas und Luft bei einer beliebigen Temperatur eingesetzt. Die Berechnung erfolgte automatisiert mit einem Algorithmus, der in Visual Basic for Applications (VBA) für Microsoft Excel® programmiert worden ist [7]. Für die Berechnung der Flammentemperaturen wurde über eine Schnittstelle auf das frei erhältliche Programm „GasEq“ [8] zurückgegriffen. Der Algorithmus ist für die Berechnungen erweitert worden. Zum einen wurden die Transporteigenschaften der Gase für die Berechnung der Flammentemperaturen berücksichtigt, um auch Explosionsbereiche für Dreistoffsysteme mit Gasen mit stark unterschiedlichen Transporteigenschaften zu berechnen, wie im Falle von Helium. Zum anderen wurde eine praxisnahe Berechnung der Spitze des Explosionsbereichs implementiert.

Insgesamt ist anhand der Ergebnisse zu erkennen, dass die Berechnung der Explosionsbereiche von Ketonen, Alkoholen und halogenierten Kohlenwasserstoffen in Dreistoffsystemen mit verschiedenen Inertgasen und bei verschiedenen Anfangstemperaturen mit dem Modell der konstanten Flammentemperaturprofile grundsätzlich mit ähnlicher Genauigkeit möglich ist, wie für Stoffe der homologen Reihe der Alkane. Allerdings setzt die Anwendung des Berechnungsmodells immer voraus, dass der Explosionsbereich für ein Dreistoffsystem mit dem gleichen Brenngas und einem beliebigen Inertgas bei einer beliebigen Temperatur bereits bekannt ist.

Durch die vorgenommene Modifikation zur Berücksichtigung der Transporteigenschaften der Gase bei der Berechnung der Flammentemperaturen wurde für die Dreistoffsysteme mit Helium als Inertgas eine ähnliche Genauigkeit erreicht wie für die Systeme mit anderen Inertgasen. Mit der vorgenommenen Modifikation für die Berechnung der Spitzen der Explosionsbereiche liefert die Berechnung an den Spitzen bezogen auf den Sauerstoffanteil größtenteils Ergebnisse mit ähnlicher Genauigkeit, wie bei den übrigen Explosionsgrenzen. Nur bei Dreistoffsystemen mit Kohlendioxid als Inertgas ist eine signifikant höhere Ungenauigkeit zu beobachten.

Literaturverzeichnis

- [1] **Burgess, M. J.; Wheeler, R. V.**, "The lower limit of inflammation of mixtures of the paraffin hydrocarbons with air"; Journal of the Chemical Society 99, London 1911, S. 2013-2030
- [2] **Linnemann, D.**, Experimentelle und rechnerische Bestimmung der Zündgrenzen des Systems Kohlenmonoxid-Inertgas-Luft, Fortschritt-Berichte VDI, Reihe 3, Nr. 143; VDI-Verlag GmbH, Düsseldorf 1987
- [3] **Thiel-Böhm, A.**, Explosionsgrenzen methanhaltiger Brenngasgemische - Experimentelle Bestimmung und Simulation, Fortschritt-Berichte VDI, Reihe 3, Nr.258; VDI-Verlag GmbH, Düsseldorf 1991
- [4] **Stickling, J.**, Einfluss von Inertgasen auf die Explosionsgrenzen organischer Gase und Dämpfe homologer Reihen – Experimentelle Bestimmung und Simulation; Fortschritt-Berichte VDI, Reihe 3, Nr.663; VDI-Verlag GmbH, Düsseldorf 2000
- [5] **Holtappels, K.**, Chemisch Instabile Gase: Inert- und Brenngaseinfluss auf die Stabilitätsgrenzdrücke von Acetylen und Ethylen; Vdm Verlag Dr. Müller, Saarbrücken 2008
- [6] **Askar, E., Schröder, V., Steinbach, J.**, "Calculation of Explosion Regions of Gas Mixtures". Proceedings of the 13th International Symposium on Loss Prevention, Brügge, Belgien, Vol. 2, 2010, S. 141-149
- [7] **Askar, E.**, Experimentelle Bestimmung und Berechnung sicherheitstechnischer Kenngrößen ethylenoxidhaltiger Gasphasen, Dissertation, Technische Universität Berlin, 2011
- [8] **Morley, C. (2015)**, GASEQ – A chemical equilibrium program for windows. Online in <http://www.gaseq.co.uk>. (Stand: 3. Juni, 2015)
- [9] **Gordon, S., & McBride, B. J.**, Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions and applications. NASA Reference Publication, 1311, 1994
- [10] **NIST**, Online auf <http://webbook.nist.gov/chemistry/name-ser>. (Stand: 3. Juni, 2015)
- [11] **Magnusson, R., Hägglund, L., Gustafsson, A., Bergström, U., Lejon, C.**, Identification and brief toxicological assessment of combustion products of the

- refrigerant HFO-1234yf. FOI-R--4285—SE, FOI, Swedish Defence Research Agency, 2016
- [12] **Abdelkhalik, A., Askar, E., Markus, D., Brandes, E., El-sayed, I., Hassan, M., Nour, M., Stolz, T.**, “Explosion regions of propane, isopropanol, acetone, and methyl acetate/inert gas/air mixtures”, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* Vol. 43, Elsevier Ltd., Amsterdam 2016, S. 669 -675, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jlp.2016.04.001>
- [13] **Molnárné, M., Schendler, T., & Schröder, V.**, *Safety characteristic data- Volume 2: explosion regions of gas mixtures.* (2nd ed.). Bremerhaven: Wirtschaftsverlag NW, 2008
- [14] **Stiel, L.I., Thodos, G.**, “The Thermal Conductivity of Nonpolar Substances in the Dense Gaseous and Liquid Regions”, *AIChE. Journal* Vol. 10, No. 1, American Institute of Chemical Engineers, New York, NY 1964, S. 26-30
- [15] **Chapman, S., and Cowling, T. G.**, *The Mathematical Theory of Nonuniform Gases*, Cambridge, New York, 1939.
- [16] **Hirschfelder, J.O., Curtiss, C.F., Bird, R.B.**, *Molecular theory of gases and liquids*, 4. Auflage. John Wiley and Sons, New York 1967
- [17] **Touloukian, Y.S., Liley, P.E., Saxena, S.C.**, *Thermophysical Properties of Matter, Vol. 3, Thermal Conductivity*, IFI/Plenum, Washington 1970
- [18] **Blanc, A.**, “Mobility of ions in gases”, *Journal de Physique Théorique et Appliquée* Vol. 7/1, 1908, S. 825ff
- [19] **Marrero, T. R., Mason E. A.**, “Gaseous diffusion coefficients”, *Journal of Physical and Chemical Reference Data* Vol. 1 Issue 1, NIST, 1972, S. 3-118
- [20] **Lasden, L. S. et al.**, *Nonlinear optimization using the generalized reduced gradient method*, Case Western Reserve University prepared for Office of Naval Research. NTIS National Technical Information Service U. S. Department of commerce, 5285 Port Royal Road, Springfield Va. 22151, 1973
- [21] **PTB, BAM, DECHEMA, CHEMSAFE®** - Datenbank für empfohlene sicherheitstechnische Kenngrößen, Inhouse-Version 2014
- [22] **DIN EN 1839:2017**, „Bestimmung der Explosionsgrenzen von Gasen und Dämpfen und Bestimmung der Sauerstoffgrenzkonzentration (SGK) für brennbare Gase und Dämpfe“, Deutsche Fassung