

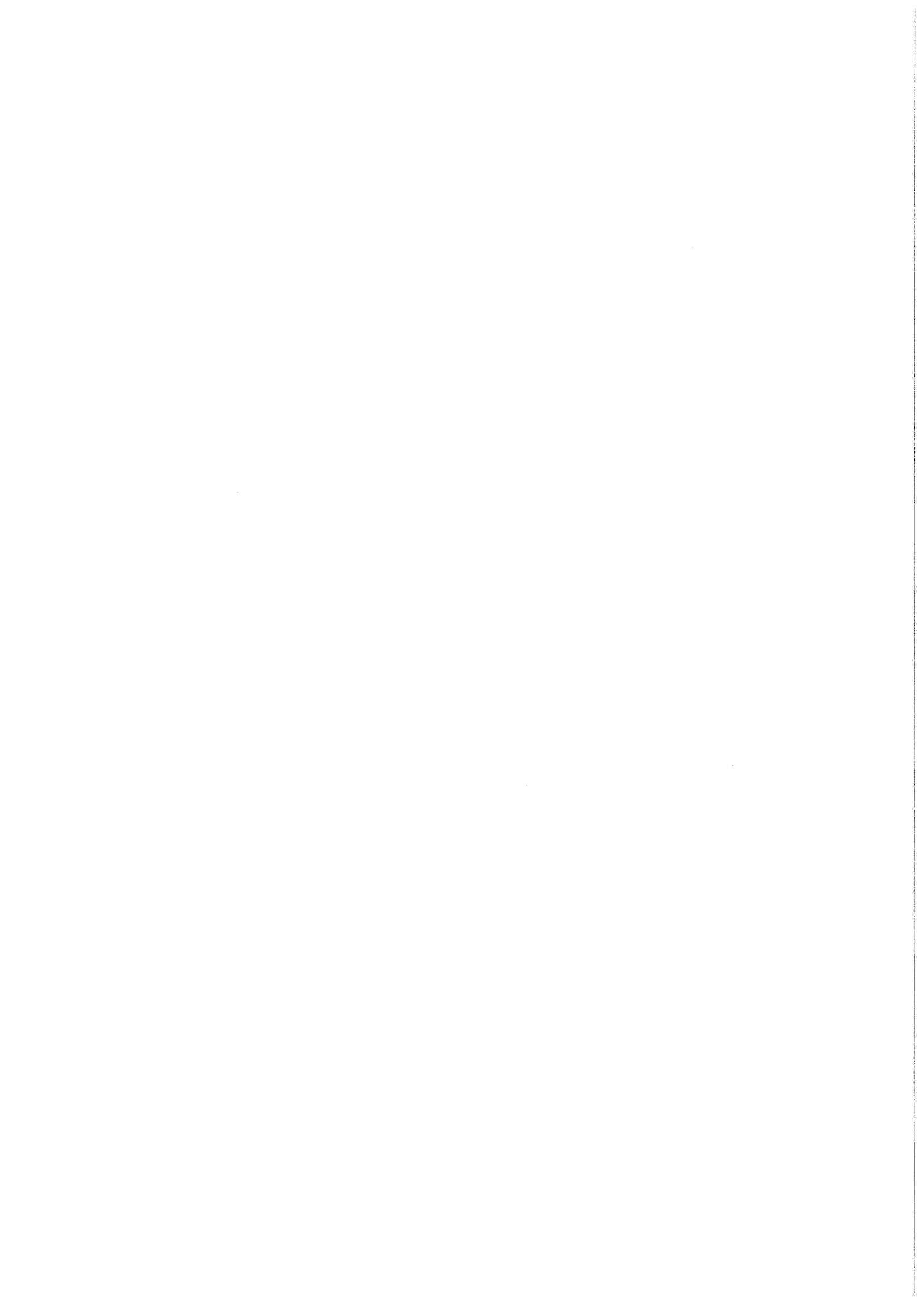
KfK 3545
November 1983

PARDISEKO IV

**Ein Computerprogramm zur
Berechnung des Aerosolverhaltens
in geschlossenen Behältern**

**H. Bunz
Laboratorium für Aerosolphysik und Filtertechnik
Projekt Schneller Brüter**

Kernforschungszentrum Karlsruhe



KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Laboratorium für Aerosolphysik und Filtertechnik
Projekt Schneller Brüter

KfK 3545

PARDISEKO IV

Ein Computerprogramm zur Berechnung des Aerosolverhaltens
in geschlossenen Behältern

H. Bunz

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
ISSN 0303-4003

Zusammenfassung

Dieser Bericht beinhaltet eine Beschreibung des Computerprogramms PARDISEKO IV, dessen Aufgabe die Berechnung des zeitlichen Verhaltens eines polydispersen Aerosolsystems in einem geschlossenen Behälter ist. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Beschreibung der Erweiterungen im Vergleich zum Vorgängerprogramm PARDISEKO IIIb sowie auf der detaillierten Beschreibung der Ein- und Ausgabe.

PARDISEKO IV - A Computer Program for the Calculation of the Aerosol Behaviour in Closed Vessels

Abstract

This report describes the computer program PARDISEKO IV. Its purpose is to calculate the behaviour of a polydisperse aerosol system in a closed vessel as a function of the time. The main object is to describe the extensions added in comparison to the former version PARDISEKO IIIb as well as to explain the input and output.

Inhaltsverzeichnis

Seite

Zusammenfassung

1. Einleitung

1

2. Modellgleichung

2

3. Numerische Lösungsmethode

6

4. Programminput

8

5. Programmoutput

18

6. Zusammenfassung und Diskussion

22

7. Literatur

24

Symbole

26

1. Einleitung

Das Computerprogramm PARDISEKO IV beschreibt das Verhalten eines polydispersen Aerosolsystems in einem abgeschlossenen Volumen. Obwohl es im Prinzip unter den noch zu erwähnenden einschränkenden Voraussetzungen in der Lage ist, das Verhalten beliebiger Aerosolsysteme zu berechnen, sind die Ein- und Ausgabe des Programms sowie eine Reihe von Unterprogrammen unter besonderer Berücksichtigung der Randbedingungen ausgelegt, wie sie bei einem schweren hypothetischen Störfall im Containment eines natriumgekühlten Reaktors zu erwarten sind.

Das Programm wurde aus dem Vorläuferprogramm PARDISEKO IIIb /1/ entwickelt, dessen Numerik und Struktur im wesentlichen übernommen wurde. Die Hauptmotivation zur Weiterentwicklung des Programms entstand aus der Tatsache, daß es nicht möglich war, eine bestimmte Gruppe von Experimenten mit dem bisherigen Programm durch Eingabedaten, die innerhalb des durch die Experimente vorgegebenen Bereichs liegen, nachzurechnen. Dies bedeutete, daß zusätzliche, bislang nicht berücksichtigte, physikalische Effekte Einfluß auf das Aerosolverhalten haben müssen. Da bei allen hier angesprochenen Experimenten interne Wärmequellen im Versuchsbehälter vorkamen, jede derartige Wärmequelle aber eine natürliche Konvektion, die meistens in eine turbulente Strömung umschlägt, verursacht, lag es nahe, mit dieser Konvektion verbundene Abscheideeffekte zu berücksichtigen /2/. Nach einer Reihe von Versuchen erschienen dazu die Ansätze, wie sie von Sehmel in /3/ abgeleitet wurden, für die Rechnung am geeignetsten sowie die damit erzielten Ergebnisse am vertrauenswürdigsten. Diese Formeln sind nun im Programm PARDISEKO IV verfügbar. Zusätzlich (im Vergleich zu PARDISEKO IIIb) wurden noch eine Reihe von Änderungen des Inputs und Outputs durchgeführt, die insbesondere die Vergleichbarkeit der Rechnungen mit den Experimenten erleichtern sollen.

2. Modellgleichung

PARDISEKO IV liegt prinzipiell dasselbe Differentialgleichungssystem wie PARDISEKO IIIb zugrunde. Dieses soll hier deswegen nur der Vollständigkeit wegen nochmals wiedergegeben werden und nur in den Einzelheiten, in denen es von dem in /1/ beschriebenen abweicht, genauer erläutert werden. Da die bezüglich des Logarithmus des massen-äquivalenten Radius lineare Diskretisierung des Partikelgrößenbereichs sich für die Anwendung bei Störfallrechnungen bewährte, wurde sie beibehalten. Die in PARDISEKO IV verwendete Modellgleichung läßt sich somit wie folgt formulieren:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(r_i, t)}{\partial t} = & S(r_i, t) - (\alpha_V(r_i) + \alpha_C(r_i) + \alpha_S(r_i) + \alpha_T(r_i) + \alpha_L(r_i)) \cdot n(r_i, t) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{K=1}^N \sum_{j=1}^N K(r_K, r_j) \cdot \beta_{Kj}^i \cdot n(r_K, t) \cdot n(r_j, t) \\ & - n(r_i, t) \cdot \sum_{j=1}^N K(r_i, r_j) \cdot n(r_j, t) \cdot (1 - \frac{1}{2} \delta_{ij}) \end{aligned}$$

$$i = 1, \dots, N \quad (1)$$

mit

$$\begin{aligned} \beta_{Kj}^i = & \frac{V_{i+1} - (V_K + V_j)}{V_{i+1} - V_i} \quad + \quad \text{für } (V_K + V_j) \in (V_i, V_{i+1}) \\ & - \quad \text{für } (V_K + V_j) \in (V_{i-1}, V_i) \quad (2) \\ & 0 \quad \text{sonst} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \alpha_V(r) = & \alpha_D(r) + \alpha_{VT}(r) \\ = & \left(\frac{k \cdot T \cdot B(r)}{\delta_D} + v_{VT}(r) \right) \cdot \frac{A_D}{V} \quad (3) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha_C(r) &= \alpha_D(r) + \alpha_{CT}(r) \\ &= \left(\frac{k \cdot T \cdot B(r)}{\delta_D} + v_{CT}(r) \right) \cdot \frac{A_C}{V} \end{aligned} \quad (4)$$

$$\alpha_S(r) = \frac{4\pi}{3} r^3 \cdot \rho \cdot g \cdot B(r) \cdot C_T(r) \cdot \frac{A_S}{V} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \alpha_T(r) &= \frac{9\pi \eta^2 r}{\rho g} \cdot \frac{1}{1 + 3C_m \cdot Kn} \cdot \frac{\frac{k_g}{k_s} + C_t \cdot Kn}{1 + 2 \cdot \frac{k_g}{k_s} + 2C_t \cdot kn} \\ &\quad \cdot \frac{B(r)}{\delta_T \cdot V \cdot T} \cdot \sum_{k=1}^{NT} \Delta T_k \cdot A_{T_k} \end{aligned} \quad (6)$$

Die Koeffizienten α_V , α_C , α_S und α_T sind dabei die Abscheidungskoeffizienten an den vertikalen Wänden, an der Deckenfläche, an der Bodenfläche aufgrund der Sedimentation und an verschiedenen Wandabschnitten aufgrund von Thermophorese. Der Koeffizient α_L ist ein beliebiger prinzipiell auch partikelgrößenabhängiger Leckagekoeffizient. Die Gleichungen für die Abscheidungskoeffizienten unterscheiden sich von den in /1/ angegebenen in folgenden Punkten:

a) Es wird nun zwischen der Partikelabscheidung an senkrechten (Index V) und waagrechten nach unten zeigenden (Index C) Flächen unterschieden. In PARADISEKO IIIb wurde bezüglich beider Flächen lediglich Diffusionsabscheidung mit jeweils gleicher Geschwindigkeit angenommen.

b) An den senkrechten Wänden kommt zur bisherigen Diffusionsabscheidung ($\alpha_D(r)$) ein zweiter Term hinzu, der den Transport zur Wand aufgrund von turbulentem Transport beschreibt. Dieser ist nach /4/ gegeben zu:

$$v_{VT}(r) = u^*/Int(r) \quad (7)$$

Zu beachten ist hier, daß das Vorzeichen des diffusiven Widerstandsintegrals $Int(r)$ umgekehrt definiert ist wie in /4/.

- c) An den Deckenflächen kommt analog ein weiterer, aber von (7) verschiedener Term hinzu

$$v_{CT}(r) = \frac{v_{sed}(r)}{\exp(v_{sed}(r) \cdot \text{Int}(r)/u^*) - 1} \quad (8)$$

- d) Da die Sedimentation zum Boden hin durch die turbulente Strömung verstärkt wird, ist die normale Sedimentationsgeschwindigkeit

$$v_{sed}(r) = \frac{4\pi}{3} r^3 \cdot \rho \cdot g \cdot B(r) \quad (9)$$

durch

$$v_{ST}(r) = v_{sed}(r) \cdot C_T(r) \quad (10)$$

mit

$$C_T(r) = (1 - \exp(-v_{sed}(r) \cdot \text{Int}(r)/u^*))^{-1} \quad (11)$$

zu ersetzen.

- e) Da über verschiedenen Teilen der Gesamtoberfläche verschiedene Temperaturgradienten herrschen können, wurde die Möglichkeit geschaffen, über unterschiedlich großen Oberflächen die dort jeweils vorhandenen Temperaturgradienten als Funktion der Zeit zu berücksichtigen.

$(T - T_w) \cdot A_T$ aus /1/ ist deswegen durch die Summe

$$\sum_{k=1}^{NT} \Delta T_k \cdot A_{T_k} \quad \text{zu ersetzen.}$$

Für die Koagulationswahrscheinlichkeit $K(r, r')$ wird im wesentlichen derselbe Ausdruck wie in /1/ verwendet:

$$K(r, r') = 4 \pi k T f (B(r) + B(r')) (r + r') + \epsilon(r, r') \frac{4\pi}{3} f g \\ |r^3 B(r) - r'^3 B(r')| \cdot \pi \cdot (r + r')^2 \quad (12)$$

Mit dem Ansatz für die Partikelbeweglichkeit nach /5/ in Verbindung mit /6/

$$B(r) = \frac{1}{\kappa_0 \pi \eta r} (1 + AKn + QKn C^{-b/Kn}) \quad (13)$$

Im Unterschied zu /1/ wird für die Kollisionswahrscheinlichkeit nun stets der Ausdruck verwendet, wie er in /7/ angegeben wird

$$\varepsilon(r, r') = \frac{1}{2} \frac{(r'/r)^2}{(1 + r'/r)^2}, \quad r' < r \quad (14)$$

Dieser Ansatz berücksichtigt die Umströmung der größeren Partikeln durch das Trägergas beim Fall mit der ihrer Größe entsprechenden stationären Fallgeschwindigkeit, wodurch das kleinere von seiner gradlinigen Bahn abgelenkt wird, indem es dieser Strömung zum Teil folgt. Dies entspricht einer effektiven Reduktion des Wirkungsquerschnitts ($\pi (r + r')^2$), welcher sich bei rein geometrischer Interzeption und gradlinigem Fall ergeben würde. Voraussetzungen für Gleichung (14) sind zum einen Stokesströmung um die Partikeln, die aber für die Reynoldszahlen, die sich beim Fall der mit PARDISEKO zu untersuchenden Partikeln ergeben, angenommen werden kann, sowie daß $r' \ll r$ ist. Wie die in /7/ zitierten Berechnungen von Davis /8/ zeigen, läßt sich Gleichung (14) trotzdem recht gut bis in die Bereiche $r' \approx r$ extrapolieren. Die Annahme der Stokesströmung ist gültig bis zu Partikelradien von etwa 30 μm (entsprechend einer Reynoldszahl von 0,4), für größere Partikeln muß mit dem Umschlagen im Potentialströmung gerechnet werden, was eine Vergrößerung der Einfangwahrscheinlichkeit bedingt. Dies gilt insbesondere für den Einfang ähnlich großer Partikeln. Da aber zum einen derartig große Partikeln eine verhältnismäßig kurze Verweilzeit im Containment haben und zum anderen Verwendung von Gleichung (14) die Einfangwahrscheinlichkeit für diese unterschätzt und somit diese Verweilzeit bei Verwendung der für dieses Regime gültigen Ansatzes nur noch etwas weiter verkürzt werden würde, ist die Verwendung von Gleichung (14) für alle Partikelgrößen als auf der sicheren Seite liegend zu betrachten und somit gerechtfertigt.

...

Früher zum Teil parametrisch verwendete, über den ganzen Partikelgrößenbereich konstante Werte für $\epsilon(r, r')$ sind nicht mehr zugelassen, da sie physikalisch unsinnig sind und zu entsprechenden Ergebnissen führen. Die mit $\epsilon(r, r') = 0$ durchgeführten Rechnungen sind aber als auf jedem Fall auf der sicheren Seite liegend zu betrachten, was für alle früheren Auslegungsrechnungen (z. B. /9/) zutrifft.

Zur Berechnung der Widerstandsintegrale $\text{Int}(r)$ in Gleichung (7), (8), (11) ist ein eigenes Computerprogramm erforderlich, da sie nur numerisch berechenbar sind. Da wie in /1/ auch in PARDISEKO IV eine über die gesamte Problemzeit feste Partikelgrößenklasseneinteilung verwendet wird, können diese Integrale für jede vorkommende Partikelgröße getrennt von der eigentlichen PARDISEKO-Rechnung berechnet und auf eine Datei gespeichert werden. Diese kann dann für jede neue Rechnung mit gleicher Partikelgrößeneinteilung wieder verwendet werden (siehe dazu auch Beschreibung des Inputs).

3. Numerische Lösungsmethode

a) Wahl der unabhängigen Variablen

Da der Größenbereich der vorkommenden Partikeln meistens über mehrere Größenordnungen reicht und als Quellgrößenverteilungen meist Lognormalverteilungen verwendet werden, wird nach wie vor der Logarithmus des massenäquivalenten Radius' als unabhängige Variable benutzt. Obwohl dies vom Prinzip her keineswegs notwendig ist, erscheint es sinnvoll, bei dieser Wahl zu bleiben, da dadurch der gesamte Partikelgrößenbereich am besten repräsentiert wird.

b) Wahl des Größenbereichs

Wie bereits erwähnt, wird zu Beginn jeder Rechnung eine feste Größenklasseneinteilung vorgegeben, welche durch die 3 Inputparameter RMIN und RMAX (kleinster und größter Partikelradius) und K2 (Zahl der Partikelklassen)

...

bestimmt wird. Die Parameter RMIN und RMAX müssen so gewählt werden, daß das gesamte, während der Rechnung vorkommende Partikelspektrum innerhalb des durch diese definierten Bereichs liegt. Der Parameter K2 sollte einen Wert größer oder gleich ca. 80 haben, wie Parameterrechnungen mit dem ähnlich strukturierten Computercode ABC-3 zeigen /10/, da sonst die Partikelgrößenverteilung nicht mehr genau genug approximiert wird, was zu systematischen Abweichungen von den Sollwerten führt. Unter Sollwerten seien dabei die Werte zu verstehen, die man bei einer sehr großen Anzahl (im approximativen Grenzfall ∞) und damit entsprechend guter Annäherung an das kontinuierliche Spektrum erhält.

Im übrigen gelten die in /1/ zur Wahl des Größenbereichs aufgestellten Regeln nach wie vor.

c) Zeitintegration

Wie in /1/ bereits beschrieben, wird das N-dimensionale Differentialgleichungssystem (Gleichung (1)) mittels eines selbststeuernden Euler-Canchy-Verfahren integriert. Die Stabilität des Verfahrens wird dadurch gewährleistet, daß die relative Abweichung der Resultate nach einem vollen und zwei halben Zeitschritten einen bestimmten vorgegebenen Wert nicht überschreiten darf. Bei Überschreitung dieses Wertes wird der nächste Zeitschritt entsprechend verkleinert, bei Unterschreitung wird er vergrößert. Da erfahrungsgemäß die mit PARDISEKO zu rechnenden Abläufe nicht sehr transient sind (d. h., daß insbesondere die Zeitkonstanten für die Änderungen der Partikelquellfunktion groß gegen die Zeitschritte sind), ist die Integration mittels eines derartigen expliziten Verfahrens möglich. Zudem wird als zusätzliches (logisches "und") Kriterium zur Berechnung der Zeitschritte während der Dauer der Quellfunktion die für Änderungen dieser Funktion charakteristische Zeit herangezogen. Möglicherweise durch große Wahl des Genauigkeitsparameters trotzdem auftretende numerische Instabilitäten sind sehr leicht an Verletzung der zu jedem Outputzyklus ausgedruckten Massenbilanz sowie an Oszillationen der Ergebnisse, die nicht durch physikalische Ereignisse bedingt sind, zu erkennen. In einem derartigen Fall

ist die Rechnung mit einem kleineren Wert für den Genauigkeitsparameter (EPS) zu wiederholen.

4. Programminput

Der Input für PARDISEKO wird von vier verschiedenen Units eingelesen. Dies sind:

a) Unit 5

Dateneingabe mittels Kasten (LRECL = 80, RECFM = FB)

Die gesamte Eingabe dieser Unit erfolgt mit Ausnahme des Feldes TEXT mittels listengesteuerter Eingabe, d. h. die einzelnen Werte müssen durch ein Blank oder ein Komma voneinander getrennt sein. Es ist vorgesehen, daß die Karten am Ende eine Numerierung tragen und nur die ersten 72 Spalten zur Datenübertragung verwendet werden. Um diese Numerierung zu überlesen, wird am Ende jeder Karte zusätzlich die Variable NDUMMY gelesen, die sonst keinerlei Bedeutung hat. Wenn nichtnumerierte Records(Karten) zur Eingabe verwendet werden, ist diese Variable aus der Inputliste zu entfernen.

In der folgenden Liste werden nun die Eingabevariablen beschrieben, in der Reihenfolge, wie sie einzulesen sind. Die Datentypen werden abgekürzt nach:

R4: Real 4

I4: Integer 4

L4: Logical 4

Cn: Character n (n beliebig, ganzzahlig)

Karten-Nr.	Variable	Typ	Bedeutung
1 + 2	TEXT	C72	Beliebiger Text zur Identifikation der Rechnung
3	K2	I4	Zahl der Stützpunkte für Partikelgrößenverteil.
	NWRITE(1)	I4	Zahl der Zeitschritte, nach der ein kleiner Ausdruck erfolgt
	NWRITE(2)	I4	Zahl der Zeitschritte, nach der ein großer Ausdruck erfolgt mit Partikelgrößenverteilung
	NTHERM	I4	Zahl (bis zu 5) der unterschiedlich temperierten Oberflächen für thermophoretische Abscheidung (siehe Gleichung (6))
	LNOLK	L4	Berücksichtigung von Leckage (=TRUE.)
	LNOTE	L4	Berücksichtigung von Thermophorese (=TRUE.)
	NCARD	I4	Zahl der Zeitschritte, nach der Ausgabe auf Plotdataset (Unit 1) erfolgt.
	CPUZT	R4	Rechenzeit /min/, nach der die Rechnung abgebrochen werden soll, sinnvollerweise gleich der Angabe auf der Jobkarte
	RESTRT	L4	Rechnung ist ein Restart-Job (=TRUE.)
	ZWCOMP	L4	Rechnung ist für ein nachgeschaltetes Compartment mit Leckage eines vorgeschalteten als Partikelquelle (=TRUE.)
	GRAVK	L4	Berücksichtigung von Gravitationskoagulation nach Gleichung (14) (=TRUE)
	FUKS	L4	Berücksichtigung der Fucks'schen Interpolationsformel bei der Koagulationswahrscheinlichkeit (=TRUE.)
4	VOL	R4	Containmentvolumen /cm ³ /
	FSED	R4	Bodenfläche für Sedimentationsabscheidung /cm ² /
	FDIFF	R4	senkrechte Fläche /cm ² /
			Bem.: Bei Nichtberücksichtigung von turbulenter Abscheidung kann hier die Gesamtoberfläche eingesetzt werden. FCEIL muß dann auf Null gesetzt werden.

Karten-Nr.	Variable	Typ	Bedeutung
5	FCELL	R4	Waagrechte nach unten gerichtete Oberfläche /cm ² /
	FTHERM(K)	R4	Oberflächen für thermophoretische Abscheidung nach Gleichung (6) /cm ² /
	K = 1, NTHERM		
	TT	R4	Containmenttemperatur /K/
	P	R4	Containmentdruck /bar/
6	GASIN	C10	Gasart im Containment, möglich sind Luft, Stickstoff und Argon. Angabe dient zur Berechnung der Gasviskosität
	DELD	R4	Diffusionsgrenzschicht δ_D (Gleichung (4)) /cm/
	DELT	R4	thermophoretische Grenzschicht δ_T (Gl. (6)) /cm/
	CONS	R4	Verhältnis der Wärmeleitfähigkeiten von Partikeln und Gas
	FORM	R4	dynamischer Formfaktor (Gleichung (12))
	FORMC	R4	Koagulationsformfaktor f (Gleichung (11))
7	UMLU	R4	Leistung des Umluftfilters /m ³ /sec/
	UMUZT	R4	Zeitpunkt des Einsetzens des Umluftfilters /h/
	UMLEFF	R4	Abscheidegrad des Umluftfilters %/
8	RMIN	R4	kleinster Partikelradius / μ m/
	RMAX	R4	größter Partikelradius / μ m/
	TIME	R4	Gesamtproblemzeit /h/
	SZEIT	R4	Startzeit /sec/
	EPS	R4	Genauigkeitsparameter (siehe Kap. 3c)
	DT	R4	Anfangszeitritt /sec/
	ZLIM	R4	untere Schranke für Zahlkonzentration /P/cm ³ /
	GLIM	R4	untere Schranke für Massenkonzentration /mg/m ³ /
9	NVGL	I4	Zahl der Zeitpunkte (bis zu 10), an denen zusätzlich zu den mit NWRITE (2) definierten Ausgabe der Größenverteilung erfolgen soll, außerdem optional Ausgabe auf eine Datei zum Plotten der Größenverteilung

Karten-Nr.	Variable	Typ	Bedeutung
10 bis 10 + NVGL	TVGL(K), K = 1, NVGL	R4	Zeitpunkte zur Ausgabe der Größenverteilung /min/
11 + NVGL = N ₁	K2T DELTT	I4 R4	Zahl der Stützpunkte der Funktionen TE Zeitinkrement der Funktionen TE, wobei diese als zeitlich äquidistante Tabelle einzulesen sind
N ₁ + 1 bis N ₁ + 1 + K2T = N ₂	TE(K,I), K=1, N ₁ THERM, I = 1, K2T	R4	auf die Gastemperatur normierte Temperaturdiffe- renzen über den einzelnen Flächen (Werte zu einem bestimmten Zeitpunkt jeweils auf einer Karte)
N ₂ + 1	NTURB FAKTVT	I4 R4	Zahl der Zeitpunkte, an denen neue (zu anderem neuen u* gehörige) Abscheidefaktoren einzulesen sind Faktor, um den die turbulenten Abscheidefaktoren an den senkrechten Wänden korrigiert werden müssen (experimentell: ca. 300)
N ₂ + 2	TTUBB(K), K = 1, NTURB	R4	Zeitpunkte, an denen neue turbulente Abscheide- faktoren einzulesen sind /sec/
N ₂ + 3	NPHASE NUKLID	I4 I4	Zahl der Freisetzungsphasen der Aerosolquelle Zahl der Nuklide, die bilanziert werden sollen. Es folgen nun NPHASE + (NUKLID + 2) Karten, die die Aerosolquelle definieren. Die Reihenfolge der Karten ist für jede Freisetzungsphase identisch, so daß die Beschreibung nur für eine Freisetzungs- phase (Nr.K) notwendig ist. Der Einfachheit halber soll hier mit einer eigenen Zählung der Karten begonnen werden.
1	SRATE(1,K) FAKTOR	R4 R4	Quellrate für Freisetzungsmode 1 in Phase K /g/ oder /g/sec/ (siehe KONTIN (1,K)) Faktor, mit der SRATE (1,K) multipliziert werden soll; kann auch als Umrechnungsfaktor benutzt werden, wenn die Quellrate in einer Nicht-CGS- Einheit eingelesen wird

Karten-Nr.	Variable	Typ	Bedeutung
2	KONTIN(1,K)	L4	SRATE (1,K) ist eine Rate (=.TRUE.) SRATE (1,K) ist eine Instantanquelle (=.FALSE.)
	MESSI(1,K)	L4	Für den Mode 1 soll eine noch einzulesende gemessene Massenverteilung als Quellpartikelgrößenverteilung verwendet werden (=.TRUE) Die beiden folgenden Parameter sind dann Dummyinput
	RG(1,K)	R4	mittlerer geometrischer Radius der Zahlverteilung der Quellpartikeln / μm /
	SIGL(1,K)	R4	Logarithmus der geometrischen Standardabweichung der Quellpartikelverteilung. Aus den beiden Parametern RG(1,K) und SIGL(1,K) wird die Größenverteilung unter Annahme einer Lognormalverteilung berechnet
	RHOQ(1,K)	R4	Materialdichte der Quellpartikeln /g/cm ³ /
	SRATE(2,K)	R4	} Bedeutung wie vorstehend, aber für den zweiten Freisetzungsmode in Phase K
	FAKTOR	R4	
	KONTIN(2,K)	L4	
	MESSI(2,K)	L4	
	RG(2,K)	R4	
	SIGL(2,K)	R4	
	RHOQ(2,K)	R4	
	TQ(K + 1)	R4	Zeitpunkt, bis zu dem die Freisetzungsphase K dauern soll, als Anfangszeitpunkt wird das Ende der vorigen Freisetzungsphase genommen. Für die erste Freisetzungsphase gilt automatisch der durch SZEIT bestimmte Anfangszeitpunkt der Rechnung als Startpunkt. Bemerkung: Bei Verwendung von Instantanquellen sollte trotz der prinzipiellen

Karten-Nr.	Variable	Typ	Bedeutung
3	NAMNUC(I)	C8	Bedeutungslosigkeit der Zeitdifferenz $TQ(K+1) - TQ(K)$ diese nicht zu klein gewählt werden, da sonst die Gefahr besteht, daß diese Aerosolquelle nicht gefunden wird, sondern daß mit einem Zeitschritt größer als $TQ(K+1) - TQ(K)$ darüber hinweggesprungen wird
	AKTIVI(1,K, I)	R4	Name des Nuklides I, dient lediglich zur Identifizierung des Nuklids Bemerkung: Reihenfolge und Art der Nuklide müssen in jeder Freisetzung gleich sein
	AKTIVI(2,K, I)	R4	Anteil des Nuklids I am Mode 1 in der Freisetzungsphase K in Massenanteilen ebenso für den Mode 2
bis NUKLID + 2	I = 1, NUKLID		Die folgenden Karten definieren die zeitabhängige Leckrate aus dem Containment, diese werden im Unterprogramm TLEAKI eingelesen (Zählung wird auch hier neu beginnen)
1	N	I4	Anzahl der Stützpunkte der Leckagefunktion; zwischen den einzelnen Stützpunkten wird während der Rechnung linear interpoliert. Im Falle $N = 1$ wird eine konstante Leckage vom Zeitpunkt $TL(1)$ an entsprechend dem Wert $RL(1)$ angenommen. Selbst bei Setzen des Parameters LNOLK auf .FALSE. müssen die Karten für die Leckagefunktion als Dummyinput gegeben sein.

Karten-Nr.	Variable	Typ	Bedeutung
2	TL(K),	R4	zeitlicher Stützpunkt der Leckfunktion /sec/
bis N	RL(K) K = 1, N	R4	Leckrate zur Zeit TL(K) /Vol%/d/ Mit dieser Eingabe der Leckagefunktion ist die Eingabe, die auf jeden Fall vorhanden sein muß, beendet. Optional ist nun noch für jeden Freisetzungsmod die Eingabe einer gemessenen Massenverteilung als Quellpartikelgrößenverteilung möglich. Eingabe im Unterprogramm MWERT
1	NPH	I4	Nummer der Freisetzungsphase, für die die Eingabe gelten soll
	NMODE	I4	Nummer des Freisetzungsmods (1 oder 2), für den die Eingabe gelten soll Anhand dieser zwei Angaben prüft das Programm, ob die Eingabe mit der Angabe von MESSI(NMODE,NPH) = .TRUE. konsistent ist. Wenn nicht, wird die Rechnung mit Ausdruck einer entsprechenden Fehlermeldung abgebrochen.
	WIEDER	L4	Die zuletzt eingelesene gemessene Verteilung soll für den durch NPH und NMODE definierte Freisetzungsmod nochmal verwendet werden (= .TRUE.) . In diesem Falle entfällt dann die weitere Eingabe für diesen Mod.
2	N	I4	Anzahl der Stützpunkte der gemessenen Massenverteilung

Karten-Nr.	Variable	Typ	Bedeutung
3 bis N + 2	D(K) BEL(K), K = 1, N	R4 R4	Durchmesser der Partikeln / μm / Masse der Partikeln des Durchmessers D(K) in beliebigen(aber selbstverständlich für alle K gleichen) Einheiten Durch die Stützpunkte D(K) und BEL(K) wird mittels Spline-Interpolation eine Funktion gelegt, um Stützpunkte an den durch die Parameter RMIN, RMAX und K2 definierten Stellen zu erhalten. Eine derartige ge- messene Größenverteilung kann für jede Freisetzungsphase zweimal (d. h. maximal bis zu 2 x NPHASE) angegeben werden. Die Eingabeoption soll vor allem den Vergleich mit Experimenten erleichtern.

Alle nun folgenden Eingaben sind ebenfalls nur optional und werden nur unter bestimmten Bedingungen benötigt. Alle Daten werden unformatiert eingelesen, was bedeutet, daß die einzelnen Records durch die die Datei erstellenden WRITE-Statements definiert werden.

b) Unit 3

Eingabe der Korrekturfaktoren bei Berücksichtigung der turbulenten Abscheidung

Diese Daten befinden sich in den Members eines PDS (partitioned data set), wobei jedes Member den zu einem spezifischen Wert der turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit u^* gehörigen Datensatz repräsentiert. Die Zeitpunkte, an denen jeweils ein neues Member einzulegen ist, werden durch die Eingabeparameter TTURB(K), K = 1, NTURB bestimmt. Diese werden sequentiell abgearbeitet, d. h. jeweils nach Erreichen des nächsten Zeitpunkts wird ein neues Member eingelesen. Dazu wird eine entsprechende Nachricht ausgedruckt. Der letzte eingegebene Zeitpunkt TTURB(NTURB) allerdings

definiert das Ende der turbulenten Abscheidung. Für den Fall, daß keine Datei unter Unit 3 definiert ist (d. h. für Unit 3 ein Null file gesetzt wird), wird programmintern das Einlesen unterdrückt und keine turbulente Abscheidung berücksichtigt. Eine entsprechende Nachricht wird ausgedruckt. Die Angaben für die Zeiten TTURB sind dann ohne Bedeutung.

Die folgende Liste gibt die Eingabevariablen in ihrer Reihenfolge, diese sind für jedes Member identisch. Verschiedene Member sind in der gewünschten Reihenfolge mit derselben Unitnummer, aber jeweils um 1 erhöhter FSN (fortran sequence number) anzugeben.

Record-Nr.	Variable	Typ	Bedeutung
1	USTERN	R4	turbulente Schwankungsgeschwindigkeit /cm/sec/
2 bis K2 + 1	CORR(K), K = 1, K2	R4	turbulenter Korrekturkoeffizient für die Sedimentation ($C_T(r)$ in Gleichung (5))
K2 + 2 bis 2·K2 + 2	VVERTT(K), K = 1, K2	R4	turbulente Abscheidegeschwindigkeit zu senkrechten Wänden /cm/sec/ ($v_{VT}(r)$ in Gl (3))
2·K2 + 3 bis 3·K2 + 3	VCEILO(K), K = 1, K2	R4	turbulente Abscheidegeschwindigkeit zu Deckenflächen dividiert durch die Materialdichte der Partikeln /cm ⁴ /sec·g/ ($v_{CT}(r)/\rho$ in Gl. (4))

c) Unit 2

Einlesen der Leckage eines vorgeschalteten Compartments als Aerosolquelle Die hier zu lesende Datei muß in einem vorher erfolgten PARDISEKO-Lauf erstellt werden (siehe dazu Ausgabebeschreibung zu UNIT 8). Da die Zeitschrittberechnung programmintern erfolgt, sind der erstellende und der lesende PARDISEKO-Lauf meist nicht synchron. Deshalb wird aus den erstellten größen- und zeitabhängigen Leckraten der aktuelle Wert durch lineare

Interpolation zwischen den einzelnen zeitlichen Stützpunkten zu jeder Größenklasse ermittelt. Mit Ausnahme des ersten Records wird die gesamte Datei im Unterprogramm READL gelesen.

Record-Nr.	Variable	Typ	Bedeutung
1	VOL1	R4	Volumen des vorgeschalteten Compartments /cm ³ /
	NUKLID	I4	Zahl der Nuklide, die im vorherigen Compartment bilanziert wurden und im aktuellen Lauf ebenfalls bilanziert werden sollen. Die vorher über Unit 5 gemachte Eingabe wird dadurch überschrieben
	SOUTIM	R4	Dauer der Aerosolquelle in der vorangehenden Rechnung /sec/
	NAMNUC(K), K = 1, NUKLID	C8	Namen der zu bilanzierenden Nuklide
2 und folgende	ZEIT2	R4	Zeitpunkt der Leckrate /sec/
	RHO2	R4	aktuelle Materialdichte der durch die Leckage strömenden Partikeln zu diesem Zeitpunkt /g/cm ³ /
	RLPV2	R4	integrale Leckrate zu diesem Zeitpunkt /mg/m ³ · sec /
	AKTIV2(K), K = 1, NUKLID Q2(K), K = 1, K2		Massenteil der einzelnen Nuklide an 2RLPV2 Leckrate jeder Partikelgrößenklasse zum Zeitpunkt ZEIT2 /1/cm ³ · sec/

d) Unit 19

Datei zum Wiederstarten eines wegen Erreichens der eingegebenen CPU-Zeit (CPUZT) abgebrochenen Laufs

Soll diese Datei gelesen werden, ist der Parameter RESTRT auf .TRUE. zu setzen. Diese Datei wird am Ende jedes Laufs über die Unit 20 erstellt. Da diese Datei nur programmintern verwendet wird, erübrigt sich eine detailliertere Beschreibung der einzelnen Variablen. Mit dieser Restartoption ist es möglich, jeden Lauf in beliebig viele Einzelläufe zu zerlegen.

5. Programmoutput

Output wird von PARDISEKO IV auf insgesamt 5 Units ausgegeben.

a) Unit 6

Normal gedruckte Ausgabe

Diese Ausgabe ist selbsterklärend. Sie umfaßt als erstes den Ausdruck aller Eingabegrößen, als zweites eine Reihe von Kontrollausdrucken und als drittes den Ausdruck der Rechenergebnisse nach jeweils den durch die Eingabeparameter NWRITE (1) und NWRITE(2) vorgegebenen Anzahl von Zeitschritten. Der nach NWRITE(2) (großer Ausdruck) ausgegebene Ausdruck unterscheidet sich von demjenigen nach NWRITE(1) durch zusätzlichen Ausdruck der Partikelgrößenverteilung. Am Schluß jeder Rechnung wird in jedem Fall ein großer Ausdruck erzeugt.

b) Unit 8

Ausgabe der Leckraten

Diese Ausgabe entspricht der Eingabe über die Unit 2, da sie ausschließlich dazu dient, in einem anderen Lauf entsprechend wieder eingelesen zu werden. Damit sind Mehrcompartmentläufe möglich, wobei vorausgesetzt wird, daß die einzelnen Compartments durch definierte Volumenströme miteinander verbunden

sind. Die durch die Parameter RMIN, RMAX und K2 definierte Größeneinteilung muß für alle Compartments gleich sein. Die folgende Outputliste ist aus diesem Grunde auch in ihrer Struktur identisch zu der im vorigen Abschnitt beschriebenen Inputliste für die Unit 2.

Record-Nr.	Variable	Typ	Bedeutung
1	VOL	R4	Volumen des Compartments /cm ³ /
	NUKLID	I4	Zahl der zu bilanzierenden Nuklide
	TQ(NPHASE+1)	R4	Endzeitpunkt der Aerosolquelle /sec/
	NAMNUC(K), K = 1, NUKLID	C8	Namen der zu bilanzierenden Nuklide
2 und folgende	SZEIT	R4	aktueller Zeitpunkt /sec/
	RHOB	R4	aktuelle Materialdichte der Aerosolpartikeln /g/cm ³ /
	RLPV	R4	integrale Leckrate /mg/m ³ sec/
	AKTIV(K), K = 1,NUKLID	R4	aktuelle Massenanteile der einzelnen Nuklide
	ZLEAK(K), K = 1, K2	R4	Leckrate jeder einzelnen Größenklasse /1/cm ³ sec/ Da dieser Record zu jedem Zeitschritt geschrieben wird, kann die zugehörige Datei einen beachtlichen Umfang annehmen. Dies sollte bei der Allokation der Datei beachtet werden.

c) Unit 20

Datei, die erstellt wird, um ein Neustarten eines wegen Erreichens der vorgegebenen Rechenzeit abgebrochenen Laufs zu ermöglichen (siehe dazu auch die Inputbeschreibung zu Unit 19)

Bemerkung zu dieser Restart-Option:

Alle übrigen vom Programm erstellbaren Dateien, wie die Plot-dateien (Unit 1 und Unit 9) und die Leckagedatei (Unit 8), sind so strukturiert, daß bei Benutzung verschiedener, durch jeweils neugestartete Läufe erzeugter Dateien diese mittels einfacher Koncatenation (natürlich in der richtigen Reihenfolge) wie eine Datei behandelt werden können.

d) Unit 1

Datei zur Erstellung von Plots verschiedener Größen als Funktion der Zeit

Die Datei (jeweils ein Record) beschreibt alle NCARD Zeitschritte. Jeder Record besteht aus 12 Real * - Größen, wobei die letzten beiden Werte Dummygrößen sind. Diese Datenstruktur wurde gewählt, um Kompatibilität mit den durch das Programm NAUAMOD4 /11/ erstellten Plotdateien zu erhalten. Die folgende Liste gibt die Reihenfolge der Variablen, wie sie identisch in jedem Record enthalten sind.

Record-Nr.	Variable	Typ	Bedeutung
1	SZEIT	R4	Zeitpunkt /sec/
und folgende	CON	R4	Partikelzahlkonzentration /1/cm ³ /
	SGEW	R4	luftgetragene Massenkonzentration /g/cm ³ /
	R50M	R4	50 %-Wert der Massenverteilung /cm/
	DEPVER	R4	kumul. Massenbelegung an vertikalen Flächen/g/cm ² /
	DEPCEI	R4	" " an Deckenflächen /g/cm ² /
	DEPSED	R4	" " auf Bodenflächen /g/cm ² /
	SIGLB	R4	geometrische Standardabweichung der aktuellen Größenverteilung
	DEPTHD		mittlere Flächenbelegung an den thermophoretischen Abscheideflächen /g/cm ² /
	SUMLK	R4	kumul. Leckage aus dem Containment /g/
	DUMMY1	R4	} Dummyvariable, ohne Bedeutung
	DUMMY2	R4	

e) Unit 9

Datei zur Erstellung von Plots der Aerosolgrößenverteilung

An den durch TVGL(K), K = 1, NVGL definierten Zeitpunkten (genaugenommen zum ersten Zeitpunkt im Programmablauf nach diesen Zeitpunkten) erfolgt das Beschreiben dieser Datei mit den zum Plotten der Größenverteilungen notwendigen Ordinatenwerten. Da die Größeneinteilung während der Rechnung gleich bleibt, werden die Abzissenwerte nur einmal am Anfang auf einen Record geschrieben.

Record-Nr.	Variable	Typ	Bedeutung
1	K2	I4	Anzahl der Stützpunkte der Größeneinteilung
	X(K), K = 1, K2	R4	natürlicher Logarithmus des Partikelradius' R(K), K = 1, K2
	R(K), K = 1, K2	R4	massenäquivalenter Radius der Partikelklassen 1 bis K2
2	MZEIT	R4	Zeitpunkt /min/
und	SGEW	R4	Massenkonzentration /mg/m ³ /
folgende	DVR(K), K = 1, K2	R4	Auf 100 % normierte Summenverteilung bezüglich der Aerosolmasse
	GEW(K), K = 1, K2	R4	Aerosolmassenverteilung /mg/m ³ /

6. Zusammenfassung und Diskussion

Mit PARDISEKO IV steht ein Programm zur Verfügung, das die Berechnung des Verhaltens der aerosolförmigen Aktivität bei beliebigen Störfällen in natriumgekühlten Brutreaktoren bzw. bei Außerachtlassung von Sonder-effekten, wie z. B. Dampfkondensation an den Partikeln, allgemein die Berechnung des Aerosolverhaltens in geschlossenen Behältern ermöglicht. Bezüglich der zugelassenen Aerosolgrößenverteilung sowie der Freisetzungsszenarien brauchen dabei keine Einschränkungen gemacht werden.

Die wesentlichsten einschränkenden Annahmen, die PARDISEKO IV zugrunde liegen sind:

- a) Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist für die Partikeln jeder Größe im gesamten Containment gleich (Prinzip der homogenen Durchmischung)

Diese Annahme setzt das Vorhandensein einer durchmischenden Strömung voraus, womit bei einem hypothetischen Störfall wegen der vorhandenen starken Wärmequellen immer gerechnet werden kann.

- b) Die Eigenschaften der Partikeln können durch einen einzigen Parameter, im Falle von PARDISEKO IV, den massenäquivalenten Radius, beschrieben werden.

Dies ist a priori keineswegs der Fall. So kann man sich ohne weiteres vorstellen, daß zwei Partikeln zwar dieselbe Masse haben, aber wegen ihrer völlig verschiedenen geometrischen Form verschiedene hydrodynamische Eigenschaften besitzen. Dies bedeutet auch, daß Größenverteilungen, die etwa bezüglich des aerodynamischen Radius¹ gemessen wurden, nicht ohne weiteres auf Größenverteilungen nach dem massenäquivalenten Radius umgerechnet werden können. Die Transformation der mittels verschiedener Meßverfahren gemessener Partikelradien ineinander geschieht mittels sogenannter Formfaktoren, deren Definition (zum Teil leider nicht konsistent) in /12/ gegeben ist. Die Formfaktoren lassen sich in der Praxis aus gemessenen

Mittelwerten bestimmter Partikeleigenschaften für Partikelklassen bestimmen, deren Einteilung sich wiederum aus den Eigenschaften des Meßgerätes ergibt. Die Formfaktoren können sich deswegen nicht nur für verschiedenartige Aerosole unterscheiden, sondern werden auch noch von der Größe der Partikeln abhängen, wobei unter Größe hier eine zur Partikelmasse korrelierter Wert verstanden werden soll. In PARDISEKO IV ist wie in den Vorgängerprogrammen der Einfachheit halber nur die Eingabe über die gesamte Größenverteilung gemittelter Formfaktoren vorgesehen. Bei Verwendung des Programms zu Störfallrechnungen sind diese gegebenenfalls über dem physikalisch möglichen Bereich zu variieren, um ihren Einfluß abzuschätzen. Bei Vorliegen entsprechender Daten von größenabhängigen Formfaktoren sind diese in PARDISEKO IV mittels nur kleiner Programmänderungen einführbar.

Bezüglich der verwendeten Ansätze zur Beschreibung der turbulenten Abscheidung ist deren semiempirische Natur zu berücksichtigen. Zusätzlich ist bekannt, daß die Berechnung turbulenter Strömungen in komplizierten Geometrien derzeit noch nicht möglich ist, sondern nur für eine einfache radialsymmetrische Geometrie /13/. Die in PARDISEKO IV implementierten Ansätze sind daher in erster Linie für den Vergleich von Rechnungen und Experimenten gedacht, da die Versuchsgefäße im allgemeinen angenähert radialsymmetrisch sind und sich somit die Schwankungsgeschwindigkeit u^* angenähert bestimmen läßt. Für die eigentlichen Störfallrechnungen lassen sich höchstens grobe Abschätzungen bezüglich des Einflusses der turbulenten Abscheidung vornehmen, um ein gewisses Maß für die zusätzliche Sicherheitsmarge bei deren Vernachlässigung zu gewinnen.

7. Literatur

- /1/ H. Bunz, PARADISEKO IIIb Ein Computerprogramm zur Berechnung des Aerosolverhaltens in geschlossenen Behältern KfK 2903 (April 1980)

- /2/ H. Bunz, H. Sauter to be published

- /3/ G. A. Sehmel: Particle Diffusivities and Deposition Velocities over a Horizontal Smooth Surface
J. Coll. Int. Sci 37 (1971), S. 891 - 906

- /4/ G. A. Sehmel: Particle Eddy Diffusivities and Deposition Velocities for Isothermal Flow and Smooth Surfaces
J. Aer. Sci. 4 (1973) S. 125 - 138

- /5/ R. A. Millikan, The General Law of Fall of a Small Spherical Body through a Gas, and its Bearing upon the Natur of Molecular Reflection from Surfaces, Phys. Rev. 22 (1923), S. 1-23

- /6/ N. A. Fuchs, The Mechanics of Aerosols, Pergamon Press (1964)

- /7/ H. R. Pruppacher, J. D. Klett, Microphysics of Clouds and Precipitation. D. Reidel Publishing Comp. (1978)

- /8/ M. H. Davis, J. Atmos. Sci. 29 (1972), S. 911 zitiert in /7/

- /9/ H. Bunz, U. Scholle, Study of the Containment System of the planned SNR-2 Fast Breeder Reactor, 15th DOE Nuclear Air Cleaning Conf., Boston (Mass., USA) (1978)

- /10/ N. Mitsutsuka, K. Miyagi, H. Obata, E. Tamura, A. Watanabe, private Mitteilung (1982)

- /11/ H. Bunz, M. Koyro, W. Schöck, NAUAMOD4 A Code for Calculating
Aerosol Behavior in LWR Core Melt Accidents
KfK 3554 (1983)
- /12/ Messen von Partikeln, Prüfkriterien und Prüfmethode n zum Bestimmen
partikelförmiger Beimengungen in Gasen
VDI 3491 (1975)
- /13/ W. Cherdron, private Mitteilung (1982)

Liste der verwendeten Symbole

r_i	: massenäquivalenter Radius der Partikeln der Klasse i	/ μm /
V_i	: Volumen der Partikeln der Klasse i	/ μm^3 /
$n(r_i, t)$: Zahl der Partikeln der Klasse i zur Zeit t in	/P/ cm^3 /
$S(r_i, t)$: Leistung der Aerosolquelle in	/P/ $\text{cm}^3 \cdot \text{sec}$ /
N	: Zahl der Partikelklassen	
k	: Boltzmannkonstante in	/erg/K/
T	: Gastemperatur in	/K/
g	: Erdbeschleunigung in	/cm/ sec^2 /
η	: Trägergasviskosität in	/poise/
ρ_g	: Dichte des Trägergases in	/g/ cm^3 /
δ_D	: Diffusionsgrenzschicht in	/cm/
δ_T	: thermophoretische Grenzschicht in	/cm/
Kn	: Knudsenzahl λ/r mit λ als mittlere freie Weglänge des Trägergases	
ρ	: Materialdichte des Aerosolpartikels in	/g/ cm^3 /
k_g, k_s	: thermische Leitfähigkeit des Trägergases bzw. der Partikeln in	/mW/cm \cdot K/
C_t, C_m	: Konstanten, die mit der Art des Wärmeüberganges bzw. des Impulsübertrags zwischen Trägergas und Partikeloberfläche zusammenhängen (siehe /6/)	
A, Q, B	: empirische Werte für die Slip-Flow-Korrektur nach Millikan /7/ in Verbindung mit /8/	
f, α	: Formfaktoren der Koagulation bzw. der Beweglichkeit (siehe /2/)	
V	: Volumen des Containments in	/ cm^3 /
A_D	: Oberfläche für Diffusionsabscheidung i.a. die Gesamtinnenoberfläche des Containments in	/ cm^2 /
A_S	: Bodenfläche des Containments in	/ cm^2 /

- A_{T_k} : Oberfläche für thermophoretische Abscheidung Nr. k in /cm² /
- $\Delta T_k = T - T_{W_k}$: Temperaturdifferenz über Oberfläche Nr. k in /K/
- Int(r) : diffusives Widerstandsintegral zum Radius r (hängt
zusätzlich noch von u*, vom Winkel der Abscheidefläche
zur Schwerkraft und einer Reihe von Stoffgrößen ab)
- u* : turbulente Reibungsgeschwindigkeit in /cm/sec/