



KfK 2903
April 1980

PARDISEKO IIIb
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 2903

PARDISEKO IIIb
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 der neuesten Version des Computerprogramms PARDISEKO IIIb, dessen Aufgabe die Berechnung des zeitlichen Verhaltens eines polydispersen Aerosolsystems in einem geschlossenen Behälter ist. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Beschreibung der verwendeten numerischen Methoden sowie der Ein- und Ausgabe.

PARDISEKO IIIb - A Computer Program for the Calculation of the Aerosol Behavior in Closed Vessels

Abstract

This report gives a description of the latest version of the computer-code PARDISEKO IIIb. 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 numerical methods as well as the input and output.

1. Einleitung

Der folgende Bericht beschreibt die neueste Version des Codes PARDISEKO IIIb, der ein Nachfolger des Codes PARDISEKO III [1] ist. Die Aufgabe des Codes ist es, das Verhalten eines polydispersen Aerosolsystems in einem geschlossenen Containment zeitabhängig zu berechnen und dies mit besonderer Blickrichtung auf die Verhältnisse, wie sie im Containment eines schnellen natriumgekühlten Reaktors bei einem schweren hypothetischen Störfall (Bethe-Tait-Störfall) erwartet werden müssen. Als Aerosole kommen dabei Brennstoffaerosole [2] (zusammen mit Spaltprodukten und Strukturmaterial), Natriumrekondensationsaerosole (metallisch) sowie Natriumbrandaerosole in Frage. Diese Rechnungen sind Teil der Abschätzung der radiologischen Umgebungsbelastung nach einem derartigen Störfall, da die im Containment luftgetragene Aktivität über Leckagen den Quellterm für die Freisetzung in die Umgebung bildet. Darüberhinaus können diese Rechnungen Anhaltswerte für die Auslegung möglicher Störfallfilter liefern. Die gewonnenen Ergebnisse gelten natürlich nur für die partikelförmige Aktivität und nicht für gasförmige Spaltprodukte wie Edelgase, elementares Jod u.a.

Zur Durchführung derartiger Störfallanalysen sollten Freisetzungsraten, Art der freigesetzten Aerosole und Leckageparameter zwischen den einzelnen Compartments des Containmentsystems über einen großen Bereich variiert werden können. Darin liegt auch bereits der Hauptgrund für die Notwendigkeit, PARDISEKO III zu PARDISEKO IIIb umzuformulieren. Denn in einer ganzen Reihe von Rechnungen, speziell in Fällen mit hohen Partikelzahlkonzentrationen, mit Aerosolnachlieferung durch eine Langzeitquelle und bei Anfangsverteilungen, die von einer lognormalen stark abweichen, ergaben sich numerische Instabilitäten, die sich in einem zum Teil starken Anwachsen der Gesamtmasse ausdrückten, wobei kein physikalischer Grund vorlag. Diese Fehler abzustellen, wäre mit den in PARDISEKO III verwendeten Methoden - wenn überhaupt - nur mit sehr großem zusätzlichem Rechenaufwand möglich gewesen. Dies aber hätte die ohnehin schon langen Rechenzeiten noch weiter vergrößert. Deshalb wurde eine weitgehende Neuformulierung des Codes durchgeführt. Diese auch im Hinblick auf die Änderungen im Vergleich zum Code PARDISEKO III [1] sollen im folgenden beschrieben werden.

2. Modellgleichung

Die Grundidee zur Lösung der aerosolphysikalischen Basisgleichung ist die Approximation des polydispersen Aerosolsystems durch eine Reihe monodisperser Fraktionen, deren Größenparameter über die gesamte Rechnung erhalten bleibt. Die einzige wesentliche Schwierigkeit einer derartigen Methode bereitet die Berechnung der Koagulation, da zum einen diese in der Masse bzw. dem Volumen der Partikeln linear ist, andererseits aber eine in der Partikelmasse lineare Einteilung nicht praktikabel ist, da sie zur Überdeckung des notwendigen Größenbereichs

ca. 10^5 Partikelklassen erfordern würde. Deshalb werden im allgemeinen die Partikeln, die durch Koagulation entstehen, nicht in das vorgegebene Einteilungsschema passen. Da aber die Größe der Partikeln in jedem Fall eine schon von der Messung und der Definition her unsichere Größe ist, erscheint ein Fehler hierbei - zumal, wenn er durch eine engmaschige Wahl der Partikelklassen klein gehalten wird - viel eher vertretbar als ein Fehler bei der Teilchenzahl- und Massenbilanz, die vernünftigerweise auf jeden Fall gewährleistet sein müssen. Deshalb werden die entstehenden Partikeln zwischen den beiden Partikelklassen, zwischen die sie größenmäßig fallen, so aufgeteilt, daß die Erhaltung der Masse bzw. des Volumens und der Teilchenzahlbilanz gewährleistet ist.

Dies führt zu folgenden Gleichungen:

Koagulationsgleichung:

$$d n_{Kj} = K(r_K, r_j) \cdot n(r_K, t) \cdot n(r_j, t) \quad (1)$$

$$\text{Sei} \quad V_K + V_j \in (V_i, V_{i+1})$$

Partikelzahlbilanzgleichungen:

$$d n_K = -d n_{Kj} \quad (2)$$

$$d n_j = -d n_{Kj} \quad (3)$$

$$d n_i + d n_{i+1} = d n_{Kj} \quad (4)$$

(4) ist äquivalent zu den beiden folgenden Gleichungen:

$$d n_i = \beta \cdot d n_{Kj} \quad 0 \leq \beta \leq 1 \quad (5)$$

$$d n_{i+1} = (1-\beta) \cdot d n_{Kj} \quad (6)$$

Der Koeffizient β ergibt sich aus der Massenbilanzgleichung

$$d n_i \cdot V_i + d n_{i+1} \cdot V_{i+1} = d n_{Kj} \cdot (V_K + V_j) \quad (7)$$

Einsetzen von (5) und (6) in (7) ergibt dann:

$$\beta = \frac{V_{i+1} - (V_K + V_j)}{V_{i+1} - V_i} \quad (8)$$

oder allgemeiner

$$\beta_{Kj}^i = \begin{cases} \frac{v_{i+1} - (v_K + v_j)}{v_{i+1} - v_i} & + \text{ für } (v_K + v_j) \in (v_i, v_{i+1}) \\ - & \text{ für } (v_K + v_j) \in (v_{i-1}, v_i) \\ 0 & \text{ sonst} \end{cases} \quad (9)$$

Diese Interpolation kann bei jeder beliebigen Wahl der unabhängigen Variablen wie etwa Partikelradius, Logarithmus des Partikelradius (wie in PARADISEKO IIIb) oder andere durchgeführt werden. Für den Fall einer massen-äquivalenten Teilung geht der Koeffizient β_{Kj}^i natürlich in die Form $\delta_{i, K+j}$ über.

Die gesamte Modellgleichung ist damit wie folgt gegeben:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(r_i, t)}{\partial t} = & S(r_i, t) - (\alpha_D(r_i) + \alpha_S(r_i) + \alpha_T(r_i) + \alpha_L(r_i)) \cdot n(r_i, t) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{K=1}^N \sum_{j=1}^N K(r_K, r_j) \cdot \beta_{Kj}^i \cdot n(r_K, t) \cdot n(r_j, t) \\ & - n(r_i, t) \cdot \sum_{j=1}^N K(r_i, r_j) \cdot n(r_j, t) \cdot (1 - \frac{1}{2} \delta_{ij}) \quad i=1, \dots, N \quad (10) \end{aligned}$$

Die erste der beiden Summen beschreibt die Bildung aus Partikeln der Größe r_i durch Koagulation kleinerer Partikeln, die zweite die Koagulation der Partikel r_i mit anderen Partikeln. Die Form der Abscheidungskoeffizienten und der Koagulationswahrscheinlichkeit wurde bereits in [1] angegeben und sei hier nur der Vollständigkeit halber nochmals aufgeführt:

$$\alpha_D(r) = \frac{k \cdot T \cdot B(r)}{\delta_D} \cdot \frac{A_D}{V} \quad \text{Diffusionsabscheidungskoeffizient}$$

$$\alpha_S(r) = \frac{4\eta}{3} r^3 \cdot \rho \cdot g \cdot B(r) \cdot \frac{A_S}{V} \quad \text{Sedimentationsabscheidungskoeffizient}$$

$$\begin{aligned} \alpha_T(r) = & \frac{9\pi\eta^2 r}{\rho_g} \cdot \frac{1}{1+3C_m \cdot Kn} \cdot \frac{\frac{k_g}{k_s} + C_t \cdot Kn}{1+2 \cdot \frac{k_g}{k_s} + 2C_t \cdot Kn} \\ & \cdot \frac{T-T_w}{T} \cdot \frac{1}{\delta_T} \cdot B(r) \cdot \frac{A_T}{V} \quad \text{Thermophoretischer Abscheidungskoeffizient} \end{aligned}$$

$$\alpha_L(r): \quad \text{beliebiger Leckratenkoeffizient}$$

$$K(r, r') = 4 \pi k T f(B(r) + B(r')) (r+r') + \varepsilon(r, r') \frac{4 \pi}{3} \rho g f^2$$

$|r^3 B(r) - r'^3 B(r')| \cdot \pi \cdot (r+r')^2$: Koagulationswahrscheinlichkeit

$$B(r) = \frac{1}{\kappa 6 \pi \eta r} (1 + A K_n + Q K_n C^{-b/K_n}) : \text{Partikelbeweglichkeit}$$

Aus einem Vergleich mit der in [1] angegebenen Modellgleichung läßt sich erkennen, daß der Hauptunterschied zu Gleichung (10) in der Berechnung der Koagulation besteht. Dieser Unterschied hat seinen Grund in der erwähnten Approximation der Partikelverteilung durch monodisperse Einzelaktionen anstatt durch eine kontinuierliche Funktion, wodurch das Integrodifferentialgleichungssystem in ein System gekoppelter Differentialgleichungen 1. Ordnung umgewandelt wird.

In der derzeitigen Fassung des Codes nicht enthalten sind die turbulente Agglomeration (im Gegensatz zur Brown'schen und zur Gravitationskoagulation, wie aus obiger Formulierung für $K(r, r')$ zu ersehen), der Einfluß großräumiger Konvektion mit dem signifikanten Auftreten räumlicher Inhomogenitäten sowie die Kondensation von Natriumdampf an bestehenden Partikeln. Der Einbau dieser Prozesse ist, wenn die dafür notwendigen physikalischen Daten wie Turbulenzgrade, Kondensationsgeschwindigkeit, Strömungsgeschwindigkeiten etc. verfügbar wären, möglich, ist aber im Falle der Konvektion wegen der dabei notwendigen räumlichen Einteilung des Containments mit erheblichem numerischen Mehraufwand verbunden. Auch die Berechnung der Kondensation an den Partikeln erfordert, wie Rechnungen zur Kondensation von Wasser an Partikeln [3] zeigen, einen bedeutenden Zuwachs an erforderlicher Rechenzeit.

3. Numerische Lösungsmethode

a) Wahl der unabhängigen Variablen

Als unabhängige Variable wird nach wie vor der Logarithmus des Radius benutzt, welches wohl auch sinnvoll ist, da in der überwiegenden Anzahl von Rechnungen lognormale Ausgangsverteilungen benutzt werden. Diese Wahl ist, wie schon erwähnt, aber keineswegs zwingend, so daß sie jederzeit geändert werden kann, wenn dazu die Notwendigkeit bestehen sollte. So ist z.B. im NAUA-Code [3], der im wesentlichen dieselben Methoden verwendet, der Partikelradius die unabhängige Variable.

b) Wahl des Größenbereichs

Der Größenbereich bleibt bei PARDISEKO IIIb über die gesamte Rechnung hinweg gleich. Deswegen muß mittels der Inputparameter RMIN und RMAX vor Beginn der Rechnung ein geeigneter Größenbereich definiert werden. Geeignet bedeutet dabei, daß RMIN so gewählt wird, daß auch die kleinen Quellpartikeln noch ausreichend genau erfaßt werden. Dies läßt sich durch folgende Ungleichung beschreiben

$$n(RMIN, t) \leq 10^{-d} \cdot \max_{i=1, N} (n(r_i, t)) \quad \text{für alle } t$$

d sollte dabei in etwa gleich 4 sein, da dann die Zahl der Partikeln mit $r < RMIN$ so klein ist im Verhältnis zur Gesamtzahl, daß deren Berücksichtigung schon wegen der limitierten Maschinengenauigkeit keinen Genauigkeitsgewinn mehr bringen würde.

Der Parameter RMAX muß so gewählt werden, daß die großen Partikeln, die während der Rechnung durch Koagulation entstehen, möglichst vollständig noch im gewählten Größenbereich liegen. Zustatten kommt hierbei, daß die großen Partikeln bevorzugt durch Sedimentation ausfallen, so daß dem Wachstum des Partikelspektrums zu großen Größen hin eine Grenze gesetzt ist. Als Testgröße, ob RMAX vernünftig gewählt wurde, wird bei jedem Outputzyklus die aufintegrierte Masse der Partikeln mit $r > RMAX$ ausgedruckt. In der Rechnung werden diese dem Kanal mit $r = RMAX$ zugeschlagen. In den Fällen, in denen diese Größe zu groß im Verhältnis zur Gesamtzahl ist (etwa $> 10^{-4} \cdot \text{Gesamtzahl}$), muß die Rechnung mit einem vergrößerten RMAX wiederholt werden. Im übrigen können sowohl RMIN und RMAX als auch die Gesamtzahl der Partikelklassen K2 großzügig gewählt werden, da der Code für die Rechnung (vor allem für die zeitaufwendige Koagulationsberechnung) immer nur die Klassen berücksichtigt, deren Masse und Partikelzahl über den Inputparametern GLIM und ZLIM liegen. Dies gilt natürlich nicht für die Auswertung der Quellfunktion und die Zuordnung von durch Koagulation entstandenen Partikeln.

c) Zeitintegration

Die Zeitintegration erfolgt wie in [1] mittels eines selbststeuernden Euler-Cauchy-Verfahren, welches das einfachste Einschrittverfahren ist.

$$n(r_i, t + \Delta t) = n(r_i, t) + \frac{\partial n(r_i, t)}{\partial t} \cdot \Delta t + O(\Delta t)^2 \quad i = 1, \dots, N \quad (11)$$

Dabei werden die Terme der Ordnung $(\Delta t)^2$ und höher vernachlässigt. Um das Lösungsverfahren stabil zu halten, ist es notwendig, eine Information über die Größenordnung der höheren Terme zu gewinnen, um damit den Zeitschritt Δt richtig wählen zu können.

In PARDISEKO IIIb wird dazu ein Verfahren angewandt, wie es in [4] beschrieben ist. Dabei werden die Werte der Funktionen $n(r_i, t + \Delta t)$ einmal berechnet wie in Gl. (11) und ein zweites Mal durch Hintereinanderausführung von zwei $(\Delta t/2)$ -Schritten.

Da, wie aus Gl. (11) ersichtlich, unter Vernachlässigung höherer Terme beim Euler-Verfahren der Fehler proportional zu $(\Delta t)^2$ ist, ergibt sich

$$\Delta n(r_i, t + \Delta t; \Delta t) \approx \alpha \cdot (\Delta t)^2 \quad (12)$$

$$\Delta n(r_i, t + \Delta t; \Delta t/2) \approx 2 \cdot \alpha \cdot (\Delta t/2)^2 = \frac{1}{2} \alpha \cdot (\Delta t)^2 \quad (13)$$

Aus der Beziehung

$$n_{\text{exakt}}(r_i, t + \Delta t) = n(r_i, t + \Delta t; \Delta t) + \Delta n(r_i, t + \Delta t; \Delta t) \quad (14)$$

ergibt sich mittels der Näherungsbeziehungen (12) und (13)

$$\begin{aligned} \Delta n(r_i, t + \Delta t; \Delta t) &\approx 2 \cdot \Delta n(r_i, t + \Delta t; \Delta t/2) \\ &\approx 2 [n(r_i, t + \Delta t; \Delta t/2) - n(r_i, t + \Delta t; \Delta t)] \quad (15) \\ &= 2\Delta \tilde{n}_i \end{aligned}$$

womit die gewünschte Abschätzung für den Diskretisierungsfehler gefunden ist. Der Zeitschritt wird dann daraus folgendermaßen bestimmt:

$$\Delta t_{\text{neu}} = \Delta t_{\text{alt}} / \sqrt{2 \cdot \text{Max}_{i=1, n} \left| \frac{\Delta \tilde{n}_i}{\epsilon \cdot n_i} \right|} \quad (16)$$

Der errechnete Fehler $\Delta \tilde{n}$ läßt sich außerdem nach [5] noch zur Korrektur der Feinlösung $n(r_i, t + \Delta t; \Delta t/2)$ benutzen, da, wie aus (14) und (15) hervorgeht, der Diskretisierungsfehler dieser bei Vernachlässigung höherer Terme gleich $\Delta \tilde{n}_i$ ist. Somit lautet die endgültige Lösung, wie sie im Code angewandt wird:

$$n(r_i, t + \Delta t) = n(r_i, t + \Delta t; \Delta t/2) + \Delta \tilde{n}_i \quad (17)$$

Das beschriebene Zeitsteuerungsverfahren ist ohne Schwierigkeiten auch auf andere Einschnittverfahren anwendbar. So existiert auch von PARDISEKO IIIb eine weitere Version mit einem Runge-Kutta-Verfahren, die aber wegen ihres höheren Rechenzeitaufwandes nur zum Testen der eigentlichen

"Arbeits"-Version mit dem Euler-Cauchy-Verfahren eingesetzt wird. Die Ergebnisse der beiden Versionen stimmen bei den bis jetzt gerechneten Fällen mit ausreichender Genauigkeit überein.

4. Programminput

Die Inputparameter für den Code lassen sich in drei Gruppen unterteilen.

a) Aerosolphysikalische Parameter

Diese bestimmen die Eigenschaften des Aerosols, dessen Verhalten im Containment berechnet werden soll. Darunter fallen Angaben über die Größe der Partikeln, die Varianz der Verteilung, die Quellfunktion, material-spezifische Daten, Formfaktoren etc. Die folgende Liste enthält alle diese Parameter, wie sie für die derzeitige Codeversion notwendig sind. Dasselbe gilt für diejenigen in den Abschnitten b und c.

| Variable | Bedeutung | Dimension |
|----------|---|-------------------|
| CONØ | Zahlkonzentration der Anfangspartikel | P/cm ³ |
| RG | mittlerer geometrischer Radius " | µ |
| SIGL | Logarithmus der geometrischen Standardabweichung " | --- |
| RHO | Materialdichte " | g/cm ³ |
| RGQ | mittlerer geometrischer Radius der Quellpartikel | µ |
| SIGLQ | Logarithmus der geometrischen Standardabweichung " | --- |
| RHOQ | Materialdichte " | g/cm ³ |
| DELD | Diffusionsgrenzschicht | cm |
| DELT | Thermophoretische Grenzschicht | cm |
| CONS | Wärmeleitfähigkeit der Partikel | mW/cm·K |
| FORM | Dynamischer Formfaktor | --- |
| FORMC | Koagulationsformfaktor | --- |
| COLL | Kollisionseffizienz bei der Gravitationskoagulation | --- |
| RMIN | Kleinster Partikelradius | µ |
| RMAX | Größter Partikelradius | µ |
| K2S | Zahl der Stützpunkte für Quellfunktion | --- |
| DELTS | Zeitabstand " " | sec |
| FACTOR | Freisetzungsfaktor der Quelle | --- |
| QI | Stützpunkte der Quellfunktion entspr. der aufintegrierten Masse der Quellpartikeln zum jeweiligen Zeitpunkt | kg |

Alternativ zu der vorgenannten Quellfunktion ist es auch möglich, eine beliebige Tabelle von Werten, die zeit- und größenabhängige Quelleistungen darstellen, zu verarbeiten. Dadurch ist es möglich, das Aerosolverhalten in Multicompartmenten zu berechnen, dergestalt, daß die zeit- und größenabhängigen Leckagen des einen Compartments auf einen Datenträger - bei der großen Menge von Daten zweckmäßigerweise ein Magnetband - geschrieben werden und in einem zweiten Lauf als Quelle des anderen Compartments eingelesen werden.

b) Containmentspezifische Parameter

Dazu gehören zum einen die Geometrie des Containments, d.h. Volumen, Oberflächen, zum anderen thermodynamische Daten wie Druck und Temperatur. Auch diese Parameter beeinflussen das Aerosolverhalten sehr stark, vor allem das Oberflächen-Volumen-Verhältnis und die Temperaturgradienten Trägergas-Wand. Dagegen ist der Einfluß der Temperaturabhängigkeiten der Trägergasviskosität und der mittleren freien Weglänge des Trägergases, die beide berücksichtigt werden, nicht sehr groß.

| Variable | Bedeutung | Dimension |
|----------|--|---------------------|
| VOL | Volumen des Containments | cm ³ |
| FDIFF | Gesamtoberfläche " | cm ² |
| FSED | Bodenfläche " | cm ² |
| FTHERM | Oberfläche mit einem Temperaturgradienten gegenüber dem Trägergas | cm ² |
| RATELK | Leckagerate | 1/sec |
| TIMELK | Zeitpunkt des Einsetzens der Leckage | sec |
| UMLU | Fluß durch ein Umluftfilter | m ³ /sec |
| UMLUZT | Zeitpunkt des Einsetzens des Umluftfilters | h |
| UMLEFF | Abscheidegrad des Umluftfilters | % |
| P | Containmentdruck | bar |
| TGAS | Trägergastemperatur | K |
| K2T | Zahl der Stützpunkte der Funktion TE | --- |
| DELTT | Zeitabstand " | sec |
| TE | $(T - T_w) / T$ auf die Gastemperatur normierte Temperaturdifferenz Trägergas-Wand | --- |

Druck und Temperatur werden bei der derzeitigen Programmversion noch als Konstante eingelesen. Die Einführung entsprechender Zeitfunktionen wäre

aber ohne weiteres möglich, wenn dies erforderlich sein sollte.

c) Parameter zur Steuerung des Programmablaufs

Diese Gruppe umfaßt alle Parameter, die das eigentliche Ergebnis der Rechnung nicht oder nur geringfügig beeinflussen, sondern die den Genauigkeitsgrad der Rechnung und die Art und Menge des Outputs bestimmen und es gestatten, bestimmte Funktionen (wie Quelle, Thermophorese etc.) zu aktivieren.

| Variable | Bedeutung | Dimension |
|----------|---|----------------------|
| DT | Anfangszeitritt | sec |
| TIME | Gesamtzeit, für die die Berechnung des Aerosolverhaltens gewünscht wird | h |
| ZEIT | Anfangszeitpunkt | sec |
| EPS | Genauigkeitsparameter (siehe Gl. (16)) | --- |
| ZLIM | Untere Schranke für Zahlkonzentration | } s. Ab- schm. 3b |
| GLIM | " für Massenkonzentration | |
| K2 | Zahl der Partikelklassen z.Z. max. 100 | --- |
| NWRITE | Zahl der Zeitschritte, nach der der Output gedruckt wird | --- |
| NCARD | Zahl der Zeitschritte, nach der der Output gestanzt wird | --- |
| NOSO | = 1 aktiviert Quellfunktion | --- |
| NOLK | = 1 " Leckagefunktion | --- |
| NOTE | = 1 " Thermophorese | --- |

5. Programmoutput

Nach jeweils NWRITE-Zeitschritten (siehe 4c) erfolgt ein Ausdruck der bis dahin errechneten Ergebnisse. Dieser Ausdruck umfaßt folgende Werte:

Zeit in sec, min, h

Teilchenzahlkonzentration in P/cm³

$$C_p = \sum_{K=1}^N n(r_K, t)$$

Massenkonzentration in mg/m³

$$C_M = \sum_{K=1}^N S \cdot \frac{4\pi}{3} r_K^3 \cdot n(r_K, t)$$

Mittlerer Radius in μ

$$\bar{r} = \frac{1}{C_p} \sum_{K=1}^N r_K \cdot n(r_K, t)$$

Mittlerer geometrischer Radius in μ

$$r_g = \exp\left(\frac{1}{C_p} \sum_{K=1}^N \ln(r_K) \cdot n(r_K, t)\right)$$

Logarithmus der geometrischen Standardabweichung

$$\ln \delta = \sqrt{\frac{1}{C_p} \sum_{K=1}^N (\ln(r_K) - \ln(r_g))^2 \cdot n(r_K, t)}$$

Abgeschiedene Massen

$$M_X(t) = \int_0^t \sum_{K=1}^N \frac{4\pi}{3} r_K^3 \cdot \rho \cdot V_X(r_K) \cdot n(r_K, t) \cdot dt$$

mit

$$X = \begin{cases} S: \text{ Sedimentation} \\ D: \text{ Diffusion} \\ T: \text{ Thermophorese} \\ L: \text{ Leckage} \\ U: \text{ Umluftfilter} \end{cases}$$

Für $X = S, D, T$ wird M_X als Flächenbelegung in $[\text{mg/cm}^2]$ ausgegeben. Die V_X sind in diesen Fällen die entsprechenden größenabhängigen Grenzwgeschwindigkeiten (siehe u.a. $[\text{1}, \text{2}]$). Für L und U wird M_X als abgeschiedene Gesamtmasse in $[\text{g}]$ angegeben, wobei hier die V_X die (im Moment noch) größenunabhängigen Leckageparameter bzw. Filterabscheidekoeffizienten sind.

Materialdichte der Aerosolpartikeln in g/cm^3

$$\rho(t) = (C_M(t - \Delta t) + S(t) \cdot \Delta t) / (C_M(t - \Delta t) / \rho(t - \Delta t) + S(t) \cdot \Delta t / \rho_Q)$$

Diese zeitabhängige Materialdichte berücksichtigt das Zumischen von Partikeln mit der Dichte ρ_Q zu den bereits vorhandenen unter der Annahme, daß diese Zumischung gleichmäßig über alle Größenklassen erfolgt.

Koagulationskonstante in cm^3/sec

$$\bar{K} = \frac{1}{C_p^2(t)} \sum_{K=1}^N \sum_{i=1}^N K(r_K, r_i) \cdot n(r_K, t) \cdot n(r_i, t)$$

Aktueller Zeitschritt in Δt in sec

Berechnet wird der Zeitschritt wie in Abschn. 3c beschrieben. Die Initialisierung erfolgt durch die Inputgröße DT.

Partikelzahl- und Massenverteilung in P/cm^3 bzw. mg/m^3 als Funktion des Partikelradius und des Logarithmus des Partikelradius.

Zusätzlich zum gedruckten Output bestehen noch Optionen für eine Stanz- ausgabe der Massenkonzentration, der Partikelzahlkonzentration, der ab- geschriebenen Massen etc. jeweils als Funktion der Zeit. Zur optischen Sichtbarmachung der Ergebnisse ist eine Plotausgabe der Aerosolmassen- konzentration als Funktion der Zeit mittels der an der hiesigen Rechen- anlage installierten Plotsoftware vorgesehen.

6. Zusammenfassung und Diskussion

Durch die Berücksichtigung der beiden Bilanzgleichungen (4) und (7) arbeitet der Code streng massenerhaltend, wobei natürlich auf eine ver- nünftige Wahl des Zeitschrittes geachtet werden muß, welche aber durch den beschriebenen Algorithmus sichergestellt ist. So kann der Verbleib sämtlicher eingebrachter Massen bis auf ganz wenige Prozent (ca. 0,1 bis 2 %) über die gesamte Rechnung hin verfolgt werden. Der entstehende Fehler hängt dabei neben der Maschinengenauigkeit im wesentlichen von der Wahl des Inputparameters EPS (Genauigkeitsordnung der Zeitschrittwahl) ab. Die in PARDISEKO III immer wieder aufgetretenen numerischen Instabi- litäten können damit als beseitigt gelten. Auch konnte für gleich Anfangs- bedingungen die Rechenzeit gegenüber PARDISEKO III um einen Faktor 10 bis 20 gesenkt werden. Dies bedeutet, daß in Fällen, in denen nur eine Anfangsfreisetzung als Aerosolquelle vorliegt, die Rechenzeiten (für IBM 370/M3033) in der Größenordnung von Minuten oder weniger liegen. In Fällen mit sehr starken Langzeitaerosolquellen muß aber trotzdem noch mit relativ großen Rechenzeiten (> 10 - 20 min) gerechnet werden. Dies läßt sich auch mit sehr großer Sicherheit bei einem Verfahren, das die aerosolphysikalischen Prozesse - womit hier insbesondere die Koagulation gemeint ist - direkt und ohne besondere Annahmen etwa bezüglich der Art der Größenverteilung behandelt, nicht ändern.

Nach wie vor unberücksichtigt - wie im übrigen in allen vergleichbaren Codes - sind mögliche Auswirkungen räumlicher Inhomogenitäten in der

Größenverteilung. Vielmehr wird angenommen, daß alle Partikeln einer bestimmten Größe zu jeder Zeit räumlich homogen über das zu untersuchende Containment verteilt sind. Dies bedeutet eine gewisse indirekte Berücksichtigung einer turbulenten Konvektion. In Fällen aber, in denen sehr große Partikeln ($r > 15 \mu$) in großer Zahl entstehen (etwa bei Berücksichtigung der Gravitationskoagulation) könnte diese Vereinfachung zu Fehlern führen, da diese Partikeln naturgemäß aufgrund ihrer großen Masse zum "Ausmischen" neigen. Ob dies so ist und welche Auswirkungen es hat, muß unter anderem in den laufenden Großversuchen geklärt werden.

Literatur

- [1] H. Jordan, C. Sack, PARADISEKO III: A Computer Code for Determining the Behavior of Contained Nuclear Aerosols, KFK 2151 (Mai 1975)
- [2] H. Jordan, W. Schikarski, H. Wild, Nukleare Aerosole im geschlossenen System, KFK 1989 (August 1974)
- [3] H. Bunz, C. Sack, W. Schöck, Projekt Nukleare Sicherheit, Halbjahresbericht 1977/2, KFK 2600 (1978)
- [4] I. Stoer, R. Bulirsch, Einführung in die numerische Mathematik II, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York (1973)
- [5] R. Zurmühl, Praktische Mathematik, 5. Auflage, Springer-Verlag (1965)
- [6] J.R. Brock, On the Theory of Thermal Forces Acting on Aerosol Particles, J.Coll.Sci. 17 (1962), S. 768-780
- [7] R.A. Millikan, The General Law of Fall of a Small Spherical Body through a Gas, and its Bearing upon the Nature of Molecular Reflection from Surfaces, Phys.Rev. 22 (1923), S. 1-23
- [8] N.A. Fuchs, The Mechanics of Aerosols, Pergamon Press (1964)

Symbolerklärung

- 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]
- n_i : Vereinfachung für $n(r_i, t)$
- $S(r_i, t)$: Leistung der Aerosolquelle in [$\text{P}/\text{cm}^3 \cdot \text{sec}$]
- $S(t)$: Integralleistung der Aerosolquelle in [$\text{mg}/\text{m}^3 \cdot \text{sec}$]
Zusammenhang mit $S(r_i, t)$:
$$S(t) = \sum_{i=1}^N \rho_Q \cdot V_i \cdot S(r_i, t)$$
- N : Zahl der Partikelklassen
- k : Boltzmannkonstante in [erg/K]
- T : Absolute Temperatur in [K]
- T_W : Wandtemperatur 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 [$\text{mW}/\text{cm} \cdot \text{K}$]
- C_t, C_m : Konstanten, die mit der Art des Wärmeübergangs 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]

- $\xi(r, r')$: Kollisionswahrscheinlichkeit
- 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_T : Oberfläche für thermophoretische Abscheidung in $[cm^2]$
- A_S : Bodenfläche des Containments in $[cm^2]$