

KfK 3154
September 1981

NAUA-Mod 3 — Ein Computerprogramm zur Beschreibung des Aerosolverhaltens in kondensierender Atmosphäre

H. Bunz, M. Koyro, W. Schöck
Laboratorium für Aerosolphysik und Filtertechnik
Projekt Nukleare Sicherheit

Kernforschungszentrum Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Laboratorium für Aerosolphysik und Filtertechnik

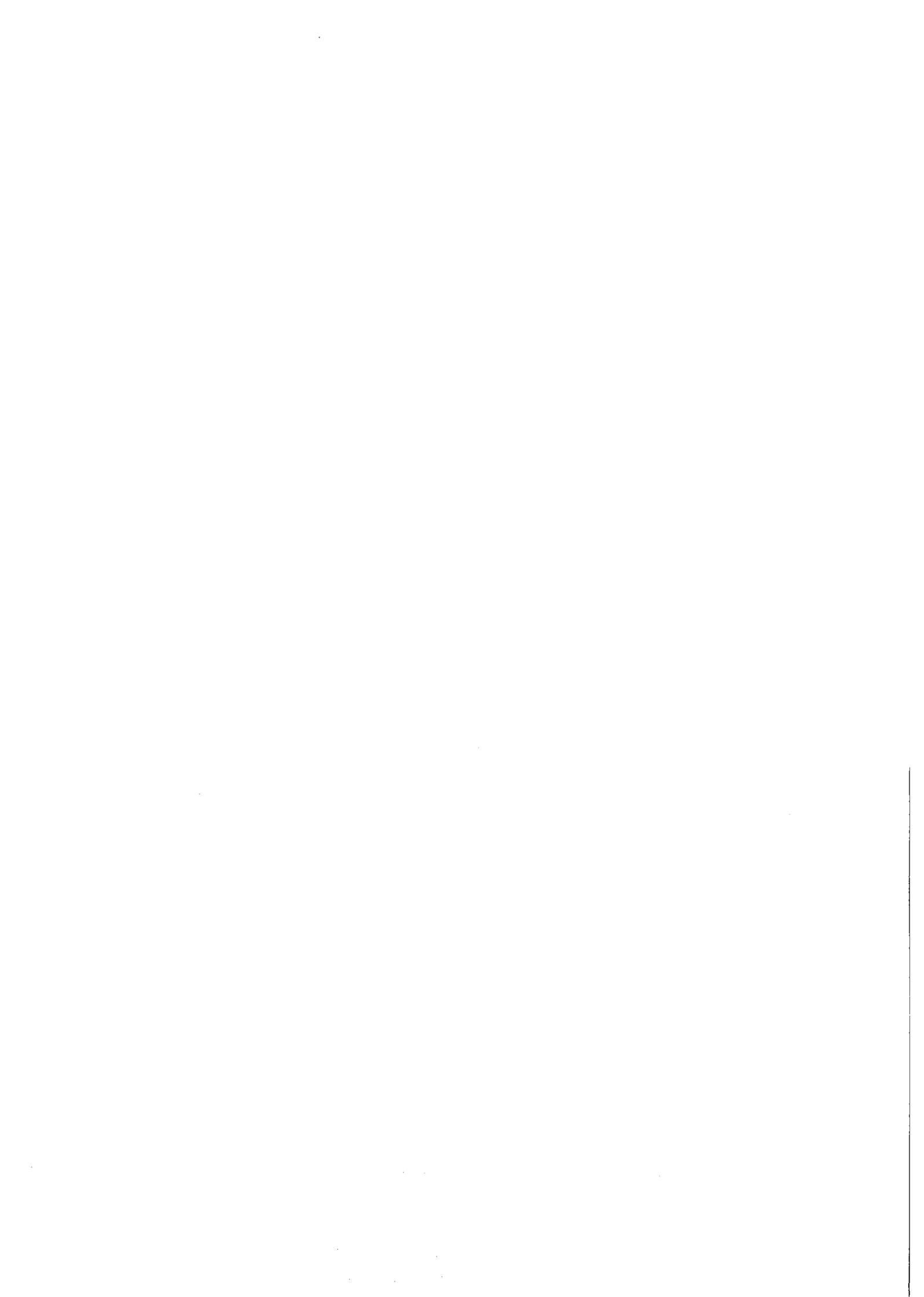
Projekt Nukleare Sicherheit

KfK 3154

NAUA-Mod 3 - Ein Computerprogramm zur Beschreibung
des Aerosolverhaltens in kondensierender Atmosphäre

H. Bunz, M. Koyro, W. Schöck

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe



Inhalt	Seite
1. Einleitung	1
2. Physikalische Voraussetzungen und Modellgleichung	2
3. Numerische Behandlung	14
4. Beschreibung des Inputs und Outputs	17
5. Beispielrechnungen	22
6. Zusammenhang des NAUA-Codes mit Containmentcodes	23
7. Zusammenfassung und Diskussion	25
Anhang	26
Liste der verwendeten Symbole	29
Literatur	32
Abbildungen	34

1. Einleitung

Der Rechencode NAUA-Mod 3 ist ein Programm zur Berechnung des Aerosolverhaltens im Containment eines Leichtwasserreaktors (LWR) nach einem angenommenen Kernschmelzenunfall. Berechnungen dieser Art sind notwendig, da angenommen werden muß, daß ein sehr großer Anteil der bei einem derartigen Unfall freigesetzten Aktivität in Form von Aerosolen vorliegt. Dies gilt insbesondere auch für die langlebige Aktivität wie die Transurane, so daß Spätfolgen fast ausschließlich durch diese Art der Aktivität verursacht werden, während Kurzzeitschäden im wesentlichen ihre Ursache in den radioaktiven Edelgasen und dem Jod haben.

Um nun zu realistischen Abschätzungen zu gelangen, welche Menge von Aerosolen im Sicherheitsbehälter durch natürliche Abbauprozesse abgeschieden wird und welche per Leckage aus dem Sicherheitsbehälter in die Umgebung gelangen kann bzw. in möglichen Störfallfiltern zurückgehalten werden muß, ist ein Rechenprogramm notwendig, das sämtliche physikalische Prozesse enthält, die durch theoretische Überlegungen und experimentelle Befunde als wichtig erkannt wurden. Diese beinhalten die Wechselwirkung der Partikeln untereinander, die Abscheideprozesse an die Wände sowie als Besonderheit für den LWR die Wechselwirkung der Partikeln mit dem Wasserdampf. Alle diese Prozesse müssen einzeln und möglichst ohne einschränkende Voraussetzungen in einen derartigen Code eingearbeitet werden, da ihre Bedeutung unter den verschiedensten Randbedingungen sehr verschieden sein kann und in vielen Fällen nicht ohne weiteres vorausgesagt werden kann. Dies soll später an einer Reihe von Beispielrechnungen noch erläutert werden. Eine Beschreibung des Aerosolabbaus durch empirisch ermittelte Abbaukurven, wie sie in der älteren Literatur noch zu finden ist, ist daher in keinem Fall möglich.

Im folgenden wird nun eine Beschreibung des Codes NAUA-Mod 3 gegeben, der vor dem Hintergrund dieser Überlegungen entwickelt wurde. Auf die die Code-Entwicklung begleitenden Experimente soll in diesem Bericht nur am Rande eingegangen werden, da diese in einem separaten Bericht beschrieben werden /1/.

2. Physikalische Voraussetzungen und Modellgleichung

Ein polydisperses Aerosolsystem ist dadurch definiert, daß eine große Anzahl Partikeln unterschiedlicher Maße und möglicherweise auch chemischer Zusammensetzung und geometrischer Form in einem Trägergas dispergiert sind. Die Partikeln können flüssig oder fest sein. Diese Partikeln sind einer Reihe von physikalischen Prozessen unterworfen. Diese sind:

1. Kräfte auf die Partikeln aufgrund äußerer Felder, z.B. Gravitation, elektrische Felder.
2. Kräfte auf die Partikeln, die vom umgebenden Trägergas ausgeübt werden. Diese Kräfte haben ihren Ursprung sowohl in einer im Trägergas möglicherweise vorhandenen Konvektion als auch in den zufälligen Stößen von Gas-molekülen auf die Partikeloberfläche aufgrund deren thermischer Bewegung.
3. Wechselwirkung der einzelnen Aerosolpartikeln untereinander, die sich durch Stöße zwischen den Partikeln aufgrund unterschiedlicher Geschwindigkeiten ergeben. Da die Partikeln bei einem Stoß mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit aneinander haften bleiben (Koagulation), verändert sich dadurch das Größenspektrum der Partikeln und damit ihr Verhalten gegenüber allen übrigen Prozessen. Prinzipiell ist auch der umgekehrte Prozeß der Desagglomeration vor allem bei sehr großen und verzweigten Partikeln möglich. Da aber, wie später noch ausgeführt werden soll, nur das statistische Verhalten des Aerosolsystems interessiert und die Koagulation oder Agglomeration überwiegt, wird diese mit der Koagulation verrechnet und tritt deswegen nicht mehr gesondert auf.
4. Absorption und Desorption von Einzelmolekülen und kleinen Molekülclustern. Auch dies führt zu einer Veränderung des Größenspektrums mit den unter Pkt. 3 erwähnten Auswirkungen. Auch hier ist nur eine statistisch gemittelte Behandlung möglich, mit dem Unterschied allerdings, daß aufgrund des thermodynamischen Gesamtsystemzustandes und der Partikelgröße entschieden werden muß, welcher Vorgang überwiegt.
5. Wechselwirkungen der Partikeln mit makroskopischen Oberflächen. Hier kommen Absorption und Desorption von Partikeln in Frage. Da aufgrund der für kleine Partikeln sehr starken van-de-Vaals-Kräfte die Absorption die Desorption weit überwiegt, wirken Oberflächen als Partikelsenken. Den Transport zu diesen Oberflächen bewirken die unter Pkt. 1 und 2 genannten Kräfte.

Von diesen Überlegungen ausgehend, läge es zunächst nahe, einfach die gekoppelten Bewegungsgleichungen für die Einzelpartikeln zu lösen und damit das Problem vollständig zu beschreiben. In der Praxis ist dies leider unmöglich, da die Zahl der Partikeln (bis zu $10^9 / \text{cm}^3$) dazu zu groß ist. Man beschreibt deshalb das Aerosolsystem durch Konzentrationsfelder, die sowohl vom Ort als auch der Zeit abhängen und formuliert ein Gleichungssystem dafür. Es wird nun nicht mehr nach Einzelpartikeln gefragt, sondern nach Konzentrationen von Partikeln, die eine bestimmte Anzahl von Atomen oder Molekülen enthalten. Dies ergibt folgendes hochdimensionales nicht-lineares Gleichungssystem /2, 3/:
Bemerkung: Bedeutung der Symbole ist aus separater Liste ersichtlich.

$$\frac{\partial n_i(\vec{R}, t)}{\partial t} + \nabla_{\vec{R}} (n_i(\vec{R}, t) \cdot \vec{q}(\vec{R}, t)) + \nabla_{\vec{R}} (n_i(\vec{R}, t) \cdot \vec{v}_i(\vec{R}, t)) = \quad (1a)$$

$$\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} K_{ij} n_i(\vec{R}, t) \cdot n_{i-j}(\vec{R}, t) - n_i(\vec{R}, t) \sum_{j=1}^N K_{ij} n_j(\vec{R}, t) + E_{i+1} n_{i+1}(\vec{R}, t) - E_i n_i(\vec{R}, t)$$

für $i = 2, \dots, N$

$$\frac{\partial n_1(\vec{R}, t)}{\partial t} + \nabla_{\vec{R}} (n_1(\vec{R}, t) \cdot \vec{q}(\vec{R}, t)) + \nabla_{\vec{R}} (n_1(\vec{R}, t) \cdot \vec{v}_1(\vec{R}, t)) = \quad (1b)$$

$$- n_1(\vec{R}, t) \cdot \sum_{j=1}^N K_{1j} n_j(\vec{R}, t) + \sum_{j=2}^N (1 + \delta_{2j}) E_j n_j(\vec{R}, t)$$

Die einzelnen Terme der Gl. (1a) bedeuten dabei in ihrer Reihenfolge von links nach rechts:

1. Zeitliche Änderung der Konzentration von i-Meren am Ort \vec{R}

2. Fluß von i-Meren aus oder in das Volumenelement $d^3\vec{R}$ am Ort \vec{R} aufgrund der Gasströmung
3. Fluß von i-Meren aufgrund der Bewegung der Partikeln relativ zum Trägergas
4. Produktion von i-Meren durch Koagulation kleinerer Partikeln
5. Koagulation von i-Meren mit anderen Partikeln
6. Gewinn bzw. Verlust von i-Meren aufgrund von Evaporation von Einzelmolekülen
7. Einzelmolekülen

Gl. (1b) entspricht weitgehend Gl. (1a). Da Gl. (1b) aber das Verhalten der Monomere beschreibt, müssen sämtliche Terme, die Partikelerzeugung aus kleineren Partikeln beschreiben, fehlen.

Die Zahl N ist die maximal in einem Partikel vorkommende Anzahl an Monomeren bzw. Molekülen (oder Atomen). Diese Zahl gibt gleichzeitig die Zahl der partiellen Differentialgleichungen an, die simultan für den gesamten Raum gelöst werden müssen. Sie liegt normalerweise in der Größenordnung von $10^8 - 10^{12}$. Daraus ergibt sich unmittelbar, daß eine direkte Lösung der Gleichungen (1a) und (1b) praktisch nicht in Frage kommt, sondern Vereinfachungen notwendig sind, selbst wenn die Funktionen E_i , K_{ij} , \vec{v}_i und das Strömungsfeld \vec{q} bekannt wären.

Die erste dieser Vereinfachungen betrifft die Partikelgröße. Da nämlich die Eigenschaften eines i-Mers von denen eines $i+1$ -Mers kaum verschieden sind für die aerosolphysikalisch interessanten Bereiche mit $i \gg 1$, ist es berechtigt, eine ganze Reihe von i-Meren vergleichbarer Größe zu einer Größenklasse zusammenzufassen, die etwa durch das mittlere Volumen der Partikeln dieser Klasse gekennzeichnet ist.

$$n(v_k, \vec{R}, t) = \sum_{i=I_{k_2}}^{I_{k_2}} n_i(\vec{R}, t) \quad i \quad v_k = v_1 \frac{\sum_{i=I_{k_1}}^{I_{k_2}} in_i(\vec{R}, t)}{n(v_{k_1}, \vec{R}, t)} \quad (2a; b)$$

$$\text{mit } I_{k_2} - I_{k_1} \ll \{I_{k_1}, I_{k_2}\}, \quad I_{(k+1)_1} = I_{k_2} + 1, \quad \{I_{k_1}, I_{k_2}\} \gg 1$$

Eine weitere Vereinfachung betrifft den betrachteten Größenbereich. Wie bereits erwähnt, ist die Mittelung nach Gleichung (2) nur sinnvoll und möglich für große i , d.h. es muß eine Möglichkeit gefunden werden, sie sich nach Gl. (2) ergebende Größenverteilung zu den kleinen Teilchengößen hin abzuschließen. Eine mögliche (und auch physikalisch sinnvolle) Abgrenzung nach unten ist die kritische Clustergröße, die dadurch gegeben ist, daß die freie Energie für diese ein Maximum besitzt, was bedeutet, daß kleinere Cluster thermodynamisch instabil sind und bevorzugt wieder zerfallen, während größere bevorzugt weiterwachsen. Diese Abgrenzung ist aber nur für Stoffe anwendbar, die bei den herrschenden thermodynamischen Bedingungen einen noch merklichen Dampfdruck besitzen, so daß die kritische Größe obige Bedingung erfüllt. Dies aber ist für die häufig betrachteten Rekondensationsaerosole - bestehend aus Metalloxiden - nicht möglich, da diese bei normalerweise vorkommenden Temperaturen einen extrem kleinen Dampfdruck besitzen, was bedingt, daß bereits für Cluster aus einigen wenigen Atomen die freie Energie kleiner ist als für gleiche Anzahl von Einzelatomen sind. Dies trifft z.B. für die hier interessierenden Feststoffaerosole (UO_2 , Stahl, Silikate etc.) zu. Für Stoffe dagegen (z.B. Wasser), deren Dampfdruck unter den zu betrachtenden Bedingungen in der gleichen Größenordnung wie der Atmosphärendruck liegt, ändert sich die kritische Größe unter Umständen bei kleinen Änderungen der thermodynamischen Randbedingungen beträchtlich, was ständige Änderungen der unteren Grenzgröße bedingen würde. Dies aber ist für die praktische Durchführung im Programm relativ umständlich. Deshalb wird die untere Grenzgröße zunächst willkürlich definiert, etwa durch die Partikelgröße, die meßtechnisch gerade noch nachweisbar ist. Diese Willkür läßt sich nachträglich dadurch rechtfertigen, daß - wie die Rechenergebnisse zeigen - Aerosolpartikeln sehr kleiner Größe (etwa $< 0.01 \mu$) insbesondere bei den betrachteten, hohen Partikelzahlkonzentrationen sehr schnell (in wenigen Sekunden) durch Koagulation mit den größeren Partikeln verschwinden und somit die Vernachlässigung der sehr kleinen Rekondensationsaerosolpartikeln nur ein Außerachtlassen eines für den eingangs geschilderten Zweck völlig unwichtigen Kurzzeiteffekts ist.

Die Wechselwirkung der Partikeln mit Clustern und Monomeren aus leichtflüchtigen Bestandteilen (z.B. Wasser) läßt sich dagegen am zweckmäßigsten entkoppelt von der Wechselwirkung der makroskopischen Partikeln als Größenwachstum durch Kondensation beschreiben. Dafür aber gibt es Formeln,

die aus der Diffusionsgleichung abgeleitet wurden und deshalb bereits auch eine Summation über eine sehr große Anzahl an Monomeren enthalten. Diese Ansätze lassen sich experimentell bestätigen /1, 4/. Dabei spielt es auch keine Rolle, ob Monomere oder kleine Cluster anlagern (oder abdampfen), da man ja nur eine pauschale Veränderung der Partikelgröße berechnet bzw. mißt.

Die obere Grenze des zu betrachtenden Größenspektrums (in Gl. (1) durch die Zahl N gegeben) läßt sich zunächst nicht genau festlegen, da die Partikeln durch Koagulation und Kondensation im Prinzip unbegrenzt wachsen können. Trotzdem läßt sich eine obere Grenze dadurch abschätzen, daß sehr große Partikeln bevorzugt durch Sedimentation ausfallen und somit nicht mehr zu betrachten sind. Im allgemeinen läßt sich die obere Grenzgröße dadurch definieren, daß der Fluß von Partikeln in diese Größenklasse durch die Wachstumsprozesse kleiner ist als der negative Fluß durch die Sedimentation.

Eine weitere entscheidende Vereinfachung von Gl. (1) betrifft die Behandlung der räumlichen Variationen der Aerosolgrößenverteilung. Da nämlich die Behandlung der ortsabhängigen Terme in Gl. (1) zu einer enormen numerischen Schwierigkeiten bringen würde, zum anderen das Strömungsfeld \vec{q} nur in den seltensten Fällen (insbesondere für reale Containments) genau genug bekannt ist, wird der Einfluß der Strömung pauschal so behandelt, daß diese dafür sorgt, daß das Partikelspektrum ständig im gesamten Raum homogen verteilt ist, d.h. der Einfluß der Strömung reduziert sich auf die Durchmischung der Atmosphäre und des Aerosolsystems. Diese Annahme wird durch Simulationsexperimente im großen und ganzen bestätigt. Damit aber entfallen in Gl. (1) sämtliche Ableitungen nach dem Ort und man kann die \vec{R} -Abhängigkeit aus den Gleichungen für $n(\vec{R}, r_k, t)$ entfernen. Die einzige Schwierigkeit, die sich damit zunächst ergibt, ist die, daß sich mit einer nun ortsunabhängigen Gleichung natürlich die geometrische Randbedingung, die fordert, daß an den Oberflächen des Containments die Partikelzahlkonzentration gleich null ist, nicht erfüllen läßt. Diese Schwierigkeit wird dadurch umgangen, daß man annimmt, daß die erwähnte homogene Durchmischung nicht bis zur Wand gilt, sondern daß die Konzentration homogen ist bis zu einer laminaren Grenzschicht und sie in dieser vom Volumenwert bis zur Wand hin auf Null abfällt. Da die Zahl der Partikeln in der Grenzschicht klein ist gegen die Gesamtzahl der Partikeln, können die Wechselwirkungs-

prozesse innerhalb der Grenzschicht vernachlässigt werden. Dies bedeutet, daß die Oberflächen mit den ihnen überlagerten Grenzschichten lediglich als Partikelsenken wirken, wenn man davon ausgeht, daß eine Partikel, die die Wand erreicht hat, dort haften bleibt, was aber durch die Erfahrung bestätigt wird. Die Partikelabscheidung läßt sich damit durch folgenden Koeffizienten beschreiben:

$$\alpha_{\chi}(r_k) = v_{\chi}(r_k) \cdot \frac{F_{\chi}}{V} \quad (3)$$

χ steht dabei für die Prozesse der Sedimentation (S), Diffusion (D) und bei Vorhandensein von Temperaturgradienten, Thermophorese (T). Der Gesamtabscheidekoeffizient ergibt sich daraus durch einfache Summation der Einzelkoeffizienten. Diese Vorgehensweise ist nicht unumstritten, da sie streng nur gilt, wenn keine Korrelationen zwischen den verschiedenen Aerosolprozessen auftreten, was aber keineswegs notwendig der Fall ist. Die einfache Summation ist deshalb nur eine erste Näherung, die aber dadurch gerechtfertigt wird, daß in fast allen realistischen Fällen die Sedimentationsabscheidung die übrigen Prozesse um mehrere Größenordnungen überwiegt, so daß die ihnen zugeordneten Abscheidekoeffizienten nur kleine Korrektuten darstellen und man erwarten kann, daß mögliche durch Korrelation auftretende Korrekturkoeffizienten ebenfalls von sehr kleiner Größenordnung sind und deshalb vernachlässigt werden können. An senkrechten Wänden ist die Sedimentationsabscheidung sowieso von den übrigen Prozessen entkoppelt. Es ergibt sich nun das Problem, die Geschwindigkeiten $v_{\chi}(r)$ zu berechnen. Diese lassen sich mit Hilfe des Stokes'schen Gesetzes und der Betrachtung der den Prozessen entsprechenden Kräfte gewinnen:

$$K_{st} = v(r)/B(r) \quad (4a)$$

K_{st} sei dabei die Reibungskraft auf die Partikel bei einer Geschwindigkeit $v(r)$. Gl.(4a), die der Einfachheit halber nur eindimensional formuliert ist, gilt genau genommen nur für Reynoldszahlen kleiner 1, die aber bei den vorkommenden Partikelgrößen und -geschwindigkeiten grundsätzlich vorausgesetzt werden können. $B(r)$ hat die Form /5, 6/:

$$B(r) = \frac{1}{\kappa_0 \pi \eta r} (1 + A \cdot Kn + Q \cdot Kne - b/Kn) \quad (4b)$$

mit

$$Kn = \lambda/r \text{ (Knudsenzahl)}$$

Der Klammerausdruck in Gl. (4b) ist dabei die sogenannte "Slip-Flow"-Korrektur, die die Abweichung im Strömungswiderstand sehr kleiner Teilchen ($< 0.5 \mu\text{m}$) vom klassischen Stokes'schen Gesetz beschreibt. Anschaulich läßt sich dieses Verhalten damit erklären, daß die Partikeln bei hinreichender Kleinheit anfangen, das Vakuum zwischen den einzelnen Trägergasatomen zu "sehen". Dies ergibt einen gegenüber dem normalen Stokes'schen Gesetz verminderten Strömungswiderstand. Die Partikelgeschwindigkeit läßt sich dann mittels Gl. (4a) gewinnen, indem man K_{st} gleich der entsprechenden treibenden Kraft setzt. Man bekommt dadurch nur eine stationäre Grenzgeschwindigkeit, was aber angesichts der kurzen Relaxationszeiten (ca. 10^{-6} bis 10^{-3} sec) gerechtfertigt ist (siehe dazu auch /7/).

Für die Sedimentation ergibt sich damit

$$K_s = m(r) \cdot g \quad (5a)$$

woraus folgt

$$v_s = m(r) \cdot g \cdot B(r) \quad (5b)$$

und

$$\alpha_s = v_s(r) \cdot F_s / V$$

$m(r)$ ist für ideal kugelförmige, porositätsfreie und aus einem Material bestehenden Partikeln gleich $\frac{4}{3} \pi \rho r^3$.

Die für die Diffusion verantwortliche Kraft wird durch die Zufallstöße der Gasmoleküle mit dem Partikel erzeugt. Diese Stöße sind gleich verteilt über den Raumwinkel, so daß im Mittel über sämtliche Partikel die angreifende Kraft verschwindet. Trotzdem aber ergibt sich in Wandnähe ein effektiver Partikelstrom zur Wand hin, da aufgrund der Zufallsbewegung immer eine gewisse Anzahl sich in Richtung der Wand bewegt und bei Berührung mit dieser haften bleibt, so daß kein Rückstrom stattfindet. Dieser Bewegung läßt sich formal eine von Null verschiedene mittlere Kraft in Richtung der Wand zuordnen. Diese Kraft und damit die Geschwindigkeit ist proportional zum Gradienten in der Teilchenzahldichte (genommen senkrecht zur Wand)

$$v_D(r_K) \sim D(r) \nabla_{\vec{n}} n(\vec{R}, r, t) \quad (5c)$$

wobei \vec{n} die Flächennormale ist. Dieser Gradient müßte nun auf der gesamten

inneren Oberfläche des Containments berechnet werden. Da dies aber sehr schwierig, wenn nicht unmöglich ist, wird stattdessen zum einen der Mittelwert über die gesamte Oberfläche genommen und zum anderen, wie oben bereits erwähnt, angenommen, daß der Abfall der Partikelzahlkonzentration ausschließlich in der laminaren Grenzschicht über der Oberfläche erfolgt, d.h. der Gradient in Gl. (5c) wird ersetzt durch:

$$\nabla_{\vec{n}} n(\vec{R}, r, t) = \frac{1}{\delta_D} \cdot n(r, t) \quad (5d)$$

wobei $n(r, t)$ wiederum die vorher definierte volumenhomogene Partikelzahlverteilung ist. Die Grenzschicht δ_D ist nach einer schwachen Potenz ($\sim r^{0.25}$) von der Partikelgröße abhängig /8/, wird aber als unabhängig von der Partikelgröße angenommen, zumal ihre theoretische und experimentelle Bestimmung mit gewissen Unsicherheiten behaftet ist. Im allgemeinen wird sie so gewählt, daß das Ablagerungsverhalten der Aerosolpartikeln durch den Code im Vergleich zu Experimenten richtig beschrieben wird. Dazu kommt noch, daß die Diffusion als Ablagerungsprozeß im Vergleich zur Sedimentation von geringer Bedeutung ist, so daß es sich zumindest für den hier angesprochenen Zweck des Codes ein zu großer Aufwand zur genaueren Bestimmung der Grenzschicht nicht gerechtfertigt erscheint. Die Geschwindigkeit $v_D(r)$ und der Abscheidekoeffizient $\alpha_D(r)$ ergeben sich damit zu:

$$v_D(r) = D(r) \cdot \frac{n(r, t)}{\delta_D} \cdot \frac{1}{n(r, t)} = D(r) \cdot \frac{1}{\delta_D} \quad (5e)$$

$$\alpha_D(r) = v_D(r) \cdot F_D/V$$

Für die thermophoretische Abscheidung, die dem Temperaturgradienten an der Wand proportional ist, wird eine ähnliche Vorgehensweise wie im Falle der Diffusion gewählt. Auch hier wird angenommen, daß dieser Gradient, der in Wirklichkeit natürlich lokal aufgrund der unterschiedlichen Strömungsverhältnisse, unterschiedlicher Oberflächeneigenschaften, wie Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität sowie Wärmeabfuhr durchaus sehr verschieden sein kann, durch einen gemittelten effektiven Temperaturgradienten beschrieben werden kann. Ein derartiger effektiver Gradient läßt sich wie in Gl. (5e) mittels einer Grenzschichtdicke (δ_T) darstellen. Somit folgt für die thermophoretische Abscheidung

$$K_T (r, t) = f_T (r) \cdot \nabla_{\vec{n}} T (\vec{R}, t) = f_T (r) \cdot \frac{\Delta T(t)}{\delta_T} \quad (5f)$$

$$v_T (r) = K_T (r) \cdot B (r)$$

$$\alpha_T (r) = v_T (r) \cdot F_T/V$$

$f_T (r)$ ist dabei eine Funktion nicht nur der Größe r sondern auch der thermischen Eigenschaften des Partikelmaterials und des Trägergases (siehe dazu u.a. /9/).

Die vollständige Modellgleichung, wie sie in NAUA-Mod3 verwendet wird, lässt sich damit wie folgt beschreiben:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(r_k, t)}{\partial t} = & S(r_k, t) - (\alpha_D(r_k) + \alpha_S(r_k) + \alpha_T(r_k) + \alpha_L(r_k)) \cdot n(r_k, t) \\ & - \sum_{i=1}^N (1 - \frac{1}{2} \delta_{ik}) \cdot K(r_i, r_k) \cdot n(r_i, t) \cdot n(r_k, t) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N K(r_i, r_k) \beta_{ij}^k \cdot n(r_i, t) \cdot n(r_j, t) \\ & + (1 - \delta_{1k}) \frac{\dot{V}_{k-1}(t)}{V_k - V_{k-1}} \cdot n(r_{k-1}, t) \\ & - \frac{\dot{V}_k(t)}{V_{k+1} - V_k} \cdot n(r_k, t) \quad \text{für } k = 1, \dots, N \quad (6) \end{aligned}$$

Die mathematischen Formen der Funktionen $K(r_i, r_j)$ sowie $\dot{V}_k(t)$ lassen sich aus der Literatur /10, 11, 12, 13/ entnehmen und seien deshalb an dieser Stelle nur kurz wiederholt.

Die Koagulationsfunktion $K(r_i, r_j)$ spaltet sich in mehrere Terme auf, deren Bedeutung je nach Größe der Partikeln sowie den Eigenschaften der Trägergasatmosphäre unterschiedlich ist. Die für den hier zu betrachtenden Fall der Nachunfallsituation in einem LWR am bedeutendsten sind die Brown'sche Koagulation /10/ sowie die Graviationskoagulation (z.B. /11/). $K(r_i, r_j)$ hat damit die folgende Form:

$$K(r_i, r_j) = K_B(r_i, r_j) + K_G(r_i, r_j) \quad (7a)$$

mit

$$K_B(r_i, r_j) = 4 \pi \cdot k \cdot T \cdot (B(r_i) + B(r_j)) \cdot (r_i + r_j) \quad (7b)$$

und

$$K_G(r_i, r_j) = \epsilon(r_i, r_j) \cdot \pi \cdot (r_i + r_j)^2 \cdot |v_s(r_i) - v_s(r_j)| \quad (7c)$$

Darüberhinaus gibt es noch Koagulationseffekte durch Turbulenzen und Scherströmungen im Trägergas, die sich aber für den genannten Anwendungszweck schwer quantifizieren lassen und deshalb außer acht gelassen werden. Da aber zusätzliche Koagulationseffekte mit Sicherheit eine vermehrte Partikelabscheidung bedingen, ist man mit dieser Vernachlässigung auf jeden Fall auf der sicheren Seite bezüglich der Risikobetrachtungen.

Der Interpolationskoeffizient β_{ij}^k ist notwendig, wenn eine (wie im allgemeinen) nicht massenäquidistante Einteilung für die Aerosolgrößenverteilung verwendet wird, da dann die durch Koagulatione entstehenden Partikelnicht in die vorgegebene Größeneinteilung hineinpassen. Es ergibt sich zu /14/:

$$\beta_{ij}^k = \begin{cases} \frac{V_{k+1} - (V_i + V_j)}{V_{k+1} - V_k} & \begin{array}{l} + \text{ für } (V_i + V_j) \in (V_k, V_{k+1}) \\ - \text{ für } (V_i + V_j) \in (V_{k-1}, V_k) \end{array} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Für die Volumenwachstumsgeschwindigkeit \dot{V}_k wird ein Ansatz verwendet, wie er von Mason /12/ für das Wachstum von Regentröpfchen entwickelt wurde. Die Anwendbarkeit dieses Ansatzes für kernschmelzentypische Situationen wurde experimentell überprüft und bestätigt /1,15/. Die Geschwindigkeit \dot{V}_k ist neben der Partikelgröße von der Temperatur, Stoffeigenschaften des Wassers und der Luft sowie sehr stark vom Wasserdampfgehalt in der Atmosphäre abhängig. Damit ergibt sich:

$$\dot{V}_k = 4 \pi r_k \frac{S - \exp(2\sigma M / \rho_W \cdot R \cdot T \cdot r_k)}{\frac{L \cdot \rho_W}{K \cdot T} \left(\frac{L \cdot M}{R \cdot T} - 1 \right) + \frac{\rho_W \cdot R \cdot T}{M \cdot D \cdot P_s(T)}} \quad (8)$$

Aus der Bestimmung der Nullstelle des Zählers der rechten Seite von Gl. (8) ergibt sich unmittelbar der kritische Radius r_c

$$r_c = \frac{2 \sigma \cdot M}{\rho_W \cdot R \cdot T \cdot \ln S} \quad (9)$$

welcher den Partikelradius (oder Tröpfchenradius) bezeichnet, der die Tröpfchen, die unter den gegebenen Umständen verdampfen ($r < r_c$), von denen trennt, die weiter wachsen ($r > r_c$). Gl. (8) ist also ohne weiteres in der Lage, auch negatives Wachstum (d.h. Wiederverdampfung von Tröpfchen) zu berechnen.

Ein weiteres Problem für die modellmäßige Behandlung des Aerosolsystems, wie es hier vorliegt, ist die Tatsache, daß dieses aus zumindest zwei sich physikalisch recht unterschiedlich verhaltenen Komponenten, nämlich dem Feststoffanteil und dem Wasser besteht. Der Feststoffanteil läßt sich natürlich in eine Reihe weiterer Komponenten zerlegen, im Prinzip bis auf die Ebene der einzelnen vorkommenden chemischen Verbindungen. Auf diese zweite Unterteilung wird im NAUA-Programm allerdings verzichtet, zum einen wegen des enormen zusätzlichen rechenzeitintensiven Aufwands, zum zweiten kann man davon ausgehen, daß aufgrund der zu erwartenden großen Partikelzahlkonzentrationen die hohe Koagulationsrate für eine gute Durchmischung aller Feststoffkomponenten über alle Partikelgrößen sorgt. Deshalb soll im folgenden unter Feststoffanteil das homogene Gemisch sämtlicher aerosolförmig vorkommender Feststoffmaterialien verstanden werden, dessen Zusammensetzung sich nur zeitlich ändert (siehe dazu Kapitel 3).

Diese Argumentation läßt sich natürlich auf den Wasseranteil der Aerosolpartikeln nicht anwenden, der sich bereits bei kleinen Änderungen der thermodynamischen Randbedingungen stark ändern kann und somit explizit behandelt werden muß. Eine derartige Behandlung aber würde der Klassifizierung der Aerosolpartikeln, wie sie in Gl. (2) beschrieben wurde, eine weitere Dimension hinzufügen insofern, als man jedes Partikel nicht nur nach der Anzahl der Atome oder Moleküle, die es enthält, charakterisieren muß, sondern auch nach dem Anteil von Molekülen jeder der beiden Komponenten. In Gl. (6) müßte dann der Index nicht von 1 bis N laufen, sondern von 1 bis $N \cdot N_1$, wenn man davon ausgeht, daß man für die Klassifizierung nach dem Wasseranteil in N_1 Klassen wählt. Dies aber würde den Rechenaufwand in nicht vertretbarer Weise erhöhen, da dieser - wie aus Gl. (6) ersichtlich - zu einem Teil zwar nur linear, im anderen Teil (Koagulation) aber quadratisch mit der Anzahl

von Klassen anwächst. Aus diesem Grunde wird die Einteilung nach der Größe nach Gl. (2) beibehalten, jeder Größenklasse aber zusätzlich noch nur für die Größe gemittelte Anteile an Feststoff und Wasser zugeordnet. Diese werden jeweils neu berechnet, wenn Koagulation mit Partikeln anderer Zusammensetzung stattfindet, sowie natürlich bei Kondensation oder Verdampfung von Wasser.

Diese Vereinfachung spielt bei sämtlichen aerosolphysikalischen Prozessen, die nur von der Größe der Partikeln abhängen, keine Rolle, wohl aber bei denen, die auch von der Masse der Partikeln abhängen. Dies betrifft aber in erster Linie die Sedimentation (Gl. (5a), (5b)), die gleichzeitig auch der wichtigste Abscheideprozeß ist. Da nun der Zweck des NAUA-Programms die Berechnung der für die Freisetzung in die Umgebung eines KKW zur Verfügung stehenden Aerosole ist, hat man nachzuweisen, daß das geschilderte Verfahren auf der sicheren Seite ist, d.h. daß die Abscheidung dadurch immer unterschätzt wird. Das dies der Fall ist, wird im Anhang 1 gezeigt, womit die Anwendung dieser Vereinfachung gerechtfertigt erscheint.

Zum Abschluß dieses Kapitels soll noch einiges zum Begriff der "Größe" bei Aerosolpartikeln bemerkt werden.

Die Definition, wie sie nach Gl. (2) gegeben ist, impliziert eine Charakterisierung der Partikeln nach der Masse, da diese der Anzahl der Moleküle und deren Molekulargewicht proportional ist. Dies ist auch die Einteilung, wie sie im NAUA-Code angewandt wird, was auch sinnvoll ist im Hinblick darauf, daß die eigentlich interessierende Aktivität direkt mit der Masse korreliert ist. Die an der Masse orientierte Größe läßt sich allerdings in sehr vielen Fällen nicht auf die aerosolphysikalischen Prozesse, wie sie durch die Gleichungen (4) bis (8) beschrieben werden, anwenden. Dies liegt ganz einfach daran, daß sehr viele Aerosolpartikeln keineswegs kugelförmig und kompakt sind, was den durch

$$r_e = \sqrt[3]{\frac{3 m}{4 \pi \rho}} \quad (10)$$

Partikelradius in diesen Fällen zu einer rein fiktiven Größe macht, die keinem physikalischen Prozeß zugeordnet werden kann. Als Beispiel dafür soll Abb. 1 dienen, die eine elektronenmikroskopische Aufnahme von durch einen Lichtbogen erzeugten UO_2 -Partikeln zeigt. Diese unregelmäßige geometrische Form sehr vieler realer Aerosolpartikeln bedingt, daß für praktisch jede einzelne physikalische Erscheinung (Beweglichkeit, Lichtstreuung, Masse etc.) ein spezieller Partikeldurchmesser definiert werden muß, der durch das

Verhalten der entsprechenden Äquivalentkugel gegeben ist. Die einzelnen Definitionen sind in /16/ aufgeführt. Zur Transformation der einzelnen Durchmesser ineinander bedient man sich sogenannter Formfaktoren, die im allgemeinen experimentell bestimmt werden müssen. So ist zum Beispiel die Beweglichkeit (Gl. (4b)) von Partikeln, wie sie in Abb. 1 zu sehen sind, erheblich kleiner als diejenige der entsprechenden massenäquivalenten Kugel. Deshalb muß in Gl. (4b) bei Verwendung des massenäquivalenten Radius zur Korrektur der dynamische Formfaktor κ eingeführt werden, welcher von der Partikelgeometrie abhängt und für jedes Partikel verschieden sein kann. Im allgemeinen können nur gemittelte Formfaktoren bestenfalls für bestimmte Gruppen von Partikeln angegeben werden. So gibt es Ansätze, die sich nach der Anzahl der Primärpartikeln richten, die in dem betrachteten agglomerierten Partikel enthalten sind /17/.

Für den hier zu betrachtenden Fall der Partikeln in einer kondensierenden Atmosphäre allerdings konnte experimentell festgestellt werden, daß diese sich aufgrund der außerordentlich starken Kapillarkräfte immer zu Kugeln (Abb. 2) umformen /15/. Da aber mit Kondensation stets - vielleicht auch nur zeitlich oder räumlich fluktuierend (je nach Unfallszenario)- gerechnet werden muß, kann man sämtliche Partikeln als kugelförmig annehmen.

Die Frage, die dazu lediglich noch offen ist, ist die Bestimmung der effektiven Dichte der Partikeln, da die genannten Kapillarkräfte selbstverständlich nicht ausreichen, die Partikeln bis auf die wirkliche Materialdichte zusammenzupressen. Dafür sind, wie aus der Materialforschung bekannt ist, sehr große Kräfte und hohe Temperaturen erforderlich (Prozeß der Sinterung). Die Bestimmung dieser effektiven Dichte aber ist möglich durch Messung der Partikeldurchmesser mittels elektronenmikroskopischer Aufnahmen und durch Messung der Aerosolmassenkonzentration. Es muß aber betont werden, daß diese vereinfachende Annahme der Kugelförmigkeit nur unter den vorliegenden Bedingungen möglich ist.

3. Numerische Behandlung

Gleichung (6) stellt ein System von gekoppelten nichtlinearen Differentialgleichungen 1. Ordnung dar. Dieses ist wegen seiner Nichtlinearität analytisch nicht lösbar und muß deshalb numerisch gelöst werden, wobei ein vertretbarer Kompromiß zwischen erforderlicher Genauigkeit einerseits und der dafür notwendigen Rechenzeit andererseits gefunden werden muß. Durch Test- und Vergleichsrechnungen mit anderen numerischen Verfahren konnte nachgewiesen werden, daß bereits ein Euler-Cauchy-Verfahren mit variabler Zeitschrittwahl numerisch stabil ist und brauchbare Lösungen von Gl. (6) liefert.

Für die Berechnung des Zeitinkrements wird davon ausgegangen, daß das Verhältnis der Terme 2. Ordnung zu denen 1. Ordnung sich mittels des Verhältnisses von denen 1. Ordnung zu denen von 0. Ordnung abschätzen lassen, d.h.

$$|\ddot{n}/\dot{n}| \sim |\dot{n}/n| \quad (11a)$$

Dies aber läßt sich wie folgt begründen: Es gilt

$$n(t + \Delta t) = n(t) + \dot{n} \cdot \Delta t + 1/2 \ddot{n} (\Delta t)^2 + \dots \quad (11b)$$

wobei vorausgesetzt wird, daß diese Reihe konvergiert und die Heranziehung der ersten Terme zur Konvergenzbeurteilung ausreicht. Gl. (6) ist nun von der Art

$$\dot{n} = -\alpha n - \beta n^2 \quad (\alpha > 0, \beta > 0) \quad (11c)$$

Daraus ergibt sich:

$$\ddot{n} = -(\alpha + 2\beta n) \cdot \dot{n} = (\alpha + 2\beta n) \cdot (\alpha n + \beta n^2) \quad (11d)$$

$$|\ddot{n}/\dot{n}| = \alpha + 2\beta \cdot n \quad (11e)$$

$$|\dot{n}/n| = \alpha + \beta n \quad (11f)$$

Daraus folgt:

$$2 |\dot{n}/n| \geq |\ddot{n}/\dot{n}| \geq |\dot{n}/n| \quad (11g)$$

da sämtliche vorkommenden Größen positiv sind (auch n , das als Teilchenzahl natürlich immer positiv ist).

Dies bedeutet, daß die Abschätzung des Terms 2. Ordnung durch diejenige des Terms 1. Ordnung ersetzt werden kann, was natürlich eine enorme Erleichterung darstellt. Da nun Gl. (6) ein Gleichungssystem ist, das simultan für alle n_i gelöst werden muß, wird der Zeitschritt Δt wie folgt bestimmt:

$$\Delta t = \text{Min}_{k=1,N} \quad \epsilon \cdot |n_k/\dot{n}_k| \quad (12)$$

Da nun die Geschwindigkeit der Kondensation des Wasserdampfes an den Partikeln erheblich über den Geschwindigkeiten der übrigen Prozesse (Koagulation, Sedimentation etc.) liegt, muß die Integration dieses Teils von Gleichung (6) getrennt von der übrigen Gleichung mit erheblich kürzeren Zeitschritten erfolgen.

Dies führt zu einem prinzipiellen Aufbau des Codes, wie er aus Abb. 3 zu ersehen ist, die ein Blockschema des Codes zeigt.

Wie bereits erwähnt (Kap. 2), kann sich aufgrund der Freisetzung verschiedenartiger Materialien die Zusammensetzung des luftgetragenen Materials zeitlich ändern. Dem wird dadurch Rechnung getragen, daß die über die gesamte Aerosolgrößenverteilung gemittelte Materialdichte abhängig von der Menge der jeweiligen freigesetzten Masse und der bereits luftgetragenen Masse nach jedem Zeitschritt, in dem eine Aerosolfreisetzung stattfand, neu berechnet wird.

$$\rho(t + \Delta t) = (C_M(t) + \Delta t \sum_{i=1}^{Z_S} S_i(t)) / (C_M(t) / \rho(t) + \Delta t \sum_{i=1}^{Z_S} S_i(t) / \rho_i) \quad (13)$$

Z_S ist dabei die Zahl der unterschiedlichen Aerosolquellen, ρ_i sind die unterschiedlichen Materialdichten dieser Quellen. Ein ähnliches Schema wird auch zur Bilanzierung des radioaktiven Anteils des Aerosolsystems angewandt:

$$A(t + \Delta t) = (C_M(t) \cdot A(t) + \Delta t \sum_{i=1}^{Z_S} S_i(t) \cdot A_i) / (C_M(t) + \Delta t \sum_{i=1}^{Z_S} S_i(t)) \quad (14)$$

Diese Berechnungsweise des Aktivitätsanteils läßt sich im übrigen unschwer auch nuklidspezifisch durchführen. Ansonsten wird die Zahl der Quellpartikeln einfach jeweils zu der entsprechenden Partikelklasse dazuaddiert. Somit ergeben sich bezüglich der verwendbaren Aerosolgrößenverteilungen keinerlei Einschränkungen.

Da nun je nach Freisetzungsszenario die erforderliche Rechenzeit stark schwanken kann, wurde das Programm restartfähig gemacht. Dies wird durch die Struktur des Programms (Abb. 3) sehr erleichtert, da man nur die gesamten Daten, die am Ende einer Zeitschleife zur Ausführung der nächsten verfügbar sein müssen, auf einen Zwischendataset speichern muß, um dann mittels diesem in einem neuen Job weiterrechnen zu können. Deshalb wird die auf der Jobkarte angegebene CPU-Zeit zusätzlich nochmals als normale Inputgröße angegeben, so daß während des Rechnens ständig geprüft werden kann, ob diese erreicht ist. Wenn ja, wird dann der genannte Zwischendataset geschrieben.

Jede Rechnung läßt sich so in eine Reihe von Einzeljobs zerlegen.

Im übrigen werden sämtliche physikalischen Größen wie Gasviskosität, mittlere freie Weglänge, Dampfdruck etc. bei jedem Zeitschritt abhängig von der jeweiligen Containmenttemperatur neu berechnet.

4. Beschreibung des Inputs und Outputs

I) Input

Die Liste der Inputparameter läßt sich in drei Teile aufgliedern:

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, materialspezifische Daten, Formfaktoren etc.

b) containmentspezifische Parameter

Dazu gehören zum einen die Geometrie des Containments, d.h. Volumen und Oberflächen, zum anderen thermodynamische Daten wie Temperatur, Wasserdampfgehalt und -quelle und Containmentleckage jeweils als Funktion der Zeit. Besonders starken Einfluß auf das Aerosolverhalten haben davon das Oberflächen-Volumen-Verhältnis und beim Auftreten von Übersättigungszuständen Temperatur und Wasserdampfgehalt im Containment.

c) Parameter zur Steuerung des Programmablaufs und des Outputs

Der größte Teil der Parameter dieser Gruppe beeinflußt den eigentlichen Ablauf der Rechnung wenig, sondern bestimmt lediglich Art und Umfang des Inputs und Outputs sowie den Genauigkeitsgrad der Rechnung. Mittels einiger anderer können noch bestimmte Programmooptionen wie Kondensation und Containmentleckage aktiviert werden.

Anmerkung

Schlüssel zum Variablentyp:	I 4:	INTEGER * 4
	L 4:	LOGICAL * 4
	R 4:	REAL * 4
	R 8:	REAL * 8

a) Aerosolphysikalische Parameter

Variable	Bedeutung	Typ	Dimension
AKTIVI	Feld: Aktivitätsanteil der verschiedenen Aerosolquellen in Massenanteilen Länge = Anzahl der verschiedenen Aerosolquellen	R 4	-
DELD	Diffusionsgrenzschicht	R 4	cm
FORM	Dynamischer Formfaktor	R 4	-
FORMC	Koagulationsformfaktor	R 4	-
FORMKO	Kondensationsformfaktor (i.a. = 1) siehe /14/	R 4	-
KONTIN	siehe SRATE	L 4	-
RG	Feld: mittl. geometrische Radien der verschiedenen Aerosolquellen	R 4	cm
RMIN RMAX	kleinster bzw. größter Radius der zu behandelnden Partikelverteilung	R 4	cm
RHO1	Feld: Materialdichten der verschiedenen Aerosolquellen	R 4	cm
SIGL	Feld: geometrische Standardabweichungen der verschiedenen Aerosolquellen. Alternativ zu den mittels r_g und σ definierten Aerosolgrößenverteilungen können auch beliebige Wertetabellen als Verteilungen eingelesen werden.	R 4	-
SRATE	Feld: Quellrate bzw. Gesamtmasse der verschiedenen Aerosolquellen in bestimmten Zeitabschnitten (siehe TQ). Das Feld KONTIN bestimmt, ob SRATE als kontinuierliche Quelle (.TRUE.) oder als Punktquelle (.FALSE.) aufzufassen ist.	R 4	g/sec oder g
TIMEK1	Zeitpunkte des Beginns bzw. des Endes der	R 4	sec
TIMEK2	Kondensation des Wasserdampfes an den Partikeln	R 4	sec
TQ	Feld: Zeitpunkte zur Abgrenzung der einzelnen Aerosolfreisetzungsphasen	R 4	sec

b) Containmentspezifische Parameter

Variable	Bedeutung	Typ	Dimension
FDIFF	Gesamtinnenoberfläche des Containments maßgebend für die Diffusionsabscheidung	R 4	cm ²
FSED	Gesamtbodenfläche (= Summe aller waagerechten Flächen)	R 4	cm ²
VOL	Volumen des Containments	R 4	cm ³
	Zusätzlich werden in den Unterprogrammen TEMPC, STEAM und TLEAK Tabellen als zeitabhängige Containmenttemperatur, Dampfquelle und Leckrate eingelesen.		
TEMPC:			
N	Anzahl der Stützpunkte TI	I 4	-
DELT	Zeitabstand zwischen den Stützpunkten	R 4	sec
TI	Feld: äquidistante Tabelle der Containmenttemperatur	R 4	C
STEAM:			
N	Anzahl der Stützpunkte von TD und D	I 4	-
D	Feld: Dampfquelle zu den Zeiten TD	R 4	g/sec
TD	Feld: Zeitstützpunkte zur Dampfquelle	R 4	sec
TLEAK:			
N	Anzahl der Stützpunkte von TL und RL	I 4	-
RL	Feld: Leckrate zu den Zeiten TL	R 4	1/sec
TL	Feld: Zeitstützpunkte zur Leckrate	R 4	sec

c) Steuerparameter

Variable	Bedeutung	Typ	Dimension
CPUZT	Maximale Rechenzeit laut Jobkarte	R 4	min
CUTOFF	Minimale Anzahl von Partikeln in einer Größenklasse; bei kleiner Zahl wird diese Klasse auf Null gesetzt	R 4	cm ⁻³
EPS	Genauigkeitsparameter (siehe Gl. (12))	R 4	-
KMAX	Anzahl der Klassen zur Einteilung des Partikelspektrums	I 4	-
LEAK	= .TRUE. : aktiviert Leckagefunktion (TLEAK)	L 4	-
LKOND	= .TRUE. : aktiviert Wasserdampfkondensation	L 4	-

Variable	Bedeutung	Typ	Dimension
NPLOT	Zahl der Zeitschritte, nach der Output zur Anfertigung von Plots erfolgt	I 4	-
NWRITE	Zahl der Zeitschritte, nach der Output gedruckt wird	I 4	-
RESTRT	= .TRUE. : Es handelt sich um einen Fortsetzungsjob; es wird ein entsprechender Anschlußdatensatz erwartet	L 4	-
SZEIT	Startzeit	R 4	sec
TEXT1			
TEXT2	Text für Überschrift	R 8	-
TEXT3			
TEXT4			
TIME	Gesamtproblemzeit	R 4	h

Die Form der Inputliste ist aus Abb. 4 zu ersehen. Der Input erfolgt ausschließlich über das listengesteuerte READ /18/, wobei nummerierte Dateien als Input benutzt werden. Dies erfordert, daß jeweils am Ende jedes Records ein Parameter NDUMMY gelesen wird, der dazu dient, die Zeilennummerierung zu überlesen.

II. Output

a) Ausgabe des Inputs

Zur besseren Kontrolle wird der gesamte eingelesene Input (mit Ausnahme der Restartdatei) zu Beginn des Rechenlaufs ausgedruckt.

Die Ausgabe ist selbsterklärend.

b) Ausgabe der Rechenergebnisse

Alle NWRITE-Zeitschritte bzw. am Ende der Problemzeit erfolgt eine Druckausgabe, die alle wesentlichen Ergebnisse, die bis zu diesem Zeitpunkt berechnet wurden, enthält. Diese sind (in der Reihenfolge der Ausgabe):

- Problemzeit in sec, min, h
- Gesamtteilchenzahlkonzentration in P/cm³
- Gesamtmassenkonzentration in g/ cm³
- Containmenttemperatur in C

- mittlerer Partikelradius in cm
- Feststoffanteil der Massenkonzentration in g/cm^3
- Wasseranteil der Massenkonzentration in g/cm^3
- zeitabhängige Materialdichte (Gl. (13)) in g/cm^3
- Aktivitätsanteil am Feststoffanteil (Gl. (14))
- Leckrate aus dem Containment in g/sec
- Aktivitätsanteil davon in g/sec
- aufintegrierte Leckage in g
- Aktivitätsanteil davon in g
- auf den Containmentoberflächen abgeschiedene Partikeln in g/cm^2
 - durch Diffusion
 - durch Sedimentation
 - Feststoffanteil der Diffusionsabscheidung
 - Wasseranteil der Diffusionsabscheidung
 - Feststoffanteil der Sedimentationsabscheidung
 - Wasseranteil der Sedimentationsabscheidung
- aktueller Integrationszeitschritt in sec
- aus dem Abfall des Trockenanteils der Massenkonzentration berechnete effektive Abscheiderate
- aktuelle Wasserdampfsättigung
- Tabelle der aktuellen Aerosolgrößenverteilung
 - Nummer der Größenklasse
 - Zahl der Partikeln in der Größenklasse in P/cm^3
 - Radius der Partikeln in der Größenklasse in cm
 - Masse der Partikeln in der Größenklasse in g/cm^3
 - Feststoffmasse der Partikeln in der Größenklasse in g/cm^3
 - Wassermasse der Partikeln in der Größenklasse in g/cm^3

Am Schluß eines jeden Laufs wird als Informationswert noch die Gesamtzahl der Zeitschritte ausgedruckt.

Zusätzlich zur Druckangabe kann als Option alle NPLOT-Zeitschritte auf eine Datei (meist auf einer Magnetplatte) geschrieben werden, die dann später zur Anfertigung von Plots der Massenkonzentration, Zahlkonzentration und der verschiedenen Ablagerungen als Funktion der Zeit verwendet werden können.

5. Beispielrechnungen

Im folgenden sollen einige Beispielrechnungen erläutert werden, die mögliche Abläufe eines hypothetischen Kernschmelzens als Hintergrund haben. Als Basisfall wird dabei angenommen, daß 1 t Brennstoff (zusammen mit Spaltprodukten und Strukturmaterial) sowie 55 kg Silikate aus dem Beton aerosolformig freigesetzt werden. Der zeitliche Freisetzungsablauf wird dabei durch den Unfallablauf wie folgt bestimmt:

- 1) Freisetzung von Brennstoff-Aerosolen aus dem noch intakten Reaktor-druckbehälter (RDB) während des Abschmelzens des Kerns und gleichzeitiger Restwasserverdampfung als treibende Strömung.
- 2) Ausbildung des Schmelzens im RDB; währenddessen wird mangels einer treibenden Strömung kein Aerosol mehr ins Containment freigesetzt.
- 3) Versagen des RDB; dabei Freisetzung der gesamten im RDB zu diesem Zeitpunkt luftgetragenen Aerosole; zusätzliche Freisetzung beim Kontakt der Schmelze mit dem Beton. Ein Teil davon ist dabei Silikat aus dem Beton.
- 4) Ausbildung des Schmelzsees im Betonfundament. Die Temperaturen sinken in relativ kurzer Zeit so stark ab, daß keine nennenswerten Aerosolmengen mehr freigesetzt werden, wohl aber stark überhitzter Wasserdampf, der deswegen nicht zur Kondensation beitragen kann.

Der Freisetzungsverlauf, der sich daraus vereinfachend konstruieren läßt, ist aus Abb. 5 zu ersehen. Zu bemerken ist dazu, daß bei den relativ großen Mengen an aerosolförmigem Material, wie sie bei einem Kernschmelzenunfall zu erwarten ist, der genaue Zeitverlauf der Freisetzung keinen großen Einfluß auf das Langzeitverhalten hat, solange die Gesamtdauer der Freisetzung einige Stunden nicht überschreitet. Zusätzliche konnte durch ausgedehnte Parameterrechnungen nachgewiesen werden, daß auch die Größenverteilung der Quellpartikeln in derartigen Fällen praktisch keinen Einfluß auf den langfristigen Aerosolabbau hat /19/. Dies läßt sich aus Abb. 6 ersehen, die den Aerosolabbau bei 3 verschiedenen Anfangsgrößenverteilungen zeigt. Der Grund für diese Unabhängigkeit von der Anfangsgrößenverteilung ist, daß sich bei genügend großen Partikelzahlkonzentrationen und genügend großen Volumina quasi-stationäre Zustände unabhängig vom Eingangszustand ausbilden können. Großen Einfluß auch auf das Langzeitverhalten hat hingegen die Gesamtfreisetzung

(siehe Abb. 7). Es zeigt sich der bekannte Effekt, daß die Massenkonzentration als Funktion der Zeit umso schneller abfällt, je höher die Aerosolfreisetzung ist. Dies ist in der Ausbildung im Mittel größerer schnellerer sedimentaler Partikeln in den Fällen höherer Zahl- und Massenkonzentrationen begründet.

Den möglichen Einfluß von Wasserdampfkondensation auf den Abbau der luftgetragenen Aktivität zeigt Abb. 8. Die obere Kurve stellt dabei den Verlauf der Aerosolmassenkonzentration bei einer Freisetzung von 1.000 kg dar, wobei das oben beschriebene Szenario zugrundegelegt ist. Diese Kurve ist deshalb mit den Kurven aus Abb. 6 identisch, bei denen ebenfalls keine Wasserdampfkondensation berücksichtigt wurde. Für die untere Kurve wurde die gleiche Masse zugrundegelegt, die aber am Anfang innerhalb von 2000 sec freigesetzt wird. Gleichzeitig zu dieser Freisetzung kondensiert Wasserdampf an den Partikeln, wobei ausgehend von einer gesättigten Atmosphäre (wie sie nach dem Blowdown erwartet werden kann) aufgrund einer volumenhomogenen Abkühlung kondensierbarer Wasserdampf freigesetzt wird. Der Schwerpunkt der Aussage liegt dabei auf dem Wort "volumenhomogen", was bedeutet, daß irgendein Mechanismus (z.B. ein Containmentspray) vorausgesetzt ist, der in der Lage ist, insbesondere die bei der Wasserdampfkondensation an den Partikeln freiwerdende latente Wärme abzuführen, so daß diese nicht mehr extra zu berücksichtigen werden braucht und etwa zu einer Temperaturerhöhung in Volumen führt, die die kondensierbare Dampfmenge sofort wieder reduzieren würde. Unter diesen Voraussetzungen, die eine sehr starke Wasserdampfkondensation ergeben, zeigt sich ein starker Effekt dieser auf den Abbau der luftgetragenen Aktivität. (In der Abbildung ist nur der Feststoffanteil des Aerosols aufgetragen). Die Frage, ob derartige oder ähnliche thermodynamische Zustände in der Containmentatmosphäre in Verbindung mit einem dazu passenden Freisetzungsverlauf der Aerosolpartikeln überhaupt auftreten, läßt sich nur in Verbindung mit geeigneten Containment-Codes klären. Dies soll im nächsten Kapitel diskutiert werden.

6. Zusammenhang des NAUA-Codes mit Containmentcodes

Durch die numerische Lösung der Gl. (6) ist es möglich, das Verhalten eines Aerosolsystems, bestehend aus einer flüchtigen und einer nicht-

flüchtigen Komponente zu berechnen. Zu berücksichtigen ist dabei nur die Einschränkung, wie sie im Anhang noch genauer erläutert wird. Die Art der verwendeten Gleichungen garantiert zudem, daß der Code streng massenerhaltend arbeitet. Der Code ist damit in der Lage, sämtliche vorkommenden Unfallszenarien zu behandeln, wobei prinzipiell beliebige Partikelquellen und Dampfquellen behandelt werden können. Diese Aussage gilt uneingeschränkt, allerdings im Moment nur für die Partikelquellen, wo in der Tat beliebige Größenverteilungen sowie Freisetzungsverläufe behandelt werden können. Die Einschränkungen, die im Moment noch bezüglich der Behandlung von Dampfquellen gemacht werden müssen, sind im wesentlichen thermodynamischer Natur; denn wie aus Gl. (8) ersichtlich, benötigt das Programm zur Berechnung der Wasserdampfkondensation als wichtigsten Parameter die Übersättigung, wobei selbst kleine Änderungen die Kondensationsgeschwindigkeit und den kritischen Radius stark beeinflussen. Dies bedeutet, daß es notwendig ist, auftretende Dampfquellen sehr exakt in einen entsprechenden Sättigungszustand umzurechnen. Um dies tun zu können, müssen unter Berücksichtigung sämtlicher Wärme- und Massenströme die genaue Containmenttemperatur und der Wasserdampfgehalt zu jedem Zeitpunkt bestimmt werden, da der Dampfdruck des Wassers sehr stark temperaturabhängig ist /20/. Besonders zu beachten sind dabei konkurrierende Prozesse, wie die Kondensation des Wasserdampfes an den Partikeln und an der Wand und die Reduzierung des kondensierbaren (d.h. übersättigten) Wasserdampfes durch die Temperaturerhöhung, die durch die bei der Kondensation an den Partikeln freigesetzte latente Wärme bedingt ist. Die meisten bisherigen Containmentcodes berücksichtigen diese letzteren Effekte allerdings meist nicht, sondern gehen davon aus, daß die Atmosphäre gesättigt oder untersättigt ist und aller überschüssige Wasserdampf direkt an der Wand kondensiert. Durch Einbindung des NAUA-Codes in die weitere Entwicklung des Containmentcodes wird es in Zukunft aber möglich sein, auch diese Effekte zu berücksichtigen. Der vorläufige Ansatz zur Behandlung von Wasserdampfquellen und Wandkondensation, wie er in /21/ beschrieben wird, führt jedenfalls zu einem erheblich verminderten Einfluß der Wasserdampfkondensation auf den Partikelabbau im Vergleich zu dem in Abb. 8 gezeigten Fall (volumenhomogene Abkühlung der Containmentatmosphäre). Sicher ist, daß die zeitliche Korrelation von Wasserdampf- und Partikelquellen einen erheblichen Einfluß auf den Aktivitätsabbau hat, so daß

auch deshalb die Kopplung des NAUA-Codes an geeignete Containment-codes notwendig ist.

7) Zusammenfassung und Diskussion

Mit NAUA-Mod 3 steht ein Code zur Verfügung, der prinzipiell in der Lage ist für sämtliche Unfallszenarien, die mit Aerosolfreisetzung verbunden sind, das Verhalten der Aerosolpartikeln im Containment eines LWR und das sich daraus ableitbare Unfallrisiko zu berechnen.

Dies ist möglich, da die dem Code zugrunde liegende Modellgleichung aus Formeln der als wichtig erkannten physikalischen Einzelprozessen abgeleitet ist und keine empirische Größen für das Integralverhalten des Systems erhält. Zu beachten sind allerdings die Einschränkungen, wie sie im Abschnitt 2 beschrieben wurden, in erster Linie dabei die Annahme, daß die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für Partikeln aller Größen im gesamten Volumen konstant ist. Die Anwendbarkeit dieser Annahme ist jeweils im Einzelfall zu prüfen, evtl. muß das zu betrachtende Volumen in einzelne Compartments aufgeteilt werden, für die dann das Prinzip der homogenen Mischung wieder anwendbar ist.

Als Haupteinflußgrößen für den Aerosolabbau im Containment und die daraus errechnete Leckage wurden folgende Größen ermittelt:

- a) die Geometrie des Containments, insbesondere das Oberflächen-Volumen-Verhältnis
- b) die Gesamtmasse der freigesetzten Aerosolpartikeln
- c) der thermodynamische Zustand der Containmentatmosphäre als Funktion der Zeit.

Die Probleme, die bezüglich des letzten Punktes noch offen sind, wurden im vorigen Abschnitt angesprochen. Zu bemerken ist noch, daß die Einflüsse irgendwelcher Sonderereignisse, die während des Unfallablaufs auftreten können, wie Wasserstoffexplosion oder -deflagration und starke Dampfströmung zu Strukturen, die zwangsgekühlt werden z.T. nur qualitativ aber nicht quantitativ bekannt sind und noch zu untersuchen sind.

Anhang:

Beweis, daß die bei der Behandlung der Flüssig- und der Feststoffkomponente gemachte Vereinfachung zu einer Unterschätzung der Sedimentation des Feststoffanteils führt.

Annahme: es existiere eine Klasse K von Partikeln mit Volumen V_K ; diese enthalte N_K Partikel.

Innerhalb dieser Klasse sei der jeweilige Feststoffanteil nach einer beliebigen Funktion $f(i)$ verteilt, d.h.

$$\begin{aligned} i \cdot V^f &= f(i) \cdot V_K & i = 1, \dots, N_K & \text{Feststoffanteil} \\ i \cdot V^w &= (1-f(i)) V_K & & \text{Wasseranteil} \end{aligned}$$

Der mittlere Feststoff- bzw. Wasseranteil, wie er im Programm verwendet wird, ergibt sich damit

$$\begin{aligned} \langle V^f \rangle &= \frac{V_K}{N_K} \cdot \sum_i f(i) \\ \langle V^w \rangle &= \frac{V_K}{N_K} \cdot \sum_i (1-f(i)) \end{aligned}$$

Die Sedimentationsabscheiderate für den Feststoff ist damit (bis auf für diese Betrachtung unwesentliche Faktoren) gegeben durch

$$\begin{aligned} \langle W_1 \rangle &\sim \langle W_1' \rangle = (\rho_f \cdot \langle V^f \rangle + \rho_w \cdot \langle V^w \rangle) \langle V^f \rangle \\ &= \frac{V_K^2}{N_K^2} \cdot (\rho_f \cdot \sum_{i,j} f(i) \cdot f(j) + \rho_w N_K \sum_i f(i) - \rho_w \sum_{i,j} f(i) f(j)) \end{aligned}$$

Die wirkliche mittlere Abscheiderate, wie sie sich aufgrund der Verteilungsfunktion $f(i)$ ergeben würde, berechnet sich dagegen wie folgt:

$$i_{W_2} \sim i_{W_2}' = (\rho_f \cdot V_K \cdot f(i) + \rho_W \cdot V_K (1-f(i)) \cdot V_K \cdot f(i))$$

(Abscheidekoeffizient für das i -te Partikel)

$$\langle W_2' \rangle = \frac{1}{N_K} \cdot \sum_i i_{W_2}' = \frac{V_K^2}{N_K^2} \sum_i (\rho_f \cdot N_K f^2(i) + \rho_W \cdot N_K f(i) - \rho_W \cdot N_K f^2(i))$$

Nachzuweisen ist nun, daß $\langle W_2 \rangle$ größer als $\langle W_1 \rangle$ ist, damit die erzielten Rechnungen als auf der sicheren Seite liegend betrachtet werden können. Das heißt, es ist zu zeigen, daß gilt:

$$\langle W_2' \rangle - \langle W_1' \rangle > 0$$

Aus (2) und (3) ergibt sich

$$\langle W_2' \rangle - \langle W_1' \rangle = \frac{V_K^2}{N_K^2} \cdot (\rho_f - \rho_W) \cdot \sum_{i,j} (N_K f(i) \cdot f(j) \delta_{ij} - f(i) \cdot f(j))$$

Da nun die Differenz der Dichten $\rho_f - \rho_W$ in allen realistischen Fällen (ρ_f liegt für Mischungen aus UO_2 , Spaltprodukten und Stahl zwischen 8 und 10 g/cm³ die Dichte des Wassers aber ist 1 g/cm³) größer als 0 ist, bleibt noch nachzuweisen, daß die verbleibende Summe größer als 0 ist.

Diese aber läßt sich wie folgt abschätzen:

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} (...) &= \sum_j f(j) \sum_i (N_K f(i) \delta_{ij} - f(i)) \\ &= \sum_j f(j) \sum_i (N_K f(i) \delta_{ij} - f(i)) + \sum_j f(j) \sum_i (N_K \cdot f(i) \delta_{ij} - f(i)) \\ \text{NB: } f(j) &< \bar{f} \qquad \qquad \qquad \text{NB: } f(j) \geq \bar{f} \end{aligned}$$

Da aber gilt

$$\begin{aligned} \sum_i (N_K f(i) \delta_{ij} - f(i)) &= N_K f(j) - N_K \cdot \bar{f} \\ &= N_K \cdot (f(j) - \bar{f}) = N_K \cdot \Delta f(j) \end{aligned}$$

folgt

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} (..) &= N_K \sum_j f(j) \cdot \Delta f(j) + N_K \sum_j f(j) \cdot \Delta f(j) \\ &\quad \text{NB: } f(j) < \bar{f} \qquad \text{NB: } f(j) > \bar{f} \\ &= f_1 N_K \sum_j \Delta f(j) + f_2 N_K \sum_j \Delta f(j) \\ &\quad \text{NB: } f(j) < \bar{f} \qquad \text{NB: } f(j) > \bar{f} \end{aligned}$$

mit $f_1 \in]0, f)$
 $f_2 \in]f, 1]$

woraus folgt: $f_2 > f_1$

Aus der Definition des Mittelwerts aber folgt unmittelbar

$$\begin{aligned} \sum_j \Delta f(j) &= - \sum_j \Delta f(j) > 0 \\ \text{NB: } f(j) \geq \bar{f} \quad \text{NB: } f(j) < \bar{f} \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} (...) &= (f_2 - f_1) N_K \sum_j \Delta f(j) > 0 \quad \text{w.z.b.w.} \\ &\quad \text{NB: } f(j) \geq \bar{f} \end{aligned}$$

Damit ergibt sich, daß das geschilderte Verfahren bei jeder beliebigen Verteilung des Feststoffs über Partikeln gleicher Größe konservativ ist und daher seine Verwendung bei Berechnungen zur Störfallfolgenabschätzung gerechtfertigt ist.

Liste der verwendeten Symbole

$\dot{n}_i(\vec{R}, t):$	Dichte der Partikeln, bestehend aus i Monomeren am Ort \vec{R} zur Zeit t in P/cm^3 .
$\vec{q}(\vec{R}, t):$	Strömungsgeschwindigkeit am Ort R zur Zeit t in cm/sec .
$\vec{v}_i(\vec{R}, t):$	Mittlere Geschwindigkeit i - Mers relativ zum Trägergas in cm/sec .
$K_{ij}:$	Koagulationswahrscheinlich zwischen i -Meren und j -Meren in $cm^{-3} sec^{-1}$.
$E_i:$	Wahrscheinlichkeit für die Evaporation in sec^{-1} .
$V_k:$	Volumen der Partikeln der Größenklasse k in cm^3 .
$v_i' = v_1'$	Volumen eines i -Mers.
$r_k:$	Volumenäquivalenter Radius der Partikeln der Klasse k in cm .
$v_x(r_k):$	Mittlere Geschwindigkeit der Partikeln der Klasse k senkrecht zu F_x in cm/sec bezüglich des Abscheideprozesses x .
$\alpha_x(r_k):$	Abscheidekoeffizient der Partikeln der Klasse k bez. des Prozesses x in $1/sec$.
$F_x:$	Abscheidefläche zu Abscheideprozeß x in cm^2 $x = T, D, S, L$
$V:$	Volumen des Containments in cm^3 .
$\kappa:$	dynamischer Formfaktor
$A, Q, b:$	Empirische Werte für die Slip-Flow-Korrektur nach /5/ in Verbindung mit /6/.
λ	Mittlere freie Weglänge des Trägergases in cm .
η	Viskosität des Trägergases in Poise .

- ρ Materialdichte der Partikeln in g/cm^3 .
- D: Diffusionsgrenzschicht in cm .
- $D(r)$: Diffusionskoeffizient eines Partikel der Größe r .
- $T(\vec{R}, t)$: Temperatur am Ort \vec{R} zur Zeit t in K .
- $\Delta T(t)$: Über die Fläche F_T gemittelte Temperaturdifferenz zur Zeit t in K .
- $K(r_i, r_k)$: Koagulationswahrscheinlichkeit zwischen Partikeln der Größen r_i und r_k in $\text{cm}^{-3} \text{sec}^{-1}$.
- β_{ij}^k : Interpolationskoeffizient bei Koagulationsrechnung
- $n(r_k, t)$: Konzentration von Partikeln der Klasse k zur Zeit t in P/cm^3 .
- $\dot{V}_k(t)$: Volumenwachstumsgeschwindigkeit der Partikeln der Klasse k aufgrund von Wasserdampfkondensation in cm^3/sec .
- S : Übersättigung
- σ : Oberflächenspannung der Wasser in erg/cm^2 .
- M : Molgewicht des Wassers
- R : Allgemeine Gaskonstante in $\text{erg/grad}\cdot\text{mol}$.
- L : Latente Wärme des Wassers beim Übergang Dampf/Wasser in erg/g .
- K : Wärmeleitfähigkeit des Trägergases in $\text{erg/cm}\cdot\text{sec}\cdot\text{K}$.
- D : Diffusionskoeffizient des Trägergases in cm^2/sec .
- $P_s(T)$: Sättigungsdruck des Wasserdampfes in dyn/cm^2 .
- r_c : Kritischer Radius bei Kondensation in cm s. Gl. (9)
- $E(r_i, r_j)$: Kollisionseffizienz bei der Gravitationskoagulation
Ausdruck für die verminderte Trefferwahrscheinlichkeit der Partikeln aufgrund des Abbiegens der Strömungslinien um die Partikeln.

ϵ : Genauigkeitsparameter bei der Zeitintegration.

$S(r_k, t)$: Quelle von Partikeln der Klasse k zur Zeit t
in $P/cm^3 \cdot sec$.

$S_i(t)$: Partikelquellrate der Quelle i in $g/cm^3 sec$.

A_i : Aktivitätsanteil von S_i .

$C_M(t)$: Aerosolmassenkonzentration in g/cm^3 .

$A(t)$: Aktivitätsanteil von $C_M(t)$.

L i t e r a t u r :

- /1/ W. Schöck, H. Bunz, M. Koyro: Messung von Wasserdampfkondensation an Aerosolen unter LWR-unfalltypischen Bedingungen; KfK 3153 (August 1981)
- /2/ F. Gelbard, J.H. Seinfeld: The General Dynamic Equation for Aerosols; J. Coll. Int. Sci 68 (1979), S. 363 - 382
- /3/ J.R. Brock: The Dynamics of ultrafine Aerosols: A Survey Aerosole in Naturwissenschaft, Medizin und Technik; Proceedings der Jahrestagung der GAF 1978 (Wien); S. 40 - 92
- /4/ J.A. Garland, J.R. Branson: Investigation into the Rate of Growth of Droplets in a Pollak Counter and the Supersaturation J. Aer. Sci 8 (1977), S. 101 - 109
- /5/ 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
- /6/ N.A. Fuchs, The Mechanics of Aerosols, Pergamon Press (1964)
- /7/ H. Jordan, W. Schikarski, H. Wild: Nukleare Aerosole im geschlossenen System, KfK 1989 (August 1974)
- /8/ J.F. van de Vate, H.M. Jen Brick: The Boundary Layer for Diffusive Aerosol Deposition onto Walls

Proceedings of the 2nd CSNI Specialists Meeting on Nuclear Aerosols in Reactor Safety 1980 (Gatlinburg, Tennessee), S. 162 - 170
- /9/ J.R. Brock: On the Theory of Thermal Forcing Acting on Aerosol Particles; J. Coll. Sci 17 (1962), S. 768 - 780
- /10/ M.V. Smoluchowski: Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen
Zeitschr. f. physik. Chemie 92 (1916), S. 129 - 168

- /11/ H.R. Pruppacher, J.D. Klett: Micorphysics of Clouds and Precipitation; D. Reidel Publishing Comp. (1978)
- /12/ B.J. Mason: The Physics of Clouds; Clarendon Press (1971)
- /13/ J.P. Hosemann, H. Jordan: Nukleare Schadstoffe in der Nachunfallatmosphäre eines Leichtwasserreaktorcontainments Projekt Nukleare Sicherheit, Halbjahresbericht 1973/1 KFK 1859
- /14/ H. Bunz: Paradiseko III b: Ein Computerprogramm zur Berechnung des Aerosolverhaltens in geschlossenen Behältern KFK 2903 (April 1980)
- /15/ H. Bunz, W. Schöck: Measurements of the Condensation of Steam on Different Aerosols under LWR Melt Down Conditions; Proceedings of the 2nd CSNI Specialists Meeting on Nuclear Aerosols in Reactor Safety 1980 (Gatlinburg, Tennessee), S. 171 - 180
- /16/ Messen von Partikeln, Prüfkriterien und Prüfmethode zum Bestimmen partikelförmiger Beimengungen in Gasen. Begriffe und Definitionen VDI 3491 (1975)
- /17/ J. Kops, G. Dibbets, L. Hermans, J.F. van de Vate: The Aerodynamic Diameter of Branched Chain-like Aggregates J. Aer. Sci 6 (1975), S. 329 - 333
- /18/ IBM System/360 and System/370 Fortran IV Language; 11. Ausgabe Publikationsnr. GC 28 - 6515 - 10
- /19/ H. Bunz, M. Koyro, W. Schöck: Influence of the Source Term Parameters on Aerosol Behaviour in Core Melt Down Accidents in LWRs, Proceedings of the 2nd CSNI Specialists Meeting on Nuclear Aerosols in Reactor Safety 1980 (Gatlinburg, Tennessee), S. 458 - 468
- /20/ E. Schmidt: VDI-Wasserdampf Tafeln; Springer-Verlag (1968)
- /21/ H. Bunz, M. Koyro, W. Schöck: Untersuchungen zur Wechselwirkung von Spaltprodukten und Aerosolen in LWR-Containments; in KFK 2950, PNS-Jahresbericht 1980

Verzeichnis der Abbildungen:

- 1) Elektronenmikroskopische Aufnahme von UO_2 -Aerosolpartikeln
- 2) Wie 1), aber nach einem Kondensationsexperiment
- 3) Blockschema des NAUA-Codes
- 4) Inputliste des NAUA-Codes
- 5) Aerosolquelle als Funktion der Zeit für die Beispielrechnungen
- 6) Verlauf der Aerosolmassenkonzentration als Funktion der Zeit für verschiedene Größenparameter der Quellpartikeln
- 7) Wie 6), aber für verschiedene Gesamtfreisetzungen
- 8) Einfluß der Wasserdampfkondensation auf den Aerosolabbau

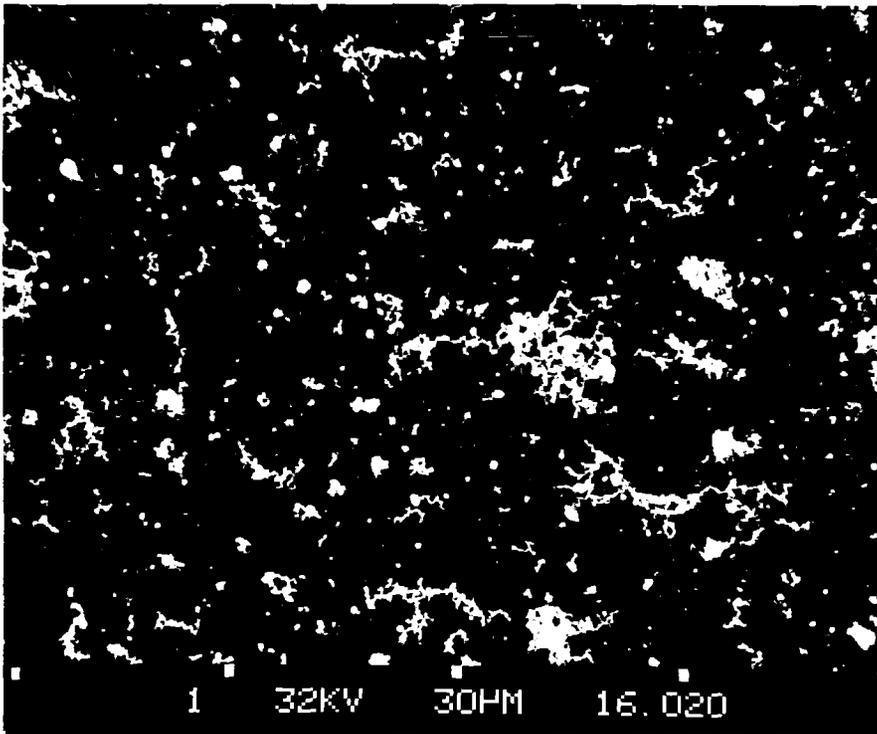


Abb. 1 Elektronenmikroskopische Aufnahme von UO_2 -Aerosolpartikeln

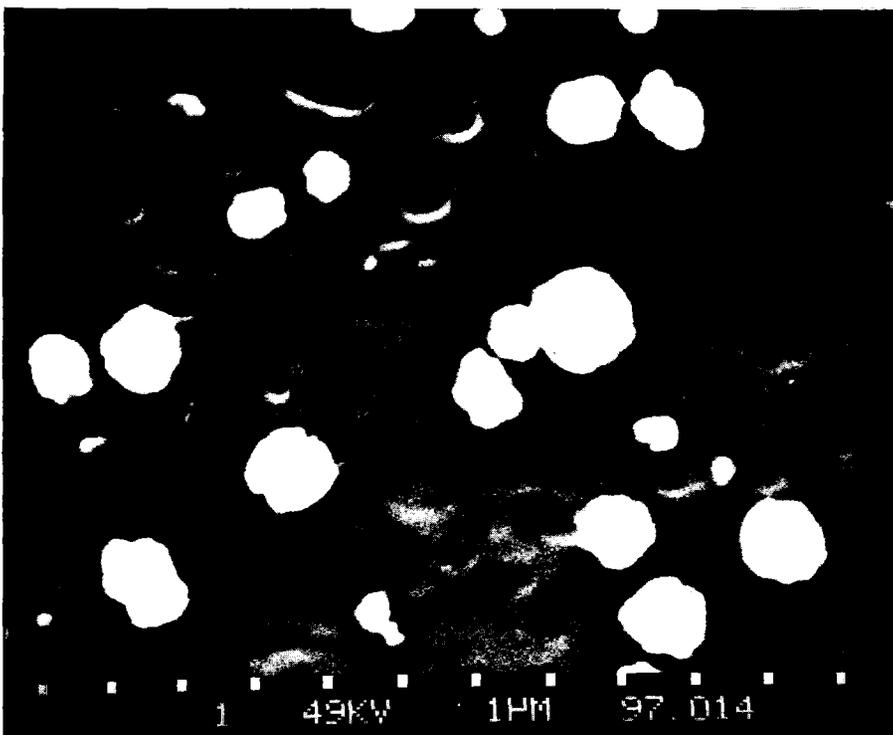


Abb. 2 Elektronenmikroskopische Aufnahme von UO_2 -Aerosolpartikeln nach einem Kondensationsexperiment

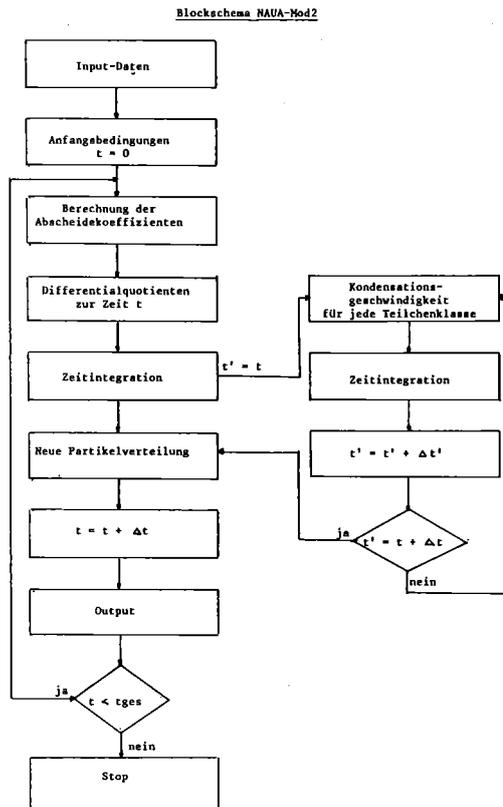


Abb. 3 Blockschema des NAUA-Codes

```

READ(5,*) TQ,NDUMMY,
*RG,SIGL,RH01,NDUMMY,
*SRATE,AKTIVI,NDUMMY,
*KONTIN,NDUMMY,
*VOL,FSED,FDIFF,RMIN,NDUMMY,
*RMAX,KMAX,DELD,FORM,FORMC,NDUMMY,
*CUTOFF,FORMKO,TIME,SZEIT,EPS,CPUZT,NDUMMY,
*NWRITE,NPLOT,LKONO,RESTR,LEAK,TIMEK1,TIMEK2,NDUMMY,
*TEXT1,NDUMMY,TEXT2,NDUMMY,TEXT3,NDUMMY,TEXT4
    
```

FUNCTION TEMPC(T)

EINLESEN DER TEMPERATURFUNKTION

```

READ(5,*) N,DELT
NN=(N-1)/9+1
READ(5,*) ((TI(9*(I-1)+K),K=1,9),NDUMMY,I=1,NN)
    
```

FUNCTION STEAM(T1,T2)

EINLESEN DER DAMPFQUELLE

```

READ(5,*) N,NDUMMY,(TD(K),D(K),NDUMMY,K=1,N)
    
```

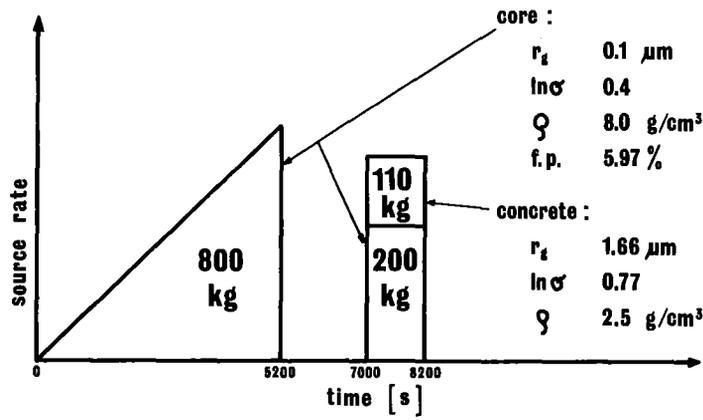
FUNCTION TLEAK(T)

EINLESEN DER LECKAGEFUNKTION

```

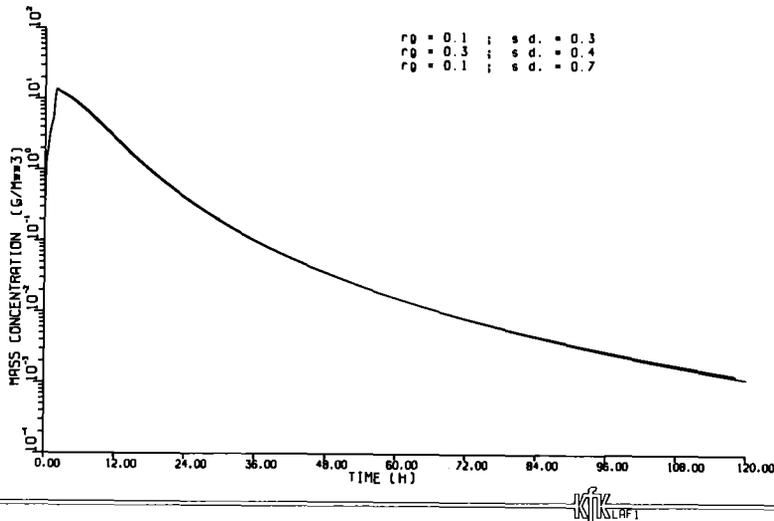
READ(5,*) N,NDUMMY,(TL(K),RL(K),NDUMMY,K=1,N)
    
```

Abb. 4 Inputliste des NAUA-Codes



KIT LAF 1

Abb. 5 Aerosolquelle als Funktion der Zeit für die Beispielrechnungen



KIT LAF 1

Abb. 6 Verlauf der Aerosolmassenkonzentration als Funktion der Zeit für verschiedene Größenparameter der Quellpartikeln