

**Weiterentwicklung
numerischer Methoden
zur Freisetzungs- und
Dosisberechnung für
hochdynamische SEWD
auf Kernbrennstoff-
transporte**

Weiterentwicklung numerischer Methoden zur Freisetzungs- und Dosisberechnung für hochdynamische SEWD auf Kernbrennstoff- transporte

Anna-Lena Becker
Ole Gerber

Oktober 2024

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Eigenforschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV) unter dem Förderkennzeichen 4721R01640 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei der GRS.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung der GRS wieder und muss nicht mit der Meinung des BMUV übereinstimmen.

Deskriptoren

Ausbreitung, Ausströmen, CFD, Freisetzung, Freistrahler, Hilfsmittel, Lagerbehälter, Partikel, Sicherung, Simulation, Transportbehälter, Transporte

Kurzfassung

Im Rahmen der Betrachtung möglicher Risikoszenarien bei Kernbrennstofftransporten wird in diesem Vorhaben der mögliche Austritt radioaktiver Stoffe infolge der Einwirkung panzerbrechender Waffen mit Hohlladungsprinzip auf Transport- und Lagerbehälter untersucht. Dazu werden numerische Untersuchungen zu den hochdynamischen Prozessen durchgeführt, die durch solche Einwirkungen ausgelöst werden. Insbesondere das Austreten von mit radioaktiven Partikeln beladenen Gasen als Freistrahls durch ein kleines Loch im beschädigten Behälter steht dabei im Mittelpunkt.

Im vorangegangenen Forschungsvorhaben „Experimentelle Untersuchungen eines diskontinuierlichen Freistrahls infolge Hohlladungseinwirkung“ /GRS 23/ wurden wesentliche experimentelle Daten zur Charakterisierung eines instationären partikelbeladenen Freistrahls gewonnen. Aufbauend auf diesen experimentellen Grundlagen wird ein numerisches Modell zur Simulation des Freistrahls und seiner relevanten Einflussgrößen mittels Computational Fluid Dynamics entwickelt. Eine Vielzahl von Simulationen wird unter verschiedenen Anfangs- und Randbedingungen sowie unter Variation relevanter Parameter durchgeführt. Die Simulationsergebnisse werden detailliert ausgewertet, um den Einfluss verschiedener Parameter zu quantifizieren und mögliche Konsequenzen abzuleiten. Darüber hinaus erfolgt eine Analyse der gewonnenen Erkenntnisse im Hinblick auf eine Anwendung zur Optimierung der Bewertung von Kernbrennstofftransporten.

Insgesamt zeigt dieser Bericht, dass Simulationen zu dieser Thematik nachvollziehbar und reproduzierbar durchgeführt werden können. Es werden Methoden und Modelle vorgestellt, mit denen in Zukunft Fragestellungen zur Ausbreitung schneller und zielgerichteter gelöst werden können. Darüber hinaus werden die Auswirkungen von Parametervariationen sowie die Wirkung einer im Ausbreitungsgebiet befindlichen Haube eingeordnet.

Abstract

As part of the consideration of possible risk scenarios for the transport of nuclear fuels, this project investigates the possible release of radioactive substances as a result of the impact of anti-tank weapons on transport and storage containers. To this end, numerical investigations are being carried out into the highly dynamic processes triggered by such impacts. In particular, the focus is on the escape of gases loaded with radioactive particles as a free jet through a small hole in the damaged container.

In the previous research project „Experimentelle Untersuchungen eines diskontinuierlichen Freistrahls infolge Hohlladungseinwirkung“ (Experimental investigations of a discontinuous free jet due to shaped charge impact) /GRS 23/, essential experimental data for the characterization of a transient particle-loaded free jet were obtained. Based on these experimental principles, a numerical model for the simulation of the free jet and its relevant influencing variables is developed using computational fluid dynamics. A large number of simulations are carried out under different initial and boundary conditions as well as under variation of relevant parameters. The simulation results are evaluated in detail in order to quantify the influence of various parameters and to derive possible consequences. In addition, an analysis of the knowledge gained is carried out with regard to an application for optimizing the evaluation of nuclear fuel transports.

Overall, this report shows that simulations on this topic can be carried out in a comprehensible and reproducible manner. Methods and models are presented that can be used in future to solve dispersion issues more quickly and in a more targeted manner. In addition, the effects of parameter variations and the effect of a canopy located in the dispersion area are classified.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung	I
	Abstract	II
	Inhaltsverzeichnis	III
1	Einleitung	1
2	Stand von Wissenschaft und Technik	3
2.1	Strömungsmechanik	6
2.2	Freistrahl	8
2.2.1	Definitionen.....	8
2.2.2	Geschwindigkeit	13
2.2.3	Disperse Phase	17
2.2.4	Experimentelle Erkenntnisse	19
2.3	Typische Randbedingungen	23
3	Simulation	27
3.1	Geometrie.....	28
3.1.1	Behälter und Ausbreitungsgebiet	29
3.1.2	Haube	31
3.2	Rechengitter	36
3.3	Physikalische Modelle	40
3.4	Rand- und Anfangsbedingungen	42
3.4.1	Druck	44
3.4.2	Partikel	48
3.5	Vorgehen	58
4	Ergebnisse und Analyse	61
4.1	Gasfreistrahel	63
4.2	Partikelbeladener Freistrahel	72
4.2.1	Gasphase	72

4.2.2	Partikelphase.....	78
4.2.3	Variationen	87
4.3	Haube.....	93
4.3.1	Gasphase	94
4.3.2	Partikelphase.....	100
4.4	Wechselwirkungen.....	104
4.5	Partikel im Behälter.....	109
5	Schlussfolgerung und Bewertung.....	115
5.1	Einordnung der Simulationsergebnisse.....	115
5.2	Anwendung der Methoden und Ergebnisse	118
5.3	Vorschläge zu weiteren Untersuchungen.....	121
6	Zusammenfassung	125
	Literaturverzeichnis.....	129
	Abbildungsverzeichnis.....	133
	Tabellenverzeichnis.....	138
	Abkürzungsverzeichnis.....	139

1 Einleitung

Hauptziel des deutschen Sicherungssystems für Nukleartransporte und kerntechnische Anlagen ist der Schutz von Kernbrennstoffen vor Freisetzung und Entwendung. Rechtsgrundlage für das deutsche Sicherungssystem ist das Atomgesetz (AtG), in dem es in § 4 (2) für die Beförderung von Kernbrennstoffen heißt: "Eine Genehmigung ist zu erteilen, wenn [...] der erforderliche Schutz gegen Störmaßnahmen oder sonstige Einwirkungen Dritter gewährleistet ist". Um diesen Schutz zu gewährleisten, werden in § 42 AtG drei Schutzziele definiert, deren Einhaltung der Genehmigungsinhaber sicherzustellen hat: Schutz vor einer Freisetzung von Kernbrennstoffen vor Ort, Schutz vor einer Entwendung zum Zwecke der Freisetzung an einem beliebigen Ort und Schutz vor einer einfachen oder mehrfachen Entwendung zum Zwecke der Herstellung einer kritischen Anordnung.

Zur Gewährleistung des Schutzes gegen die Freisetzung und den Missbrauch ionisierender Strahlung aus Kernbrennstoffen oder deren Folgeprodukten in erheblichen Mengen vor Ort (kurz: erhebliche Freisetzung) ist zu untersuchen, ob eine solche Freisetzung bei einer Einwirkung auf die für Kernbrennstoffe verwendeten Transport- und Lagerbehälter (TLB) auftreten kann.

Unabhängig von den konkreten Vorgaben des kerntechnischen Regelwerks nach § 44 AtG ist für eine solche Prüfung im Rahmen der Genehmigung von Kernbrennstofftransporten von großem Interesse, unter welchen Annahmen und in welchen Szenarien mit einer erheblichen Freisetzung zu rechnen ist. Dazu ist es erforderlich, sowohl etablierte als auch neue Waffengattungen und Werkzeuge zu betrachten, ihre Wirkungsweise zu verstehen und ihre Auswirkungen möglichst quantifizierbar zu machen. Zur Verletzung der Integrität dickwandiger TLB und damit zur Freisetzung radioaktiver Stoffe aus TLB kommen z. B. panzerbrechende Waffen nach dem Hohlladungsprinzip in Frage.

Bei der Einwirkung einer panzerbrechenden Waffe auf einen TLB handelt es sich um hochdynamische Vorgänge. Um diese Prozesse zu verstehen und quantifizierbar zu machen, um daraus mögliche radiologische Konsequenzen einer Freisetzung ableiten zu können, wurden bereits experimentelle Daten erhoben. Ein elementarer Prozess, der im Rahmen eines experimentellen Forschungsvorhabens betrachtet wurde, ist das Ausströmen des durch die Einwirkung mit radioaktiven Partikeln beladenen Füllgases aus dem durch die panzerbrechende Waffe beschädigten TLB in die offene Umgebung. Die radioaktiven Partikel sind dabei durch die teilweise Zerstörung des Inventars entstanden und

das Füllgas des Behälters kann durch die Wärmefreisetzung infolge der Einwirkung einen Überdruck gegenüber der Umgebung erreichen, der zu einem Ausströmvorgang führt. Ein solcher Ausströmvorgang durch ein relativ kleines Loch, wie es durch eine Hohlladung erzeugt wird, in die Umgebung kann durch das physikalische Phänomen eines Freistrahls beschrieben werden. Durch das experimentelle Forschungsvorhaben „Experimentelle Untersuchungen eines diskontinuierlichen Freistrahls in Folge einer Hohlladungseinwirkung bei einer Beförderung von Kernbrennstoffen“ /GRS 23/ wurde eine experimentelle Grundlage und ein prinzipielles Verständnis der Eigenschaften eines instationären partikelbeladenen Freistrahls geschaffen.

Im Rahmen dieses Vorhabens wird ein numerisches Modell für die Durchführung einer Simulation zur Beschreibung eines instationären partikelbeladenen Freistrahls entwickelt. Ziel dieses Vorhabens ist nicht nur die Durchführung einer Simulation für eine konkrete Situation, sondern die generelle Entwicklung der Fähigkeit zur Durchführung von Simulationen des Ausströmverhaltens zweiphasiger Strömungen aus einem TLB im Zuge einer Hohlladungseinwirkung. Mit den Ergebnissen der Experimente aus /GRS 23/ liegen bereits die notwendigen experimentellen Grundlagen für die Optimierung und Validierung eines solchen Modells vor. Auf der Basis einer validierten Simulation werden verschiedene Einflussgrößen untersucht, so dass deren Einfluss auf den Freistrahls quantifiziert werden kann.

Im Folgenden werden in Abschnitt 2 zunächst die wissenschaftlichen und technischen Grundlagen für die Simulationen dargestellt. Dabei werden die relevanten physikalischen Konzepte und die in /GRS 23/ gewonnenen Erkenntnisse aufgeführt. In Abschnitt 3 wird die Computational Fluid Dynamics (CFD) eingeführt und beschrieben, wie und mit welchen Randbedingungen die Simulationen durchgeführt werden. In Abschnitt 3 werden die Ergebnisse der durchgeführten Simulationen dargestellt und ausgewertet. Dabei werden auch Einflüsse von Parametervariationen auf den Freistrahls näher untersucht. In Abschnitt 5 werden die wesentlichen Ergebnisse der Auswertung zusammengefasst und hinsichtlich des erzielten Erkenntnisgewinns und ihrer Anwendbarkeit bewertet. In Abschnitt 5.2 werden ein exemplarisches Szenario entwickelt und eine exemplarische Betrachtung der radioaktiven Konsequenzen durchgeführt. Darüber hinaus werden offene Fragen benannt und Vorschläge für mögliche weitere Forschungsschritte gemacht. Der Bericht schließt mit einer kurzen Zusammenfassung in Abschnitt 6.

2 Stand von Wissenschaft und Technik

Die diesem Vorhaben zugrunde liegende Thematik ist die Einwirkung einer panzerbrechenden Waffe mit Hohlladungsprinzip auf einen TLB. Eine solche Hohlladungseinwirkung kann im Rahmen einer systematischen Betrachtung in verschiedene Teilprozesse unterteilt werden, so dass diese einzeln betrachtet und beschrieben werden können. Die wesentlichen Teilprozesse der Einwirkung einer Hohlladung bis zur letztlich relevanten Freisetzung in Form eines Freistrahls und anschließenden Ausbreitung sind in Abb. 2.1 und Abb. 2.2 schematisch dargestellt und werden im folgenden Text kurz erläutert.

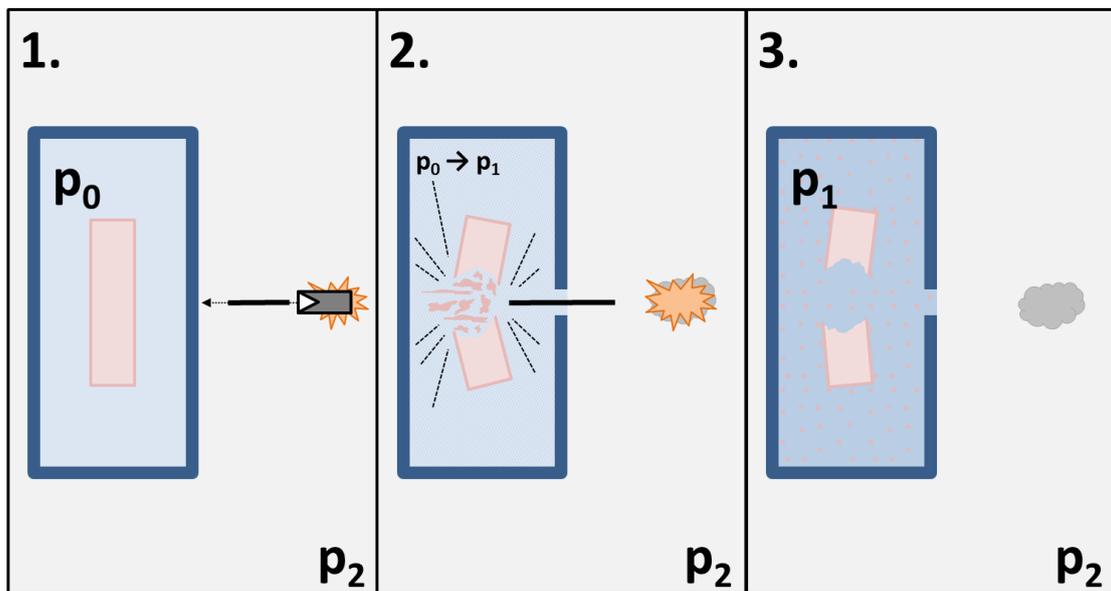


Abb. 2.1 Teilprozesse vor der Freisetzung aus dem Behälter: 1. Zündung der Hohlladung, 2. Zerstörung der Behälterwand und des Inventars, 3. Druckerhöhung im Behälter

In Abb. 2.1 werden die Teilprozesse von der Einwirkung mit einer Hohlladung auf einen Behälter bis zum Zustand eines Behälters mit Öffnung und erhöhtem Druck dargestellt. Dabei verteilen sich die wesentlichen Ereignisse folgendermaßen auf die Teilprozesse:

1. Zündung der Hohlladung: Der Hohlladungsgefechtsskopf wird automatisch vor dem TLB gezündet, wodurch sich ein Metallstachel bildet, der mit hoher Geschwindigkeit (etwa 8000 m/s) auf die Behälterwand trifft.
2. Zerstörung der Behälterwand und des Inventars: Abhängig von der Leistungsfähigkeit der Hohlladung durchdringt der Stachel die Behälterwand und zerstört Teile des Behälterinventars, wodurch innerhalb des Behälters partikelförmige Bestandteile des Inventars verteilt werden (primäre Freisetzung).

- Druckerhöhung im Behälter: Durch die Wechselwirkung des Hohlchargenstachels mit dem Inventar wird bei der primären Freisetzung Wärme auf die Behälteratmosphäre übertragen, so dass der Innendruck von p_0 auf p_1 ansteigt.

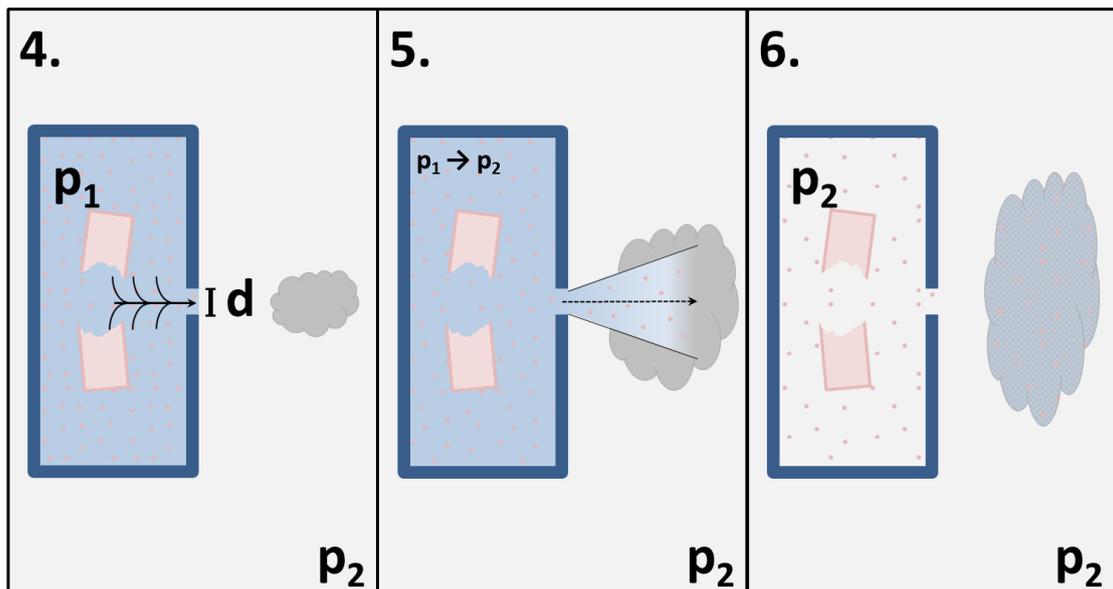


Abb. 2.2 Teilprozesse bei der Freisetzung aus dem Behälter: 1. Druckabbau durch Ausströmen, 2. Bildung eines Freistrahls, 3. Durchmischung der Freisetzung

In Abb. 2.2 werden die Teilprozesse vom Zustand eines Behälters mit Öffnungsdurchmesser d und erhöhtem Druck p_1 bis zum Zustand eines Behälters mit Öffnungsdurchmesser d im Druckgleichgewicht mit der Atmosphäre p_2 dargestellt. Dabei verteilen sich die wesentlichen Ereignisse folgendermaßen auf die Teilprozesse:

- Druckabbau durch Ausströmen: Im Fall eines Überdrucks im Behälter gegenüber der Umgebung ($p_1 > p_2$) strömt das Behältergas zusammen mit darin verteilten Partikeln der primären Freisetzung durch die Öffnung d aus dem Behälter.
- Bildung eines Freistrahls: Das ausströmende Füllgas des Behälters bildet zusammen mit den vom Gas mitgerissenen Partikeln einen partikelbeladenen Freistrahls, der mit fortschreitendem Druckausgleich zwischen Behälter und Umgebung an Geschwindigkeit verliert und daher als instationär bezeichnet wird.
- Durchmischung der Freisetzung: Der Freistrahls mit freigesetztem Füllgas des Behälters und mitgeführten Partikeln vermischt sich mit den heißen Explosionsgasen der Hohlladung.

Diese Teilprozesse wurden bereits in verschiedenen deutschen Forschungsvorhaben, die zum Teil mit internationaler Beteiligung durchgeführt wurden, untersucht. Zu nennen ist hier das Vorhaben „Experimentelle Bestimmung der Freisetzung von UO_2 aus einem Transportbehälter für abgebrannte Brennelemente nach Hohlladungsbeschuss“ (SR 2082) /PRE 94/, in dem experimentelle Untersuchungen zur Bestimmung der Masse freigesetzter radioaktiver Staubpartikel, insbesondere der lungengängigen Partikelfraktion mit schwach radioaktivem Inventar, zur Ermittlung der radiologischen Konsequenzen nach Hohlladungsbeschuss eines mit bestrahlten Brennelementen beladenen Transportbehälters durchgeführt wurden. Weiterhin wurde die Vorhabenreihe „Bestimmung von Quelltermen infolge SEWD im Rahmen internationaler Zusammenarbeit“ (SR 2370, SR 2461, SR 2546) /GRS 03/, /GRS 05/, /GRS 08/ zur Gewinnung experimenteller Daten zur Freisetzung aus TLB für bestrahlte Brennelemente nach einer Hohlladungseinwirkung durchgeführt. Neben dem Freisetzungsverhalten abgebrannter Brennelemente standen hierbei die Bestimmung lungengängiger Freisetzungsanteile und die Umlagerung leichtflüchtiger Bestandteile in den lungengängigen Bereich im Vordergrund. Im Vorhaben „Freisetzung aus verglasten Abfällen nach SEWD“ (SR 2458) /GRS 06/ wurden inaktives Glassimulat mit einer Hohlladung beschossen, um einen experimentellen Datensatz zur Berechnung der Freisetzung aus verglasten hochradioaktiven Abfällen in TLB infolge einer Hohlladungseinwirkung zu generieren. Es wurde dabei das Zerstörungs- und Freisetzungsverhalten unterschiedlicher Materialien und Konfigurationen untersucht. Im Vorhaben „Verbesserung der Quelltermmittlung für die Einwirkung panzerbrechender Waffen auf Transport- und Lagerbehälter mit abgebrannten Brennelementen“ (SR 2613) /GRS 12/ wurden die Bildungs- und Freisetzungsprozesse von luftgetragenen Partikeln infolge der Einwirkung einer panzerbrechenden Waffe auf TLB mit den Untersuchungsschwerpunkten Einfluss der Freisetzungsrandbedingungen und Geometrie des Inventars sowie Entwicklung und Anwendung von Modellansätzen zum Freisetzungsprozess untersucht.

Hauptgegenstand der oben beschriebenen Forschungsvorhaben waren im Wesentlichen die Teilprozesse 1 bis 3. Der Teilprozess 4 (Druckabbau durch Ausströmen) wurde in den bisherigen Forschungsvorhaben nur hinsichtlich des Druckverlaufs und der integralen Messung der Massenfreesetzung betrachtet. Die Teilprozesse 4 (Druckabbau durch Ausströmen) und 5 (Bildung eines Freistrahls) waren Gegenstand der in /GRS 23/ durchgeführten Experimente und werden in diesem Vorhaben mittels Simulation näher betrachtet. Als Ausgangssituation wird ein Behälter mit erhöhtem Druck und einer Öffnung angenommen. Innerhalb des Behälters befindet sich ein Gemisch aus

freigesetzten Partikeln und dem Füllgas des Behälters, die aufgrund der Druckdifferenz gemeinsam als Zweiphasenströmung durch die Öffnung austreten und einen partikelbeladenen Freistrahlf bilden. Vor dem Behälter können zusätzlich Wechselwirkungseffekte mit Turbulenzen und thermischen Vorgängen infolge der Zündung der Hohlladung (Teilprozess 6) auftreten, die im Rahmen dieses Vorhabens ebenfalls betrachtet werden.

Das vorliegende Vorhaben ist das Nachfolgevorhaben zu /GRS 23/, in dessen Bericht die physikalischen Hintergründe der Teilprozesse ausführlich dargestellt werden. Daher werden in diesem Bericht nur grundlegende Hintergründe zum Stand von Wissenschaft und Technik erneut dargestellt. Als Hintergrund für die in Abschnitt 3 näher erläuterten Simulationen wird in Abschnitt 2.1 zunächst ein Überblick über die den Simulationen zugrunde liegende Strömungsmechanik gegeben. In Abschnitt 2.2 werden die Eigenschaften eines Freistrahls und mögliche Wechselwirkungen erläutert. Abschließend werden in Abschnitt 2.3 typische Randbedingungen für Kernbrennstofftransporte aufgeführt, um die Rahmenbedingungen für die Simulationen einzugrenzen.

2.1 Strömungsmechanik

In diesem Vorhaben wird das Ausströmen eines mit Partikeln beladenen Gases aus einem Behälter betrachtet, d. h. die Strömung eines Fluids. Das Verhalten von Fluiden kann mit Hilfe der Strömungsmechanik beschrieben und mit numerischen Methoden berechnet werden. Eine grundlegende Basis der Strömungsmechanik sind die Navier-Stokes-Gleichungen, die das Verhalten von Fluiden beschreiben. Sie basieren auf dem Massenerhaltungssatz und dem Impulserhaltungssatz und berücksichtigen die Effekte von Druck, Viskosität und Schwerkraft. Die Impulsgleichung ist in der folgenden Gleichung (2.1) aufgeführt:

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} \vec{v} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \vec{v} + (\lambda + \eta) \nabla (\nabla \cdot \vec{v}) + \rho \cdot \vec{f} \quad (2.1)$$

Die dargestellte Navier-Stokes-Gleichung für die Impulserhaltung lässt sich aus dem 2. Newtonschen Axiom ($F = ma$) für ein Volumenelement ableiten. Dabei kann die Masse durch die Dichte ρ und die Beschleunigung durch die Änderung des Geschwindigkeitsfeldes \vec{v} dargestellt werden. Dies ist in der obigen Gleichung auf der linken Seite dargestellt. Auf der rechten Seite der Gleichung sind die Kräfte dargestellt, die auf dieses Volumenelement wirken. Dies sind, von links nach rechts in Gleichung (2.1), die wirkenden

Kräfte unter Berücksichtigung der Änderung des Drucks p , der Reibungskräfte, die durch die Viskosität (η und λ) bestimmt werden, sowie äußere Kräfte \vec{f} wie beispielsweise der Gravitation, die von der Masse bzw. der Dichte ρ abhängt.

Für kompressible Fluide wird neben der Impulsgleichung in Formel (2.1) auch die Energiegleichung und die Kontinuitätsgleichung benötigt. Die Kontinuitätsgleichung stellt sicher, dass die Masse m erhalten bleibt und beschreibt den Massenfluss:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \vec{m} = 0 \quad (2.2)$$

Die Energiegleichung beschreibt die Erhaltung der Energie in einem Fluid. Sie enthält die Dissipationsfunktion Φ , die Wärmeleitung bzw. den Wärmefluss q und die innere Energie E :

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} E + (\vec{v} \cdot \nabla) E \right) = -\nabla q + \Phi \quad (2.3)$$

Zusammen bilden die Impulsgleichung, die Kontinuitätsgleichung und die Energiegleichung ein System nichtlinearer partieller Differentialgleichungen, welches das mathematische Grundmodell der Strömungsmechanik darstellt. Zusammen mit definierten Rand- und Anfangsbedingungen kann ein solches Modell mit numerischen Methoden näherungsweise gelöst werden.

Eine numerische Methode zur Lösung von Strömungsproblemen bzw. zur Simulation des Verhaltens von Fluiden ist die Finite-Volumen-Methode (FVM). Bei der FVM wird das zu untersuchende Strömungsgebiet zunächst in kleinere, geometrisch einfachere Teile, sogenannte Kontrollvolumen, unterteilt. Diese Volumina können unterschiedliche Formen und Größen haben und werden so angeordnet, dass sie das gesamte Gebiet abdecken. Für jedes Kontrollvolumen werden dann die oben beschriebenen Strömungsgleichungen aufgestellt. Die partiellen Differentialgleichungen, die die Strömungsgleichungen darstellen, werden für jedes Kontrollvolumen diskretisiert. Dies geschieht durch Integration der Gleichungen über die Volumina und anschließende Approximation der Flussgrößen, wie z.B. Geschwindigkeit und Druck, an den Rändern der Volumina. Die Flüsse an den Volumengrenzen werden typischerweise durch numerische Approximationen berechnet. Die diskretisierten Gleichungen für jedes Kontrollvolumen werden zu einem globalen Gleichungssystem zusammengefasst, das alle Teile des

Strömungsgebiets umfasst. Dieses Gleichungssystem kann sehr groß sein, insbesondere bei komplexen Geometrien und hohen Auflösungen. Das resultierende Gleichungssystem wird in jedem Kontrollvolumen gelöst, um die Werte der Strömungsgrößen wie Geschwindigkeit und Druck im gesamten Strömungsgebiet zu bestimmen. Dies kann je nach Größe und Struktur des Gleichungssystems durch verschiedene numerische Verfahren wie iterative Lösungsverfahren oder direkte Lösungsverfahren erfolgen. Nach der Lösung des Gleichungssystems können die Ergebnisse analysiert werden, um Informationen über das Strömungsverhalten zu erhalten. Dies beinhaltet die Visualisierung von Geschwindigkeitsvektoren, Druckverteilungen und anderen relevanten Strömungsgrößen, um Einblicke in die Strömungsphänomene zu erhalten.

Wie diese Kontrollvolumen für die im Rahmen dieses Vorhabens durchgeführten Simulationen genau definiert sind, welche physikalischen Modelle relevant sind, welche Rand- und Anfangsbedingungen verwendet werden und wie die Simulationen prinzipiell aufgebaut sind, wird in Abschnitt 3 näher erläutert.

2.2 Freistrah

In diesem Vorhaben wird das Ausströmen eines Fluids aus einer Austrittsöffnung mit hoher Geschwindigkeit in die Umgebung betrachtet. Dieses Phänomen wird als Freistrah bezeichnet und wurde im Forschungsvorhaben „Experimentelle Untersuchungen eines diskontinuierlichen Freistrahls in Folge einer Hohlladungseinwirkung bei einer Beförderung von Kernbrennstoffen“ /GRS 23/ experimentell detailliert untersucht. Auf der Grundlage der in diesem Vorhaben gewonnenen Erkenntnisse sowie von Angaben aus der Literatur, z. B. /KRA 75/, /TRI 13/ und /PIC 11/, werden nachfolgend die wichtigsten Begriffe und Konzepte in Zusammenhang mit der Physik des Freistrahls erläutert.

2.2.1 Definitionen

Ein Freistrah ist die Strömung eines Fluids aus einer Austrittsöffnung in einen offenen Raum. Ändert sich die Geschwindigkeit dieses Freistrahls innerhalb einer begrenzten Zeit stark, so wird dieser als instationärer Freistrah bezeichnet. Besteht der Freistrah neben Gas noch aus einer weiteren Phase, so wird dieser als zweiphasiger Freistrah bezeichnet, und handelt es sich insbesondere um Partikel, so wird dieser als partikelbeladener Freistrah bezeichnet.

Im Folgenden wird zunächst der stationäre Gasfreistrahler betrachtet, bevor in den weiteren Schritten der instationäre partikelbeladene Freistrahler betrachtet wird, der im Rahmen dieses Vorhabens von besonderer Relevanz ist.

Ein Freistrahler entsteht, weil das ausströmende Fluid und das umgebende Fluid unterschiedliche Geschwindigkeiten haben und sich zwischen ihnen eine Scherschicht ausbildet. In dieser Schicht kommt es durch Reibungseffekte zu einer Vermischung mit atmosphärischer Luft, wodurch der Massenstrom zunimmt und sich das Geschwindigkeitsprofil des Freistrahlers ausbreitet. In radialer Richtung kann ein Freistrahler durch eine Freistrahlergrenze von der Atmosphäre abgegrenzt werden. Um eine solche Grenze zu definieren, muss zunächst ein Kriterium für eine solche Grenze festgelegt werden. Üblich sind hier z. B. eine Geschwindigkeit kleiner als 1 m/s oder eine relative Geschwindigkeitsabnahme auf 1 % der maximalen Geschwindigkeit /SCL 06/. Die folgende Abb. 2.3 zeigt schematisch einen Freistrahler, anhand dessen die wichtigsten Begriffe erläutert werden.

Der dreidimensionale Freistrahler wird hier auf eine zweidimensionale Betrachtung mit x- und y-Achse vereinfacht, was aufgrund der Symmetrie eines aus einer runden Öffnung austretenden Freistrahlers zulässig ist. In der folgenden Abbildung stellt die x-Achse die Strahlachse des Freistrahlers dar, auf der die Geschwindigkeit gegenüber den senkrecht dazu liegenden Positionen maximal ist. Die Grenze des Freistrahlers, wie oben definiert, ist durch die blaue Linie gekennzeichnet. Zwischen Strahlachse und Grenze liegt die Halbwertsbreite (orange gestrichelt), bei der die Geschwindigkeit des Freistrahlers relativ zur Strahlachse auf die Hälfte abgesunken ist.

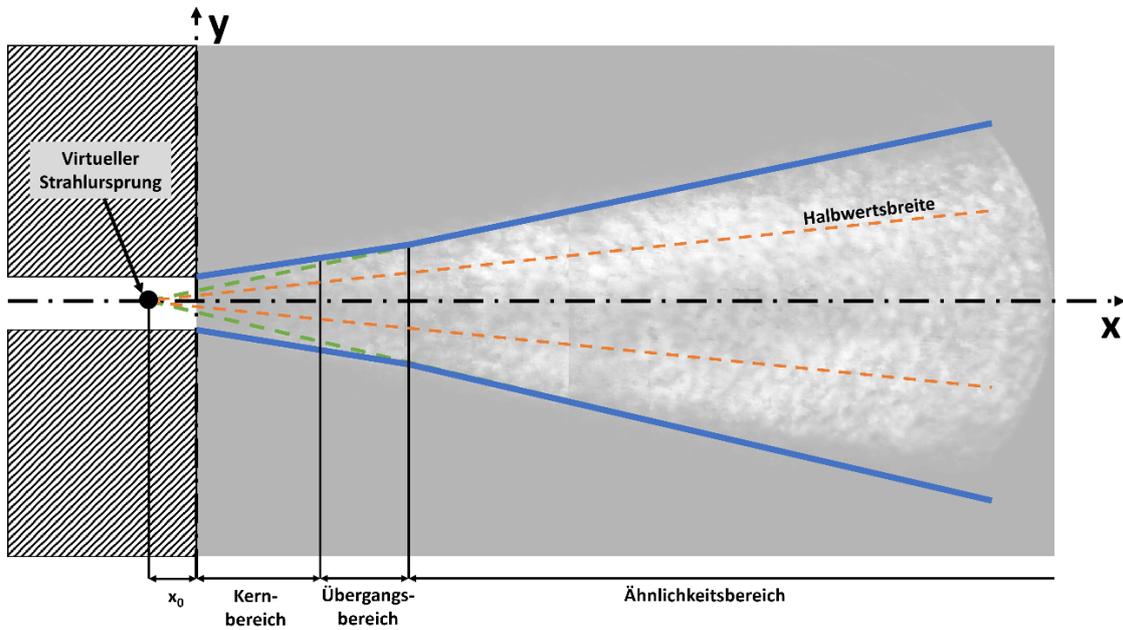


Abb. 2.3 Definitionsskizze eines stationären, rotationssymmetrischen Freistrahls; in Anlehnung an /RAJ 76/ und /GER 15/

In Abb. 2.3 sind drei verschiedene Bereiche des Freistrahls markiert. Im sogenannten Kernbereich, in dem die höchsten Geschwindigkeiten auftreten, verläuft die Freistrahlgrenze noch annähernd parallel zur Strahlachse. Dies ändert sich im Übergangsbereich, bis schließlich im Ähnlichkeitsbereich die Grenzen stetig konisch auseinanderlaufen. Für Freistrahlbetrachtungen ist vor allem der Ähnlichkeitsbereich interessant, da er den größten Bereich darstellt und für die Ausbreitung entscheidend ist. Zur Charakterisierung des Ähnlichkeitsbereichs ist der virtuelle Strahlursprung relevant. Dieser kann bestimmt werden, indem die Grenzen des Freistrahls über den Ähnlichkeitsbereich hinaus verlängert werden, wie in der folgenden Abbildung grün gestrichelt dargestellt, und ihr Schnittpunkt bestimmt wird. Dieser virtuelle Strahlursprung liegt dann nicht am Punkt $x = 0$, an dem der Strahl aus der Austrittsöffnung austritt, sondern eine Distanz x_0 davor in der Öffnung. Im Folgenden wird diese Distanz als virtueller Strahlursprung x_0 bezeichnet.

Oben werden bereits drei Bereiche eines Freistrahls genannt. Am Ende des Freistrahls kommt noch der diffuse Strahlbereich hinzu. In diesen vier Bereichen dominieren unterschiedliche Prozesse und können daher mit unterschiedlichen Modellen beschrieben werden /SCH 18/.

1. **Kernbereich:** Ausgehend von der Austrittsöffnung mit Durchmesser d bildet sich ein nur schwach aufweitender Kegel, auf dessen Strahlachse die

Geschwindigkeit etwa der Austrittsgeschwindigkeit v_0 (bei $x=0$) entspricht. Im Kernbereich besteht ein relativ klarer Rand zur Umgebungsluft. Der Kernbereich liegt gemäß /MIL 10/ etwa bei $0 \leq x/d_R \leq 6$.

2. **Übergangsbereich:** Am Rand des Freistrahls vermischt sich das Gas des Freistrahls zunehmend mit der Umgebungsluft. Der Bereich bevor sich der anfängliche klare Rand vollständig aufgelöst hat, wird als Übergangsbereich bezeichnet. Dieser Bereich liegt zwischen dem Kernbereich und dem für weitere Betrachtungen signifikanten Ähnlichkeitsbereich.
3. **Ähnlichkeitsbereich:** Im Ähnlichkeitsbereich, der für die meisten Betrachtungen entscheidend ist, liegt eine voll ausgebildete selbstähnliche Strömung vor. Bei einer selbstähnlichen Strömung sind die Geschwindigkeitsprofile bei entsprechender Skalierung in verschiedenen Abständen von der Quelle identisch, da eine solche Strömung ihre Struktur beibehält.

Die Umgebungsluft mischt in diesem Bereich in den Freistrah ein, wodurch die Geschwindigkeit entlang der Strahlachse hyperbolisch abnimmt und orthogonal zur Strahlachse durch eine Gaußverteilung beschrieben werden kann. Nach /MIL 10/ ist ab $x/d_R \geq 25$ der Freistrah voll ausgebildet, so dass eine selbstähnliche Strömung vorliegt und der Ähnlichkeitsbereich beginnt. In anderen Quellen wie /MAR 15/ kann bereits ab etwa $x/d_R \geq 15$ oder gemäß /RIE 08/, in Abhängigkeit von der Mischzahl des Freistrahls, ab etwa $x/d_R \geq 7$ (bei einer Mischzahl von 0,15) von einem Ähnlichkeitsbereich ausgegangen werden. Im Folgenden wird zunächst $x/d_R \geq 10$ als Beginn des Ähnlichkeitsbereiches verwendet, der im Zuge der Auswertung noch entsprechend eingeordnet werden kann.

4. **Diffuser Strahlbereich:** Am Ende des Ähnlichkeitsbereichs wird die Geschwindigkeit betragsmäßig vernachlässigbar, sodass von einem Ende des Freistrahls gesprochen werden kann. Wo dieses Ende liegt, hängt von den Umgebungsbedingungen und der genauen Definition ab.

Bei dem in diesem Vorhaben betrachteten Prozess tritt der Strahl, der hauptsächlich aus Luft oder Helium besteht, aus einer runden Öffnung mit turbulenter Strömung aus. Hat der Strahl die gleiche Dichte wie das Medium, in das er eintritt, so wird dieser als offener Freistrah bezeichnet. Ist dies nicht der Fall, so muss die Strömung nach /THR 53/ mit einem Dichtefaktor β skaliert werden, der sich aus dem Verhältnis der Gasdichte des Freistrahls ρ_F und der Dichte der Atmosphäre ρ_A ergibt:

$$\beta = \sqrt{\frac{\rho_F}{\rho_A}} \quad (2.4)$$

Die Form der Öffnung, in der sich der Ursprung des Freistrahls befindet, ist ein wichtiger Faktor für die weitere Ausbreitung. In diesem Projekt wird eine runde Öffnung und damit ein runder Freistrahls betrachtet. Die charakteristische Länge eines solchen Freistrahls ist daher der Durchmesser der Öffnung d . Für Berechnungen, bei denen sich das austretende Gas vom Gas der Umgebung, also in der Regel Luft, unterscheidet, wird ein effektiver Düsendurchmesser d_e verwendet, der über den oben angegebenen Dichtefaktor β und dem geometrischen beziehungsweise realen Düsendurchmesser d_R berechnet wird /THR 53/:

$$d_e = d_R \cdot \beta \quad (2.5)$$

Die Durchmischung des Freistrahls mit der Umgebung wird durch die Mischzahl m charakterisiert. Die Länge des Kernbereichs hängt von dieser Durchmischung und den dabei auftretenden Turbulenzen sowie dem Durchmesser der Öffnung ab. Der Proportionalitätsfaktor zwischen dem Durchmesser der Öffnung d_R und dem virtuellen Strahlursprung x_0 ist diese Mischzahl m /RIE 08/:

$$m = \frac{d_R}{x_0} \quad (2.6)$$

Als die inverse Größe der Mischzahl kann die Abbaukonstante K_1 , welche oft in der Literatur benutzt wird, ebenfalls verwendet werden. Die typischen Literaturwerte für die Abbaukonstante K_1 liegen zwischen 5 und 6,5 /TUD 22/:

$$K_1 = \frac{1}{m} = \frac{x_0}{d} \quad (2.7)$$

Der virtuelle Strahlursprung bei einem runden stationären Freistrahls mit einer Abbaukonstante von $K_1 = 6,5$, welcher aus einem Loch mit 25 mm Durchmesser austritt, liegt daher bei etwa $x_0 = 0,16$ m.

Bei einem offenen Freistrahls wird das Strömungsbild vorwiegend durch das Verhältnis von Trägheitskräften und Reibungskräften bestimmt. Dieses Verhältnis wird als

Reynolds-Zahl bezeichnet und ist ein Maß dafür, ob eine laminare oder turbulente Strömung vorliegt. Bei Freistrahlen mit einer laminaren Strömung an der Öffnung können im Vergleich zu turbulenten Strömungen bis zu dreimal größere Reichweiten des Freistrahls erreicht werden. Bei einem beispielhaften Szenario mit einem Durchmesser d der Öffnung von 25 mm und einer Geschwindigkeit v von 100 m/s ergibt sich mit der kinematischen Viskosität ζ für Luft eine Reynolds-Zahl Re von:

$$Re = \frac{v \cdot d}{\zeta} \approx 10^5 \quad (2.8)$$

Gemäß /JOU 03/ wurden bei quantitativen Untersuchungen für Reynolds-Zahlen kleiner als 2300 ein laminares und für Reynolds-Zahlen größer als 4000 ein turbulentes Strömungsverhalten nachgewiesen. Damit kann für das in diesem Vorhaben betrachtete Szenario von einem turbulenten Freistrahls ausgegangen werden, die auch als turbulente freie Scherströmung bezeichnet wird.

Die Mach-Zahl ist eine weitere wichtige Größe bei der Betrachtung eines Freistrahls:

$$Ma = \frac{v_{\text{Strömung}}}{v_{\text{Schall}}} \quad (2.9)$$

Bei den in diesem Vorhaben auftretenden Freistrahlen liegen Mach-Zahlen kleiner als 0,7 vor, weswegen die Strömung im Unterschallbereich ohne Verdichtungsstöße liegt, jedoch die Kompressibilität des Gases berücksichtigt werden muss.

2.2.2 Geschwindigkeit

Das Geschwindigkeitsfeld eines Gasfreistrahls kann als Vektorfeld beschrieben werden. Dabei können dem Fluid an jedem Raumpunkt Geschwindigkeiten für die drei kartesischen Raumrichtungen und ein daraus resultierender Geschwindigkeitsbetrag zugeordnet werden. Bei den Betrachtungen der Geschwindigkeit des Freistrahls im Rahmen dieses Vorhabens werden in der Regel die axiale und die radiale Geschwindigkeitsverteilung getrennt betrachtet. Bei der axialen Geschwindigkeitsverteilung wird der Geschwindigkeitsbetrag an Positionen entlang der Strahlachse betrachtet. Bei der radialen Geschwindigkeitsverteilung wird der Geschwindigkeitsbetrag an Positionen orthogonal zur Strahlachse betrachtet.

Axiale Geschwindigkeitsverteilung

Die Geschwindigkeit des Freistrahls lässt sich nach /SCH 18/ auf der Strahlachse als Funktion des Abstandes vom Ursprung x , der Initialgeschwindigkeit v_0 und eines vom jeweiligen Strahlbereich abhängigen Exponenten durch eine hyperbolische Funktion darstellen. Die Werte und Funktionen hängen von verschiedenen Parametern ab und können meist nur experimentell bestimmt werden. Für einen runden Freistrahls, wie er aufgrund der annähernd runden Öffnung vorliegt, kann für den Ähnlichkeitsbereich in der Regel von einem Exponenten $n = 1$ ausgegangen werden:

$$v(x) \sim v_0 \cdot \left(\frac{1}{x}\right)^{n=1} \quad (2.10)$$

Der Verlauf der Geschwindigkeit in diesem Bereich hat demnach einen hyperbolischen Verlauf, wie beispielhaft in der folgenden Abb. 2.4 dargestellt ist. Für den Beginn des Ähnlichkeitsbereichs wird hier, wie oben eingeführt, $x/d_R \geq 10$ angesetzt, so dass die Fit-Funktion bei einem 25 mm breiten Loch ab 25 cm beginnt.

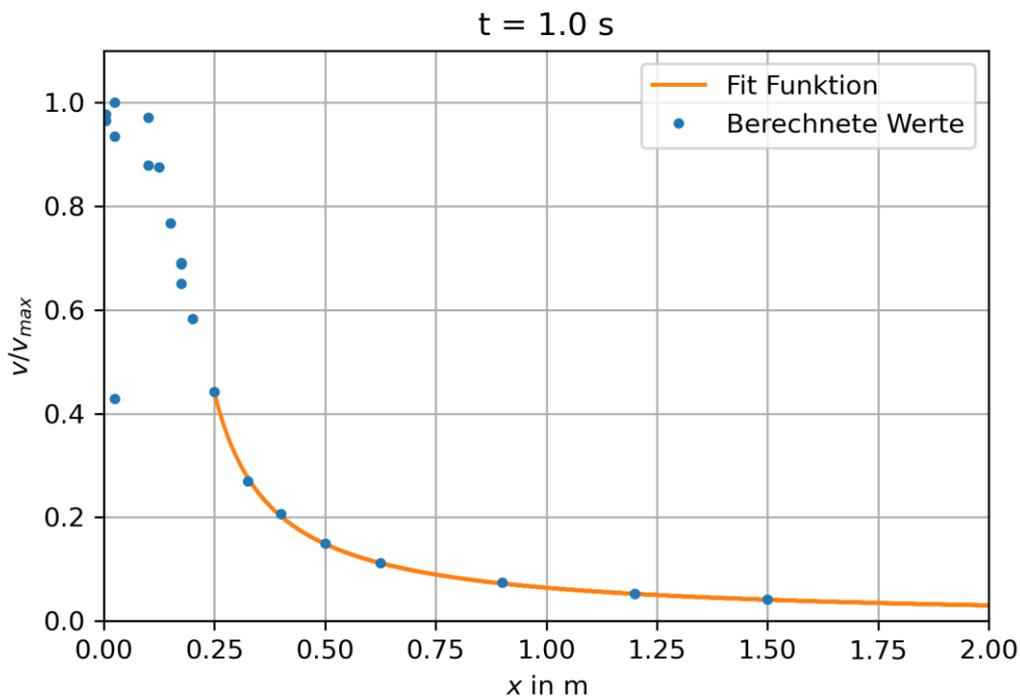


Abb. 2.4 Beispielhafte Darstellung eines hyperbolischen Geschwindigkeitsverlaufs, der axialen Ausbreitung des Geschwindigkeitsfeldes des Freistrahls, gemessen im Rahmen von /GRS 23/

Die Geschwindigkeit für den Ähnlichkeitsbereich lässt sich für den isothermen runden offenen Freistrahlgemäß /REG 59/ über folgendes Verhältnis vereinfacht berechnen:

$$v(x) = v_0 \cdot \frac{x_0}{x} = v_0 \frac{d}{m \cdot x} \quad (2.11)$$

Nach /SCL 06/ kann eine Freistrahlgrenze definiert werden, die qualitativ bei einer radialen Geschwindigkeitsabnahme zur Strahlachse von 1 % vorliegt. Eine solche Grenze ist beispielhaft in Abb. 2.3 dargestellt. Aus dieser Abbildung ist auch ersichtlich, dass bei einer Verlängerung der Freistrahlgrenze in den Kernbereich hinein ein virtueller Strahlursprung x_0 hinter der eigentlichen Düsenöffnung definiert werden kann. Dieser ist für die Berechnung der Freistrahlgeschwindigkeit im Ähnlichkeitsbereich der tatsächlich anzunehmende Strahlursprung, weshalb nach /SCL 06/ die Formel (2.11) angepasst werden muss zu:

$$v(x) = v_0 \cdot \frac{x_0}{x} = v_0 \cdot \frac{d}{m \cdot (x - x_0)} \quad (2.12)$$

Die obigen Formeln beziehen sich auf einen Luft Freistrahlgemäß mit einer vergleichbaren Dichte wie das Medium. Sollte der Freistrahlgemäß aus einem anderen Gas bestehen, so muss, wie zuvor bereits erläutert, der in Formel (2.4) aufgeführte Korrekturfaktor β für den Düsendurchmesser verwendet werden, um einen effektiven Düsendurchmesser zu erhalten. Damit lässt sich die axiale Geschwindigkeit des Freistrahls im Ähnlichkeitsbereich berechnen über /THR 53/:

$$v(x) = v_0 \cdot \frac{d_e}{m \cdot (x - x_0)} = v_0 \cdot \frac{d_R \cdot \beta}{m \cdot (x - x_0)} \quad (2.13)$$

Unter Verwendung der in der Literatur öfter benutzten Kennzahl K_1 , welche als Abbaukonstante bezeichnet wird, ergibt sich für die positionsabhängige Geschwindigkeit eines stationären Gas Freistrahls im Ähnlichkeitsbereich des Freistrahls entlang der x-Achse die Funktion:

$$v(x) = v_0 \cdot K_1 \cdot \frac{d_e}{(x - x_0)} \quad (2.14)$$

Radiale Geschwindigkeitsverteilung

Die Geschwindigkeit des Freistrahls orthogonal zur Strahlachse im Ähnlichkeitsbereich lässt sich gemäß /KRA 75/ über die x-Koordinate, die Entfernung z-Koordinate und die axiale Geschwindigkeit v_{axial} mit einer Gauß'schen Verteilungsfunktion darstellen:

$$v(x, z) \sim v_{axial} \cdot \exp\left(-\left(\frac{z}{x}\right)^2\right) \quad (2.15)$$

Der Verlauf der Geschwindigkeit in diesem Bereich ist beispielhaft in der folgenden Abb. 2.4 dargestellt.

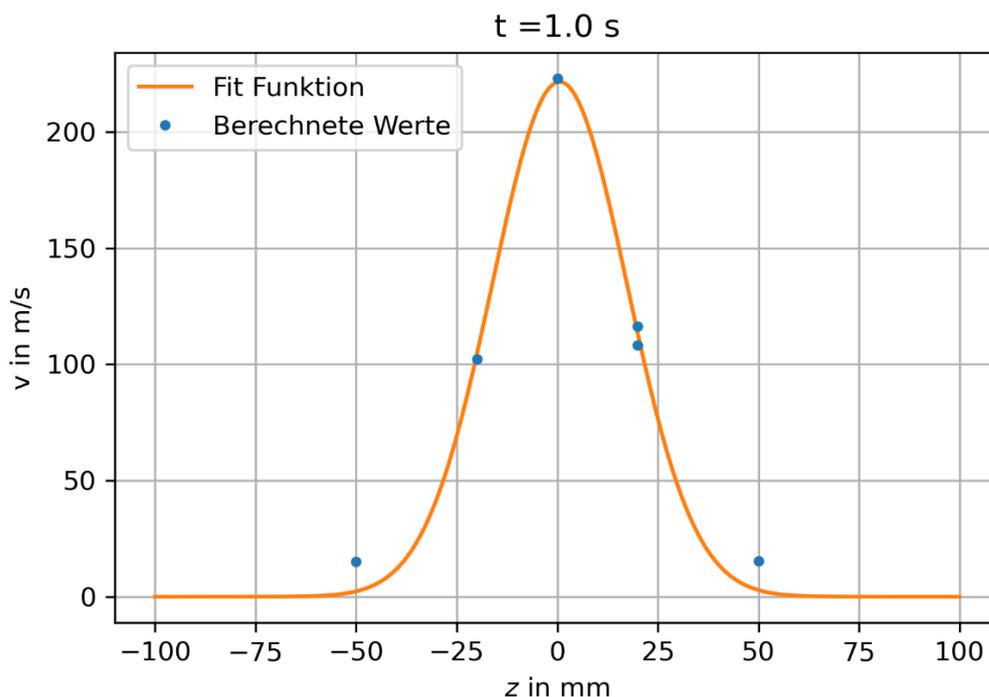


Abb. 2.5 Beispielhafte Darstellung des Geschwindigkeitsverlaufs in Form einer Gauß'schen Verteilungskurve, wie sie für die radiale Ausbreitung des Geschwindigkeitsfeldes des Freistrahls im Ähnlichkeitsbereich angenommen werden kann. Gemessen im Rahmen von /GRS 23/

Im Ähnlichkeitsbereich bildet sich orthogonal zur Strahlachse ein Geschwindigkeitsprofil in der Form einer Gauß'schen Glockenkurve aus. Die axiale Geschwindigkeit v_{axial} des Freistrahls kann über die zuvor gezeigte Gleichung berechnet werden. Die Geschwindigkeit kann gemäß /KRA 75/ berechnet werden über:

$$v(x, z) = v_{axial} \cdot \exp\left(-A \cdot \left(\frac{z}{x - x_0}\right)^2\right) \quad (2.16)$$

$$v(x, z) = v_0 \cdot K_1 \cdot \frac{d_e}{(x - x_0)} \cdot \exp\left(-A \cdot \left(\frac{z}{x - x_0}\right)^2\right)$$

Hier ist A ein Fit-Parameter, mit dem die orthogonale Abnahme der Geschwindigkeit quantifiziert werden kann. Im Folgenden wird dieser Parameter jedoch in die in der Literatur gebräuchlicheren Parameter Halbwertsbreite und Streurrate umgerechnet. So lässt sich aus der obigen Formel eine Halbwertsbreite, also der Entfernung entlang der z -Achse, bei der die Geschwindigkeit halbiert ist, bestimmen:

$$z_{1/2} = (x - x_0) \cdot \sqrt{\frac{\ln(0,5)}{-A}} \quad (2.17)$$

Aus der Halbwertsbreite lässt sich die in der Literatur öfter benutzte Kennzahl K_2 , welche als Streurrate bezeichnet wird, ableiten:

$$K_2 = \frac{z_{1/2}}{(x - x_0)} = \sqrt{\frac{\ln(0,5)}{-A}} \quad (2.18)$$

Eingesetzt in die Formel (2.16) führt die zu:

$$\frac{v(x, z)}{v_{max}} = \frac{1}{2} \cdot \exp\left(K_2^{-2} \cdot \left(\frac{z}{x - x_0}\right)^2\right) \quad (2.19)$$

2.2.3 Disperse Phase

Ein mit Partikeln beladener Gasfreistrahler weist neben der Strömungsdynamik des Gases eine komplexe Wechselwirkung zwischen der Gasphase und der dispersen Partikelphase auf. Die Beschreibung der dispersen Phase (Partikel) in einem solchen Freistrahler umfasst verschiedene Aspekte, einschließlich der Bewegung und Verteilung der Partikel und ihrer Wechselwirkung mit der Gasphase.

Bezüglich der Partikel-Gas-Wechselwirkung ist zu beachten, dass die Partikel durch das bewegte Gas Schubkräfte erfahren, die ihre Geschwindigkeit und Bewegung beeinflussen. Da die Partikel durch das Gas beschleunigt werden, kann die Geschwindigkeitsverteilung der Partikel prinzipiell analog zur Geschwindigkeitsverteilung des Gases, wie in Abschnitt 2.2.2 dargestellt, beschrieben werden. Das Ausmaß der Beschleunigung hängt von der Größe und Dichte der Partikel sowie von der Viskosität des Gases ab, so dass sowohl hinsichtlich des Geschwindigkeitsbetrages als auch hinsichtlich der räumlichen Verteilung partikelgrößenabhängige Unterschiede bestehen. Umso leichter und kleiner die Partikel sind, umso besser ist ihr Folgevermögen in Bezug zum Gas, so dass sich hier die Geschwindigkeitsverteilungen angleichen. Größere und schwerere Partikel hingegen weisen eine höhere Trägheit auf, so dass sich diese langsamer an Änderungen der Gasströmungsgeschwindigkeit anpassen. Außerdem kann sich die Verteilung der Partikelkonzentration in radialer Richtung ändern, da größere Partikel aufgrund ihrer Trägheit dazu neigen, sich in der Mitte des Strahls zu konzentrieren, während kleinere Partikel der Gasströmung stärker folgen und eine breitere Verteilung aufweisen können. In turbulenten Freistrahlen diffundieren die Partikel zusätzlich durch turbulente Fluktuationen im Strömungsfeld des Gases, was zu einer Verbreiterung der Partikelverteilung und insgesamt des Freistrahls führt.

Zur Beschreibung der dispersen Phase in einem partikelbeladenen Freistrahls werden häufig erweiterte Modelle verwendet, die sowohl die Fluidmechanik der Gasphase als auch die Partikeldynamik berücksichtigen. Diese Modelle sind in der Regel eine Kombination aus einem Lagrange-Ansatz bzw. einer körperbezogenen Darstellung und einem Euler-Ansatz bzw. einer raumbezogenen Darstellung. Häufig verwendete Modelle sind:

- **Euler-Euler-Ansatz:** Beide Phasen, die Gasphase und die Partikelphase, werden als kontinuierliche Medien behandelt. Jede Phase wird durch eigene Kontinuitäts- und Impulsgleichungen beschrieben. Diese Gleichungen enthalten Quellterme, die die Wechselwirkungen zwischen den Phasen darstellen. Die Kopplung der Phasen erfolgt durch Austauschsterme in den Gleichungen, die Kräfte, Masse- und Impulsaustausch zwischen den Phasen beschreiben.
- **Euler-Lagrange-Ansatz:** Dieser Ansatz verfolgt die Partikelbahnen individuell (Lagrange-Ansatz), während die Gasphase als kontinuierliches Medium (Euler-Ansatz) behandelt wird. Dabei werden zunächst die Strömungsfelder (Geschwindigkeit, Druck, Temperatur) für die Gasphase mittels der Navier-Stokes-Gleichungen berechnet. Die Bewegung der Partikel wird durch Newtonsche

Bewegungsgleichungen beschrieben, die die Kräfte berücksichtigen, die auf die Partikel wirken (z.B. Schubkräfte, Gravitation, Trägheitskräfte). Die Wechselwirkungen zwischen den Phasen werden berücksichtigt, indem Kräfte, die von der Gasphase auf die Partikel wirken, sowie die Rückwirkung der Partikel auf die Gasphase (z.B. durch einen zusätzlichen Widerstandsterm in den Navier-Stokes-Gleichungen) modelliert werden.

Im Rahmen dieses Vorhabens sind insbesondere lungengängige Partikel relevant. Lungengängig sind Partikel, die einen aerodynamischen Durchmesser (aerodynamic equivalent diameter, AED) kleiner oder gleich $10\ \mu\text{m}$ besitzen. Unterhalb dieses Durchmessers steigt der Anteil von eingeatmeten Partikeln, die bis in die Alveolen (Lungenbläschen) gelangen, mit kleinerem Durchmesser stetig an /HIN 82/.

Ein Partikel mit einem AED von $d_{\text{AED}} = 10\ \mu\text{m}$ verhält sich aerodynamisch wie ein sphärischer Körper mit einem geometrischen Durchmesser d_{geo} von $10\ \mu\text{m}$ und einer Einheitsdichte von $\rho_0 = 1\ \text{g/cm}^3$. Unter Vernachlässigung der geometrischen Abweichung eines Partikels von einer sphärischen Form lässt sich sein AED aus dem geometrischen Durchmesser d_{geo} , der Einheitsdichte ρ_0 und seiner Dichte ρ_p folgendermaßen ableiten /HIN 82/:

$$d_{\text{AED}} = d_{\text{geo}} \cdot \sqrt{\rho_p / \rho_0} \quad (2.20)$$

2.2.4 Experimentelle Erkenntnisse

Im Rahmen des Vorhabens /GRS 23/ wurde ein instationärer partikelbeladener Gasfreistrahler experimentell untersucht. Dazu wurden gemeinsam mit dem Lehrstuhl für Fluidmechanik der Fakultät für Bio- und Chemieingenieurwesen in den Laboren der Technischen Universität (TU) Dortmund Messaufbauten errichtet und unter Variation der Versuchsparameter insgesamt über 300 Einzelversuche durchgeführt. Es wurden verschiedene Messtechniken verwendet, welche sowohl eine quantitative als auch eine qualitative Auswertung zulassen. Beispielhaft ist in der folgenden Abb. 2.6 ein mit dem Schlierenverfahren erstelltes Bild des gemessenen Freistrahls abgebildet.

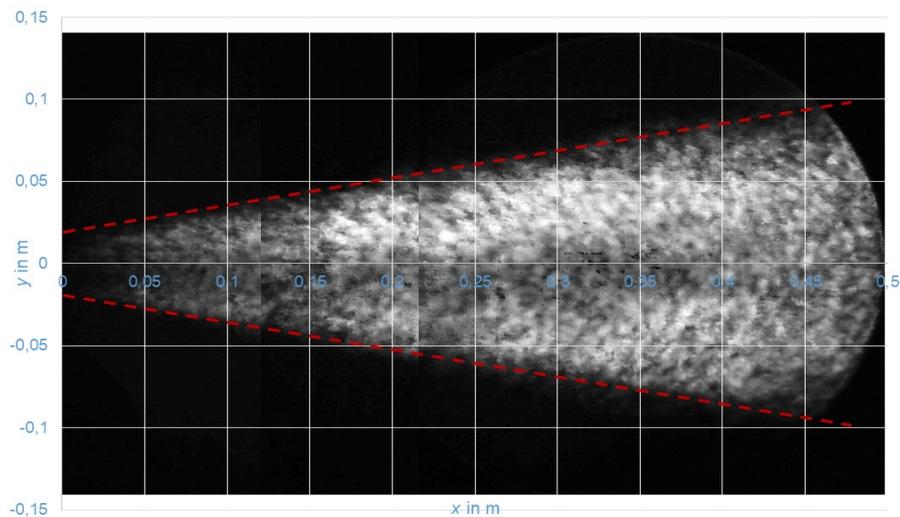


Abb. 2.6 Bearbeitetes Bild aus dem Schlierenverfahren bestehend aus drei Messungen. Mit einer rot gestrichelten Linie ist die qualitativ abgeschätzte „Grenze“ des Freistrahls abgebildet /TUD 22/

Bei den Versuchen wurde ein etwa 2 m^3 großer Kessel, wie in Abb. 2.7 dargestellt, mit Überdruck gefüllt und anschließend über ein 400 mm langes Rohr und einen speziellen Öffnungsmechanismus entleert, so dass sich vor dem Kessel ein Freistrahл bilden konnte. Es wurde Luft oder Helium mit einem Überdruck von 0,5 bar gegenüber der Umgebung verwendet.

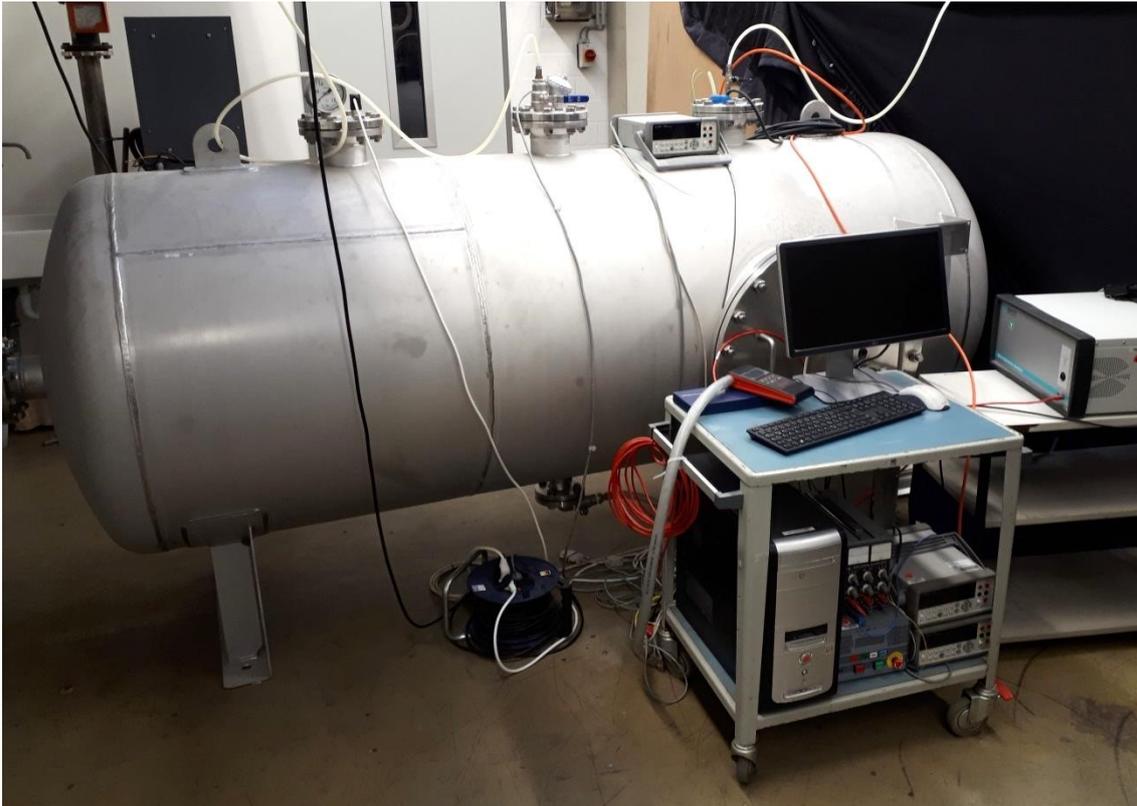


Abb. 2.7 Aufbau des Versuchstandes rund um den aufgebauten Kessel mit den Verkabelungen für die Sensoren sowie den Computern und technischen Messsystemen, welche nicht im Messbereich selbst liegen /GRS 23/

Zur quantitativen Erfassung der Partikelströmung wurde ein Phasen-Doppler-Anemometer (PDA) eingesetzt. Mit einem PDA können die Geschwindigkeitskomponenten und der Durchmesser von kugelförmigen Partikeln in einer Fluidströmung mittels eines berührungslosen optischen Messverfahrens gemessen werden. Die Daten eines einzelnen Experiments liefern für einen bestimmten lokalen Messpunkt beziehungsweise für ein sehr kleines Messvolumen an diesem Punkt die zeitabhängige Geschwindigkeit und den Durchmesser der Partikel, die sich durch diesen Punkt bewegen. Die Ergebnisse können dann z. B. wie in Abb. 2.8 dargestellt werden. Durch Messungen an verschiedenen Messpunkten kann dann ein umfassendes Modell des Freistrahls erstellt werden.

innerhalb eines physikalischen Modells, das auf theoretischen Modellen aus der Literatur basiert, zeitabhängig und mehrdimensional bestimmt werden.

Für die Abbaukonstante eines partikelbeladenen Freistrahls liegen keine Literaturwerte vor. Aus theoretischen Überlegungen in der Literatur kann jedoch geschlossen werden, dass zum einen die Abbaukonstante der Gasphase bei einem partikelbeladenen Freistrahls größer ist als bei einem Gasfreistrahls und zum anderen die Abbaukonstante hauptsächlich vom Verhältnis der Massenströme von Gas und Partikelbeladung abhängt. Dies konnte in den Versuchen in /GRS 23/ bestätigt werden. So wurde bei einem mit Partikeln beladenen Freistrahls eine größere Abbaukonstante ermittelt und bei einer Erhöhung der Dosierung oder der Dichte bzw. Masse der einzelnen Partikel eine gleichzeitige Erhöhung der Abbaukonstante festgestellt. Die allgemeinen theoretischen Überlegungen können somit auch hier bestätigt werden.

Es konnten auf Grundlage der experimentellen Daten analytische Modelle entwickelt werden, mit denen sich die zeit- und partikelgrößenabhängige Ausbreitung des Freistrahls berechnen lässt. Außerdem konnten die Effekte von Parametervariationen sowie die Wirkung einer im Ausbreitungsgebiet befindlichen Lochblende eingeordnet werden. Die in /GRS 23/ gewonnenen Messergebnisse ermöglichen eine Optimierung und Validierung von numerischen Modellen im Rahmen dieses Vorhabens.

2.3 Typische Randbedingungen

In diesem Vorhaben wird das Szenario einer Hohlladungs-Einwirkung auf TLB mit Kernbrennstoffen möglichst generisch betrachtet. Da das Anwendungsgebiet jedoch bei Kernbrennstofftransporten liegt, können einige typische Randbedingungen und Größenordnungen zu den bestimmenden Parametern für das Szenario einer Hohlladungs-Einwirkung auf TLB mit Kernbrennstoffen identifiziert werden.

Behälter

Kernbrennstoffe mit hohem Aktivitätsinventar und damit hohem Gefährdungspotenzial sind im Wesentlichen bestrahlte Brennelemente und verglaste Abfälle aus der Wiederaufarbeitung bestrahlter Brennelemente. Für diese hochaktiven Kernbrennstoffe bestehen im Bereich der Transportsicherheit unter anderem hohe Anforderungen an die Störfallfestigkeit der Verpackung und an die Abschirmung der vom radioaktiven Inventar

ausgehenden ionisierenden Strahlung. Es werden daher massive, dickwandige Behälter verwendet, die überwiegend aus Gusseisen oder Stahl bestehen.

Die in Deutschland eingesetzten TLB für bestrahlte Brennelemente aus Leistungsreaktoren und für Glaskokillen mit Edelstahlmantel haben bereits unbeladen eine Masse > 100 t, eine Wanddicke von etwa 0,4 m und ein Fassungsvermögen von etwa > 7 m³. Je nach radioaktivem Inventar und zusätzlichen inneren Strukturen zur Fixierung, Wärmeabfuhr und Abschirmung wird das Volumen zum Teil erheblich reduziert, so dass das verbleibende freie Volumen auf wenige Kubikmeter reduziert werden kann. Brennelementbehälter für Forschungsreaktoren sind kleiner, haben etwas geringere Wandstärken und ein geringeres freies Volumen. Die Wanddicke bestimmt bei ausreichenden Leistungsdaten des Wirkmediums die Länge des Strömungskanals.

Hohlladungen

Panzerbrechende Waffen nach dem Hohlladungsprinzip gibt es in einer Vielzahl von Ausführungen und Varianten. In fast allen Fällen sind die Hohlladungen Teil eines Gefechtskopfes, der aus größerer Entfernung auf das Ziel abgefeuert werden kann. Wie genau dieser Abschussvorgang abläuft, hängt von der jeweiligen Waffengattung ab. So lassen sich die Panzerabwehrwaffen mit Hohlladungsprinzip grob in Panzerabwehrhandwaffen und Panzerabwehrlenkwaffen, die vom Boden oder von Fahrzeugen aus verschossen werden, unterteilen. Die genauen technischen Details dieser Waffensysteme sind jedoch nicht Gegenstand dieses Vorhabens und für die weiteren Betrachtungen nicht relevant. Die für die Konzeption der Simulationen relevanten Parameter bezüglich der Hohlladung sind das mögliche Schadensbild, insbesondere die möglichen Lochdurchmesser sowie die mögliche Eindringtiefe durch den Hohlladungsstachel, die nur vom Gefechtskopf abhängt /ZUK 98/.

Die Durchschlagsleistung von Panzerabwehrwaffen liegt je nach Waffentyp zwischen 300 und über 1000 mm RHA. RHA (rolled homogeneous armour) ist die fiktive Dicke einer Panzerung aus Panzerstahl, die durchschlagen werden könnte. Für die Umrechnung der Stahläquivalente in RHA wird angenommen, dass das Durchdringungsvermögen von Normalstahl (C60) /WAL 89/ aufgrund seiner geringeren Festigkeit um 20 % höher ist als das von Panzerstahl. Es kann daher davon ausgegangen werden, dass mit diesem Waffentyp in den meisten Transport- und Lagerbehältern für Kernbrennstoffe ein Loch bis in das Behälterinnere erzeugt werden kann, aus dem dann ein Ausströmvorgang stattfinden kann.

Die Lochdurchmesser beim Eindringen einer Hohlladung hängen von der Art der Waffe, aber auch von den Materialeigenschaften des Ziels ab. Bei typischen Hohlladungskalibern zwischen 60 und 150 mm liegen die typischen Lochdurchmesser in Stahl und Guss-eisen im unteren Zentimeterbereich /HEL 78/. Dabei ist zu beachten, dass der Lochdurchmesser nicht über die gesamte Länge konstant ist, sondern entlang eines homogenen Materials mit zunehmender Tiefe abnimmt. Außerdem treten unter realen Bedingungen Unebenheiten und Wandrauigkeiten auf, die sich auf die Durchströmung auswirken können. Für die numerischen Untersuchungen ist es jedoch zulässig, eine Öffnung mit konstantem Durchmesser und glatter Wand anzunehmen, die einen konstanten mittleren Durchmesser von einigen Zentimetern aufweist.

Primäre Freisetzung

Da die Konzentration der im Behälter freigesetzten luftgetragenen Partikel in Abhängigkeit von den Randbedingungen stark schwanken kann, wird im Folgenden lediglich eine plausible Größenordnung als Orientierung für die Festlegung der Versuchsrandbedingungen abgeschätzt. Der nach Durchdringung der Behälterwand verbleibende Anteil des Hohlladungsstachels kann je nach Leistungsdaten und Behälterinventar mehr als 10 g lungengängige Partikel im Behälter erzeugen. Die primäre Freisetzungsmasse im Behälter bis $AED \leq 100 \mu\text{m}$ ist etwa um den Faktor 10 höher. Bei zusätzlicher Betrachtung der Partikelgröße über $100 \mu\text{m AED}$ steigt der Beitrag zur gesamten primär freigesetzten Masse zwar weiter an, die Bedeutung dieser Partikel für den Freisetzungsprozess aus dem Behälter nimmt jedoch aufgrund der zunehmenden Sedimentationsgeschwindigkeit und weiterer hydrodynamischer Effekte deutlich ab. Auch der Anteil der Fraktion $10 - 100 \mu\text{m AED}$ an den luftgetragenen Partikeln nimmt auf dem Weg aus dem Behälter ab.

Wenn von 100 g Partikeln mit $AED < 100 \mu\text{m}$ in einem Behälter mit 1 m^3 freiem Volumen ausgegangen wird, ergibt sich für diesen Größenbereich eine plausible anfängliche mittlere Partikelbeladung des Behältergases in der Größenordnung von $0,1 \text{ g/l}$. Bei kleineren Behältern, größeren Freisetzungsmassen oder inhomogener Verteilung erhöht sich der Wert entsprechend. Die mittlere Dichte der Partikel variiert je nach beitragendem Material (Glas, Uranoxid, Hüllmaterial, Tragkorbstruktur etc.) zwischen etwa $2,5$ und 11 g/cm^3 .

Behälterdruck

Im Normalfall sind TLB mit Helium gefüllt und der Fülldruck im Behälterschacht ist so eingestellt, dass während des Transports und der Lagerung ein deutlicher Unterdruck gegenüber der Umgebung gewährleistet ist (z. B. /BFE 17/).

Die experimentellen Grundlagen für eine belastbare Zuordnung des Druckanstiegs durch eine Hohlladungseinwirkung bei unterschiedlichen Konfigurationen aus Waffe, Behälter und Inventar sind bisher noch eingeschränkt. Nach bisherigem Kenntnisstand kann bei ungünstigen Kombinationen aus Einwirkung, Inventar und freiem Volumen ein kurzzeitiger Druckanstieg im Bereich einer Verdopplung des Innendrucks nicht ausgeschlossen werden /PRE 94/. Typischerweise ist jedoch von niedrigeren Amplituden des anfänglichen Druckanstiegs auszugehen /GRS 06/, /GRS 12/. Der zugehörige kurzzeitige Anstieg der mittleren Gastemperatur, welcher diesen Druckanstieg hervorruft, folgt näherungsweise aus der Zustandsgleichung für ideale Gase.

3 Simulation

Im Rahmen dieses Vorhabens werden sowohl Gasströmungen als auch Mehrphasenströmungen partikelbeladener Gase betrachtet. Solche Strömungen können, wie bereits in Abschnitt 2 erwähnt, mit Hilfe der Strömungsmechanik physikalisch beschrieben werden. Zur Lösung und Analyse von Strömungsproblemen wird die numerische Strömungsmechanik, kurz CFD, eingesetzt, die numerische Methoden zur näherungsweisen Lösung dieser Probleme verwendet. Die Anwendung von CFD erfolgt in Form von numerischen Modellen mit CFD-Simulationen. Die Grundlage von CFD-Simulationen sind die Navier-Stokes-Gleichungen, ein System von Gleichungen, das aus der Impulsgleichung für die Impulsbewegung, der Kontinuitätsgleichung für die Massenerhaltung und der Energiegleichung für die Thermodynamik besteht.

Bei CFD-Simulationen wird das zu untersuchende Strömungsfeld in eine Vielzahl kleiner Volumenelemente oder Zellen unterteilt. Für jede dieser Zellen werden die grundlegenden Erhaltungsgleichungen (Masse, Impuls und Energie) gelöst. Bei diesen Berechnungen werden die Eigenschaften des Fluids wie Dichte und Viskosität sowie die Randbedingungen des Systems berücksichtigt. Eine moderne CFD-Software verwendet eine der verschiedenen Methoden wie die Finite-Volumen-Methode (FVM), die Finite-Elemente-Methode (FEM) oder die Finite-Differenzen-Methode (FDM), um die Gleichungen zu lösen und die Strömungsdynamik zu modellieren.

Für dieses Vorhaben wird die Software ANSYS Fluent verwendet, welche die FVM verwendet. Mit ANSYS Fluent können die Strömungsmodelle aufgesetzt und entsprechende CFD-Simulation durchgeführt werden. Das Vorgehen zur Durchführung von CFD-Simulationen kann in sechs Schritte unterteilt werden:

1. **Geometrie:** Definition und Erstellung der Geometrie sowie des Ausbreitungsgebiets, welches im Folgenden betrachtet werden soll.
2. **Rechengitter:** Die Geometrie wird mit einem Rechengitter (Mesh) ausgefüllt, welches den Raum in kleine Volumenelemente unterteilt.
3. **Physikalische Modelle:** Ausgehend von den für das Problem dominierenden physikalischen Effekten werden Modellgleichungen aufgestellt.
4. **Rand- und Anfangsbedingungen:** Die physikalischen Bedingungen und Eigenschaften des Fluids werden definiert, einschließlich Geschwindigkeiten oder Drücke sowie Temperaturen an den Grenzen des Simulationsbereichs.

5. **Simulation:** Die Simulation wird gestartet, und ANSYS Fluent berechnet die Strömungsfelder, Druckverteilungen und andere relevante physikalische Größen innerhalb der Rechendomäne.
6. **Postprocessing:** Nach Abschluss der Simulation werden die Ergebnisse analysiert und visualisiert, um Einblicke in das Strömungsverhalten zu gewinnen.

Im Folgenden werden die ersten vier oben dargestellten Schritte in separaten Abschnitten 3.1 bis 3.4 erläutert und in den Kontext des Vorhabens eingeordnet. Dabei ist zu beachten, dass im Rahmen des Vorhabens nicht nur eine einzige Simulation mit einer bestimmten Geometrie und Vernetzung sowie bestimmten physikalischen Modellen und festen Rand- und Anfangsbedingungen durchgeführt wird, sondern eine ganze Reihe von verschiedenen Simulationen mit unterschiedlichen Bedingungen und Parametern, da das Ziel des Vorhabens nicht die Durchführung einer bestimmten Simulation für einen ganz konkreten Sachverhalt ist, sondern die generelle Entwicklung der Fähigkeit, Simulationen des Ausströmverhaltens bei TLB, welche im Zuge einer Einwirkung mit einer Hohlladung beschädigt wurden, durchführen zu können. Darüber hinaus ist die Durchführung der numerischen Simulation ein iterativer Prozess, da das Rechengebiet, das Rechengitter oder die Randbedingungen aufgrund der Berechnungsergebnisse häufig angepasst bzw. optimiert werden müssen, um die Problemstellung zu lösen.

Die Schritte einer CFD-Simulation werden nicht nur generisch erklärt, sondern alle Schritte werden auch beispielhaft an durchgeführten Simulationen erläutert, die in Abschnitt 4 dargestellt sind.

In Abschnitt 3.5 wird die gesamte Vorgehensweise noch einmal zusammengefasst und zusätzlich auf die Schritte zur Durchführung einer CFD-Simulation sowie auf das Postprocessing eingegangen.

3.1 Geometrie

Die Erstellung der Geometrie für ANSYS Fluent erfolgt in der Regel mit SpaceClaim, einem Computer-Aided Design (CAD)-Programm, das die Erstellung und Bearbeitung von Geometrien für Strömungssimulationen ermöglicht. Zunächst wird die Geometrie des zu untersuchenden Objekts oder Systems definiert, wobei es wichtig ist, die relevanten physikalischen Dimensionen und Details zu berücksichtigen. Anschließend wird das Ausbreitungsgebiet, das die Umgebung des Objekts oder die Strömungsdomäne

darstellt, festgelegt. Dabei sollte darauf geachtet werden, dass das Modell möglichst einfach gehalten wird, um die Rechenzeit zu minimieren, ohne dabei wichtige Details der Strömung zu vernachlässigen. Besondere Sorgfalt ist bei der Wahl der Grenzbedingungen und der Erstellung eines sauberen Netzes geboten, um akkurate und stabile Simulationen zu gewährleisten.

3.1.1 Behälter und Ausbreitungsgebiet

Im Rahmen dieses Vorhabens wird die Freisetzung von Gasen und Partikeln aus einem dickwandigen TLB in Form eines Freistrahls untersucht. Die relevante Geometrie ist daher ein solcher dickwandiger TLB, der in vereinfachter Form ein zylindrischer Behälter ist, sowie das Ausbreitungsgebiet, in dem der Freistrahл strömt.

Um die Ergebnisse später mit den Simulationen aus dem experimentellen Freistrahл Vorhaben der GRS /GRS 23/ vergleichen zu können, welches in Abschnitt 2.2.4 dargestellt ist, wird als Ausgangsgeometrie der dort verwendete Versuchsaufbau zugrunde gelegt. Für die Abmessungen werden daher die Maße des dort verwendeten Druckbehälters benutzt. Der zylindrische Behälter hat somit einen Durchmesser von $D = 1084$ mm, eine Länge von $L = 2168$ mm und ein Volumen von $V = 2$ m³. Das Rohr, aus dem das Gas später ausströmt, befindet sich exakt in der Mitte der Stirnseite und hat einen inneren Durchmesser von $d_R = 25$ mm und eine Länge von $L_R = 400$ mm. Eine schematische Skizze der Geometrie des Aufbaus ist in Abb. 3.1 dargestellt. Die Länge des Rohres steht dabei stellvertretend für die eigentliche Wandstärke des Behälters und der Durchmesser des Rohres für den Durchmesser des Lochs in diesem Behälter. Konstruiert wird die Geometrie für die späteren Rechnungen mit dem CAD-Modul von ANSYS (SpaceClaim). Dabei ist darauf zu achten, dass die Geometrie vollständig ist und keine Lücken oder Überlappungen aufweist. Stellen, die die Geometrie unnötig kompliziert machen, sollten dabei vereinfacht werden. Außerdem sollte bereits beim Erstellen der Geometrie die anschließende Vernetzung berücksichtigt und das Modell entsprechend angepasst werden, um die Vernetzung möglichst einfach und unkompliziert zu gestalten. Ein Beispiel dafür ist die Aufteilung der einzelnen Komponenten in verschiedene Segmente, da diese dann einzeln vernetzt werden können. Außerdem bietet dieses Vorgehen die Möglichkeit, für besonders interessante Bereiche ein feineres Netz, d.h. kleinere Kontrollvolumina als an anderen Stellen zu verwenden.

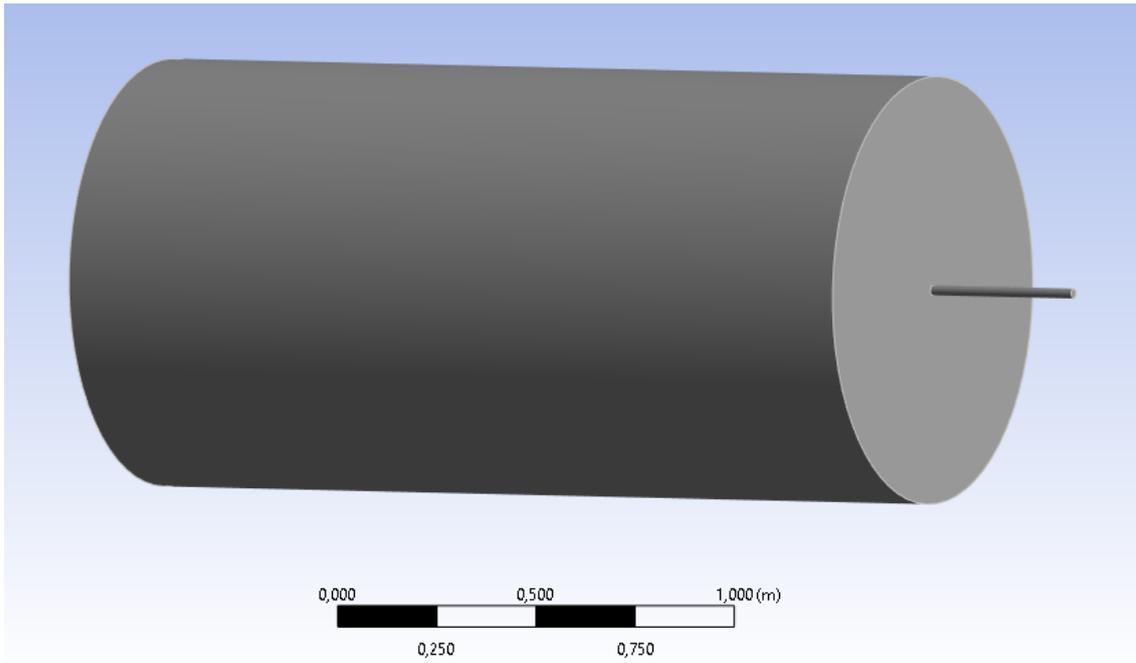


Abb. 3.1 Darstellung der Geometrie des verwendeten Behälters inklusive Rohr

Die Größe des Ausbreitungsgebietes, das an das Rohr anschließt, wird auf Grundlage der Reichweite und der Halbwertszeit des zu erwartenden Freistrahls abgeschätzt. Dabei wird zunächst ein Gebiet mit einer Länge von $L_G = 5$ m und einem maximalen Radius von $r_{G,max} = 2$ m betrachtet, der minimale Radius des Gebietes direkt am Anschluss an das Rohr beträgt dabei $r_{G,min} = 1$ m.

Der Behälter sowie das Ausbreitungsgebiet weisen dabei eine Radialsymmetrie auf. Aufgrund der unterschiedlichen Ausbreitung der Partikel in verschiedene radiale Richtungen (u. a. bedingt durch die Gravitation und den Auftrieb) in den späteren Simulationen wird jedoch nur die Achsensymmetrie längs des Versuchsaufbaus herangezogen. Das bedeutet, dass nur eine Hälfte der Geometrie betrachtet werden muss. Daher wird die Geometrie in Längsrichtung bei 180° halbiert.

Die vollständige halbierte Geometrie bestehend aus Behälter (links), Rohr (mittig) und Ausbreitungsgebiet (rechts) ist in Abb. 3.2 dargestellt. In der Abbildung sind auch die einzelnen Segmente bzw. Segmentgrenzen zu erkennen, in die die Geometrie unterteilt wurde, um die Vernetzung der Geometrie zu vereinfachen. Die Aufteilung erfolgte dabei in insgesamt 36 Segmente, 10 für den Behälter, 12 für das Ausströmrrohr und 14 für das Ausbreitungsgebiet. Das Rohr war ursprünglich nur in 6 Segmente aufgeteilt. Auf ungefähr $1/3$ der Strecke vom Anfang des Rohres aus wurde das Rohr jedoch senkrecht unterteilt, um so eine Fläche für die späteren Injektionen der Partikel zu erhalten.

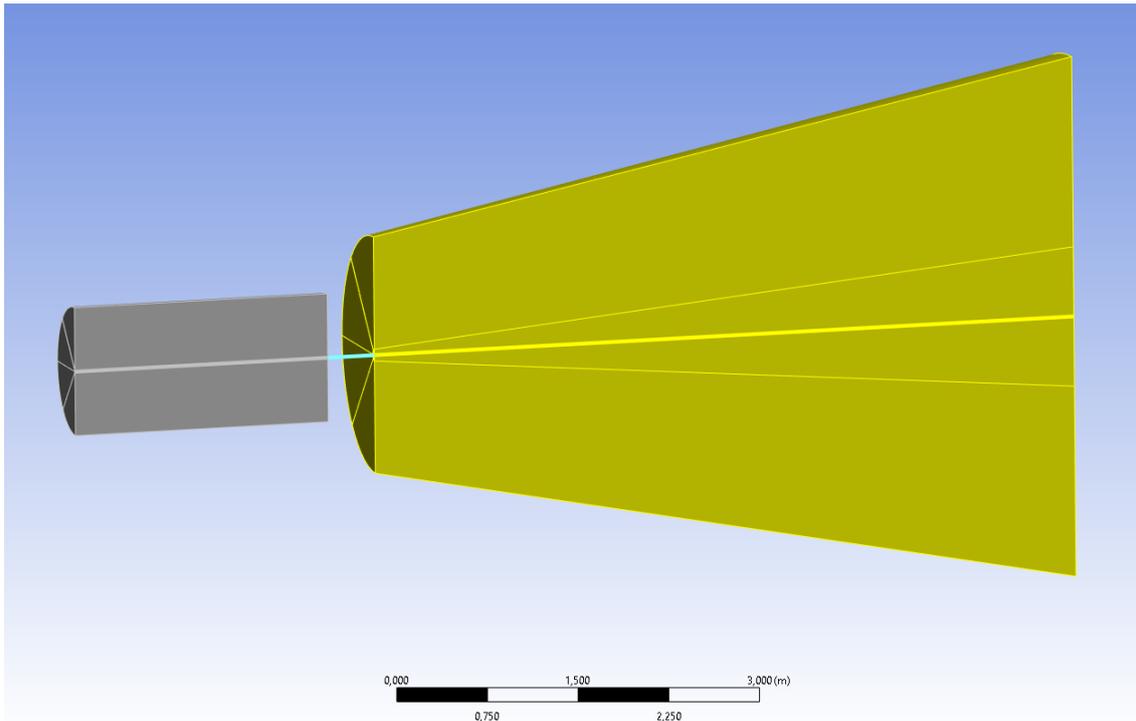


Abb. 3.2 Halbierte Geometrie des Aufbaus, der Behälter ist auf der linken Seite dargestellt, mittig das Ausströmrohr und rechts das Ausbreitungsgebiet

Für weitergehende Simulationen wird die Geometrie dahingehend angepasst, dass die Simulation des Behälters separat durchgeführt wird und damit aus der Simulation der Ausbreitung des Freistrahls herausfällt. Die Geometrie vereinfachte sich damit auf 26 Bereiche. Dieses Vorgehen hat den Vorteil, dass die benötigte Rechenzeit stark verkürzt wird. Anstelle des Behälters wird dann ein Pressure-Inlet (Druck-Einlass) am linken Ende des Rohres mit einer zeitabhängigen Funktion angenommen, welche sich aus der separaten Simulation des Behälters ergibt. Diese Vorgehensweise wird in Abschnitt 3.4 noch ausführlich behandelt.

3.1.2 Haube

Im vorhergehenden Abschnitt wurde die Geometrie eines dickwandigen TLB auf einen zylindrischen Behälter vereinfacht. In einer realen Transportkonfiguration ist der Behälter in der Regel zusätzlich noch von einer Haube umgeben, welche eine Ausbreitung des Freistrahls maßgeblich beeinflussen kann.

Im nächsten Schritt erfolgt daher eine Betrachtung der vorherigen Geometrie inklusive einer einhüllenden Haube. Dabei befindet sich der bereits in Abschnitt 3.1.1 verwendete Behälter mit einer Wandstärke von $L_R = 400 \text{ mm}$ (das Rohr in Abschnitt 3.1.1

symbolisierte diese Wandstärke) innerhalb einer Haube. Der Behälter wird dabei mittig am Boden der Haube platziert. Der Abstand zwischen der Außenwand des Behälters und der Haube beträgt dabei vorne/hinten bzw. links/rechts jeweils $a_c = 300 \text{ mm}$. In den Abb. 3.3 und Abb. 3.4 ist der schematische Aufbau inklusive der Haube und in den Abb. 3.5 und Abb. 3.6 sind die konstruierten Geometrien dargestellt. In Abb. 3.6 sind dabei die Festkörper (Wand und Haube) ausgeblendet und es werden nur die Bereiche gezeigt, in denen sich das Gas ausbreiten kann.

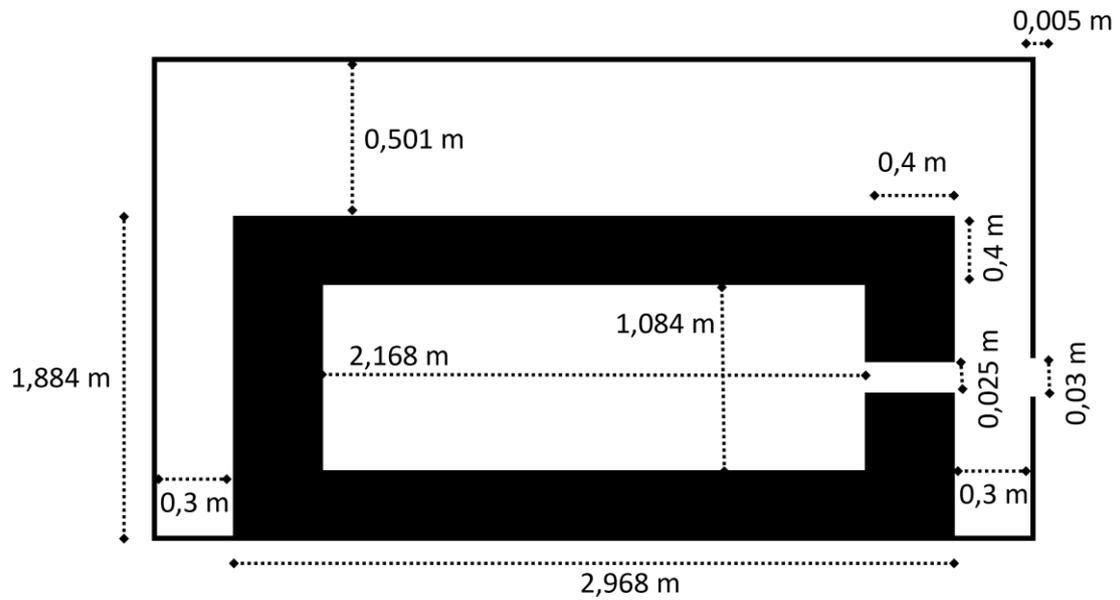


Abb. 3.3 Schematische Darstellung der Maße des Behälters mit einer darüber befindlichen Haube (Seitenansicht)

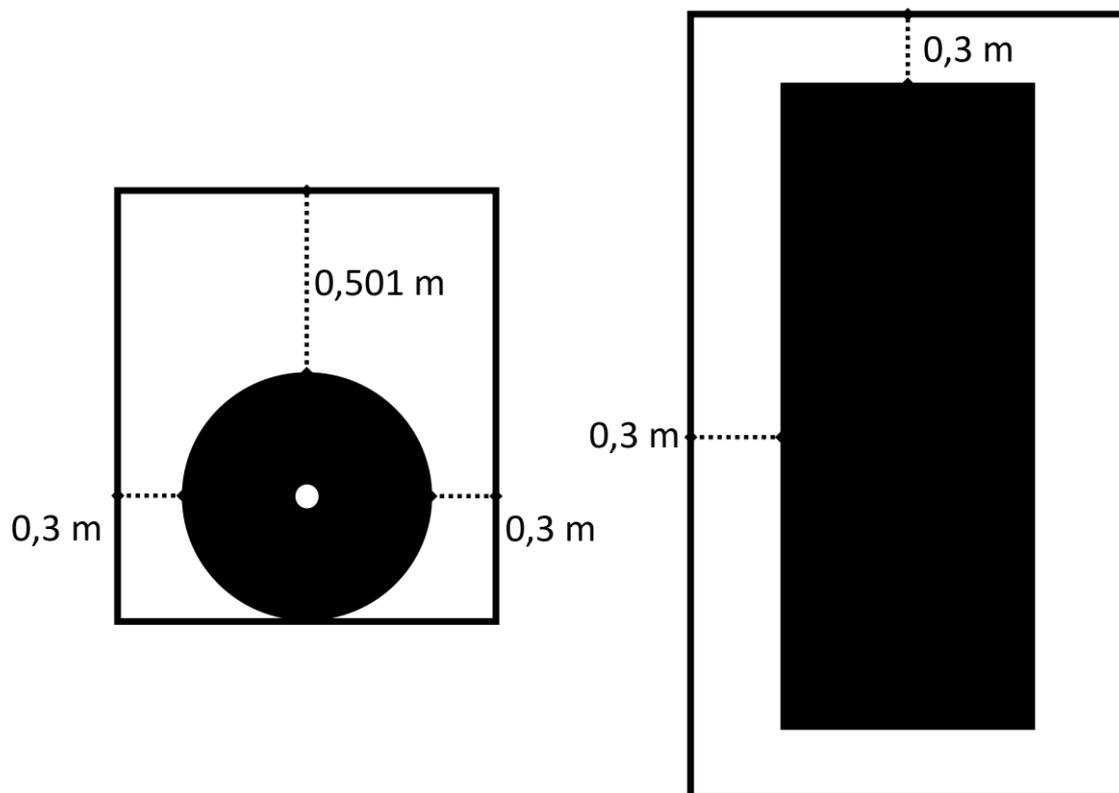


Abb. 3.4 Schematische Darstellung der Maße des Behälters mit einer darüber befindlichen Haube Front-/Stirnansicht (links) und Draufsicht (rechts)

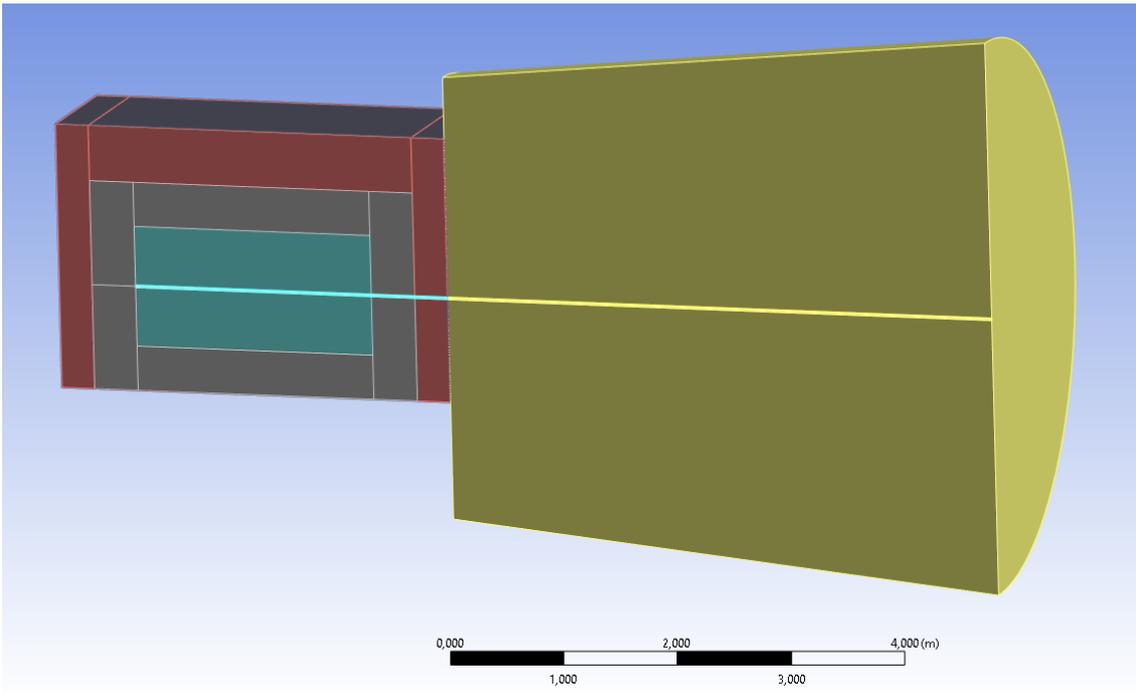


Abb. 3.5 Halbierte Geometrie des vollständigen Aufbaus inklusive Haube und Ausbreitungsgebiet (türkis: Behälterinnenraum inklusive Rohr, grau: Außenhülle Behälter und Haube, rot: Innenraum Haube, gelb: Ausbreitungsgebiet)

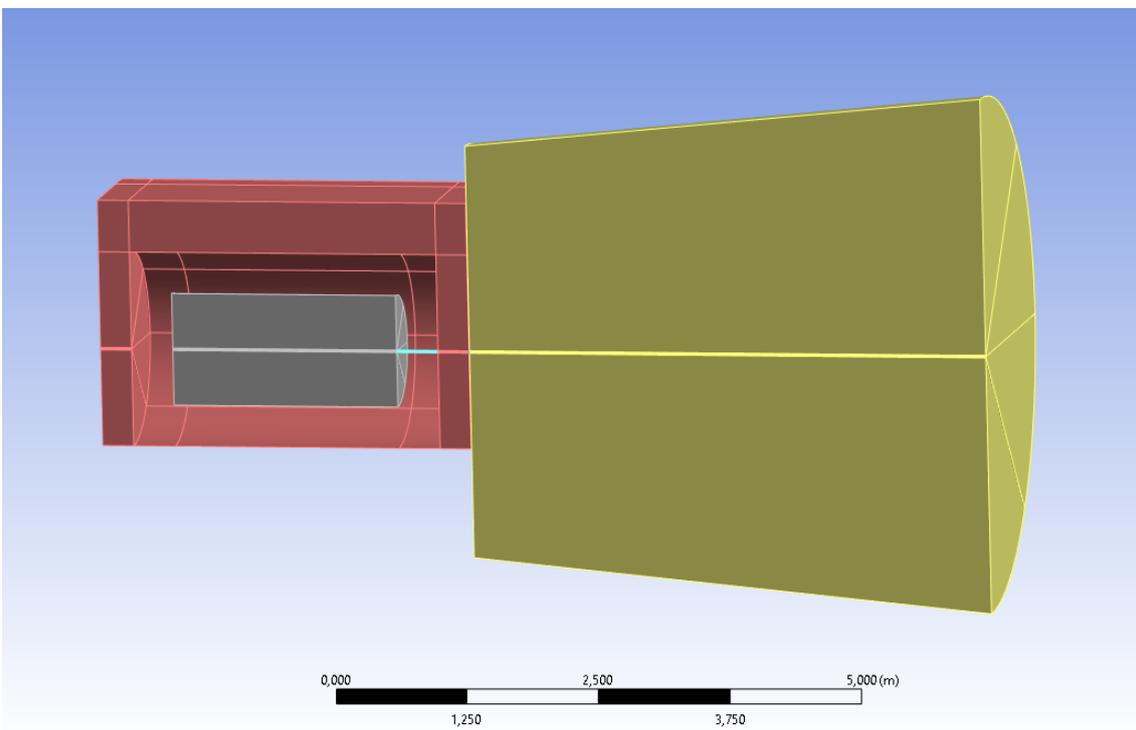


Abb. 3.6 Halbierte Geometrie des vollständigen Aufbaus ohne Festkörper inklusive Haube und Ausbreitungsgebiet (grau: Behälter, türkis: Rohr, rot: Haube, gelb: Ausbreitungsgebiet)

Um die benötigte Rechenleistung möglichst gering zu halten, wird für die Geometrie zunächst nicht die gesamte Haube, sondern nur die rechts liegende Wand als eine Art Lochblende konstruiert. Dies entspricht auch den zugehörigen Aufbauten der experimentellen Versuche /GRS 23/. In Abb. 3.7 und Abb. 3.8 sind die entsprechenden Geometrien dargestellt. Die Lochblende befindet sich dabei, entsprechend dem kompletten Aufbau, in einem Abstand von 0,3 m zum Ausgang des Rohres. Der Innendurchmesser der kreisförmigen Öffnung der Lochblende ist 30 mm groß und damit 5 mm größer als der Innendurchmesser des Rohres.

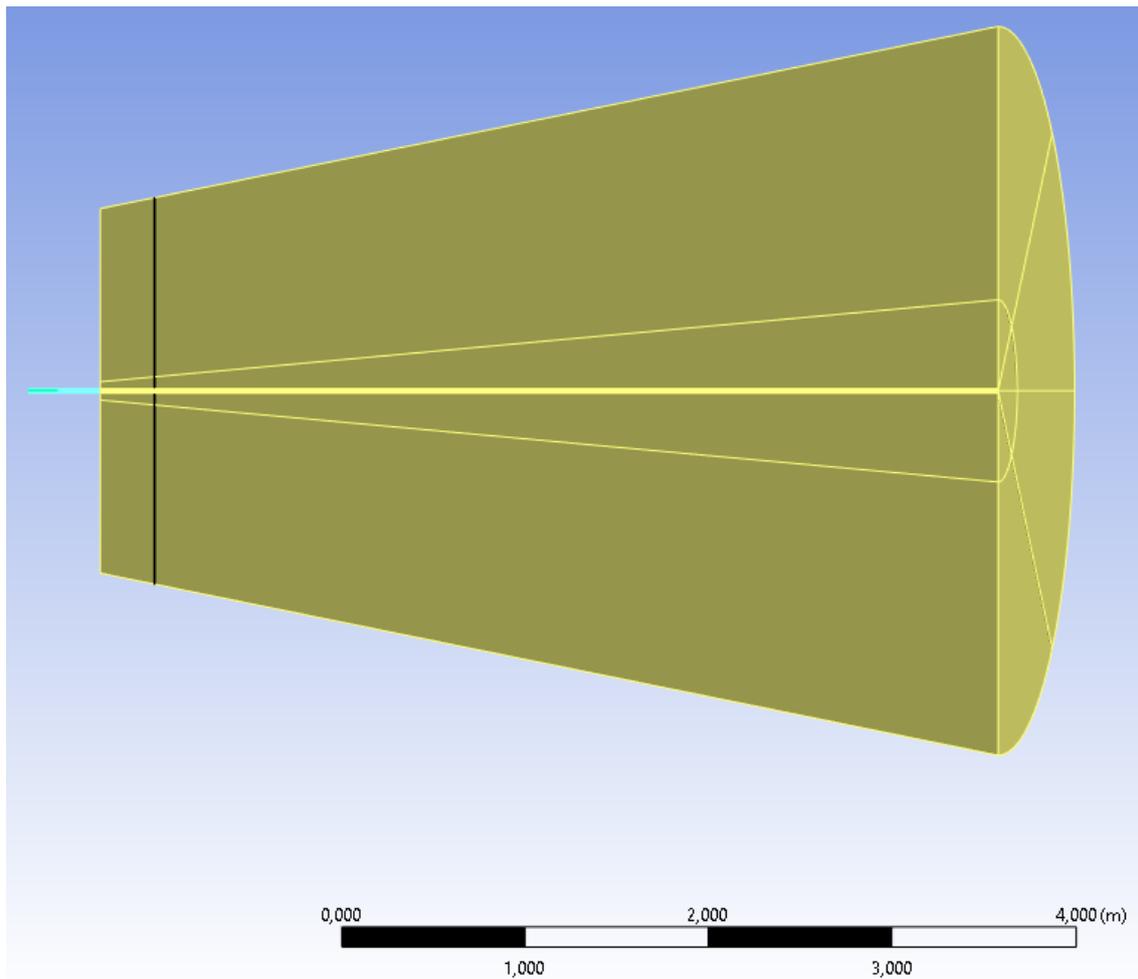


Abb. 3.7 Halbierte Geometrie des Aufbaus mit Lochblende (türkis: Rohr, gelb: Ausbreitungsgebiet, schwarz: Lochblende)

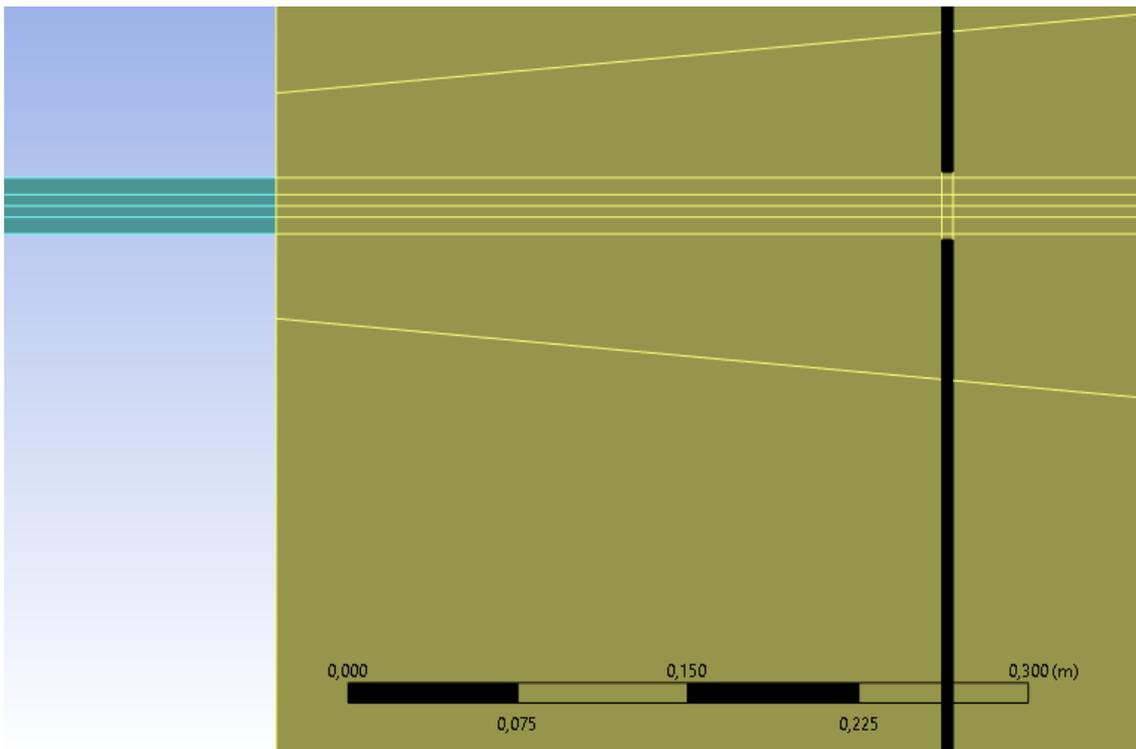


Abb. 3.8 Nahansicht des Übergangs vom Rohr zum Ausbreitungsgebiet für die halbierten Geometrie des Aufbaus mit Lochblende (türkis: Rohr, gelb: Ausbreitungsgebiet, schwarz: Lochblende)

3.2 Rechengitter

Das Rechengitter, auch Mesh genannt, ist eine räumliche Diskretisierung der physikalischen Geometrie, die in CFD-Simulationen zur Lösung der kontinuierlichen Strömungsgleichungen verwendet werden, welche in Abschnitt 2.1 eingeführt wurden. Das Netz unterteilt das Simulationsgebiet in kleine Kontrollvolumen (Zellen), in denen die Gleichungen diskretisiert und numerisch gelöst werden. In ANSYS Fluent ist die Qualität der Vernetzung ein entscheidender Faktor für die Genauigkeit und Effizienz der Simulation. Je kleiner die einzelnen Bereiche vernetzt sind, desto detaillierter wird die Berechnung, dabei ist jedoch zu beachten, dass die benötigte Rechenkapazität mit steigender Anzahl der Zellen ebenfalls ansteigt. Am wichtigsten ist es bei der Erstellung des Gitters darauf zu achten, dass die einzelnen Zellen an den vorhandenen Kanten gut aufeinandertreffen und keine Überlappungen bzw. hängende Knoten entstehen. Die Knoten sind dabei die Punkte, an denen die einzelnen Zellen aufeinandertreffen.

Die Art des erforderlichen Gitters hängt von der Komplexität der Geometrie und den Anforderungen an die Simulation ab. Beim hier betrachteten Fall handelt es sich um eine

relativ einfache Geometrie, die eine strukturierte Vernetzung ermöglicht, was vorteilhaft für die angestrebten Simulationen ist.

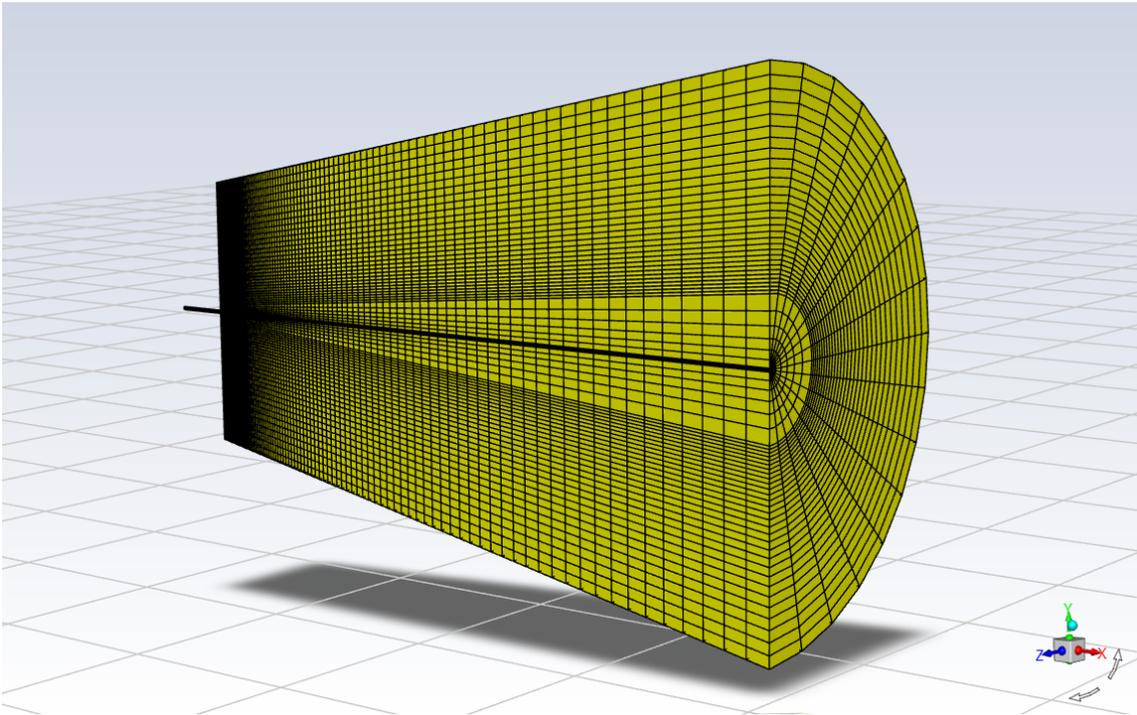


Abb. 3.9 Vernetzung des Rohres und des Ausbreitungsgebiets

Die Gittererstellung erfolgt von innen nach außen und eine Teilkomponente nach der anderen. In diesem Fall bedeutet das, dass zunächst die Rohrgeometrie, die sich durch den gesamten Aufbau zieht, vernetzt wird. Dabei wird für jede Kante eines Segments angegeben, wie viele Zellen das Netz in diesem Abschnitt enthalten soll. Bei der Größe der Zellen ist darauf zu achten, welche Zeitschrittweite bei den Berechnungen verwendet werden soll, um eine möglichst stabile und konsistente Simulation zu erhalten, was in der numerischen Strömungsmechanik durch die sogenannte Courant-Friedrichs-Lewy-Zahl (CFL) quantifiziert wird. Diese bestimmt sich aus der Geschwindigkeit v_F , der Zeitschrittweite Δt und der Zellgröße Δx zu:

$$CFL = \frac{v_F \cdot \Delta t}{\Delta x} \quad (3.1)$$

Gemäß /FER 02/ sind CFL Zahlen von 1-100 für die meisten Anwendung ausreichend, um stabile Lösungen zu generieren. Eine CFL Zahl von unter 1, bei der also maximal eine Zelle innerhalb eines Zeitschritts durchschritten wird, ist jedoch am günstigsten. Bei einer Geschwindigkeit von 100 m/s und einer Zellgröße von 1 mm würde demnach gelten:

$$CFL = \frac{100 \text{ m/s} \cdot \Delta t}{1 \text{ mm}} < 1 \quad (3.2)$$

$$\Delta t < \frac{1 \text{ mm}}{100 \text{ m/s}} = 1 \cdot 10^{-5} \text{ s}$$

Aufgrund der unterschiedlichen Geschwindigkeiten in den verschiedenen Bereichen des Ausbreitungsgebietes ist die Zellengröße für die verschiedenen Komponenten einzeln anzupassen, was beispielhaft in Abb. 3.10 dargestellt ist. Dort sind die Zellen zur Achse hin kleiner werdend, da dort die höchsten Strömungsgeschwindigkeiten auftreten können. Für die einzelnen Kanten kann ein Skalierungsfaktor angegeben werden, mit dem die Zellen im Verlauf der Kante größer bzw. kleiner werden, um die Größe der einzelnen Zellen entsprechend anzupassen. Insbesondere an Stellen mit großem Gradienten, wie hier beispielsweise der Übergang vom Rohrausgang zum Ausbreitungsgebiet, ist es wichtig drauf zu achten, dass das Netz dort fein genug ist. Insgesamt kann die Netzqualität über die Faktoren orthogonale Qualität, Aspect Ratio und Skewness überwacht werden, welche weiter unten näher erläutert werden. Für die durchgeführten Simulationen wird für die Geometrie, bestehend aus dem Rohr und dem Ausbreitungsgebiet, ein Netz mit über 64.000 Zellen und über 71.000 Knoten erstellt, welches in Abb. 3.9 dargestellt ist.

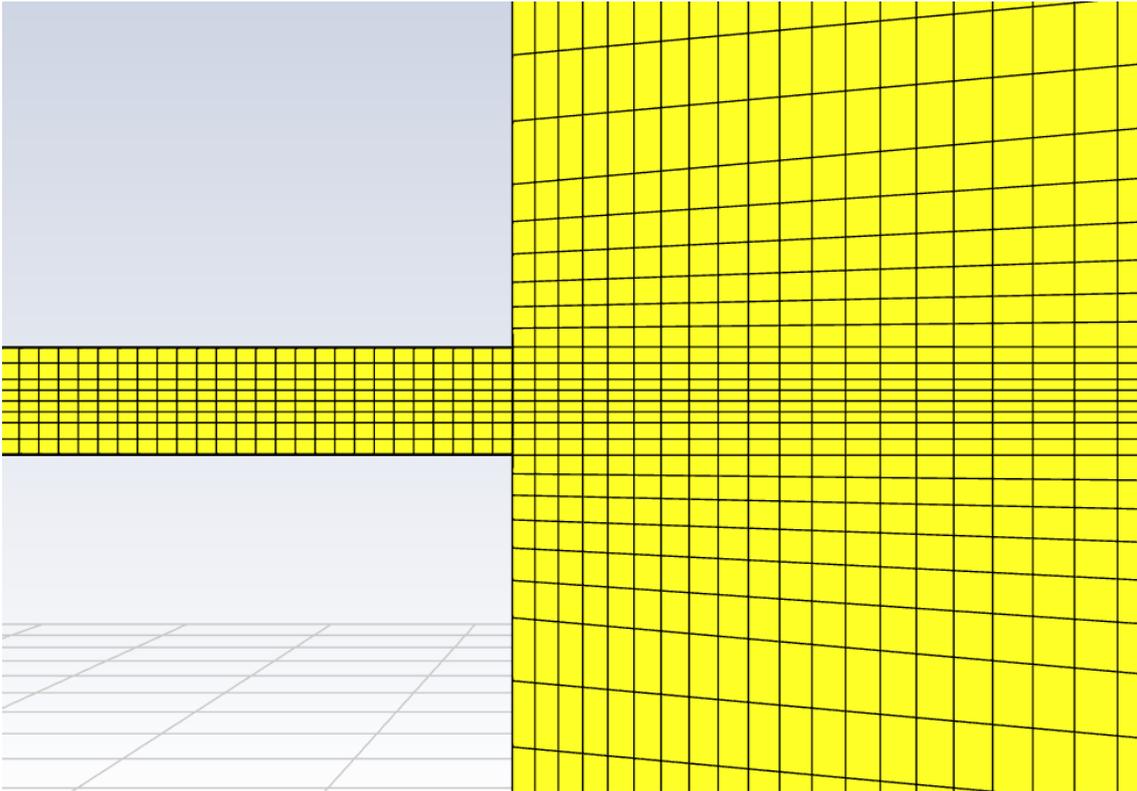


Abb. 3.10 Nahansicht des Übergangs der Vernetzung des Rohres zum Ausbreitungsgebiet

Wie oben erwähnt sind orthogonale Qualität, Aspect Ratio und Skewness wichtige Faktoren, um die Qualität von Rechengittern bei CFD-Simulationen bewerten zu können. Diese Faktoren sind in ANSYS dokumentiert und können für ein erzeugtes Gitter mit dem ANSYS Meshing Modul ermittelt werden.

Die orthogonale Qualität beschreibt auf einer Skala zwischen 0 und 1, wie orthogonal die Zellen des Gitters sind. Eine perfekt orthogonale Zelle hat dabei rechte Winkel zwischen allen benachbarten Zellkanten. Ein gutes Gitternetz sollte idealerweise möglichst orthogonale Zellen haben, da dies die Stabilität und Genauigkeit der numerischen Methode verbessert. Das in Abb. 3.9 dargestellt und im Weiteren verwendete Gitternetz hat eine mittlere orthogonale Qualität von 0,987 und besitzt somit eine sehr gute orthogonale Qualität.

Das Aspect Ratio ist das Verhältnis zwischen der längsten und der kürzesten Kante einer Zelle. Es wird oft als Verhältnis von Länge zu Breite in 2D oder von Länge zu Höhe zu Breite in 3D ausgedrückt. Ein Aspect Ratio von 1 (ideale quadratische oder kubische Zellen) ist optimal. Zellen mit hohen Aspect Ratios über 10 (z. B. sehr lange und schmale

Zellen) können zu numerischen Instabilitäten und Fehlern führen. Hohe Aspect Ratios sind besonders problematisch in Bereichen mit hohen Strömungsgradienten, da sie die Fähigkeit der Lösung einschränken, diese korrekt zu erfassen. Umgekehrt sind hohe Aspect Ratios in Bereichen mit geringen Strömungsgradienten, wie z.B. in Randbereichen eines Ausbreitungsgebietes, unkritisch. Das in Abb. 3.9 dargestellte und im Folgenden verwendete Gitter hat einen mittleren Aspect Ratio von 6,8. Es ist zu beachten, dass der Aspect Ratio stark variiert und im Rohrbereich, unmittelbar hinter dem Rohraustrittsbereich sowie entlang der Strahlachse deutlich kleiner als dieser Mittelwert ist. Am Rand des Ausbreitungsgebietes sind die Werte jedoch höher, da diese Bereiche weniger relevant sind und durch die geringere Anzahl an Gitterzellen die Rechenzeit niedriger gehalten werden kann.

Skewness beschreibt auf einer Skala zwischen 0 und 1 die Verzerrung einer Zelle und gibt an, wie weit die Zellform von einer idealen Form (z. B. Quadrat oder Würfel) abweicht. Eine Zelle mit geringer Verzerrung und einer Skewness kleiner als 0,1 hat eine Form, die der idealen Zelle näherkommt, während eine stark verzerrte Zelle (hohe Skewness) oft schwierig zu berechnen ist. Das in Abb. 3.9 dargestellt und im Weiteren verwendete Gitternetz hat eine mittlere Skewness von 0,002 und besitzt somit eine sehr gute Skewness.

3.3 Physikalische Modelle

Bei der Simulation einer partikelbeladenen Gasströmung mit dem Euler-Lagrange-Ansatz in ANSYS Fluent müssen verschiedene physikalische Modelle und Effekte berücksichtigt werden, um die Wechselwirkungen zwischen der kontinuierlichen Gasphase und der diskreten Partikelphase genau zu erfassen. Diese Modelle sind entweder bereits automatisch in ANSYS Fluent implementiert oder müssen manuell hinzugefügt werden, wenn sie für die Problemstellung relevant sind.

Drei entscheidende Aspekte hierbei sind die Auswahl geeigneter Turbulenzmodelle für die Gasphase, die Aktivierung und Konfiguration des Discrete Phase Model (DPM) für die Partikelphase und die Definition der physikalischen Eigenschaften der Partikel und die auf diese wirkenden relevanten Kräfte.

Die Gasphase muss in der Simulation durch ein geeignetes Turbulenzmodell beschrieben werden, um die turbulente Natur der Strömung korrekt abzubilden. Häufig verwendete Turbulenzmodelle in ANSYS Fluent sind:

- **k- ϵ -Modell:** Ein robustes und weit verbreitetes Modell, das die turbulenzkinetische Energie (k) und die Dissipation (ϵ) beschreibt. Es eignet sich gut für allgemeine Strömungsprobleme.
- **k- ω -Modell:** Ähnlich wie das k- ϵ -Modell, aber es verwendet die spezifische Dissipation (ω) anstelle der Dissipation. Es bietet Vorteile bei der Simulation von Strömungen mit starken Druckgradienten und Wandnähe.
- **Large Eddy Simulation:** Ein fortschrittlicheres Modell, das die großen Wirbelstrukturen direkt simuliert und nur die kleineren Wirbel modelliert. Es ist genauer, aber auch rechenintensiver, und wird oft für detaillierte Studien der Turbulenzstrukturen verwendet.

Das DPM ermöglicht die Simulation von Partikeln, Tropfen oder Blasen als diskrete Elemente in der kontinuierlichen Gasphase. Bei der Konfiguration des DPM müssen nach der Aktivierung von ANSYS Fluent die Quellen und Bedingungen definiert werden, unter denen die Partikel in die Strömung eingebracht werden (z.B. Eintrittsort, Injektionsrate, Geschwindigkeit). Außerdem müssen die Interaktionsmodelle definiert werden, die die Wechselwirkungen zwischen den Partikeln und der Gasphase bestimmen.

Darüber hinaus müssen die physikalischen Eigenschaften der Partikel, d.h. Form, Dichte und Größe, spezifiziert werden, um ihr Verhalten in der Strömung korrekt zu modellieren. Von diesen Größen hängen wiederum verschiedene Kräfte ab, die auf die Partikel wirken und ihre Bewegung beeinflussen. Die Schubkraft wird von der umgebenden Gasströmung auf die Partikel ausgeübt. Häufig verwendete Modelle sind der Stokes-Widerstand für kleine Partikel und der Schubkoeffizient für größere Partikel. Abhängig von der Masse der Partikel wirken auch die Trägheitskraft und die Gewichtskraft auf die Partikel, was besonders wichtig ist, wenn die vertikale Bewegung der Partikel von Bedeutung ist. Weitere Kräfte sind die Auftriebskraft, die senkrecht zur Strömungsrichtung wirkt, die thermophoretische Kraft, die aufgrund von Temperaturgradienten in der Gasphase auf die Partikel wirkt, und die Saffman-Kraft, die auf Partikel in Scherströmungen wirkt.

Ein weiterer Aspekt ist die Partikel-Turbulenz-Wechselwirkung, die die turbulente Dispersion und die turbulente Modulation umfasst. Die turbulente Dispersion beschreibt die Verteilung der Partikel durch turbulente Fluktuationen in der Gasphase. Diese

Dispersion kann mit dem Stochastic-Tracking-Modell, auch Random-Walk-Modell genannt, simuliert werden. Hierbei wird die zufällige Bewegung der Partikel durch die turbulente Strömung berücksichtigt, was zu einer realistischen Verteilung der Partikel im Strömungsfeld führt. Die turbulente Modulation bezieht sich auf die Rückwirkung der Partikel auf die Turbulenz der Gasphase. Diese Wechselwirkung wird insbesondere bei hohen Partikelkonzentrationen relevant, da die Partikel die Eigenschaften der Turbulenz beeinflussen können. Die Anwesenheit von Partikeln kann die Energieverteilung und die Struktur der Turbulenz in der Gasphase verändern, was wiederum die Dynamik der gesamten Strömung beeinflusst.

Darüber hinaus wird ein Modell zur Beschreibung der Partikel-Wand-Wechselwirkung benötigt. Die Partikel-Wand-Wechselwirkung umfasst die verschiedenen Wechselwirkungen, die auftreten, wenn Partikel auf Wände treffen. Dazu gehören insbesondere die Partikelabscheidung und die Partikelhaftung. Diese beschreiben die Prozesse, bei denen Partikel auf die Wand auftreffen, abprallen, anhaften oder sich ablagern. Faktoren wie Aufprallgeschwindigkeit und -winkel sowie die Materialeigenschaften der Wand und der Partikel beeinflussen diese Prozesse.

3.4 Rand- und Anfangsbedingungen

Bei der Simulation einer partikelbeladenen Gasströmung im Euler-Lagrange-Ansatz in ANSYS Fluent müssen spezifische Rand- und Anfangsbedingungen sowohl für die Gasphase als auch für die Partikelphase festgelegt werden. Diese Bedingungen beeinflussen die Genauigkeit und Stabilität der Simulation. Im Weiteren werden zunächst die wichtigsten zu definierenden Bedingungen für die Gas- und Partikelphase aufgeführt, bevor in den folgenden Unterabschnitten die Bedingungen bezüglich des Drucks sowie der Partikel separat betrachtet werden.

Als Anfangsbedingungen einer CFD-Simulation können, wenn diese nicht den Normalbedingungen entsprechen sollen, das Druck-, Geschwindigkeits- und Temperaturfeld sowie die Volumenanteile der verschiedenen Phasen, wenn z. B. verschiedene Gase in der Simulation betrachtet werden, für ausgewählte Bereiche der Geometrie initial festgelegt werden. Diese initiale Festlegung wird als Patching bezeichnet. Mit diesem Patching-Verfahren können Partikel in einen Raumbereich eingebracht werden. Eine Alternative stellt die Injektion dar, bei der nicht nur initial, sondern pro Zeitschritt eine definierte Partikelmenge mit definierter Partikelgrößenverteilung, Geschwindigkeit,

Größe und Dichte eingebracht wird. Diese Aspekte werden in Abschnitt 3.4.2 näher beschrieben.

Die Randbedingungen für CFD-Simulationen legen fest, wo sich Einlässe (Inlet) und Auslässe (Outlet) befinden und welche Eigenschaften diese haben. Außerdem muss festgelegt werden, welche Wechselwirkungen an Wänden (Wall) beziehungsweise Festkörpern auftreten. Insbesondere bei Partikeln ist relevant, ob diese abprallen, haften, zerbrechen oder sich ablagern. Darüber hinaus können Symmetrien (Symmetry) festgelegt werden, also Flächen, die auf der einen Seite eine definierte Region haben und deren andere Seite als symmetrisch gespiegelt zu dieser Region angenommen wird und daher nicht explizit berechnet werden muss, da ein gleiches Ergebnis erwartet wird. Wie in Abschnitt 3.1 gezeigt, werden in den in diesem Vorhaben durchgeführten Simulationen aus Symmetriegründen nur 180 ° der Geometrie betrachtet. Die Schnittebene durch die Geometrie entspricht in diesem Fall der Symmetrie-Fläche.

Als Einlass wird bei den in diesem Vorhaben durchgeführten Simulationen, wie bereits in Abschnitt 3.1 aufgeführt, zwischen den Simulationen mit und ohne Behälter unterschieden. So wird bei den Simulationen mit Behälter kein Einlass verwendet, sondern mit der oben beschriebenen Patching-Methode ein Anfangsüberdruck im Behälter definiert. Wird der Behälter weggelassen, so dient der Rohranfang als Druckeinlass (Pressure-Inlet). Für diesen Einlass wird eine zeitabhängige Druckfunktion definiert. Wie diese Druckfunktion ermittelt wird, ist in Abschnitt 3.4.1 beschrieben.

Als Auslass wird ein Druckauslass (Pressure-Outlet) definiert, der am Rand des Ausbreitungsgebiets liegt. Dieser Auslass sorgt dafür, dass der Druck konstant gehalten wird und die Gas-Strömung sowie die Partikel ungehindert das Simulationsgebiet verlassen können.

Die Wand wird stationär mit Haftbedingung und einer standardmäßigen Rauigkeit gemäß ANSYS Fluent definiert. In dieser Simulation sind Wechselwirkungen mit der Wand lediglich für den Bereich des Rohres relevant, da das Ausbreitungsgebiet nur entgegen der Strömungsrichtung durch eine Wand begrenzt ist und daher dort praktisch keine Partikel auftreten. Aufgrund der Haftbedingung ist die Strömungsgeschwindigkeit des Gases an den Rohrwänden immer Null, so dass sich dort eine Grenzschicht ausbildet.

3.4.1 Druck

Im Rahmen dieses Vorhabens wird das druckgetriebene Ausströmen aus einem Behälter mit anfänglichem Überdruck simuliert. Daher ist der Druck die entscheidende Größe bei der Festlegung der Anfangsbedingungen. In einer Simulation, die diesen Prozess vollständig abbilden soll, kann ein zylindrischer Behälter simuliert werden, in den durch Patching ein bestimmter Überdruck und ein bestimmtes Gas, beispielsweise Helium mit einem Überdruck von 0,5 bar, im Behälter initialisiert wird. Beim Einströmen des Heliums in das Rohr ergibt sich ein zeitabhängiger Druckverlauf, der den nachfolgenden Ausström- und Ausbreitungsprozess bestimmt.

Wenn die Druck-Zeit-Funktion bekannt ist, kann sie alternativ auch als Funktion am Einlass des Rohres verwendet werden und der Behälter kann aus der Simulation entfernt werden. Dadurch wird das Rechengebiet wesentlich kleiner und die Berechnungen können schneller durchgeführt werden. Um die Simulation so effizient wie möglich zu gestalten, sind drei Ansätze denkbar, um diese Druck-Zeit-Funktion zu bestimmen, ohne den Behälter in jeder Simulation darstellen zu müssen.

Als erste Option kann die im Rahmen der Experimente in /GRS 23/ ermittelte Druck-Zeit-Funktion verwendet werden. Diese Option kommt völlig ohne Berechnungen aus, hat aber auch einige Nachteile, da der Druck mit einem Sensor in der Mitte des Behälters gemessen wurde. Somit beschreibt die dort aufgenommene Funktion den zeitlichen Druckverlauf im Behälter und nicht direkt am Rohreintritt. Weiterhin ist zu beachten, dass in den Simulationen meist idealisierte Randbedingungen hinsichtlich des Gasmodells, Wärmeübergangs und Eigenschaften des Rohres wie Rauigkeit und Einlaufverhalten angenommen werden. Der im Experiment gemessene Druckverlauf wird jedoch u.a. maßgeblich durch nicht quantifizierte Reibungsverluste im Rohr und die Einlaufbedingungen des Rohres bestimmt. Eine direkte Übernahme des gemessenen Druckverlaufs aus dem Experiment in die Simulation ist daher problematisch, da die zugrundeliegenden Bedingungen beziehungsweise Annahmen teilweise unterschiedlich sind. Diese Option wird daher im Rahmen dieses Vorhabens nicht genutzt.

Eine zweite Option, die die Probleme der ersten Option umgeht, ist die Simulation des Behälters und die Speicherung der Druck-Zeit-Funktion am Rohreintritt. Bei dieser Option können die Annahmen und Randbedingungen für die Simulation des Druckverlaufs und für die Simulation der Freistrahlausbreitung gleich gehalten werden. Eine solche Simulation ist zwar auch rechenintensiv, muss aber für festgelegte Behälterparameter

(Gas, Überdruck und Volumen) nur einmal durchgeführt und kann dann immer wieder verwendet werden. Lediglich bei einer Variation dieser Behälterparameter ist eine solche Simulation zu wiederholen.

Um auch bei Variationen der Behälterparameter eine schnelle Lösung zu erhalten, bietet sich eine dritte Option an. Statt eine numerische Berechnung in Form einer CFD-Simulation kann der Behälter vereinfacht auch mit einer Differentialgleichung für ein bestimmtes Volumen beschrieben werden und die Änderung des Drucks durch eine numerische Lösung dieser Differentialgleichung bestimmt werden.

Im Folgenden werden die Ergebnisse der zweiten und dritten Option vorgestellt und miteinander verglichen. Aus der zweiten Option ergeben sich diskrete Druckwerte für bestimmte Zeitpunkte. Mit einem Fit dieser Werte kann eine entsprechende Druck-Zeit-Funktion bestimmt werden. Bei der dritten Option kann eine Differentialgleichung für die Änderung des Drucks aufgestellt werden. Diese kann dann für bestimmte Startbedingungen und ein bestimmtes Zeitintervall gelöst werden, so dass eine Druck-Zeit-Funktion vorliegt.

Zur Ermittlung der Differentialgleichung für die Druckänderung wird auf die in /FIS 20/ beschriebenen Berechnungsschritte auf der Basis eines Strömungsmodells nach /ZIE 18/ zurückgegriffen. Bei diesem Modell wird die Strömung eines kompressiblen Gases mit einem eindimensionalen Geschwindigkeitsfeld betrachtet. Es wird von einer isentropen Zustandsänderung, einer vernachlässigbaren Höhenänderung, einem deutlich größeren Behälter- als Rohrdurchmesser und einem, im Vergleich zum Trägheitsdruckverlust, kleinen Reibungsdruckverlust, ausgegangen. Aus diesem Modell mit den beschriebenen Annahmen lässt sich eine Gleichung für die querschnittsgemittelte Geschwindigkeit am Rohreintritt aufstellen.

Über die Massenbilanz des Gases im Behälter kann mit der idealen Gasgleichung und der oben beschriebenen querschnittsgemittelten Geschwindigkeit am Rohreintritt eine Gleichung für die Druckänderung im Behälter aufgestellt werden. Mit kleinen Anpassungen gegenüber /FIS 20/ für den vorliegenden Fall ergibt sich folgende Differentialgleichung:

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{R \cdot T \cdot K \cdot p_0^{-\alpha}}{M \cdot V} \cdot \left(\frac{\pi}{4} \cdot d^2\right) \cdot \sqrt{\left(\frac{-2 \cdot \rho_0}{\alpha \cdot (1 + E)}\right) \cdot (p^{2\alpha} - p_A^{-\alpha} \cdot p^{3\alpha})} \quad (3.3)$$

Der Faktor α stellt das in Formel (3.4) aufgezeigte Verhältnis des Isentropenexponenten K aus der isentropen Zustandsänderung dar. Der Isentropenexponent K eines Gases ist das Verhältnis der Wärmekapazität eines Gases bei konstantem Druck C_P zur Wärmekapazität eines Gases bei konstantem Volumen C_V :

$$\alpha = \frac{K - 1}{K} \quad (3.4)$$

Die sonstigen Parameter in der Formel (3.3) sind die ideale Gaskonstante R , der Druckverlustbeiwert durch das Rohr E , der geometrische Rohrdurchmesser d sowie die Umgebungsdruck p_A . Außerdem werden das Volumen V , die Temperatur T und der initiale Druck p_0 im Behälter benötigt. Weitere Parameter sind die molare Masse M und Dichte ρ_0 des Gases. Die initiale Gasdichte ρ_0 am Rohreintritt kann berechnet werden über:

$$\rho_0 = p_A^{\frac{1}{K}} \cdot p_0^{\frac{K-1}{K}} \cdot \frac{M \cdot T}{R} \quad (3.5)$$

Die Lösung der Differentialgleichung für ein gegebenes Zeitintervall und gegebene Anfangsbedingungen kann mit dem Python-Paket SciPy gelöst werden. Unter der Annahme eines mit Helium ($M = 4E-3$ kg/mol, $K = 1,67$) gefüllten Behältervolumens von $V = 2$ m³ mit einem Anfangsüberdruck $p_0 = 0,5$ bar, einer Temperatur in Anlehnung an /GRS 23/ von $T = 308,15$ K, einem Rohrdurchmesser von $d = 25$ mm und einem Druckverlustbeiwert, also einem Maß dafür, wie stark das Rohr den Strömungsdruck reduziert, von $E = 1,5$ /BEA 07/ kann eine Lösung für den Zeitraum bis 5 s berechnet werden. Es werden dabei diskrete Werte für das bestehende Anfangswertproblem berechnet. Eine Funktion kann dann durch eine Interpolation oder einen Fit dieser Werte ermittelt werden. Außerdem kann ANSYS Fluent auch statt einer Funktion Wertepaare (Druck-Zeit) direkt einlesen.

In der folgenden Abbildung ist diese Funktion zusammen mit den Druckwerten einer CFD-Simulation mit den gleichen Annahmen dargestellt. Somit können die Ergebnisse der oben diskutierten zweiten und dritten Option miteinander verglichen werden.

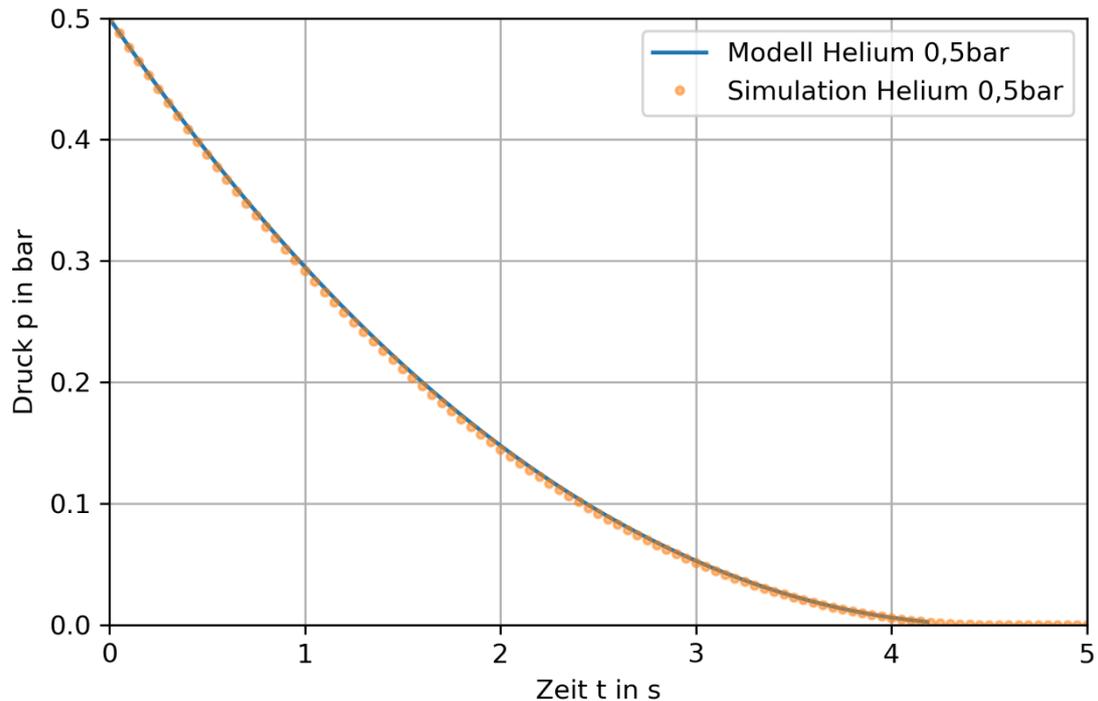


Abb. 3.11 Vergleich zweier Druck-Zeit-Funktionen eines Behälters, berechnet mit CFD-Simulation und Lösung einer Differentialgleichung

Es ist zu erkennen, dass das oben eingeführte Differentialgleichungsmodell und die CFD-Simulation sehr gut zusammenpassen und daher mit diesem Modell zuverlässig die gleichen Druck-Zeit-Funktionen ermittelt werden können wie mit einer vollständigen CFD-Simulation. Daher wird dieses Modell im Folgenden zur Berechnung einer Druck-Zeit-Funktion für den Druckeintritt am Rohreintritt verwendet.

Mit dem vorliegenden Modell können die Druck-Zeit-Funktionen für verschiedene Anfangsbedingungen bestimmt werden. So lassen sich Ausströmdauer und Verlauf sehr schnell ermitteln. Die folgende Abbildung zeigt beispielhaft einige Variationen. Die Bezeichnungen geben dabei das Gas und den Überdruck an. Die weiteren Angaben sind Abweichungen von den zuvor beschriebenen Annahmen. So wird in einem Fall ein Behältervolumen von $V = 4 \text{ m}^3$ und in einem anderen Fall eine Temperatur von $T = 600 \text{ K}$ angenommen.

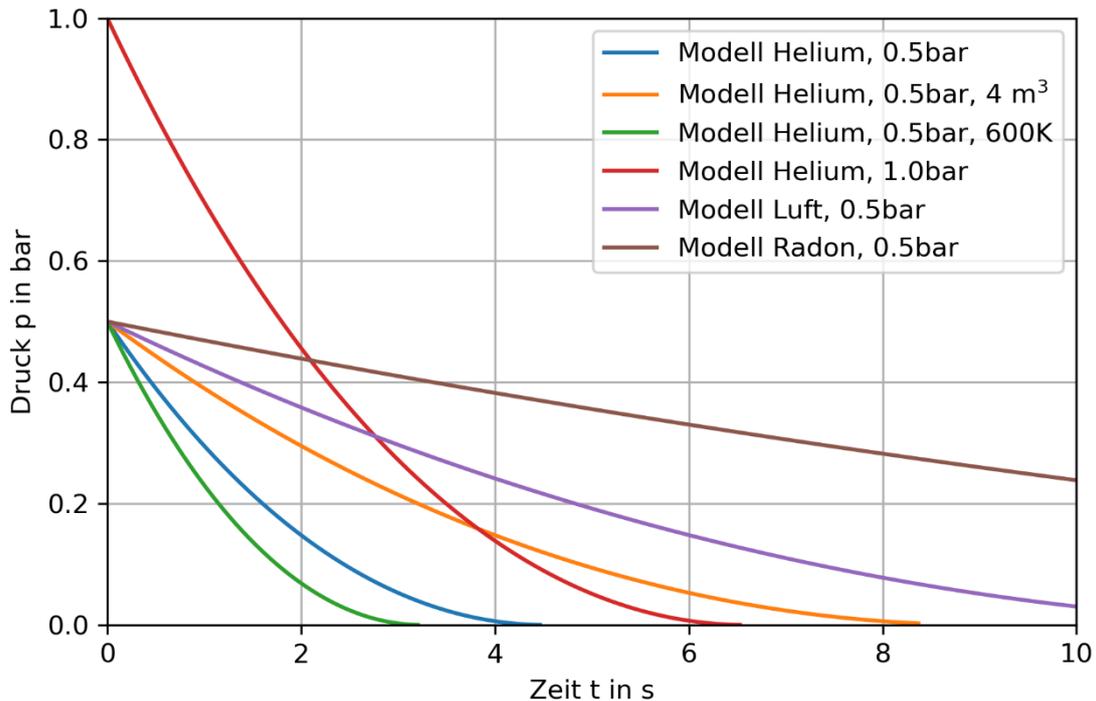


Abb. 3.12 Vergleich von Druck-Zeit-Funktionen eines Behälters, berechnet mit einem Differentialgleichungsmodell für unterschiedliche Bedingungen

In Abb. 3.12 ist die Abhängigkeit des Druckverlaufs von verschiedenen Faktoren gut zu erkennen. Beim Vergleich von Helium, Luft und Radon ist zu erkennen, dass der Ausströmvorgang mit steigender molarer Masse stark zunimmt. Der Ausströmvorgang, der in Abb. 3.12 nicht vollständig dargestellt ist, um die Unterschiede in den ersten zehn Sekunden besser erkennen zu können, dauert bei Luft etwa 14,3 s und bei Radon etwa 20 s. Bei den vier verschiedenen Varianten eines mit Helium gefüllten Behälters ist zu erkennen, dass bei einem doppelt so großen Behälter der Ausströmvorgang etwa doppelt so lange dauert, bei einem doppelt so hohen Anfangsüberdruck etwa eineinhalbmal so lange dauert und dass bei einer höheren Anfangstemperatur der Ausströmvorgang beschleunigt wird.

3.4.2 Partikel

Die Implementierung einer Partikelphase mit dem DPM (s. Abschnitt 3.3) erfordert mehrere Schritte, von der Definition der Partikelquellen bis hin zur Anpassung der numerischen Einstellungen. Die diskrete Phase im DPM wird als eine Sammlung von Partikeln behandelt, die in einer kontinuierlichen Phase (z. B. Gas) transportiert werden. Dabei können die Partikel mit der Strömung interagieren. Die diskrete Phase bzw. die Partikel

müssen zunächst hinsichtlich Dichte, Partikeldurchmesser und, bei Variation des Durchmessers, der Partikelgrößenverteilung definiert werden. Anschließend muss die Erzeugung der Partikel (Injektion) mit der Partikelquelle und deren Eigenschaften festgelegt werden. Neben der Wahl des genauen Startpunktes und der Anfangsbedingungen der Partikel ist insbesondere der Massen- oder Volumenstrom der Partikel relevant.

Für die folgenden Simulationen werden die Partikeleigenschaften, die Partikelgrößenverteilung (s. Abschnitt 3.4.2.1) und der Massenstrom bzw. die Partikelbeladung des Gases (s. Abschnitt 3.4.2.2) an die Referenzpartikel aus den Experimenten /GRS 23/ angelehnt, um eine Vergleichbarkeit zu gewährleisten. In den nachfolgenden Simulationen werden diese Parameter ebenfalls variiert.

Als Injektionsort für die Partikel wird analog zu den Experimenten /GRS 23/ das Rohr gewählt. Daher werden die Partikel etwa 165 mm vom Behältervolumen entfernt über den gesamten Rohrquerschnitt verteilt in das Rohrvolumen injiziert. Die Anzahl der Lagen von Gitterzellen, in die die Partikel injiziert werden, hängt von der Partikelbeladung und damit von der Anzahl der pro Zeitschritt zu injizierenden Partikel ab. Die Position des Injektionsortes variiert jedoch auch bei hoher Partikelbeladung nur um wenige Millimeter. Die Partikel durchlaufen das Rohr also alle ca. 235 mm.

In /GRS 23/ wurde die Beschleunigungsstrecke bis zum Erreichen von 95 % der Strömungsgeschwindigkeit für den vorliegenden Aufbau berechnet, um den Unterschied zwischen einer Injektion 165 mm vom Behältervolumen entfernt und einer Injektion direkt am Rohreinlauf in den Behälter quantifizieren zu können. Grundsätzlich kann in Anlehnung an /GRS 23/ gesagt werden, dass der Abstand bei höheren Geschwindigkeiten und größeren Partikeln exponentiell zunimmt. Partikel mit einem AED von 10 μm benötigen selbst bei Geschwindigkeiten von 550 m/s nur eine Beschleunigungsstrecke von weniger als 100 mm. Bei Partikeln mit einem AED von 100 μm beträgt dieser Weg bei dieser Geschwindigkeit bereits ca. 3000 mm. Größere Partikel, die für die folgenden Untersuchungen nur bedingt relevant sind, werden daher bei hohen Gasgeschwindigkeiten innerhalb eines 400 mm langen Rohres nicht vollständig auf Strömungsgeschwindigkeit beschleunigt. Bei kleineren Partikeln, insbesondere im lungengängigen Bereich (kleiner als 10 μm), ist der Unterschied zwischen den beiden Injektionsorten jedoch vernachlässigbar, da die Beschleunigung innerhalb weniger Zentimeter erfolgt.

In weitergehenden Simulationen wird von der an /GRS 23/ angelehnten Vorgehensweise der Injektion im Rohr abgewichen und eine Injektion innerhalb des Behälters betrachtet

(s. Abschnitt 4.5). Damit kann untersucht werden, wie sich die Partikelgrößenverteilung und die Geschwindigkeitsverteilung in Abhängigkeit von den verschiedenen Injektionsarten unterscheiden.

Die Eigenschaften der Partikel werden ebenfalls analog zu den Experimenten aus /GRS 23/ gewählt. Die Dichte ρ der dort verwendeten Partikel beträgt ca. 2500 kg/m^3 . Die weiteren Eigenschaften der dort verwendeten transparenten Kalk-Natron-Glas-Partikel sind für die in diesem Vorhaben betrachtete Fragestellung nicht weiter relevant. Da innerhalb einer Simulation die Dichte aller Partikel immer gleich gehalten wird, können im Folgenden die Bezeichnungen kleine und leichte Partikel sowie große und schwere Partikel synonym verwendet werden.

3.4.2.1 Partikelgrößenverteilung

Die in den Experimenten /GRS 23/ eingesetzten Referenzpartikel lagen in einem geometrischen Partikelgrößenintervall von $10 \mu\text{m} \leq d_P \leq 110 \mu\text{m}$. Die Partikelgrößenverteilung ist in der folgenden Abb. 3.13 dargestellt. Dabei ist zu beachten, dass hier bereits eine Umrechnung der geometrischen Partikeldurchmesser in AED durchgeführt wurde, welcher in Abschnitt 2.2.3 eingeführt wurde. Die Verteilung ist als normierte Massenverteilung q_3 dargestellt. Im Folgenden wird für kumulative Verteilungen die Bezeichnung Q_n und für differentiellen Verteilungen q_n verwendet. Der Index $n = 0, 1, 2$ oder 3 bezeichnet die Dimension des Partikels, auf die sich die Verteilung bezieht ($0 = \text{Anzahl}$, $1 = \text{Durchmesser}$, $2 = \text{Fläche}$ und $3 = \text{Volumen bzw. Masse}$).

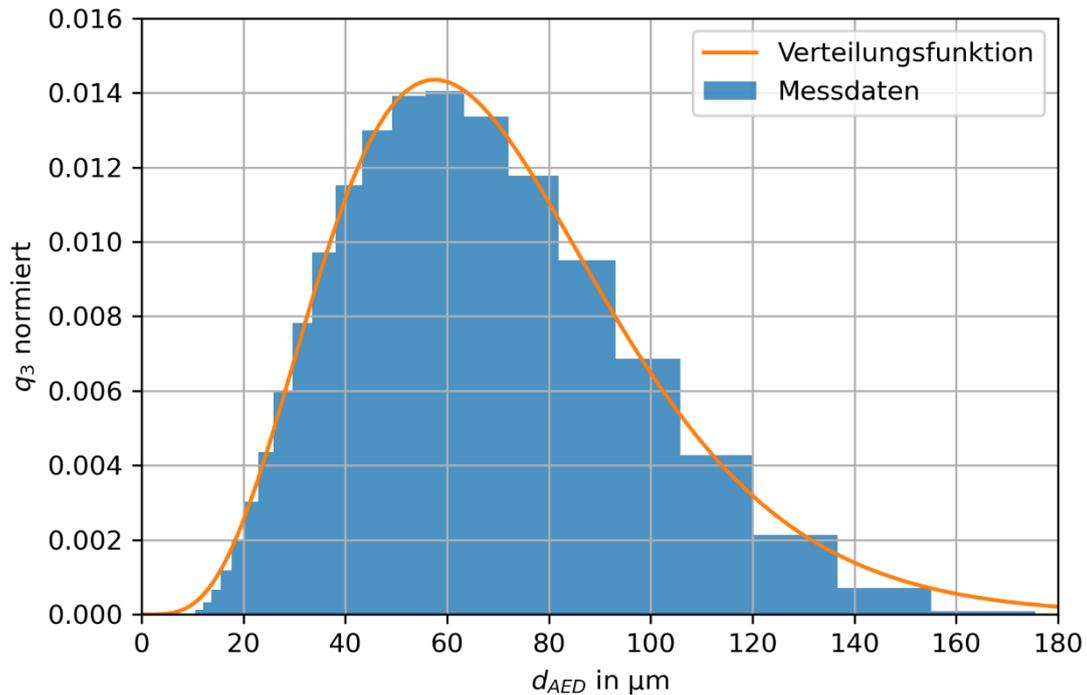


Abb. 3.13 Normierte Massenverteilung q_3 der Referenzpartikel in /GRS 23/

Die Verteilung der Referenzpartikel, welche in der Abbildung oben zu sehen ist, entspricht einer Gamma-Verteilung der Form:

$$q_3(d) = \frac{\beta^\alpha}{\gamma} \cdot d^{\alpha-1} \cdot \exp(-\beta \cdot d) \quad (3.6)$$

Hierbei ist d der Durchmesser, α und β die Parameter der Funktion, welche die Form und Skalierung bestimmen, und γ der Funktionswert der Gamma-Verteilung. Aus diesen Parametern lassen sich der Erwartungswert, die Varianz und die Schiefe der Verteilung, welche die Art und Stärke der Asymmetrie der Gamma-Verteilung beschreibt, bestimmen. Für die oben dargestellte Verteilungsfunktion der Referenzpartikel ergeben sich für diese Parameter folgende Werte:

$$\alpha = 5,29 \qquad \beta = 0,07 \mu\text{m}^{-1} \qquad \gamma = 34,85$$

Das Maximum der Verteilung liegt demnach bei:

$$\max(d) = \frac{\alpha - 1}{\beta} = 57,54 \mu\text{m} \quad (3.7)$$

Da es sich hierbei jedoch um eine Gamma-Verteilung handelt, ist, anders als bei einer Normalverteilung, das Maximum nicht gleich dem Erwartungswert. Der Erwartungswert ist der Wert, den der Durchmesser im Mittel annimmt. Bei einer rechtsschiefen Verteilung, wie sie hier vorliegt, ist der Erwartungswert also größer als das Maximum der Verteilung. Für den vorliegenden Fall ergibt sich ein Wert von:

$$\mu(d) = \frac{\alpha}{\beta} = 70,94 \text{ } \mu\text{m} \quad (3.8)$$

Die Varianz ist die mittlere quadratische Abweichung der gemessenen Durchmesser von diesem Erwartungswert. Die Standardabweichung ergibt sich wiederum aus der Quadratwurzel dieses Wertes:

$$\sigma(d) = \sqrt{\sigma^2(d)} = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta^2}} = 32,79 \text{ } \mu\text{m} \quad (3.9)$$

Die Schiefe beschreibt die Art und Stärke der Asymmetrie der Gamma-Verteilung. Bei Werten größer Null ist die Verteilung rechtsschief, bei Werten kleiner Null ist sie links-schief. Im vorliegenden Fall beträgt die Schiefe:

$$S(X) = \frac{2}{\sqrt{\alpha}} = 0,87 \quad (3.10)$$

3.4.2.2 Partikelbeladung

Die Partikelbeladung in den Experimenten /GRS 23/ betrug 0,1 g/l bzw. 0,1 kg/m³. Diese Beladung wird daher auch für die Referenzsimulationen verwendet. Darüber hinaus werden auch Simulationen mit einer Variation dieser Beladung durchgeführt, wie in Abschnitt 4.2.3 näher erläutert wird.

In ANSYS Fluent kann die Partikelbeladung nicht direkt eingestellt werden, sondern muss über Einstellungen bei der Injektion und den Zeitschritten realisiert werden. Bei einer Injektion in ANSYS Fluent wird ein Volumen definiert, in das die Partikel mit ihren zu definierenden Eigenschaften (Größe, Dichte etc.) injiziert werden. Die Masse der injizierten Partikel kann entweder über den Partikelmassenstrom, also einer Partikelmasse pro Zeit (kg/s), oder über eine Anzahl von Streams pro Zeitschritt eingestellt werden. Ein

Stream ist eine definierte Einheit von Partikeln, die in einem Zeitschritt in ein Gitterelement injiziert werden.

Bei der in diesem Vorhaben betrachteten Strömung handelt es sich um einen hochtransienten Prozess, bei dem die austretende Gasmasse nicht konstant, sondern zeitabhängig ist. Bei konstanter Partikelbeladung müssen der Massenstrom des ausströmenden Gases und der Massenstrom der ausströmenden Partikel im gleichen Verhältnis stehen. Daher ist auch der Massenstrom der Partikel nicht konstant, sondern hat etwa die gleiche Zeitabhängigkeit wie das Gas. In ANSYS Fluent kann der Massenstrom bei der Injektion jedoch nicht als Funktion, sondern nur als Konstante in Form einer Masse pro Zeit definiert werden. Da der Massenstrom eine Zeitabhängigkeit besitzen soll, wird die Injektion daher durch Streams pro Zeitschritt realisiert. Da die Zeitschrittgrößen nicht konstant sind, kann über die Anzahl der Streams pro Zeitschritt und die Variation der Zeitschrittgröße ein zeitabhängiger Massenstrom eingestellt werden.

Es muss also bestimmt werden, wie groß die Partikelmasse pro Zeitschritt sein soll. Dazu wird zunächst untersucht, wie groß der Massenstrom der Partikel sein soll. Da dieser in einem konstanten Verhältnis zum Massenstrom des Gases über die Partikelbeladung steht, wird dieser bestimmt. Dies kann über die Verwendung von Werten aus den Experimenten in /GRS 23/ zusammen mit physikalischen Betrachtungen erfolgen.

Zur Bestimmung des Massenstroms und damit auch des Druck- und Temperaturverlaufs wird im Folgenden nicht der in Abschnitt 3.4.1 für den Druck beschriebene Weg über die Lösung einer Differentialgleichung gewählt, sondern ein einfacherer Ansatz. Dieser Ansatz kann mit den im Vorhabensverlauf gewonnenen Erkenntnissen und insbesondere mit den in Abschnitt 3.4.1 entwickelten Methoden für zukünftige Simulationen angepasst werden, stellt jedoch zunächst eine ausreichende Beschreibung des Massenstroms dar. Darüber hinaus werden in Abschnitt 4.5 Simulationen zur numerischen Berechnung des Massenstroms aus einem mit einem Gas-Partikel-Gemisch gefüllten Behälter beschrieben, die auch für weitergehende Simulationen genutzt werden können.

In /GRS 23/ wurden der Druck und die Temperatur im Inneren des Behälters erfasst. Mit vereinfachten Annahmen kann die Helium Masse über die thermische Zustandsgleichung eines idealen Gases bestimmen werden:

$$m_G(t) = \frac{p(t)}{T(t)} \cdot \frac{V}{R_S} \quad (3.11)$$

Für den Anfangspunkt ($t = 0$ s) und den Endpunkt ($t = 5$ s) des zu betrachtenden Ausströmprozesses liegen Daten für Temperatur und Druck vor. So kann aus den experimentellen Ergebnissen der Referenzversuche aus /GRS 23/ ein Temperaturabfall von $T(t = 0 \text{ s}) = 298,15 \text{ K}$ auf $T(t = 5 \text{ s}) = 268,15 \text{ K}$ und ein linearer Druckabfall von $p(t = 0 \text{ s}) = 1,5 \text{ bar}$ auf $p(t = 5 \text{ s}) = 1 \text{ bar}$ abgelesen werden. Aufgrund der kurzen Prozessdauer von wenigen Sekunden, der vergleichsweise geringen Druckdifferenz und keinem nennenswerten Wärmeaustausch, werden beide Verläufe als linear fallend angenommen. Dieser vereinfachte Ansatz ermöglicht eine schnelle und dennoch ausreichende Beschreibung des transienten Verhaltens. Die Richtigkeit dieses Ansatzes wird später überprüft, indem die in /GRS 23/ gemessene integrale ausgetragene Partikelmasse mit der berechneten verglichen wird. Durch diesen Vergleich kann sichergestellt werden, dass die vereinfachte lineare Annahme den realen Austrag hinreichend genau beschreibt.

Das Volumen V des Behälters ist etwa 2 m^3 und die spezifische Gaskonstante R_S für Helium beträgt $2077 \text{ J} \cdot \text{Kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$. Damit ergibt sich für die zeitabhängige Masse:

$$m_G(t) = \frac{1,5 - 1 \cdot t}{298,15 - 6 \cdot t} \cdot \frac{2}{2077} \quad (3.12)$$

Die Anfangsmasse des Heliums beträgt somit $m(t = 0 \text{ s}) = 0,5050 \text{ kg}$ und die Masse am Ende des Ausströmprozesses $m(t = 5 \text{ s}) = 0,3743 \text{ kg}$. Es sind also $0,1307 \text{ kg}$ Helium ausgetreten, was unter Normalbedingungen bei einer Helium Dichte von $0,1785 \text{ kg/m}^3$ einem Volumen von $0,7321 \text{ m}^3$ entspricht. Bei einer Partikelbeladung von $0,1 \text{ kg/m}^3$ werden demnach etwa $0,073 \text{ kg}$ Partikel ausgetragen. Die in den Versuchen /GRS 23/ gemessene ausgetragene Partikelmasse liegt mit gewissen Schwankungen bei ca. $0,075 \text{ kg}$. Somit liegt der berechnete Wert im gleichen Größenbereich und die getroffenen Annahmen können als plausibel angesehen werden. Um die zeitliche Änderung der Heliummasse zu bestimmen, muss die Ableitung der Heliummassenabgabe ermittelt werden:

$$\frac{d}{dt} m_G(t) = \frac{d}{dt} \left(\frac{1,5 - 1 \cdot t}{298,15 - 6 \cdot t} \cdot \frac{2}{2077} \right) = \frac{58,0394}{(t - 49,6917)^2} \quad (3.13)$$

Um den Massenstrom der Partikel zu erhalten, muss die Massenänderung des Heliums mit dem Verhältnis der Masse der Partikel zur Masse des Heliums multipliziert werden. Dieses Verhältnis ergibt sich aus der Dichte des Heliums von $0,1785 \text{ kg/m}^3$ und der Partikelbeladung von $0,1 \text{ kg/m}^3$. Da nun nicht mehr die Änderung im Behälter, sondern die Änderung während des Ausströmens betrachtet wird, muss die zeitliche Betrachtung geändert und der Zeitpunkt des Endes des Ausströmens als neuer zeitlicher Nullpunkt definiert werden, so dass für die Zeit $t'' = (5-t) \text{ s}$ einzusetzen ist:

$$\frac{d}{dt} m_P(t') = \frac{m_P}{V_G} \cdot \frac{d}{dt} m_G(t') = \frac{0,1}{0,1785} \cdot \frac{58,0394}{((5-t) - 49,6917)^2} \quad (3.14)$$

$$\frac{d}{dt} m_P(t) = \frac{32,5151}{(-t - 44,6917)^2} = \frac{32,5151}{(t + 44,6917)^2}$$

Um zu überprüfen, ob diese Funktion auch die oben bereits ausgerechneten Massen wiedergibt, kann das Integral von $t = 0 \text{ s}$ bis $t = 5 \text{ s}$ berechnet werden:

$$\int_0^5 \frac{d}{dt} m_P(t) dt = \int_0^5 \frac{32,5151}{(t + 44,6917)^2} dt = 0,0732 \quad (3.15)$$

Die ausgetragene Heliummasse von $t = 0 \text{ s}$ bis $t = 5 \text{ s}$ beträgt demnach 73 g , was mit den obigen Berechnungen übereinstimmt und im Messbereich der Experimente liegt. Die Formel für den Massenstrom der Partikel kann daher verwendet werden. Die Masse der in einem Zeitschritt Δt injizierten Partikel bestimmt sich über:

$$m_P(t, \Delta t) = \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \frac{d}{dt} m_P(t) dt = \left[\frac{32,5151}{(t + 44,6917)} \right]_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \quad (3.16)$$

Wie in Abschnitt 3.4.2.1 beschrieben, liegt eine Partikelgrößenverteilung vor, so dass nicht nur eine bestimmte Gesamtpartikelmasse, sondern auch eine bestimmte Partikelmassenverteilung vorliegt. Die Masse der einzelnen Partikel kann über den geometrischen Durchmesser und die Dichte, welche 2500 kg/m^3 beträgt, bestimmt werden:

$$m_P(d_P, \rho_P) = \rho_P \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{d_P}{2} \right)^3 \quad (3.17)$$

Da nicht beliebig viele Partikel gleichzeitig injiziert werden können und die Anzahl der Partikel einer bestimmten Masse bzw. Größe der Partikelgrößenverteilung entsprechen soll, muss bei der Injektion eine Gewichtung mit diesem Faktor berücksichtigt werden. Dazu wird die Masse der Partikel mit dem Anteil der Partikel der jeweiligen Partikelgröße an der Gesamtmenge der Partikel multipliziert, um eine gewichtete Masse zu erhalten. Die so berechnete Partikelmasse und die gewichtete Partikelmasse sind in Tab. 3.1 aufgeführt. Am Ort der Injektion wird also eine bestimmte Masse an Partikeln erzeugt. Die Wahrscheinlichkeit bzw. die Häufigkeit, mit der ein Partikel einer bestimmten Masse erzeugt wird, hängt von der Partikelgrößenverteilung gemäß Abschnitt 3.4.2.1 ab. Wie in Tab. 3.1 zu sehen ist, hat eine Einheit von Partikeln, deren Durchmesser, entsprechend der in der Spalte „Anteil“ angegebenen Häufigkeit, verteilt sind, ein Gewicht von $1,28\text{E}-10$ kg. Dies ist daher die Masse, welche im Folgenden pro Stream erzeugt wird.

Tab. 3.1 Geometrischer Durchmesser und Massenverteilung der verwendeten Partikel

Durchmesser in μm	Anteil	Gewicht in kg	Anteil mal Gewicht in kg
2,42	2,40E-05	1,86E-14	4,45E-19
2,75	3,09E-05	2,72E-14	8,41E-19
3,12	3,44E-05	3,98E-14	1,37E-18
3,55	4,12E-05	5,86E-14	2,41E-18
4,03	4,12E-05	8,57E-14	3,53E-18
4,58	4,12E-05	1,26E-13	5,18E-18
5,21	3,44E-05	1,85E-13	6,37E-18
5,92	3,09E-05	2,72E-13	8,39E-18
6,72	1,04E-04	3,97E-13	4,13E-17
7,64	8,69E-04	5,84E-13	5,07E-16
8,68	2,41E-03	8,56E-13	2,06E-15
9,86	4,84E-03	1,25E-12	6,07E-15
11,20	8,71E-03	1,84E-12	1,60E-14
12,70	1,44E-02	2,68E-12	3,86E-14
14,50	2,22E-02	3,99E-12	8,86E-14
16,40	3,20E-02	5,77E-12	1,85E-13
18,70	4,39E-02	8,56E-12	3,76E-13
21,20	5,73E-02	1,25E-11	7,15E-13
24,10	7,12E-02	1,83E-11	1,30E-12
27,40	8,44E-02	2,69E-11	2,27E-12
31,10	9,52E-02	3,94E-11	3,75E-12
35,30	1,02E-01	5,76E-11	5,87E-12
40,10	1,03E-01	8,44E-11	8,69E-12
45,60	9,79E-02	1,24E-10	1,22E-11
51,80	8,63E-02	1,82E-10	1,57E-11
58,90	6,97E-02	2,67E-10	1,86E-11
66,90	5,03E-02	3,92E-10	1,97E-11
76,00	3,13E-02	5,75E-10	1,80E-11
86,40	1,56E-02	8,44E-10	1,32E-11
98,10	5,25E-03	1,24E-09	6,49E-12
111,00	6,80E-04	1,79E-09	1,22E-12
127,00	3,21E-05	2,68E-09	8,61E-14
	1,00		1,28E-10

Um den Massenstrom wie berechnet umzusetzen, muss innerhalb eines Zeitschritts Δt eine bestimmte Masse an Partikel erzeugt werden. Diese Masse m_P welche innerhalb eines Zeitschritts erzeugt werden soll, sowie die Zusammensetzung dieser Masse in Bezug zur Partikelgrößenverteilung wurde oben berechnet. Es wurde außerdem eine gewichtete Partikelmasse berechnet, welcher der erzeugten Masse pro Stream m_P/n entspricht. Die Zeitschrittgröße $\Delta t(t)$, welche sich über die Dauer der Simulation ändert, kann in ANSYS Fluent aus der Simulation entnommen werden. Mit diesen Faktoren lässt sich die benötigte Anzahl an Streams pro Zeitschritt $n/\Delta t$ bestimmen:

$$m_P(t, \Delta t) = \frac{m_P}{n} \cdot \frac{n}{\Delta t} \cdot \Delta t(t) \quad (3.18)$$

$$\frac{n}{\Delta t} = \frac{m_P(t, \Delta t)}{\Delta t(t)} \cdot \frac{n}{m_P}$$

Mit dieser Formel und den oben eingeführten Methoden lässt sich demnach für jede Simulation ein Massenstrom umsetzen. Für die in Abschnitt 4.2 näher erläuterte Simulation eines partikelbeladenen Freistrahls wurden beispielsweise 121 Streams pro Zeitschritt verwendet, mit denen eine Partikelbeladung von $0,1 \text{ kg/m}^3$ umgesetzt werden konnte.

3.5 Vorgehen

Wie zu Beginn des Kapitels erläutert, kann die Durchführung von CFD-Simulationen in sechs Schritte unterteilt werden:

1. Geometrie (s. Abschnitt 3.1)
2. Rechengitter (s. Abschnitt 3.2)
3. Physikalische Modelle (s. Abschnitt 3.3)
4. Rand- und Anfangsbedingungen (s. Abschnitt 3.4)
5. Simulation
6. Postprocessing

Die ersten vier Schritte (Preprocessing) wurden in den vorangegangenen vier Abschnitten beschrieben und im Zusammenhang mit den in diesem Vorhaben durchgeführten Simulationen erläutert.

Die technische Umsetzung der ersten vier Schritte erfolgt auf lokalen Rechnern. Die Randbedingungen sind im Modell enthalten, die Anfangsbedingungen werden jedoch erst zu Beginn der Simulation festgelegt. Das Gesamtmodell, bestehend aus Geometrie, Rechengitter, verwendeten physikalischen Modellen und Randbedingungen, wird in einer Datei gespeichert, die dann für verschiedene Simulationen mit variierenden Anfangsbedingungen wiederverwendet werden kann.

Die numerische Berechnung bzw. Simulation (Processing) wird nach Abschluss dieser vorbereitenden Schritte durch den Start der Simulation in ANSYS Fluent initiiert. Dabei werden die bereits eingeführten Navier-Stokes-Gleichungen für die Gasphase gelöst und damit die Geschwindigkeit, der Druck und andere relevante Strömungsgrößen innerhalb der Rechendomäne berechnet. Weiterhin werden die Bewegungsgleichungen für die Partikel berechnet und die Trajektorie der Partikel durch das Strömungsfeld verfolgt. Die Wechselwirkungen zwischen der diskreten und der kontinuierlichen Phase werden durch eine gegenseitige Kopplung der Kräfte und Energien berücksichtigt. ANSYS Fluent iteriert zwischen der Lösung der kontinuierlichen und der diskreten Phase, bis Konvergenz für den jeweiligen Zeitschritt erreicht ist. Bei einer transienten Simulation, wie sie in diesem Vorhaben vorliegt, wird vor dem Start der Simulation festgelegt für welche Zeitdauer oder für welche Anzahl an Zeitschritten die Simulation durchgeführt werden soll. Am Ende der Simulation werden alle Daten der Gasphase und der Partikelphase für diesen Zeitpunkt automatisch gespeichert. Da bei einer transienten Simulation auch die Zwischenergebnisse zu anderen Zeitpunkten relevant sind, muss vor dem Start der Simulation festgelegt werden, zu welchen Zeitpunkten die Daten gespeichert werden sollen. Am Ende der Simulation stehen somit Daten-Dateien für diskrete Zeitpunkte zur Verfügung.

Die Durchführung von CFD-Simulationen ist aufgrund der Komplexität der physikalischen Modelle, der notwendigen feinen räumlichen und zeitlichen Auflösung sowie des iterativen Lösungsverfahrens der nichtlinearen gekoppelten Gleichungssysteme sehr rechenintensiv. Aus diesem Grund werden diese Simulationen auf einem Rechencluster durchgeführt, wo sie schneller und effizienter durchgeführt werden können. Neben dem größeren Arbeitsspeicher ist dort vor allem die Rechenkapazität (Anzahl der Prozessoren) deutlich höher und eine Parallelisierung der Rechenprozesse kann genutzt werden. Die technische Umsetzung der fünften Stufe (Processing) erfolgt daher im Rahmen dieses Vorhabens auf den Clustern der GRS. Dazu wird das zuvor erstellte Gesamtmodell verwendet und die Anfangsbedingungen wie Gaszusammensetzung, Überdruck und

Temperatur festgelegt. Außerdem werden die Simulationszeit und die Häufigkeit der Speicherung der Zwischenergebnisse angegeben und anschließend die Simulation gestartet.

Im Anschluss an die Simulation können mit diesen Daten-Dateien verschiedene Strömungsgrößen wie Geschwindigkeit, Druck und Temperatur sowie Partikeleigenschaften wie Position, Geschwindigkeit und Größe im sogenannten Postprocessing innerhalb der Rechendomäne analysiert werden. Dies kann durch die Darstellung von Strömungsfeldern und Partikeltrajektorien zur Analyse und Interpretation von Strömungsphänomenen sowie durch statistische Analysen der Partikelbewegung und -verteilung erfolgen. Eine Zusammenfassung der Ergebnisse wird im folgenden Abschnitt 4 gegeben. Dabei werden die wichtigsten Erkenntnisse sowie beispielhafte Darstellungen aus dem Postprocessing vorgestellt.

Die technische Realisierung des Postprocessings erfolgt auch hier wieder auf lokalen Rechnern. Da die generierten Daten dauerhaft archiviert werden, können diese Daten zu einem späteren Zeitpunkt für weitere Fragestellungen erneut ausgewertet werden.

4 Ergebnisse und Analyse

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der durchgeführten Simulationen dargestellt und analysiert. Zur Einordnung der nachfolgenden Darstellung ist anzumerken, dass die Zielsetzung hierbei nicht die Durchführung einer spezifischen Simulation für eine ganz konkrete Situation ist. Vielmehr liegt der Fokus dieses Vorhabens auf der Entwicklung eines Grundkonzeptes zur Simulation des Ausströmverhaltens aus TLB infolge einer Hohlladungseinwirkung, welches anschließend auf unterschiedliche Randbedingungen und Fragestellungen angewendet werden kann. Die Ergebnisse stellen daher zunächst dieses Grundkonzept vor und zeigen beispielhafte Anwendungen für bestimmte Randbedingungen. Darüber hinaus werden jedoch auch einige Einflussgrößen im Rahmen der Analyse näher betrachtet.

Um die Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu gewährleisten, werden die in Abschnitt 3.1 beschriebene Geometrie, und das in Abschnitt 3.2 beschriebene Rechengitter bei den Simulationen möglichst gleich gehalten. Die in Abschnitt 3.3 beschriebenen physikalischen Modelle hängen unter anderem von den in Abschnitt 3.4 beschriebenen Rand- und Anfangsbedingungen ab, die aus Gründen der Vergleichbarkeit gleich gehalten werden, sofern nicht eine bestimmte Parametervariation untersucht werden soll. Insgesamt können die durchgeführten Simulationen in fünf Kategorien eingeteilt werden:

- **Gasfreistrahler** (Abschnitt 4.1): Simulation eines mit Überdruck gefüllten Behälters mit einer Öffnung, aus der ein einphasiger Freistrahler austritt. Relevante Variationen der Anfangs- und Randbedingungen sind hier insbesondere die Größe des Behälters, der Druck im Behälter sowie das Behältergas.
- **Partikelbeladener Freistrahler** (Abschnitt 4.2): Das Grundscenario ist wie beim Gasfreistrahler, jedoch werden Partikel in das Ausströmrohr injiziert, so dass sich ein partikelbeladener Freistrahler bildet. Relevante Variationen der Anfangs- und Randbedingungen sind hier insbesondere die Partikelbeladung sowie die Partikelgrößenverteilung und das Partikelmaterial.
- **Haube** (Abschnitt 4.3): Aufbauend auf den beiden vorhergehenden Szenarien wird vor den Behälter ein geometrisches Hindernis gesetzt, das die Ausbreitung des Freistrahlers beeinflusst. In Anlehnung an die Versuche /GRS 23/ handelt es sich dabei entweder um eine Lochblende oder um unterschiedlich detaillierte Variationen des schematischen Aufbaus einer Förderhaube.

- **Wechselwirkung** (Abschnitt 4.4): Aufbauend auf den ersten beiden Szenarien wird eine Explosion vor dem Behälter simuliert, so dass die Wechselwirkung des Freistrahls mit dieser Explosion analysiert werden kann.
- **Partikel im Behälter** (Abschnitt 4.5): Es wird nur der Behälter ohne Ausbreitungsgebiet simuliert. Als Anfangsbedingungen werden ein Überdruck im Behälter und eine zufällige Gleichverteilung der Partikel angenommen. Neben dem Druckverlauf wird insbesondere die Partikelgrößenverteilung beobachtet.

Bei ANSYS Fluent Simulationen wird in jedem Zeitschritt für jede Zelle des Rechengitters sowie für jeden Partikel eine Vielzahl physikalischer Parameter berechnet. Es kann vorab festgelegt werden, wie oft diese Zwischenergebnisse gespeichert werden sollen. Am Ende der Simulation stehen diese dann als zeitabhängige Ergebnisse zur weiteren Auswertung und Analyse zur Verfügung. Die relevantesten Größen im Rahmen dieses Projektes sind für die Zellen die Geschwindigkeit, der Druck sowie die Temperatur des Gases und für die Partikel ist neben der Geschwindigkeit auch deren Größe relevant. Aus diesen physikalischen Parametern lassen sich einige Größen bestimmen, die zur Quantifizierung des Freistrahls und des aufgestellten Modells verwendet werden können.

Der Druck- und Temperaturverlauf im Behälter sind wichtige Größen für den Vergleich des Ausströmprozesses aus dem Behälter mit anderen Simulationen. Außerdem kann aus dem Druck- und Temperaturverlauf im Behälter über die Bernoulli-Gleichung und die Kontinuitätsgleichung die Geschwindigkeit des ausströmenden Gases abgeschätzt werden. Mit diesen Werten kann auch die Dichte des Gases und damit der Massenstrom berechnet werden. Bei den folgenden Ergebnissen liegt der Fokus jedoch zum einen auf dem Ausbreitungsgebiet und zum anderen wird bei den meisten Simulationen der Behälter nicht direkt in der Simulation abgebildet, sondern als Funktion am Rohreintritt dargestellt, wie dies in Abschnitt 3.4 erläutert wurde.

Die zeit- und ortsabhängige Geschwindigkeit des Gases sowie die zeit-, orts- und größenabhängige Geschwindigkeit der Partikel im Ausbreitungsgebiet sind die bestimmenden Größen eines Freistrahls. Aufgrund der mehrdimensionalen Abhängigkeit der Geschwindigkeit sind Kennzahlen zur Beschreibung des Freistrahls erforderlich. Die wichtigsten sind die in Abschnitt 2.2 eingeführte Abbaukonstante und die Streurrate. Zur Bestimmung dieser Kenngrößen ist eine getrennte Betrachtung der axialen und radialen Geschwindigkeitsverteilung erforderlich.

Weitere relevante Größen im Rahmen einer Bewertung sind die Dichte, die Strömungsturbulenz und der Massenstrom des Freistrahls. Aufgrund ihrer grundlegenden Bedeutung im theoretischen Freistrahlmolell, ihrer direkten Messbarkeit im Experiment und ihrer weitreichenden Einflüsse auf andere physikalische Größen und Strömungseigenschaften wird im Folgenden jedoch der Schwerpunkt auf die Freistrahlgeschwindigkeit gelegt. Der Grund dafür ist, dass die Geschwindigkeit eine direkt messbare physikalische Größe, die auch in den Experimenten in /GRS 23/ gemessen wurde und zur Validierung der Simulationen herangezogen werden kann. Die axiale und radiale Geschwindigkeit des Freistrahls gibt direkt Aufschluss über die Strömungscharakteristik und das Strahlverhalten. Änderungen in der Geschwindigkeit können auf verschiedene physikalische Phänomene wie Turbulenz, Strahlaufweitung und Wechselwirkung mit der Umgebung hinweisen, wodurch Aspekte wie Reichweite, Ausdehnung und Dauer des Freistrahls beschrieben werden können. Darüber hinaus hat die Geschwindigkeit einen direkten Einfluss auf andere wichtige physikalische Größen wie Druck, Temperatur und Dichte.

4.1 Gasfreistrah

Für die Simulation eines Gasfreistrahls wird ein mit Helium gefüllter Behälter mit einem Überdruck von 0,5 bar simuliert, der eine 25 mm breite und 400 mm lange Öffnung aufweist, aus der der Gasstrahl austritt. Die grundlegende Situation, einschließlich der Systemgeometrie, des Rechengitters, des physikalischen Modells sowie der Randbedingungen und Anfangsbedingungen, wurde ausführlich in Abschnitt 3 beschrieben.

Neben der Simulation dieser Grundsituation, welche im Folgenden als Referenzsimulation für den Gas-Freistrah dient, werden auch verschiedene Variationen der Anfangs- und Randbedingungen untersucht. Dabei stehen insbesondere die Größe des Behälters, der Druckverlauf am Einlass des Rohres bzw. im Inneren des Behälters sowie die Art des verwendeten Gases im Fokus der Analyse. Diese Parameteränderungen dienen dazu, die Einflüsse unterschiedlicher Bedingungen auf das Verhalten des Gas-Freistrahls zu verstehen und umfassend zu charakterisieren. Im Folgenden wird, wie oben bereits erläutert, vor allem die Geschwindigkeit des Gases betrachtet und ausgewertet.

Die Geschwindigkeit in der Referenzsimulation lässt sich, wie in der folgenden Abb. 4.1 beispielhaft für den Zeitpunkt $t = 1,5$ s gezeigt, für das gesamte Rechenggebiet ermitteln und darstellen. In diesen Darstellungen ist ein typischer Freistrah zu erkennen, der

ausgehend von einer maximalen Geschwindigkeit am Auslass mit zunehmendem Abstand und zu den Rändern hin abnimmt. Die Geschwindigkeit und ihre Verteilung sind abhängig von der Zeit und anderen Startparametern wie etwa Gas, Druck und Temperatur.

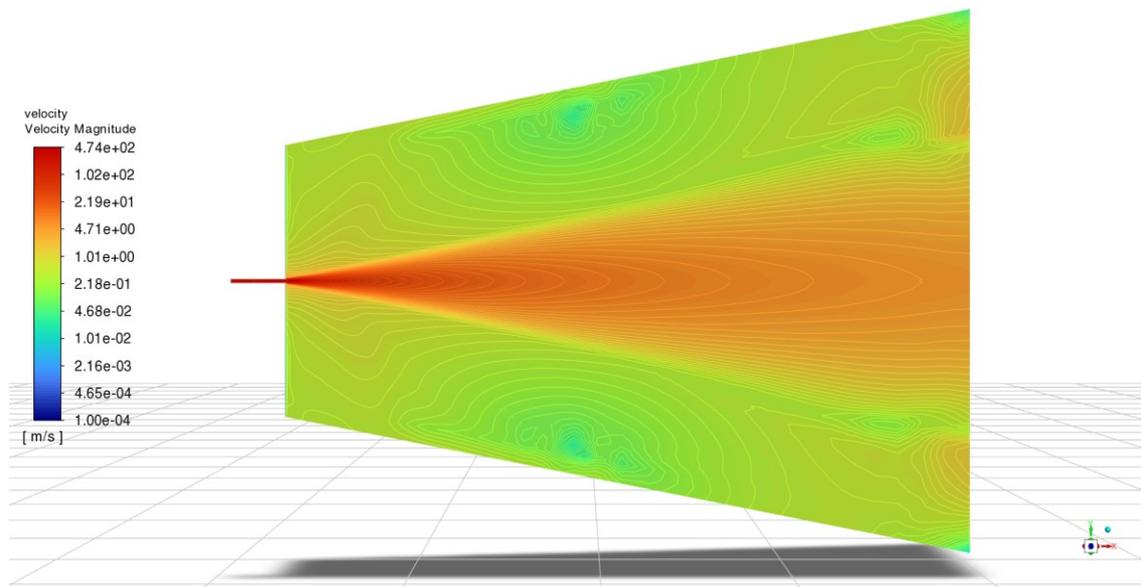


Abb. 4.1 Geschwindigkeit des simulierten Helium Freistrahls zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s

Die mit der Freistrahlbildung verbundenen Effekte lassen sich nicht nur an der Geschwindigkeitsverteilung, sondern auch an einer Vielzahl anderer Parameter erkennen. So ist in der der folgenden Abb. 4.2 beispielhaft die Dichte des Fluids für den Zeitpunkt $t = 1,5$ s dargestellt. Es ist zu erkennen, wie das im Vergleich zu Luft weniger dichte Helium aus dem Rohr austritt und sich im Ausbreitungsgebiet mit der Luft vermischt. Diese Vermischung führt zu einer Abbremsung des Freistrahls in den Randbereichen.

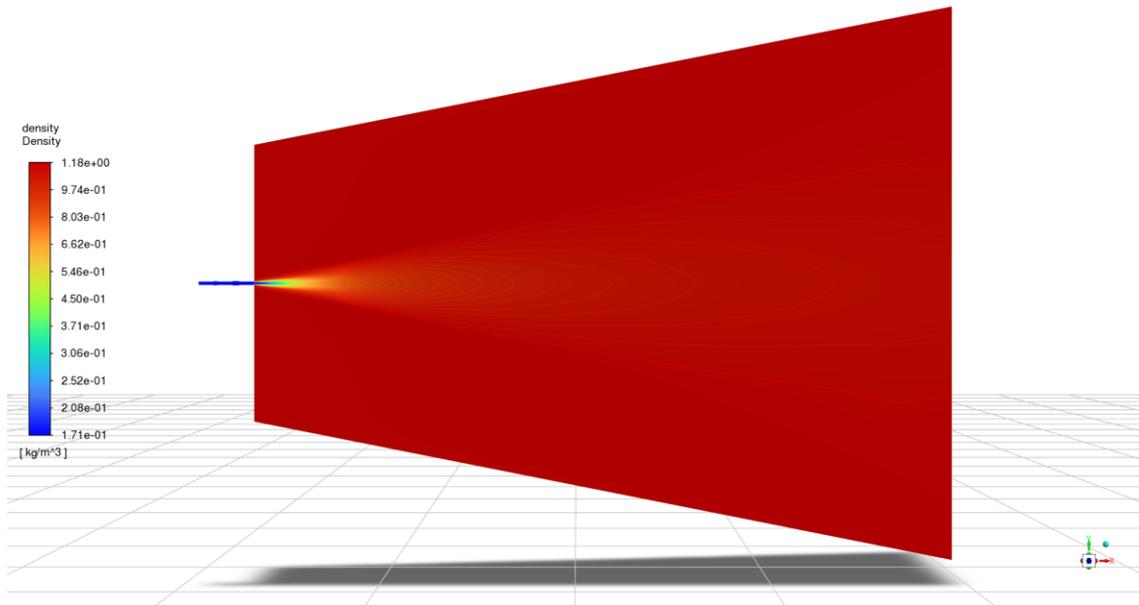


Abb. 4.2 Dichte des simulierten Helium Freistrahls zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s

Wie in Abschnitt 2.2.2 beschrieben, kann die ortsabhängige Geschwindigkeit eines Gasfreistrahls im Ähnlichkeitsbereich entlang der x -Achse durch eine hyperbolische Funktion beschrieben werden:

$$v(x) = v_0 \cdot K_1 \cdot \frac{d_e}{(x - x_0)} \quad (4.1)$$

Dabei ist v_0 die Austrittsgeschwindigkeit an der Rohröffnung, K_1 die Abbaukonstante des Freistrahls, d_e der effektive Rohrdurchmesser und x_0 der virtuelle Strahlursprung. Der effektive Rohrdurchmesser ergibt sich aus dem realen Rohrdurchmesser d_r und dem Verhältnis der Dichten von Freistrahls und Umgebung bzw. dem Kehrwert des Verhältnisses ihrer spezifischen Gaskonstanten R_S . Wird für den Freistrahls Helium und für die Umgebung Luft angenommen, so ergibt sich der effektive Rohrdurchmesser zu:

$$d_e = d_r \cdot \left(\frac{R_{S,\text{Luft}}}{R_{S,\text{Helium}}} \right)^{1/2} = 2,5 \text{ cm} \cdot \left(\frac{287 \frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}}}{2076 \frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}}} \right)^{1/2} = 0,93 \text{ cm} \quad (4.2)$$

Zur besseren Vergleichbarkeit kann die Geschwindigkeit auf die maximale Geschwindigkeit unmittelbar vor der Rohröffnung normiert werden, die als Austrittsgeschwindigkeit v_0 angenommen wird:

$$\frac{v(x)}{v_0} = K_1 \cdot \frac{d_e}{(x - x_0)} \quad (4.3)$$

In der folgenden Abb. 4.3 ist beispielhaft für den Zeitpunkt $t = 1,5$ s die normierte Geschwindigkeit entlang der Strahlachse aufgetragen. Die blauen Punkte sind die Datenpunkte aus der Simulation und die orange Linie ist die mit Formel (4.3) gefittete Funktion.

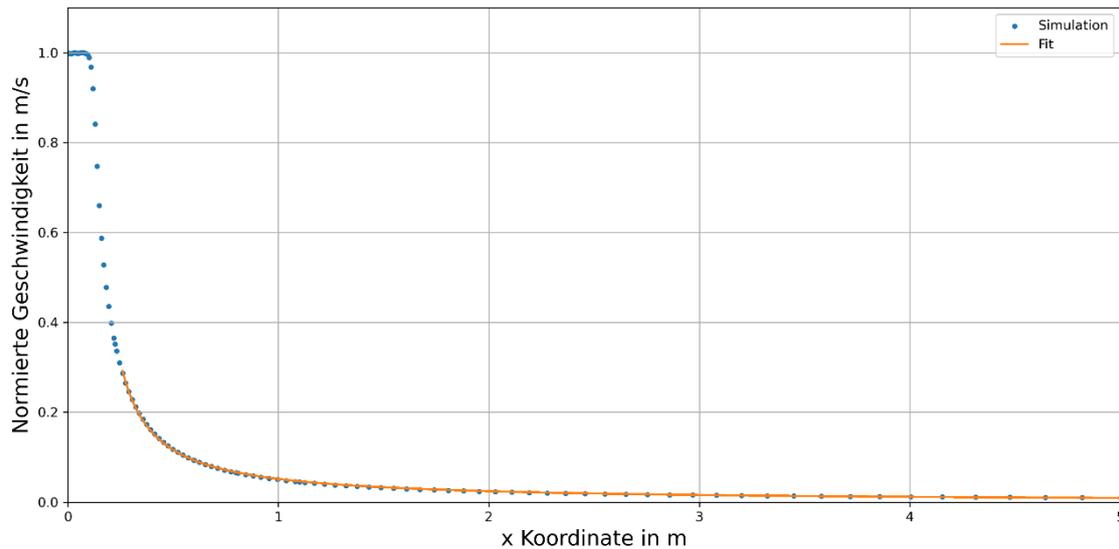


Abb. 4.3 Axiale Geschwindigkeit des Helium Freistrahls mit Fit Funktion zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s

Im Ähnlichkeitsbereich des Freistrahls, welcher in Abschnitt 2.2 eingeführt wurde und ab etwa 0,25 m beginnt, kann eine Funktion durch den oben aufgeführten hyperbolischen Verlauf gefittet werden. Aus der Fit-Funktion ergibt sich die Abbaukonstante K_1 , welche für alle simulierten Zeitpunkte in der folgenden Abb. 4.4 dargestellt ist.

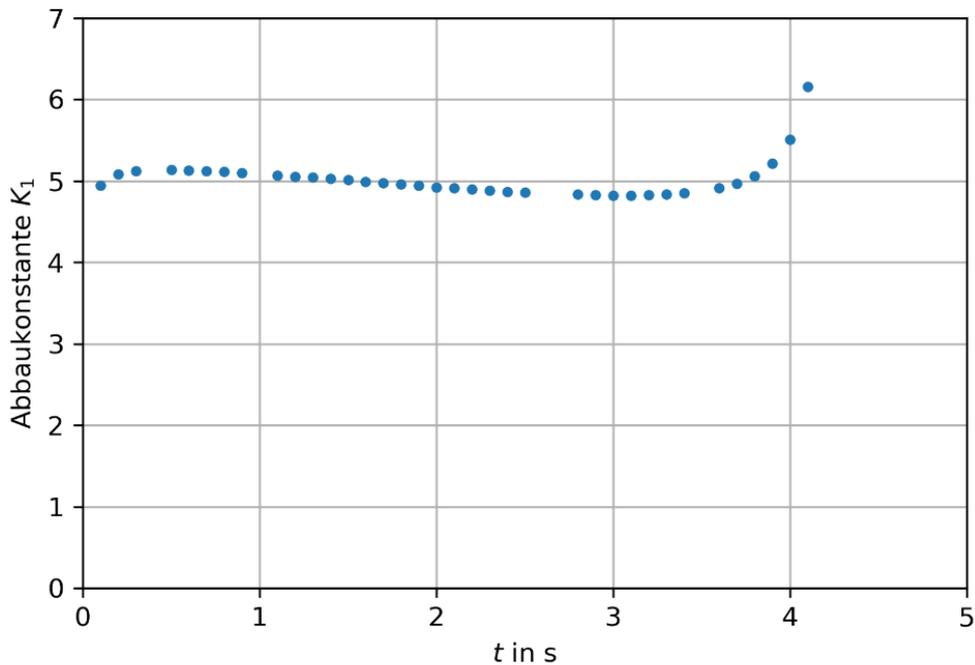
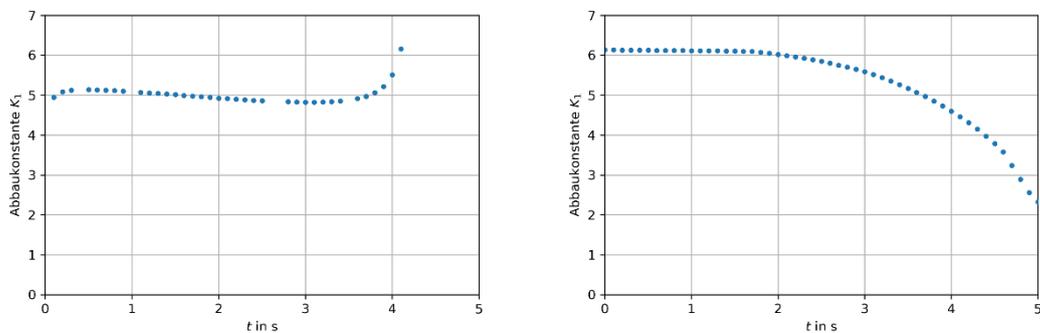


Abb. 4.4 Abbaukonstante des Helium Freistrahls abhängig von der Zeit

Es zeigt sich, dass die Abbaukonstante bei etwa $K_1 \approx 5$ liegt und über die Zeit relativ konstant bleibt. Dieser Wert liegt im unteren Bereich der Literaturwerte für die Abbaukonstante. Ab etwa 3,7 s ist der Behälterüberdruck vollständig abgefallen und es liegt kein typischer Freistrahls mehr vor, der mit dem obigen Modell sinnvoll beschrieben werden kann, weshalb die Werte der berechneten Abbaukonstanten sprunghaft ansteigen.

Diese Zeitabhängigkeit der Abbaukonstante des Helium Freistrahls, welche im Rahmen dieses Vorhabens ermittelt wurde, kann mit der experimentell ermittelten Abbaukonstante aus /GRS 23/ verglichen werden.



In Abb. 4.5 ist zu erkennen, dass die Abbaukonstanten für den Zeitraum des normalen Ausströmvorgangs bis 3 s sowohl in der Simulation als auch bei den Experimenten ungefähr konstant bleiben. Danach sinkt der Überdruck im Behälter, wie oben bereits erwähnt, so stark ab, dass die Geschwindigkeitsverteilung nicht länger durch das Modell eines Freistrahls sinnvoll erfasst werden kann. Bei der Simulation liegt die Abbaukonstante bei etwa $K_1 \approx 5$ und bei den Experimenten /GRS 23/ bei etwa $K_1 \approx 6$. Eine größere Abbaukonstante bedeutet einen langsameren Geschwindigkeitsabbau in axialer Richtung. Der Unterschied zwischen Experiment und Simulation ist im Wesentlichen durch zwei Umstände zu erklären. Zum einen werden in der Simulation idealisierte Randbedingungen z.B. für die Eigenschaften der Gase und des Rohres verwendet, was zu einer höheren Austrittsgeschwindigkeit und einem größeren Massenstrom und damit zu einem schnelleren Geschwindigkeitsabbau in axialer Richtung führt, also einer niedrigeren Abbaukonstante. Zum anderen ist die Messmethode der Experimente in /GRS 23/ näher zu betrachten. Die Gasgeschwindigkeit kann mit den in /GRS 23/ verwendeten Aufbau-ten nicht direkt gemessen werden, sondern nur indirekt über Tracerpartikel, deren Folgevermögen so gut ist, dass ihre Geschwindigkeit annähernd der Gasgeschwindigkeit entspricht. Zum einen besteht hierbei eine gewisse Unsicherheit und zum anderen sorgen die Tracerpartikel selbst wieder für eine Massenbelegung des Gas-Freistrahls, die zu einer größeren Abbaukonstante führt, wie im Folgenden noch gezeigt wird. Die Unterschiede zwischen den Abbaukonstanten liegen daher in einem erklärbaren Rahmen.

Bei der Anpassung der Simulation an reale Verhältnisse sind insbesondere die Eigenschaften des Rohres bzw. dessen Wandeigenschaften, wie z.B. die Rauigkeit, relevant. Durch eine entsprechende Anpassung können die im Experiment ermittelten Daten reproduziert werden. Eine solche Anpassung ist für die Beschreibung eines bestimmten Versuchsaufbaus interessant, für die Beschreibung im Rahmen eines generischen Ansatzes jedoch nicht geeignet. Daher werden im Folgenden weiterhin die zuvor eingeführten Randbedingungen für die Eigenschaften des Rohres verwendet.

Wie in Abschnitt 2.2.2 beschrieben, kann die ortsabhängige Geschwindigkeit eines Gasfreistrahls im Ähnlichkeitsbereich des Freistrahls orthogonal zur x-Achse durch eine Gauß-Verteilungskurve der folgenden Form beschrieben werden:

$$v(y) = v_{max} \cdot \exp\left(-A \cdot \left(\frac{y}{x - x_0}\right)^2\right) \quad (4.4)$$

Hierbei ist v_{max} das Geschwindigkeitsmaximum, x die entsprechende x-Position, y die entsprechende y-Position und A die Streukonstante. Für die weitere Auswertung der radialen Verteilung wird der Wert x_0 , welcher den virtuellen Strahlursprung angibt, vernachlässigt. Außerdem wird auch hier die Geschwindigkeit normiert. Dadurch werden mit der Variablen A alle Effekte abgebildet und die Auswertung vereinfacht.

$$\frac{v(y)}{v_{max}} = \exp\left(-A \cdot \left(\frac{y}{x}\right)^2\right) \quad (4.5)$$

In der folgenden Abb. 4.6 ist beispielhaft für den Zeitpunkt $t = 1,5$ s an der x-Position $x = 0,8$ m die Geschwindigkeit orthogonal zur Strahlachse aufgetragen. Die blauen Punkte sind die Datenpunkte aus der Simulation und die orange Linie ist die mit Formel (4.5) gefittete Funktion.

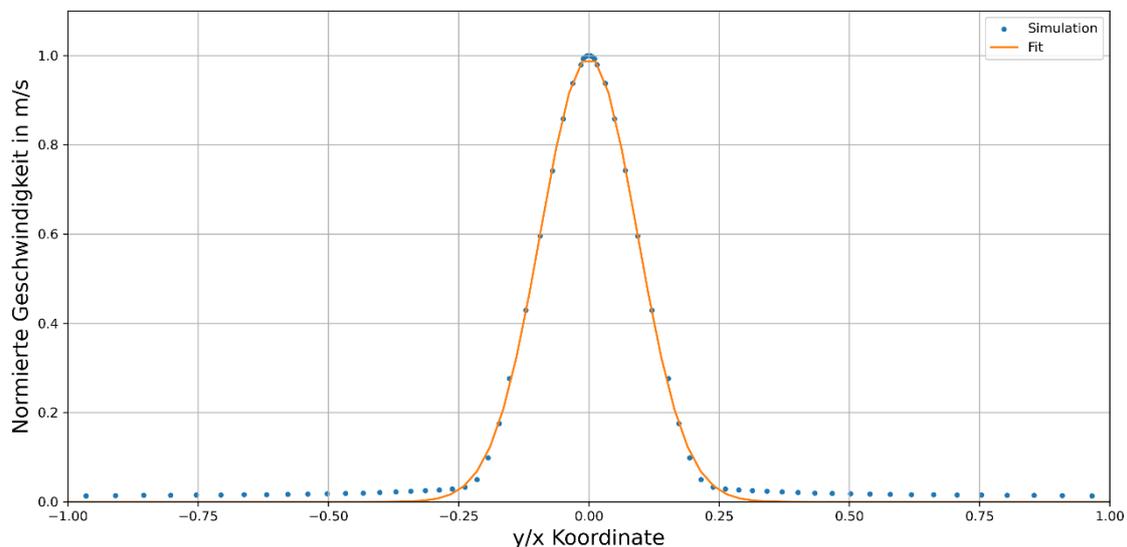


Abb. 4.6 Normierte orthogonale Geschwindigkeitsverteilung des Helium Freistrahls mit Fit Funktion zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s an der Position $x = 0,8$ m

Es ist zu erkennen, dass die Fit-Funktion aus Formel (4.5) die mittleren Werte der Geschwindigkeitsverteilung gut beschreibt, aber zu den Rändern hin die Geschwindigkeiten unterschätzt. Dies liegt daran, dass die Luft im Ausbreitungsgebiet um den Freistrahler herum eine gewisse Geschwindigkeit hat, die in dem Modell des reinen Freistrahls natürlich nicht enthalten ist. Die Geschwindigkeit des Freistrahls und die Geschwindigkeit im Ausbreitungsgebiet, eine Art Hintergrundgeschwindigkeit, überlagern sich demnach. Durch die Einführung eines zusätzlichen Faktors in Formel (4.5) könnte die Funktion die Werte aus der Simulation besser wiedergeben. An der Bestimmung der für die weiteren

Betrachtungen relevanten Halbwertsbreite bzw. Streurate würde sich dadurch jedoch nichts ändern. Daher wird die klassische Gauß'schen Verteilungsfunktion aus der Literatur beibehalten.

Die Halbwertsbreite $y_{1/2}$ ist eine charakteristische Größe einer solchen Verteilung und gibt an, wie groß der Abstand entlang der x-Achse zu dem Punkt ist, an dem die Geschwindigkeit auf die Hälfte des Maximums abgesunken ist. Eine solche Halbwertsbreite kann bestimmt werden durch:

$$y_{1/2} = x \cdot \sqrt{\frac{\ln(0,5)}{-A}} \quad (4.6)$$

Die als Streurate K_2 bezeichnete Kennzahl des Freistrahls entspricht dabei dem Faktor:

$$K_2 = \sqrt{\frac{\ln(0,5)}{-A}} \quad (4.7)$$

Eine zeitabhängige Streurate lässt sich daher, wie in der folgenden Abb. 4.7 dargestellt, für verschiedenen Positionen entlang der x-Achse bestimmen. In diesem Fall sind die vier Positionen $x = 225 \text{ mm}$, $x = 600 \text{ mm}$, $x = 800 \text{ mm}$ und $x = 1100 \text{ mm}$ dargestellt.

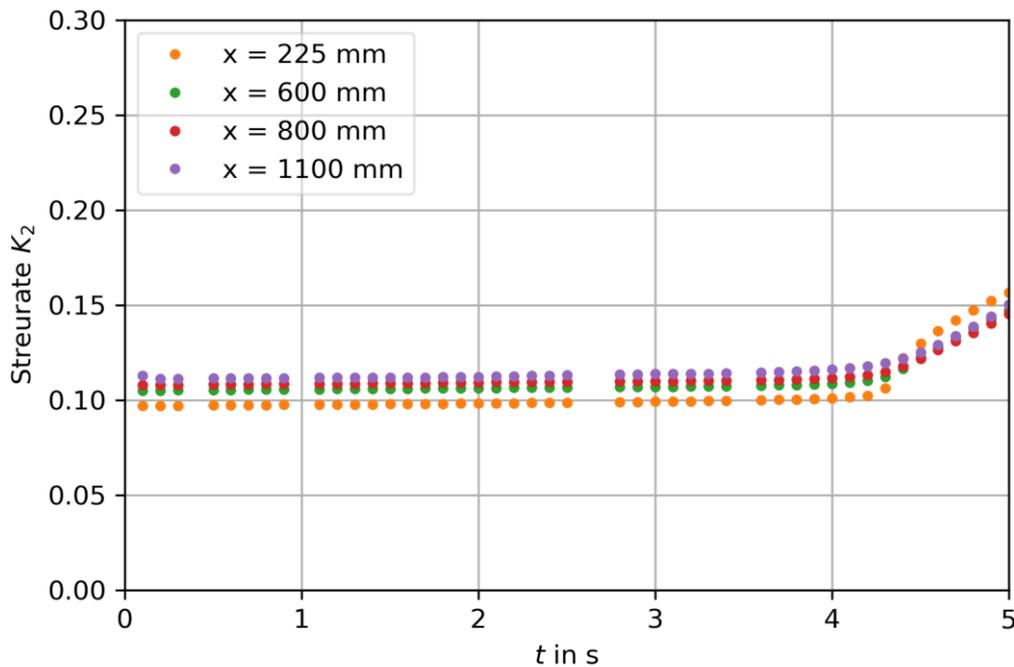


Abb. 4.7 Streurrate des Helium Freistrahls in Abhängigkeit von der Zeit

Diese Zeitabhängigkeit der Streurrate des Helium Freistrahls, welche im Rahmen dieses Vorhabens ermittelt wurde, kann mit der experimentell ermittelten Streurrate aus /GRS 23/ verglichen werden.

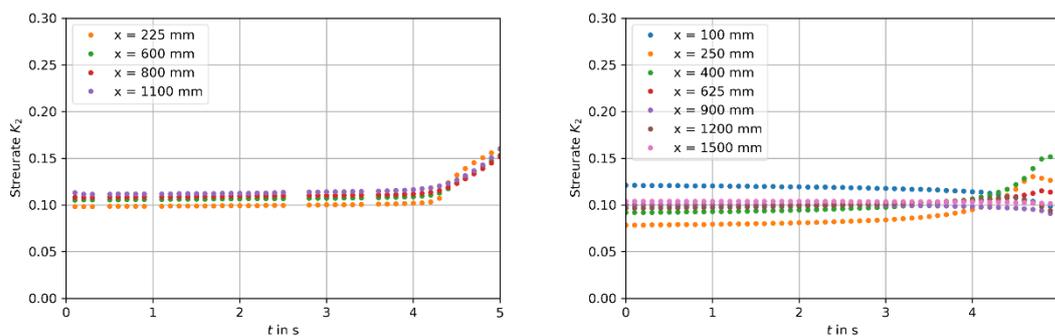


Abb. 4.8 Vergleich der ermittelten Abbaukonstante des Helium Freistrahls: Simulation (links), Experimente (rechts)

In Abb. 4.8 lässt sich erkennen, dass die Streurrate in beiden Fällen relativ konstant über die Zeit verläuft und jeweils bei etwa $K_2 = 0,1$ liegt. Für größere Zeiten funktioniert, wie bereits zuvor erkannt, das Modell des Freistrahls nicht mehr so gut, so dass nach etwa 4 s die Tendenz zu größeren Abweichungen der Werte steigt.

4.2 Partikelbeladener Freistrahl

Die Simulation des partikelbeladenen Freistrahls baut auf den zuvor dargelegten Simulationen eines Gasfreistrahls auf. Zusätzlich zu den dort beschriebenen Randbedingungen werden, wie in Abschnitt 3.4.2 beschrieben, Partikel am Anfang des Rohres injiziert, so dass sich ein partikelbeladener Freistrahls ausbildet.

Zunächst wird eine Simulation mit Anfangs- und Randbedingungen, die sich an den Experimenten in /GRS 23/ orientieren, durchgeführt und detailliert ausgewertet. Diese Simulation dient als Referenzsimulation für die Betrachtung eines partikelbeladenen Freistrahls. Die Simulation wird mit den in Abschnitt 3.4.2 beschriebenen Partikeln sowie der dort aufgeführten Partikelbeladung und Partikelgrößenverteilung durchgeführt.

Zusätzlich zu dieser Referenzsimulation werden diese Anfangsbedingungen variiert. Diese Parametervariationen dienen dazu, die Einflüsse unterschiedlicher Bedingungen auf das Verhalten des partikelbeladenen Freistrahls zu verstehen und umfassend zu charakterisieren. Die Simulationen mit Variationen der Anfangs- und Randbedingungen sind in Abschnitt 4.2.3 aufgeführt.

Die Gasgeschwindigkeit des partikelbeladenen Freistrahls kann, obwohl diese natürlich miteinander wechselwirken, getrennt von den Partikelgeschwindigkeiten für das gesamte Rechengebiet ermittelt werden. In Abschnitt 4.2.1 wird daher zunächst die Gasphase betrachtet und der Freistrahls analog zum Gasfreistrahls ausgewertet. Anschließend wird in Abschnitt 4.2.2 die Partikelphase und ihr Verhalten betrachtet.

4.2.1 Gasphase

In der folgenden Abb. 4.9 ist beispielhaft für den Zeitpunkt $t = 1,5$ s die Gasgeschwindigkeit des partikelbeladenen Freistrahls gezeigt. In der Darstellung ist ein typischer Freistrahls zu erkennen, der ausgehend von einer maximalen Geschwindigkeit am Auslass mit zunehmendem Abstand und zu den Rändern hin abnimmt. Bei einem Vergleich mit dem Gasfreistrahls in Abb. 4.1 ist zu erkennen, dass die maximale Gas-Geschwindigkeit beim partikelbeladenen Freistrahls zu diesem Zeitpunkt mehr als 100 m/s geringer ist. Dieser Effekt ist auf die Beladung mit Partikeln zurückzuführen.

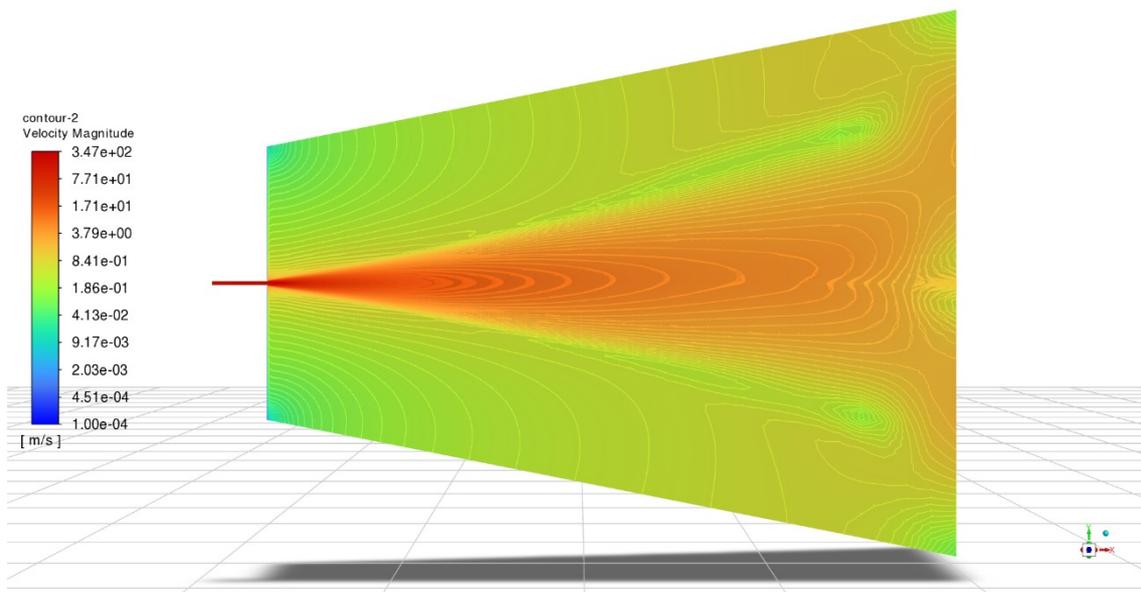


Abb. 4.9 Geschwindigkeit des simulierten partikelbeladenen Helium Freistrahls zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s

Die Form des Freistrahls lässt sich nicht nur an der Geschwindigkeitsverteilung, sondern auch an einer Vielzahl anderer Parameter erkennen. So ist in der der folgenden Abb. 4.10 beispielhaft die Dichte des Fluids für den Zeitpunkt $t = 1,5$ s dargestellt. Hier sind keine signifikanten Unterschiede zum Gasfreistrahls festzustellen, da die Durchmischung nicht stark von den Partikeln beeinflusst wird.

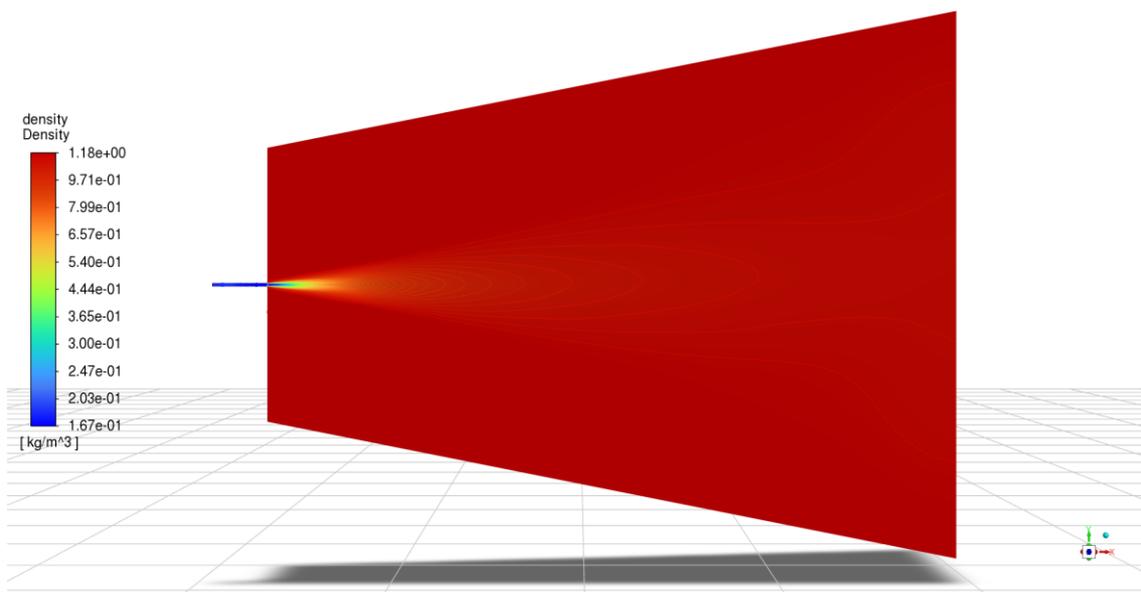


Abb. 4.10 Dichte des simulierten partikelbeladenen Fluids im Rohr und im Ausbreitungsgebiet zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s

Die ortsabhängige Geschwindigkeit des Gases eines partikelbeladenen Freistrahls kann analog zu Abschnitt 4.1 dargestellt und im Ähnlichkeitsbereich entlang der x-Achse bzw. Strahlachse durch eine hyperbolische Funktion beschrieben werden. So ist in der folgenden Abb. 4.11 beispielhaft für den Zeitpunkt $t = 1,5$ s die normierte Geschwindigkeit entlang der x-Achse aufgetragen.

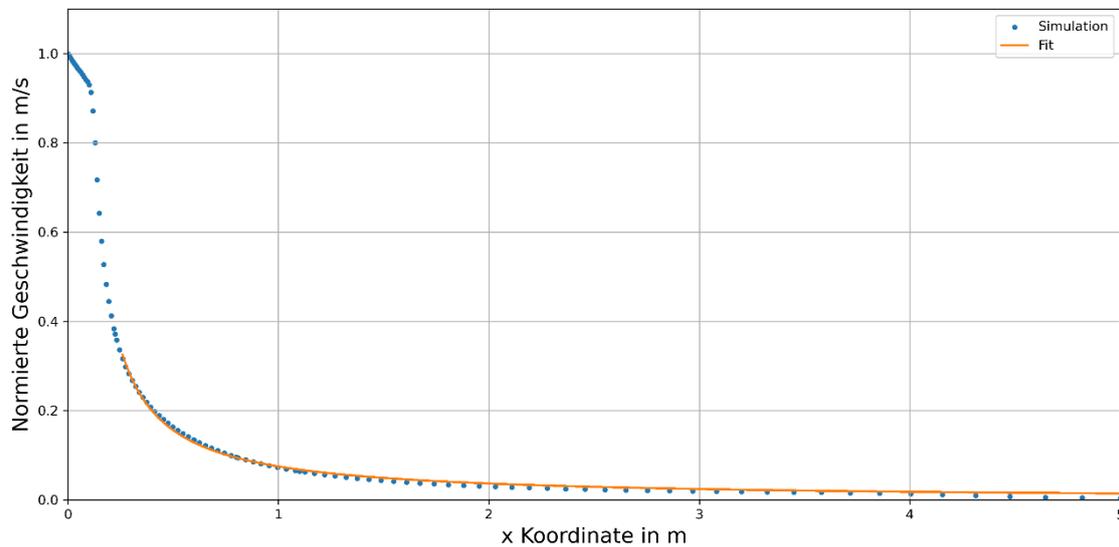


Abb. 4.11 Axiale Geschwindigkeit der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s

Aus der Fit-Funktion ergibt sich die Abbaukonstante K_1 , welche für alle simulierten Zeitpunkte in der folgenden Abb. 4.12 dargestellt ist.

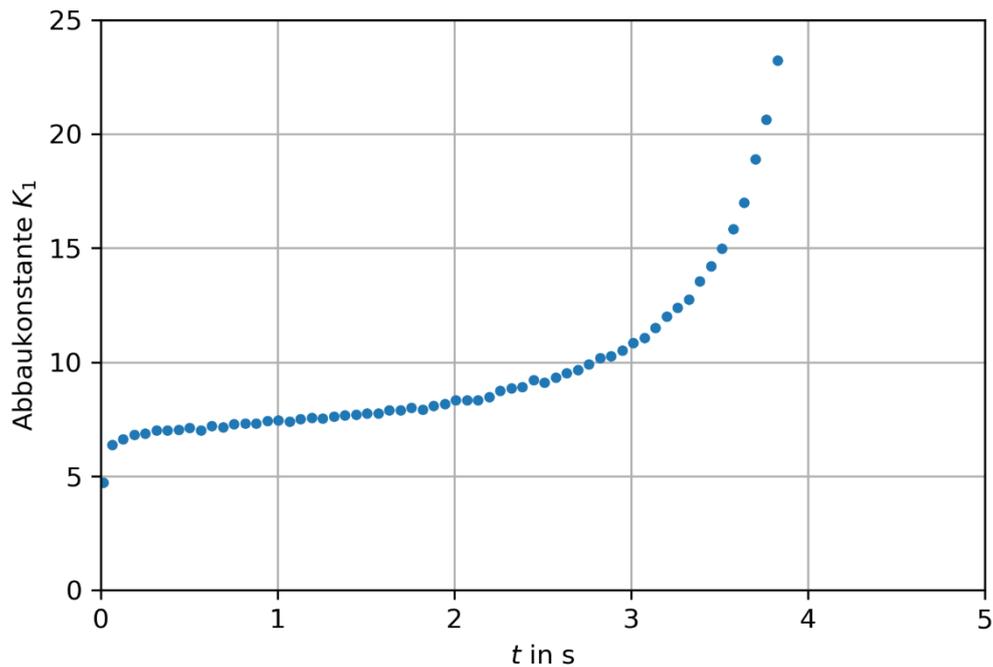


Abb. 4.12 Abbaukonstante der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls

Es zeigt sich, dass die Abbaukonstante K_1 zwischen 7 und 12 liegt und über die Zeit ansteigt. Der Wert ist höher als die Abbaukonstante des reinen Gasfreistrahls, was einen langsameren Geschwindigkeitsabbau bedeutet. Dies ist aufgrund der Belegung mit Partikel auch zu erwarten. Zum einen wird die Geschwindigkeit des Gases durch den Impuls, den die Partikel als Anteil am Gesamtimpuls haben, reduziert. Zum anderen verlangsamen die Partikel durch ihre Trägheit auch den Abbau dieser Geschwindigkeit. Die Werte für Zeiten ab 3 bis 4 s sind, wie zuvor auch schon, nicht mehr aussagekräftig.

Diese Zeitabhängigkeit der Abbaukonstante der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls, welche im Rahmen dieses Vorhabens ermittelt wurde, kann mit der experimentell ermittelten Abbaukonstante aus /GRS 23/ verglichen werden.

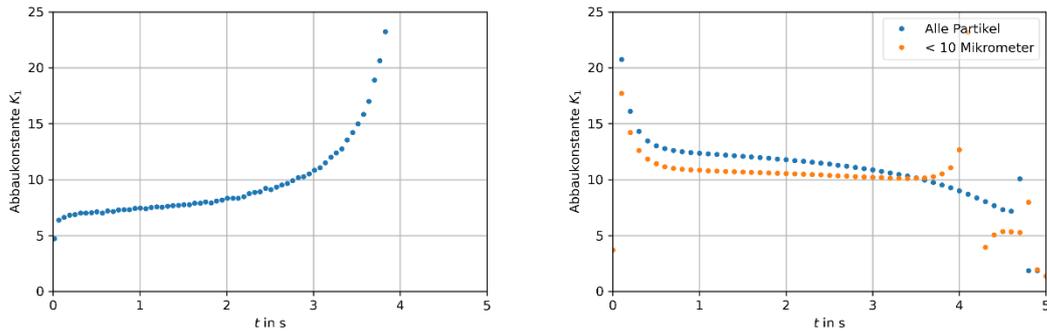


Abb. 4.13 Durch eine Simulation (links) ermittelte Abbaukonstante der Gasphase eines partikelbeladenen Helium Freistrahls und durch Experimente /GRS 23/ (rechts) ermittelte Abbaukonstante der Partikel eines partikelbeladenen Helium Freistrahls

In Abb. 4.13 sind die durch Simulation ermittelten Abbaukonstanten der Gasphase eines partikelbeladenen Helium Freistrahls den experimentell bestimmten Abbaukonstanten der Partikel des partikelbeladenen Helium Freistrahls gegenübergestellt. Obwohl ein direkter Vergleich nicht möglich ist, kann festgestellt werden, dass die Abbaukonstanten in der gleichen Größenordnung liegen, die Abbaukonstante für die Gasphase jedoch etwas kleiner ist. Bei den Partikeln kleiner als $10 \mu\text{m}$, die bereits ein sehr gutes Folgevermögen gegenüber der Gasphase aufweisen, ist dieser Unterschied jedoch bereits geringer als bei der über alle Partikelgrößen integral berechneten Abbaukonstante.

Die ortsabhängige Geschwindigkeit des Gases eines partikelbeladenen Freistrahls orthogonal zur x -Achse kann ebenfalls analog zu Abschnitt 4.1 im Ähnlichkeitsbereich des Freistrahls durch eine Gauß-Verteilungskurve beschrieben werden. In der folgenden Abb. 4.14 ist beispielhaft für den Zeitpunkt $t = 1,5 \text{ s}$ an der x -Position $x = 0,8 \text{ m}$ die Geschwindigkeit der Gasphase orthogonal zur Strahlachse aufgetragen. Die blauen Punkte sind die Datenpunkte aus der Simulation und die orange Linie ist die mit Formel (4.5) gefittete Funktion.

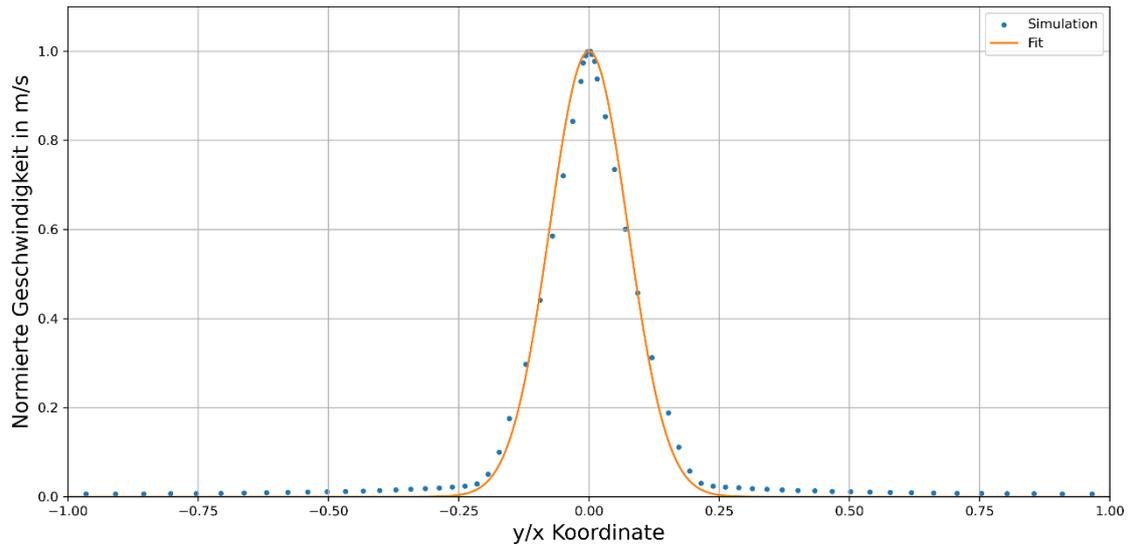


Abb. 4.14 Normierte orthogonale Geschwindigkeitsverteilung der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Fit Funktion zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s an der Position $x = 0,8$ m

Eine zeitabhängige Streurate lässt sich daher, wie in der folgenden Abb. 4.15 dargestellt, für verschieden Positionen entlang der x-Achse bestimmen. In diesem Fall sind die vier Positionen $x = 225$ mm, $x = 600$ mm, $x = 800$ mm und $x = 1100$ mm dargestellt.

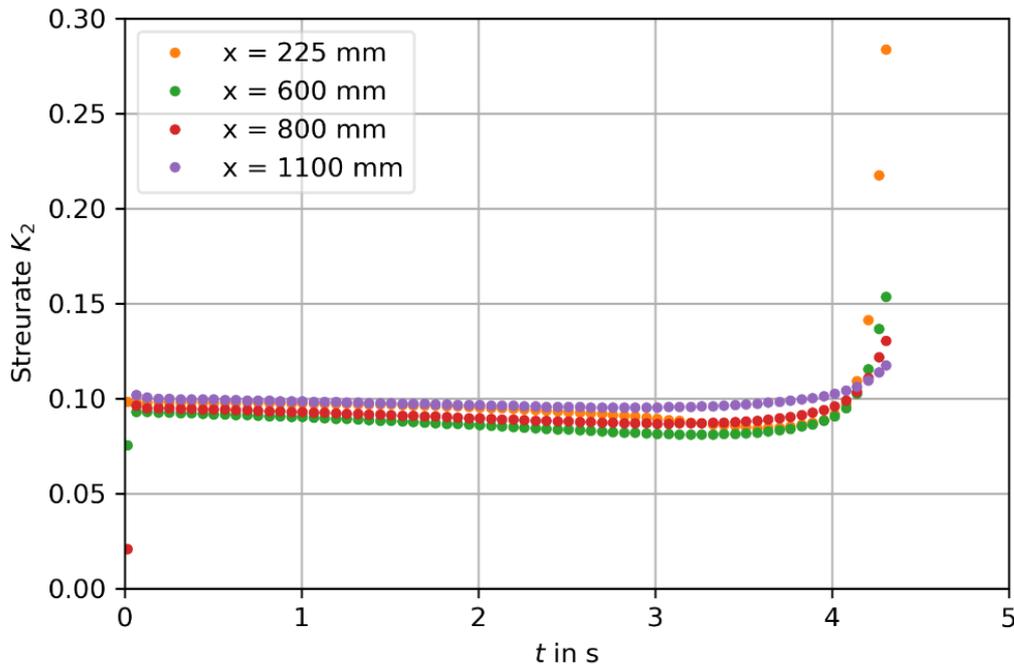


Abb. 4.15 Streurrate der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls abhängig von der Zeit

Diese Zeitabhängigkeit der Streurate des partikelbeladenen Helium Freistahls, welche im Rahmen dieses Vorhabens ermittelt wurde, kann mit der experimentell ermittelten Abbaukonstante aus /GRS 23/ verglichen werden.

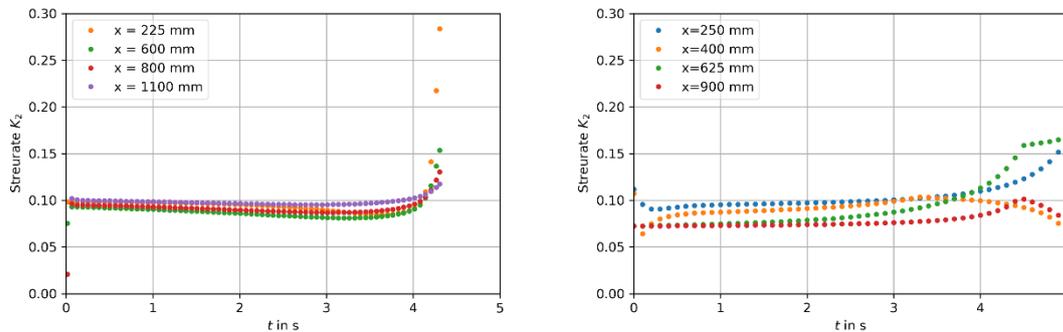


Abb. 4.16 Durch eine Simulation (links) ermittelte Streurate der Gasphase eines partikelbeladenen Helium Freistrahls und durch Experimente /GRS 23/ (rechts) ermittelte Streurate der Partikel eines partikelbeladenen Helium Freistrahls

In Abb. 4.16 lässt sich erkennen, dass die Streurate in beiden Fällen relativ konstant über die Zeit verläuft und jeweils knapp unter $K_2 = 0,1$ liegen. Für größere Zeiten funktionierte, wie bereits zuvor schon erkannt, das Modell des Freistrahls nicht mehr so gut, so dass sich dort die Werte ändern.

4.2.2 Partikelphase

Die Partikel werden, wie in Abschnitt 3.4.2 beschrieben, in das Rohr injiziert. Dadurch wird ein partikelbeladener Gasstrom erzeugt, in dem die Gas- und die Partikelphase miteinander wechselwirken. Im Rahmen einer Analyse können diese beiden Phasen jedoch auch getrennt betrachtet werden, um ihre Eigenschaften zu analysieren. Im Rahmen der Analyse der Partikelphase ist deren Ausbreitungsverhalten und deren zeit-, weg- und partikelgrößenabhängige Geschwindigkeit relevant. Diese Eigenschaften werden nachfolgend untersucht. Dazu werden beispielhaft Ergebnisse für den Zeitpunkt $t = 1,1$ s dargestellt und analysiert.

In der Abb. 4.17 sind die Partikel chronologisch nach dem Zeitpunkt ihrer Injektion nummeriert. Es ist zu erkennen, dass sich die Partikel aus dem Rohr zunächst nahe der Strahlachse befinden, bevor der Strahl konisch aufweitet. Im hinteren Bereich ist diese

Form, die dem Gasfreistrahls gleicht, nicht mehr zu erkennen, da dort die älteren Partikel eine Art Wolke um den Konus der austretenden Partikel bilden.

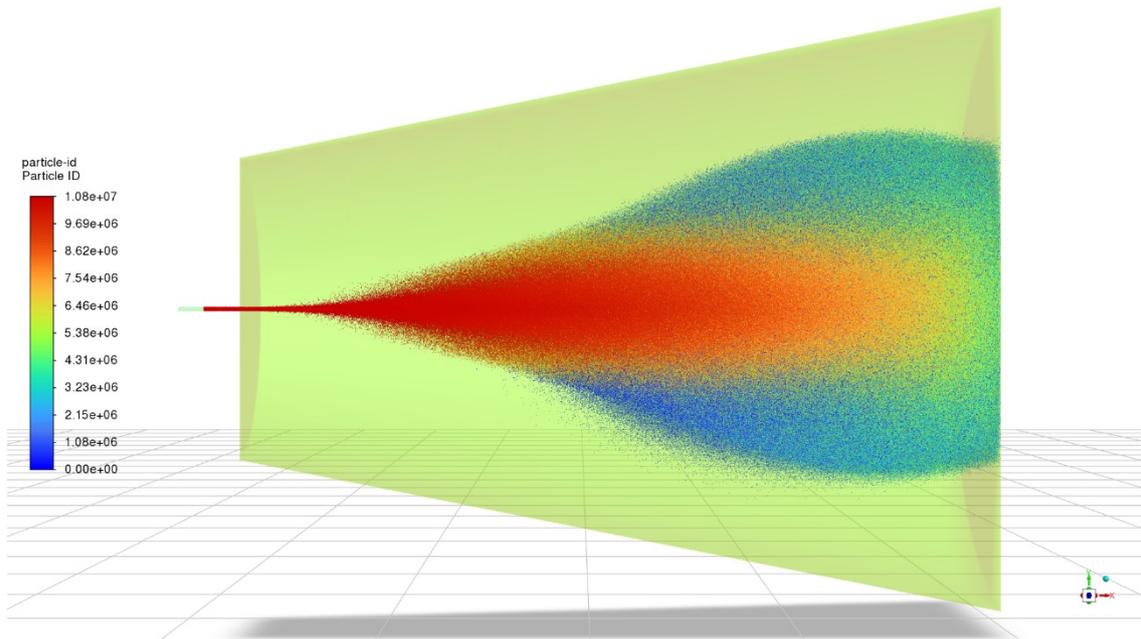


Abb. 4.17 Chronologisch durchnummerierte Partikel in einer Simulation eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende zum Zeitpunkt $t = 1,1$ s

In der folgenden Abb. 4.18 ist die Geschwindigkeit der Partikel farblich logarithmisch dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die in der vorherigen Abbildung identifizierten älteren Partikel nur noch eine sehr geringe Geschwindigkeit in der Größenordnung von etwa 1 m/s aufweisen. Die Geschwindigkeit, welche am Rohraustritt maximal ist, nimmt entlang der Strahlachse exponentiell ab und ist nach etwas über der Hälfte des 5 m langen Ausbreitungsgebiets auf die zuvor erwähnte Größenordnung abgesunken. Senkrecht zur Strahlachse ist der Geschwindigkeitsverlauf vergleichbar mit dem bereits betrachteten Geschwindigkeitsverlauf des Gasfreistrahls.

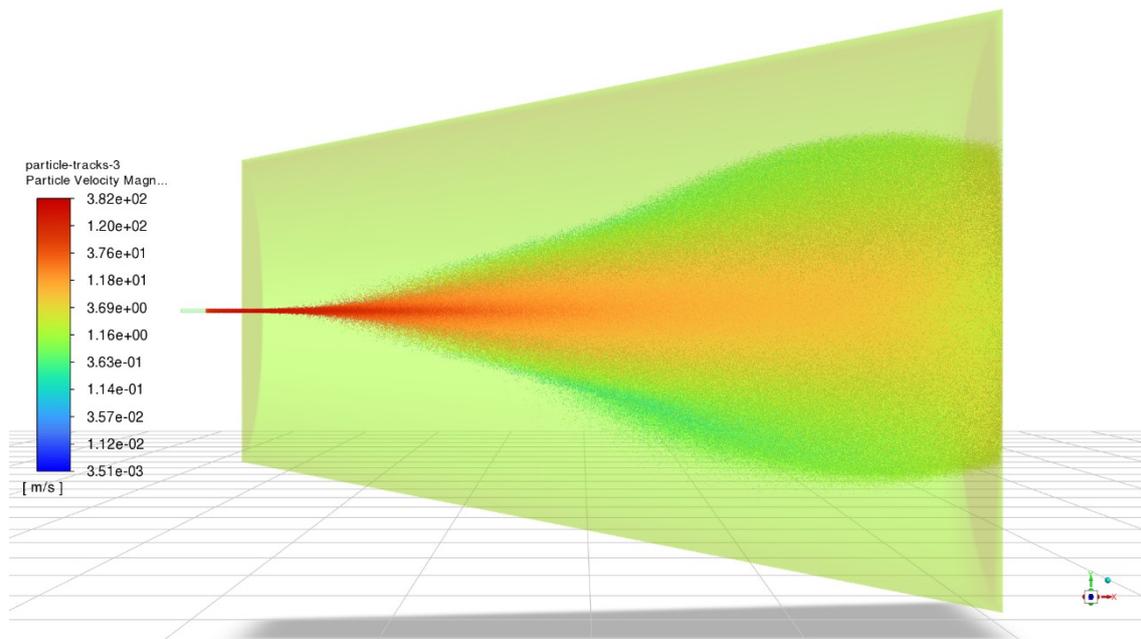


Abb. 4.18 Logarithmisch dargestellte Geschwindigkeit der Partikel in einer Simulation eines partikelbeladenen Helium Freistrahls zum Zeitpunkt $t = 1,1$ s

In der folgenden Abb. 4.19 ist der Durchmesser der Partikel farblich dargestellt. Zum einen ist zu erkennen, dass die Partikel entlang der Strahlachse einen größeren Durchmesser aufweisen als die weiter von der Strahlachse entfernten Positionen. Dies ist darauf zurückzuführen, dass schwerere Partikel aufgrund ihrer größeren Trägheit weniger von dieser Achse abweichen. Außerdem ist im hinteren Bereich eine erhöhte Anzahl von schwereren Partikeln im unteren Bereich zu erkennen. Bei diesen Partikeln handelt es sich, wie in den beiden vorangegangenen Abbildungen zu sehen war, um alte und langsame Partikel. Aufgrund ihrer höheren Masse sinken die schweren Partikel, wenn sie nicht mehr beschleunigt werden, schneller nach unten als die leichten Partikel.

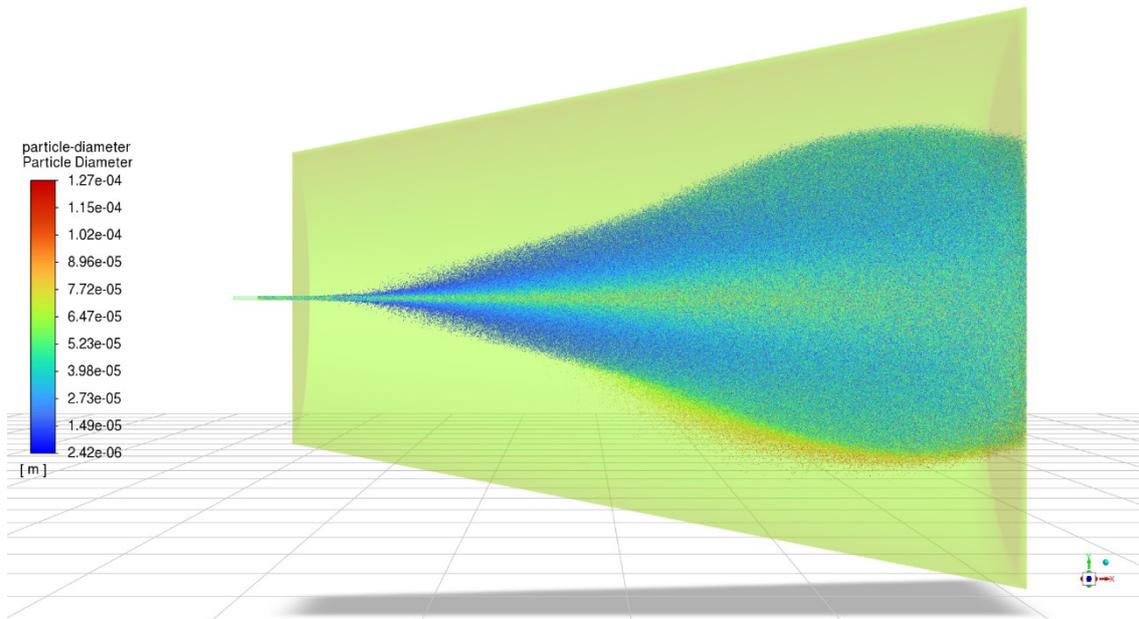


Abb. 4.19 Durchmesser der Partikel in einer Simulation eines partikelbeladenen Helium Freistrahls zum Zeitpunkt $t = 1,1$ s

Das in der obigen Abbildung beschriebene Phänomen, dass sich die Partikel in Abhängigkeit von ihrem Durchmesser und damit von ihrer Masse unterschiedlich schnell bewegen, kann in einem Plot, in dem die Geschwindigkeit als Funktion der x-Koordinate und des Durchmessers aufgetragen wird, detaillierter betrachtet werden. Dies ist in der folgenden Abb. 4.20 umgesetzt. Es ist zu erkennen, dass zu Beginn eine große Varianz in der Partikelgeschwindigkeit besteht und zu diesem Zeitpunkt die kleinsten Partikel etwa dreimal so schnell sind wie die größten Partikel. Weiterhin ist zu erkennen, dass die kleineren Partikel eine deutlich stärkere räumliche Abbremsung erfahren und sich nach etwa einem halben Meter die Geschwindigkeitsdifferenz umkehrt. Die großen Partikel sind also ab diesen Positionen schneller als die kleinen Partikel. Die unterschiedliche Geschwindigkeitsabnahme für verschiedene Durchmesser bedeutet auch eine Abhängigkeit der Abbaukonstante vom Durchmesser, wie sie bereits in den Versuchen /GRS 23/ festgestellt werden konnte (s. Abb. 4.13).

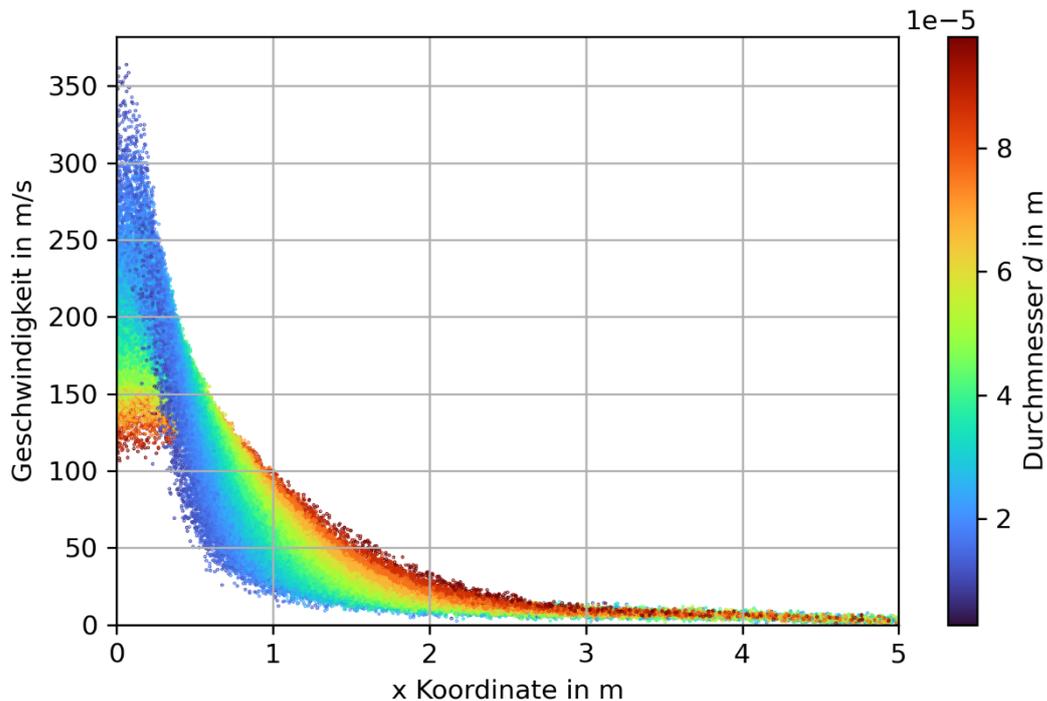


Abb. 4.20 Geschwindigkeit der Partikel in Abhängigkeit von der x-Koordinate und dem Durchmesser in einer Simulation eines partikelbeladenen Helium Freistrahls zum Zeitpunkt $t = 1,1$ s

Die Abhängigkeit der Partikelausbreitung kann durch einen Vergleich der Partikelgrößenverteilung für verschiedene Bereiche detaillierter betrachtet werden. Am Ort der Injektion entstehen Partikel mit unterschiedlichen Durchmessern, die insgesamt einer bestimmten Partikelgrößenverteilung entsprechen, die bereits in Abschnitt 3.4.2.1 näher beschrieben wurde. Im Folgenden wird die Partikelgrößenverteilung als flächennormierte Summenverteilung angegeben. Die Fläche eines Bins ergibt sich somit aus der Anzahl der Partikel, die innerhalb des jeweiligen Durchmesserintervalls liegen. Die Summe aller Bin-Flächen ergibt eins. Diese Darstellung ist besonders geeignet, um Verschiebungen in der Verteilung zu erkennen. Die folgende Abb. 4.21 zeigt die Partikelgrößenverteilung als flächennormierte Summenverteilung für die in diesem Abschnitt durchgeführten Simulationen. Der Unterschied zu der in Abb. 3.13 dargestellten Partikelgrößenverteilung besteht darin, dass dort die Anzahl der Partikel noch mit dem Volumen bzw. der Masse der einzelnen Partikel multipliziert wurde.

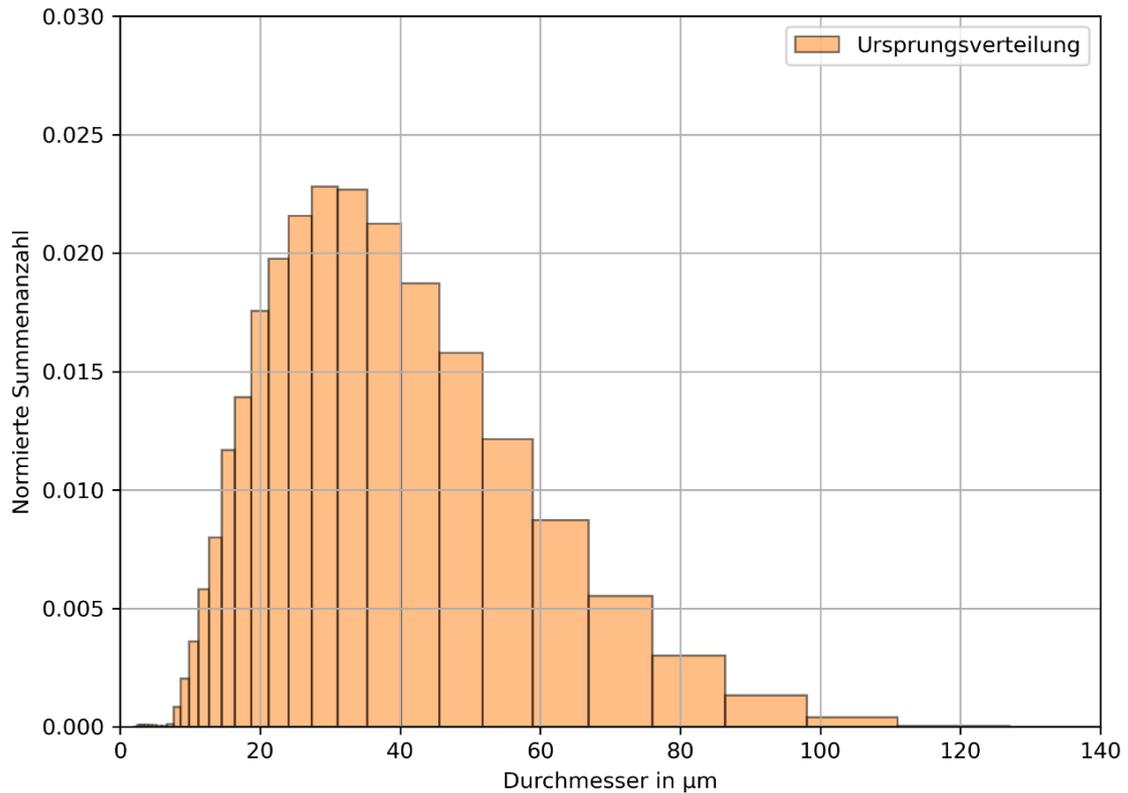


Abb. 4.21 Über die Gesamtzahl normierte Größenverteilung der Anzahl der Partikel der Ursprungsverteilung

Geringfügige Änderungen dieser Ursprungsverteilung im Ausbreitungsgebiet kann vielfältige Gründe haben, wie dem Austreten von Partikeln aus dem Ausbreitungsgebiet, der Ablagerung von Partikeln an Wänden oder auch statistischen Fluktuationen bei der Injektion. Zu einem Zeitpunkt, zu dem bereits eine ausreichend große Menge injiziert wurde und noch kein nennenswerter Anteil der Partikel das Ausbreitungsgebiet verlassen hat, kann jedoch ein Vergleich mit den Ausgangsverteilungen Hinweise auf das partikelgrößenabhängige Verhalten geben. Im Folgenden werden daher die Partikelgrößenverteilungen für den Zeitpunkt $t = 1,1$ s betrachtet

Von besonderem Interesse sind die bereits oben qualitativ beschriebenen Phänomene entlang der Strahlachse und in den äußeren Bereichen des Freistrahls. In Abb. 4.22 unten sind sechs Bereiche dargestellt, für die im Folgenden die Partikelgrößenverteilung betrachtet wird.

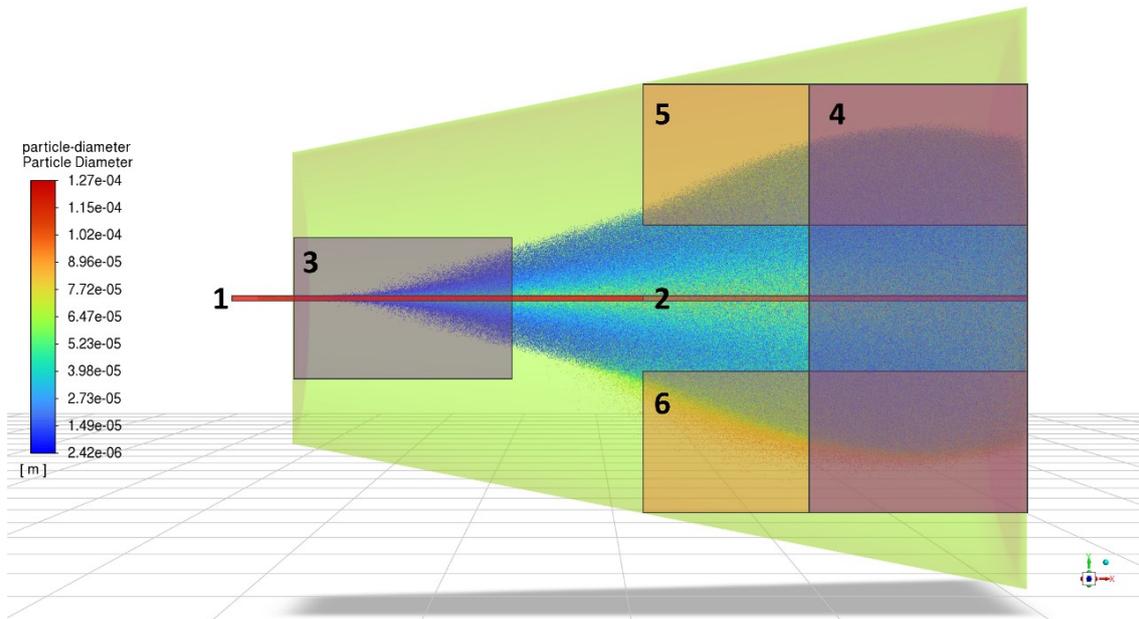


Abb. 4.22 Abbildung der sechs Raumbereiche, in denen die Partikelgrößenverteilung verglichen wird. Dargestellt hier sind die Partikeldurchmesser im Ausbreitungsgebiet zum Zeitpunkt $t = 1,1$ s

Die in Abb. 4.22 mit 1 und 2 bezeichneten Raumregionen liegen in einem Bereich von 20 mm Abstand von der Strahlachse. Es wird unterschieden zwischen der Raumregion bis zur Hälfte des Ausbreitungsgebietes (1) und der Raumregion ab der Hälfte des Ausbreitungsgebietes (2). Die Partikelgrößenverteilungen für diese beiden Raumregionen sind in der Abb. 4.23 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass bei beiden Partikelgrößenverteilungen die Anzahl der großen Partikel im Vergleich zu Ursprungsverteilung erhöht ist. Im hinteren Bereich der Strahlachse wird dieses Phänomen noch deutlicher herausgestellt. Beides steht im Einklang mit der Annahme, dass die größeren Partikel ihre Richtung weniger stark ändern und sich eher entlang der Strahlachse bewegen. Bei kleineren Partikeln ist die Abweichung des Richtungsvektors von einer reinen Bewegung in x-Richtung größer, so dass mit zunehmendem Abstand der Anteil größerer Partikel entlang der Strahlachse zunimmt.

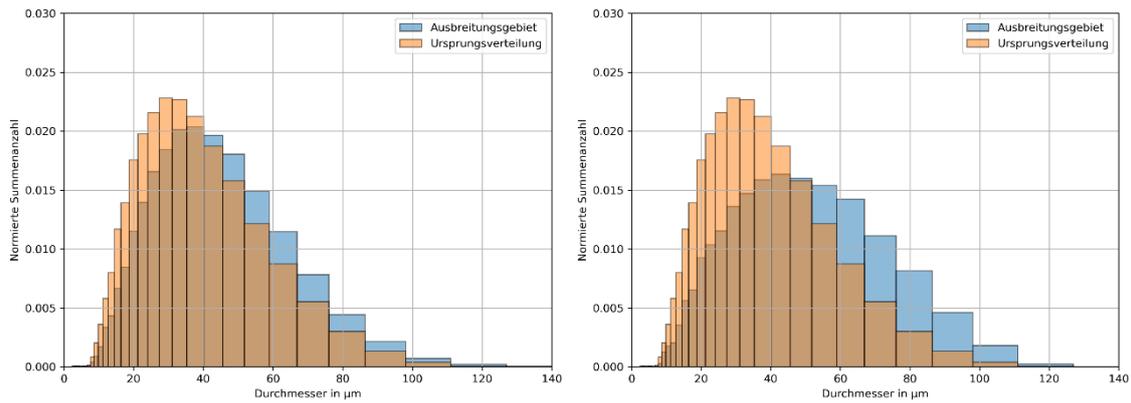


Abb. 4.23 Flächennormierte Partikelgrößenverteilung zum Zeitpunkt $t = 1,1$ s für den Raumbereich der vorderen Strahlachse 1 (links) und der hinteren Strahlachse 2 (rechts)

Bei den in Abb. 4.22 mit 3 und 4 bezeichneten Raumbereichen handelt es sich zum einen um den vorderen Bereich im ersten Meter des Ausbreitungsgebietes (3) und zum anderen um den hinteren Bereich im letzten Meter des Ausbreitungsgebietes (4). Die Partikelgrößenverteilungen für diese beiden Raumbereiche sind in Abb. 4.24 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass bei der vorderen Raumregion die Anzahl der kleineren Partikel erhöht ist. Dies ist gut erklärbar mit den in Abb. 4.20 dargestellten partikelgrößenabhängigen Geschwindigkeiten. Wie dort zu erkennen ist, werden die kleinen Partikel zunächst schneller aus dem Rohr heraus beschleunigt, werden dann aber stark abgebremst, so dass sie nach einem halben Meter langsamer sind als die großen Partikel. Hinzu kommt der bereits mehrfach beschriebene Effekt, dass die kleinen Partikel stärker von der Strahlachse abweichen, so dass sie bis zur Grenze $x = 1$ m im Mittel eine längere Wegstrecke zurücklegen. Beide Effekte zusammen erklären die deutlich erhöhte Anzahl kleiner Partikel im vorderen Raumbereich. Die gleichen Effekte erklären auch das umgekehrte Verhältnis für den hinteren Raumbereich. Dort ist der Anteil größerer Partikel nur geringfügig erhöht. Diese Zunahme ist durch die stärkere Abbremsung und den längeren Weg der kleineren Partikel zu erklären. So ist die Anzahl der kleinen Partikel, die in $1,1$ s mehr als 4 m zurücklegen, geringer als die Anzahl der großen Partikel die so weit kommen.

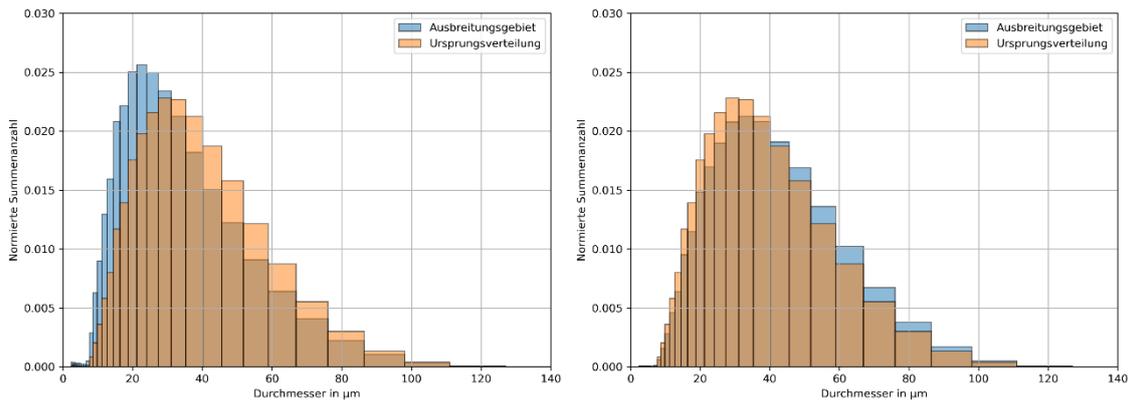


Abb. 4.24 Flächennormierte Partikelgrößenverteilung zum Zeitpunkt $t = 1,1$ s für den vorderen Raumbereich 3 (links) und den hinteren Raumbereich 4 (rechts)

Die in Abb. 4.22 mit 5 und 6 bezeichneten Raumbereiche sind die Bereiche, die ab der Hälfte des Ausbreitungsbereichs (2,5 m) mehr als 0,5 m von der Strahlachse entfernt sind. In Abb. 4.25 sind der obere (5) und der untere Bereich (6) mit diesen Abständen gegenübergestellt. Im oberen Bereich ist die Anzahl der kleineren Partikel erhöht, was auf den bekannten Effekt zurückzuführen ist, dass die kleineren Partikel stärker von der Strahlachse abweichen. Dementsprechend ist die Anzahl der kleinen Partikel in den Randbereichen des Freistrahls grundsätzlich erhöht. In der Raumregion 6, die ebenfalls eine Randregion des Freistrahls darstellt, ist jedoch die Anzahl der großen Partikel erhöht. Dies liegt daran, dass bei diesen Entfernungen und Geschwindigkeiten der Partikel die massenabhängige Gravitationskraft nicht mehr vernachlässigt werden kann. Die schwereren Partikel werden insgesamt stärker nach unten beschleunigt, so dass sich nicht nur insgesamt mehr kleine Partikel in den oberen hinteren Regionen befinden, sondern auch deutlich mehr schwere Partikel in den unteren hinteren Regionen.

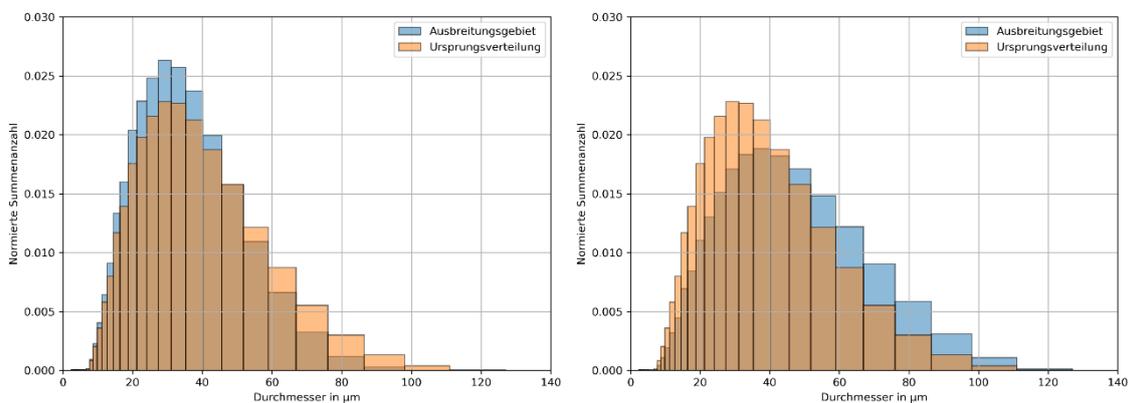


Abb. 4.25 Flächennormierte Partikelgrößenverteilung zum Zeitpunkt $t = 1,1$ s für die äußeren Raumbereiche oben 5 (links) und unten 6 (rechts)

Das Verhalten der Partikelphase wurde in diesem Abschnitt konkret für einen Zeitpunkt dargestellt und untersucht. Die hier gemachten Beobachtungen und Analysen sind jedoch auf das allgemeine Verhalten der Partikelphase übertragbar. So ist die Geschwindigkeit und Reichweite der Partikel deutlich von der Partikelgröße abhängig, so dass z.B. lungengängige Partikel deutlich stärker abgebremst werden, aber auch langsamer absinken als große Partikel. Große Partikel wiederum sinken schneller und können sich entsprechend schneller am Boden absetzen.

4.2.3 Variationen

Die bisherigen Simulationen eines Gasfreistrahls (Abschnitt 4.1) und eines partikelbeladenen Freistrahls (Abschnitt 4.2) wurden jeweils mit bestimmten Anfangsbedingungen beschrieben, die sich an den /GRS 23/ orientieren. Aufbauend auf diesen Simulationen können Variationen dieser Anfangsbedingungen durchgeführt werden, um deren Einfluss auf die Ausbreitung des Freistrahls zu analysieren. Im Rahmen dieses Vorhabens wurde eine Vielzahl von Variationen durchgeführt, die in Tab. 4.1 aufgelistet sind. Im Folgenden werden die Variationen der Partikelbeladung, des Behältergases, des Anfangsdruckes und der Partikelgrößenverteilung dargestellt und kurz bewertet.

Tab. 4.1 Auflistung der durchgeführten Simulationen inklusive der zugehörigen Randbedingungen

lfd. Nummer	Füllgas	Anfangsdruck	Partikelverteilung	Partikelanzahl pro Zeitschritt	Blende
1	Luft	0,5 bar	Ohne	0	Nein
2	Helium	0,5 bar	Ohne	0	Nein
3	Helium	0,5 bar	wie beim Experiment	121	Nein
4	Helium	0,5 bar	wie beim Experiment	12	Nein
5	Helium	0,5 bar	wie beim Experiment	2	Nein
6	Helium	0,5 bar	wie beim Experiment	121	ja
7	Helium	0,5 bar	Gaußverteilung um 10 µm	121	Nein
8	Helium	0,5 bar	Gaußverteilung um 10 µm	2	Mein
9	Helium	0,25 bar	wie beim Experiment	2	Nein
10	Helium	0,5 bar	wie beim Experiment	2	Nein
11	Helium	1 bar	wie beim Experiment	2	Nein
12	Argon	0,25 bar	wie beim Experiment	2	nein
13	Argon	0,5 bar	wie beim Experiment	2	Nein
14	Radon	0,25 bar	wie beim Experiment	2	Nein
15	Radon	0,5 bar	wie beim Experiment	2	Nein

Um Aussagen über den Einfluss der Partikelbeladung auf die Ergebnisse treffen zu können und um die Realisierbarkeit von Berechnungen mit geringerer Partikelbeladung, und damit geringerer benötigter Rechenleistung, auszutesten, wurde die oben beschriebene Simulation eines partikelbeladenen Freistrahls mit drei verschiedenen Partikelbeladungen variiert. So wurde einmal eine Beladung mit 2 Partikeln pro Zeitschritt, einmal eine Beladung mit 12 Partikeln pro Zeitschritt und einmal eine Beladung mit 121 Partikeln pro

Zeitschritt betrachtet. Die resultierende Partikelverteilung nach $t = 0,75$ s ist in Abb. 4.26 dargestellt.

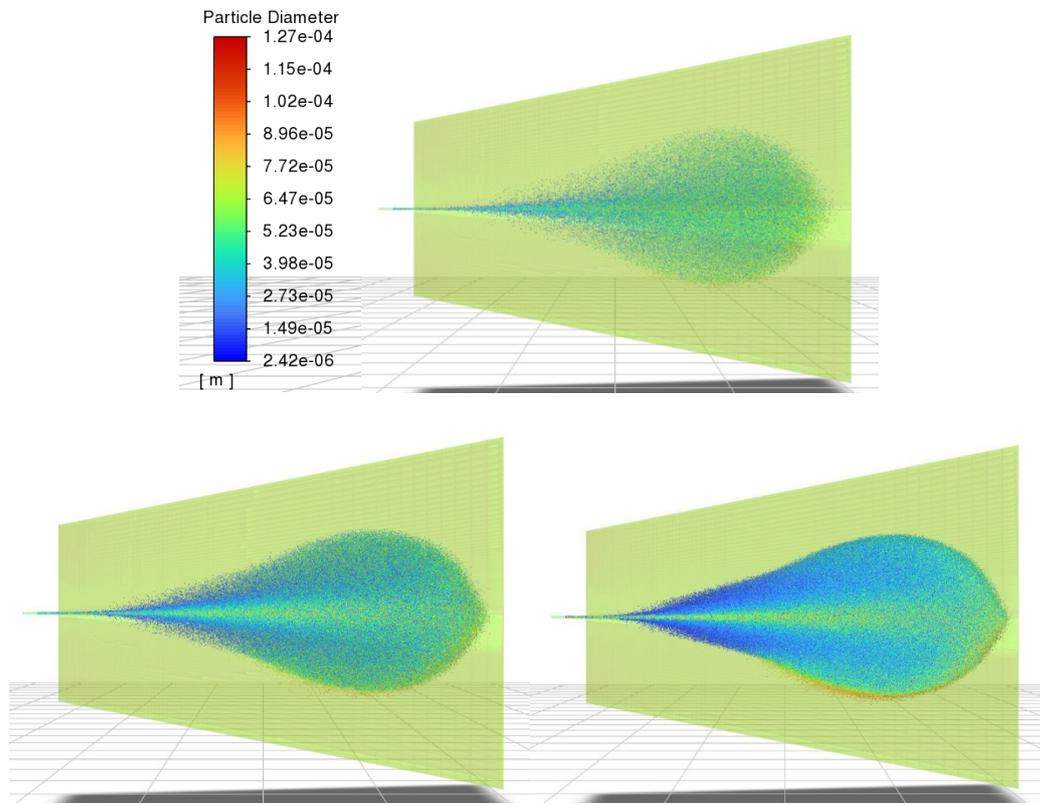


Abb. 4.26 Verteilung der Partikel im Ausbreitungsgebiet nach $t = 0,75$ s in Abhängigkeit ihres Durchmessers für verschiedene Anzahlen der Partikel, 2 Partikel pro Zeitschritt (oben), 12 Partikel pro Zeitschritt (links), 121 Partikel pro Zeitschritt (rechts)

Wie in Abb. 4.26 zu sehen ist, ist die Form des Ausbreitungskegels der Partikel auch bei einer geringerer Partikelbeladung deutlich erkennbar. Die Dimensionen des Freistrahls sind dabei vergleichbar. Die bereits identifizierten Besonderheiten der räumlichen Partikelgrößenverteilung sind ebenfalls für alle drei Partikelbeladungen vergleichbar. Die genaue Form sowie das unterschiedliche Ausbreitungsverhalten der verschiedenen Partikelgrößen ist bei größerer Partikelbeladung ausgeprägter, da eine deutlich höhere Anzahl an Partikeln vorliegt. Insgesamt kann geschlussfolgert werden, dass bei einer größeren Partikelanzahl eine bessere Statistik vorliegt, jedoch deutlich höhere Rechenzeiten benötigt werden und die Dimension des Freistrahls auch bei geringeren Partikelbeladungen vergleichbar sind.

Aber auch die Gesamtmasse der Partikel, die von der Partikelbeladung abhängt, hat einen Einfluss auf die Partikelgeschwindigkeiten. Aufgrund ihrer Trägheit setzen die Partikel der Beschleunigung durch das ausströmende Gas einen Widerstand entgegen und werden nicht sofort auf die gleiche Geschwindigkeit wie das Helium beschleunigt. Mit zunehmender Partikelbeladung verstärkt sich dieser Effekt, wodurch die Strömungsgeschwindigkeit weiter reduziert wird. Insgesamt wird also bei höherer Partikelbeladung die Geschwindigkeit des ausströmenden Gas-Partikel-Gemisches reduziert. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die erhöhte Partikelmasse die Gesamtträgheit des Systems erhöht und mehr Energie zur Beschleunigung der Partikel benötigt wird. Daher wird die Gesamtgeschwindigkeit des ausströmenden Gases und der Partikel verlangsamt.

Ein anderer Aspekt, der betrachtet wurde, war der Einfluss des Gases mit Überdruck im Inneren des Behälters, dabei wurden neben den o. g. Varianten mit Luft und Helium die beiden Edelgase Radon und Argon betrachtet, da diese eine große Variation in der Dichte ergeben. Die Dichte von Argon ist unter Normalbedingungen ungefähr 13-mal so groß wie die von Helium und die Dichte von Radon ist unter Normalbedingungen ungefähr 72-mal so groß wie die von Helium. Die Ausströmgeschwindigkeiten der drei Gase unterscheiden sich daher stark.

Durch die an die jeweilige Berechnung angepassten Zeitschritt-Größen sind für den Zeitpunkt von $t = 0,75$ s jeweils unterschiedlich viele Zeitschritte durchlaufen und damit unterschiedlich viele Partikel freigesetzt worden, bei der Simulation mit Helium im Behälter waren es signifikant mehr Partikel als bei den beiden Gasen Argon und Radon. Die Geschwindigkeiten der Partikel für die verschiedenen Gase sind für den Zeitpunkt $t = 0,75$ s in Abb. 4.27 dargestellt.

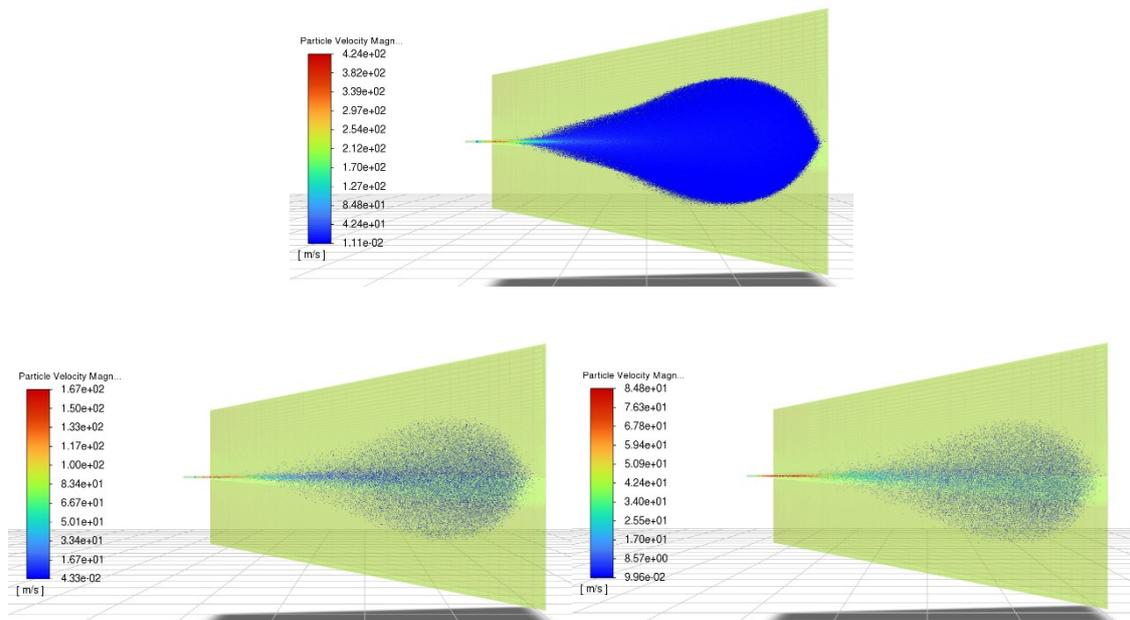


Abb. 4.27 Partikelgeschwindigkeit nach $t = 0,75$ s für die Edelgase Helium (oben), Argon (links) und Radon (rechts)

Wie in Abb. 4.27 zu erkennen ist, nimmt die Geschwindigkeit der Partikel mit steigender Dichte des ausströmenden Gases ab. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Auströmgeschwindigkeit des Gases proportional zur Quadratwurzel des Druckunterschieds geteilt durch die molare Masse beziehungsweise Dichte des Gases unter Normalbedingungen ist. Die Gasgeschwindigkeit nimmt also mit höherer Dichte ab. Bei einem gleichen anfänglichen Überdruck ist die Austrittsgeschwindigkeit von Helium daher deutlich größer als die von Argon und Radon. Die Partikel werden durch das Gas beschleunigt, daher nimmt die Geschwindigkeit der Partikel mit steigender Dichte des ausströmenden Gases ab.

Des Weiteren wurden für Helium Simulationen mit verschiedenen Anfangsdrücken im Behälter durchgeführt. Dafür wurde die Druckfunktion für einen Anfangsdruck von 0,25 bar, 0,5 bar und 1 bar berechnet und die Simulationen damit durchgeführt. Die resultierenden Partikelverteilungen mit der zugehörigen Geschwindigkeit im Ausbreitungsgebiet nach $t = 0,75$ s für die verschiedenen Anfangsdrücke sind in Abb. 4.28 dargestellt.

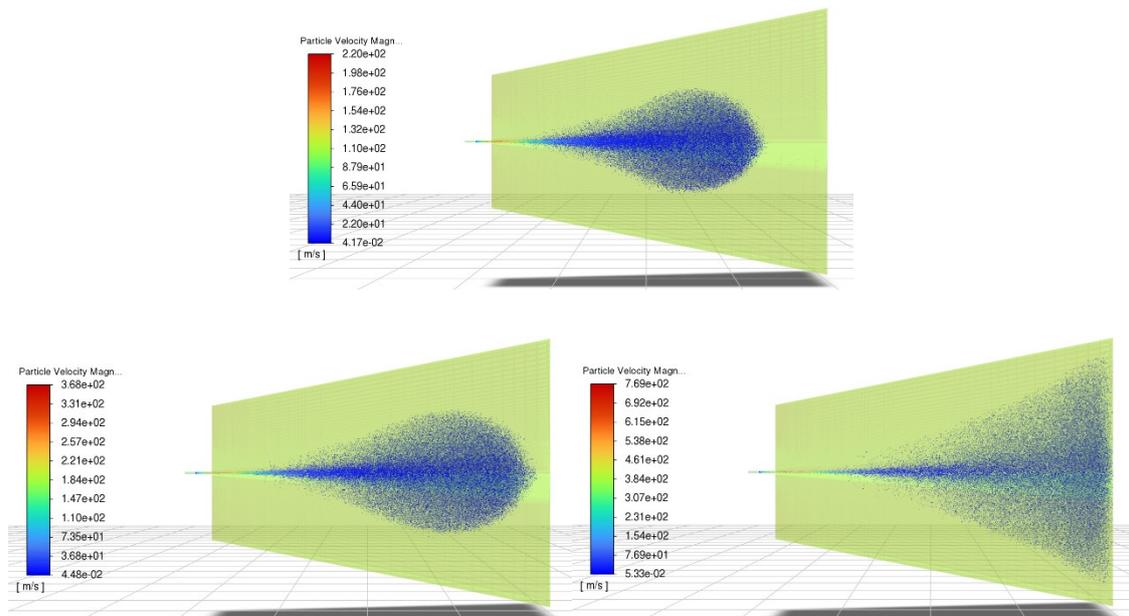


Abb. 4.28 Partikelgeschwindigkeit nach $t = 0,75$ s für Helium bei verschiedenen Anfangsdrücken 0,25 bar (oben), 0,5 bar (links) und 1 bar (rechts)

In Abb. 4.28 ist zu erkennen, dass der Freistrah und damit die Partikel im Freistrah bei einem höheren Anfangsdruck im Behälter eine höhere Geschwindigkeit haben und der Freistrah sich damit schneller ausbreitet. Dies ist mit dem bereits oben erwähnten Zusammenhang zu erklären, dass die Austrittsgeschwindigkeit des Gases proportional zur Quadratwurzel der Druckdifferenz ist.

Eine andere Möglichkeit der Variation ist die Veränderung der Partikelgrößenverteilung. Dafür wurden Simulationen mit einer Partikelgrößenverteilung in Form einer Gaußkurve mit einem Mittelwert von $10 \mu\text{m}$ und einer Standardabweichung von $2,5 \mu\text{m}$ durchgeführt. Die Dichte der Partikel sowie die Anzahl der Partikel werden dabei gleichgehalten. Der resultierende Freistrah bei einem Überdruck von 0,5 bar und nach $t = 0,75$ s ist in Abb. 4.29 dargestellt.

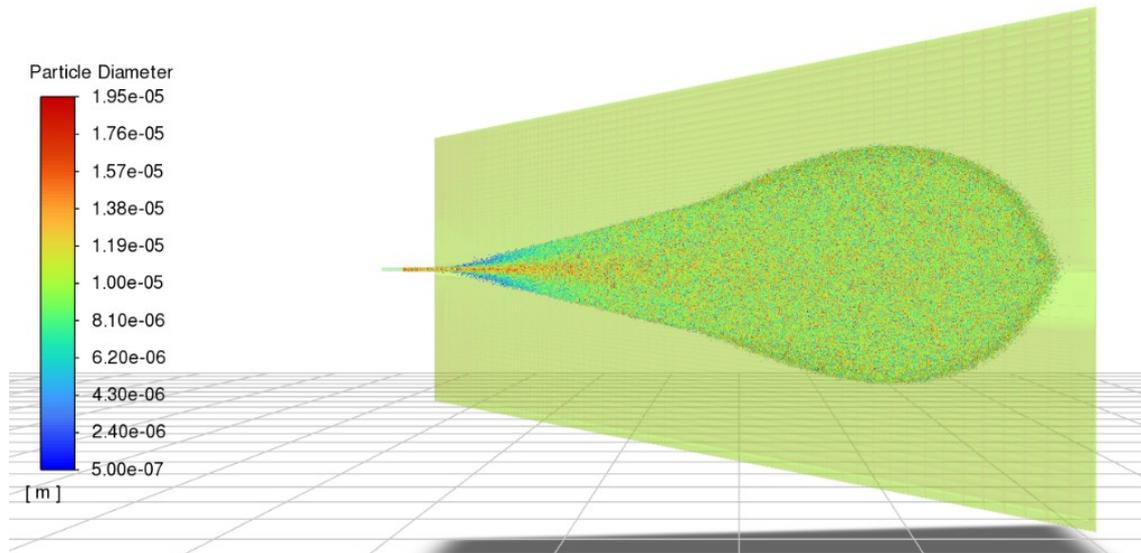


Abb. 4.29 Verteilung der Partikel im Ausbreitungsgebiet nach $t = 0,75$ s in Abhängigkeit ihres Durchmessers

Aufgrund des kleineren Durchmessers haben die Partikel in Abb. 4.29 ein geringeres Gewicht, so dass sich die Partikel in dieser Simulation ähnlich verhalten wie die kleineren Partikel in den vorherigen Simulationen. Nur zu Beginn des Freistrahls sind partikelgrößenabhängige Unterschiede in der Ausbreitung des Freistrahls zu erkennen, da sich die kleineren Partikel weiter außen im Freistrahls befinden, wie dies auch bei der anderen Partikelgrößenverteilung zu beobachten ist.

4.3 Haube

Die Wirkung einer Haube über einem Behälter aus dem ein Freistrahls austritt, wurde im Rahmen der Experimente in /GRS 23/ mit einer Lochblende mit einer zentralen Bohrung von 30 mm Durchmesser im Abstand von 300 mm vom Austrittsrohr untersucht. In Anlehnung an diese Experimente wird dies auch in den Simulationen so untersucht. Die Simulation baut dabei auf der im vorherigen Abschnitt beschriebenen Simulation eines partikelbeladenen Heliumfreistrahls auf, mit dem Unterschied, dass eine Lochblende in den Ausbreitungsbereich des Freistrahls eingefügt wird.

Wie im vorangegangenen Abschnitt kann die Gasgeschwindigkeit des partikelbeladenen Freistrahls getrennt von den Partikelgeschwindigkeiten für das gesamte Rechengebiet ermittelt werden. In Abschnitt 4.3.1 wird daher zunächst die Gasphase betrachtet und

der Freistrah analog zum partikelbeladenen Freistrah analog ausgewertet. Anschließend wird in Abschnitt 4.3.1 die Partikelphase und ihr Verhalten betrachtet.

4.3.1 Gasphase

In der folgenden Abb. 4.30 ist beispielhaft für den Zeitpunkt $t = 1,5$ s die Gasgeschwindigkeit des partikelbeladenen Freistrahls mit Lochblende gezeigt. In der Darstellung ist zu erkennen, wie sich zunächst räumlich ein Freistrah bildet, bevor dieser durch die Blende unterbrochen wird. Ausgehend von der Strahlachse wird ein Teil des Gases nach oben und unten entlang der Blende umgelenkt. Durch das Loch entsteht ein neuer Freistrah, der sich auf der anderen Seite der Blende ausbildet.

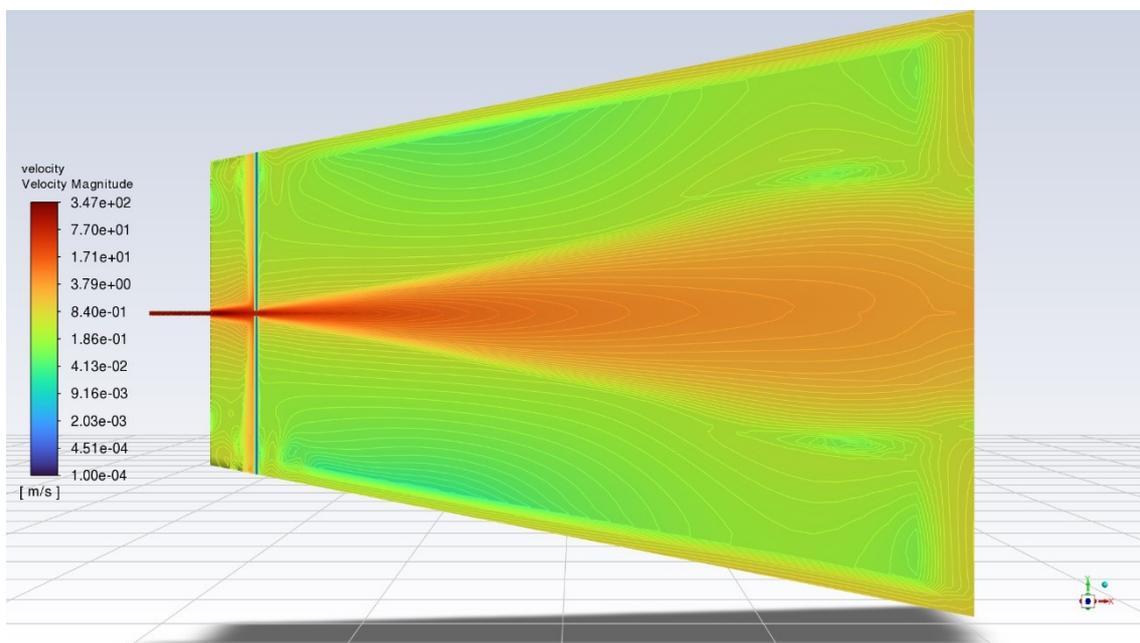


Abb. 4.30 Geschwindigkeit eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s

Der Effekt der Blende lässt sich nicht nur an der Geschwindigkeitsverteilung, sondern auch an einer Vielzahl anderer Parameter erkennen. So ist in der folgenden Abb. 4.31 beispielhaft die Dichte des Fluids für den Zeitpunkt $t = 1,5$ s dargestellt.

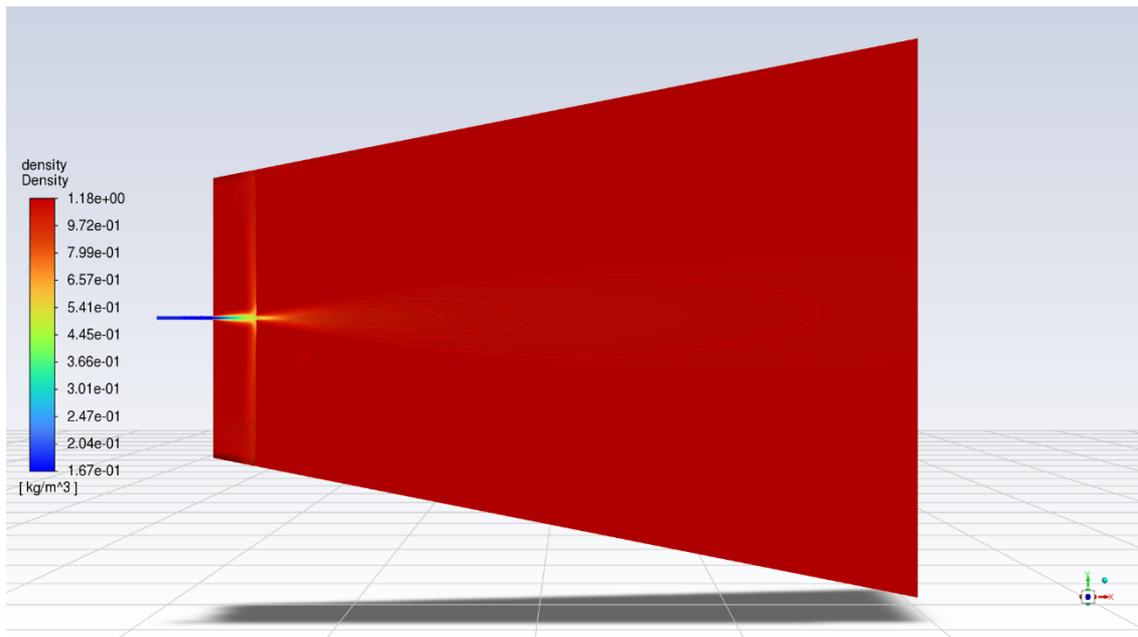


Abb. 4.31 Dichte des Fluids im Rohr und im Ausbreitungsgebiet zum Zeitpunkt $t = 1,5 \text{ s}$

Die ortsabhängige Geschwindigkeit des Gases eines partikelbeladenen Freistrahls mit Lochblende in der Strahlachse kann analog zu Abschnitt 4.2 dargestellt und im Ähnlichkeitsbereich entlang der x -Achse durch eine hyperbolische Funktion beschrieben werden. So ist in der folgenden Abb. 4.32 beispielhaft für den Zeitpunkte $t = 1,5 \text{ s}$ die normierte Geschwindigkeit entlang der x -Achse aufgetragen.

Ein Unterschied besteht hier darin, dass es zwei verschiedene Freistrahlabchnitte gibt: die Ausbreitung bis zur Blende und die Ausbreitung hinter der Blende. Das Verhalten des Freistrahls vor der Blende zeigt keine signifikanten Unterschiede zum bereits betrachteten partikelbeladenen Freistrahls. Der Fokus liegt daher auf dem Freistrahls, der sich hinter der Blende ausbildet. Die Normierung erfolgt daher auf die maximale Geschwindigkeit hinter der Blende und die Fit-Funktion wird entsprechend verschoben.

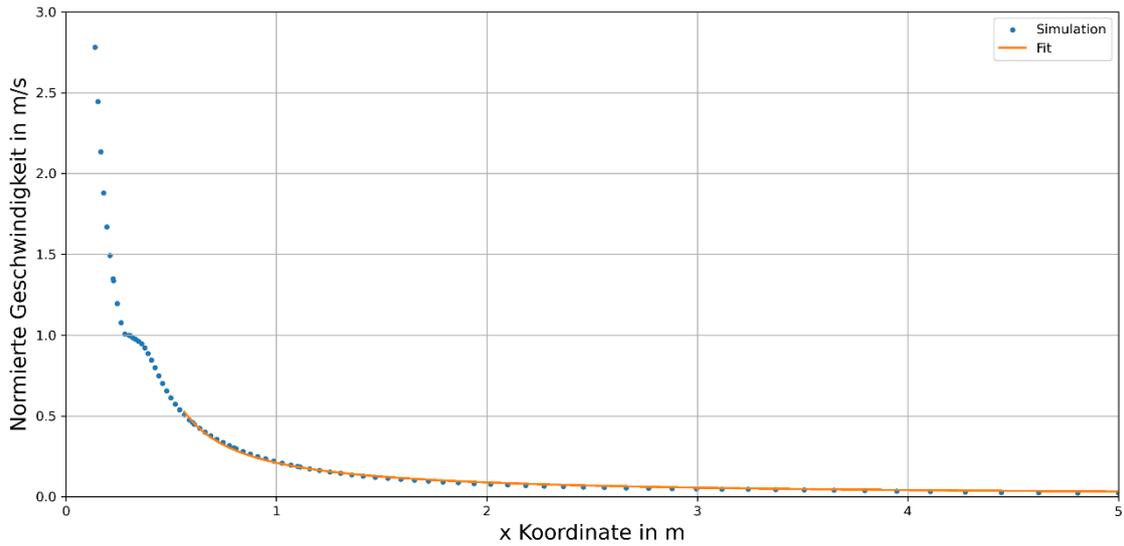


Abb. 4.32 Axiale Geschwindigkeit der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s

Im Ähnlichkeitsbereich des zweiten Freistrahls kann eine Funktion durch den oben aufgeführten hyperbolischen Verlauf gefittet werden. Aus der Fit-Funktion ergibt sich die Abbaukonstante K_1 , welche in der folgenden Abb. 4.33 dargestellt ist.

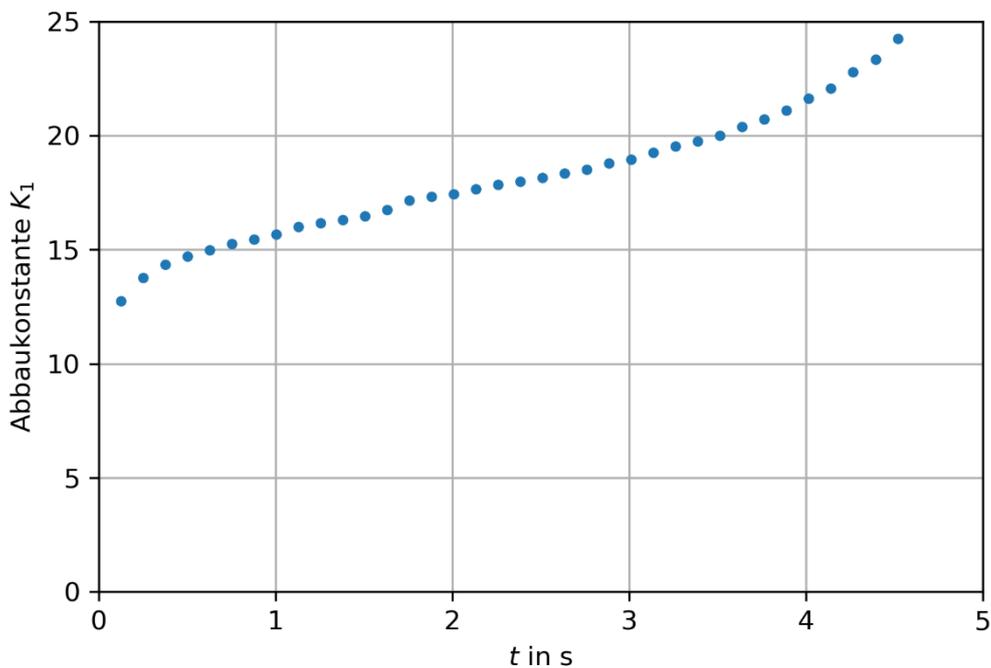


Abb. 4.33 Abbaukonstante der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende

Es zeigt sich, dass die Abbaukonstante K_1 zwischen etwa 15 und 20 liegt und über die Zeit leicht ansteigt. Der Wert ist höher als die Abbaukonstante des partikelbeladenen Freistrahls ohne Lochblende, was einen langsameren Geschwindigkeitsabbau bedeutet.

Diese Zeitabhängigkeit der Abbaukonstante der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende, welche im Rahmen dieses Vorhabens ermittelt wurde, kann mit der experimentell ermittelten Abbaukonstante aus /GRS 23/ verglichen werden.

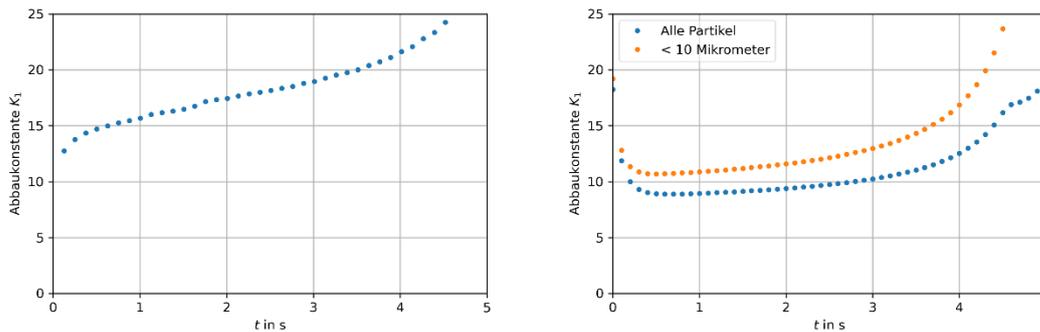


Abb. 4.34 Durch eine Simulation (links) ermittelte Abbaukonstante der Gasphase eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende und durch Experimente /GRS 23/ (rechts) ermittelte Abbaukonstante der Partikel eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende

In Abb. 4.34 sind die durch Simulation ermittelten Abbaukonstanten der Gasphase eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende den experimentell bestimmten Abbaukonstanten der Partikel des partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende gegenübergestellt. Obwohl ein direkter Vergleich nicht möglich ist, kann festgestellt werden, dass die Abbaukonstanten in der gleichen Größenordnung liegen, die Abbaukonstante für die Gasphase jedoch etwas größer ist. Bei den Partikeln kleiner als $10 \mu\text{m}$, die bereits ein sehr gutes Folgevermögen gegenüber der Gasphase aufweisen, ist dieser Unterschied jedoch bereits geringer als bei der über alle Partikelgrößen integral berechneten Abbaukonstante. Der Effekt ist im Vergleich zum partikelbeladenen Helium Freistrahls aus dem vorherigen Abschnitt genau umgekehrt.

Die ortsabhängige Geschwindigkeit des Gases eines partikelbeladenen Freistrahls orthogonal zur x-Achse kann ebenfalls analog zu Abschnitt 4.2 im Ähnlichkeitsbereich des Freistrahls durch eine Gauß-Verteilungskurve beschrieben werden. In der folgenden Abb. 4.35 ist beispielhaft für den Zeitpunkt $t = 1,5 \text{ s}$ an den Positionen $x = 0,8 \text{ m}$, also $0,5 \text{ m}$ hinter der Lochblende, die Geschwindigkeit orthogonal zur Strahlachse

aufgetragen. Die Positionen der Berechnungen für die Lochblende haben den gleichen Nullpunkt wie in den vorherigen Betrachtungen, d. h. die Öffnung des Rohres. Die Öffnung der Lochblende liegt daher bei $x = 300 \text{ mm}$.

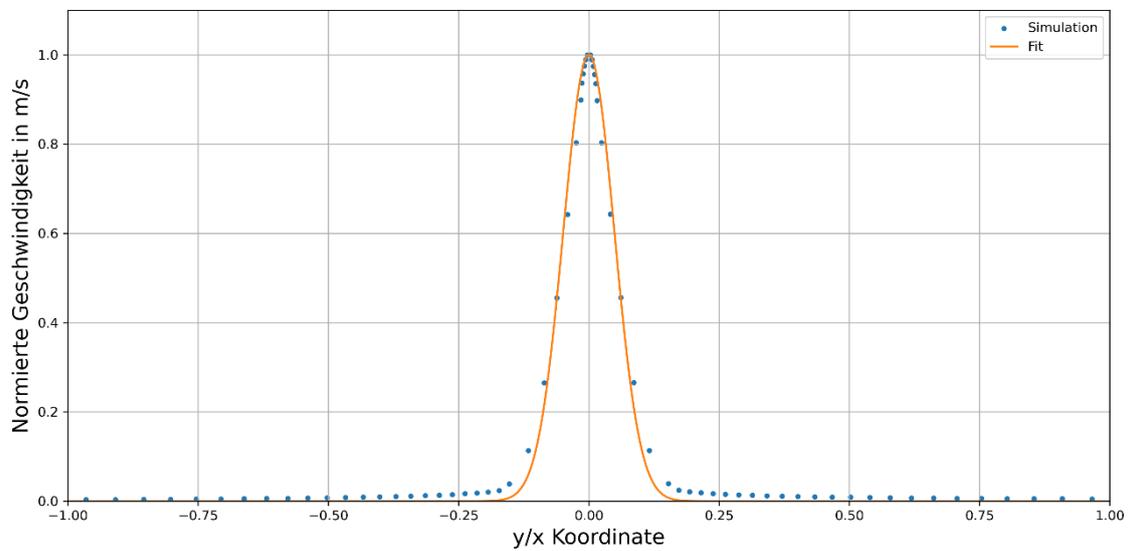


Abb. 4.35 Normierte orthogonale Geschwindigkeitsverteilung der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende zum Zeitpunkt $t = 1,5 \text{ s}$ an der Position $x = 0,8 \text{ m}$

Eine zeitabhängige Streurate lässt sich daher, wie in der folgenden Abb. 4.36 dargestellt, für verschieden Positionen entlang der x-Achse bestimmen. In diesem Fall sind die vier Positionen $x = 225 \text{ mm}$, $x = 600 \text{ mm}$, $x = 800 \text{ mm}$ und $x = 1100 \text{ mm}$ dargestellt.

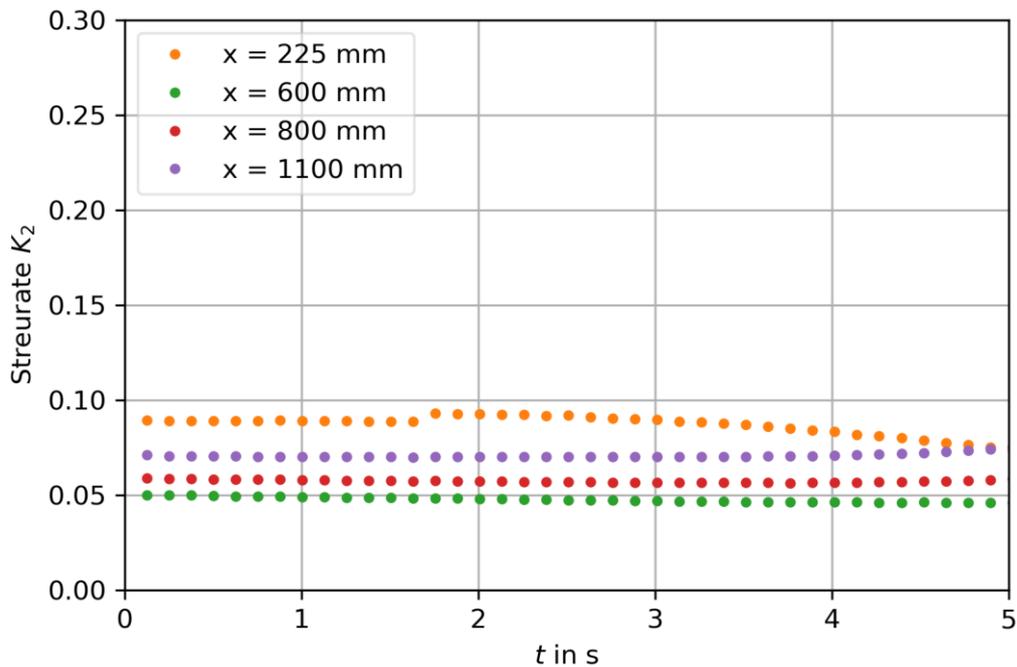


Abb. 4.36 Streurrate der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende abhängig von der Zeit

Diese Zeitabhängigkeit der Streurrate des Helium Freistrahls, welche im Rahmen dieses Vorhabens ermittelt wurde, kann mit der experimentell ermittelten Abbaukonstante aus /GRS 23/ verglichen werden, dargestellt ist dies in Abb. 4.37.

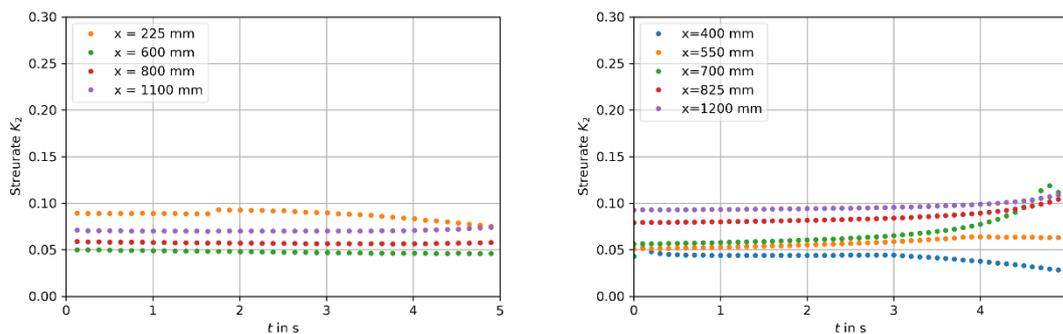


Abb. 4.37 Durch eine Simulation (links) ermittelte Streurrate der Gasphase eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende und durch Experimente /GRS 23/ (rechts) ermittelte Streurrate der Partikel eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende

In Abb. 4.37 lässt sich erkennen, dass die Streurrate in beiden Fällen relativ konstant über die Zeit verläuft und jeweils zwischen $K_2 = 0,05$ und $K_2 = 0,1$ liegt.

4.3.2 Partikelphase

Wie schon in Abschnitt 4.3.1 ist auch bei den Simulationen mit einer Lochblende das Verhalten der unterschiedliche Parameter der Partikelphase relevant. Daher werden im Folgenden beispielhaft Ergebnisse für den Zeitpunkt $t = 1,5$ s dargestellt und analysiert.

In der Abb. 4.38 sind die Partikel chronologisch nach dem Zeitpunkt ihrer Injektion nummeriert. Es ist zu erkennen, dass der Partikel-Freistrahl hinter der Blende dem zuvor betrachteten Partikel-Freistrahlnahezu gleich. Direkt an der Blende sind vor allem neuere Partikel zu erkennen. Diese Partikel sind kurz vorher auf die Blende getroffen und wurden dort zusammen mit dem Gas orthogonal zur Strahlachse entlang der Blende beschleunigt, wie in Abb. 4.30 zu sehen ist. Zwischen Blende und Behälter sind dann auch ältere Partikel zu erkennen. Die relativ geringe Anzahl der hier beobachtbaren älteren Partikel deutet darauf hin, dass ein Teil der älteren Partikel, die von der Blende aufgehalten wurden, bereits aus dem Ausbreitungsgebiet heraus beschleunigt wurden.

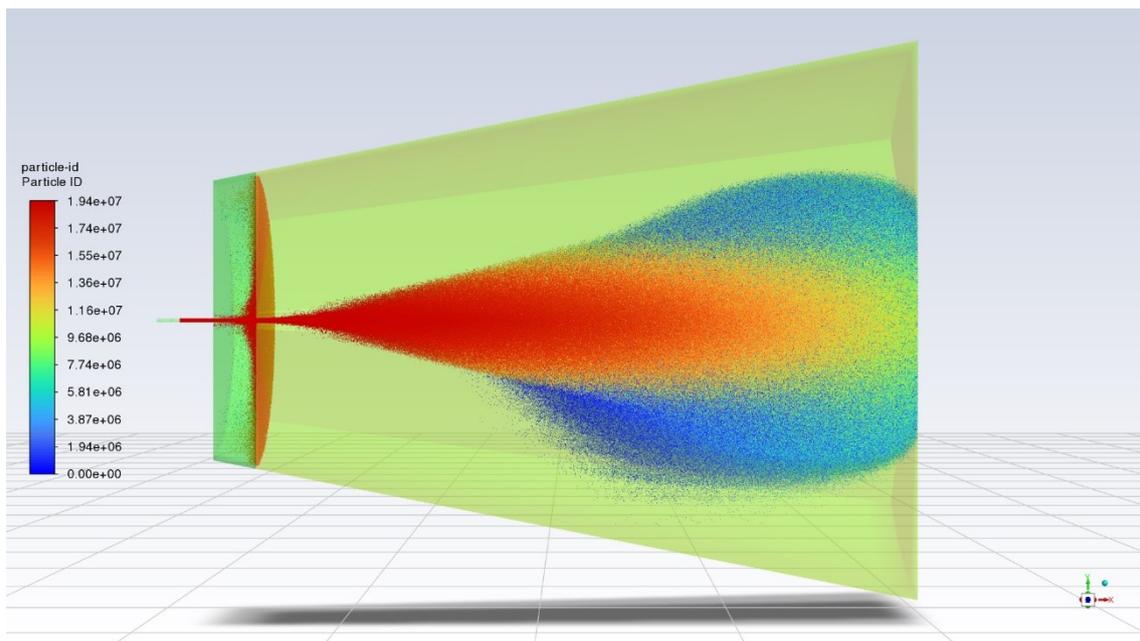


Abb. 4.38 Chronologisch durchnummerierte Partikel in einer Simulation eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s

Die oben aufgestellte These kann am besten durch einen Vergleich der Partikel Nummern vor und hinter der Blende getestet werden. Dazu sind in Abb. 4.39 die Partikel Nummern für diese beiden Positionen als Histogramme dargestellt.

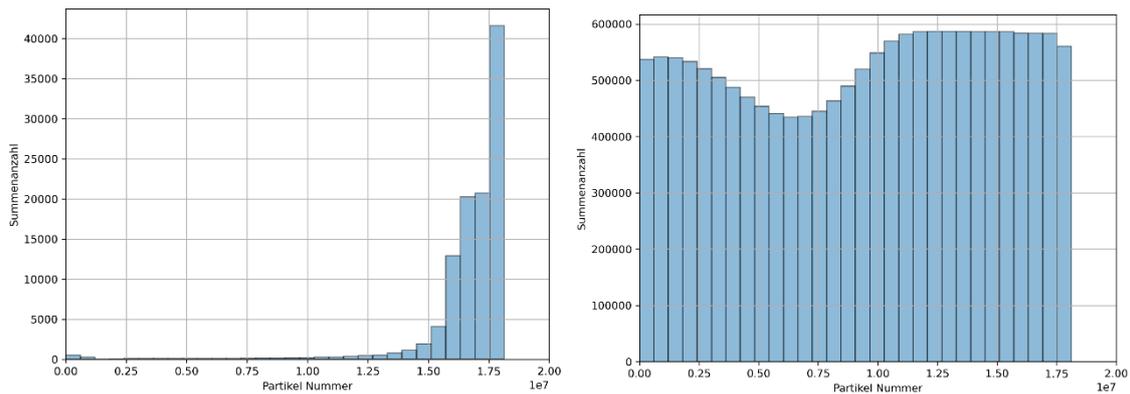


Abb. 4.39 Histogramm der Partikel Nummern für den Bereich vor der Lochblende (links) und hinter der Lochblende (rechts) zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s

Aus den beiden obigen Histogrammen lassen sich eine Reihe von Schlussfolgerungen ziehen. Zunächst ist in Bezug auf die oben aufgeworfene Fragestellung festzustellen, dass sich vor der Lochblende tatsächlich überwiegend Partikel mit höherer Nummer, also jüngere Partikel, befinden. Da der Effekt des Partikelrückhaltes durch die Lochblende nicht erst kurz vor dem Zeitpunkt $t = 1,5$ s einsetzt, kann daraus geschlossen werden, dass ein großer Anteil der älteren Partikel, die durch die Lochblende zurückgehalten wurden, das Ausbreitungsgebiet verlassen haben. Weiterhin ist zu erkennen, insbesondere wenn die Gesamtzahl der injizierten Partikel berücksichtigt wird, dass die Anzahl der durch die Lochblende zurückgehaltenen Partikel um etwa eine Größenordnung geringer ist als die Anzahl der Partikel, die durch die Lochblende beschleunigt werden. Dies kann unter anderem darauf zurückgeführt werden, dass die räumliche Verteilung der Partikelphase des Freistrahls am Punkt der Lochblende ($x = 0,3$ m) noch nicht sehr breit ist. Weiterhin kann aus dem Histogramm für die Partikel hinter der Lochblende erkannt werden, dass auch dort bereits einige ältere Partikel das Ausbreitungsgebiet verlassen haben. Würden keine Partikel das Ausbreitungsgebiet verlassen, so hätte ein Histogramm der Partikelzahlen über alle erfassten Partikel für jedes Bin den gleichen Wert, was ist hier offensichtlich nicht der Fall ist. Die Anzahl der fehlenden Partikel nimmt zu Beginn zu, da sich der Freistrahл erst bilden muss, und nimmt dann wieder ab, da auch die Geschwindigkeit des Freistrahls mit der Zeit abnimmt.

In der folgenden Abb. 4.40 ist die Geschwindigkeit der Partikel farblich logarithmisch dargestellt. Auch hier ist zu erkennen, dass der Partikel-Freistrahл hinter der Blende dem zuvor betrachteten Partikel-Freistrahл ähnelt und die gleichen Effekte zu beobachten sind. Direkt an der Blende haben die Partikel noch eine relativ hohe Geschwindigkeit,

was mit der zuvor gemacht Beobachtung übereinstimmt, dass die Partikel entlang der Blende beschleunigt werden und aus dem Ausbreitungsgebiet austreten.

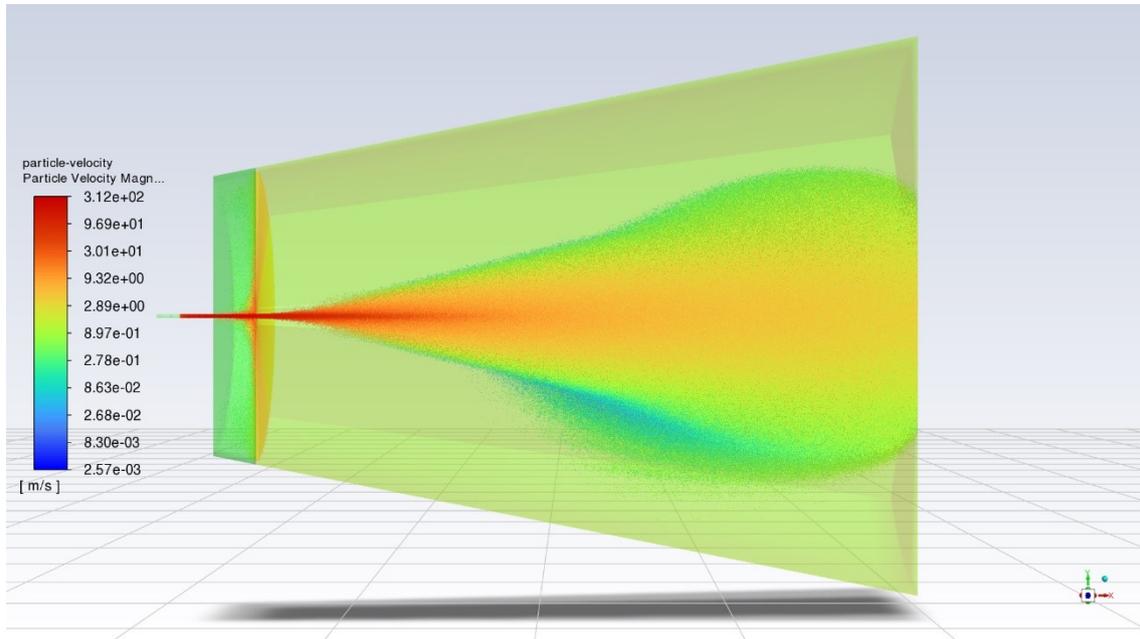


Abb. 4.40 Geschwindigkeit der Partikel in einer Simulation eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s

In der folgenden Abb. 4.41 ist der Partikeldurchmesser farblich dargestellt. Wie zuvor ist auch hier zu erkennen, dass der Partikel-Freistrahls hinter der Blende dem zuvor betrachteten Partikel-Freistrahls ähnelt und die gleichen Effekte zu beobachten sind. Vor der Blende sind vermehrt Partikel mit kleinerem Durchmesser zu beobachten. Dies lässt sich mit dem bereits beim Partikel-Freistrahls beschriebenen Phänomen erklären, dass sich die schwereren Partikel gerade zu Beginn näher an der Strahlachse befinden. Die leichteren Partikel weichen daher stärker von der Strahlachse ab und gelangen so zu einem größeren Anteil nicht durch die Blende, sondern werden zurückgehalten.

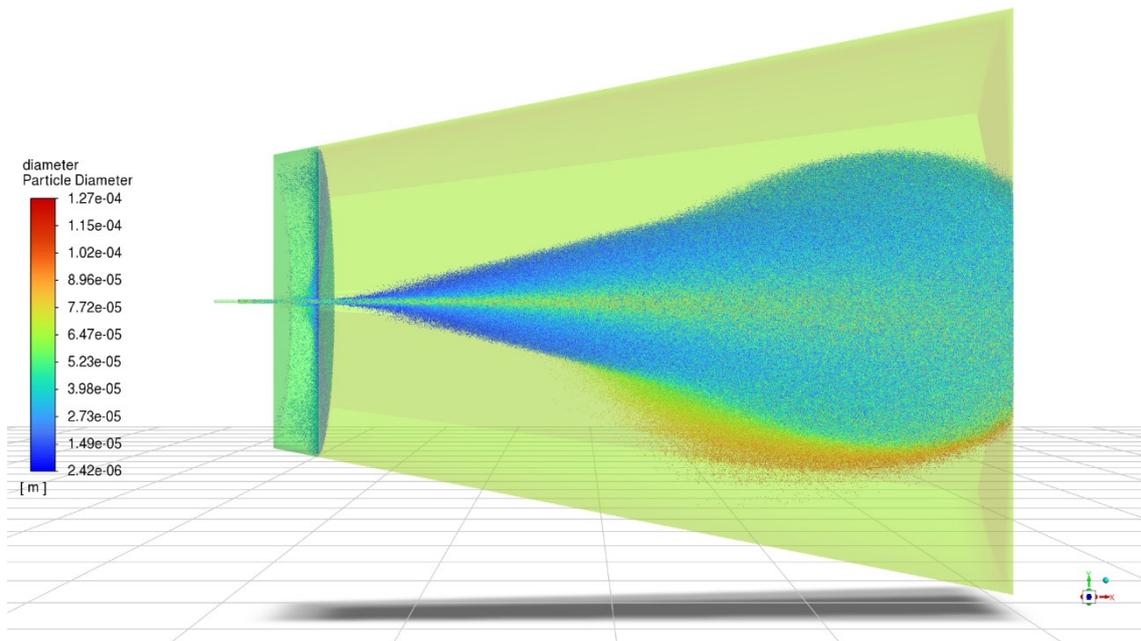


Abb. 4.41 Durchmesser der Partikel in einer Simulation eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s

Die obige These lässt sich am besten durch einen konkreten Vergleich der Partikelgrößenverteilung überprüfen. Dazu sind in Abb. 4.42 die Partikelgrößenverteilungen für den Raumbereich vor der Lochblende und hinter der Lochblende nebeneinandergestellt.

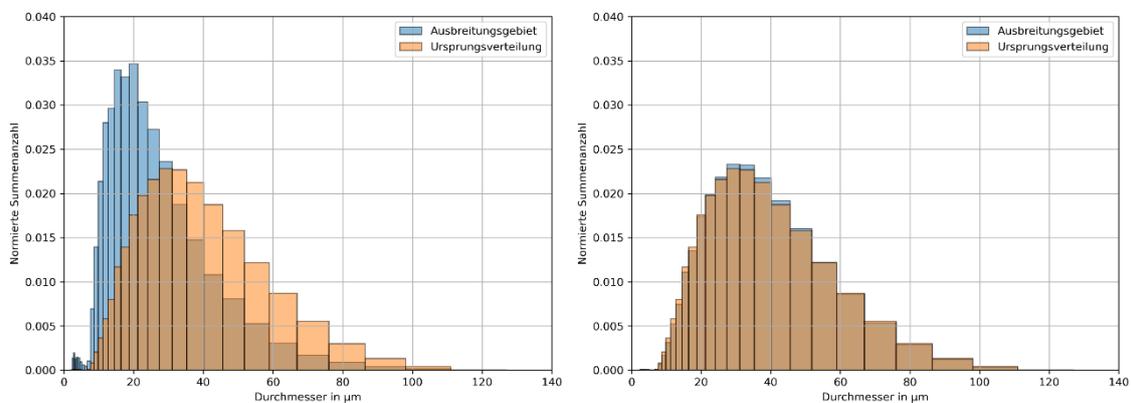


Abb. 4.42 Flächennormierte Partikelgrößenverteilung zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s für den Raumbereich vor der Lochblende (links) und hinter der Lochblende (rechts)

Es ist zu erkennen, dass die Partikelgrößenverteilung vor der Lochblende im Vergleich zur Ursprungsverteilung deutlich zu kleineren Partikeldurchmessern verschoben ist, was mit den obigen Thesen übereinstimmt. Die Partikelgrößenverteilung hinter der Lochblende zeigt jedoch nur minimale Änderungen gegenüber der ursprünglichen Verteilung.

Dies kann damit erklärt werden, dass die Gesamtzahl der Partikel, die durch die Lochblende zurückgehalten wurden, im Vergleich zur Gesamtzahl der Partikel gering war, so dass keine signifikante Verschiebung der Partikelgrößenverteilung festgestellt werden kann, obwohl die Lochblende offensichtlich mehr kleine Partikel zurückhält.

4.4 Wechselwirkungen

Eine der Grundannahmen für einen klassischen Freistrahler, wie in Abschnitt 2.2 beschrieben, ist, dass der Ausströmvorgang in einer freien und möglichst ruhenden Umgebung stattfindet. Beim Ausströmen eines mit Partikeln beladenen Füllgases aus einem durch eine panzerbrechende Waffe beschädigten TLB in die Umgebung ist jedoch mit signifikanten Effekten und Wechselwirkungen in dieser Umgebung zu rechnen. Bei der Umsetzung einer panzerbrechenden Waffe nach dem Hohlladungsprinzip wird die chemische Energie des Sprengstoffes in Form von Wärme, Druck und kinetischer Energie freigesetzt. Es handelt sich um eine extrem schnelle Reaktion, bei der große Mengen an Gasen und Energie freigesetzt werden. Die wichtigste physikalische Auswirkung einer Explosion ist die Entstehung einer Druckwelle. Durch die plötzliche Freisetzung von Energie wird die umgebende Luft komprimiert, was zu einer schnellen Ausbreitung der Druckwelle führt. Diese Druckwelle breitet sich sphärisch vom Explosionsort aus und weist eine extrem hohe Druckspitze auf, die nur sehr kurz anhält. Bei der Explosion werden große Mengen heißer Gase freigesetzt, die sich schnell ausdehnen. Diese Ausdehnung trägt zur Entstehung und Verstärkung der Druckwelle bei. Die Temperatur der Gase kann mehrere tausend Grad Celsius erreichen. Je nach Art des Sprengstoffs können sich brennbare Gase und heiße Partikel entzünden und einen Feuerball oder Brand verursachen. Darüber hinaus sind Staub und Rauch wichtige Nebenprodukte von Explosionen, die durch die Zerstörung und Verbrennung von Materialien sowie durch Detonationsprodukte entstehen. Sie treten mit der Luft in Wechselwirkung, indem sie durch die Druckwelle verteilt, durch Wind verweht und durch thermische Effekte in die Höhe getragen werden.

Im Rahmen dieses Vorhabens wird die Wirkung der Detonationswelle auf die Ausbreitung des Freistrahls betrachtet, da die Detonationswelle der primäre und dominante Effekt ist, der unmittelbar nach der Explosion auftritt und die meisten anderen Effekte auslöst oder verstärkt. Außerdem lassen sich die Eigenschaften der Detonationswelle (z. B. Geschwindigkeit, Druckspitze, Reichweite) numerisch relativ gut modellieren. Es wird daher aufbauend auf dem Szenario des Gasfreistrahls (s. Abschnitt 4.1) eine

Detonationswelle als Folge einer Explosion vor dem Behälter simuliert, so dass die Wechselwirkung des Gasfreistrahls mit der Detonationswelle untersucht werden kann.

Für die Simulation der Detonationswellenausbreitung wird ein numerischer Ansatz zur CFD-Modellierung aus /MOH 22/ verwendet, der als Pressurised-Bubble-Methode (PBM) bezeichnet wird. Die Grundidee der PBM ist, dass die Energiemenge einer Explosionsreaktion innerhalb eines kleinen Volumens, einer Art Luftblase, initiiert wird. Diese Energie wird dann spontan freigesetzt, wenn diese Blase "platzt". Die Gesamtenergie E_B , die eine unter Druck stehende Blase freisetzen kann, lässt sich durch das Volumen V_B , der Dichte ρ_B und der spezifischen Energie der Blase e_B , sowie Dichte und spezifischer Energie der Umgebung bestimmen:

$$E_B = V_B \cdot (\rho_B e_B - \rho_0 e_0) \quad (4.8)$$

Die Dichte der Umgebung entspricht dabei der Dichte der Luft $\rho_0 = 1,2 \text{ kg/m}^3$ und die spezifische Energie der Luft entspricht unter atmosphärischen Bedingungen $e_0 = 0,21 \text{ MJ/kg}$. Die Formel (4.8) kann zusammen mit der adiabatischen Konstante für Luft $\gamma = 1,4$ /BAR 18/ und den Drücken von Luft p_0 und Blase p_B wie folgt ausgedrückt werden:

$$E_B = V_B \cdot \left(\frac{p_B - p_0}{\gamma - 1} \right) \quad (4.9)$$

Die Größe der Blase kann bei diesem Ansatz frei gewählt werden, und der resultierende Druck kann über diese Größe berechnet werden. In ANSYS Fluent kann die PBM relativ einfach implementiert werden, indem ein Volumen für die Blase innerhalb des Ausbreitungsgebietes definiert wird. Das Volumen, in dem das Gas unter Druck steht, muss einem hohen Druck und einer hohen Temperatur beaufschlagt werden, bis die Dichte innerhalb der Blase die folgende Dichte erreicht:

$$\rho_B = \frac{p_B}{(\gamma - 1) \cdot e_B} \quad (4.10)$$

Im Rahmen dieses Vorhabens wird eine Entfernung zwischen Blase und Rohröffnung von 1,2 m auf der Strahlachse angesetzt. Als Volumen wird ein Kegel mit Radius 0,15 m und einer Länge von 0,2 m angenommen, um die Geometrie des Sprengstoffs in einer Hohlladung näherungsweise abzubilden. Für die Gesamtenergie, welche durch den

Sprengstoff umgesetzt werden soll, wird im Rahmen einer Machbarkeitsstudie ein Wert von etwa 10 MJ angesetzt. Durch diese Werte ergibt sich ein anzusetzender Druck von etwa 1,7 GPa, eine Dichte von 1000 kg/m^3 und damit wiederum eine Temperatur von 5830 K. Die Anfangsbedingungen im Bezug zum Druck sind in der folgenden Abb. 4.43 dargestellt.

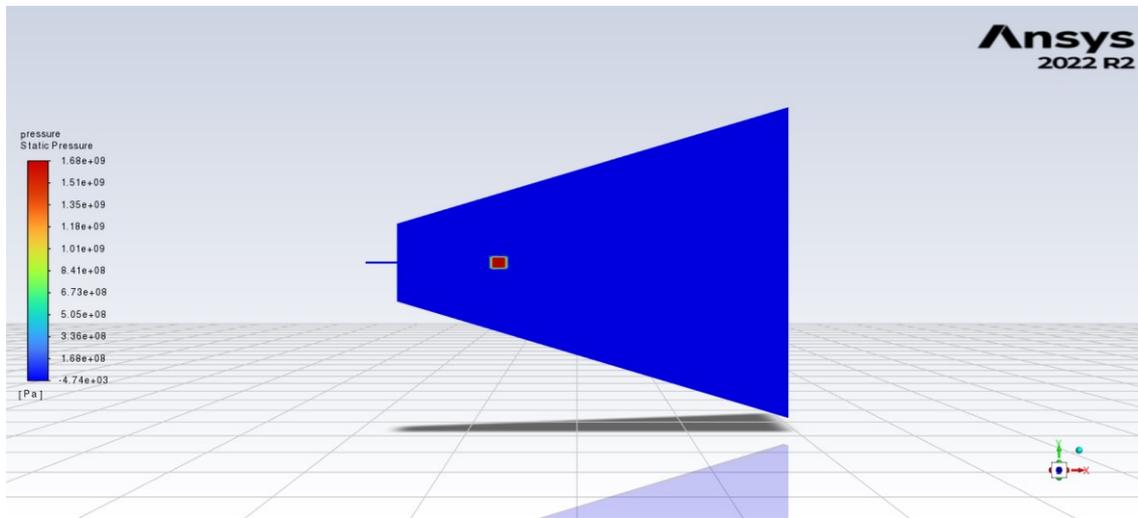


Abb. 4.43 Druck im Ausbreitungsgebiet für die Zeit $t = 0 \text{ s}$

Der Druck breitet sich vom Mittelpunkt der Blase als Detonationswelle aus. Durch die zylinderförmige Geometrie der Blase ist die Ausbreitung nur näherungsweise kugelförmig, wie in den folgenden Abbildungen zu erkennen ist.

In der folgenden Abb. 4.44 ist der Druck im Ausbreitungsgebiet von etwa 0,1 ms bis 1 ms nach der Initialisierung dargestellt. Es lässt sich erkennen, dass innerhalb dieses Zeitraums die Detonationswelle bereits die Rohröffnung erreicht hat und dort mit dem sich gerade bildenden Freistrahл wechselwirkt.

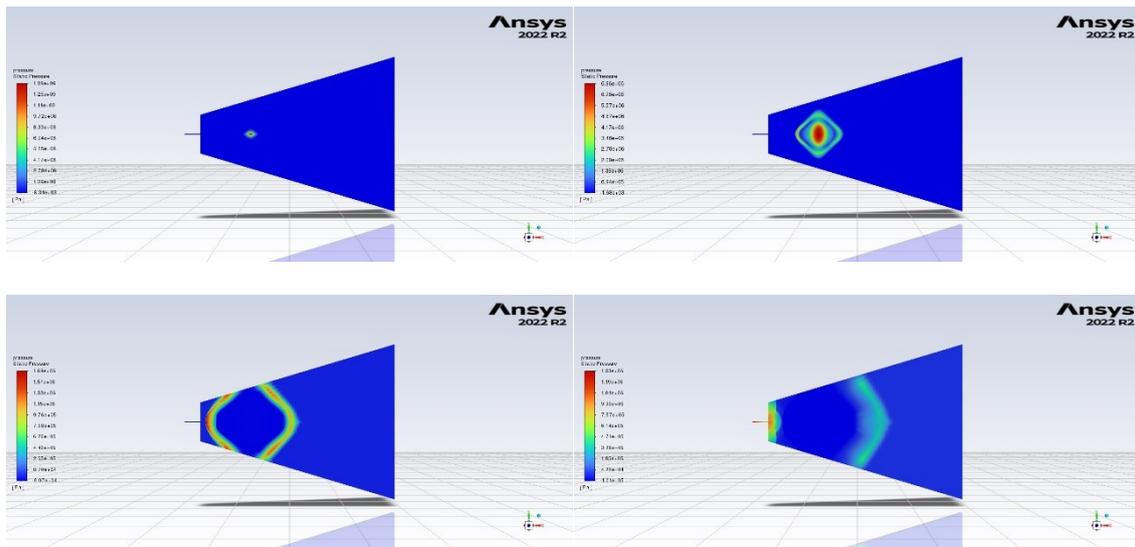


Abb. 4.44 Druck im Ausbreitungsgebiet für vier Zeiten von wenigen Zeitschritten nach der Initialisierung ($\sim 0,1$ ms) bis zum Zeitpunkt $t = 1$ ms

In der folgenden Abb. 4.45 ist die Geschwindigkeit des Gases im Ausbreitungsgebiet für dieselben Zeitpunkte dargestellt.

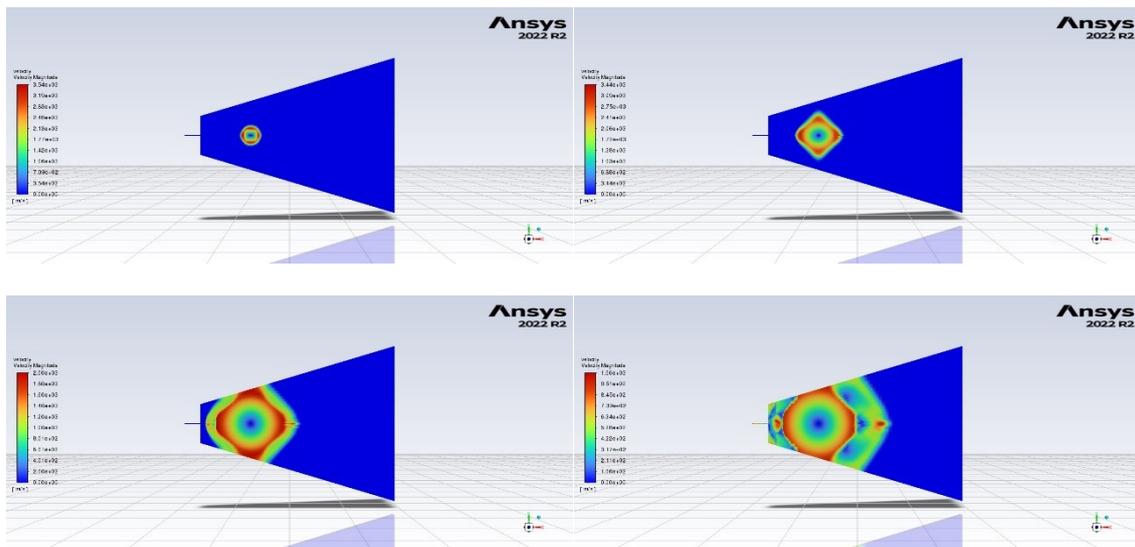


Abb. 4.45 Geschwindigkeit im Ausbreitungsgebiet für vier Zeiten von wenigen Zeitschritten nach der Initialisierung ($\sim 0,1$ ms) bis zum Zeitpunkt $t = 1$ ms

Bei einer Darstellung der Geschwindigkeit entlang der x-Achse, wie in den beiden folgenden Abb. 4.46 und Abb. 4.47 dargestellt, ist zu erkennen, wie hoch die Geschwindigkeiten des Gases durch eine solche Detonation anfänglich ist. Ein möglicher Freistrahler wird zu diesen Zeitpunkten von der Druckwelle so stark überlagert, dass dieser in einer solchen Darstellung nicht erkennbar ist.

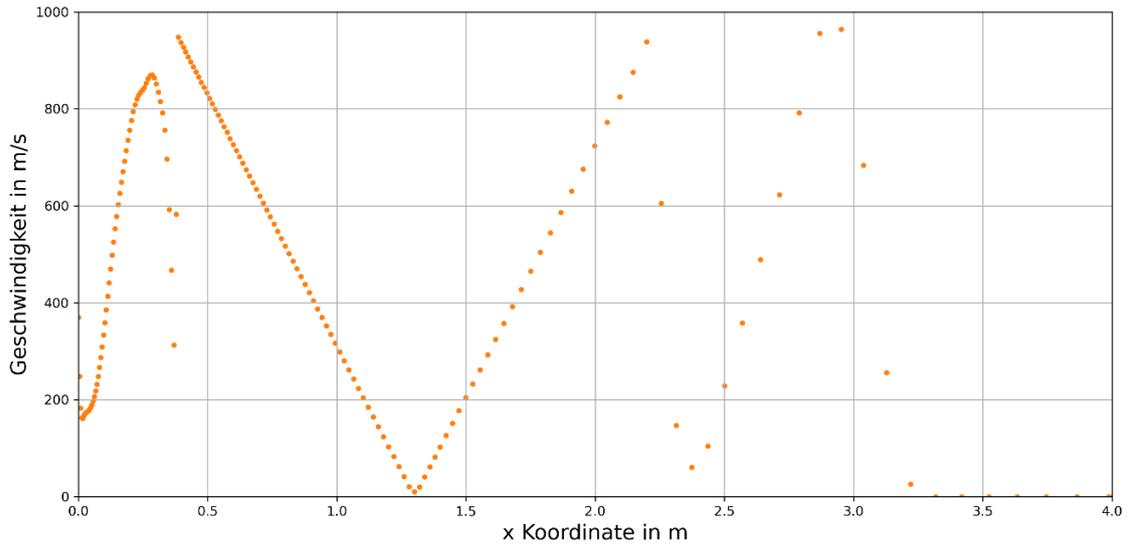


Abb. 4.46 Die Geschwindigkeit des Gases im Ausbreitungsgebiet entlang der x-Achse zum Zeitpunkt $t = 1$ ms

In der oberen Abbildung für den Zeitpunkt $t = 1$ ms ist die linear vom Ursprung ansteigende Geschwindigkeit durch die Druckwelle zu erkennen. Hin zum Ursprung ist bereits eine Reflektion an der Wand des Behälters zu erkennen, wodurch es zu Interferenzen kommt. In der nachfolgenden Abbildung für den Zeitpunkt $t = 10$ ms ist die maximale Geschwindigkeit auf beinahe die Hälfte abgesunken. Auch dort sind Interferenzen erkennbar.

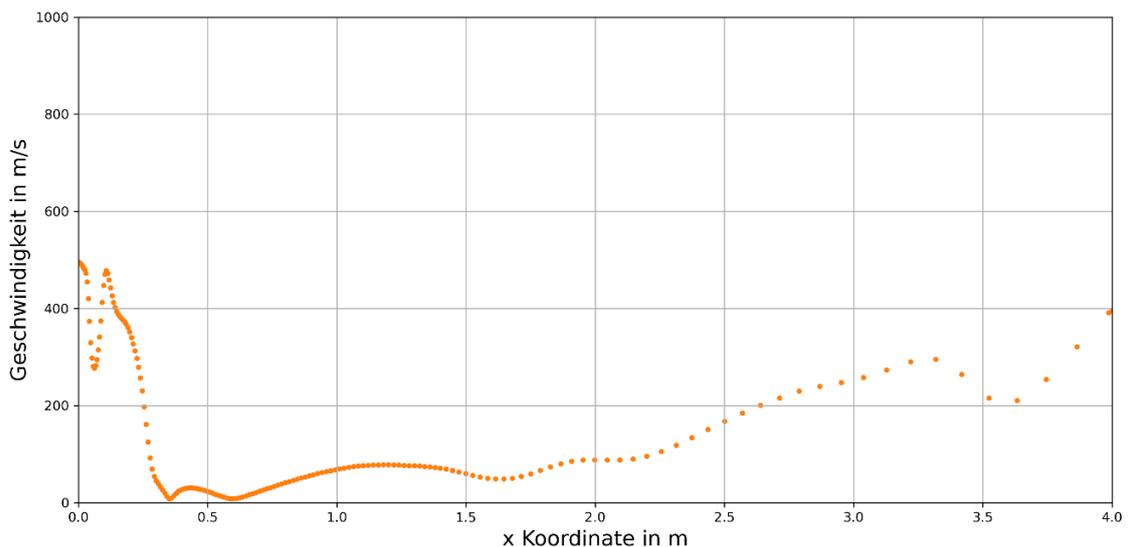


Abb. 4.47 Die Geschwindigkeit des Gases im Ausbreitungsgebiet entlang der x-Achse zum Zeitpunkt $t = 10$ ms

Spätestens nach 100 ms ist keine Geschwindigkeitswirkung im Ausbreitungsgebiet mehr erkennbar, was bei Anfangsgeschwindigkeiten von über 1000 m/s auch zu erwarten ist. Die Wirkung der durch die Detonation erzeugten Druckwelle hat also nur in den ersten Millisekunden einen signifikanten Einfluss auf Druck und Geschwindigkeit. Dementsprechend ist auch die Wirkung auf den Freistrahls nur für die ersten Millisekunden gegeben. In dieser Zeit wird der Freistrahls durch den Gegendruck gedämpft. Da dieser Zeitraum jedoch im Vergleich zur gesamten Ausströmdauer sehr kurz ist, ist insgesamt kein signifikanter Einfluss der durch die Detonation hervorgerufenen Druckwelle auf das Ausbreitungsverhalten des Freistrahls zu erwarten.

4.5 Partikel im Behälter

Bei allen bislang dargestellten Simulationen der Partikelphase wurde, wie in Abschnitt 3.4.2 beschrieben, eine Injektion der Partikel im Rohr vorgenommen. In der realen Situation, die durch diese Simulationen abgebildet werden soll, würden sich die Partikel jedoch zunächst im Behälter selbst befinden und dann, bedingt durch den Ausströmvorgang, aus dem Rohr bzw. der Öffnung in die Umgebung strömen. Der gewählte Ansatz hat dennoch aus mehreren Gründen seine Berechtigung. Zum einen ergeben sich enorme Rechenzeitvorteile, da nicht die gesamte Dynamik im Behälter simuliert werden muss und das Rechengbiet kleiner ist. Außerdem ist die Kontrolle von Parametern wie Partikelgrößenverteilung und Dosierung besser, da alle Partikel, die in das Rohr injiziert werden, später auch im Ausbreitungsgebiet beobachtet werden können. Darüber hinaus wurde auch im Rahmen des Vorhabens /GRS 23/ aus technischen Gründen eine Injektion der Partikel in das Rohr selbst durchgeführt. Insgesamt erleichtert diese Vorgehensweise somit die Simulation und erhöht andererseits die Vergleichbarkeit mit vorhandenen experimentellen Daten.

Dennoch besteht weiterhin eine Reihe von Fragestellungen, die durch eine so konzipierte Simulation nicht ausreichend beantwortet werden können. Insbesondere ist von Interesse, wie sich die Partikelgrößenverteilung der Partikel innerhalb und außerhalb des Behälters unterscheidet und ob eine solche Änderung eventuell zeitabhängig ist. Um dieser Fragestellung nachzugehen, werden im Rahmen dieses Vorhabens entsprechende Simulationen durchgeführt.

Die grundlegenden Annahmen der Simulation sind, dass sich zum Zeitpunkt $t = 0$ eine definierte Anzahl an Partikeln mit einer bestimmten räumlichen Verteilung und einer

bestimmten Partikelgrößenverteilung im Behälter befindet. Der Behälter weist, wie auch in den vorangehenden Simulationen, einen Überdruck von 0,5 bar auf und ist mit Helium befüllt. Mit Beginn der Simulation erfolgt ein Druckabbau im Kessel, da Helium aus dem Rohr austritt. Infolge des Druckabbaus im Kessel erfolgt ein Austrag von Partikeln zusammen mit der Gasphase, was zu einer Reduktion der Gesamtpartikelzahl im Behälter führt.

Die räumliche Verteilung wirft die Problematik auf, dass es keine experimentellen Daten dazu gibt, wie die Verteilung im Rahmen der Fragestellung dieses Vorhabens aussehen könnte. Des Weiteren ist zu berücksichtigen, dass die Verteilung maßgeblich von den im Behälter installierten Einbauten sowie dem vorhandenen Inventar abhängt. Infolgedessen lässt sich diesbezüglich keine allgemeingültige Aussage treffen. Daher wird ein möglichst generischer Ansatz gewählt, wobei die Positionen der Partikel als gleichverteilte Zufallsgrößen bestimmt werden.

Im Rahmen dieses Vorhabens werden die Partikelgrößenverteilungen mehrfach variiert, wobei der Fokus jeweils auf einer spezifischen Fragestellung liegt. Im Rahmen der in diesem Abschnitt beschriebenen Simulation steht die Änderung der Partikelgrößenverteilung im Fokus der Betrachtung. Daher wird auch hier ein möglichst generischer Ansatz gewählt. Diesbezüglich wird eine Normalverteilung mit einem Erwartungswert von 10 μm und einer Standardabweichung von 5 μm definiert.

Zur Umsetzung wird ein Rechengript erstellt, in dem die Positionen der Partikel als gleichverteilte Zufallsgrößen und der Durchmesser als normalverteilte Zufallsgrößen bestimmt werden. Die Anzahl der Partikel kann nach Belieben gewählt werden; für die nachfolgenden Darstellungen wurde eine Anzahl von 2000 verwendet. In der folgenden Abb. 4.48 ist die anfängliche Verteilung im Behälter zu erkennen.

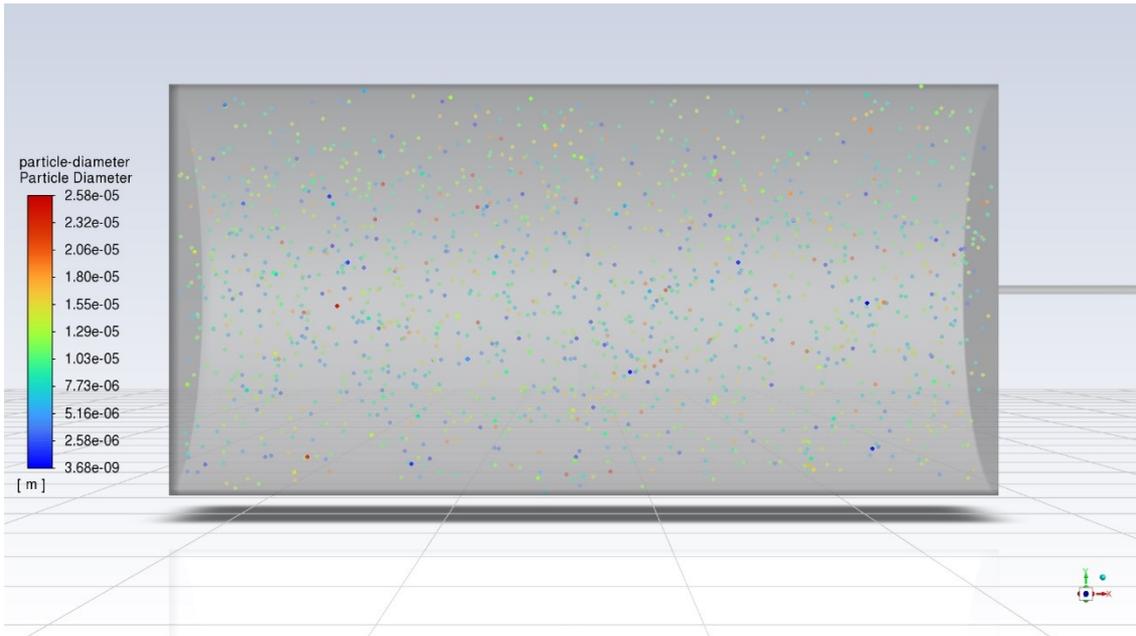


Abb. 4.48 Anfängliche räumliche Verteilung der Partikel im Behälter mit einer definierten Partikelgrößenverteilung

Die Größenverteilung aller Partikel im Behälter kann für jeden Zeitpunkt der Simulation bestimmt werden, so dass diese miteinander verglichen werden können. Bei einem mit der Gesamtzahl der Partikel normierten Histogramm kann dabei eine mögliche Änderung in der Verteilung erkannt werden.

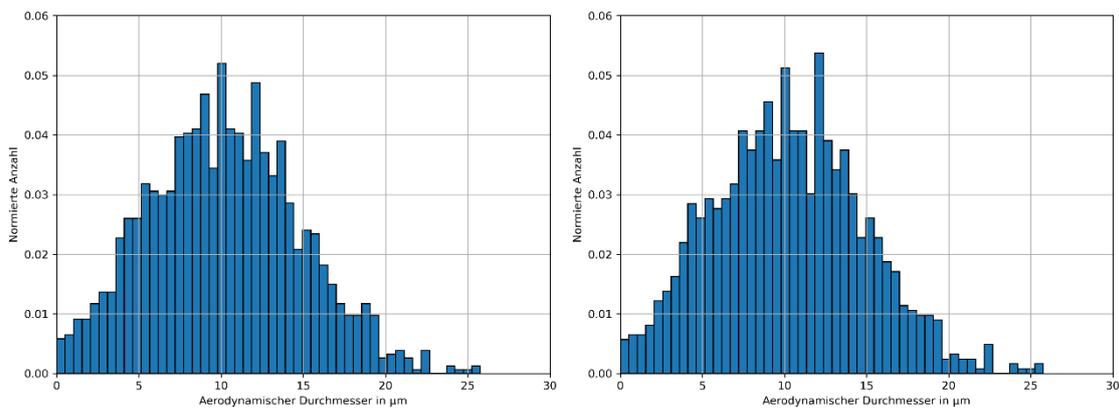


Abb. 4.49 Histogramme der normierten Partikelgrößenverteilungen für die Zeitpunkte $t = 0$ s (links) und $t = 5$ s (rechts)

In der oberen Abb. 4.49 sind für die Zeitpunkte $t = 0$ s und $t = 5$ s die normierten Partikelgrößenverteilungen abgebildet. Es sind Unterschiede in der Verteilung erkennbar, jedoch keine so signifikanten Änderungen, dass auf einen klaren Unterschied im

Ausströmverhalten zwischen den unterschiedlichen Partikelgrößen geschlossen werden kann.

Eine Überprüfung der initialen Einschätzung kann durch einen Vergleich der nicht-normierten Partikelgrößenverteilungen erfolgen. In der nachfolgenden Abb. 4.50 sind die Partikelgrößenverteilungen für vier Zeitpunkte übereinandergelegt.

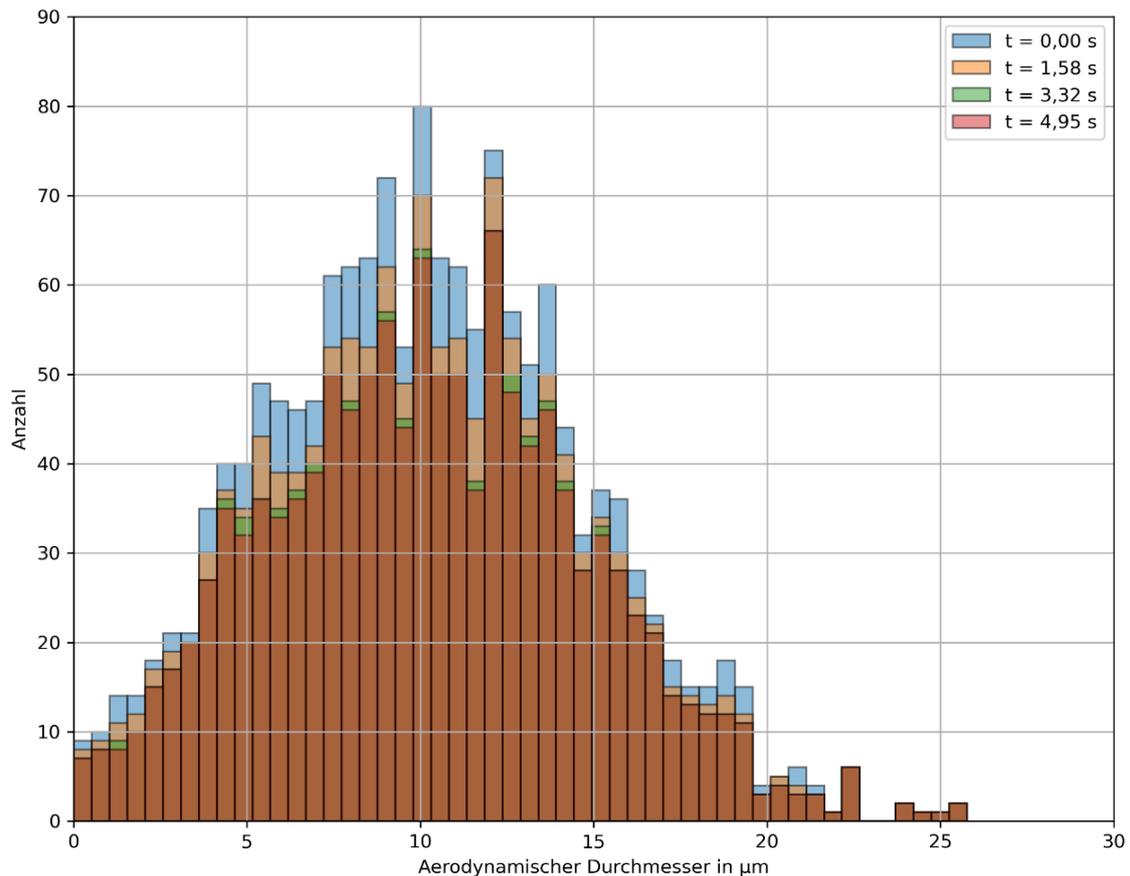


Abb. 4.50 Vergleich der Partikelgrößenverteilungen zu vier verschiedenen Zeitpunkten

Zunächst lässt sich festhalten, dass die Anzahl der Partikel mit der Zeit abnimmt. Des Weiteren lässt sich konstatieren, dass ab $t = 3,32 \text{ s}$ die Anzahl der Partikel nur noch marginal sinkt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass zu diesem Zeitpunkt nahezu kein Überdruck im Behälter mehr besteht. Außerdem ist eine Tendenz zu erkennen, dass Partikel kleiner als $10 \mu\text{m}$ häufiger ausgetragen werden als größere Partikel. Dies ist darauf zurückzuführen, dass diese Partikel aufgrund ihrer geringen Trägheit ein gutes Folgevermögen aufweisen. Mit zunehmendem Partikeldurchmesser nimmt der Trägheitseffekt zu, so dass auch der Anteil dieser Partikel an den ausgetragenen Partikeln abnimmt. In weiterführenden Untersuchungen mit einer deutlich breiteren

Partikelgrößenverteilung könnte dieser Effekt noch genauer untersucht werden. So wird in /BAI 22/ und /FIS 23/ das Austragsverhalten von Partikeln aus Gastanks eingehend untersucht. Auch dort wird ein klarer Zusammenhang zwischen Partikelgrößen und relativem Partikelaustrag festgestellt. Die dort durchgeführten Untersuchungen konnten darüber hinaus für Partikel kleiner als 10 μm einen Zusammenhang zwischen dem relativen Partikelaustrag und der relativen ausströmenden Gasmasse feststellen /BAI 22/.

5 Schlussfolgerung und Bewertung

Der vorliegende Abschnitt dient im Wesentlichen der kompakten Darstellung der gewonnenen Erkenntnisse sowie deren Einordnung in den bisherigen Stand von Wissenschaft und Technik (Abschnitt 5.1). Darüber hinaus werden beispielhaft Anwendungen der entwickelten Methoden und erzielten Ergebnisse diskutiert (Abschnitt 5.2) und es werden Vorschläge für die weitere Nutzung der Ergebnisse sowie für weiterführende Untersuchungen abgeleitet (Abschnitt 5.3).

5.1 Einordnung der Simulationsergebnisse

In diesem Abschnitt werden die wichtigsten Ergebnisse und Analysen der durchgeführten Simulationen zusammengefasst und eingeordnet. Die Einordnung erfolgt unter drei wesentlichen Gesichtspunkten. Zum einen werden die CFD-Simulationen nach Kriterien wie Laufzeit, Handhabbarkeit, aber auch nach für numerische Berechnungen typischen Kriterien wie Gitterqualität bewertet. Anschließend erfolgt ein Vergleich mit experimentellen Ergebnissen aus /GRS 23/, anderen Literaturangaben und physikalisch beobachtbaren Phänomenen. Abschließend wird die Anwendbarkeit der Modelle und Methoden für konkrete Fragestellungen bewertet.

Die Erstellung der Simulation konnte erfolgreich abgeschlossen werden, wobei besonderes Augenmerk auf die Auswahl geeigneter Gitterstrukturen, die Optimierung der Rechenzeiten und die Variabilität des Gesamtmodells Wert gelegt wurde. Die orthogonale Qualität, der Aspect Ratio und die Skewness, als typische Kriterien für die Qualität des Rechengitters, wurden in Abschnitt 3.2 untersucht und weisen sehr gute Werte auf. Die Gitterqualität ist ein wesentlicher Faktor für die Genauigkeit, Stabilität und Effizienz der numerischen Berechnungen in CFD-Simulationen. Bei der Erstellung des Rechengitters wurde auch der Aspekt der Rechenzeit berücksichtigt. Ein Gitter mit kleineren Gitterzellen hat zwar eine feinere Auflösung, benötigt aber wegen der größeren Anzahl von Zellen auch mehr Rechenzeit. Daher wurde das Gitter so optimiert, dass in den für die Ausbreitung besonders relevanten Bereichen wie der Strahlachse und in der Nähe der Rohröffnung die Auflösung des Gitters deutlich höher ist als in den Randbereichen. Um die Rechenzeit zu optimieren, wurde außerdem die Symmetrie des Freistrahls ausgenutzt, so dass nur die Hälfte der Gesamtgeometrie simuliert wird. Außerdem wurde, wie in Abschnitt 3.4.1 erläutert, das Einströmen der Gasphase aus dem Behälter in das Rohr durch ein einfaches numerisches Modell ersetzt, so dass der Behälter nicht mehr in die

CFD-Simulation einbezogen werden muss. Durch diese Anpassung wurde das Rechengebiet deutlich verkleinert, so dass insgesamt viel Rechenzeit eingespart werden kann. Darüber hinaus wurde im Rahmen des Vorhabens die Erstellung der notwendigen Berechnungsskripte für die Durchführung der Simulation sowie die Auswertung und Analyse systematisiert und teilweise automatisiert, so dass eine Anpassung bestimmter Werte sowie Parameterstudien schnell und effektiv durchgeführt werden können. Damit besteht eine hohe Variabilität in der Anwendung der Simulationen, so dass spezifische Fragestellungen innerhalb von einigen Tagen bis wenigen Wochen (abhängig von Rechenleistung und Fragestellung) untersucht werden können.

Die Validierung der Simulationen mit den Experimenten aus /GRS 23/ ergab eine große Übereinstimmung sowie einige erklärbare Abweichungen. Die Streurate, die ein normiertes Maß für die Breite des Freistrahls ist und damit seine räumliche Ausbreitung beschreibt, stimmt in Simulation und Experiment sehr gut überein. Die Abbaukonstante, die die Geschwindigkeitsabnahme entlang der Strahlachse beschreibt, liegt in Simulation und Experiment in einem ähnlichen Bereich, weicht aber leicht ab. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Abbaukonstante sehr empfindlich auf Faktoren wie Beladung und Anfangsgeschwindigkeit reagiert, wie es bei den Parametervariationen in Abschnitt 4.2.3 gezeigt wurde. Eine zeitlich konstante Beladung konnte in den Simulationen realisiert werden, bei den Experimenten in /GRS 23/ kann jedoch nur eine Aussage über die integrale Belastung über die gesamte Ausströmzeit gemacht werden, so dass hier Abweichungen vorliegen könnten. Die anfängliche Geschwindigkeit beim Rohrauslass ist abhängig vom Widerstandsbeiwert des Rohres, welcher von Faktoren wie Rauigkeit und Unebenheiten abhängt, welche in der idealisierten Simulation vernachlässigt wurden. Darüber hinaus sind auch leichte Abweichungen zwischen Experiment und Simulation im Druckverlauf zu erkennen, die ebenfalls hauptsächlich auf die Unterschiede im Rohr zurückzuführen sind. Insgesamt sind diese Abweichungen erklärbar und die in den Simulationen beobachteten Verläufe entsprechen auch den zu erwartenden physikalischen Modellen aus der Literatur, wie im nächsten Abschnitt nochmals diskutiert wird. Die Abweichungen zu den Experimenten lassen sich somit im Wesentlichen durch die leicht unterschiedlichen Anfangs- und Randbedingungen erklären. Darüber hinaus können im Rahmen der Parametervariation bei der Betrachtung der Einflussgrößen auf den Freistrah in der Simulation die gleichen Aussagen getroffen werden wie in den Experimenten. Insgesamt kann ein im Labor erzeugter Freistrah durch die in diesem Projekt durchgeführte Simulation plausibel abgebildet werden, insbesondere wenn die Anfangs- und Randbedingungen genau bekannt sind.

Ein Vergleich der Simulationsergebnisse mit Literaturwerten zeigt, dass die ermittelten Werte für Streuraten und Abbaukonstanten des Gasfreistrahls im Bereich der in der Literatur angegebenen Werte liegen (s. Abschnitt 2.2.2). Darüber hinaus wurde eine Reihe von physikalischen Einflussgrößen und Effekten beobachtet, die in Abschnitt 4 diskutiert werden. So ist in Bezug auf den partikelbeladenen Freistrahls insbesondere festzuhalten, dass lungengängige Partikel ein sehr gutes Folgevermögen aufweisen und somit beim Austritt aus dem Rohr annähernd die Geschwindigkeit der Gasphase besitzen. Allerdings wird die Geschwindigkeit dieser Partikel auch schneller abgebaut und der Geschwindigkeitsvektor weicht stärker von der Strahlachse ab als bei größeren Partikeln. Größere Partikel wiederum behalten aufgrund ihrer Trägheit länger eine höhere Geschwindigkeit bei und weichen nicht so stark von der Strahlachse ab. Sobald jedoch die Geschwindigkeit der Partikel abnimmt, sinken die größeren Partikel aufgrund ihrer Masse auch schneller ab. Beim Ausströmen von Partikeln aus einem Behälter sowie beim Auftreffen eines Freistrahls auf eine Blende spielen all diese Effekte eine Rolle, so dass hier partikelgrößenabhängige Effekte auftreten. So wird die Partikelgrößenverteilung durch die Lochblende in Richtung der schwereren Partikel verschoben, da sich diese stärker entlang der Strahlachse bewegen als die kleinen Partikel. Diese beobachteten Effekte entsprechen den aus der Literatur zu erwartenden physikalischen Phänomenen, die Simulationen ermöglichen darüber hinaus aber auch eine konkrete Quantifizierung. Ein Vergleich der Simulationsergebnisse mit Literaturwerten bestätigt daher insgesamt die physikalische Plausibilität der Simulationen.

Weitere Fragen zur Wechselwirkung des Freistrahls mit einer Detonation und zum Partikelverhalten in einem Überdruckbehälter konnten teilweise beantwortet werden, bedürfen aber weiterer Simulationen. Bei der Detonation konnte die Erzeugung der Druckwelle mit Methoden aus der Literatur /MOH 22/ reproduziert werden. Die neben der Druckwelle auftretenden Effekte sollten jedoch für eine ganzheitliche Betrachtung mit einbezogen werden. Das simulierte Austragsverhalten von Partikeln aus Gastanks konnte ebenfalls mit Ergebnissen aus der Literatur /BAI 22/ bestätigt werden. Um umfassendere Aussagen zu dieser Thematik treffen zu können, sind hier jedoch weitere Auswertungen der vorhandenen Daten notwendig. Insgesamt konnten beide Themen in Übereinstimmung mit Literaturangaben in der Simulation abgebildet werden und liefern bereits wesentliche Erkenntnisse.

Zusammen mit den experimentellen Ergebnissen aus /GRS 23/ liegen nun sowohl eine umfangreiche experimentelle Datenbasis als auch numerische Methoden und Modelle

zur Quantifizierung der Freisetzung radioaktiver Stoffe infolge der Einwirkung panzerbrechender Waffen mit Hohlladungsprinzip auf TLB in Form eines Freistrahls vor. Insbesondere zu Fragen der Reichweite und der Abmessungen eines Freistrahls sowie zur Austrittsdauer, Austrittsgeschwindigkeit und Partikelgrößenverteilung können fundierte und schnelle Aussagen getroffen werden. Ebenso kann die Wirkung verschiedener Randbedingungen wie Behältergröße, Behältergas oder Temperaturen mit den entwickelten Modellen in einem akzeptablen Zeitraum quantifiziert werden.

5.2 Anwendung der Methoden und Ergebnisse

Ziel dieses Vorhabens war es, mit Hilfe von Simulationen die Auswirkungen einer Hohlladungseinwirkung auf TLB besser einordnen zu können. In den betrachteten Szenarien wird von einer Ausgangssituation ausgegangen, in der sich eine bestimmte Partikelmenge im Behälter befindet, ein Überdruck im Behälter herrscht und sich ein Loch im Behälter befindet. Ausgehend von diesen Anfangsbedingungen kann dann mit Hilfe einer CFD-Simulation die Ausbreitung der austretenden Partikel berechnet werden. Um die in diesem Projekt gewonnenen Erkenntnisse anwenden zu können, müssen diese Anfangsbedingungen geklärt werden. Hierzu können Methoden und Ergebnisse aus anderen Forschungsvorhaben der GRS herangezogen werden, die jedoch nicht Gegenstand dieses Berichtes sind. Typische Anfangsbedingungen sind in Abschnitt 2.3 aufgeführt.

Für eine CFD-Simulation des oben beschriebenen Themas müssen die Eigenschaften des Behälters, des Behältergases, der Partikel und der Umgebung geklärt werden. Das Volumen und die Geometrie des Behälters müssen definiert sein, ebenso wie der Überdruck und die Zusammensetzung des Behältergases. Hinsichtlich der Partikel müssen das Material und die Partikelgrößenverteilung bekannt sein. Weiterhin ist zu klären, ob die Menge der Partikel, die durch die Einwirkung einer Hohlladung innerhalb des Behälters freigesetzt wird, oder die Menge der Partikel, die außerhalb des Behälters freigesetzt wird, bekannt ist. Dies hängt in der Regel davon ab, auf welche Forschungsergebnisse zurückgegriffen werden kann. Ist die Menge der innerhalb des Behälters freigesetzten Partikel bekannt, muss noch geklärt werden, welche räumliche Verteilung der Partikel im Behälter angenommen werden kann. Ist dagegen die Menge der Partikel bekannt, die außerhalb des Behälters freigesetzt wird, können die Partikel vereinfacht in das Rohr eingespeist werden. Weiterhin ist für die Anwendung im Rahmen einer konkreten Betrachtung zu klären, wie die Umgebung um den Behälter beschaffen ist, welche

Wechselwirkungen zu erwarten sind und bis zu welcher Entfernung eine Ausbreitung betrachtet werden soll. Sind alle diese Anfangsbedingungen geklärt, kann eine konkrete Simulation, wie in Abschnitt 3 beschrieben, durchgeführt werden.

Beispielhaft wird anhand der in diesem Vorhaben erarbeiteten Methoden und Ergebnisse zusammengefasst, wie vorzugehen ist, um aus einer Grundsituation, wie sie oben beschrieben wurde, mögliche radiologische Konsequenzen abzuleiten. Dazu ist es zunächst erforderlich, die Geometrie des Behälters, wie in Abschnitt 3.1 beschrieben, ausreichend genau abzubilden. Dabei ist anzustreben, die Geometrie so weit wie möglich zu vereinfachen, ohne wesentliche Details zu vernachlässigen. Von besonderer Bedeutung sind dabei die Wanddicke und das freie Behältervolumen. Einbauten und Teilvolumina sollten für eine realistische Modellierung ebenso berücksichtigt werden wie mögliche Barrieren um den Behälter. So hat z. B. eine Haube einen erheblichen Einfluss auf die Ausbreitung eines Freistrahls. Das Ausbreitungsgebiet sollte groß genug sein, um die radiologischen Konsequenzen im Nahfeld bestimmen zu können. Diese gesamte Geometrie ist dann mit einem Rechengitter zu vernetzen. Dabei sind die in Abschnitt 3.2 beschriebenen Anforderungen an ein akzeptables Rechengitter zu beachten.

Anschließend sind die Gaszusammensetzung im Behälter sowie die Partikelmaterialien zu definieren. Die erforderlichen physikalischen Modelle, wie z. B. das DPM-Modell, sind gemäß den in Abschnitt 3.3 beschriebenen Anforderungen zu implementieren. In einer Situation, in der die Menge der im Behälter freigesetzten Partikel und ihre Partikelgrößenverteilung bekannt sind, müssen diese zunächst in den Behälter injiziert werden. Die Simulation der Partikel im Behälter kann entweder getrennt von der Simulation des Freistrahls durchgeführt werden, wie es in diesem Vorhaben gemacht wurde, siehe Abschnitt 4.5, oder das gesamte System kann zusammen simuliert werden. Für die Partikel sind Material und Durchmesser relevant. Wenn verschiedene Materialien vorhanden sind, müssen diese einzeln zugegeben werden. Wenn die räumliche Verteilung der Partikel im Behälter nicht bekannt ist, muss ein konservativer Ansatz gewählt werden. Bei einer separaten Simulation des Behälters müssen insbesondere der Druckverlauf und das Geschwindigkeitsfeld an der Öffnung des Behälters als Ergebnis der Simulation gespeichert werden. Weiterhin müssen die Partikeleigenschaften (Material, Größe, Geschwindigkeit) der dort austretenden Partikel hinterlegt werden. Diese Ergebnisse können dann in einem zweiten Schritt als Anfangsbedingungen für eine weitergehende Simulation verwendet werden. Bei einer solchen expliziten Simulation des Partikelaustrags aus dem Behälter muss die Partikelbeladung nicht extra berechnet werden, da sie

sich als Ergebnis der Simulation ergibt. Weitere Randbedingungen und Anfangsbedingungen (s. Abschnitt 3.4) sind der vorhandene Überdruck im Behälter bzw. der Druckverlauf am Rohreintritt, wenn der Behälter nicht explizit simuliert wird, sowie die Anfangstemperatur im Behälter.

Die Simulation kann mit dem oben beschriebenen Modell, den Bedingungen und Parametern durchgeführt werden. Für die Durchführung ist vorab festzulegen, für welchen Zeitraum und mit welchen Zeitschritten die Simulation durchgeführt werden soll. Außerdem muss festgelegt werden, wie oft eine Speicherung der Zwischenergebnisse erfolgen soll. Als Ergebnis liegen dann für die zuvor definierten diskreten Zeitpunkte die physikalischen Größen der Gasphase für jede Gitterzelle mit freiem Volumen sowie für jeden Partikel im simulierten Gebiet vor.

Von der ursprünglichen Partikelmenge im Behälter gelangt nur ein bestimmter Bruchteil durch die Öffnung. Die Partikelgrößenverteilung verschiebt sich in Richtung der leichteren Partikel, die ein besseres Folgevermögen aufweisen. Trifft der Freistrahls nach einigen Zentimetern hinter der Behälteröffnung auf eine Haube, in der sich eine Öffnung befindet, so wird er leicht abgebremst und nur ein bestimmter Anteil der Partikel gelangt durch die Öffnung und bildet wieder einen Freistrahls. Durch die Öffnung in der Haube wird die Partikelgrößenverteilung wieder mehr in Richtung der schwereren Partikel verschoben, da diese sich stärker entlang der Strahlachse bewegen. Im Ausbreitungsgebiet breitet sich der partikelbeladene Freistrahls dann in seiner typischen Form aus. Bei den schweren Partikeln ist eine größere Reichweite, aber auch ein schnelleres Absinken zu beobachten. Alle diese Phänomene können mit den vorliegenden Daten quantifiziert werden.

Um aus diesen Daten dann radiologische Konsequenzen ableiten zu können, sind die Partikel von Bedeutung. Dabei muss zunächst betrachtet werden, was mit den Partikeln passiert, wenn sie nicht mehr durch den Freistrahls beschleunigt werden. Hierfür sind die Bedingungen im Ausbreitungsgebiet wie Wind, Regen und Bodenoberfläche relevant. Mit solchen Randbedingungen kann bestimmt werden, welche Partikelmaterialien und -größen sich z.B. vermehrt am Boden ablagern und welche länger in der Luft bleiben und sich somit weiter ausbreiten. Damit können verschiedene Expositionspfade betrachtet werden, die prinzipiell für die Ausbreitung von Partikeln relevant sind. Dabei spielt die Partikelgröße eine wesentliche Rolle. Lungengängige Partikel sind z.B. für die Inhalation besonders relevant, da sie tief in die Atemwege eindringen können. Solche leichten Partikel verbleiben grundsätzlich länger in der Luft und können sich somit weiter ausbreiten.

Schwerere Partikel hingegen sinken schneller zu Boden und können wesentlich zur Bodenstrahlung beitragen, die wiederum über Bodenkontamination und spätere Resuspension zu weiteren Expositionspfaden führen kann.

Insgesamt ist es also mit den in diesem Vorhaben entwickelten Modellen und Methoden möglich, aus einer definierten Ausgangssituation radiologische Konsequenzen abzuleiten, wenn die Anfangs- und Randbedingungen geklärt sind. Parameterstudien unter Variation dieser Bedingungen sind ebenfalls möglich, jedoch mit CFD-Simulationen sehr zeit- und rechenintensiv.

5.3 Vorschläge zu weiteren Untersuchungen

Ausgehend von der Einordnung der Ergebnisse und den möglichen Anwendungen der Methoden und Ergebnisse werden in diesem Abschnitt Vorschläge für weitergehende Untersuchungen zur Thematik der Freisetzung radioaktiver Stoffe infolge der Einwirkung panzerbrechender Waffen mit Hohlladungsprinzip auf TLB gemacht. Dabei werden sowohl bisher nicht betrachtete Fragestellungen auf der Basis der in diesem Vorhaben entwickelten Simulationen als auch eine weitergehende Untersuchung einzelner Prozesse betrachtet.

Im Rahmen dieses Vorhabens wurden eine Vielzahl von Simulationen mit Parametervariationen und verschiedenen Geometrien umgesetzt. Allerdings bieten sich noch weitere Variationsmöglichkeiten an, die zusätzliche Untersuchung der Effekte auf die Ausbreitung ermöglichen würden. Außerdem erlaubt die im Rahmen des Vorhabens gewonnene Fülle an Daten eine Auswertung hinsichtlich weiterführender Fragestellungen. Daher können weitere Untersuchungen auf Basis der in diesem Vorhaben entwickelten Simulationen in zwei Kategorien unterteilt werden: Variationen der Simulation und eine vertiefte Analyse der bestehenden Simulationsergebnisse.

Die Variationen der Simulationen können hinsichtlich der Partikelparameter, der Behälterparameter, einer möglichen festen Geometrie um den Behälter sowie des Ausbreitungsgebietes unterteilt werden. Bezüglich der Partikel könnte zum einen der in Abschnitt 4.5 begonnene Ansatz der Simulation von Partikeln im Behälter selbst weiterverfolgt werden. Darüber hinaus könnte die Freisetzung eines Gemischs aus verschiedenen Partikelmaterialien von Interesse sein. Hinsichtlich der Behälterparameter wären in Verbindung mit der Simulation von Partikeln im Behälter Einbauten innerhalb

des Behälters und deren Auswirkung auf den Freisetzungsprozess von Interesse. Geometrien wie eine Haube außerhalb des Behälters könnten noch realistischer umgesetzt werden, um deren Wirkung auf die Ausbreitung besser quantifizieren zu können. Das Ausbreitungsgebiet könnte vergrößert, ein Boden simuliert und die Bedingungen an reale Wetterbedingungen angepasst werden. Dadurch wäre es möglich, die Verteilung der Partikel über längere Zeiträume zu beobachten. Für konkrete Fragestellungen können solche Variationen auf Basis der bereits in diesem Projekt durchgeführten Arbeiten schnell untersucht werden. Eine systematische Auswertung verschiedener Simulationsvariationen sollte jedoch in einem Folgevorhaben durchgeführt werden.

Eine vertiefte Analyse der vorhandenen Simulationsergebnisse ist möglich, da in den durchgeführten Simulationen für jeden definierten Speicherschnitt eine Vielzahl von physikalischen Größen für die Partikel- und Gasphase aufgezeichnet werden. Somit ist sowohl eine Auswertung dieser Größen für diskrete Zeitpunkte als auch eine zeitabhängige Auswertung möglich. Darüber hinaus ist auch ein Vergleich einzelner physikalischer Größen sowie der Ergebnisse verschiedener Simulationen möglich. Dies wurde bereits in Abschnitt 4 für eine Reihe von Größen und Simulationsergebnissen durchgeführt. Dort standen vor allem die Geschwindigkeiten der Gas- und Partikelphase sowie die Partikelgrößen im Vordergrund. Von weiterem Interesse könnten beispielsweise eine bessere Beschreibung der partikelgrößenabhängigen Ausbreitung, eine vertiefte Untersuchung der Durchmischung des Behältergases mit der Umgebung oder der Einfluss der Temperatur auf den Freistrahler sein. All diese Aspekte könnten auf Basis der vorliegenden Simulationsergebnisse näher untersucht werden. Auch hier gilt, dass konkrete Fragestellungen schnell untersucht werden können, eine systematische Bewertung von Themenkomplexen jedoch ein Folgevorhaben erfordert.

Im Rahmen dieses Vorhabens wurden einige Prozesse identifiziert, die einer näheren Betrachtung bedürfen. Dies sind zum einen die beiden Aspekte Simulation einer Wechselwirkung und Simulation der Partikel im Behälter, welche bereits in den Abschnitten 4.4 und 4.5 betrachtet wurden, jedoch noch einige Fragen offenlassen. Ein weiterer Aspekt ist die Problematik der Sedimentation und Ablagerung von Partikeln als Langzeitprozesse im Rahmen der Ausbreitung.

Die Thematik der Wechselwirkung des Freistrahls mit einer Detonationsdruckwelle, hervorgerufen durch die Umsetzung des Explosivstoffes einer panzerbrechenden Waffe außerhalb des Behälters, wurde im Rahmen dieses Vorhabens in Abschnitt 4.4 betrachtet. Es gibt jedoch noch weitere relevante Vorgänge bei der Detonation, wie zum Beispiel

Verbrennungsprozesse, die ebenfalls in eine Simulation einbezogen werden könnten, um eine realistischere Einschätzung der Prozesse zu erhalten. Als Grundlage für solche Simulationen wäre die Durchführung entsprechender Experimente im Realmaßstab sinnvoll. Auf Basis solcher realskaliger Experimente könnte ein CFD-Modell erstellt werden, mit dem die konzentrationsverdünnenden und reichweitenbegrenzenden Effekte der Detonation auf einen Freistrahls quantifiziert werden könnten. Damit könnten bisherige Modellansätze zur Ausbreitung eines Freistrahls ergänzt und verbessert werden. Darüber hinaus könnte die Anwendbarkeit von CFD-Berechnungsverfahren und numerischen Modellen für den Sprengstoffeinsatz näher untersucht werden.

Die Thematik des Partikelverhaltens im Behälter wurde im Rahmen dieses Vorhabens in Abschnitt 4.5 behandelt. Zu dieser Thematik, die einen wichtigen Teilprozess des in Abschnitt 2.2 dargestellten Freisetzungprozesses darstellt, ergeben sich zusätzliche Fragestellungen sowohl hinsichtlich der freigesetzten Massen als auch hinsichtlich der Partikelgrößenverteilung. Im Rahmen dieses Projektes wird von einer bekannten Partikelbelastung bzw. Gesamtpartikelmasse sowie einer bekannten Partikelgrößenverteilung in der Behälteröffnung ausgegangen und anschließend deren Ausbreitung beobachtet. Es sind jedoch auch Situationen denkbar, in denen diese Parameter innerhalb des Behälters bekannt sind und die Fragestellung lautet, welche Masse und mit welcher Größenverteilung Partikel aus dem Behälter heraus freigesetzt werden. In Abschnitt 4.5 konnte bereits erkannt werden, dass bei homogener Verteilung der Partikel im gesamten Behälter insgesamt nur ein Bruchteil der Partikel freigesetzt wird und zusätzlich eine Abhängigkeit von der Partikelgröße besteht. Zum einen wäre es interessant, diese Faktoren näher zu quantifizieren. Darüber hinaus könnten auch Simulationen mit inhomogenen räumlichen Partikelverteilungen oder mit Einbauten im Behälter durchgeführt werden.

Bei den in diesem Vorhaben durchgeführten Simulationen wurde vor allem die Ausbreitung der Partikel in der Luft betrachtet. Im Hinblick auf mögliche radiologische Konsequenzen ist eine weitere interessante Frage, in welchen Gebieten diese Partikel sedimentieren könnten und welche Zusammenhänge mit den Freistrahlsparametern bestehen. Dazu müssten die möglichen Randbedingungen für eine Sedimentation betrachtet und Überlegungen zur Modellierung des Wettergeschehens und der Bodenbeschaffenheit angestellt werden. Es wäre zu prüfen, ob eine Durchführung im Rahmen einer CFD-Simulation für diese Fragestellungen sinnvoll ist oder ob dafür andere Simulationsprogramme eingesetzt werden sollten.

6 Zusammenfassung

Das Ziel des Vorhabens bestand in der Erstellung eines numerischen Modells für einen instationären partikelbeladenen Freistrahl. Dieses Modell sollte zum einen die Untersuchung konkreter Anfangs- und Randbedingungen ermöglichen und zum anderen die generelle Grundlage für die Durchführung von Simulationen des Ausströmverhaltens einer zweiphasigen Strömung aus einem TLB im Zuge einer Hohlladungseinwirkung schaffen. Zu Beginn des Forschungsvorhabens erfolgte eine umfassende Zusammenstellung des aktuellen Stands von Wissenschaft und Technik zum Thema sowie eine Aufbereitung der experimentellen Grundlagen gemäß /GRS 23/. Im Rahmen der vorliegenden Untersuchung wurden relevante Parameter, Anfangs- und Randbedingungen identifiziert, welche für die Durchführung der Simulationen von Relevanz sein könnten.

Zur Vorbereitung der Simulationen wurden daraufhin in Anlehnung an die Experimente aus /GRS 23/ Gesamtmodelle bestehend aus Geometrie (s. Abschnitt 3.1), Rechengitter (s. Abschnitt 3.2), physikalischen Modellen (s. Abschnitt 3.3) und Randbedingungen (s. Abschnitt 3.4) erstellt und beschrieben (Preprocessing). Mit diesen Modellen können Simulationen für verschiedene Anfangsbedingungen, z. B. unterschiedliche Partikeleigenschaften, Behältergase, Überdrücke etc. durchgeführt werden (Processing). Die Vorgehensweise zur Durchführung einer solchen Simulation wird in Abschnitt 3.5 beschrieben. Im Rahmen des Vorhabens wurden eine ganze Reihe verschiedener Simulationen mit unterschiedlichen Bedingungen und Parametern durchgeführt. Insgesamt wurde damit das Ziel des Vorhabens, die Fähigkeit zur Durchführung von Simulationen des Ausströmverhaltens einer zweiphasigen Strömung aus einem TLB bei Einwirkung einer Hohlladung zu entwickeln, erreicht.

Die durchgeführten Simulationen lassen sich in fünf Kategorien unterteilen, die den jeweiligen Unterabschnitten in Abschnitt 4 zugeordnet sind. Zunächst werden in Abschnitt 4.1 der Gasfreistrahler und in Abschnitt 4.2 der partikelbeladene Freistrahler untersucht. Neben qualitativen Einordnungen werden in diesen Simulationen auch die Streurate und die Abbaukonstante ermittelt und mit den Ergebnissen aus /GRS 23/ verglichen. Für den partikelbeladenen Freistrahler wird zusätzlich eine detaillierte Analyse der Partikelphase durchgeführt, wobei insbesondere die Verteilung und das Verhalten der Partikel im Strahlverlauf untersucht wird. Darüber hinaus werden verschiedene Variationen der Simulationsparameter durchgeführt, dabei wurde u. a. die Partikelbeladung, das verwendete Gas und der angenommene Überdruck im Behälter variiert. Diese Parametervariationen ermöglichten es, die Sensitivität der Strahlausbreitung auf verschiedene

physikalische und numerische Größen zu untersuchen und somit zu einem umfassenden Verständnis des Freistrahls zu gelangen. Insgesamt lieferten die Simulationen wertvolle Einblicke in die komplexen Wechselwirkungen innerhalb des Freistrahls und ermöglichten die Identifikation und Untersuchung zentraler Phänomene.

In Abschnitt 4.3 wird der Einfluss einer Haube bzw. Lochblende auf die Ausbreitung eines partikelbeladenen Freistrahls untersucht. Dabei wird die Gasphase und die Partikelphase getrennt betrachtet und mit den Ergebnissen für den partikelbeladenen Freistrahls ohne Lochblende verglichen. Insbesondere konnte der Einfluss auf die Partikelgrößenverteilung näher untersucht werden. Es zeigte sich, dass die Lochblende zu einer Veränderung der Partikelgrößenverteilung führte, da größere Partikel aufgrund ihrer Trägheit weniger stark abgelenkt wurden als kleinere.

In Abschnitt 4.4 wird die Auswirkung einer Detonationswelle infolge einer Explosion vor dem Behälter auf die Ausbreitung des Freistrahls betrachtet. Dazu wird aufbauend auf dem Gasfreistrahlszenario (s. Abschnitt 4.1) eine Detonationswelle als Folge einer Explosion vor dem Behälter simuliert, um die Wechselwirkung des Gasfreistrahls mit der Detonationswelle untersuchen zu können. Die Simulation zeigte, dass die Detonationswelle nur in den ersten Millisekunden zu einer Veränderung der Strahlstruktur führt und somit insgesamt keinen signifikanten Einfluss auf die Ausbreitung des Freistrahls hat.

In Abschnitt 4.5 wird eine Simulation dargestellt, bei der das Ausströmverhalten von Partikeln aus einem Behälter mit Überdruck untersucht wird. Anders als beim partikelbeladenen Freistrahls, bei dem die Partikel kontinuierlich injiziert werden, werden die Partikel in dieser Simulation anfänglich homogen im Behälter verteilt. Diese Methode ermöglichte es, die gesamte freigesetzte Partikelmasse sowie den Einfluss der Partikelgröße auf das Austragsverhalten zu analysieren. Im Postprocessing der Simulation zeigt sich, dass kleinere Partikel schneller bzw. in größerem Umfang als größere Partikel aus dem Behälter ausgetragen werden und sich somit die Partikelgrößenverteilung durch den Austragsprozess leicht verändert.

Das Vorgehen und die Ergebnisse des Vorhabens werden in Abschnitt 5 zusammenfassend eingeordnet und bewertet. Dazu werden in Abschnitt 5.1 die gewonnenen Erkenntnisse in den bisherigen Stand von Wissenschaft und Technik eingeordnet. In Abschnitt 5.2 wird eine beispielhafte Anwendung der entwickelten Methoden und erzielten Ergebnisse diskutiert und in Abschnitt 5.3 werden Vorschläge für die weitere Nutzung der Ergebnisse sowie für weiterführende Untersuchungen abgeleitet. Es konnten im

Rahmen des Projektes viele Erkenntnisse gewonnen werden, die eine zukünftige Anwendbarkeit ermöglichen, außerdem ergaben sich weitere Fragestellungen die anhand der bereits gewonnen Daten der durchgeführten Simulationen sowie weiterführender Simulationen im Rahmen eines Folgevorhabens betrachtet werden können.

Insgesamt konnten im Rahmen der vorliegenden Untersuchungen CFD-Simulationen durchgeführt werden, die den experimentellen Aufbau aus /GRS 23/ nachbilden. Die erstellten Simulationen eignen sich zur Variation der Randbedingungen sowie zur Durchführung von Untersuchungen zum Einfluss der genannten Parameter. Durch die Entwicklung numerischer Modelle wird es in Zukunft möglich sein, Einwirkungen von Hohlradungen auf Behälter oder Transportkonfigurationen mit Hilfe von Simulationen detailliert zu untersuchen und damit eine genaue Abschätzung möglicher radiologischer Konsequenzen zu ermöglichen. Die im Vergleich zu Experimenten kostengünstige und schnelle Durchführung von Simulationen erlaubt darüber hinaus die Abschätzung des Einflusses von Sicherheitsmaßnahmen und zusätzlichen Barrieren. Die Ergebnisse des Vorhabens eröffnen somit vielversprechende Möglichkeiten für ein besseres Verständnis von Freisetzungsvorgängen sowie für eine optimierte Auslegung von Sicherheitsmaßnahmen.

Literaturverzeichnis

- /BAI 22/ Simon Baier, Numerische Modellierung des Austragsverhaltens von Partikeln aus Gastanks, Bachelorarbeit TU Dortmund, 09.05.2022
- /BAR 18/ M. Bartelmann et al., Theoretische Physik 4, Thermodynamik und Statistische Physik, Springer Spektrum, 2018
- /BEA 07/ Peter Beater, Pneumatic Drives - System Design, Modelling and Control, Stand: 2007
- /BFE 17/ Bundesamt für kerntechnische Entsorgungssicherheit, 7. Änderungsgenehmigung zur Aufbewahrung von Kernbrennstoffen im Standort-Zwischenlager in Gemringheim der EnBW Kernkraft GmbH, 26.04.2017
- /FER 02/ Ferziger et al., Computational Methods for Fluid Dynamics, 3rd. Edition, Springer-Verlag, 2002
- /FIS 20/ Fischer, Michael-David, Numerische Simulation von partikelbeladenen instationären Freistrahlen, TU Dortmund, 2020
- /FIS 23/ Fischer et al, Numerical modelling of the discharge behaviour of particles from a gas vessel, Results in Engineering, 2023
- /GER 15/ Universität der Bundeswehr München, Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik, Institut für Thermodynamik, Experimentelle und numerische Untersuchung von Gasfreistrahlen, Dissertation, Josef Gerold, Juli 2015
- /GRS 03/ Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Bestimmung von Quelltermen infolge Störmaßnahmen oder sonstige Einwirkungen Dritter (SEWD) im Rahmen internationaler Zusammenarbeit, SR 2370, GRS-A-3165, Dezember 2003
- /GRS 05/ Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Experimentelle und analytische Bestimmung der Freisetzung infolge SEWD im Rahmen internationaler Zusammenarbeit, SR 2461, GRS-A-3276, August 2005, VS-NfD

- /GRS 06/ Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Freisetzung aus verglasten Abfällen nach Störmaßnahmen oder sonstige Einwirkungen Dritter (SEWD), SR 2458, GRS-A-3308, Dezember 2006, VS-Vertraulich
- /GRS 08/ Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Bestimmung von Quelltermen infolge Störmaßnahmen oder sonstige Einwirkungen Dritter (SEWD) im Rahmen internationaler Zusammenarbeit – Fortführung, SR 2546, GRS-A-3406, März 2008, VS-NfD
- /GRS 12/ Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Verbesserung der Quelltermmittlung für die Einwirkung panzerbrechender Waffen auf Transport- und Lagerbehälter mit abgebrannten Brennelementen, 3607R02613, GRS-A-3581, Januar 2012, VS-Vertraulich
- /GRS 23/ Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Experimentelle Untersuchungen eines diskontinuierlichen Freistrahls in Folge einer Hohlladungseinwirkung bei einer Beförderung von Kernbrennstoffen, GRS-A-4125, August 2023, VS-NfD
- /HEL 78/ M. Held, Leistungsgrenzen von konventionellen Ladungstypen, Jahrbuch der Wehrtechnik, Folge 11, Seite 204-210, 1978
- /HIN 82/ W.C. Hinds, Aerosol Technology, John Wiley & Sons, 1982
- /JOU 03/ Karl Jousten (Hrsg.), Wutz – Handbuch Vakuumtechnik, Theorie und Praxis, 8. Auflage, Dezember 2003
- /KRA 75/ Universität Dresden, Sektion Wasserwesen, Bereich Technische Hydrodynamik, Ausbreitungs- und Mischvorgänge in Strömungen, Dissertation, Willi Kraatz, Dezember 1975
- /MAR 15/ Martin H., Pohl R. et al., Technische Hydromechanik 4 - Hydraulische und numerische Modelle, 3. überarbeitete Auflage. Beuth Verlag, S. 216-218, 2015
- /MIL 10/ Milanovic, Ivana M./Hammad, Khaled J., PIV Study of the Near-Field Region of a Turbulent Round Jet, ASME, 1353–1361, 2010

- /MOH 22/ Mohotti, Wijesooriya, Weckert, A simplified approach to modelling blast in computational fluid dynamics (CFD), Defence Technology 23 (2023) 19-34, 17. November 2022
- /PIC 11/ F. Picano et al., Particle-laden jets: particle distribution and back-reaction on the flow, Journal of Physics: Conference Series 318 (5), 52018., 2011
- /PRE 94/ G. Pretzsch, F. Lange, Experimentelle Bestimmung der Freisetzung von UO₂ aus einem Transportbehälter für abgebrannte Brennelemente nach Hohlladungsbeschuss, GRS-A-2157, Mai 1994
- /RAJ 76/ N. Rajaratnam, Turbulent Jets, Elsevier Science, 1st Edition, 01. Januar 1976
- /REG 59/ B. Regenscheit, Die Luftbewegung in klimatisierten Räumen, Kältetechnik, Heft 1, 1959
- /RIE 08/ H- Rietschel, H Esdorn, Raumklimotechnik, Band 1: Grundlagen, Springer-Verlag, Berlin und Heidelberg, 1994, 16. Auflage, Korrigierter Nachdruck 2008
- /SCH 18/ D. Schulz, P. Mathis, D. Müller, Überprüfung einfacher Strahlengesetze anhand von Messdaten beim Einsatz typischer Luftdurchlässe, HLH Lüftung/Klima, Heizung/Sanitär, Gebäudetechnik, Seite 32-40, 2018
- /SCL 06/ H. Schlichting, K. Gersten, Grenzschicht-Theorie Überprüfung einfacher Strahleng, Springer-Verlag, Berlin und Heidelberg, 10. Überarbeitete Auflage, 21. Februar 2006
- /THR 53/ M. W. Thring, M- P- Newby, Comustion Length of enclosed turbulent jet flames. Symosium (International) on Combustion, Volume 4, Issue 1, 1953
- /TRI 13/ W. Trier, Glasschmelzöfen: Konstruktion und Betriebsverhalte, Springer-Verlag Berlin, 1984
- /TUD 22/ TU Dortmund, Fischer, Michael-David; Projektbericht - Experimentelle Untersuchungen zu partikelbeladenen Gasfreistrahlen aus Druckbehältern; April 2022;

- /WAL 89/ W.P. Walters, Zukas J.A., Fundamentals of Shaped Charges, John Wiley & Sons, 1989
- /ZIE 18/ Zierep, Grundzüge der Strömungslehre. Springer Fachmedien Wiesbaden, 2018
- /ZUK 98/ J.A. Zukas, Walters W. P., Explosive Effects and Applications, Springer, 1998

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Teilprozesse vor der Freisetzung aus dem Behälter: 1. Zündung der Hohlladung, 2. Zerstörung der Behälterwand und des Inventars, 3. Druckerhöhung im Behälter.....	3
Abb. 2.2	Teilprozesse bei der Freisetzung aus dem Behälter: 1. Druckabbau durch Ausströmen, 2. Bildung eines Freistrahls, 3. Durchmischung der Freisetzung	4
Abb. 2.3	Definitionsskizze eines stationären, rotationssymmetrischen Freistrahls; in Anlehnung an /RAJ 76/ und /GER 15/	10
Abb. 2.4	Beispielhafte Darstellung eines hyperbolischen Geschwindigkeitsverlaufs, der axialen Ausbreitung des Geschwindigkeitsfeldes des Freistrahls, gemessen im Rahmen von /GRS 23/	14
Abb. 2.5	Beispielhafte Darstellung des Geschwindigkeitsverlaufs in Form einer Gaußschen Verteilungskurve, wie sie für die radiale Ausbreitung des Geschwindigkeitsfeldes des Freistrahls im Ähnlichkeitsbereich angenommen werden kann. Gemessen im Rahmen von /GRS 23/.....	16
Abb. 2.6	Bearbeitetes Bild aus dem Schlierenverfahren bestehend aus drei Messungen. Mit einer rot gestrichelten Linie ist die qualitativ abgeschätzte „Grenze“ des Freistrahls abgebildet /TUD 22/	20
Abb. 2.7	Aufbau des Versuchstandes rund um den aufgebauten Kessel mit den Verkabelungen für die Sensoren sowie den Computern und technischen Messsystemen, welche nicht im Messbereich selbst liegen /GRS 23/	21
Abb. 2.8	Beispielhafte Darstellung für die Mittelung der Daten. Links sind die Rohdaten als zweidimensionales Histogramm abgebildet (wobei die Skala auf der rechten Seite die Partikeldurchmesser darstellt) und rechts eine Mittelung dieser Daten für bestimmte Partikelgrößen-Intervalle /GRS 23/	22
Abb. 3.1	Darstellung der Geometrie des verwendeten Behälters inklusive Rohr.....	30
Abb. 3.2	Halbierte Geometrie des Aufbaus, der Behälter ist auf der linken Seite dargestellt, mittig das Ausströmrrohr und rechts das Ausbreitungsgebiet.....	31
Abb. 3.3	Schematische Darstellung der Maße des Behälters mit einer darüber befindlichen Haube (Seitenansicht)	33
Abb. 3.4	Schematische Darstellung der Maße des Behälters mit einer darüber befindlichen Haube Front-/Stirnansicht (links) und Draufsicht (rechts).....	33
Abb. 3.5	Halbierte Geometrie des vollständigen Aufbaus inklusive Haube und Ausbreitungsgebiet (türkis: Behälterinnenraum inklusive Rohr, grau:	

	Außenhülle Behälter und Haube, rot: Innenraum Haube, gelb: Ausbreitungsgebiet.....	34
Abb. 3.6	Halbierte Geometrie des vollständigen Aufbaus ohne Festkörper inklusive Haube und Ausbreitungsgebiet (grau: Behälter, türkis: Rohr, rot: Haube, gelb: Ausbreitungsgebiet.....	34
Abb. 3.7	Halbierte Geometrie des Aufbaus mit Lochblende (türkis: Rohr, gelb: Ausbreitungsgebiet, schwarz: Lochblende)	35
Abb. 3.8	Nahansicht des Übergangs vom Rohr zum Ausbreitungsgebiet für die halbierten Geometrie des Aufbaus mit Lochblende (türkis: Rohr, gelb: Ausbreitungsgebiet, schwarz: Lochblende)	36
Abb. 3.9	Vernetzung des Rohres und des Ausbreitungsgebiets	37
Abb. 3.10	Nahansicht des Übergangs der Vernetzung des Rohres zum Ausbreitungsgebiet.....	39
Abb. 3.11	Vergleich zweier Druck-Zeit-Funktionen eines Behälters, berechnet mit CFD-Simulation und Lösung einer Differentialgleichung.....	47
Abb. 3.12	Vergleich von Druck-Zeit-Funktionen eines Behälters, berechnet mit einem Differentialgleichungsmodell für unterschiedliche Bedingungen	48
Abb. 3.13	Normierte Massenverteilung q_3 der Referenzpartikel in /GRS 23/.....	51
Abb. 4.1	Geschwindigkeit des simulierten Helium Freistrahls zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s	64
Abb. 4.2	Dichte des simulierten Helium Freistrahls zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s.....	65
Abb. 4.3	Axiale Geschwindigkeit des Helium Freistrahls mit Fit Funktion zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s.....	66
Abb. 4.4	Abbaukonstante des Helium Freistrahls abhängig von der Zeit	67
Abb. 4.5	Durch eine Simulation (links) und durch Experimente (rechts) ermittelte Abbaukonstante des Helium Freistrahls	67
Abb. 4.6	Normierte orthogonale Geschwindigkeitsverteilung des Helium Freistrahls mit Fit Funktion zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s an der Position $x = 0,8$ m.....	69
Abb. 4.7	Streurate des Helium Freistrahls in Abhängigkeit von der Zeit.....	71
Abb. 4.8	Vergleich der ermittelten Abbaukonstante des Helium Freistrahls: Simulation (links), Experimente (rechts)	71
Abb. 4.9	Geschwindigkeit des simulierten partikelbeladenen Helium Freistrahls zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s.....	73

Abb. 4.10	Dichte des simulierten partikelbeladenen Fluids im Rohr und im Ausbreitungsgebiet zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s.....	73
Abb. 4.11	Axiale Geschwindigkeit der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s.....	74
Abb. 4.12	Abbaukonstante der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls	75
Abb. 4.13	Durch eine Simulation (links) ermittelte Abbaukonstante der Gasphase eines partikelbeladenen Helium Freistrahls und durch Experimente /GRS 23/ (rechts) ermittelte Abbaukonstante der Partikel eines partikelbeladenen Helium Freistrahls.....	76
Abb. 4.14	Normierte orthogonale Geschwindigkeitsverteilung der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Fit Funktion zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s an der Position $x = 0,8$ m	77
Abb. 4.15	Streurate der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls abhängig von der Zeit.....	77
Abb. 4.16	Durch eine Simulation (links) ermittelte Streurate der Gasphase eines partikelbeladenen Helium Freistrahls und durch Experimente /GRS 23/ (rechts) ermittelte Streurate der Partikel eines partikelbeladenen Helium Freistrahls	78
Abb. 4.17	Chronologisch durchnummerierte Partikel in einer Simulation eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende zum Zeitpunkt $t = 1,1$ s	79
Abb. 4.18	Logarithmisch dargestellte Geschwindigkeit der Partikel in einer Simulation eines partikelbeladenen Helium Freistrahls zum Zeitpunkt $t = 1,1$ s	80
Abb. 4.19	Durchmesser der Partikel in einer Simulation eines partikelbeladenen Helium Freistrahls zum Zeitpunkt $t = 1,1$ s.....	81
Abb. 4.20	Geschwindigkeit der Partikel in Abhängigkeit von der x-Koordinate und dem Durchmesser in einer Simulation eines partikelbeladenen Helium Freistrahls zum Zeitpunkt $t = 1,1$ s.....	82
Abb. 4.21	Über die Gesamtzahl normierte Größenverteilung der Anzahl der Partikel der Ursprungsverteilung	83
Abb. 4.22	Abbildung der sechs Raumbereiche, in denen die Partikelgrößenverteilung verglichen wird. Dargestellt hier sind die Partikeldurchmesser im Ausbreitungsgebiet zum Zeitpunkt $t = 1,1$ s.....	84
Abb. 4.23	Flächennormierte Partikelgrößenverteilung zum Zeitpunkt $t = 1,1$ s für den Raumbereich der vorderen Strahlachse 1 (links) und der hinteren Strahlachse 2 (rechts)	85

Abb. 4.24	Flächennormierte Partikelgrößenverteilung zum Zeitpunkt $t = 1,1$ s für den vorderen Raumbereich 3 (links) und den hinteren Raumbereich 4 (rechts)	86
Abb. 4.25	Flächennormierte Partikelgrößenverteilung zum Zeitpunkt $t = 1,1$ s für die äußeren Raumbereiche oben 5 (links) und unten 6 (rechts)	86
Abb. 4.26	Verteilung der Partikel im Ausbreitungsgebiet nach $t = 0,75$ s in Abhängigkeit ihres Durchmessers für verschiedene Anzahlen der Partikel, 2 Partikel pro Zeitschritt (oben), 12 Partikel pro Zeitschritt (links), 121 Partikel pro Zeitschritt (rechts).....	89
Abb. 4.27	Partikelgeschwindigkeit nach $t = 0,75$ s für die Edelgase Helium (oben), Argon (links) und Radon (rechts).....	91
Abb. 4.28	Partikelgeschwindigkeit nach $t = 0,75$ s für Helium bei verschiedenen Anfangsdrücken 0,25 bar (oben), 0,5 bar (links) und 1 bar (rechts).....	92
Abb. 4.29	Verteilung der Partikel im Ausbreitungsgebiet nach $t = 0,75$ s in Abhängigkeit ihres Durchmessers	93
Abb. 4.30	Geschwindigkeit eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s	94
Abb. 4.31	Dichte des Fluids im Rohr und im Ausbreitungsgebiet zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s	95
Abb. 4.32	Axiale Geschwindigkeit der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s.....	96
Abb. 4.33	Abbaukonstante der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende.....	96
Abb. 4.34	Durch eine Simulation (links) ermittelte Abbaukonstante der Gasphase eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende und durch Experimente /GRS 23/ (rechts) ermittelte Abbaukonstante der Partikel eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende	97
Abb. 4.35	Normierte orthogonale Geschwindigkeitsverteilung der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s an der Position $x = 0,8$ m	98
Abb. 4.36	Streurate der Gasphase des partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende abhängig von der Zeit	99
Abb. 4.37	Durch eine Simulation (links) ermittelte Streurate der Gasphase eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende und durch Experimente /GRS 23/ (rechts) ermittelte Streurate der Partikel eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende.....	99

Abb. 4.38	Chronologisch durchnummerierte Partikel in einer Simulation eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s	100
Abb. 4.39	Histogramm der Partikel Nummern für den Bereich vor der Lochblende (links) und hinter der Lochblende (rechts) zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s.....	101
Abb. 4.40	Geschwindigkeit der Partikel in einer Simulation eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s.....	102
Abb. 4.41	Durchmesser der Partikel in einer Simulation eines partikelbeladenen Helium Freistrahls mit Lochblende zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s.....	103
Abb. 4.42	Flächennormierte Partikelgrößenverteilung zum Zeitpunkt $t = 1,5$ s für den Raumbereich vor der Lochblende (links) und hinter der Lochblende (rechts).....	103
Abb. 4.43	Druck im Ausbreitungsgebiet für die Zeit $t = 0$ s	106
Abb. 4.44	Druck im Ausbreitungsgebiet für vier Zeiten von wenigen Zeitschritten nach der Initialisierung ($\sim 0,1$ ms) bis zum Zeitpunkt $t = 1$ ms.....	107
Abb. 4.45	Geschwindigkeit im Ausbreitungsgebiet für vier Zeiten von wenigen Zeitschritten nach der Initialisierung ($\sim 0,1$ ms) bis zum Zeitpunkt $t = 1$ ms	107
Abb. 4.46	Die Geschwindigkeit des Gases im Ausbreitungsgebiet entlang der x-Achse zum Zeitpunkt $t = 1$ ms	108
Abb. 4.47	Die Geschwindigkeit des Gases im Ausbreitungsgebiet entlang der x-Achse zum Zeitpunkt $t = 10$ ms	108
Abb. 4.48	Anfängliche räumliche Verteilung der Partikel im Behälter mit einer definierten Partikelgrößenverteilung	111
Abb. 4.49	Histogramme der normierten Partikelgrößenverteilungen für die Zeitpunkte $t = 0$ s (links) und $t = 5$ s (rechts)	111
Abb. 4.50	Vergleich der Partikelgrößenverteilungen zu vier verschiedenen Zeitpunkten	112

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Geometrischer Durchmesser und Massenverteilung der verwendeten Partikel	57
Tab. 4.1	Auflistung der durchgeführten Simulationen inklusive der zugehörigen Randbedingungen	88

Abkürzungsverzeichnis

AED	Aerodynamischer Durchmesser (aerodynamic equivalent diameter)
AtG	Atomgesetz
BMUV	Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz
CAD	Computer-Aided Design
CFD	Computational Fluid Dynamics
DPM	Discrete Phase Model
FDM	Finite-Differenzen-Methode
FEM	Finite-Elemente-Methode
FVM	Finite-Volumen-Methode
GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH
PBM	Pressurised-Bubble-Methode
PDA	Phasen Doppler Anemometer
RHA	Rolled Homogeneous Armour
SEWD	Störmaßnahmen oder sonstige Einwirkungen Dritter
TLB	Transport- und Lagerbehälter
TU	Technische Universität

**Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH**

Schwertnergasse 1
50667 Köln

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14

85748 Garching b. München

Telefon +49 89 32004-0

Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200

10719 Berlin

Telefon +49 30 88589-0

Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4

38122 Braunschweig

Telefon +49 531 8012-0

Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de

ISBN 978-3-910548-87-9