

**Validierung und
Weiterentwicklung
der Modellierung von
Freisetzungsszenarien
mit unkonventionellen
Spreng- und Brandvor-
richtungen (USBV)
mittels CFD-Programmen
mit dem Ziel einer
Übertragbarkeit der
Methoden auf komplexe
Anwendungen**

**Validierung und
Weiterentwicklung
der Modellierung von
Freisetzungsszenarien
mit unkonventionellen
Spreng- und Brandvor-
richtungen (USBV)
mittels CFD-Programmen
mit dem Ziel einer
Übertragbarkeit der
Methoden auf komplexe
Anwendungen**

Abschlussbericht

Johannes Martens
Sabrina Gippert
Gerd Frieling

Februar 2023

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV) unter dem Förderkennzeichen 4720R01620 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

Blastfoam, Computational Fluid Dynamics, OpenFOAM, Unkonventionelle Spreng- und Brandvorrichtung

Kurzfassung

Im vorliegenden Vorhaben wurde die Machbarkeit der Simulation von Explosionen mit Hilfe von Computational Fluid Dynamics (CFD)-Algorithmen untersucht. Zunächst wurden hierfür verschiedene frei verfügbare (Open Source) und kostenpflichtige, kommerzielle Software-Pakete identifiziert und hinsichtlich verschiedener Parameter verglichen. Hierbei wurden u. a. Nutzungskosten, Anwendbarkeit, verwendete physikalische Ansätze und Größe der Nutzer-Community berücksichtigt. Insbesondere aufgrund der freien Lizenzierung sowie der stetig wachsenden Nutzer-Community der Software OpenFOAM wurde für dieses Vorhaben das Solver-Paket blastfoam (Vs. 4.0.0) der Firma Synthetik Applied Technologies ausgewählt. Dieses stellt zusätzliche Solver für die Nutzung in OpenFOAM zur Verfügung, welche explizit für die Simulation von Detonationen und die auftretenden Feldgradienten programmiert und vorgesehen sind. Es wurden zwei verschiedene Solver des Pakets ausgewählt, mit welchen zuvor durchgeführte Sprengversuche simuliert wurden. Hierbei wurde darauf geachtet, einen guten Kompromiss zu finden zwischen den hohen rechnerischen Anforderungen, welche die Simulationen darstellen, und der Wahl der Ausgangsparameter, welche das Experiment bestmöglich darstellen sollten. Insbesondere war die Ausbreitung von Partikeln in die Simulationen mit einzubeziehen, welche im Experiment oberhalb des Sprengstoffs angeordnet waren. Die Arbeiten ermöglichten die Identifizierung eines geeigneten Solvers und realistischer Rahmenbedingungen, welche eine gute Grundlage für die Untersuchung der obigen Fragestellungen bilden können. Aufgrund von extrem langen Rechenzeiten wurden Ansätze zur Reduzierung der rechnerischen Anforderungen implementiert und umgesetzt, um die Simulationen in für das Vorhaben angemessenen Zeiträumen durchführen zu können. Weitere Optimierungen, insbesondere hinsichtlich einer weiteren Reduzierung des rechnerischen Aufwandes, sind für zukünftige Vorhaben von zentraler Bedeutung.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung	I
1	Einleitung.....	1
2	Aufgabenstellung und Zielsetzung.....	3
3	Stand von Wissenschaft und Technik.....	5
3.1	Grundlagen des Explosionsmechanismus	7
3.1.1	Die Detonationswelle	7
3.1.2	Der dynamische Druck.....	9
3.1.3	TNT-Äquivalenzmasse.....	10
3.1.4	Explosionskategorien	11
3.1.5	Modellierung der Sprengladung	11
3.1.6	Der Jones-Wilkins-Lee (JWL)-Ansatz	13
3.1.7	Verdämmte oder unverdämmte Sprengstoffe	15
3.2	USBV	16
3.2.1	Radioaktive Quellen	16
3.2.2	Partikeltransport bzw. Freisetzung.....	18
4	Sichtung geeigneter Software.....	29
4.1	ANSYS Produkte.....	30
4.1.1	ANSYS CFX.....	31
4.1.2	ANSYS Fluent	31
4.1.3	ANSYS Autodyn.....	32
4.1.4	ANSYS LS-DYNA	33
4.1.5	Bewertung	34
4.2	OpenFOAM	34
4.2.1	blastFoam	35
4.2.2	Bewertung	38
4.3	Sonstige Software	39

4.4	Abschließende Bewertung	40
5	Modellerstellung.....	41
5.1	Verfügbare Daten aus vorherigen Vorhaben	41
5.2	Szenario	44
5.3	Rechenmodell und Rechengitter	44
5.4	Randbedingungen	45
5.5	Prozesse	46
5.6	Solver	47
5.7	Numerische Einstellungen	47
5.7.1	Solvereinstellungen	47
5.7.2	Zeitdiskretisierung	48
5.7.3	Gitterdiskretisierung	48
6	Simulation.....	51
6.1	Anwendung / Aufgabenstellung	51
6.2	Einstellungen der Simulationen.....	53
6.2.1	Einstellungen <i>blastFoam</i>	54
6.2.2	Einstellungen <i>blastEulerFoam</i>	65
6.3	Simulationsergebnisse	73
6.3.1	Ergebnisse <i>blastFoam</i>	73
6.3.2	Ergebnisse <i>blastEulerFoam</i>	81
6.3.3	Vergleich	90
7	Bewertung und Schlussfolgerungen.....	95
	Literaturverzeichnis	99
	Abbildungsverzeichnis	107
	Tabellenverzeichnis	110
	Abkürzungsverzeichnis	111

1 Einleitung

Im vorliegenden Vorhaben wurden Simulationsrechnungen von Explosionen mit einem CFD-(Computational Fluid Dynamics) Programm durchgeführt. Ziel war es, die simulierten Detonationswolken mit experimentellen Sprengwolken zu vergleichen bzw. diese nachzubilden. Die Analysen sollten dazu beitragen, den Gefahrenradius von sog. Unkonventionellen Spreng- und Brandvorrichtungen (USBV) oder umgangssprachlich „schmutzigen Bomben“ einzuschätzen. Im englischsprachigen Raum wird eine schmutzige Bombe als „Radiological Dispersal Device“ (RDD) bezeichnet, also ein Hilfsmittel, welches zur böswilligen Verteilung von radiologischen Stoffen dient (vgl. /OSH 22/).

Zur Berechnung der potenziellen Strahlenexposition nach der Explosion einer USBV, müssen die initialen Wolkendimensionen der Explosionswolke bekannt sein. Mithilfe der Höhe und des Durchmessers der Wolke kann unter Annahme einer bestimmten freigesetzten Schadstoffmenge, die Konzentration innerhalb der Wolke abgeschätzt werden. Anschließend kann der atmosphärische Schadstofftransport in weiter entfernte Gebiete durch hier ansetzende Ausbreitungsmodelle berechnet werden.

Ein gängiges Programm für atmosphärische Ausbreitungsrechnungen ist zum Beispiel das Programm HotSpot /HOM 20/. Es beinhaltet einen empirischen Ansatz zur Bestimmung der Wolkendimensionen auf Grundlage der Sprengstoffmenge. Untersuchungen ergaben, dass der empirische Ansatz eine Überschätzung der Wolkendimensionen bis zu einem Faktor zwei im Vergleich zu früheren experimentellen Sprengversuchen (vor 2002) lieferte. Da eine Überschätzung des Wolkenvolumens eine Unterschätzung der Schadstoffkonzentration zur Folge hat, sollten die zugrundeliegenden Zusammenhänge zwischen Schadstoffwolke und Sprengstoffmenge im Rahmen von weitergehenden experimentellen Versuchen tiefer untersucht werden (/GRS 04/, /GRS 10/).

In den Projekten /GRS 04/ und /GRS 10/ wurden deshalb von der GRS diverse experimentelle Sprengversuche im Feld mit der Zielstellung der Ermittlung der Aerosolverteilung im Nahfeld (mehrere 10 m Radius) durchgeführt. In /GRS 04/ wurden die Ergebnisse dafür verwendet, einen „verbesserten“ empirischen Ansatz zur Ermittlung der Dimension der Sprengwolke (Höhe und Durchmesser) abzuleiten. Der empirische Ansatz wurde dann in das Programm LASAIR (Lagrange-Simulation zur Ausbreitung und Inhalation von Radionukliden, /WAL 08/) implementiert. Die Untersuchungen in /GRS 04/ wurden mit Sprengstoffmassen von 0,5 kg bis 10 kg durchgeführt. Für USBV Ereignisse können jedoch auch Sprengstoffmassen bis zu 100 kg relevant sein (siehe

z. B. /IVA 18/). Da die statistischen Unsicherheiten zur Abschätzung der Wolkendimensionen auf Grundlage des in /GRS 04/ ermittelten empirischen Ansatzes für höhere Sprengstoffmassen nicht vertretbar sind, wurden in /GRS 10/ weitere experimentelle Sprengversuche mit Massen zwischen 10 bis 100 kg durchgeführt.

2 Aufgabenstellung und Zielsetzung

Eine direkte Messung der Wolkendimensionen im Gelände ist schwierig und wird in der Regel durch eine visuelle Auswertung (z. B. Videoaufnahmen) bewerkstelligt. Zur Ergänzung und Nachprüfung der in /GRS 04/ und /GRS 10/ durchgeführten Feldversuche, soll im vorliegenden Eigenforschungsvorhaben mit einem CFD -Modell die zeitliche Entwicklung der Wolkendimensionen und der Aerosolverteilung in Abhängigkeit von u. a.

- der Sprengstoffart und -masse sowie
- der Geometrie (z. B. Sprengladung auf dem Boden aufgesetzt, frei aufgehängt oder seitlich verdammt),

numerisch modelliert werden. Die Modellrechnungen versprechen darüber hinaus die Untersuchung von bisher versuchstechnisch noch nicht erfassten Randbedingungen. Insbesondere sollen die Feldversuche in /GRS 04/ und /GRS 10/ zur Validierung der Rechenergebnisse in diesem Vorhaben verwendet werden.

Die Modellergebnisse liefern einen wichtigen Beitrag zum Verständnis der Wolkenentwicklung und dem Einfluss verschiedener Parameter auf die Ergebnisse der Sprengversuche. Durch das Vorhaben wird die Wissensbasis der GRS im Bereich der Evaluierung von Sprengstoffwirkungen bei der Aerosolbildung erweitert, um auch für bisher nicht untersuchte Fragestellungen fundierte Erkenntnisse zu generieren, bzw. verwendete Ansätze (wie z. B. das Zylindermodell) zu verifizieren. Das Zylindermodell wird in der Begutachtung von Maßnahmen gegen Störmaßnahmen oder sonstige Einwirkungen Dritter (SEWD)-eingesetzt und geht von einer homogenen Verteilung von Aerosolen in einem Zylinder aus, auf Basis der in den früheren Sprengversuchen ermittelten Abmessungen.

Für eine bessere Übersicht der Struktur und Planung der Arbeiten, wurde das Projekt in drei Arbeitspakete (AP) unterteilt:

- **AP 1:** Erarbeitung des Standes von Wissenschaft und Technik und Recherche zu verfügbaren CFD-Modellsystemen zur Simulation von Explosionen.
- **AP 2:** Erstellung eines Explosionsmodells mit dem ausgewählten Modellsystem.
- **AP 3:** Simulation von Explosionswolken mit dem ausgewählten Modell bzw. Modellsystem, unter Berücksichtigung der in den Projekten /GRS 04/ und /GRS 10/ ermittelten Parameter. Validierung der Simulationsergebnisse mit den Sprengversuchen.

3 Stand von Wissenschaft und Technik

Bei Explosionen entstehen Druckwellen, die sich vom Zentrum der Explosionsquelle aus kugelförmig ausbreiten. Dadurch entstehen hochdynamische Prozesse, deren direkte Messung bei experimentellen Feldversuchen schwierig zu bewerkstelligen ist. In der Regel sind deshalb visuelle Fernprüfeinrichtungen erforderlich. Bei den Projekten /GRS 04/ und /GRS 10/ wurden die Dimensionen der entstehenden Wolke aus Videoaufnahmen abgeleitet. CFD-Simulationen können helfen, um z. B. experimentelle Ergebnisse detaillierter evaluieren und den Einfluss von Randbedingungen auf die Ergebnisse zu untersuchen.

In der Vergangenheit wurden für atmosphärischen Dispersionsprobleme (bspw. radioaktive Gase und Aerosole) in der Regel Gauß-Fahnen-Modelle verwendet. Diese nehmen an, dass die Schadstoffe um die mittlere Windgeschwindigkeit normalverteilt sind. Mit größerer Entfernung von der Quelle wird die Schadstoffwolke breiter und höher, bzw. dispergiert. Aufgrund des relativ simplen Ansatzes werden Gauß-Fahnen-Modelle häufig für schnelle Risikobewertungen und Notfallplanungen verwendet /HUM 17/. Sie sind jedoch weniger geeignet für Störfalluntersuchungen im Nahfeld (vgl. u. a. /GRS 20/).

Grundsätzlich ist die Bandbreite der mithilfe von Explosionssimulationen untersuchten Themen sehr breit. Sie umfassen Fragestellungen zur Abschätzung der Auswirkungen von Druckwellen auf Gebäudestrukturen oder der Dynamik von Gasexplosionen (bspw. Kohlenstaubexplosionen), aber insbesondere dienen sie auch der Untersuchung der Schadstoffausbreitung von USBVs.

In /SOH 16a/ wurden Explosionssimulationen mit dem kommerziellen Programm ANSYS Fluent durchgeführt, um die Druckwellenausbreitung in freier Atmosphäre und die strukturellen Einwirkungen auf Gebäude zu untersuchen. Gemäß /SOH 16a/ verfügt ANSYS Fluent über keinen spezifischen Gleichungslöser (sog. Solver) bzw. Algorithmus für Explosionssimulationen. Im Vergleich hierzu enthalten die kommerziellen Programme LS-DYNA und ABAQUS sowie auch die Open Source Software OpenFOAM entsprechende Algorithmen. In /CHE 13/ und in /MIT 14/ wurden die Auswirkungen einer Explosion auf Strukturen mit einem Fluid-Struktur-Interaktionsalgorithmus, mit der Finite-Elemente-Methode (FEM)- Software LS-DYNA /CHE 13/ bzw. ANSYS Autodyn /MIT 14/ untersucht. Zur Berechnung der Druckwelle wurde die sog. Jones-Wilkins-Lee (JWL) Zustandsgleichung verwendet. Dieser Ansatz ist auch im Solver-Paket blastfoam der Firma Synthetik Applied Technologies /SYN 20/ enthalten, welches als Zusatz für die

Software OpenFOAM entwickelt wurde. Eine detailliertere Beschreibung von Programmen, welche zur Simulation von Explosionsereignissen eingesetzt werden können, findet sich in Kap. 4.

Es existieren verschiedene Ansätze der Implementierung von Explosionsquellen in einem Simulationsmodell. Grundsätzlich kann eine Abstraktion der Explosionsquelle durch sog. Äquivalenzansätze und die Ausbreitung durch empirische Ansätze erfolgen (z. B. Friedlander-Gleichung) oder die Energiefreisetzung und die damit einhergehende Druck- und Temperaturerhöhung erfolgen direkt durch sog. Zustandsgleichungen (z. B. JWL-Ansatz). Wenn die erforderlichen Zustandsgleichungen nicht in der verwendeten CFD-Software implementiert sind, kann die Explosionsquelle z. B. vereinfacht als sphärisches, unter einem hohen Überdruck stehendes, Gasvolumen innerhalb einer Atmosphäre angenommen werden. Die somit enthaltene innere Energie entspricht der Energie, die von einer entsprechenden Sprengladung freigesetzt wird. In der Simulation wird der Überdruck instantan freigesetzt, wodurch eine Druckwelle entsteht. Die freigesetzte Energie kann hierbei als Trinitrotoluol (TNT)-Äquivalent errechnet werden. In /MOH 19/ wurde dieser Ansatz gewählt, um mit der Software ANSYS Fluent Explosionen zu simulieren.

Die Ausbreitung von Druckwellen beinhaltet hochdynamische Prozesse. Die Berechnung dieser Prozesse stellt hohe technische Anforderungen an das Modellgitter bzw. die einzelnen Gitterelemente, welche bspw. räumlich entsprechend fein diskretisiert werden müssen. Während sich die Druckwelle ausbreitet, nehmen Druck und Geschwindigkeit mit zunehmender Entfernung vom Explosionszentrum ab. Grundsätzlich kann somit die räumliche Auflösung des Modellnetzes bzw. die Elementgrößen mit zunehmendem Abstand zum Explosionsursprung entsprechend den fallenden Druckgradienten verringert werden. Die Software OpenFOAM inkl. blastFoam /GRE 19/ ermöglicht für solche Fälle eine dynamische Anpassung des Rechengitters („dynamic mesh adaptation“, DMA) in Abhängigkeit der auftretenden lokalen Gradienten. Dies kann die erforderlichen Rechenzeiten erheblich reduzieren, weil nur so viele Gitterelemente wie nötig berechnet werden müssen. Die räumliche Ausbreitung der Druckwelle beinhaltet auch eine zeitliche Komponente. Da sich die Druckwelle mit Überschallgeschwindigkeit ausbreitet, ist zur Berechnung daher ein kleiner Zeitschritt (Gittergrößenabhängigkeit) erforderlich.

3.1 Grundlagen des Explosionsmechanismus

In diesem Abschnitt werden zunächst einige Grundbegriffe erklärt, welche zum besseren Verständnis der verschiedenen Prozesse während einer Explosion dienen.

Gemäß /BAL 12/ ist eine Explosion definiert als eine plötzliche exotherme Freisetzung von Energie in die Atmosphäre. Dies ist normalerweise mit der schnellen Zündung eines leicht brennbaren Materials verbunden. Die Energie, die in ein Gasvolumen bzw. die Atmosphäre instantan freigesetzt wird, führt zu einer schnellen Expansion der umgebenden Luft. Wenn eine Explosion aus einer Verbrennungs- oder Zerfallsreaktion entsteht, so können z. B. die Definitionen aus der DIN EN 13237 /DIN 13/ herangezogen werden /BAL 12/.

- *Explosion: plötzliche Oxidations- oder Zerfallsreaktion mit Anstieg der Temperatur, des Druckes oder beides gleichzeitig.*
- *Deflagration: Explosion, die sich mit Unterschallgeschwindigkeit fortpflanzt.*
- *Detonation: Explosion, die sich mit Überschallgeschwindigkeit fortpflanzt, gekennzeichnet durch eine Stoß- bzw. Druckwelle.*

Bei den in diesem Vorhaben angenommenen Explosionen, handelt es sich in der Regel um Detonationen (Sprengstoffdetonationen). Hierbei wird der größte Teil der freigesetzten Energie in eine Druckwelle umgewandelt. Diese Druckwelle breitet sich sphärisch schneller aus als die Schallgeschwindigkeit und ist gekennzeichnet durch einem steilen Druckanstieg mit nachfolgendem Druckabfall bis unter den Atmosphärendruck /BAL 12/. Detonationswellen unterscheiden sich z. B. von den oben genannten Deflagrationswellen, welche in der Regel bei Gaswolkenexplosionen auftreten. Eine Deflagrationsdruckwelle weist zum Vergleich an der Front einen langsamen Druckanstieg auf, gefolgt von einem – verglichen mit dem Anstieg – steilen Abfall.

3.1.1 Die Detonationswelle

In Abb. 3.1 wird ein idealer Druckverlauf einer Detonationswelle an einem fixen Ort gezeigt. Der Druckverlauf ist durch einen schlagartigen Druckanstieg zum Zeitpunkt t_A vom atmosphärischen Umgebungsdruck (P_0), zum sog. Spitzenüberdruck (P_{so} , peak incident overpressure) gekennzeichnet. Der Spitzenüberdruck ist der Druck über dem atmosphärischen Druck von 101 kPa (bei Meeresspiegelniveau) /GOE 15/. Nach Durchlauf der

Druckwelle nimmt der Druck mit der Zeit exponentiell ab und kehrt zum Zeitpunkt t_d zum Umgebungsdruck zurück.

Nach dem Durchgang der Druckwelle kann der Druck unter den Umgebungsdruck fallen. Diese Unterdruckphase kann ca. 2- bis 5-mal länger als die Überdruckphase andauern /GOE 15/. Bei sehr starken Detonationen kann die Temperatur auch unter den Taupunkt sinken, wodurch die sog. Wilson-Wolke entsteht. Zudem kann sich die Strömung aufgrund des starken Unterdruckes sogar umkehren (z. B. nuklearen Detonationen). Der betragliche Spitzenwert des Unterdruckes P_{so}^- ist geringer als P_{so} und ist gegenüber t_A verzögert. P_{so}^- hat jedoch eine viel längere Dauer als P_{so} (einige ms) /MAS 17/.

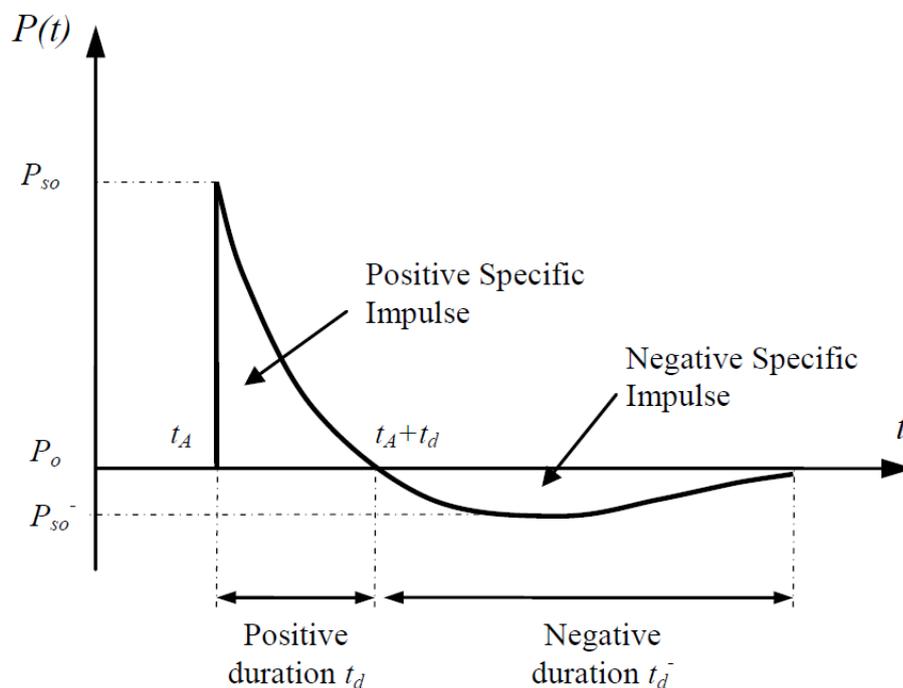


Abb. 3.1 Zeitlicher Druckwellenverlauf einer idealen Detonation (sog. Friedlander-Wellenform) /NGO 07/

P_o ist der Atmosphärendruck, t_A ist die Ankunftszeit der Druckwelle am Auswertungspunkt

Der Druckverlauf in Abb. 3.1 wird durch die Friedlander-Gleichung wie folgt für in freier Luft detonierte sphärische Sprengladungen beschrieben /MAS 17/.

$$P_s(q, t) = P_{so}(q) \left(1 - \frac{t - t_A}{t_0}\right) e^{-b \frac{t - t_A}{t_0}} \quad (3.1)$$

$P_s(q, t)$ Druckverlauf [Pa]

q Entfernung von der Detonationsquelle [m]

P_{so} Spitzenüberdruck relativ zu P_0 (Umgebungsdruck) am Punkt q [Pa]

t_A Ankunftszeit der Druckwelle am Punkt q

t_0 positive Phasendauer ab t_A bis $P_s \geq 0$

b Abklingkoeffizient der Wellenform [-]

Der Abklingkoeffizient b beeinflusst die Berechnung des Detonationsimpulses. Der Impuls für die Überdruckphase einer Druckwelle entspricht der Fläche unter der Friedlanderkurve und kann als Kraft pro Flächeneinheit berechnet werden, vgl. /MAS 17/. Dieser Wert ist z. B. für die Untersuchung von Auswirkungen einer Detonation auf Gebäudeflächen relevant. Dafür muss der Spitzenüberdruck und insbesondere die Dauer der Druckwirkung betrachtet werden. Zudem ist die Orientierung der Objekte zur Druckwellenausbreitung entscheidend /BAL 12/. Strukturelle Einwirkungen von Druckwellen auf Objekte sind jedoch nicht Gegenstand dieses Vorhabens.

3.1.2 Der dynamische Druck

Der Druckwelle folgt eine Luftströmung, die durch die sich ausdehnenden heißen Gase erzeugt wird. Der damit einhergehende dynamische Druck (Staudruck) ist eine Funktion der Strömungsgeschwindigkeit und Dichte der Luft hinter der Stoßwelle /GOE 15/. Der dynamische Druckverlauf wird nicht in der Friedlander Gleichung berücksichtigt und muss separat berechnet werden. Bei sehr starken Druckwellen kann der dynamische Spitzendruck sogar größer als der Spitzenüberdruck sein. Unter einem Spitzenüberdruck von etwa 500 kPa, ist der dynamische Druck jedoch kleiner. Ähnlich wie beim Spitzenüberdruck nimmt der dynamische Spitzendruck mit zunehmendem Abstand vom Detonationszentrum ab /REM 07/.

Für typische Bedingungen wurden empirische Beziehungen zwischen dem Spitzenüberdruck P_{so} , dem dynamischen Spitzendruck, der Strömungsgeschwindigkeit und der Luftdichte hinter der Druckwellenfront hergestellt. Diese Beziehungen besagen, dass die Größe des dynamischen Drucks, der Stoßfrontgeschwindigkeit und der Luftdichte ausschließlich eine Funktion des Spitzenüberdrucks ist /REM 07/.

3.1.3 TNT-Äquivalenzmasse

Zur Bestimmung des Spitzenüberdrucks bzw. des Druckverlaufs, wurden viele empirische Gleichungen entwickelt (siehe u. a. /MAS 17/). Diese Gleichungen berücksichtigen die Menge des Sprengstoffs und die Entfernung vom Detonationsort durch die Einführung von Skalierungsgesetzen. Diese Gesetze ermöglichen die Verwendung von universal gültigen Detonationsparametern eines standardisierten Versuchsaufbaus für andere Entfernungen und Ladungsgewichte. Das am häufigsten verwendete Skalierungsgesetz, wurde von Hopkinson-Cranz entwickelt /KAR 15/, /KAR 13/:

$$Z = \frac{R}{\sqrt[3]{W}} \quad (3.2)$$

Z	skalierter Abstand
R	Entfernung von der Explosionsquelle [m]
W	Masse des Sprengstoffs [kg]

Für eine bessere Vergleichbarkeit der großen Vielfalt an Sprengstoffen wurde ein Referenzsprengstoff definiert, welcher in Gleichung (3.2) verwendet wird. Hierfür wurde TNT ausgewählt, da seine Detonationseigenschaften vielen anderen festen Sprengstoffen ähnlich sind. Dies bedeutet, die Masse eines möglichen Sprengstoffs muss zunächst in eine äquivalente TNT-Masse umgerechnet werden. Hierfür wird das Verhältnis der während der Detonation erzeugten Wärme verwendet, wie in Gleichung (3.3) gezeigt /UNI 08/:

$$W_e = W_{exp} \frac{H_{exp}^d}{H_{TNT}^d} \quad (3.3)$$

W_e	TNT Äquivalenzmasse [kg]
W_{exp}	Gewicht des umzurechnenden Sprengstoffs [kg]
H_{exp}^d	erzeugte Wärme des umzurechnenden Sprengstoffs [MJ/kg]
H_{TNT}^d	erzeugte Wärme von TNT [MJ/kg]

Gemäß /KAR 15/ sind entsprechende Parameter zur Wärmeproduktion verschiedener Sprengstoffe u. a. in /UNI 08/ und /UNI 15/ zu finden.

3.1.4 Explosionskategorien

Gemäß /GLA 22/ können Explosionen in freier Atmosphäre, welche für das vorliegende Vorhaben relevant sind, bspw. unterschieden werden darin, ob sie in der Luft oder auf einer Oberfläche stattfinden. Die Unterteilung in /GLA 22/ erfolgt in Bezug auf eine Wechselwirkung der Explosion mit der Umgebung. Wenn ein Sprengsatz in einer gewissen Entfernung über dem Boden explodiert, kann von einem „air burst“ gesprochen werden (s. Abb. 3.2-links). Findet die Explosion auf oder sehr nahe an der Bodenoberfläche statt, handelt es sich um einen „surface burst“ (s. Abb. 3.2-rechts). Die Druckwelle wird hier direkt von der Bodenoberfläche reflektiert. Beide Arten von Explosionen können durch die Wechselwirkung der entstehenden Druckwelle und der reflektierten Wellen u. U. unterschiedlichen Einfluss auf eine Schadstofffreisetzung haben.

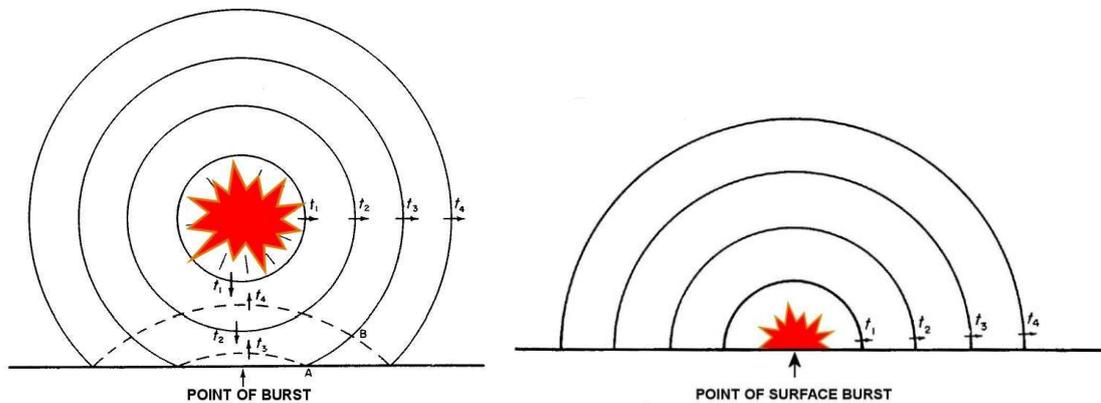


Abb. 3.2 Schematische Darstellung entstehender Druckwellen beim „air burst“ (links) und dem „surface burst“ (rechts). Die gestrichelten Linien stellen die reflektierte Welle dar /REM 07/

3.1.5 Modellierung der Sprengladung

Zur Vorhersage der Druckwellenausbreitung bei Explosionen, existieren verschiedene Methoden, welche in drei grundlegende Kategorien unterteilt werden können:

- a) Empirische (oder analytische) Methoden
- b) Semiempirische Methoden und
- c) Numerische Methoden.

Empirische Methoden sind im Wesentlichen Korrelationen, welche aus experimentellen Daten und Versuchen gewonnen wurden. Semiempirische Methoden enthalten sowohl empirische Größen als auch weitere Parameter, welche durch theoretische Überlegungen vorab festgelegt wurden. Numerische Methoden basieren auf mathematischen Gleichungen, die die problemspezifischen Grundgesetze der Physik beschreiben. Diese Prinzipien umfassen die Erhaltung von Masse, Impuls und Energie. In diesem Vorhaben werden nur numerische Methoden berücksichtigt.

Es existieren verschiedene Ansätze zur Modellierung von Sprengladungen in Simulationsmodellen, welche im Folgenden kurz erläutert werden:

1. Der einfachste Weg, den Druckverlauf einer Explosion zu berechnen, besteht über eine Funktion, die die zeitliche Entwicklung der Druckwelle an einem bestimmten Ort beschreibt (siehe Friedlander Funktion Abb. 3.1, Abschnitt 3.1.1). Bei dieser Art der Simulation werden verschiedene Faktoren, wie Stoß (impact), Reflexion (reflection), Abschattung (shadowing) und Kanalisierung (channeling) bei der Berechnung der Druckwelle nicht berücksichtigt. Bei komplexeren Regimen (wie sie häufig in städtischen Gebieten oder bei Nahfelddetonationen auftreten) liefert die Friedlander-Funktion keine zufriedenstellende Ergebnisse /STO 14/. Zur Beschreibung der Druckwellenausbreitung werden aufgrund ihrer Einfachheit häufig empirische Methoden, wie z. B. das CONWEP- und das TM5-1300-Modell /UNI 08/ verwendet. Eine Beschreibung dieser und weiterer empirischer Modelle ist in /KAR 15/ zu finden. Empirische Modelle bieten ein ausgewogenes Verhältnis zwischen Rechenaufwand und Präzision. Tatsächlich berücksichtigen diese Modelle nur die initiale Druckwelle aber keine Reflexionen oder den dynamischen Druck /MAS 17/.
2. Ein weiterer Ansatz besteht darin, die Energiefreisetzung des Sprengstoffs bzw. den chemischen Prozess der Verbrennung direkt zu berechnen. Das Verhalten des Sprengstoffs (z. B. von TNT) kann z. B. unter Verwendung des JWL-Ansatzes zusammen mit einem Gasmodell für Luft (bspw. als ideales Gas) betrachtet werden /STO 14/.
3. Zur Vereinfachung der Berechnung der Energiefreisetzung wurde in vielen Vorhaben der sog. Ballon-Ansatz angewendet. Dabei wird die Sprengladung als kugelförmiges Volumen modelliert. In diesem ist Gas unter hohem Überdruck eingeschlossen. Die innere Energie des enthaltenen kompressiblen Gases entspricht der Energie, die durch die Sprengladung freigesetzt wird /STO 14/.

4. Die sog. Mapping Methode kann als allgemeinere Methode betrachtet werden. Ein Mapping-Algorithmus überträgt Simulationsergebnisse aus detaillierten 1D-Rechnungen auf ein gröberes 3D-Netz, wodurch der Rechenaufwand reduziert wird. Kommerzielle Software wie Autodyn und LS-DYNA bieten Mapping-Technologien an /STO 14/.

In CFD-Anwendungen werden häufig die Ansätze in Punkt 2 und 3 verwendet. Punkt 3 (Ballon-Ansatz) wird als vereinfachter Ansatz gewählt, wenn keine entsprechenden Modelle zur Berechnung der Druckwellenausbreitung verfügbar sind. Als Zustandsgleichung in Punkt 2 wird in der Regel der JWL-Ansatz verwendet. Da dieser Ansatz auch in diesem Vorhaben verwendet werden soll, wird dieser im Folgenden Unterkapitel näher erläutert.

3.1.6 Der Jones-Wilkins-Lee (JWL)-Ansatz

Als gängigste Zustandsgleichung zur Simulation von Detonationen wird der JWL-Ansatz in der Literatur aufgeführt, vgl. z. B. /MAS 17/.

Der JWL-Ansatz wird üblicherweise zur Beschreibung der Druck-Volumen-Energie-Beziehung von Detonationsprodukten verwendet. Grundsätzlich beschreibt der JWL-Ansatz eine physikalisch basierte Zustandsgleichung (EOS, equation of state), die die Gesetze der Thermodynamik verwendet, um die Energiefreisetzung einer chemischen Detonation zu berechnen. Dieses Modell ermöglicht eine vollständige Beschreibung eines Detonationsablaufs, d. h. nicht nur die Ausbreitung der Druckwelle in einem Medium (z. B. Luft), sondern auch ihre Reflexion auf festen Oberflächen und die Ausdehnung der heißen Gase, d. h. des dynamischen Drucks /MAS 17/. Der JWL-Ansatz berechnet den Überdruck P_s im Sprengstoff in Abhängigkeit von verschiedenen Parametern:

$$P_s = A \left(1 - \frac{\omega \rho}{R_1 \rho_0}\right) \exp\left(-R_1 \frac{\rho_0}{\rho}\right) + B \left(1 - \frac{\omega \rho}{R_2 \rho_0}\right) \exp\left(-R_2 \frac{\rho_0}{\rho}\right) + \omega \rho E_m \quad (3.4)$$

P_s	Überdruck [Pa]
ρ_0	Sprengstoffdichte
ρ	Dichte der Detonationsprodukte
E_m	innere Energie pro Masseneinheit
A, B, R_1, R_2, ω	Sprengstoffspezifische Parameter

Zusätzlich kann noch die Detonationsgeschwindigkeit v_D angegeben werden. Alle Parameter werden anhand der Anpassungsergebnisse des sog. Zylinderausdehnungstests kalibriert /MAS 17/. In Tab. 3.1 sind beispielhaft Parameter für die JWL-Zustandsgleichung für Luft und TNT dargestellt.

Tab. 3.1 Beispielhafte Parameter für die JWL-Zustandsgleichung /MAS 17/

Luft	$\rho = 1,225$ [kg/m ³]	T = 288,2 [K]	Gas Konstante = 287,058 [J/kg K]		spezifische Wärme = 717,6 [W/m K]			
TNT	$\rho_0 = 1630$ [kg/m ³]	$v_D = 6930$ [m/s]	A = 373770 [MPa]	B = 3747 [MPa]	$\omega =$ 0,35	$R_1 =$ 4,15	$R_2 =$ 0,9	$E_m = 3680$ [KJ/kg]

Der JWL-Ansatz basiert auf einer Energieerweiterung erster Ordnung der prinzipiellen Isentropen¹ für die Detonationsprodukte, Gleichung (3.5):

$$P_s = A \exp\left(-R_1 \frac{\rho_0}{\rho}\right) + B \exp\left(-R_2 \frac{\rho_0}{\rho}\right) + C \left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)^{-(\omega+1)} \quad (3.5)$$

P_s Überdruck [Pa]

ρ_0 Sprengstoffdichte

ρ Dichte der Detonationsprodukte

A, B, C, R_1 , R_2 , ω Sprengstoffspezifische Parameter

Das Isentrop in Gleichung (3.5) besteht aus drei verschiedenen Beiträgen, von denen jeder die Ausbreitung einer Detonationswelle innerhalb eines explosiven Materials beschreibt (Abb. 3.3) /MAS 17/:

1. Der erste Term beschreibt das Hochdruckregime und dominiert, wenn der Explosivstoff so komprimiert wird, dass $\rho_0/\rho < 1$,
2. der zweite Term repräsentiert den hohen Zwischendruckbereich, d. h. wenn $1 < \rho_0/\rho < 0,75$ und
3. der dritte Term ist die Zustandsgleichung eines idealen Gases, das ein korrektes Verhalten bei großer Ausdehnung gewährleistet, $\rho_0/\rho > 4$.

¹ „Als Isentrope bezeichnet man Linien gleicher Entropie. Da Entropie und potenzielle Temperatur direkt miteinander in Beziehung stehen, wird der Begriff der Isentropen auch synonym für Linien gleicher potentieller Temperatur gebraucht“ (Wikipedia)

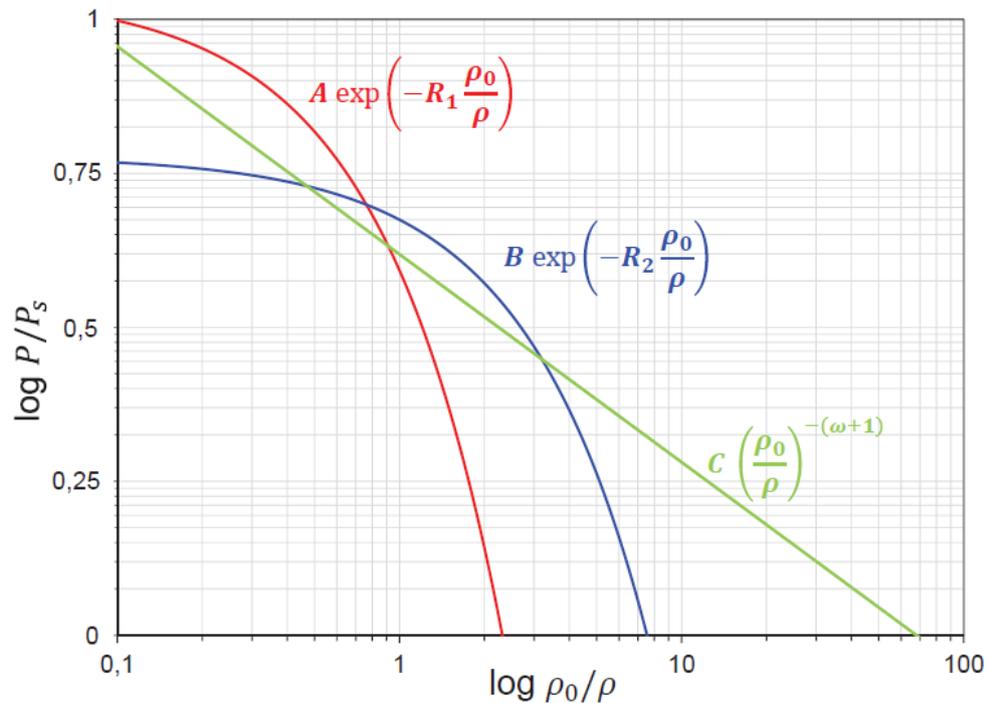


Abb. 3.3 Überdruck für TNT, bei Variation der Dichte der Detonationsprodukte /MAS 17/

3.1.7 Verdämmte oder unverdämmte Sprengstoffe

Die Verdämmung bzw. der Einschluss von Sprengstoff, z. B. in einer Metallhülle, hat Einfluss auf die Druckwelle. Um den Einfluss der Verdämmung einer thermobaren Ladung (Kraftstoff-Luft-Sprengstoff) auf den Explosionsprozess zu bewerten, wurden in /CHE 16/ entsprechende Ladungen mit unterschiedlich starken Hüllen gesprengt und numerischen Simulationen mit ANSYS-Autodyn durchgeführt. Die simulierten Ergebnisse wurden mit den experimentellen Versuchen verglichen. Die Ergebnisse zeigen, dass Parameter der Druckwelle (shock wave), wie die Abklingrate (shock wave decay) und der Nachbrenndruck (after-burning pressure) von Ladungen ohne Hülle höher sind als bei Ladungen mit Hülle unter ansonsten gleichen Bedingungen /CHE 16/.

Die Druckwellenparameter, wie der sog. Nachbrenndruck und die Abklingrate von Ladungen mit Aluminiumhüllen sind höher als die von Ladungen mit Stahlhüllen. Der durch numerische Simulationen berechnete zeitliche Verlauf der Druckwelle, sowie der maximale Druck und Impuls, stimmen gut mit den experimentellen Ergebnissen überein. Die Ankunftszeit des maximalen Nachbrenndrucks der Druckwelle von Ladungen ohne Hülle ist früher als die von Ladungen mit Hülle. Die Ankunft des maximalen Nachbrenndrucks der Druckwelle von Ladungen mit Aluminiumhülle erfolgt früher als die von Ladungen

mit Stahlhülle. Die Dicke der Hüllen hat einen großen Einfluss auf den anfänglichen Überdruck der Druckwelle, denn die Metallhüllen verzögern die Ausbreitung der Druckwelle /CHE 16/.

Die Untersuchungen in /GRS 04/ ergaben jedoch, dass die Verdämmung, sowie die Sprengstoffart keinen signifikanten Einfluss auf die Entwicklung der Wolkendimensionen haben. Deswegen wurden die Untersuchungen in /GRS 10/ ohne Verdämmung und nur mit dem Sprengstoff Pentaerythryltetranitrat (PETN) durchgeführt.

3.2 USBV

3.2.1 Radioaktive Quellen

Zusätzlich zu den in Abschnitt 3.1 beschriebenen Explosionsmechanismen ist bei der Untersuchung von USBV auch die Art der beigemengten (Schad-)Stoffe sowie ihre Ausbreitung im Verlauf und nach der Explosion von Bedeutung. Für die Bewertung des Schadstofftransportes einer USBV ist die Identifizierung der freigesetzten Schadstoffart bzw. Radionuklide (z. B. Partikelgröße) von großer Wichtigkeit. Gemäß /AND 08/ wird von einem beschränktem Umfang der radiologischen Schadstoffe ausgegangen. In Frage kommen hier bspw. Radionuklide, welche in der Medizin, Forschungslabors oder Verarbeitungsbetrieben verwendet werden. In diesen Einrichtungen werden erhebliche Mengen nicht spaltbarer radioaktiver Stoffe gelagert (z. B. zum Abtöten von Mikroben, Betrieb radiothermischer Generatoren und Messinstrumente zur Vermessung von tiefen Bohrungen). In diesen Einrichtungen fehlen die für die Herstellung von Atomwaffen geeigneten Arten oder Mengen von Radionukliden, jedoch sind sie ausreichend die Verwendung in USBV.

In Tab. 3.2 ist eine Übersicht gegeben über potenzielle radiologische Schadstoffe, welche in einer schmutzigen Bombe zum Einsatz kommen könnten.

Tab. 3.2 Potenzielle radiologische Schadstoffe für den Einsatz in einer schmutzigen Bombe /AND 08/

Radionuclide	Typical physicochemical form of large existing sources	Existing strong sources and their strengths
⁶⁰ Co	Metal	Sterilisation irradiator (up to 400,000 TBq). Teletherapy source (up to 1000 TBq)
⁹⁰ Sr	Ceramic (SrTiO ₃) - insoluble, brittle, soft (Mohs hardness: 5.5)	Radioisotope thermoelectric generator (1000-10.000 TBq)
¹³⁷ Cs	Salt (CsCl), soluble	Sterilisation irradiator (up to 400,000 TBq). Teletherapy source (up to 1000 TBq)
¹⁹² Ir	Metal – soft - Mohs hardness 6.5	Industrial radiography source (up to 50 TBq)
²²⁶ Ra	Salt (RaSO ₄) very low solubility	Old therapy source (up to 5 TBq)
²³⁸ Pu	Ceramic (PuO ₂) - insoluble	Radioisotope thermoelectric generator (up to 5,000 TBq)
²⁴¹ Am	Pressed ceramic powder (AmO ₂)	Well logging source (up to 1 TBq).
²⁵² Cf	Ceramic (Cf ₂ O ₃) - insoluble	Well logging source (up to 0.1 TBq).

Gemäß /AND 08/ haben experimentelle Arbeiten von /HAR 07/ gezeigt, dass die nach einer Explosion zu erwartende Partikelgrößenverteilung der Schadstoffe stark von ihren elementaren Eigenschaften, wie bspw. ihrer physikochemischen Formen und dem mehr oder weniger erfolgreichen Aufbau der Sprengvorrichtung abhängt. Gemäß Tab. 3.2 können typische physikalisch-chemische Formen grob in vier Kategorien unterschieden werden: Keramik, Metalle, Pulver/Salze und Flüssigkeiten. Während der Schock-Aerosolisierung können Stoffe Phasenänderungen in flüssiger oder dampfförmiger Form durchlaufen /HAR 07/. Dadurch können kleine Flüssigkeits- oder Dampfkondensationspartikel gebildet werden, welche unterschiedliche Transport- und Depositionseigenschaften aufweisen. Im Zusammenhang mit dem Prozess der Aerosolisierung ist deshalb entscheidend, welcher Anteil der Schadstoffe hierfür überhaupt zur Verfügung steht /AND 08/.

Die Größenverteilung der dispergierten Partikel ist im Allgemeinen von großer Bedeutung für die Folgen einer atmosphärischen Freisetzung von Schadstoffen. Beispielsweise ist die Trockenablagerungsgeschwindigkeit auf einem Rasen für 20 µm-Partikel typischerweise um einen Faktor von etwa 30 höher als für 2 µm-Partikel. Die Verteilung der Kontamination auf verschiedenen Oberflächen z. B. in einer bewohnten Umgebung hängt somit stark von der Partikelgröße und den vorherrschenden Prozessen (Brownsche Diffusion, Impakt, Abfangen (interception), gravitative Ablagerung usw.) ab.

Diese bestimmen deren trockene Deposition auf Oberflächen unterschiedlicher Materialien /AND 08/.

In /GRS 04/ wurden Untersuchungen mit unterschiedlichen Partikelgrößen (verschiedene Farbstoffe) durchgeführt. Die Ergebnisse zeigten, dass die Partikelgröße keinen Einfluss auf die Wolkendimensionen hat. Unter Umständen wirkt sich die Partikelgröße stärker auf die eigentliche Deposition der Partikel im Umfeld aus und weniger auf die eigentliche Wolkenbildung. Die Untersuchung der Partikeldeposition ist jedoch nicht Aufgabenstellung dieses Vorhabens.

3.2.2 Partikeltransport bzw. Freisetzung

Gemäß /HUM 17/ ist für eine realistische Vorhersage der radiologischen Folgen eines USBV-Ereignisses, die Simulation der lokalen Aerosolisierung der Schadstoffe (Nahfeld) und der nachfolgende atmosphärische Transport der suspendierten Schadstoffe (Fernfeld) von entscheidender Bedeutung. Ein atmosphärischer Schadstofftransport kann allgemein durch die folgenden drei Ansätze simuliert werden (siehe z. B. /REN 11/):

- Gauß-Fahnen- oder Puff-Modelle,
- Lagrange-Puff oder -Partikel-Modelle und
- CFD-basierte Euler- oder Lagrange'sche Partikel-Modelle.

Die Simulation der initialen Aerosolisierung eines Schadstoffes durch eine Sprengstoffexplosion kann nicht durch empirische Gauß-Fahnen/Puff- oder Lagrange'sche Puff-Modelle (z. B. HotSpot oder LASAIR) abgebildet werden. Für diese Modelle werden die initialen Zustände (Wolkenhöhe und Konzentration) aus empirischen Gleichungen abgeleitet. Ein Schadstofftransport in Abhängigkeit der bei einer Explosion auftretenden Prozesse, kann insbesondere durch CFD-Simulationen mit dem Euler- oder dem Lagrange'schen Partikel-Modell berechnet werden. Insbesondere können mit CFD-Modellen physikalische mikroskalige Prozesse berechnet und untersucht werden.

Für „große“ Ausbreitungsmodelle (> 2 km) können CFD-Rechnungen insbesondere mit dem Lagrange'schen Partikelansatz sehr rechenaufwendig sein. Zur Verringerung der Rechenzeit werden sog. Hybridmodelle angewendet, in denen die Freisetzung der Partikel durch ein Lagrange'sches Partikel Modell und der Weitertransport in der Atmo-

sphäre durch ein Gaußsches Puff Modell erfolgte. In /IVA 18/ wurde z. B. ein entsprechendes Modell entwickelt, das sog. MCREXS-Modell (Multi-Cloud Radiological Explosive Source). Im Folgenden werden die bei einer Explosion auftretenden Phänomene näher beschrieben.

Die Bildung eines sog. „Feuerballs“ ist das erste Phänomen, das unmittelbar nach der Explosion von Sprengstoff auftritt. Der Feuerball kühlt innerhalb von Millisekunden ab und erzeugt die anfängliche Explosionswolke, die aus heißem gasförmigem, radioaktivem und mitgerissenem Material (z. B. Staub) besteht. Die Explosionswolke steigt auf, kühlt sich ab, vermischt sich mit der Umgebungsatmosphäre und wird durch anstehenden Wind dispergiert. Die Entwicklung der Explosionswolke bis zu ihrer effektiven Höhe (d. h. der Höhe, in der sich die Wolke im thermischen Gleichgewicht mit der Umgebungsluft befindet und somit nur von der Atmosphäre beeinflusst wird) ist für jedes atmosphärische Transportmodell wichtig /SHA 12/.

Die endgültige Wolkendimension und die Partikelkonzentration darin beeinflussen die Boden- und Luftkonzentration. Hiervon abhängig sind somit die resultierenden Kontaminationen und entsprechend die Expositions Dosen im Nahfeld sowie in Entfernungen bis zu wenigen Kilometern von der Explosionsquelle. Die Entwicklung der Wolkendimension hängt von der Menge und Art des Sprengstoffs (seiner Energiekapazität) sowie seiner Geometrie, der Anordnung des Schadstoffs beim Sprengstoff, dem Bodenoberflächentyp (z. B. Erde oder Beton), der Explosionshöhe über dem Boden und insbesondere auch von den atmosphärischen Bedingungen in der unmittelbaren Nähe der Explosionsquelle ab.

Die atmosphärische Stabilität und ihr mitunter turbulentes Verhalten beeinflussen stark die Konzentrationsentwicklung des radioaktiven Materials in der Wolke und natürlich den Aufstieg der Wolke /SHA 12/. Für die Untersuchungen in diesem Vorhaben ist zunächst nur die Bildung der Explosionswolke von Interesse. Der Weitertransport des Schadstoffs in weiter entfernte Gebiete (Fernfeld) ist nicht Teil der Aufgabenstellung. Im Folgenden werden die Transportmechanismen zur Freisetzung der Schadstoffe im Nahfeld näher beschrieben.

3.2.2.1 Prozesse im Nahfeld

Der maximale Aufstieg der Schadstoffwolke hat einen großen Einfluss auf die Größe des resultierenden kontaminierten Bereichs. Wenn die Wolke aufsteigt, wird sie mit der umgebenden Luft turbulent vermischt und weiter transportiert /AND 08/. Entscheidend für die modelltechnische Abbildung des Transportproblems ist zunächst die allgemeine Identifizierung der ablaufenden Prozesse, sowie die resultierenden einwirkenden Kräfte auf die Partikel. Gemäß /SHA 12/ können die folgenden drei Phasen unmittelbar nach einer Explosion unterschieden werden:

Phase 1: Schnelle Expansion der entstehenden heißen Reaktionsprodukte.

In dieser Phase wird die Luft in unmittelbarer Nähe des Explosionspunktes (Feuerball) stark erhitzt. Diese Phase dauert mehrere zweistellige Millisekunden bis hin zu einer Sekunde und ist der schnellste sowie der am wenigsten meteorologisch abhängige Teil des gesamten Prozesses.

Phase 2: Ausdehnung und Aufstieg der Wolke aufgrund der Explosionsprodukte, heißer Luft und mitgerissenem Material vom Boden.

Während dieser Phase ist die durchschnittliche Temperatur in der Wolke deutlich höher als die Temperatur der Umgebungsatmosphäre. Die Wolkendimensionen und ihre vertikale Geschwindigkeit werden durch die durchschnittliche Dichte innerhalb der Wolke, die atmosphärischen Bedingungen um sie herum, die Viskosität sowie die Geschwindigkeits- und Temperaturverteilung innerhalb der Wolke bestimmt. Die Wolke kann aufgrund des Vorhandenseins noch brennender Explosionsprodukte immer noch zunehmen (sog. Afterburn). In diesem Stadium wird die Wolke insbesondere durch die folgenden Prozesse abgekühlt:

- Strahlung,
- Konvektion innerhalb der Wolke und
- Wärmetransport zur atmosphärischen Schichtung und volumetrischen Expansion

Dieser Schritt dauert von Sekunden bis zu mehreren zweistelligen Sekunden, je nach Sprengstoffmasse.

Phase 3: Die Fortsetzung der Wolkenexpansion und -höhe.

Zu diesem Zeitpunkt liegt die durchschnittliche Temperatur der Wolke nahe an der Umgebungsatmosphäre und die Höhe der Wolke wird aufgrund des Auftriebs und der Trägheit der darin enthaltenen Gase fortgesetzt. Die Ausdehnung der Wolke wird hauptsächlich durch Diffusion und Turbulenz verursacht. Diese Phase dauert bis zu hunderten von Sekunden für eine große Menge Sprengstoff und endet, wenn die Wolke ihre sog. effektive (maximale) Höhe erreicht hat. Im Allgemeinen wird während der ersten Phase die Form und Bewegung der Wolke nicht durch die Umgebungsatmosphäre (d. h. lokale Mikrometeorologie) beeinflusst. Die Atmosphäre wird jedoch mit der Ausbreitung der Wolkenentwicklung zu einem zunehmend dominanten Faktor. Nachdem die Wolke ihre effektive Höhe erreicht hat, bewegt sie sich aufgrund des Windes und ihre Dimension wird durch die atmosphärischen Bedingungen bestimmt.

Zusammenfassend entsteht nach der Explosion einer USBV aufgrund der exothermen Reaktion des Sprengstoffs ein sog. Feuerball verbunden mit einer Schockwelle. Der Impuls (Schockwelle) und der Auftrieb (Feuerball), die mit der Freisetzung von kinetischer und thermischer Energie verbunden sind, verursachen den anfänglichen Auftrieb der Schadstoffe in Abhängigkeit der meteorologischen Bedingungen der Umgebungsluft. Zudem wird aufgrund des schlagartigen Druckanstiegs mit der Druckwelle die dadurch beeinflusste Luft stark verdichtet und erhitzt sich zusätzlich.

Eine sich in einem Medium ausbreitende Druckwelle verliert permanent Energie und wandelt sich schließlich in eine sphärische Schallwelle (Unterschall) um /LAN 87/. Diese Transformation wird durch ein Zusammenspiel zwischen nichtlinearen und dissipativen Prozessen bestimmt. Da lineare Schallwellen keine dauerhafte Strömung erzeugen können /LAN 87/, kommt der Partikeltransport zu diesem Zeitpunkt zum Erliegen /DUB 15/.

Experimentelle Versuche ergaben, dass die Größe der Partikel als kritisch für Dispersionsvorhersagen gilt /HAR 07/. Die Trägheit eines Partikels bestimmt zum Beispiel, ob es die initiale Schockwelle „überholt“ und wie stark der Partikel durch die Viskosität der umgebenden Luft abgebremst wird. Für kleine Partikel im Maßstab suspendierter Aerosole ($< 10 \mu\text{m}$) sind die zurückgelegten Strecken relativ kurz, da sie die Druckwellenfront nicht überholen können /IVA 18/. Dies legt den Schluss nahe, dass die Druckwelle nur einen geringfügigen Effekt auf eine Änderung der Freisetzungshöhe für solche Partikel hat. Im Gegensatz dazu können größere Partikel ($> 10 \mu\text{m}$) die führende Stoßfront durchdringen und überholen und sich anschließend ballistisch durch die Luft bewegen. Partikel in

dieser Größenordnung wurden in Dispersionstests für RDD-Ereignisse beobachtet (z. B. wie von /GRE 16/ berichtet). Die richtige Charakterisierung der Partikelquelle ist daher für realistische Dispersionsvorhersagen von entscheidender Bedeutung /HUM 17/.

3.2.2.2 Transportmechanismen für Partikel

Im Folgenden werden die auftretenden physikalischen Phänomene beschrieben, um das Transportverhalten von Partikeln in der Explosionswolke vorherzusagen zu können. Hierbei müssen gemäß /FRO 18/ verschiedene Partikel-Skalenbereiche unterschieden werden:

- Auf der Skala der Partikelgröße, die von **Mikrometern bis Millimetern** reichen kann, ist es notwendig, den Effekt von Partikel-Partikel-Kollisionen zu quantifizieren, insbesondere im Bereich hoher Partikelkonzentrationen. Die Kräfte und die Wärmeübertragung zwischen Partikeln und der Strömung während der Partikel-Wechselwirkungen müssen angegeben werden /LIN 11/. Von besonderer Bedeutung ist die Bestimmung der Relaxationsrate der Relativgeschwindigkeit zwischen den Partikeln und dem Gas hinter der Druckwelle /BOI 96/. Bei reaktiven Partikeln sollten die Partikelreaktionsrate, die durch Kinetik oder Diffusion begrenzt sein kann, sowie die kollektiven Effekte mehrerer Partikel quantifiziert werden /SOO 15/.
- Andere Effekte spielen im Maßstab von **Millimetern bis Zentimetern** eine Rolle und umfassen die Entwicklung von sog. Kraft-Ketten-Netzwerken während der Verdichtung körniger Medien /MAJ 05/, sowie die anschließende Bildung von Filamentpartikelclustern und -strahlen bzw. Jetstrukturen /FRO 12/.
- Schließlich kommen auf großen, integralen Skalen (**zehn Zentimeter bis Meter**) Partikel-Struktur- und Schock-Struktur-Wechselwirkungen sowie Schock-Schock-Wechselwirkungen ins Spiel.

Die Wechselwirkung zwischen einem Trägermedium (Gas) und einem Partikelfeld ist sehr komplex, aufgrund:

- der nichtlinearen Natur der untersuchten Zusammenhänge,
- kompressibler Strömungseffekte innerhalb der Gasphase,
- hoher Reynoldszahlen (Turbulenz),
- von Kompressibilitätseffekten bei hohen Machzahlen (Überschallgeschwindigkeit),

- von Partikel-Partikel-Wechselwirkungen bei hohen Volumenanteilen der Partikel sowie
- (zufälliger) Partikelgröße, -form und -verteilung.

Auf Partikel, welche sich in einem kompressiblen, strömenden Fluid befinden, wirken unterschiedliche Kräfte. Die Kraft auf ein Teilchen kann in Oberflächen- und Körperkräfte unterteilt werden. Beispiele für Körperkräfte sind Schwerkraft, elektrostatische und magnetische Kräfte. Beispiele für Oberflächenkräfte sind Druck- und Viskositätskräfte /PAR 10/. Elektrostatische und magnetische Kräfte sind in diesem Vorhaben nicht relevant und werden nicht betrachtet. Im Folgenden werden die einzelnen Kräfte näher erläutert /CFD 21/ (siehe auch Abb. 3.4):

- Widerstandskraft (drag force): Für die Beschleunigung oder Verzögerung des Partikels aufgrund seiner Trägheit in einem Fluid ist auch die Beschleunigung oder Verzögerung des umgebenden Fluids notwendig.
- Druckgradient Kraft (pressure gradient): Kraft, welche aus der Druckdifferenz entlang der Bewegungsrichtung des Partikels resultiert.
- Gravitationskraft: Schwerkraft, welche auf die Partikel wirkt.
- Auftriebskraft (buoyancy force): Auftriebskraft, welche aus dem Dichteunterschied des Partikels und der Gasphase resultiert.
- Auftriebskraft (Saffman lift force): Partikel, die sich in einer Scherschicht bewegen, erfahren aufgrund der ungleichmäßigen Relativgeschwindigkeit über dem Partikel und der daraus resultierenden ungleichmäßigen Druckverteilung eine Querhubkraft. Die sog. Auftriebskraft von Saffman wird durch die Scherung des umgebenden Fluids verursacht, was zu einer ungleichmäßigen Druckverteilung um das Partikel führt. Diese Kraft nimmt nur in der viskosen Unterschicht, in der die Schergeschwindigkeit am höchsten ist, signifikante Größen an.
- Masseneffekt (added mass effect): Der Begriff bezieht sich auf die zusätzliche Kraft, die erforderlich ist, um einen Festkörper durch ein Medium zu beschleunigen. Da der Körper und das Medium nicht gleichzeitig das gleiche Volumen einnehmen können, ist eine Kraft erforderlich, das Medium zu verdrängen. Obwohl diese Kraft im Gasstrom vernachlässigt werden kann, kann die Kraft in Flüssigkeiten aufgrund der hohen Dichte von Flüssigkeiten signifikant sein.

- Magnus-Kraft: Partikel, die sich in einer Strömung frei drehen, können aufgrund ihrer Drehung (Magnus-Kraft) auch eine Auftriebskraft erfahren.
- Brown'sche und thermophoretische Kräfte (thermophoresis force) sind relevant für Partikel im Submikrobereich. Die Brown'sche Kraft wird durch den zufälligen Aufprall von Partikeln mit bewegten Gasmolekülen verursacht. Die thermophoretische Kraft wird durch ungleichen Impulsaustausch zwischen Partikeln und umgebendem Fluid verursacht. Höhere Molekülgeschwindigkeiten auf einer Seite des Partikels aufgrund der höheren Temperatur können zu einem stärkeren Impulsaustausch und einer resultierenden Kraft in Richtung abnehmender Temperatur führen. Dadurch werden die feinen Partikel in Richtung negativer Temperaturgradienten bewegt. Dies ist wichtig im Hinblick auf Gaspartikelströme. Die zur Aufrechterhaltung des Strömungsmusters erforderliche Kraft wurde von Basset angenähert und hängt vom Verlauf der bisherigen Partikelbahn ab und wird daher als sog. "Vergangenheitseffekt" (history effect) bezeichnet. Basset-Kräfte sind für Partikel mit einer Dichte, die wesentlich größer als die umgebende Flüssigkeitsdichte ist, vernachlässigbar.
- Interkollisionskraft (Intercollision force): Weitere Kräfte wirken auf die Partikel, wenn diese miteinander kollidieren. Dieser Prozess tritt besonders in dichten Fluid/Partikel-Gemischen auf.

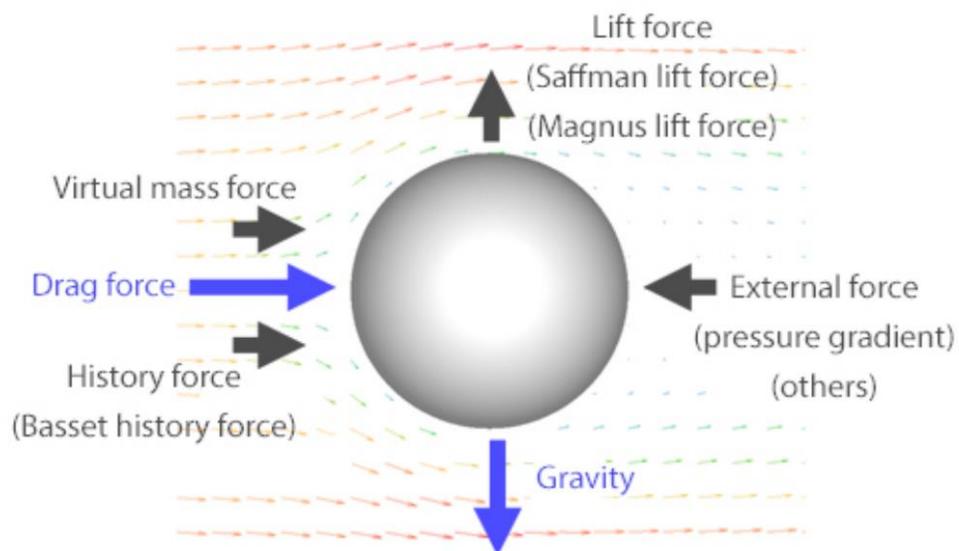


Abb. 3.4 Schematische Darstellung der verschiedenen Kräfte, welche auf ein Partikel einwirken, welches sich in einem fluiden oder gasförmigen Medium bewegt. Die eingezeichneten Vektoren gelten für Partikel mit höherer Dichte als das umgebende Medium, /OKA 19/. Die Widerstandskraft wirkt hier horizontal.

Die Partikel, welche in einem USBV-Ereignis freigesetzt werden, befinden sich vor der Explosion im Ruhezustand. Durch die Explosion erfahren die Partikel eine Geschwindigkeitsänderung (d. h. eine Beschleunigung). Die Partikel werden jedoch nicht sofort auf die Geschwindigkeit des umgebenden Mediums beschleunigt. Die Zeitskala, mit der die Geschwindigkeit zwischen Partikeln und dem umgebenden Medium ausgeglichen wird, wird als Partikelrelaxation oder Reaktionszeit bezeichnet und ist ein Maß für die Partikelträgheit. Mit anderen Worten, die Relaxationszeit ist die Zeit, die das Partikel benötigt, um auf Änderungen der Fluidgeschwindigkeit zu reagieren, und hängt von Partikel- (z. B. Geometrie und Dichte) und Fluideigenschaften (z. B. Viskosität) ab. Dieser Prozess wird in der Widerstandskraft berücksichtigt. Hier ist auch die Druckgradient-Kraft enthalten (siehe /IVA 18/). Diese Kraft ist im Zusammenspiel mit der Auftriebskraft die dominierende beeinflussende Kraft für die Partikelbewegung. Je nach Partikelgröße und Dichte ist zudem die Gravitationskraft relevant.

Gemäß /IVA 18/ können Kräfte mit relativ geringer Größe, wie die Basset-„history“, der Saffman-Lift und die Coriolis-Kraft vernachlässigt werden. Die "virtuelle" oder "added mass effect"-Kraft wird ebenfalls vernachlässigt, da die Größe der virtuellen Kraft proportional zum Verhältnis der Fluidichte (d. h. Luftdichte) zur Partikelmaterialdichte ist und die Partikel eine wesentlich höhere Dichte als Luft besitzen. Gemäß den obigen Beschreibungen den einzelnen Kräften, können auch die Brown'sche- und thermophoretische Kräfte vernachlässigt werden. Das Vernachlässigen dieser Kräfte steht gemäß /IVA 18/ im Einklang mit früheren Mehrphasenmodellen, welche ebenfalls eine explosiven Partikeldispersion untersuchten, wie z. B. /ZHA 01/ und /BAL 10/. Ein Partikeltransportmodell, welches explizit für USBV-Ereignisse entwickelt wurde, findet sich in /IVA 18/.

Gemäß /PAR 10/ wird aus dem Punkt-Teilchen-Ansatz die Geschwindigkeit eines Teilchens aus dem zweiten Newtonschen Gesetz hergeleitet (Gl. (3.6)).

$$m_p \frac{du_p}{dt} = F(t) \tag{3.6}$$

m_p Partikelmasse [kg]

u_p Strömungsgeschwindigkeit des Partikels [m/s]

$F(t)$ Auf die Partikel wirkenden Kräfte

Nähere Informationen zu den auf Partikel wirkenden Kräften finden sich z. B. in /MAR 14/, /PAR 10/ /IVA 18/.

3.2.2.3 Projektbeispiele

Im Folgenden werden Beispiele zu Studien gegeben, welche sich mit dem Partikeltransport im Zusammenhang mit einer Explosion beschäftigt haben.

Es wurde in /HUM 17/ ein Rechenmodell erstellt, um die Auswirkungen der Druckwelle auf den Partikeltransport zu untersuchen. Die Detonation der Sprengladung erzeugt eine komplexe Druckwelle, die mit den radioaktiven Partikeln interagiert und diese in der Umgebung (Nahfeld) verteilt. Nachfolgend, wenn die Druckwelle abgeklungen ist, können diese Partikel vom Umgebungswind über größere Entfernungen transportiert werden. Zahlreiche experimentelle Studien von /HAR 07/ für verschiedene feste und flüssige Materialien haben gezeigt, dass während des Transportes der Schadstoffe in der Luft vorübergehend die disperse Phase in verschiedenen physikalischen Zuständen vorliegen kann, d. h. Dampf, Flüssigkeit oder Feststoff oder eine Kombination davon. Das Rechenmodell in /HUM 17/ geht jedoch davon aus, dass Schadstoffpartikel während des Transportprozesses ihre Form bzw. festen Zustand behalten. Um die Explosions- und Umgebungswindeffekte auf den Partikeltransport zu erfassen, verwendet das Rechenmodell einen Euler-Lagrange-Ansatz, bei dem das Trägerphasenfluid (Luft) als Kontinuum bzw. Eulerphase und die Dispersionsphase als Langrange Partikel behandelt werden. Es wurde nur ein einziges starres freies Partikel berücksichtigt, das keinen Einfluss auf die Eulerphase hat. Dieses "Einweg-Kopplungs"-Modell berücksichtigt nicht den Impuls und die Energie, die aus der Trägerphase bei ihrer Wechselwirkung mit der dispersen Phase verloren gehen und vernachlässigt auch die Partikel-Partikel-Wechselwirkungen in der dispersen Phase. Folglich sagt dieses Modell Schockfronten voraus, die langsamer abklingen und sich schneller als in der Realität fortbewegen, wie in früheren Studien diskutiert (siehe /CHA 03/). Es ist zu beachten, dass die resultierenden Unterschiede in der Stoßwellengeschwindigkeit und -stärke von der Partikelgröße abhängen, wie von /CHA 03/ beschrieben. Die Ergebnisse zeigen, dass das Ausmaß der Kontaminationsfläche abhängig ist von der Aufstiegshöhe der Partikel, welche wiederum abhängig ist von der Partikelgröße und im geringeren Maß vom Impuls. Dies unterstreicht, wie wichtig es ist, einen geeigneten Wert für die in atmosphärischen Dispersionsmodellen verwendete Freisetzungshöhe zu ermitteln.

In /DUB 15/ wird ein Skalierungsansatz vorgestellt, mit dem die maximale Partikelverschiebung eines ruhenden Partikels (sphärische Partikelform) unter Einfluss einer Schockwelle bestimmt werden kann.

Gemäß /PON 18/ muss ein Freisetzungsmodell, welches den vollständigen Prozess der explosiven Ausbreitung einer Partikelschicht abbilden soll, zunächst die Schockwellenausbreitung durch die Partikelschicht, die Verdichtung der Schicht, die Übertragung des Schocks als Druckwelle in die Umgebungsluft und die Ausdehnung des Gaspartikelmediums berücksichtigen.

Für die Charakteristik einer Schadstofffreisetzung infolge einer Explosion ist die Art der Verbindung der Schadstoffe mit dem Sprengstoff zu berücksichtigen. Zum Beispiel kann der Schadstoff als Granulat um den Sprengstoff positioniert werden oder der Sprengstoff wird zusammen mit dem Schadstoff vermengt. Zudem ist entscheidend, ob es sich um flüssigen oder festen Sprengstoff handelt. Die unterschiedlichen Anordnungen haben Einfluss auf den Momenttransport der Druckwelle auf die Partikel. Die Folgen solcher unterschiedlichen Varianten werden u. a. in /PON 18/ diskutiert.

Je nach Partikeleigenschaften und der Anordnung der Partikel um den Sprengstoff können sich unterschiedliche Freisetzungsmechanismen ergeben. Zum Beispiel wurde in /FRO 18/ ein Sprengversuch beschrieben, in dem ein Sprengstoff sphärisch mit einem Partikelpulver umgeben wurde. Die Sprengung erzeugt sog. Jet Strukturen (Abb. 3.5).

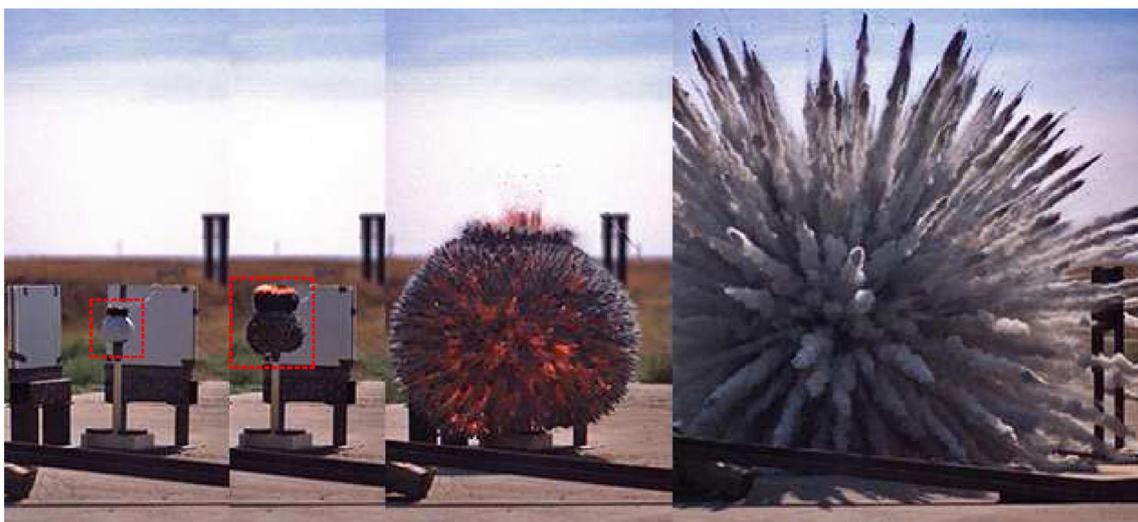


Abb. 3.5 Einzelbilder aus einer Hochgeschwindigkeits-Videoaufzeichnung der explosiven Ausbreitung von Siliciumcarbid-Partikeln. Die Zeiten der Bilder sind $a=140 \mu\text{s}$, $b=300 \mu\text{s}$, $c=1780 \mu\text{s}$, $d=5980 \mu\text{s}$

Das Umgeben einer hochexplosiven Ladung mit einer Schicht aus flüssigem oder porösem körnigem Material, verringert die Stärke der Druckwelle in unmittelbarer Nähe der Ladung. Die Abschwächung der Druckwelle wird auf die Energiedissipation während der Verdichtung und der Übertragung von thermischer und kinetischer Energie auf das poröse Material zurückgeführt (/ALL 04/ zitiert in /PON 18/).

4 Sichtung geeigneter Software

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Literaturrecherche vorgestellt, die zur Sichtung geeigneter CFD-Software zur Modellierung Sprengexperimenten durchgeführt wurde. Zur Evaluierung, ob ein Modellsystem für die entsprechenden Fragestellungen in diesem Vorhaben geeignet ist oder nicht, werden folgende Anforderungen berücksichtigt.

Die gewählte Software sollte über ein Open-Source-Lizenzmodell verfügen. Hierbei fallen Lizenzkosten an, wie für kommerzielle Software, wie z. B. von der Firma ANSYS (z. B. ANSYS Fluent) an. Insbesondere besteht bei ANSYS das Problem, dass die Lizenzkosten abhängig von der Prozessoranzahl für parallele Rechnungen sind. Da CFD-Rechnungen in der Regel stark parallelisiert werden müssen, stellt dies eine große Beschränkung bei der Durchführung aufwendiger Rechnungen dar, unter denen auch Simulationen von Explosionen fallen. Open Source Programme können dagegen frei von zusätzlichen Lizenzkosten (im Falle von OpenFOAM bspw. Unter Nutzung der GNU-Lizenz) verwendet werden.

Zudem bieten Open Source Programme die Möglichkeit, den Quellcode einzusehen und somit eigene Adaptationen und Modelle zu programmieren und zu verwenden. Bei CFD-Software von ANSYS wird klar angegeben, welche physikalischen Prozesse implementiert und nutzbar sind, jedoch ist die Umsetzung im Code selbst nicht einsehbar. Es besteht auch nur begrenzt die Möglichkeit, eigene Adaptationen vorzunehmen. Während bei kommerzieller Software der Support üblicherweise im Preis enthalten ist, ist bei Open Source Software vergleichbare Unterstützung in der Regel nur über Foren zu beziehen. Je nach Fragestellung und Größe der Nutzer-Community kann dies eine Problemlösung erschweren.

Für die Simulation von Explosionen sollte das Modellsystem zudem bestimmte Ansätze zur Berechnung der Druckwelle enthalten. Ein oft verwendeter Ansatz ist der JWL-Ansatz (vgl. Abschnitt 3.1.6). Die gewählte Software sollte somit den JWL- oder zumindest einen vergleichbaren Ansatz enthalten. Für die Simulation von Stofftransporten sollte sie zudem die Freisetzung von Aerosolen berücksichtigen können. Zum einen können die Dimensionen einer Sprengwolke mit Tracern erst sichtbar gemacht werden und zum anderen ist eine wesentliche Aufgabe der Simulationen, die Aerosolverteilung innerhalb der Explosionswolke zu ermitteln. Hierbei sollten die beiden gängigen Trans-

portansätze nach Euler (kontinuierliche Phase) und Lagrange (Partikeltransport) angewendet werden können. Durch die Freisetzung von Aerosolen soll zudem die Aerosolverteilung innerhalb der Explosionswolke ermittelt werden.

Weitere Argumente für die Verwendung einer bestimmten Software sind eine fortlaufende Entwicklung (regelmäßige Updates) und eine breite Nutzung durch eine große Community. Dies gewährleistet, dass Bugfixes zeitnah eingepflegt werden und Hilfestellungen, zumindest durch andere User, verfügbar sind.

Die ermittelten Informationen dienen dazu, eine geeignete Software auszuwählen und bereits erste Informationen zur Erstellung und Parametrisierung eines vorläufigen Simulationsmodells für das AP 2 zu identifizieren.

Anschließend werden die ausgewählten Programme einer vertieften Recherche unterzogen. Die Arbeiten umfassen u. a. die Untersuchung der Verfügbarkeit von Anwendungen für das Pre- und Postprocessing (Gittergenerierung, Parametrisierung und Visualisierung der Analyseergebnisse). Zusammenfassend stehen folgende Aspekte hierbei im Mittelpunkt:

- Lizenzierung
- Verfügbare Ansätze
- Pre- und Postprocessing
- Bedienbarkeit
- Hilfestellung bzw. Community
- Fortlaufende Entwicklung (regelmäßige Updates)

4.1 ANSYS Produkte

ANSYS ist ein Unternehmen, welches eine Vielzahl von Programmen entwickelt, z. B. für Struktur- und Strömungsanalysen:

- Strukturanalyse: ANSYS Autodyn, ANSYS LS-DYNA, ANSYS Mechanical
- Strömungsmechanik: ANSYS CFX, ANSYS Fluent

ANSYS-Produkte sind kommerziell verfügbar. Aufgrund der hohen Lizenzkosten kommen sie für dieses Vorhaben nicht in Betracht. Trotzdem werden die einzelnen Produkte in Verbindung durchgeführten Simulationen von Sprengereignissen kurz erläutert, um einen Einblick in bereits durchgeführte Forschungsvorhaben zu geben.

4.1.1 ANSYS CFX

ANSYS CFX ist eine Software zur Strömungssimulation in technischen Bauteilen, wie Turbinen, Turbomaschinen (Pumpen), Lüftern, Kompressoren sowie Gas- und Hydraulikturbinen.

In /DÍA 16/ wurde ein CFD-basierter Ansatz entwickelt, um den während einer Explosion erzeugten Überdruck vorherzusagen. Eine adiabatische exotherme Reaktion ermöglicht die Berechnung der Energiefreisetzung bei der Explosion. Um den vorgeschlagenen CFD-Ansatz zu validieren, werden auf dieser Methodik basierende Überdruckvorhersagen mit den mit der TNO-basierten Methode erzielten Ergebnissen verglichen. Die sog. TNO Multi-Energy Methode wird zur Abschätzung der positiven Überdrücke (overpressure) und Impulse infolge von Wasserstoff-Luft-Explosionen angewendet. Die TNO-Methode betrachtet eine Explosion als eine Reihe von mehreren kleinen Explosionen. Die CFD-Simulationen wurden mit ANSYS CFX durchgeführt.

4.1.2 ANSYS Fluent

ANSYS Fluent ist ebenfalls ein Programm zur Strömungssimulation und wird hauptsächlich zur Modellierung von Strömungen, Turbulenz, Wärmeübertragung und Reaktionen bei industriellen Anwendungen und in der Forschung eingesetzt. ANSYS CFX wurde hauptsächlich zur Simulation von Fluidströmungen in Turbomaschinen entwickelt. Dies hat sich mit der Zeit geändert, es werden jedoch weiterhin beide Programme von ANSYS gepflegt und vertrieben. Demgegenüber ist ANSYS Fluent eher für ein breiteres Spektrum an Aufgabenstellungen (mehrphasige oder chemisch reagierende Strömungen) ausgelegt.

Gemäß /SOH 16b/ sind Explosionsversuche teuer und zeitaufwändig. Durch die Verwendung numerischer Simulationen können explosionsbedingte Druckwellen jedoch virtuell vorhergesagt und der Bedarf an tatsächlichen Experimenten minimiert werden. In /SOH 16b/ werden zwei verschiedene Explosionsanalysen vorgestellt, welche mit ANSYS Fluent durchgeführt wurden: eine Druckwellenausbreitung auf freiem Feld und

die Explosionsbelastung auf einer Struktur. Im Allgemeinen verfügt ANSYS Fluent über keinen spezifischen Explosionsalgorithmus. Für den initialen Zustand der Explosionsquelle muss der anfängliche Explosionsdruck mithilfe eines Profils oder sog. Patches definiert werden. Es wurde ein dichtebasierter und transienter Solver zur Berechnung der kompressiblen Überschallströmung verwendet. Die berechneten Ergebnisse stimmen mit experimentellen Daten überein.

Gemäß /MOH 19/ existieren keine Methoden, die genaue Vorhersagen über den Prozess und die Wirkung von Explosionen in städtischen Umgebungen liefern. Deshalb schlagen /MOH 19/ einen neuartigen Ansatz vor, in dem Methoden aus photogrammetrischer 3D-Rekonstruktion, semantischer Segmentierung und rechnergestützten numerischen Simulationen kombiniert werden. In einem ersten Schritt wird eine genaue 3D-Stadt-Rekonstruktion aus georeferenzierten Luftbildern erstellt. Das resultierende Stadtmodell wird dann mit semantischen Informationen angereichert, die aus den ursprünglichen Quellbildern sowie aus registrierten terrestrischen Bildern unter Verwendung tiefer neuronaler Netze erhalten werden. Dies ermöglicht eine automatische Erstellung eines 3D-Modells, das für die Verwendung als Geometrie für die numerischen Untersuchungen verwendet wird. Innerhalb des Modells können nun die Größe und der Ort der Sprengladung definiert und die resultierende Ausbreitung von Druckwellen mithilfe von CFD-Simulationen simuliert werden. Aus den Analyseergebnissen können entstehende Schäden und deren Ausmaß sowie mögliche Gegenmaßnahmen abgeschätzt werden. Die numerischen Simulationen wurden mit ANSYS Fluent durchgeführt, wobei die Explosionsquelle als kugelförmiges Volumen von kompressiblem Gas mit hohem Überdruck modelliert wurde. Die innere Energie des enthaltenden kompressiblen Gases entspricht der Energie, die durch die Sprengladung freigesetzt wird.

4.1.3 ANSYS Autodyn

ANSYS Autodyn ist eine Finite-Differenzen-Software, die speziell zur Lösung einer Vielzahl nichtlinearer Probleme entwickelt wurde und hauptsächlich in der Strukturanalyse eingesetzt wird. Das Programm simuliert die Reaktion von Materialien auf kurzzeitige, große Belastungen durch Aufprall, hohen Druck oder bspw. Explosionen. Es können komplexe physikalische Phänomene, wie die Wechselwirkung und Phasenübergänge von Fluiden, sowie die Ausbreitung von Stoßwellen, einschließlich der resultierenden Spannungen, die von explosiven Materialien unter Verwendung der empirischen JWL-Gleichungen ausgehen, untersucht werden /MIT 14/. ANSYS Autodyn ist in ANSYS Workbench mit einer eigenen nativen Benutzeroberfläche integriert.

In /COS 14/ wurde die Explosion einer explosionsfähigen Atmosphäre aus Flüssiggas, mithilfe des numerischen Simulators ANSYS Autodyn untersucht. Es wurde mit einem CFD-Modell eine Bewertung der Druckwellenausbreitung durchgeführt. Phänomene, wie die Reflexion von Stoßwellen und Kanalisierungseffekte der Druckwelle wurden beim Vergleich zwischen numerischen Ergebnissen und analytischen Vorhersagen verwendet. Die Ergebnisse in /COS 17/ legen nahe, dass die gängigen analytischen Vorhersagen für eine Überdruckanalyse im Nahfeld nicht genau genug sind und dass schlecht gestaltete Gebäude den Stoßwellenüberdruck aufgrund mehrfacher Druckwellenreflexionen erhöhen und somit das zerstörerische Potenzial der Explosionen vergrößern können.

In /MIT 14/ wird die Anwendung einer hybriden Finite-Diskrete-Elemente-Methode zur Untersuchung von durch Explosion verursachten Schäden in kreisförmigen Tunneln vorgestellt. Zur Kalibrierung und Validierung der vorgeschlagenen numerischen Methode wird eine umfangreiche Datenbank mit Feldtests von unterirdischen Explosionen über Tunneln verwendet. Es wird gezeigt, dass die numerischen Ergebnisse gut mit den veröffentlichten Daten für physikalische Experimente in großem Maßstab übereinstimmen. Die Methode wird dann verwendet, um den Einfluss der Gesteinsfestigkeitseigenschaften auf die Tunnelhaltbarkeit zu untersuchen, um Explosionsbelastungen standzuhalten. Ähnliche Untersuchungen wurden auch in /FED 16/ durchgeführt.

4.1.4 ANSYS LS-DYNA

ANSYS LS-DYNA wird ebenfalls in der Strukturanalyse eingesetzt. Es kann die Reaktion von Materialien auf kurzzeitig große Belastungen untersucht werden. ANSYS LS-DYNA verfügt über eine Vielzahl von Materialmodellen und Funktionen zur Simulation extremer Verformungsprobleme mithilfe eines expliziten Löser.

In /IVA 19/ wurden verschiedenen Methoden zur Simulation der Ausbreitung von Druckwellen als Druck-Zeit-Funktion, komprimierte Luft, einen Mapping-Algorithmus oder mithilfe eines TNT Äquivalenzmodells untersucht (siehe Kap. 3.1.5). In /CHE 13/ wurde die Simulation einer Stoßwelle aufgrund einer Nahfeldexplosion unter Verwendung des sog. Arbitrary-Lagrangian-Eulerian-Fluid-Struktur-Interaktionsalgorithmus in der FEM-Software LS-DYNA durchgeführt. Die Stoßwelle wurde mit dem JWL-Ansatz simuliert. Der Überdruck aus der Nahfeld-Simulation wurde mit dem technischen Handbuch TM5-1300 der US-Armee /UNI 08/ verglichen. Die Ergebnisse zeigten, dass LS-DYNA eine Nahfeldexplosion vorhersagen kann.

4.1.5 Bewertung

Wie bereits eingangs erwähnt, kommen die ANSYS-Produkte aufgrund der hohen Lizenzkosten für dieses Vorhaben nicht in Betracht.

- Lizenzierung: Kommerzielle Software
- Verfügbare Ansätze: Zustandsgleichungen zur Berechnung der Druckwelle (z. B. der JWL-Ansatz sind nur in Autodyn und LS-DYNA verfügbar.
- Pre- und Postprocessing: ANSYS bietet eine eigene GUI an (nicht getestet).
- Bedienbarkeit: nicht getestet
- Hilfestellung bzw. Community: Die Hilfestellungen sind als gut zu bewerten. ANSYS bietet einen Customer Support and Help Desk. Die Community beschränkt sich aufgrund der hohen Anschaffungskosten auf Firmen.
- Fortlaufende Entwicklung (regelmäßige Updates): Die ANSYS Produkte werden fortlaufend entwickelt und aktualisiert.

4.2 OpenFOAM

In /KHO 18/ wurden Gasexplosionen in homogenen reaktiven Gemischen sowohl experimentell als auch numerisch untersucht. Die numerischen Untersuchungen wurden mit der Software OpenFOAM durchgeführt und zielten darauf ab, die Dynamik des Übergangs von Deflagration zu Detonation (DDT) in inhomogenen Wasserstoff/Luft-Gemischen zu untersuchen. Es wurde der reaktive auf dichtebasierender Solver VCEFoam verwendet. Der Solver ist eine Eigenentwicklung der Autoren und ist nicht im Standard-Paket von OpenFOAM enthalten. VCEFoam verwendet das Harten Lax-van Leer-Contact-Schema (HLLC) für die Berechnung der konvektiven Flüsse und der Druckwelle. Die mit dem Solver vorhergesagten Flammenspitzen- und das DDT-Verhalten stimmten gut mit den experimentellen Messungen überein.

Für OpenFOAM wurden keine weiteren Vorhaben gesichtet, welche sich mit für dieses Vorhaben relevanten Fragestellungen beschäftigt haben. Fast alle Vorhaben zur Simulation von Sprengungen wurden mit der in Kap. 4.1 vorgestellten Software von ANSYS durchgeführt. Dies könnte sich jedoch in Zukunft ändern. Von der Firma Synthetik Ap-

plied Technologies wird das für OpenFOAM entwickelte Solver-Paket blastfoam angeboten, mit dem Detonationssimulationen durchgeführt werden können. Im Folgenden wird dieses Solver-Paket näher erläutert /SYN 20/.

4.2.1 blastFoam

Das Solver-Paket blastfoam (Version 4.0) enthält eine Vielzahl von Zustandsgleichungen, die die Modellierung von Sprengstoff ermöglichen. Zudem stehen diverse Detonations- und Afterburn-Modelle zur Verfügung /SYN 20/. Der Übergang vom nicht reagierten (unreacted energetics) zum reagierten Zustand (detonation products) kann unter Berücksichtigung von Aktivierungsmodellen (activation models) simuliert werden (Abb. 4.1). Es stehen druckbasierte Aktivierungsmodelle mit mehrstufigen Arrhenius-Reaktionsraten und einfache auf empirisch abgeleiteten Detonationsgeschwindigkeiten basierende Modelle zur Verfügung. Benutzer können auch die sofortige Aktivierung der Explosiva angeben /SYN 20/.

Initiation point

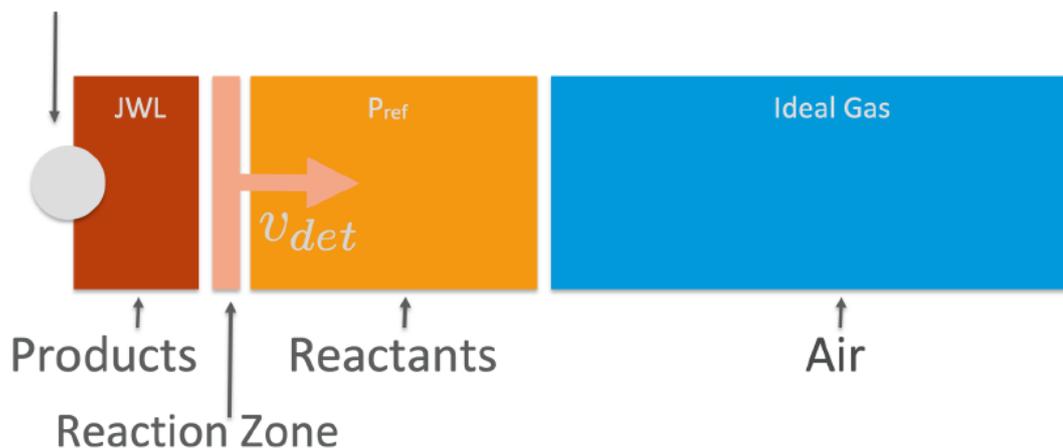


Abb. 4.1 Schematische Darstellung der verschiedenen Phasen einer Detonation in blastFoam /BRE 20/

Die verschiedenen Zustandsphasen der Detonation sind die Folgenden, /BRE 20/ (vgl. Abb. 4.1):

- Initialisierung (initiation point): Die Detonation wird an einem Punkt oder an mehreren Punkten im Raum ausgelöst. Verschiedene Aktivierungsmodelle, z. B. auf Basis der inneren Energie, temperaturbasiert oder instantan.

- Reaktanten (reactants): Das explosive Material (z. B. TNT), das in Detonationsprodukte umgewandelt wird.
- Reaktionszone (reaction zone): Die Reaktion breitet sich mit einer vorgeschriebenen Detonationsgeschwindigkeit (v_{det}) oder nach einem Aktivierungsmodell im Raum (sphärisch) aus
- Produktgase (products): JWL-Ansatz (und andere), JWL ist eine etablierte physikalisch basierte EOS für energetische Materialien.
- Luft (air): Das umgebende Fluid ist Luft (i. d. R. als ideales Gas betrachtet; weitere Zustandsgleichungen sind verfügbar).

Im blastfoam-Paket werden die verfügbaren EOS zur Berechnung der Energiefreisetzung einer Explosion, in zwei unterschiedliche Ansätze unterteilt. Zum einen gibt es Zustandsgleichungen, welche den Zustand auf Grundlage der internen Energie berechnen (z. B. Mie-Grüneisen-Form) und zum anderen Zustandsgleichungen, die auf eine lokale Temperatur zurückgreifen /SYN 20/. Situationsabhängig können beide Ansätze kombiniert zur Anwendung kommen.

Zusätzlich zu den zuvor erwähnten Gleichungen von Zustands- und thermodynamischen Modellen, können auch tabellarische Werte verwendet werden. Dies ist nützlich, wenn reale Gase mit hohen Temperaturen und Drücken simuliert werden sollen und Standardmodelle in diesen Regionen nicht mehr anwendbar sind. Es kann eine beliebige Kombination von Druck- und Temperaturtabellen verwendet werden, sofern diese von der Dichte und der inneren Energie abhängen /SYN 20/.

Mit blastfoam können Phänomene wie der sog. Größeneffekt (size effect, Abnahme der Detonationsgeschwindigkeit mit abnehmendem Ladungsradius) und die Krümmung der Detonationsfront (induziert durch die Verzögerung der Front, wenn Energie an die Außenseite der Ladung verloren geht) berücksichtigt werden. Diese Möglichkeiten verbessern die Genauigkeit und die Ladungscharakterisierung erheblich, insbesondere bei detonationsnahen Szenarien. Optionen zur Modellierung des sog. Afterburns (Sprengstoffe mit niedrigem Sauerstoffgehalt, die nach der Detonation weiter brennen) sind ebenfalls unter Verwendung des Miller-Ansatzes, durch Konstanten- oder durch Liniennratenmodelle enthalten /SYN 20/.

Das Solver-Paket blastfoam erweitert die adaptive mesh refinement (AMR)-Bibliothek der Software OpenFOAM und bietet die Möglichkeit, eine adaptive 2D- und 3D-Netzverfeinerung durchzuführen. Die Verfeinerungskriterien können auf dem Dichtegradienten, der Änderung über Flächen (Delta) oder der sog. Lohner-Methode (2. Ableitung eines Feldes) basieren, um zu bestimmen, welche Zelle verfeinert werden soll. Zusätzlich wurden Optionen für die Nichtverfeinerung, Relaxation und Vergrößerung des Gittermodells hinzugefügt. Diese Funktionen sind nützlich, um die Zellanzahl während einer Berechnung relativ konstant zu halten und gleichzeitig wichtige Prozesse (z. B. Druckwelle) mit hoher Genauigkeit berechnen zu können /SYN 20/.

Außerdem ergänzt das Solver-Paket blastfoam OpenFOAM um einen dynamischen Lastausgleich (load rebalancing) für adaptive Gitternetze und enthält eine funktionierende Lösung für 2D- und experimentelle Unterstützung für 3D-Berechnungen. Im Wesentlichen wird die Domäne in einem vorbestimmten Zeitschrittintervall neu ausgeglichen (rebalanced), so dass die Zellenanzahl pro CPU im Verlauf der Simulation gleichmäßig verteilt bleibt. Dies verringert potenzielle Speicherprobleme, wie Abstürze und eine Verlangsamung der Rechnung im Zusammenhang mit der Überlastung von CPUs, die in Zonen mit hoher Verfeinerung der Gitternetze arbeiten /SYN 20/.

Es sind Turbulenz- und Strahlungsmodelle integriert sowie eine Fluidmodellstruktur (FluidThermo-Klasse) enthalten, die die Standard-Thermoklassen von OpenFOAM erweitert und thermodynamisch konsistente Lösungen für genauere Temperaturberechnungen bietet. Es wurden zudem neue *functionObjects* (siehe /GRE 19/) hinzugefügt, mit denen der maximale Überdruck (peak overpressure) und Impuls für jede Zelle in der Domäne ausgegeben werden kann /SYN 20/.

Verifizierungs- und Validierungsstudien wurden für komplexe Probleme und Geometrien durchgeführt und in Fachzeitschriften veröffentlicht (/SYN 20/).

Im Folgenden sind die Funktionen des Solver-Pakets blastfoam nochmal zusammengefasst /SYN 20/:

- beliebige Anzahl von Phasen und EOS,
- mehrere Aktivierungs- und Abbrandmodelle,
- JWL-Zustandsgleichung mit konstanten, linearen und "Miller"-Afterburn-Modellen,

- Mehrere Solver für reaktiven Hochgeschwindigkeitsfluss und Übergang von Deflagration zu Detonation,
- High-order (1st, 2nd, 3rd und 4th Ordnung in Zeit; 2nd und 3rd Ordnung räumlich),
- Riemann Solver HLLC-, AUSM + -, Kurganov- und Tadmor- flux schemes,
- Kompatibilität mit allen kompressiblen LES- und RANS-Turbulenzmodellen von OpenFOAM,
- Parallele Rechnungen (MPI),
- Adaptive Gitternetzverfeinerung (AMR),
- Explosionsspezifisches Funktionsobjekt für das Postprocessing
- Kompatibel mit allen Standard-Utilityprogrammen zur Netzgenerierung, Vor- und Nachbearbeitung von OpenFOAM,
- Umfangreiche Verifizierung-, Validierung, sowie Tutorialrechenfälle.

Seit Ende 2021 ist das Solver-Paket blastfoam Version 5 /SYN 21/ verfügbar. Da die Arbeiten jedoch bereits unter Nutzung von Version 4 weit fortgeschritten waren, konnte eine Umstellung im Rahmen dieses Vorhabens nicht berücksichtigt werden. Erste Tests erwecken jedoch den Anschein vorteilhafter Eigenschaften gegenüber Version 4 u. a. hinsichtlich stabilerer Berechnungen sowie verkürzter Rechenzeiten. Darüber hinaus ist anzumerken, dass Version 4 (im Gegensatz zur Vorgängerversion 3) nicht mehr zum Download bereitsteht.

4.2.2 Bewertung

- Lizenz: OpenFOAM ist kostenlos erhältlich und als Open Source unter der GNU General Public Licence lizenziert. blastFoam → GNU General Public License v3.0
- Verfügbare Ansätze (blastFoam): siehe Beschreibung in Kap. 4.2.1.
- Pre- und Postprocessing: Hier können insbesondere die Standard-Tools von OpenFOAM, sowie ParaView und Gnuplot verwendet werden.
- Bedienbarkeit: Für Standard OpenFOAM ist kein grafisches Benutzerinterface (graphical user interface, GUI) vorhanden (Bedienung über die Konsole), aber kommerzielle Lösungen verfügbar (z. B. Simflow und HelyxOS), einfache Installation unter Windows sowie Linux, hohe Einarbeitungszeit,

- Hilfestellung bzw. Community: Große stetig wachsende Community, gute Hilfestellungen (z. B. www.cfd-online.com)
- Fortlaufende Entwicklung (regelmäßige Updates): Jährliche Versionssprünge, stetige Entwicklung und Implementierung auch aus Entwicklungen der Community (insb. ESI-Version)

4.3 Sonstige Software

Es existiert weitere CFD-Software, wie z. B. Star-CCM+. Es liegen jedoch keine Informationen darüber vor, dass diese in der Vergangenheit für Explosionssimulationen angewendet wurden.

Das ARGOS-Entscheidungsunterstützungssystem (Accident Reporting and Guiding Operational System) ist ein prognostisches Entscheidungsunterstützungssystem für das Krisenmanagement, das auf dem Wissen über die atmosphärische Dispersion, die anschließende Migration von Schadstoffen und die Folgen, einschließlich der Auswirkungen von Gegenmaßnahmen, basiert. Das System wurde erweitert, um die Folgen von Terroranschlägen mit chemischen, biologischen, nuklearen und radiologischen Substanzen abschätzen zu können. In /AND 08/ werden Elemente des Frameworks vorgestellt, welche in ARGOS angewendet werden, um die Dosisbeiträge von Schadstoffen zu berechnen, die nach einer Explosion einer „schmutzigen Bombe“ in der Atmosphäre verteilt sind. Es werden konzeptionelle Methoden vorgestellt, die die verschiedenen Dosiskomponenten auf der Grundlage der Kenntnis der zeitintegrierten Schadstoffkonzentrationen beschreiben. Auch die Aerosolisierung und atmosphärische Dispersion in einer Stadt mit verschiedenen Arten von denkbaren Verunreinigungen aus einer „schmutzigen Bombe“ werden diskutiert /AND 08/. Das Entscheidungsunterstützungssystem ist jedoch keine Software und deshalb für dieses Vorhaben nicht geeignet.

Es existieren weiterhin verschiedene Softwarepakete zur Bestimmung der Wolkendimensionen auf Grundlage prognostisch empirischer Parameter (z. B. HotSpot /HOM 20/, LASAIR /WAL 08/, RIMPUFF /NIE 99/, Radpuff). Da in diesem Vorhaben nur CFD-Software verwendet wird, werden diese Pakete im Folgenden nicht näher betrachtet.

Die Literaturrecherche ergab zudem, dass die Simulation von Explosionen zur Störfallbetrachtung in der Prozessindustrie, vorrangig durch Consulting-Firmen durchgeführt wird. Oft Verwendung finden hier z. B. FLACS und FireEx (KFXKameleon), welche in

der Regel nicht käuflich zu erwerben sind und daher für dieses Vorhaben nicht infrage kommen.

4.4 Abschließende Bewertung

Die Literaturrecherche ergab, dass eine Vielzahl von Studien, die sich mit der Simulation von Explosionen für verschiedene Fragestellungen beschäftigen, überwiegend mit kommerzieller Software von ANSYS durchgeführt werden. Aufgrund der hohen Lizenzkosten und der bevorzugten Verwendung von Open Source Software kommen die Produkte von ANSYS jedoch im Rahmen dieses Vorhabens nicht in Betracht.

Die Software OpenFOAM ist kostenlos erhältlich und Open Source lizenziert, ebenfalls das Solver-Paket blastFoam. Zudem sind alle geforderten Modellansätze zur Simulation von Detonationen hierin enthalten. Ein weiterer Vorteil ist, dass das Paket in Verbindung mit OpenFOAM eine Vielzahl an Pre- und Postprocessing Werkzeugen zur Verfügung stellt. Insbesondere OpenFOAM bietet eine große, stetig wachsende Benutzer Community, sowie gute Hilfestellungen an. Das Paket blastfoam ist erst seit zwei Jahren öffentlich verfügbar und befindet sich derzeit in intensiver Entwicklung. Deshalb ist die Benutzergemeinde noch klein und es gibt nur wenige Hilfestellungen. Beide Tools werden jedoch fortlaufend entwickelt (regelmäßige Updates).

Es wurde keine weiteren Open Source CFD-Software identifiziert, die eine ähnlich fortgeschrittene Entwicklung in Bezug auf Explosionssimulationen wie OpenFOAM bzw. das Software-Paket blastfoam besitzen. Deshalb und aufgrund der obigen Analysen wird dieses für die weiteren Arbeiten in diesem Vorhaben angewendet.

5 Modellerstellung

Gemäß den Definitionen in Abschnitt 3.1 handelt es sich bei den hier umgesetzten Explosionssimulationen um Detonationen. Die Begriffe werden daher im Folgenden synonym verwendet. Für die Simulation einer Detonation und der resultierenden Wolke innerhalb eines bestimmten Modellgebietes (Kontinuums), müssen für das CFD-Modell verschiedene Annahmen und Randbedingungen festgelegt werden. Diese sind gemäß /GRS 20/:

- **Modellgebiet (Kontinuum):** Das Modellgebiet definiert das Modellvolumen.
- **Modellgitter:** Das Modellgitter, muss so erstellt werden, dass die Simulationsergebnisse unabhängig von der Gitterdiskretisierung sind.
- **Randbedingungen:** An jeder „Modellgrenze“ des Modellgebietes müssen thermische und hydrostatische/dynamische Randbedingungen definiert werden, damit das Gleichungssystem gelöst werden kann.
- **Prozesse:** Es muss entschieden werden, welche Prozesse berücksichtigt werden sollen: Inkompressible/kompressible Strömung, Transportansatz (Euler, Lagrange), Turbulenzansätze (u. a. Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS), Large Eddy Simulation (LES)), Mehrphasensysteme, thermische Prozesse (Verbrennung, Wärmestrahlung, Wärmeleitung).
- **Solver:** In OpenFOAM werden zur Lösung der Gleichungen anwendungs-spezifische Solver ausgewählt. Das Solver-Paket blastfoam stellt Solver zur Verfügung, mit welchen Detonationen simuliert werden können (vgl. Abschnitt 4.2).

Es folgt eine Erläuterung der verfügbaren Daten aus den vorherigen Feldversuchen, sowie der dominierenden Prozesse und wie diese softwaretechnisch berücksichtigt werden können. Die in den folgenden Kapiteln aufgeführten Informationen dienen der Erstellung eines Simulationsmodells.

5.1 Verfügbare Daten aus vorherigen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist es, ein Simulationsmodell zu entwickeln, dessen Ergebnisse die Sprengversuche aus /GRS 04/ bestmöglich approximiert. Daher ist es sinnvoll, bereits im ersten Schritt der Modellerstellung bekannte Parameter aus den Experimenten zu

verwenden. Bei den Sprengversuchen in /GRS 04/ wurden verschiedene Sprengstoffarten und -massen zur Detonation gebracht und die Größe der Sprengwolke über ein optisches Verfahren vermessen. Oberhalb der Sprengladung war ein Farbpulver aus Eisenoxid aufgelegt (Abb. 5.1).



Abb. 5.1 Sprengladung mit aufgelegtem Farbpulverbeutel /GRS 04/

Die Tab. 5.1 fasst die Sprengversuche und Ergebnisse aus /GRS 04/ zusammen.

Tab. 5.1 Sprengversuche aus /GRS 04/

Ver-such	Sprengstoff	Menge [kg]	Verdäm-mung	Meteorolo-gie	Wolken-höhe [m]	Wolken-breite [m]
1	PETN	0,5	-	Stabil	31,104	16,330
2	PETN	2	-	Stabil	40,009	21,315
3	PETN	10	-	Stabil/neut-ral	56,150	32,094
4	Schwarzpulver	2	Papprohr	Eher labil	keine	Auswertung
5	Schwarzpulver	2	Alumini-umrohr	Eher labil	28,090	18,203
6	Nitropulver	2	Alumini-umrohr	Eher labil	keine	Auswertung
7	Gelatinöser Sprengstoff	2	-	Stabil	37,330	20,331
8	Gelatinöser Sprengstoff	2	-	Eher labil	29,283	23,296

Ver-such	Sprengstoff	Menge [kg]	Verdäm-mung	Meteorolo-gie	Wolken-höhe [m]	Wolken-breite [m]
9	PETN	2	-	Neutral	keine	Auswertung
10	PETN	2	-	Labil	34,268	24,640
11	PETN	2	-	Stabil	27,960	25,910
12	PETN	2	-	Stabil	37,260	26,259

Die in /GRS 04/ durchgeführten Versuche zeigen, dass Wetterverhältnisse, Sprengstoffart, Ladungsanbringung und Verdämmung nur einen geringen Einfluss auf die Ausprägung der Schadstoffwolke hatten. Deshalb wurden bei weiteren Versuchen in /GRS 10/ nur noch PETN mit größeren Sprengstoffmassen verwendet. In Abb. 5.2 ist die Sprengwolke für 2 kg PETN dargestellt.



Abb. 5.2 Detonationswolke für 2 kg PETN zum Zeitpunkt der Detonation (0 s) und nach 5 s /GRS 04/. Zu Beginn der Detonation wird das aufliegende Farbpulver in die Luft geschleudert. Anschließend breitet sich die Wolke aus, und Sprenggase und Partikel sind nicht mehr voneinander zu trennen.

Die entstehenden Detonationswolken wurden zu einem Zeitpunkt „vermessen“, zu welchem augenscheinlich noch keine Außeneinwirkungen (Abtreiben, Verwehungen) aufgetreten waren. Die Messung wurde also nicht direkt nach der Detonation, sondern mit einem zeitlichen Abstand von ca. 30-40 Sekunden durchgeführt. In /GRS 10/ wurden aufgrund der durchgeführten Experimente folgende funktionale Zusammenhänge zwischen Sprengstoffmasse (x in kg) und Wolkendimension (Höhe H und Durchmesser D jeweils in m) empirisch bestimmt:

$$H = A x^{1/3} \quad (5.1)$$

$$D = B x^{1/3} \quad (5.2)$$

Die Konstanten A und B sind abhängig von der vergangenen Zeit seit der Detonation.

5.2 Szenario

Im Rahmen des vorliegenden Eigenforschungsvorhabens wird die Detonation von 2 kg PETN als Modellfragestellung gewählt. Nach den Versuchen in /GRS 04/ ist der Sprengstoff quaderförmig angeordnet, wobei das Farbpulver obenauf liegt. Für die Modellierung wird bei einer Dichte von $\rho_{\text{PETN}} = 1770 \text{ kg/m}^3$ ein Volumen $V_S = 0.1 \times 0.1 \times 0.113 = 0.00113 \text{ m}^3$ für den Sprengstoff PETN angenommen. Weiterhin wird angenommen, dass 2 kg Farbpulver in Form von Eisenoxid auf dem Sprengstoff liegen. Bei einer Stampfdichte von $\rho_{\text{Eisenoxid}} = 5300 \text{ kg/m}^3$ ergibt sich ein Volumen $V_F = 0.1 \times 0.1 \times (0.15 - 0.113) = 0.00037 \text{ m}^3$ für das Farbpulver.

Die Detonation von 2 kg PETN resultiert in einer Detonationswolke der Dimension 33.33 m x 20.29 m (Höhe x Breite). Diese Größe der voll ausgebildeten Wolke ist jedoch erst nach ca. 30-40 Sekunden zu erwarten.

5.3 Rechenmodell und Rechengitter

Die Umsetzung des Experiments in der Simulation erfordert ein Rechengitter, welches fein genug diskretisiert ist, um sämtliche physikalischen Aspekte korrekt wiederzugeben. Je feiner das Modell diskretisiert wird, desto genauer wird in der Regel die Lösung. Jedoch erhöht dies gleichzeitig die numerischen Anforderungen, was zu längeren Rechenzeiten führt. Es sollte daher eine Diskretisierung gewählt werden, die Ergebnisse mit der gewünschten Genauigkeit liefert, aber auch Einschränkungen hinsichtlich der Rechenzeit und der Rechenressourcen berücksichtigt. Weiterhin erfordert die Ausbreitung der Sprengwolke über mehrere 10 m in Breite und Höhe (vgl. Abschnitt 5.1) eine ausreichende Dimensionierung des simulierten Modellbereichs.

Da über die Wetterbedingungen am Tag des Experiments, wie z. B. die Windrichtung oder -Geschwindigkeit, keine genauen Informationen vorliegen, wird in den Simulationen keine Windgeschwindigkeit vorausgesetzt. Da sich die Detonationswelle kugelförmig um den Detonationsmittelpunkt ausbreitet, bedeutet dies, dass es sich um ein in der x - y -Ebene rotationssymmetrisches Problem handelt. Um die Rechenzeit zu optimieren, wird daher nur ein Viertel der Geometrie modelliert. Das hat Konsequenzen für die an den Modellrändern anzusetzenden Randbedingungen, welche in Abschnitt 5.4 beschrieben sind.

5.4 Randbedingungen

Für die sechs Grenzflächen des Modellgebietes müssen Randbedingungen festgelegt werden, um die Lösbarkeit des aufgestellten Gleichungssystems sicherzustellen. Der Boden wird über eine Randbedingung vom Typ *wall* (undurchlässig) beschrieben. Die beiden Grenzflächen, an welchen die in Abschnitt 5.3 beschriebene Symmetrie der Modellgeometrie angewendet wird, werden als Typ *symmetry* definiert. Die übrigen beiden Seitenflächen und die Oberseite des Modells ermöglichen als Typ *patch* den Ein- und Ausstrom von Fluiden oder Gasen (Outlet). Somit ist der Boden eine feste undurchdringliche Begrenzung und die Grenzflächen des Typs *patch* bilden die Atmosphäre (vgl. Abb. 5.3). Weitere Informationen zu unterschiedlichen Randbedingungstypen finden sich in /OPE 18/.

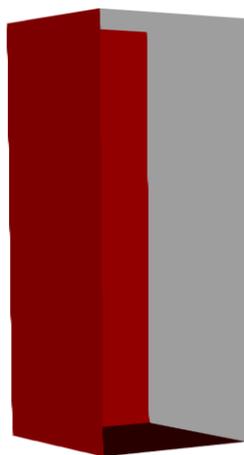


Abb. 5.3 Schematische Abbildung der Modellgeometrie (Schwarz: Boden, Rot: Symmetrie, Grau: Outlet)

Für sämtliche physikalischen Größen des Systems (bspw. Druck p , Geschwindigkeit U , Dichte ρ , Temperatur T) werden an den Rändern Werte oder Funktionen definiert.

5.5 Prozesse

Zur Berücksichtigung viskoser Effekte im Simulationsmodell müssen Turbulenzmodelle, wie RANS oder LES berücksichtigt werden. Alle für OpenFOAM standardmäßigen RANS (z. B. $k - \varepsilon$ oder $k - \omega$) und LES (z. B. Wale oder Smagorinsky) Turbulenzmodelle, sind mit dem Solver-Paket `blastfoam` anwendbar. Das verwendete Modell führt zusätzliche Transportgleichungen sowie Änderungen an Transportkoeffizienten wie Viskosität und thermischer Diffusionsfähigkeit ein, die die viskosen Terme in den Erhaltungsgleichungen modifizieren. Die Berücksichtigung von Turbulenzmodellen in den Simulationen geht dementsprechend mit erhöhten rechnerischen Anforderungen und längeren Rechenzeiten einher. Neben den erhöhten rechnerischen Anforderungen turbulenter Simulationen ist auch die Wahl eines geeigneten Turbulenzmodells nicht-trivial. Beispielsweise können die bei Detonationen auftretenden Turbulenzen mithilfe des $k - \varepsilon$ -Standardmodells nicht aufgelöst werden. Außerdem beeinflusst die Wahl der zeitlichen und räumlichen Ausgangs- und Randbedingungen die simulierten physikalischen Prozesse, weshalb sie mit großer Sorgfalt zu wählen sind und gegebenenfalls iterativ angepasst werden müssen.

Bei diesem Vorhaben liegt der Fokus jedoch zunächst auf der generellen Machbarkeit der Durchführung von CFD-Explosionssimulationen. Aufgrund der ohnehin hohen rechnerischen Ansprüche derartiger Simulationen sowie des generischen Charakters des Vorhabens wird daher zunächst auf die Einbindung eines Turbulenzmodells verzichtet. Es werden laminare Berechnungen durchgeführt, was über die Festlegung des Parameters `simulationType laminar` in der Datei `turbulenceProperties` im Unterordner `constant` des Projektordners.

Konsequenzen der Nicht-Berücksichtigung von Turbulenzeffekten müssen bei der Analyse der Ergebnisse berücksichtigt werden. Bspw. können turbulent-diffusive Effekte zur Verlangsamung und Verbreiterung von Strömungen führen. Aufgrund der Vernachlässigung von Turbulenzen kann eine einzelne Geschwindigkeitskomponente daher zu hoch ausfallen, während transversale Komponenten entsprechend niedriger berechnet werden.

5.6 Solver

Die im Solver-Paket *blastFoam* bereitgestellten Solver wurden entwickelt, speziell um Simulationen von Detonationen durchzuführen. Es stehen verschiedene Solver zur Verfügung, von welchen in diesem Vorhaben der Solver *blastFoam* sowie *blastEulerFoam* verwendet werden sollen. Einerseits ermöglichen sie die Untersuchung von Stofftransport, andererseits stellen sie nach /SYN 20/ die stabilsten und meist erprobten Solver des Pakets dar.

Für den Solver *blastFoam* ist ein Lagrange'scher Partikeltransport verfügbar. Der Solver *blastEulerFoam* hingegen ist ein Multiphasen-Solver, d. h. Es können mehrere fluide Phasen (verschiedene Gase und/oder Flüssigkeiten) berücksichtigt werden. Zudem kann eine sog. granulare Partikelphase berücksichtigt werden, wobei die Phasen nach dem Euler Prinzip transportiert werden (Euler-Euler Granular). Das bedeutet, dass keine diskreten Partikel wie beim Lagrange'schen Partikeltransport vorliegen, sondern kontinuierliche Phasen. Diese können miteinander wechselwirken. Insbesondere für die granulare Phase können physikalische Prozesse, wie z. B. Wärmeübertragung oder Stoß- und Reibungskräfte innerhalb der Phase berücksichtigt werden.

5.7 Numerische Einstellungen

Zur Modellerstellung werden neben dem Modellgitter und dessen Parametrisierung, Informationen zum Lösen der Gleichungen und zugehörige numerische Einstellungen benötigt. Dies bedeutet auch, dass Anforderungen an die zeitliche und räumliche Diskretisierung des Simulationsmodells gestellt werden (müssen).

5.7.1 Solvereinstellungen

Das OpenFOAM Systemverzeichnis *system* enthält die folgenden Steuerungsdateien, die den Solver betreffen:

- In *fvSchemes* werden die numerischen Schemata für verschiedene Terme in den Gleichungen festgelegt. Es sind Schemata für die Interpolation zwischen Zellzentren und Flächen und für Ableitungen in Zeit und Raum vorhanden.
- Die *fvSolution*-Steuerdatei enthält die Auswahl der Gleichungslöser und Vorgaben u. a. für die Toleranz bei der Lösung der physikalischen Gleichungen auf dem Rechengitter.

Die für die beiden verwendeten Solver (*blastFoam*, *blastEulerFoam*) gewählten Einstellungen in *fvSchemes* und *fvSolution* sind in Abschnitt 6.2 dargestellt.

5.7.2 Zeitdiskretisierung

Um eine physikalisch korrekte Lösung zu erzielen, muss die sogenannte „Courant-Friedrichs-Lewy“ (CFL)-Bedingung erfüllt sein /GRE 17/, /HAD 19/:

$$Co = \frac{u\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \text{ (1-dim)} \quad (5.3)$$

Co	Courant Zahl
u	Fließ-Geschwindigkeit durch Zelle
Δt	Zeitschrittgröße
Δx	Gitterboxgröße in Flussrichtung

Sie stellt sicher, dass der Transport physikalischer Informationen nicht vom tatsächlichen physischen Transport der Größe überholt werden kann. Die Einhaltung dieser Bedingung ist Voraussetzung für die Konvergenz der Simulation (Stabilitätskriterium). Bei fixer Zellgröße kann die Zeitschrittweite anhand der vorliegenden Geschwindigkeiten entsprechend angepasst werden, um eine stabile Berechnung zu ermöglichen.

5.7.3 Gitterdiskretisierung

Modellgitter müssen eine ausreichend räumliche Diskretisierung (Elementgrößen bzw. Elementanzahl) aufweisen, damit die Strömungsgleichungen effektiv gelöst werden können. Eine feinere Modelldiskretisierung bzw. eine höhere Anzahl an Elementen führt zudem zu einer höheren Genauigkeit der Modellergebnisse, jedoch erhöht sich gleichzeitig auch die Rechendauer. Deshalb muss abgewogen werden zwischen Elementanzahl und der geforderten Genauigkeit der Analyseergebnisse. Hierfür können Sensitivitätssimulationen mit unterschiedlichen Elementanzahlen eines CFD-Modells durchgeführt werden.

Ob ein Modellgitter in Bezug zur Elementanzahl als groß oder klein gilt, muss in Hinsicht auf die derzeitige Rechenleistung gesehen werden. Grundsätzlich gelten derzeit Modellgitter mit einer Elementanzahl bis 10^6 als mittelgroße und ab 10^6 als große Modellgitter. Solche Rechnungen können derzeit nur effizient mit mehreren CPUs (parallele Rechnungen) durchgeführt werden. Hierbei wird das Modellgebiet in kleinere möglichst gleichgroße Teilgebiete aufgeteilt und einzelnen Prozessoren zugeordnet. Notwendige

Zwischenlösungen aneinander angrenzenden Bereichen werden mit jedem Zeitschritt zwischen den Prozessoren ausgetauscht.

Modellgitter mit Elementen ab 10^7 sind sehr groß und sollten nach Möglichkeit vermieden werden. Sie werden jedoch in der Luft- und Raumfahrt sowie in der Automobilindustrie standardmäßig angewendet.

Grundsätzlich kann die Elementanzahl optimiert werden, wenn in Bereichen mit hohen Gradienten (z. B. Geschwindigkeit, Druck) feiner diskretisiert wird und im restlichen Bereich eine gröbere räumliche Diskretisierung verwendet wird. Dieses Vorgehen wird für die Rechnungen in diesem Vorhaben ebenfalls angewendet. Für den Fall, dass diese Feld-Gradienten zeitlich und räumlich veränderlich durch die Geometrie verlaufen (wie beispielsweise bei Druckwellen von Explosionen) stellt die Software OpenFOAM einen speziellen Algorithmus zur Verfügung, welcher eine dynamische Anpassung des Gitters ermöglicht. Im *dynamicMeshDict* im Ordner *constant* der Simulation können die mathematischen Anforderungen an die lokale Feinheit des Gitters in Abhängigkeit der Feldgradienten definiert werden. Außerdem können hierin über das Keyword *loadBalance* Parameter gesetzt werden, die eine Umverteilung der Gitterzellen zwischen den Teilgebieten ermöglichen. Diese Ausbalancierung der Lastverteilung zwischen den Prozessoren dient der Optimierung der notwendigen Rechenzeit.

6 Simulation

In diesem Kapitel geht es zunächst um die zu rechnende Anwendung, auf das die beiden ausgewählten Solver *blastFoam* und *blastEulerFoam* angewandt wurden. Die Solver und ihre Einstellungen werden danach beschrieben und die Ergebnisse ausgewertet.

6.1 Anwendung / Aufgabenstellung

Im Modell wurde die Detonation von 2 kg PETN simuliert. Auf dem Sprengstoff lagen 2 kg Farbpulver (Eisenoxid) auf. Der Fokus der Simulation lag auf der sich entwickelnden Partikelwolke bzw. der Dimension dieser. In den Feldversuchen in /GRS 04/ wurde die Dimension der Partikelwolke optisch gemessen, zu einem Zeitpunkt, zu welchem die Wolke sich in einem gewissen Gleichgewicht befunden hat. Dieses Gleichgewicht war nach ca. 30-40 Sekunden erreicht; die Feldversuche wurden jeweils nach 30 Sekunden ausgewertet. Die erwarteten Wolkendimensionen lagen bei Durchmessern von 20-25 m und Höhen von 35-50 m (vgl. Abschnitt 5.1). Für die Durchführung der Simulationen stellt dies zwei zentrale Anforderungen dar:

1. Das Modellvolumen der Sprengladung hatte eine Kantenlänge von ca. 10 cm, während die zu berechnende Wolkendimension im Bereich 30-50 m zu erwarten ist. Dieser gesamte Bereich muss während der Simulation zur Verfügung stehen und macht daher von Beginn an ein großes Gitter erforderlich.
2. Die Vermessung der experimentellen Detonationswolke erfolgte im Experiment nach 30 Sekunden. Der zu simulierende Endzeitpunkt ist damit vorgegeben.

Um lange Rechenzeiten zu vermeiden und trotzdem belastbare Ergebnisse zu erzielen, wurde zunächst die zu modellierende Geometrie auf einen Bereich von 2 m x 2 m x 5 m reduziert. Entsprechend der in Abschnitt 5.3 beschriebenen Rotationssymmetrie in der x-y-Ebene wurde hierfür ein Rechengitter mit einer Ausdehnung von 1 m x 1 m x 5 m erstellt. So konnte die Partikelwolke kurz nach der Detonation erfasst und die simulierte Zeit auf diesem Gitter auf wenige Sekunden reduziert werden. Anschließend wurde auf einem größeren Modell mit den gleichen Symmetrieannahmen gerechnet und die Ergebnisse anhand der Feldversuche validiert.

Die folgenden zwei Situationen wurden im Detail untersucht:

1. Kleines Modell

Das räumliche Gitter wurde auf 1 m x 1 m x 5 m reduziert. Die Simulationszeit umfasste bis zu 5 s.

2. Großes Modell

Die Erwartung war, dass das räumliche Gitter mit einer Größe von 10 m x 10 m x 50 m geeignet ist, die erwartete Partikelwolkengröße komplett abzubilden. Um sehr lange Rechenzeiten zu vermeiden (Vergleichbarkeit mit dem Experiment würden einen simulierten Endzeitpunkt von 30 s erfordern), wurde anvisiert die Simulationen auf diesem Rechengitter bis zu einer simulierten Zeit von 10 s laufen zu lassen.

Die Wolkendimensionen aus den Experimenten liegen zu den Zeitpunkten 5 s und 30 s nach der Detonation (vgl. /GRS 04/, /GRS 10/) vor. Diese Werte wurden in Abb. 6.1 mithilfe eines potentiellen Ansatzes $y = A \cdot x^B$ interpoliert:

$$\text{Durchmesser} \approx 9,45 t^{0,43} \quad (6.1)$$

$$\text{Höhe} \approx 7,8 t^{0,30} \quad (6.2)$$

wobei t die vergangene Zeit seit der Detonation beschreibt.

So konnte für das kleine Modell und die sehr kurze Simulationszeit die Partikelwolkengröße zumindest abgeschätzt werden. Bei der Interpolation wurde davon ausgegangen, dass die Partikel bei der Detonation anfangs stark beschleunigt werden und sich die Partikelwolke in den ersten Sekunden nach der Detonation ausbildet.

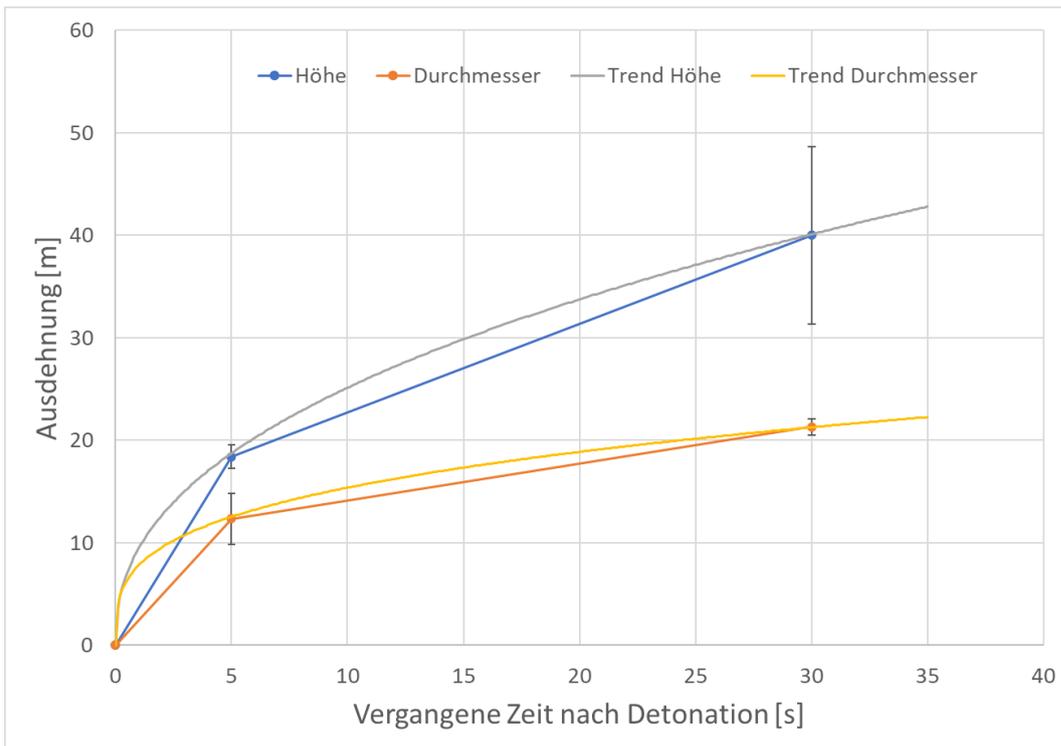


Abb. 6.1 Interpolation von Wolkendurchmesser und Wolkenhöhe. Die Funktionen der eingezeichneten Trendlinien sind in den Formeln (6.1) und (6.2) dargestellt

6.2 Einstellungen der Simulationen

Um die gewünschten Randbedingungen in der Simulation umzusetzen, sind diese in entsprechenden *dictionaries* zu integrieren. Die Bedingungen für die dynamischen Verfeinerungen des Rechengitters aufgrund starker Feldgradienten werden im *dynamicMeshDict* im Ordner *constant* (vgl. Abschnitt 5.7.3) vorgegeben. Die hier gewählten Einstellungen entsprechen den im Tutorial-Rechenfall *freeField* für den Solver *blastFoam* verwendeten Einstellungen im *dynamicMeshDict*.

```

dynamicFvMesh    adaptiveFvMesh;
errorEstimator   densityGradient;

// When can unrefinement start
beginUnrefine 1e-5;

// How often to refine
refineInterval 1;

// Refine field in between lower..upper
lowerRefineLevel 1e-2;

// If value < unrefineLevel unrefine
unrefineLevel 1e-2;

// Have slower than 2:1 refinement
nBufferLayers 1;

// Refine cells only up to maxRefinement levels
maxRefinement 1;

// Write the refinement level as a volScalarField
dumpLevel      true;

//*****// neu eingefügt

loadBalance
{
    // Is the mesh dynamically balanced
    balance no; //default is yes

    // How many refinement steps between rebalancing
    balanceInterval 1; //default is 1

    // Allowable difference between average load and max load;
    allowableImbalance 0.2; //default is 0.2

} // ***** //

```

6.2.1 Einstellungen blastFoam

Die für den Solver *blastFoam* gewählte Geometrie ist in Abschnitt 5 beschrieben. Die OpenFOAM-utility *blockMesh* wird zur Erstellung des Umgebungsgitters verwendet. Die Gesamtausdehnung des Modells sowie die Gitterzellengröße sind im zugehörigen *blockMeshDict* vorzuschreiben. Die gewählten Einstellungen sind in Tab. 6.1 aufgelistet.

Tab. 6.1 Gitterdimensionen (umgesetzt über Einträge im *blockMeshDict*)

Parameter	Kleines Modell	Großes Modell
Ausdehnung	x = 0 – 1 m y = 0 – 1 m z = 0 – 5 m	x = 0 – 10 m y = 0 – 10 m z = 0 – 50 m
Diskretisierung	x-Richtung: 10 Zellen y-Richtung: 10 Zellen z-Richtung: 50 Zellen	x-Richtung: 100 Zellen y-Richtung: 100 Zellen z-Richtung: 500 Zellen
Zellgröße	homogen: 1000 cm ³	
Gittergröße	5000 Zellen	5.000.000 Zellen

Die OpenFoam-utility *setRefinedFields* wird verwendet, um Anfangswerte für verschiedene physikalische Felder zu setzen. Dafür wird eine Box für die Sprengladung definiert, in der der Volumenanteil des Sprengstoffs mit 100 % vorgegeben wird. Außerhalb dieser Box ist kein Sprengstoff vorhanden (Volumenanteil 0 %). Um den vorgegebenen Bereich genau zu treffen, wird bei der Ausführung des Befehls *setRefinedFields* eine noch feinere Diskretisierung des Gitters vorgenommen. Der mit Sprengstoff gefüllte Quader hat die in Tab. 6.2 angegebenen Ausdehnungen. Mit den in Abschnitt 5.3 beschriebenen Symmetrieüberlegungen, beträgt die Gesamtmenge des Sprengstoffs in der Geometrie 0,5 kg (entsprechend des modellierten Gebiets $\frac{1}{4}$ der Gesamtsprengstoffmenge). Die Einstellungen im *setFieldsDict* für die Simulationen mit dem Solver *blastFoam* waren wie folgt:

```

fields (alpha.PETN);
nBufferLayers 1;

defaultFieldValues
(
    volScalarFieldValue alpha.PETN 0
    volVectorFieldValue U (0 0 0)
);

regions
(
    boxToCell
    {
        box (0.0 0.0 0.0) (0.05 0.05 0.113 );
        refineInternal yes;
        level 3;

        fieldValues
        (
            volScalarFieldValue alpha.PETN 1
        );
    }
);

```

Mithilfe der OpenFOAM-*function topoSet* wird eine Box oberhalb des Sprengstoffs für den Farbbeutel vorgegeben. Der mit Farbe gefüllte Quader hat die in Tab. 6.2 angegebenen Ausdehnungen. Es gelten die gleichen Symmetrieüberlegungen wie für den Sprengstoff, d. h. es befinden sich 0,5 kg Farbpulver in der simulierten Geometrie. Die Vorgaben im zu *topoSet* gehörigen *topoSetDict* werden gewählt, wie in Tab. 6.2 angegeben. Die resultierende Anordnung von Sprengstoff und Farbpartikeln ist in Abb. 6.2 dargestellt.

Tab. 6.2 Räumliche Vorgaben für Sprengstoff und Farbbeutel (vgl. Abschnitt 0)

Materie	Ausdehnung
Sprengstoff	$x = 0 - 0,05 \text{ m}$ $y = 0 - 0,05 \text{ m}$ $z = 0 - 0,113 \text{ m}$
Farbbeutel	$x = 0 - 0,05 \text{ m}$ $y = 0 - 0,05 \text{ m}$ $z = 0,113 - 0,15 \text{ m}$

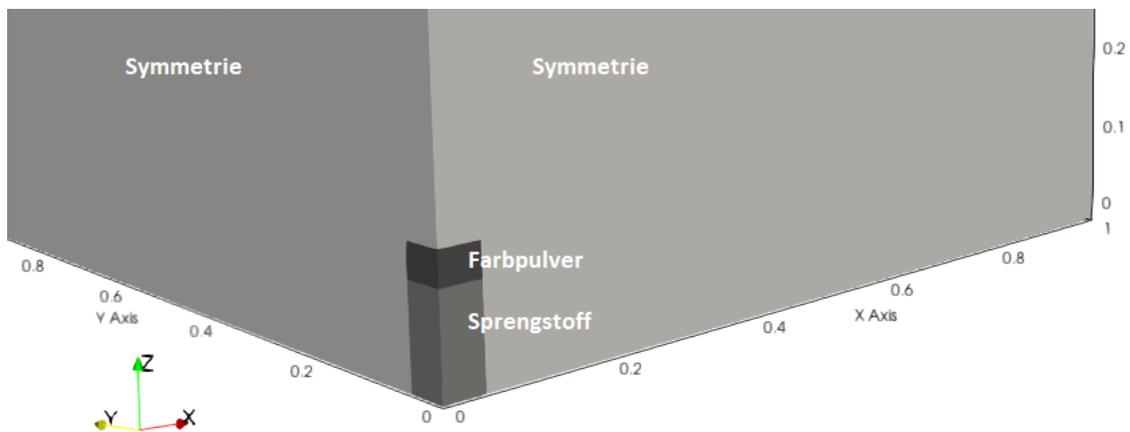


Abb. 6.2 Anordnung von Sprengstoff und Farbpulver in „Symmetrie-Ecke“ des Modells bei (0, 0, 0)

Über das *dictionary phaseProperties* im Ordner *constant* werden die von *blastFoam* genutzten Phasen unterschieden. In diesem Fall beinhaltet dies lediglich zwei Phasen, den Sprengstoff *PEN* und die umgebende Luft *air*. In *air* werden die EOS der Umgebungsluft angegeben. Für die Reaktanten und Produkte werden einzelne Parameter wie Dichte, JWL etc. vorgegeben, (vgl. Kapitel 4.2.1). Zur Beschreibung der Energiefreisetzung, wird ein lineares *activationModel* vorgegeben. Der Detonationspunkt wird 6,5 cm über dem Boden gewählt (zentral innerhalb der Sprengladung). Die Detonationsgeschwindigkeit entspricht mit 8300 m/s der Materialeigenschaft des PETN. Die im *dictionary phaseProperties* gewählten Einstellungen sind im Folgenden komplett aufgelistet:

```

phases (PETN air);

PETN
{
  type detonating;
  reactants
  {
    thermoType
    {
      transport  const;
      thermo     eConst;
      equationOfState idealGas;
    }
    equationOfState
    {
      gamma      1.25;
    }
    specie
    {
      molWeight  316.15; //Molar mass:316.15 g/mol
    }
    transport
    {
      mu         0;           // Viscosity
      Pr         1;           // Prandtl number
    }
    thermodynamics
    {
      Cv         1400;        //
      Hf         0.0;
    }
  }
  products
  {
    thermoType
    {
      transport  const;
      thermo     eConst;
      equationOfState JWL;
    }
    equationOfState
    {
      rho0      1770;        //kg/m3
      A         617.0e9;     //617 GPa
      B         16.93e9;     //16.93 GPa
      R1        4.4;
      R2        1.2;
      omega     0.25;
    }
    specie
    {
      molWeight  316.15;
    }
    transport
    {
      mu         1e-5;        // Viscosity
      Pr         0.7;         // Prandtl number
    }
    thermodynamics
    {

```

```

        Cv          1400;          // Heat capacity
        Hf          0.0;
    }
}

activationModel linear;
initiation
{
    E0          1.01e10;    // detonation energy
    points      ((0 0 0.065));    // Detonation points
    vDet        8300;      // Detonation velocity [m/s]
    useCOM yes;
}

residualRho     1e-6;      // Minimum density of the phase
residualAlpha   1e-10;    // Minimum volume fraction used
for division
}

air
{
    type basic;
    thermoType
    {
        transport    const;
        thermo        eConst;
        equationOfState idealGas;
    }
    equationOfState
    {
        gamma        1.4;          // Heat capacity ratio
    }
    specie
    {
        molWeight     28.97;
    }
    transport
    {
        mu            1e-5;
        Pr            0.7;
    }
    thermodynamics
    {
        type          eConst;
        Cv            718;
        Hf            0;
    }

    residualRho     1e-6;
    residualAlpha   1e-10;
}

```

Für eine Erklärung der nicht näher im Text beschriebenen Parameter sei an dieser Stelle auf /SYN 20/ verwiesen.

Das *dictionary turbulenceProperties* wird verwendet, um verschiedene Turbulenzmodelle abzubilden. Hier wird das Turbulenzmodell zunächst ausgeschaltet, d. h. es werden laminare Berechnungen durchgeführt.

Die Integration des Farbpulvers in der Simulation wurde auf zwei verschiedene Arten umgesetzt. Einerseits wurde die im Solver-Paket *blastfoam* leicht angepasste Version der OpenFOAM-utility *kinematicCloudProperties* verwendet, welche die Aktivierung des Farbpulvers als Lagrange-Partikel ermöglicht. Andererseits wurde das OpenFOAM-*functionObject scalarTransport* verwendet, welches die parallele Berechnung des Transports skalarer Größen während jeglicher Simulationen ermöglicht. Im Folgenden werden grob die Eigenschaften der beiden *utilities* erläutert.

kinematicCloudProperties

Die Aktivierung der Partikelphase wird über die im Ordner *constant* zu definierenden *kinematicCloudProperties* umgesetzt. Es enthält u. a. die Parametereigenschaften der Partikel wie Dichte und Durchmesser (10 μm). Es wird ein transientes Modell mit Partikeltracking gewählt. Die Partikel werden mittels *injectionModel* der Simulation hinzugefügt. Das heißt die Partikel werden in einer vorgegebenen Dauer (hier $5 \cdot 10^{-5}$ Sekunden) den Zellen der im *topoSetDict* definierten Zellen „Farbbeutel“ zugewiesen. Es wird angenommen, dass keine Partikelinteraktion auftritt und entsprechend kein Kollisionsmodell hinterlegt. Im Folgenden ist ein Ausschnitt des in den Simulationen verwendeten *dictionary kinematicCloudProperties* dargestellt. Für weitere Details sei an dieser Stelle auf /SYN 20/ verwiesen.

```

solution
{
    active            true;
    transient         true;
    coupled           false;

    //Interpolation/integration schemes for the Lagrangian Particle
    Tracking and treatment of source terms
    interpolationSchemes
    {
        rho           cell;
        U             cellPoint;
        thermo:mu     cell;
        DUcDt         cellPoint; // wird für pressureGradient be-
nötigt
    }

    sourceTerms
    {
        schemes
        {
            U         semiImplicit 1; //explicit or semiIm-
plicit, relaxCoeff for each of the fields
        }
    }

    integrationSchemes
    {
        U             Euler;
    }
}

// Properties of the particles (discrete phase)
constantProperties
{
    rho0              5240; //particle density (kg/m3)
    youngsModulus     208.2e9; // Pa für Eisen (vorher (1.3e5;))
    poissonsRatio     0.29; // kompressible 0.001; //0.35
}

subModels
{
    // Specify applicable forces on the particles subModels
    particleForces
    {
        instantDrag;

        gravity;

    pressureGradient
    {
        U U;
    }
    virtualMass
    {
        Cvm 0.5;
    }
    */
}
}

```

```

// https://www.cfd-online.com/Forums/openfoam-programming-development/183770-how-specify-number-parcels-added-cellzone-cellzoneinjection-model.html
injectionModels
{
    modell
    {
        type                cellZoneInjection;
        cellZone            Farbbeutel; // Name of cellZone
        SOI                 0; // Start Of Injection
        duration            5e-5; //
        parcelBasisType    mass; // How are the number of particles
calculated
        massTotal          2.0; // Total mass injected over injection
duration
        U0                 (0 0 0); // Initial parcel velocity
        numberDensity      1e6; //Number density of particles in cell
set
        sizeDistribution    //Teilchenradius
        {
            type fixedValue;
            fixedValueDistribution
            {
                value 10e-6; //
            }
        }
    }
}

dispersionModel none; //

patchInteractionModel none;//localInteraction;

stochasticCollisionModel none;

heatTransferModel none;

surfaceFilmModel none;

collisionModel none;

}

// Use cloudFunctions to record particle tracks, calculate particle
erosion ...
cloudFunctions
{
    voidFraction1
    {
        type                voidFraction;
    }
}

//
*****
***** //

```

scalarTransport

Ähnlich wie bei der Umsetzung mittels *kinematicCloudProperties* wird auch bei Verwendung des *scalarTransport-functionObjects* eine Injektion des *tracers* in die Zellen der im *topoSetDict* definierten *cellZone* „Farbbeutel“ über die vorgegebene Dauer von $5 \cdot 10^{-5}$ s vorgenommen. Vorab ist das Feld *tracer* im 0-Ordner der Simulation zu definieren, und die entsprechenden Felder werden als Lösung der Gleichung für den skalaren Transport zusammen mit allen anderen physikalischen Feldern für alle Zeitschritte gespeichert. Im Folgenden ist das für die Einbindung des *functionObject scalarTransport* in *system/controlDict* verwendete Skript dargestellt. Für ausführlichere Beispiele sei an dieser Stelle auf /OPE 18/ verwiesen.

```
type scalarTransport;
    libs ("libsolverFunctionObjects.so");
    active          true;
    resetOnStartup  false;

    field           tracer;
    fvOptions
    {
    tracer
    {
    type            scalarSemiImplicitSource;

    active          true;
    timeStart       0;
    duration        5e-5;

    scalarSemiImplicitSourceCoeffs
    {
    selectionMode  cellZone;
    cellZoneFarbbeutel;
    //volumemode: [Required] Choice of how to specify the two coefficients
    //- absolute: values are given as [variable]
    //- specific: values are given as [variable]/m3
    //      Mass source in kg/s (absolute) or kg/m³s (specific)
    volumeMode     specific;//
    //injectionRateSuSp: [Required] Conserved variable name and two
coefficients of linearized source term
    injectionRateSuSp
    {
    tracer         (520e5 0); // kg/(m³ s) (520e5 entspricht 1300
kg/m³, die in /GRS 04/ im Farbbeutel (vol. 0.001538 m³) liegen.
Über 5e-5 sekunden -> liefert 1300 kg/m³*1/(5e-5) = 520e5
    }
    }
    }
    }
};
```

Die gewählten numerischen Einstellungen der Gleichungslöser in *fvSolution* und *fvSchemes* (vgl. Abschnitt 5.7.1) sind im Folgenden dargestellt. Nähere Erläuterungen zu den verwendeten Lösern und Schemes sind u. a. in /OPE 18/ sowie /SYN 20/ (hier insbesondere *fvSchemes*) zu finden. Sofern nicht anders angegeben, wurden in der Regel die Einstellungen gewählt, wie sie im Tutorial-Case *freeField* zum Solver *blastFoam* verwendet wurden.

fvSolution

```
solvers
{
    "(U|e)"
    {
        solver          PBiCGStab;
        preconditioner  DIC;
        tolerance       1e-08;
        relTol          0;
    }

    "moment.*"
    {
        solver          PCG;
        preconditioner  DIC;
        tolerance       1e-12;
        relTol          0;
    }

    "(k|epsilon|omega|tracer)"
    {
        solver          PBiCGStab;
        preconditioner  DILU;
        tolerance       1e-08;
        relTol          0;
    }
}
```

fvSchemes

```
fluxScheme      Tadmor;

ddtSchemes
{
    default          Euler;
    timeIntegrator   RK2SSP;
}

gradSchemes
{
    default          cellMDLimited leastSquares 1.0;
}

divSchemes
{
```

```

default          none;
div(tauMC)       Gauss linear;
div(rhoPhi,epsilon) Gauss upwind;
div(rhoPhi,omega) Gauss upwind;
div(rhoPhi,k)    Gauss upwind;
div(alphaRhoPhi.PETN,lambda.PETN) Riemann;

div((muEff*dev2(T(grad(U)))) Gauss linear;
div(((rho*nuEff)*dev2(T(grad(U)))) Gauss linear;

div(phi,tracer)          bounded Gauss upwind;//limitedLinear 1;
}

laplacianSchemes
{
    default          Gauss linear corrected;
}

interpolationSchemes
{
    default          cubic;
    reconstruct(alpha) Minmod;
    reconstruct(rho)  Minmod;
    reconstruct(U)    MinmodV;
    reconstruct(e)    Minmod;
    reconstruct(p)    Minmod;
    reconstruct(speedOfSound) Minmod;

    reconstruct(lambda.PETN) Minmod;
}

snGradSchemes
{
    default          corrected;
}

wallDist
{
    method meshWave;
}

```

6.2.2 Einstellungen blastEulerFoam

Die Simulationen mit dem Solver *blastEulerFoam* stellten sich als erheblich zeitaufwendiger heraus als die Berechnungen mit dem Solver *blastFoam*. Deshalb wurde die in Abschnitt 5.3 beschriebene Nutzung der Symmetrie des Systems nochmals angepasst, um die zu simulierende Geometrie hinsichtlich der Rechenzeit weiter zu optimieren. Der zylindersymmetrische zu untersuchende Bereich wurde in der Simulation reduziert auf einen einzelnen Zylindersektor („Tortenstück“), wie in Abb. 6.3 dargestellt. Höhe und Breite b des Kreiszyylindersektors betragen jeweils 50 m und die Bogenlänge d 0,5 m.

Mit diesen Maßen spannte der Zylindersektor einen Winkel von ca. $1,1^\circ$ auf. Die simulierte Geometrie entsprach so ca. 0,15 % der gesamten zu simulierenden zylindersymmetrischen Situation. Die Zelldimensionen innerhalb des *blockMeshDict* wurden ähnlich den in Abschnitt 6.2.1 gewählten Einstellungen für die Simulationen mit dem Solver *blastFoam* (vgl. Tab. 6.1) gewählt.

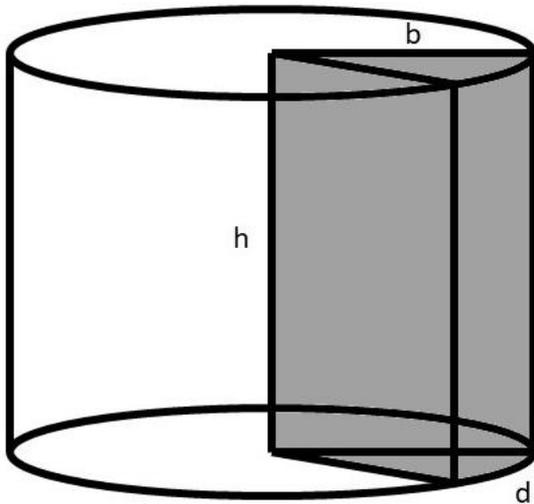


Abb. 6.3 Die für die Simulationen mit dem Solver *blastEulerFoam* verwendete Geometrie entspricht einem Zylindersektor.

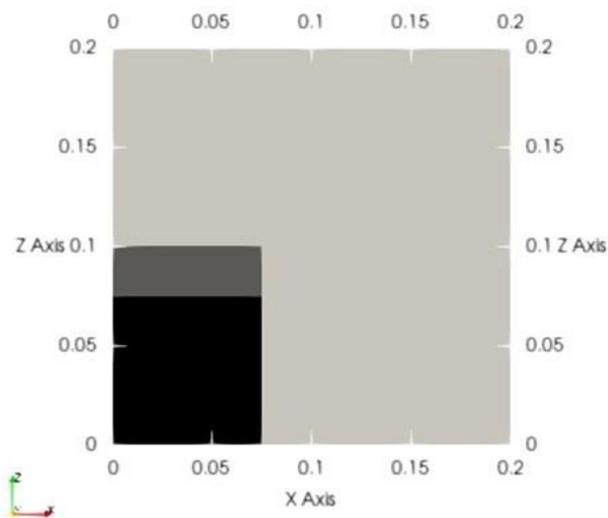


Abb. 6.4 Die Regionen, in welchen zu Beginn der Simulation der Sprengstoff (schwarz) und das Farbpulver (dunkelgrau) vorliegen. Im hellgrauen Bereich befindet sich zunächst ausschließlich Luft.

Tab. 6.3 Gitterdimensionen (umgesetzt über Einträge im *blockMeshDict*)

Parameter	Kleines Modell
Ausdehnung	x = 0 – 50 m y = 0 – 0,5 m z = 0 – 50 m
Diskretisierung	x-Richtung: 500 Zellen y-Richtung: 1 Zelle z-Richtung: 500 Zellen
Zellgröße	$\sim 2 \cdot 10^{-02} - \sim 10^{04} \text{ cm}^3$
Gittergröße	2.500.000 Zellen

Wie in Abschnitt 6.2.1 für den Solver *blastFoam* beschrieben, wurde *setRefinedFields* auch hier für die Initialisierung der einzelnen Bereiche verwendet. Für die Sprengladung wurde wieder die Initialisierung 100 % PETN und 0 % Luft genutzt. Zusätzlich zur Sprengladung und der Umgebung kam hier der Farbbeutel hinzu. Das Eisenoxid wird als Phase mitgerechnet. Innerhalb des Farbbeckens wird ein Mischungsverhältnis von 55 % Eisenoxid zu 45 % Luft definiert (vgl. /SYN 20/). Ein höherer Anteil des Eisenoxids im Mischungsverhältnis führte zu Instabilitäten und dem Abbruch der Rechnungen. Mit der Dichte von Eisenoxid ($\rho = 5300 \text{ kg/m}^3$), wurde mit der Packungsdichte die korrespondierende Stampfdichte hergestellt. Aufgrund der im Vergleich zu den Simulationen mit dem Solver *blastFoam* abweichenden simulierten Geometrie mussten die Einstellungen im verwendeten *setFieldsDict* angepasst werden. Entsprechend des Anteils des simulierten Zylindersektors am Gesamtvolumen der zylindersymmetrischen Fragestellung (ca. 0,15 %, s. o.), entsprachen die Mengen von PETN und Farbstoff jeweils 0,15 % der im Experiment verwendeten 2 kg, d. h. je ca. 3 g. Die Einstellungen im zugehörigen *setFieldsDict* lauteten wie folgt und lieferten die in Abb. 6.4 dargestellte Verteilung von Sprengstoff und Farbpulver innerhalb der Geometrie:

```
fields (alpha.PETN);
nBufferLayers 1;
defaultFieldValues
(
    volScalarFieldValue p 101298
    volScalarFieldValue alpha.particles 0
    volScalarFieldValue alpha.c4 0
)
```

```

        volScalarFieldValue alpha.air          1
    );
    regions
    (
        //Sprengstoff
        boxToCell
        {
            box (0.0 -0.1 0.0) (0.071 0.1 0.071 );
            refineInternal yes;
            level 3;
            fieldValues
            (
                volScalarFieldValue alpha.particles 0
                volScalarFieldValue alpha.PETN      1
                volScalarFieldValue alpha.air        0
            );
        }
        //Farbbeutel
        boxToCell
        {
            level 3;
            box (0.0 -0.1 0.071) (0.071 0.1 0.095 );
            fieldValues
            (
                volScalarFieldValue alpha.particles 0.55
                volScalarFieldValue alpha.air        0.45
            );
        }
    );

```

Wie für den Solver *blastFoam* dient auch hier das *dictionary phaseProperties* der Unterscheidung der in vom Solver *blastEulerFoam* genutzten Phasen. Dem Modell werden zwei Phasen zugeordnet, *particles* und *gas*. Dabei stellt *particles* die granulare Teilchenphase, in diesem Fall das Eisenoxid, und *gas* die Gasphase dar. Die Phase *gas* enthält die Sprengstoffphase *PETN* und die umgebende Phase *air*. Wie in Abschnitt 6.2.1 werden der Detonationspunkt (6,5 cm über dem Boden) und die Detonationsgeschwindigkeit (8300 m/s) vorgegeben. Die gewählten Einstellungen für die Phasen im *dictionary phaseProperties* sind im Folgenden dargestellt²:

```

phases (particles gas);

particles
{
    phaseType          granular;

    diameterModel constant;
    d                  10e-6;          //vorgegebener Teilchendurchmesser

    alphaMax          0.8;

```

² Insgesamt verfügt das *dictionary* über weitere Einträge, welche der Übersichtlichkeit halber an dieser Stelle nicht gelistet sind. Für weitere Details sei auf /SYN 20/ verwiesen.

```

alphaMinFriction 0.5;

type basic;
thermoType
{
    transport    constIso;
    thermo       eConst;
    equationOfState rhoConst;
}
specie
{
    molWeight 159.7; // in g/mol
}
equationOfState
{
    rho0      5240; // in kg/m3
}
transport
{
    kappa      80; // thermal conductivity in W/(m K) EISEN!
                // Wärmeleitfähigkeit
}
thermodynamics
{
    Cv          452; // Heat capacity J/(kg K) EISEN!
                // (spezifische) Wärmekapazität
    Hf          0.0; // Heat flux, Wärmestromdichte
W/m2
}

residualAlpha 1e-10;
residualRho   1e-6;

kineticTheoryCoeffs
{
    e          0.9;
}
}

gas
{
    phaseType      multiphase;
    diameterModel  constant;
    d              1;

    phases (PETN air); //Festlegung der Gasphasen wie bei blastFoam

    PETN
    {
        type detonating;
        reactants
        {
            thermoType
            {
                transport    const;
                thermo       eConst;
                equationOfState idealGas;
            }

            equationOfState

```

```

    {
        rho0          1770; //PETN
        // folgende Konstanten noch aus tutorial mine
        n              7.4;
        kappa          3.9e11;
        Gamma          0.35;
        gamma          1.35;
        pRef           101298;
    }
    specie
    {
        molWeight      316.15; // g/mol PETN
    }
    transport
    {
        mu             1.81e-5;           // Viscosity
        Pr             1;                 // Prandtl number
    }
    thermodynamics
    {
        Cv             1400;             // Heat capacity
        Hf             0.0;
    }
}
products
{
    thermoType
    {
        transport      const;
        thermo          eConst;
        equationOfState JWL;
    }

    equationOfState
    {
        rho0           1770; //PETN
        A               617.0e9;
        B               16.93e9;
        R1              4.4;
        R2              1.2;
        omega           0.25;
    }
    specie
    {
        molWeight      316.15; // g/mol PETN
    }
    transport
    {
        mu             1.81e-5;           // Viscosity
        Pr             0.7;             // Prandtl number
    }
    thermodynamics
    {
        Cv             1400;             // Heat capacity
        Hf             0.0;
    }
}
phase residualRho    1e-6;           // Minimum density of the

```

```

    residualAlpha 1e-10;          // Minimum volume fraction
used for division

    activationModel linear;
    initiation
    {
        E0          1.01e10; // fuer PETN E0=9.0e9;
        points      ((0 0 0.065));
        vDet        8300;      //Detonation velocity [m/s]
    }
}

air
{
    calculateDensity yes;
    type basic;
    thermoType
    {
        transport const;
        equationOfState idealGas;
        thermo eConst;
    }
    specie
    {
        molWeight 28.97;
    }
    equationOfState
    {
        gamma      1.4;
    }
    transport
    {
        mu          1.81e-5;          // Viscosity
        Pr          0.7;              // Prandtl number
    }
    thermodynamics
    {
        Cv          718;              // Heat capacity
        Hf          0.0;
    }
    residualRho    1e-6;
    residualAlpha  1e-10;
}
}

```

Wie bei den Simulationen mit dem Solver *blastFoam* wurden auch bei den Simulationen mit dem Solver *blastEulerFoam* zunächst keine Turbulenzmodelle verwendet (*dictionary turbulenceProperties: turbulence off;*), d. h. es wurden laminare Berechnungen durchgeführt.

Die gewählten numerischen Einstellungen der Gleichungslöser in *fvSolution* und *fvSchemes* (vgl. Abschnitt 5.7.1) sind im Folgenden dargestellt. Nähere Erläuterungen zu den verwendeten Lösern und Schemes sind u. a. in /OPE 18/ sowie /SYN 20/ (hier

insbesondere *fvSchemes*) zu finden. Sofern nicht anders angegeben, wurden die gleichen Einstellungen gewählt, wie sie im Tutorial-Case *mine* zum Solver *blastEulerFoam* verwendet wurden.

fvSolution

```
solvers
{
    "(rho|rhoU|rhoE|alpha)"
    {
        solver          diagonal;
    }

    "(U|e).*"
    {
        solver          PBiCGStab;
        preconditioner  DIC;
        minIter         1;
        tolerance       1e-10;
        relTol          0;
    }

    "Theta.*"
    {
        $U;
        tolerance       1e-10;
        relTol          0;
    }
}
```

fvSchemes

```
fluxSchemes
{
    gas
    {
        fluxScheme  HLLC;
    }
    particles
    {
        fluxScheme  AUSM+Up;
    }
}

ddtSchemes
{
    default          Euler;
    timeIntegrator  RK2SSP;
}

gradSchemes
{
    default          cellMDLimited leastSquares 1.0;
}

divSchemes
{
```

```

default          none;
div(tauMC)       Gauss linear;
div(rhoPhi,epsilon) Gauss upwind;
div(rhoPhi,omega) Gauss upwind;
div(rhoPhi,k)    Gauss upwind;
div(alphaRhoPhi.PETN,lambda.PETN) Riemann;

div((((alpha.gas*rho.gas)*nuEff.gas)*dev2(T(grad(U.gas))))
Gauss linear;
div(sigma.particles) Gauss linear;

div((muEff*dev2(T(grad(U)))) Gauss linear;
div((rho*nuEff)*dev2(T(grad(U)))) Gauss linear;

div(phi,tracer)          bounded Gauss upwind;//limitedLinear 1;
}

laplacianSchemes
{
    default          Gauss linear corrected;
}

interpolationSchemes
{
    default          cubic;
    reconstruct(alpha) Minmod;
    reconstruct(rho)   Minmod;
    reconstruct(U)     MinmodV;
    reconstruct(e)     Minmod;
    reconstruct(p)     Minmod;
    reconstruct(speedOfSound) Minmod;

    reconstruct(lambda.PETN) Minmod;
}

snGradSchemes
{
    default          corrected;
}

wallDist
{
    method meshWave;
}

```

6.3 Simulationsergebnisse

6.3.1 Ergebnisse *blastFoam*

Die Simulationen mit dem Solver *blastFoam* auf dem kleinen Modell wurden parallelisiert auf insgesamt 12 Prozessoren durchgeführt. Die notwendige Rechenzeit bis zu einer simulierten Zeit von 10 s betrug für das Modell unter Verwendung der in Abschnitt 5.7.3

dargestellten Symmetrieüberlegungen knapp zwei Stunden. Die Berechnung des großen Modells mit dem Solver *blastFoam* bis zum simulierten Endzeitpunkt von 10 s wurde parallel auf insgesamt 72 Prozessoren durchgeführt. Die notwendige Rechenzeit betrug ca. 4,5 Tage.

6.3.1.1 Druckwelle

Der Detonationspunkt liegt bei (0 m, 0 m, 0,065 m), d. h. 0,065 m über dem Boden. Die angenommene Detonationsgeschwindigkeit 8300 m/s ist sprengstoffabhängig, die Detonation selbst breitet sich sphärisch symmetrisch aus (vgl. Abschnitt 5.7.3). Nach diesem Ansatz erreicht die Druckwelle theoretisch in ca. $0,065 / 8300 \text{ s} = 7,8\text{e-}6 \text{ s}$ den Boden, an welchem sie reflektiert wird. Abb. 6.5 zeigt den Druck (in Pa) zum Simulationsstart und die Ausbreitung der Druckwelle. Zum Zeitpunkt $8\text{e-}6$ Sekunden, also entsprechend der Detonationsgeschwindigkeit des PETN, erreicht die Druckwelle den Boden und wird dort reflektiert. Es fällt auf, dass der Solver den Detonationspunkt nicht genau auf den Punkt (0 m, 0 m, 0,065 m), sondern etwas in x-Richtung verschoben setzt. Diese Einstellung ist zurückzuführen auf den in *phaseProperties* (vgl. Abschnitt 6.2.1) gesetzten Parameter *useCOM yes*. Hierdurch wurde der Mittelpunkt der Detonation in den Schwerpunkt des Sprengstoffs in der auf ein Viertel reduzierten Geometrie verschoben. Dies hat lediglich Einfluss auf das Durchlaufen der Detonationsfront innerhalb des Sprengstoffs (vgl. Abb. 4.1). Die Auswirkungen dieser geringfügigen Verschiebung des Startpunkts auf die Druckwelle, welche sich im Anschluss über einen erheblich größeren Bereich ausbreitet, wurden als vernachlässigbar betrachtet.

Die anschließende sphärische Ausbreitung der Druckwelle ist in Abb. 6.6 dargestellt. Anhand der in Abb. 6.6 verwendeten unterschiedlichen Druckskalen der einzelnen Zeitschritte ist deutlich zu erkennen, wie der Druck innerhalb einer halben Millisekunde bereits um mehrere Größenordnungen abnimmt. Insbesondere ist auch der erwartete Unterdruck im Bereich des ursprünglichen Detonationspunktes um den Koordinatenursprung anhand der gewählten Skalen erkennbar (vgl. Abb. 3.1). Die in Abb. 6.7 dargestellten Geschwindigkeitsfelder decken sich grundsätzlich mit den berechneten Verteilungen der Druckwelle.

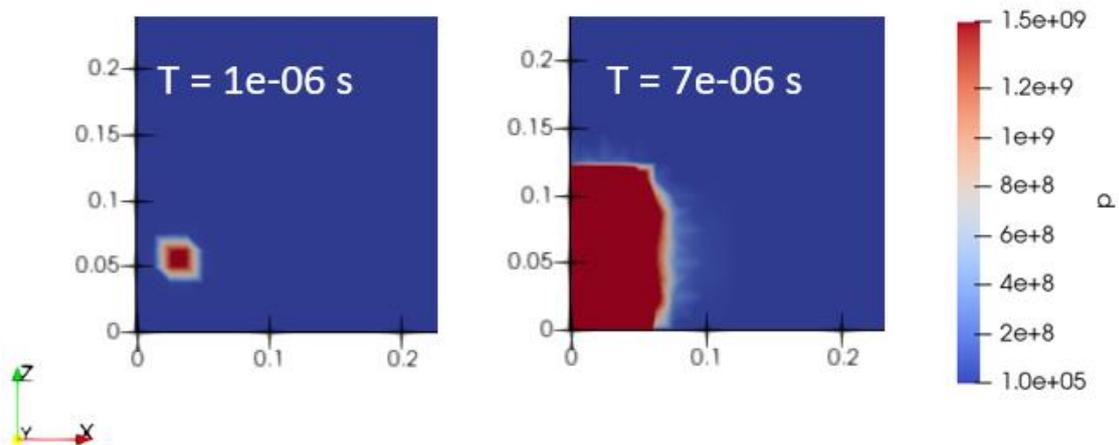


Abb. 6.5 Druckverteilung zum Zeitpunkt der Detonation (links) und zum Zeitpunkt, zu welchem die Druckwelle den Boden erreicht (rechts) beim Solver blastFoam. Der Druck ist in $\text{kg m} / \text{s}^2$ angegeben. Auf den Achsen sind die Größen in Metern angegeben

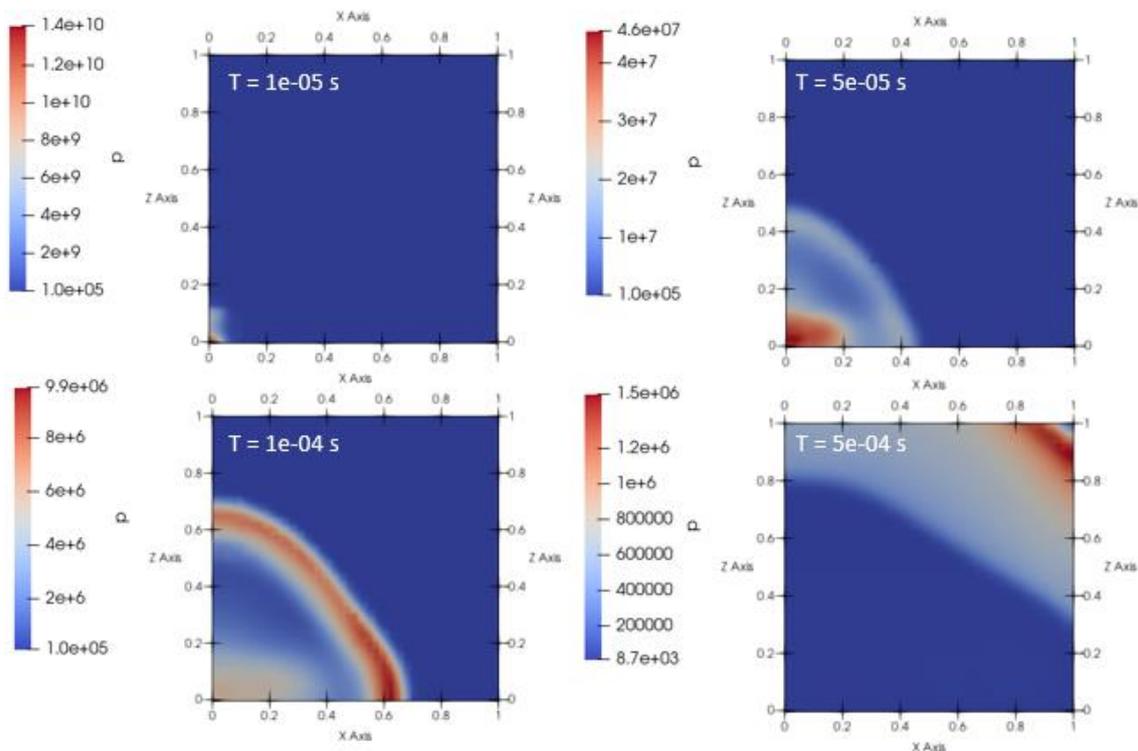


Abb. 6.6 Ausbreitung der Druckwelle beim Solver blastFoam im kleinen Modell. Der Druck ist in $\text{kg m} / \text{s}^2$ angegeben. Auf den Achsen sind die Größen in Metern angegeben

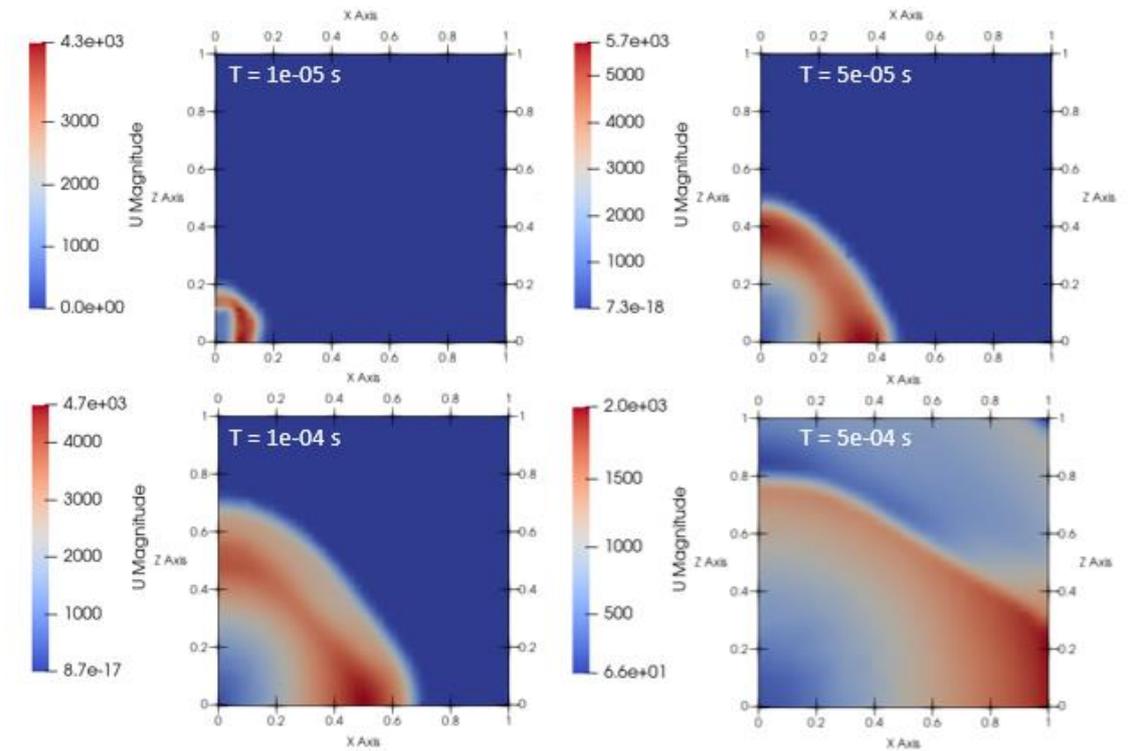


Abb. 6.7 Ausbreitung des Geschwindigkeitsfeldes beim Solver *blastFoam* im kleinen Modell. Auf den Achsen sind die Größen in Metern angegeben, Geschwindigkeiten beziehen sich auf Meter pro Sekunde

In Abb. 6.8 ist die Ausbreitung der Druckwelle im großen Modell dargestellt. Das gezeigte Zeitintervall startet nach Ende des in Abb. 6.6 und Abb. 6.7 gewählten Zeitraums. Nach 0,1 s hat die Druckwelle eine Höhe von knapp 40 m erreicht. Auch in dieser Darstellung ist der starke Druckabfall mit der Entfernung vom Detonationszentrum erkennbar. Nach 0,1 s hat die Front der Druckwelle bereits wieder fast den Umgebungsdruck erreicht. Darüber hinaus fällt auf, dass Überlagerungen von Druckwellen im Modell auftauchen, welche aufgrund von Reflexionen an den Rändern der Geometrie hervorgerufen zu werden scheinen. Das Geschwindigkeitsfeld zeigt ein analoges Verhalten und deckt sich in der Verteilung mit dem Druckfeld, weshalb auf eine Abbildung mit dem Geschwindigkeitsfeld hier verzichtet wird.

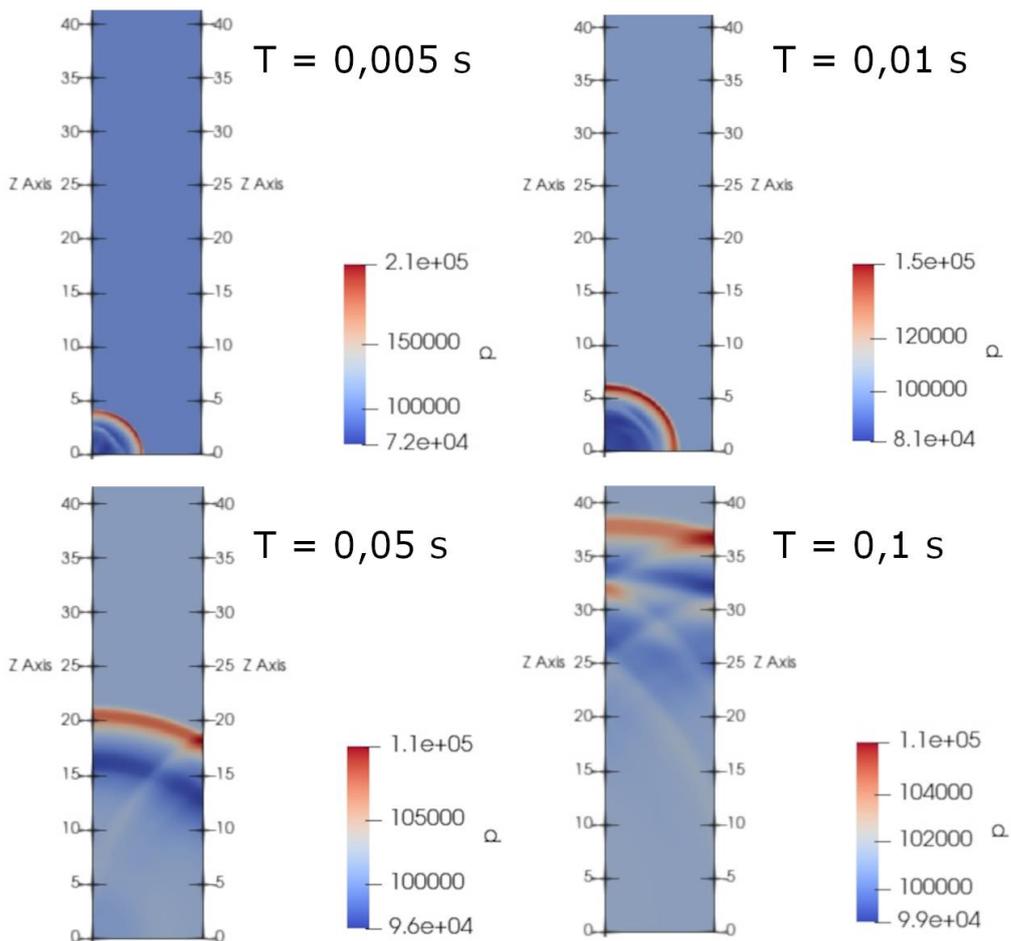


Abb. 6.8 Ausbreitung der Druckwelle beim Solver *blastFoam* im großen Modell. Der Druck ist in $\text{kg m} / \text{s}^2$ angegeben. Auf den Achsen sind die Größen in Metern angegeben

Anhand von Simulationen auf Geometrien mit unterschiedlichen Ausdehnungen konnte dieses Verhalten reproduziert werden. Die anhand der Beispiel-Cases von *blastFoam* gewählten Randbedingungen *symmetry* und *zeroGradient* an den Symmetrieflächen sowie den als Modell-Outlet gewählten Flächen (vgl. Abschnitt 5.4) scheinen für derartige Druckgradienten nicht ideal geeignet zu sein. Möglicherweise kann die Nutzung der OpenFOAM-Randbedingung *advective* für die Felder p und U hier Abhilfe schaffen. Dies sollte bei der Optimierung in zukünftigen Überlegungen berücksichtigt und überprüft werden.

6.3.1.2 Partikelverteilung und Wolkenentwicklung

Wie in Abschnitt 6.2.1 beschrieben, werden zwei unterschiedliche Herangehensweisen verwendet, um die Verteilung des Farbpulvers in der Simulation zu modellieren, *kinematicCloudProperties* sowie *scalarTransport*. Die Ergebnisse werden im Folgenden dargestellt.

kinematicCloudProperties³

Die Partikel des Farbbehalters werden wie in Abschnitt 6.2.1 über eine Dauer von $5 \cdot 10^{-5}$ Sekunden in die Zellen injiziert, vgl. Abb. 6.9. Die Detonation startet zu Beginn der Simulation mit einem linearen Aktivierungsmodell innerhalb des Sprengstoffes.

Bei der Detonation einer Sprengladung werden die Partikel instantan beschleunigt. Die Druckwelle schleudert die Partikel hoch und reißt sie mit. Die Druckwelle läuft durch die Partikel hindurch, so dass die Partikel die Geschwindigkeit der Druckwelle nicht erreichen (Massenträgheit). Die Partikel, auf die die Druckwelle nicht mehr wirkt, bleiben kurz in der Schwebe und sinken dann langsam (Trägheit der Partikel) ab. Da die Druckwelle am Boden reflektiert wird, erleben die Partikel die reflektierte Welle und werden wieder hochgeschleudert, vgl. Abb. 6.10. Die Zeitreihen in Abb. 6.10 und Abb. 6.11 zeigen, dass die Partikelwolke zuerst schnell an Höhe (bis ca. 1 m) gewinnt und diese anschließend fast beibehält. Dies entspricht nicht dem Verhalten, welches nach den in Abb. 6.5 bis Abb. 6.7 dargestellten Druck- und Geschwindigkeitsfeldern erwartet wird. Insbesondere stimmt es nicht mit den Beobachtungen im Experiment überein, wo bereits nach wenigen Sekunden mehrere Meter an Höhe erreicht werden.

³ Die Simulationen mit der Teilchen-Injektion über *kinematicCloudProperties* wurden auf einem Modell ohne die in Abschnitt 5.4 dargelegten Symmetrie-Überlegungen durchgeführt. Das Rechengitter ist daher viermal so groß wie das in allen anderen Rechenfällen verwendete. Außerdem erlaubt die Verwendung von *kinematicCloudProperties* nicht die Verwendung des *dynamicMeshDict*, was wie das viermal so große Gitter ungünstige Auswirkungen auf die Rechenzeiten hat (vgl. Abschnitt 5.7.3).

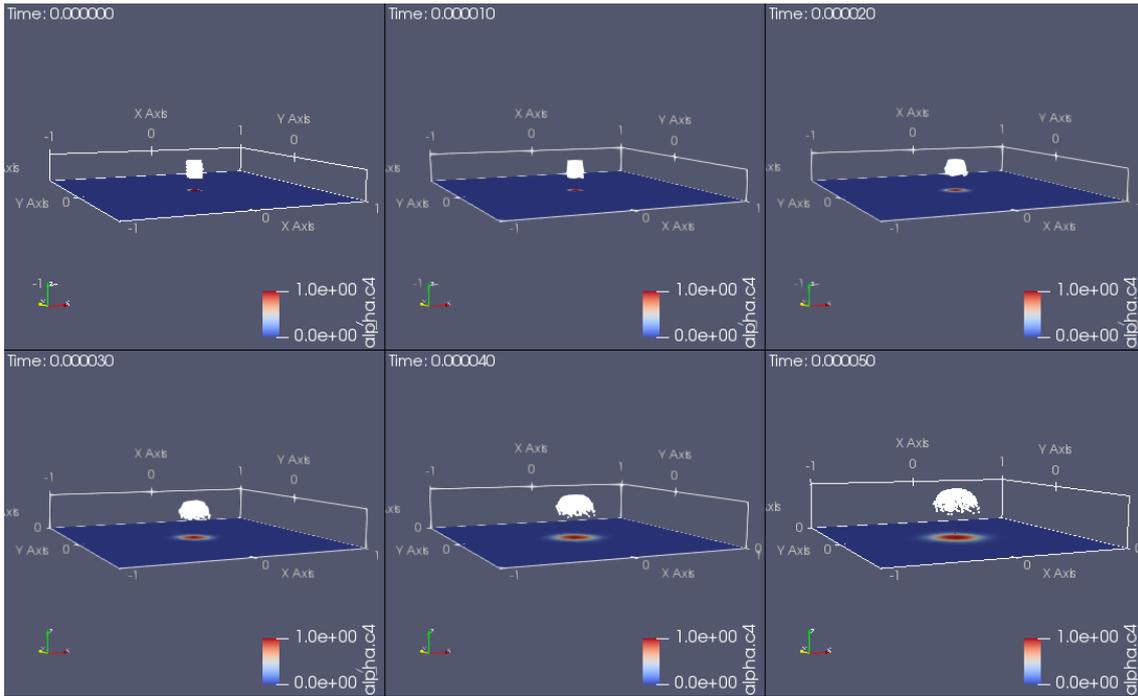


Abb. 6.9 Auf dem Boden der Geometrie ist die Verteilung des Sprengstoffs dargestellt. Darüber sind nur die injizierten Teilchen sichtbar, wie sie sich in den in Abb. 6.6 und Abb. 6.7 dargestellten physikalischen Feldern in die Höhe bewegen.

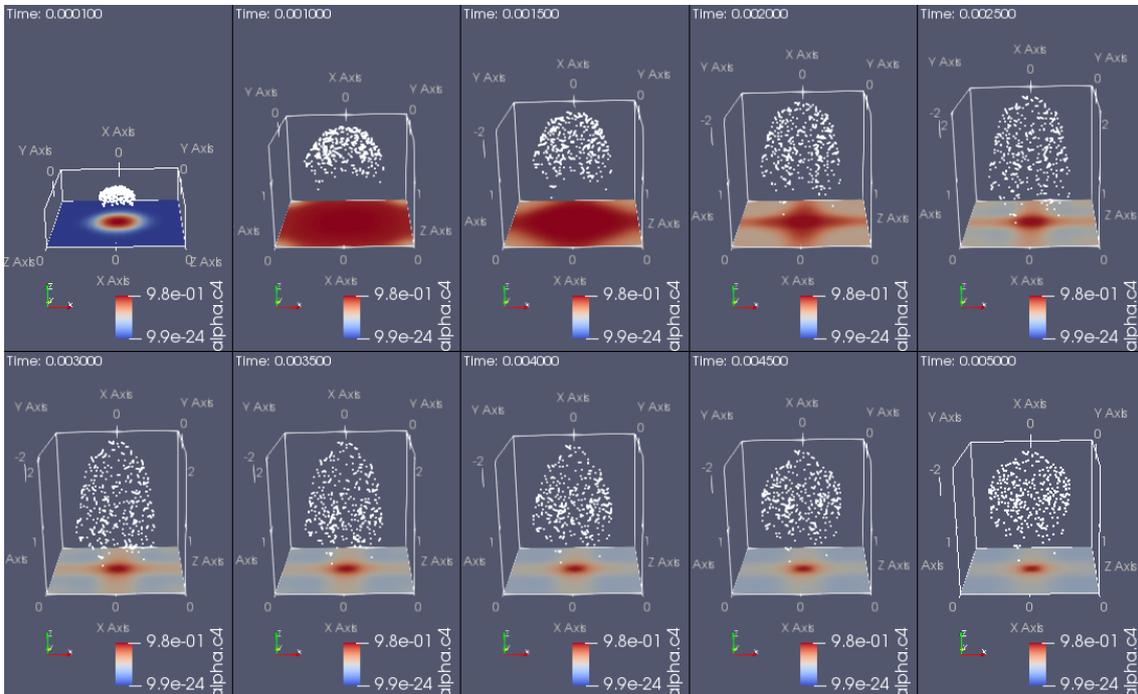


Abb. 6.10 Partikelverteilung zu Beginn der Simulation im kleinen Modell

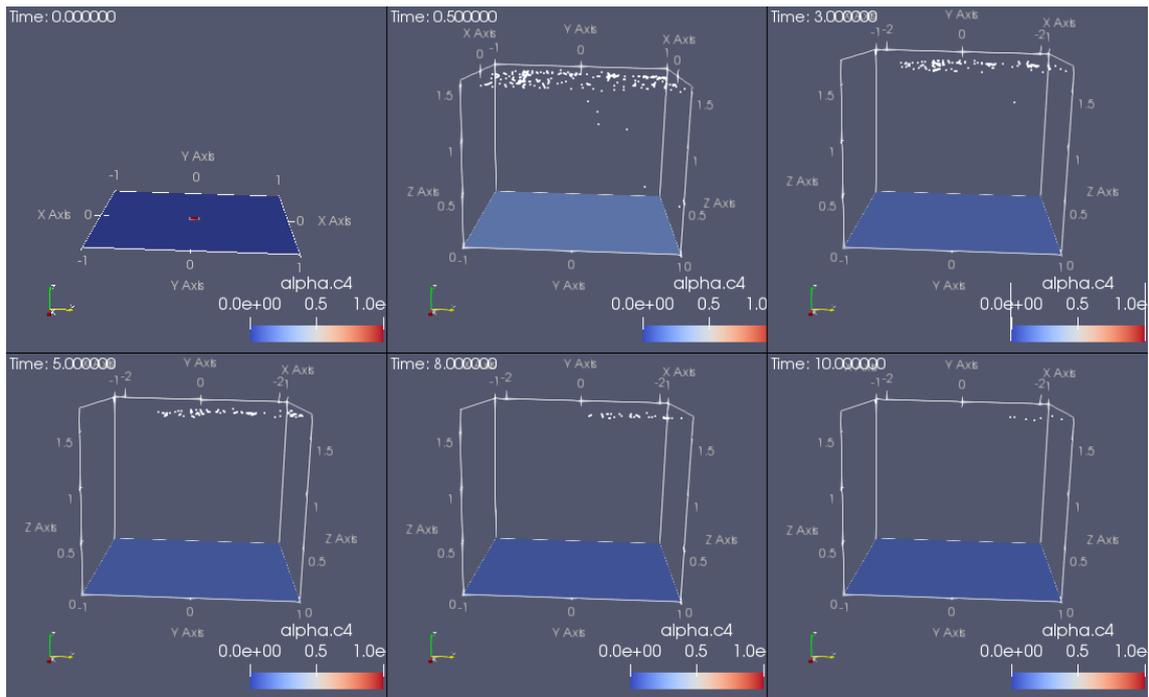


Abb. 6.11 Entwicklung der Partikelwolke in den ersten 10 Sekunden

scalarTransport

Der Transport des Farbpulvers innerhalb der Geometrie mittels des OpenFOAM-*functionObjects scalarTransport* ist in Abb. 6.12 dargestellt. Es zeigt sich ein ähnliches Verhalten wie für die Teilchen, die über *kinematicCloudProperties* injiziert wurden. Nach einem ersten Aufsteigen gleich zu Beginn der Simulation mit der Detonation, übersteigt die Farbpulverwolke eine Höhe von ca. 1,5 m nicht und stagniert. Dieses Verhalten entspricht nicht den Erwartungen aus der Zeitentwicklung der Höhe der Rauchwolke, wie in Abb. 6.1 dargestellt.

Auf die Darstellung der Volumenanteile des Sprengstoffs und der Temperatur in der Geometrie wird an dieser Stelle verzichtet. Auch hier zeigt sich eine ähnliche Verteilung, bei welcher die hohen Sprengstoffanteile im unteren Bereich der Geometrie eine vergleichbare Verteilung wie der Farbstoff (s. Abb. 6.12) bilden.

Es ist unklar, worin die abweichenden Ergebnisse der Simulationen für diese Felder ihre Ursache haben. Abgesehen von der Reflexion der Druckwelle an den Rändern der Geometrie (vgl. Abb. 6.8) erscheinen die absoluten Werte der simulierten Druckwelle realistisch zu sein.

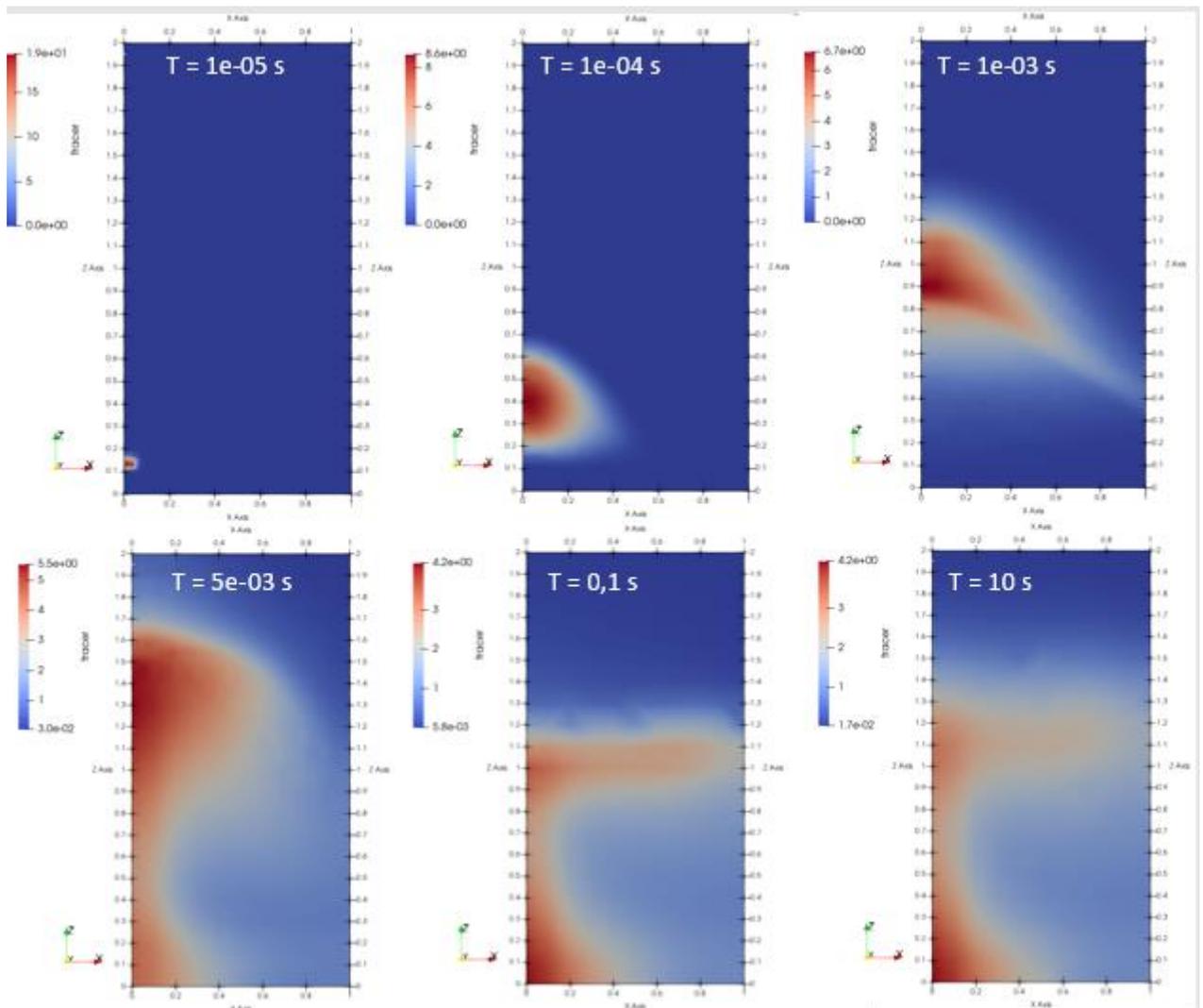


Abb. 6.12 Verteilung des Farbpulvers (*tracer*) innerhalb des kleinen Modells (Ausschnitt x : 0-1 m, z : 0-2 m) über den kompletten Simulationszeitraum von 10 s

6.3.2 Ergebnisse *blastEulerFoam*

Die Simulationen mit dem Solver *blastEulerFoam* wurden parallelisiert auf 96 Prozessoren durchgeführt. Die notwendige Rechenzeit bis zu einer simulierten Zeit von 1 s betrug ca. 10 Tage.

6.3.2.1 Druckwelle

Der Detonationspunkt ist wie in Abschnitt 6.2.2 beschrieben bei (0 m, 0 m, 0,065 m) festgelegt. Der PETN-Sprengstoff detoniert mit einer Detonationsgeschwindigkeit von

8300 m/s. Das bedeutet, die erzeugte Detonationswelle breitet sich innerhalb des Sprengstoffs mit dieser Geschwindigkeit aus. In Abb. 6.13 ist wie für den Solver *blastFoam* die Druckverteilung in Bodennähe der Geometrie zum Zeitpunkt der Detonation sowie zum Zeitpunkt, zu welchem die Druckwelle den Boden erreicht dargestellt. Es ist ein leichter zeitlicher Versatz zwischen den Simulationen zu beobachten, welcher sich auf die bei den Simulationen mit *blastFoam* gesetzte Variable *useCOM* zurückführen lässt. Jedoch wird für beide Solver eine gute Übereinstimmung erreicht, mit den erwarteten ca. $8 \cdot 10^{-6}$ s seit der zu Simulationsbeginn stattfindenden Detonation. Aufgrund der trägen Eigenschaften der granularen Phase liegt der Druck innerhalb der Partikelphase (rechte Seite in Abb. 6.13) deutlich unter dem der Gasphase. Insgesamt ergibt sich so näherungsweise das erwartete sphärische Ausbreitungsverhalten der Druckwelle.

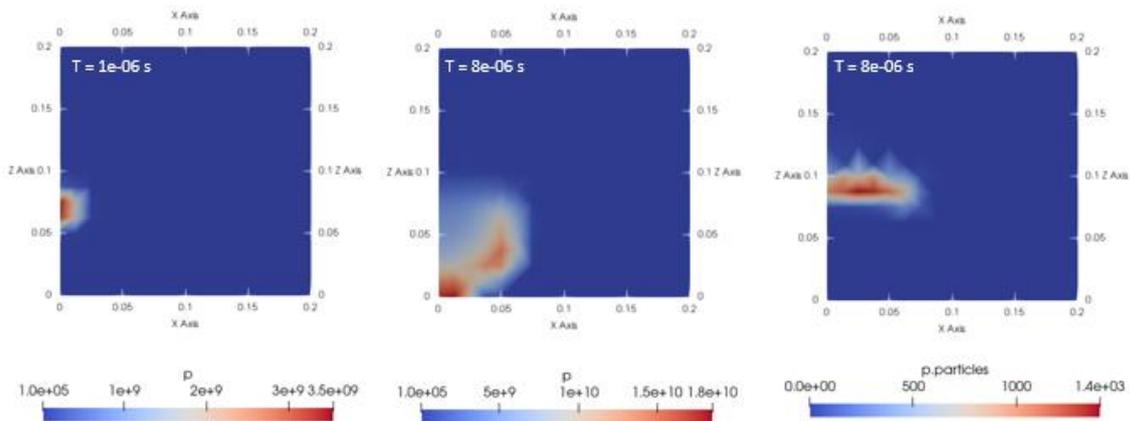


Abb. 6.13 Druck zum Zeitpunkt der Detonation (links) und zum Zeitpunkt, zu welchem die Druckwelle den Boden erreicht (rechts) für den Solver *blastEulerFoam*. Die beiden linken Bilder stellen den Druck in der Gasphase zu den Zeiten $1 \cdot 10^{-6}$ s und $8 \cdot 10^{-6}$ s dar. Im rechten Bild ist der Druck in der Partikelphase zum Zeitpunkt $8 \cdot 10^{-6}$ s dargestellt. Der Druck ist in $\text{kg m} / \text{s}^2$ angegeben (unterschiedliche Skalen). Dargestellt ist der Bereich $x: 0-0,2$ m und $z: 0-0.2$ m.

Die anschließende sphärische Ausbreitung der Druckwelle und des Geschwindigkeitsfelds ist in Abb. 6.14 und Abb. 6.15 dargestellt. Die Lösung des Solvers *blastEulerFoam* scheint im Vergleich zum Solver *blastFoam* eine etwas stärkere Ausdehnung in der horizontalen Ebene als in z-Richtung aufzuweisen. Der direkt über der Sprengladung positionierte Farbstoff (vgl. Abb. 6.2) kann die Ursache für die verzögerte Ausbreitung der Druckwelle in vertikaler Richtung sein. Der mit den Eisenpartikeln gefüllte Farbbeutel

bildet einen Widerstand, welcher die Druckwelle aufgrund von Trägheitseffekten zunächst etwas aufhält und in Druckspitzen direkt unterhalb des Farbpulvers resultiert (vgl. Abb. 6.14 $T = 5 \cdot 10^{-5}$ s und $1 \cdot 10^{-4}$ s).

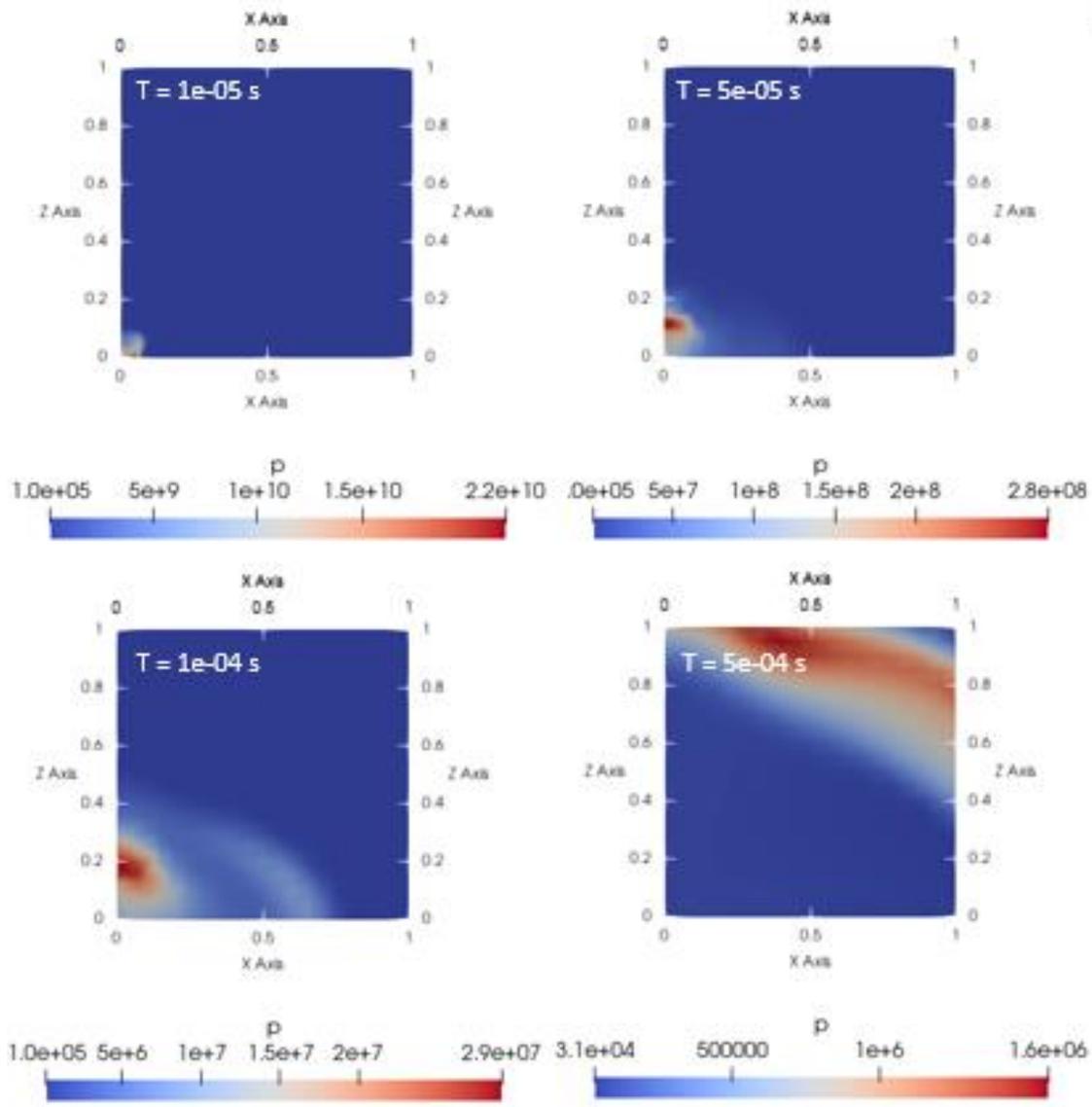


Abb. 6.14 Ausbreitung der Druckwelle beim Solver *blastEulerFoam*. Dargestellt ist der Bereich von 1 m * 1 m in der x-z-Ebene. Der Druck ist in kg m / s² angegeben.

Wie beim Solver *blastFoam* zeigen auch hier die verwendeten unterschiedlichen Druckskalen der einzelnen Zeitschritte, wie der Druck innerhalb von 0,5 ms bereits um mehrere Größenordnungen abnimmt. Insbesondere ist auch der erwartete Unterdruck im Bereich des ursprünglichen Detonationspunktes um den Koordinatenursprung anhand der gewählten Skalen in Abb. 6.14 bei $T = 5 \cdot 10^{-4}$ s erkennbar (vgl. Abb. 3.1). Die in Abb. 6.15

dargestellten Geschwindigkeitsfelder decken sich auch für den Solver *blastEulerFoam* grundsätzlich mit den berechneten Verteilungen der Druckwelle. Ebenso wie bei der Druckwelle ist eine etwas flachere Verteilung als beim Solver *blastFoam* zu erkennen.

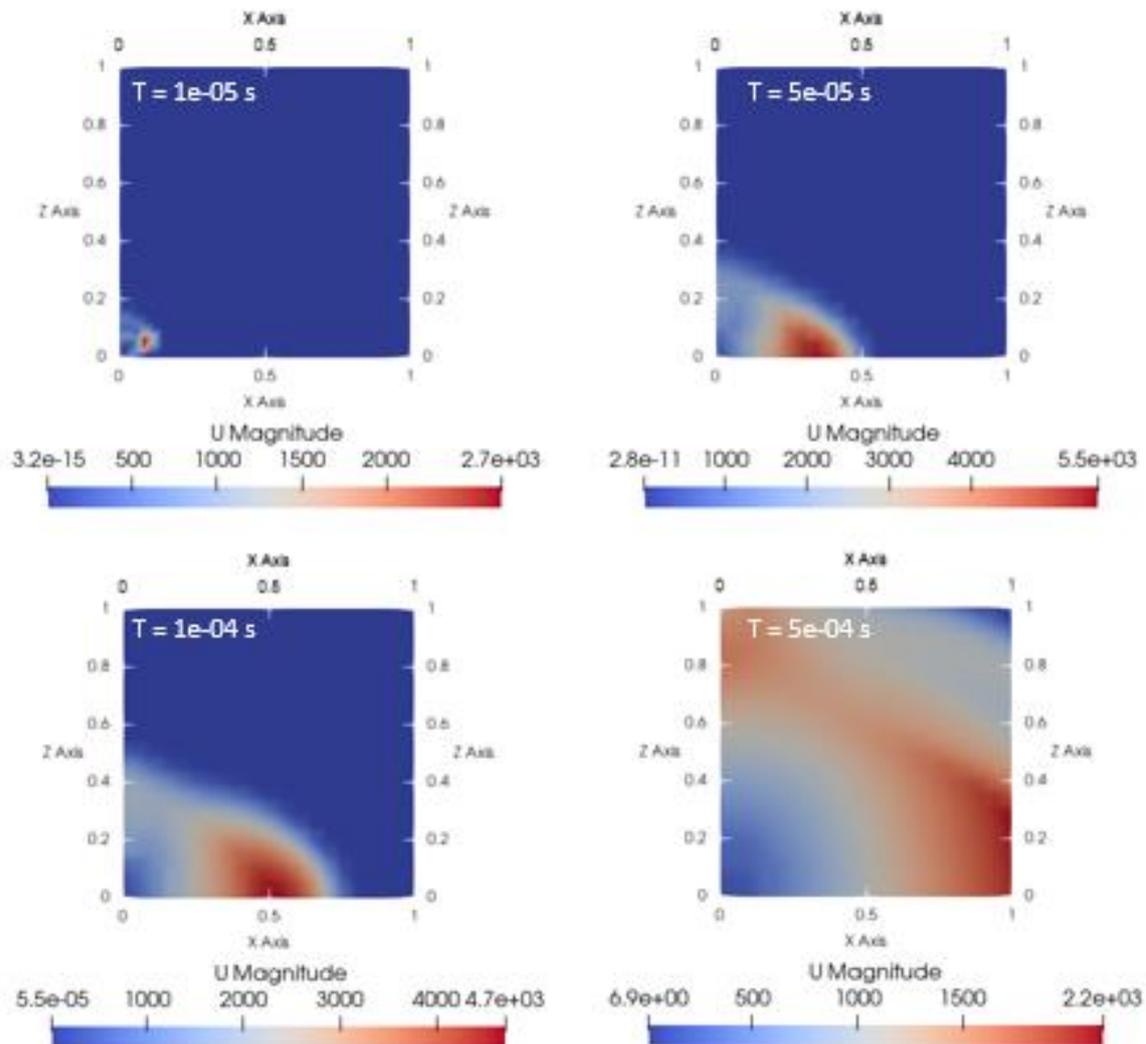


Abb. 6.15 Ausbreitung des Geschwindigkeitsfelds beim Solver *blastEulerFoam*. Dargestellt ist der Bereich von 1 m * 1 m in der x-z-Ebene. Der Druck ist in kg m / s² angegeben.

In Abb. 6.16 ist die Ausbreitung der Druckwelle dargestellt. Das gezeigte Zeitintervall startet nach Ende des in Abb. 6.14 und Abb. 6.15 gewählten Zeitraums. Nach 0,1 s hat die Druckwelle wie beim Solver *blastFoam* eine Höhe von ca. 40 m erreicht. Auch in dieser Darstellung ist der starke Druckabfall mit der Entfernung vom Detonationszentrum erkennbar. Nach 0,1 s hat die Front der Druckwelle bereits wieder fast den Umgebungsdruck erreicht. Aufgrund der breiteren gewählten Geometrie sind die in Abschnitt 6.3.1.1

für den Solver *blastFoam* beobachteten Reflexionen der Druckwellen und deren Überlagerungen zu diesem Zeitpunkt noch nicht sichtbar. Dennoch waren sie auch bei den Simulationen mit dem Solver *blastEulerFoam* zu späteren Zeitpunkten beim Durchgang der Druckwelle durch die atmosphärischen Ränder der Geometrie sichtbar (hier nicht dokumentiert). Daher sollten die gleichen Lösungsansätze wie für den Solver *blastFoam* für die Korrektur dieses Problems der Reflexion an den Geometrierändern auch beim Solver *blastEulerFoam* angewendet werden.

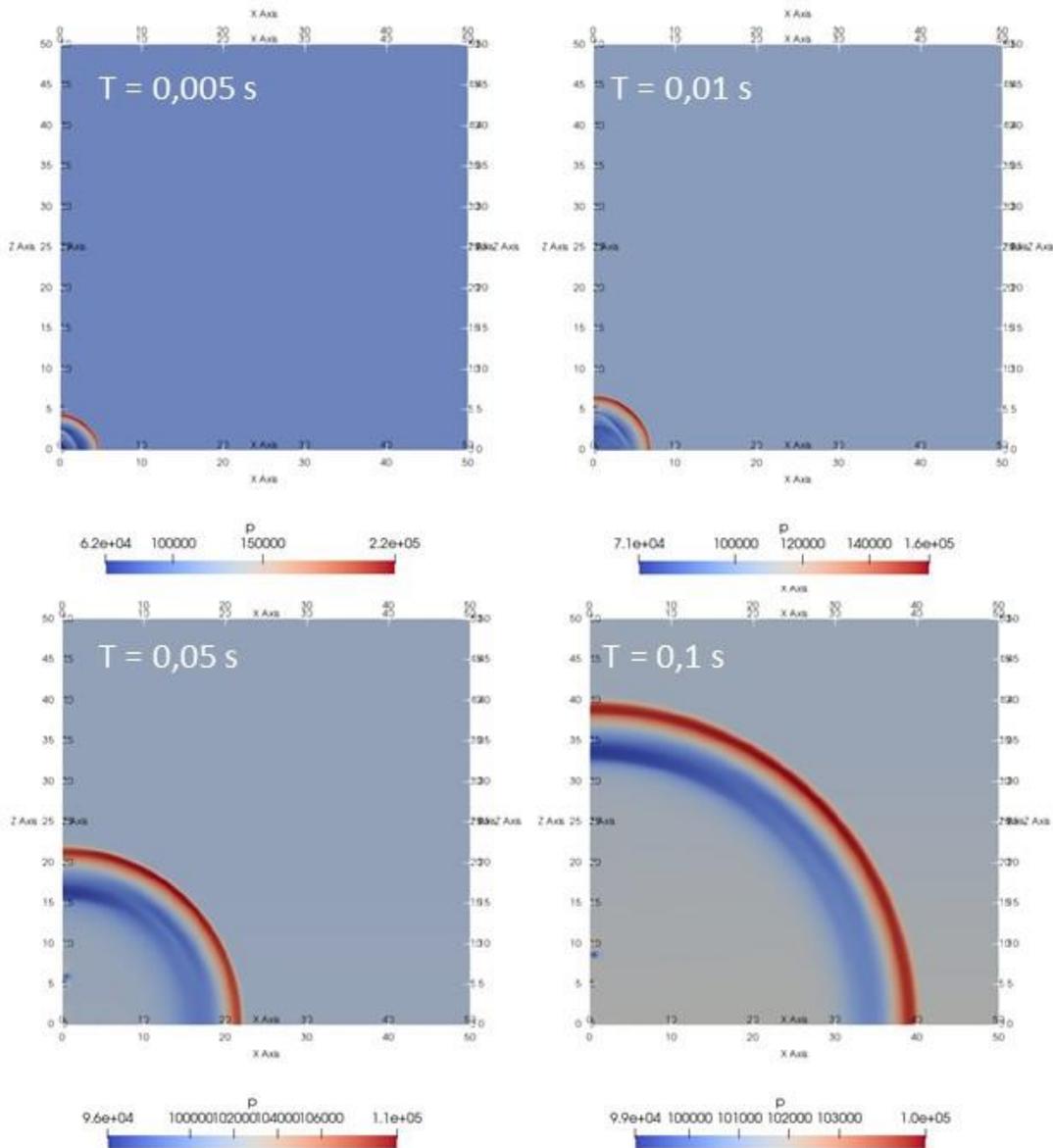


Abb. 6.16 Ausbreitung der Druckwelle beim Solver *blastEulerFoam* in der gesamten Geometrie (50 m * 50 m in der x-z-Ebene). Der Druck ist in kg m / s² (unterschiedliche Skalen) angegeben. Auf den Achsen sind die Größen in Metern angegeben.

6.3.2.2 Partikelverteilung und Wolkenentwicklung

Die Partikel werden wie in Abschnitt 5.2 beschrieben anhand einer Packungsdichte initial vorgegeben. Zunächst liegen die Partikel im zu Beginn der Simulation vorgegebenen Bereich vor, der auf der Sprengladung aufliegt (vgl. Abb. 5.1). Der Detonationspunkt liegt zentral im Sprengstoff beim Punkt (0 m, 0 m, 0,065 m). Die in Abb. 6.14 dargestellte Druckverteilung durchläuft den Farbbeutel, und das Farbpulver verteilt sich innerhalb der ersten 0,5 ms wie in Abb. 6.17 dargestellt. Abb. 6.18 zeigt die Ausbreitung der Teilchenphase im anschließenden Zeitraum zwischen 5 ms bis zu 1 s. Für denselben Zeitraum ist in Abb. 6.19 die Gasphase des Sprengstoffs dargestellt. Die Verteilung des Sprengstoffs und der Partikelphase sind in Abb. 6.20 für die Zeitpunkte 2 s und 5 s abgebildet. Die Temperaturverteilung in der Geometrie zeigt eine Verteilung, welche sich mit den in Abb. 6.17 bis Abb. 6.20 dargestellten Verteilungen grundsätzlich deckt. Mit anderen Worten, der sich bei der Explosion bildende Feuerball und die Explosionswolke gleichen der Verteilung des Sprengstoffs. Auf weitere explizite Darstellungen wird an dieser Stelle daher verzichtet.

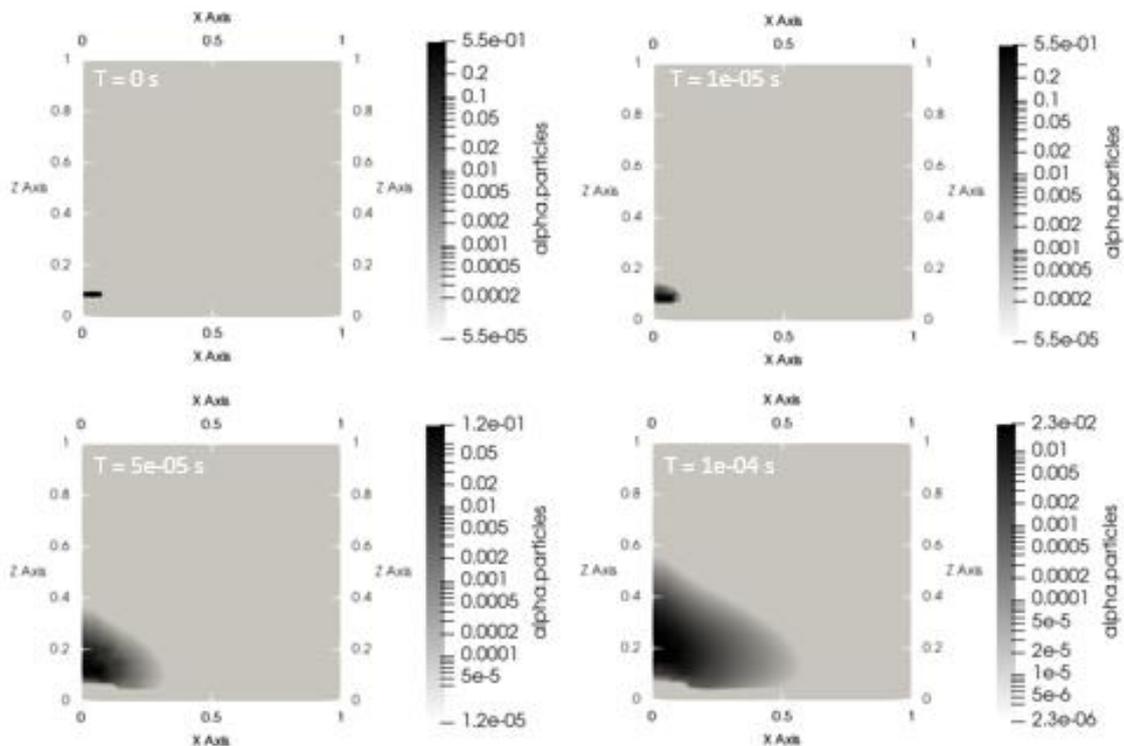


Abb. 6.17 Farbpulververteilung innerhalb der ersten 0,1 ms nach der Detonation. Die logarithmische Skala gibt den Volumenanteil der Teilchen wieder. Dargestellt ist der Bereich von 1 m * 1 m in der x-z-Ebene.

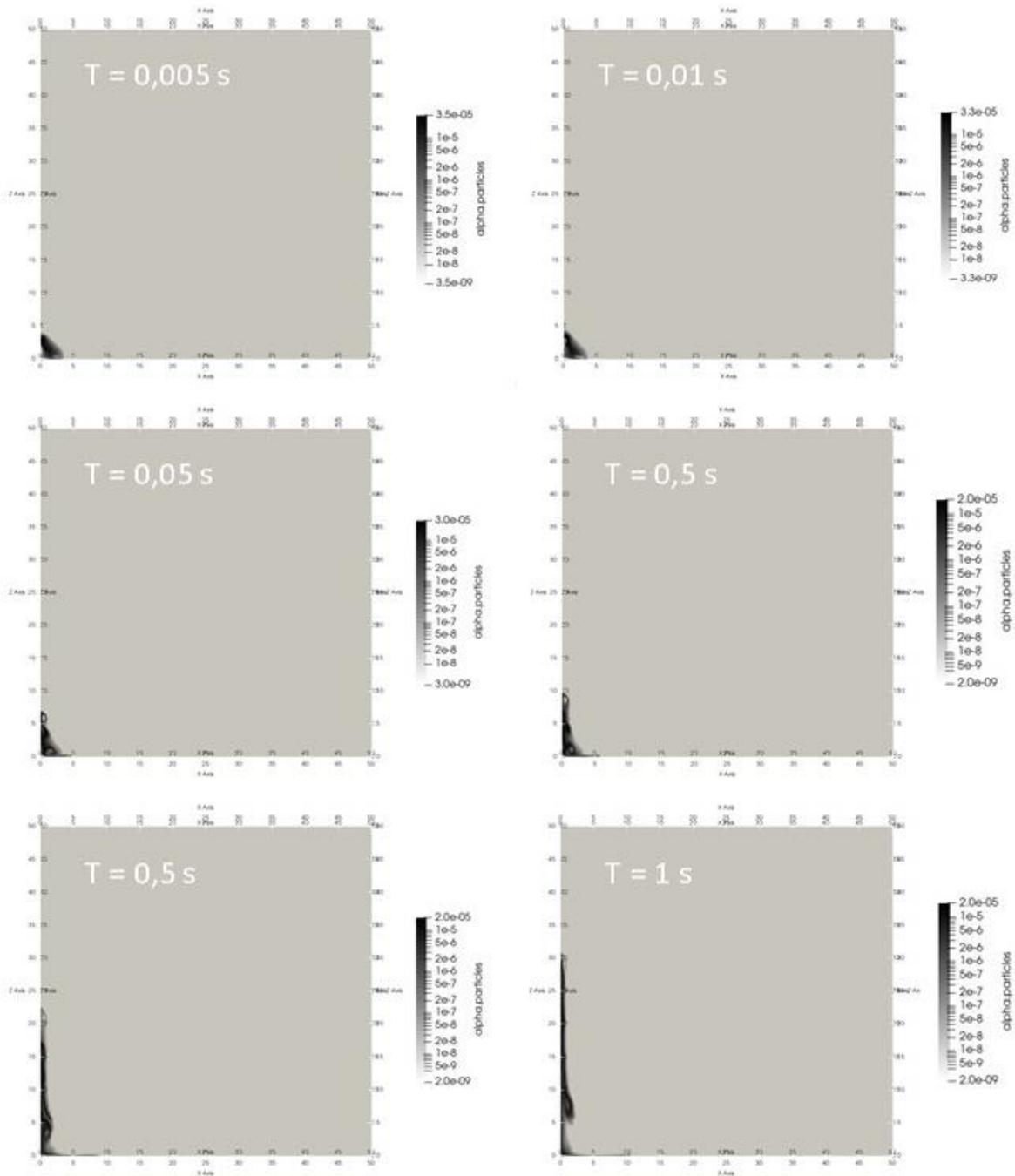


Abb. 6.18 Farbpulververteilung bis 1 s in der gesamte Geometrie (50 m * 50 m in der x - z -Ebene), *blastEulerFoam*. Auf den Achsen sind die Größen in Metern angegeben.

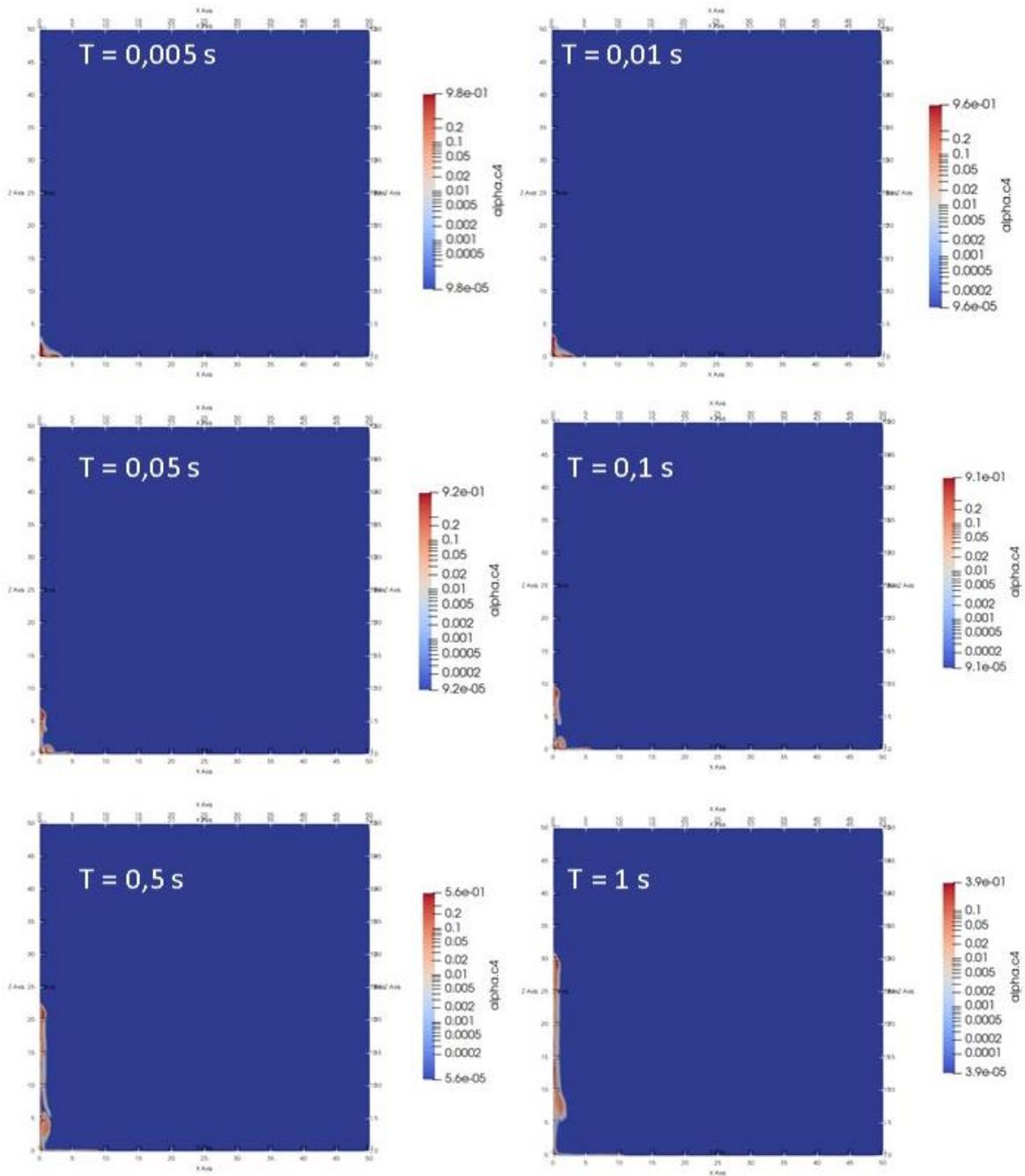


Abb. 6.19 Verteilung des Sprengstoffs bis 1 s in der gesamten Geometrie (50 m * 50 m in der x - z -Ebene), *blastEulerFoam*. Auf den Achsen sind die Größen in Metern angegeben.

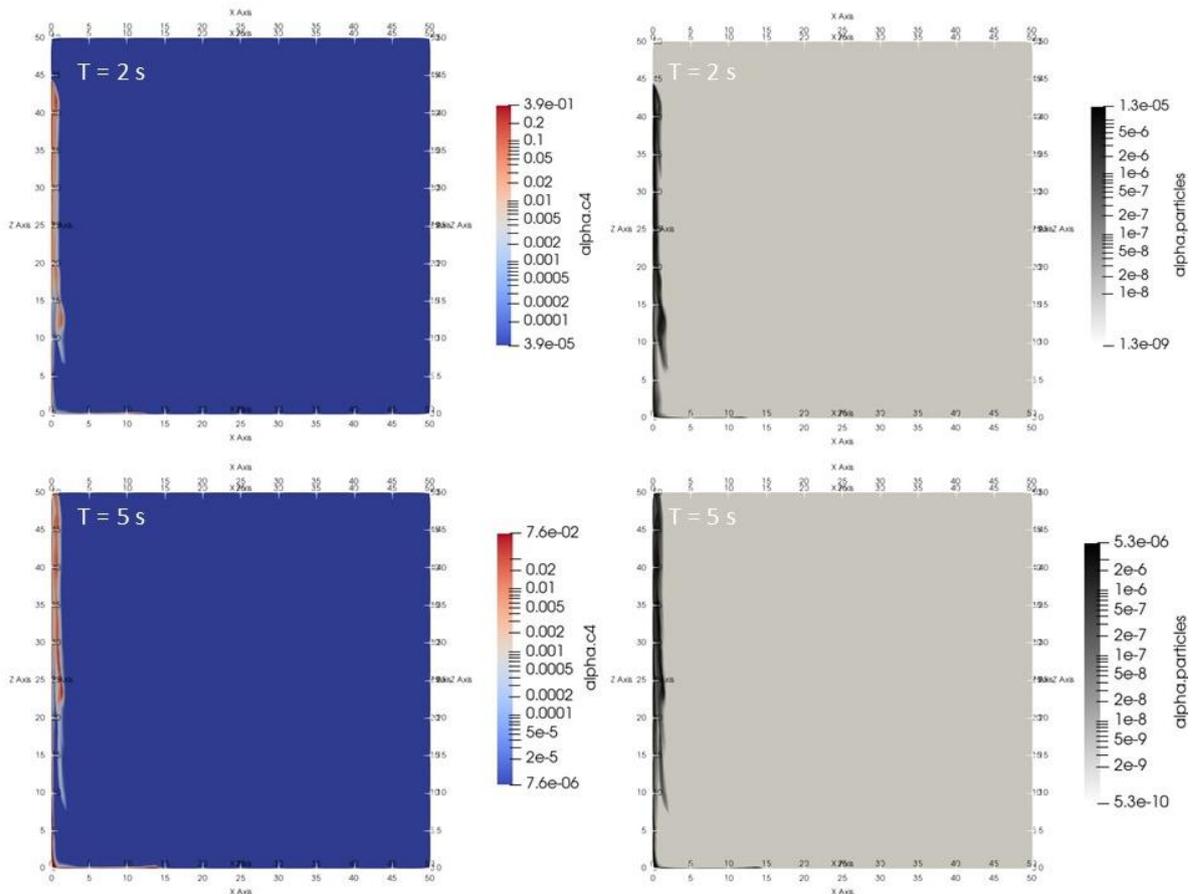


Abb. 6.20 Verteilung der Partikelphase und des Sprengstoffs bei 2 s und 5 s in der gesamten Geometrie (50 m * 50 m in der x - z -Ebene), *blastEulerFoam*. Auf den Achsen sind die Größen in Metern angegeben.

Die visuelle Auswertung in /GRS 04/ und /GRS 10/ ergab grundsätzlich ein schnelles Aufschießen des Farbpulvers direkt nach bzw. zum Zeitpunkt der Detonation (vgl. Abb. 5.2). Das in Abb. 6.17 und Abb. 6.18 dargestellte Ergebnis der Simulation spiegelt ein ähnliches Verhalten wider. Auch in den Simulationen ist ein schneller Aufstieg der Partikel zu Beginn der Simulation erkennbar. Es fällt bei den Simulationen auf, dass die nach einer Sekunde resultierende Höhe der Teilchenwolke (s. Abb. 6.19, Zeitpunkt $T = 1$ s und Abb. 6.20) deutlich über der experimentell erwarteten Höhe liegt. Nach den in Abb. 6.1 dargestellten Abschätzungen ist nach 1 s mit einer Höhe von maximal 10 m zu rechnen. Der Aufstieg geschieht in der Simulation schneller, hier erreicht der obere Rand der Teilchenwolke bereits nach 1 s eine Höhe von ca. 30 m. Während im Experiment (Abb. 6.1) die Sprengwolke nach 5 s eine Höhe von knapp 20 m bei einer Breite von ca. 12 m erreicht hat, ist die Oberkante der Sprengwolke in der Simulation nach 5 s bereits über das obere Ende der Geometrie (50 m) hinaus aufgestiegen. Dies ist sowohl in der Partikelverteilung als auch in der Verteilung des Sprengstoffs sichtbar. Weiterhin

stellt die simulierte Teilchenwolke sich sehr schmal dar, im Vergleich zum Experiment. Die Verteilungen von Sprengstoff und Partikeln zeigen ein ähnliches Verhalten hinsichtlich ihrer Form. Es bildet sich die angesprochene schmale und schnell aufsteigende Spitze direkt im Zentrum der Detonation (an der Spitze des Zylindersektors).

Nach ca. 0,05 s ist bei beiden Verteilungen jedoch eine weitere Blase am Boden der Geometrie erkennbar. Diese steigt etwas langsamer auf und hat nach 1 s eine Höhe zwischen 5-10 m erreicht, bei einer Ausdehnung in x-Richtung von 2-3 m. Unter Berücksichtigung der angewendeten Zylindersymmetrie entspricht dies einem Durchmesser der Sprengwolke von 4-6 m Diese Dimensionen von Höhe und Durchmesser liegen näher an den experimentell ermittelten und interpolierten Werten nach 1 s (vgl. Abb. 6.1). Im weiteren Verlauf der Simulation (Abb. 6.20) zu den Zeitpunkten 2 s und 5 s, zeigt diese untere etwas langsamer aufsteigende Blase dennoch kein dem Experiment entsprechendes Verhalten. Bei einer Höhe von ca. 25 m und einer Breite von 4-5 m ist auch hier eine im Vergleich zum Experiment höhere Aufstiegs geschwindigkeit und deutlich schmalere Ausdehnung in der Breite erkennbar. Es wäre zu klären, inwieweit die Verteilungen von Sprengstoff- und Teilchenwolke als repräsentativ für die in den Experimenten beobachteten Sprengwolken angesehen werden können.

6.3.3 Vergleich

Die beiden Solver zeigen hinsichtlich der Ausbreitung der Druckwelle sowie des Geschwindigkeitsfelds ein ähnliches und durchaus realistisches Verhalten. Während die Ausbreitung der Druckwelle beim Solver *blastEulerFoam* in den ersten Momenten nach der Detonation (bis ca. 5 ms) eine minimal stärkere Ausdehnung in der Horizontalen als in der Vertikalen zeigt, gleichen die Verteilungen der Druckwellen sich im weiteren zeitlichen Verlauf immer mehr an. Dies gilt sowohl für die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Druckwelle als auch für die Abnahme des Überdrucks gegenüber der Umgebung sowie die Unterdruckphase, wie sie auch in der Friedlander-Kurve in Abb. 3.1 dargestellt ist.

Bei den Simulationen sind Artefakte den Rändern der Geometrie erkennbar. Es entstehen Überlagerungen von Druckwellen, die an den Rändern zurückgeworfen zu werden scheinen. Das Verhalten ist vergleichbar mit der Reflexion von Wasserwellen an einem Beckenrand im Schwimmbad oder Lichtwellen an Grenzen zwischen Gebieten mit unterschiedlichem Brechungsindex. Eine Möglichkeit zur Abhilfe könnte die Nutzung anderer OpenFOAM-Randbedingungen wie *advective* oder *waveTransmissive* bieten, welche in zukünftigen Untersuchungen getestet werden sollten. Dennoch ist die Vermutung,

dass die beobachteten Reflexionen für die untersuchten Ausbreitungsprozesse von untergeordneter Bedeutung waren.

Bezüglich der Ausbreitung des Farbpulvers, welches in den Experimenten für bessere Sichtbarkeit der Rauchwolke verwendet wurde (vgl. Abschnitt 5.1), wurden gravierende Unterschiede zwischen beiden Solvern *blastFoam* und *blastEulerFoam* offenbar.

Die Verteilung der Teilchenwolke beim Solver *blastFoam* – sowohl für die Simulation mit den *kinematicCloudProperties* (Abb. 6.11) als auch unter Verwendung von *scalarTransport* (Abb. 6.12) – zeigte ein Verhalten, welches nicht mit den Ergebnissen der Experimente übereinstimmt (vgl. Abb. 6.1) und insbesondere auch wenig physikalisch erscheint. Die Teilchen bzw. der Tracer stiegen nicht über eine Höhe von ca. 1,2 m hinaus. Die Druckwelle schien kaum Einfluss auf das so modellierte Farbpulver auszuüben. Die Verteilung des Sprengstoffs (hier nicht dargestellt) in der Geometrie zeigte ein ähnliches Verhalten und verblieb im gleichen Bereich unterhalb von ca. 1,2 m. Die Ursachen hierfür sollten in zukünftigen Simulationen genauer untersucht werden.

Die Lösung des Solvers *blastEulerFoam* kommt hingegen den experimentellen Ergebnissen näher. Der Effekt der Detonation auf die Verteilung der Partikelphase (Abb. 6.17 und Abb. 6.18) sowie insbesondere auch des Sprengstoffs selbst (Abb. 6.19) war deutlich erkennbar. Die in Abb. 6.18 und Abb. 6.19 dargestellten Verteilungen der Partikel- und Sprengstoffphasen zum Zeitpunkt 1 s lagen hinsichtlich der maximalen Höhe deutlich über der geschätzten Verteilung (Simulation: ca. 30 m, Experiment: ca. 10 m). Jedoch fiel bei beiden Verteilungen auf, dass sich nach ca. 0,05 s am Boden eine weitere Blase bildete, welche mit etwas langsamerer Geschwindigkeit aufstieg. Die Ausdehnungen dieses Teils der simulierten Sprengstoff- und Partikelwolken liegen mit einer Höhe von ca. 5-10 m und einem Durchmesser von ca. 5 m näher an den nach 1 s anhand der Interpolationen in Abb. 6.1 geschätzten Dimensionen der experimentellen Wolken. Im späteren Verlauf „überholt“ jedoch auch dieser Teil der Sprengwolke die experimentell bestimmte Verteilung und steigt schneller auf.

In diesem Zusammenhang ist anzumerken, dass die am unteren Rand der Geometrie („Boden“) gewählte Randbedingung in den Simulationen als *wall* (vgl. Abschnitt 5.4) modelliert ist. Dies bedeutet, er stellt ein unnachgiebiges Fundament dar, an welchem die Druckwelle grundsätzlich vollständig reflektiert wird, was einen schnelleren Aufstieg der Sprengwolke zusätzlich begünstigt. Eine Möglichkeit diesen Effekt abzuschwächen und

den Boden letztendlich realitätsnäher zu modellieren, besteht in der Definition des Bodens, auf welchem die Sprengladung aufliegt, in Form einer weiteren Phase. Diese Phase (bspw. *sand*) könnte mithilfe des *dictionary phaseProperties* basierend auf vorhandenen Beispiel-Cases des Solver-Pakets *blastFoam* umgesetzt werden. Ein Beispiel hierfür ist der Tutorial-Case *mine* des Solvers *blastEulerFoam*, in welchem sich infolge der simulierten Detonation ein Krater bildet, welcher zwangsläufig einen Teil der Druckwelle absorbiert. Ein anderer Ansatz besteht in der Definition einer Druck-Permeabilität, welche in Bodennähe bzw. als Eigenschaft des Boden-*patches* angesetzt werden sollte. Sofern dies in OpenFOAM und dem Solver-Pakets *blastFoam* umsetzbar ist, könnte so idealerweise eine gedämpfte Reflexion der Druckwelle vom Boden zurück in die Geometrie realisiert werden, um so für realistischere Randbedingungen zu sorgen. Es ist zu prüfen, ob dieser Ansatz möglicherweise in angepasster Form ebenso eine Alternative für die *symmetry*- und *outlet*-*patches* darstellen kann, an welchen die unerwünschten Reflexionen der Druckwelle beobachtet werden. Idealerweise wird die Rechendomäne vergrößert, was mit erhöhten Rechenanforderungen einhergeht.

Neben der Festlegung des physikalischen Verhaltens an den Rändern der 3D-Geometrie stellt auch die Wahl des Turbulenzmodells eine bedeutende Randbedingung für die Simulationen dar. Da es sich bei diesem Vorhaben um eine generelle Machbarkeitsstudie der Umsetzung von Detonationssimulationen mit OpenFOAM und dem Software-Paket *blastFoam* handelt, wurden zunächst nur laminare Berechnungen durchgeführt, d. h. Turbulenzen wurden vernachlässigt. Die Berücksichtigung von Turbulenzen stellt in der Impulsgleichung eine zusätzliche Senke dar, was zu einem stärkeren Abbremsen des Auftriebs (geringere Geschwindigkeitskomponente in vertikaler Richtung) sowie einer stärkeren Verbreiterung der Detonationswolke (höhere Geschwindigkeitskomponenten in horizontaler Richtung) führt. Jedoch geht die Berücksichtigung eines Turbulenzmodells auch mit zusätzlich erhöhten rechnerischen Anforderungen einher. Aufgrund der ohnehin schon langen Rechenzeiten für laminare Berechnungen war die Berücksichtigung von Turbulenzen im Rahmen des Projektes nicht möglich (vgl. Abschnitt 5.5). Sie wäre in zukünftigen Simulationen miteinzubeziehen. Das gilt insbesondere, da bei den hier durchgeführten laminaren Berechnungen Detonationswolken simuliert wurden, welche einerseits zu schmal und andererseits zu schnell zu große Höhen erreicht haben. Mit anderen Worten, in den Simulationen traten zu hohe vertikale und zu niedrige horizontale Geschwindigkeitskomponenten auf, ein Effekt der u. a. auf die Nichtberücksichtigung von Turbulenzeffekten zurückgeführt werden könnte.

Ein weiterer wichtiger Aspekt bei den Simulationen ist der Rechenaufwand bzw. die notwendige Rechenzeit, um die in den Abschnitten 6.3.1 und 6.3.2 erhaltenen Ergebnisse zu erzielen. Zum besseren Überblick sind die Gittergrößen, die notwendigen Rechenzeiten und Parallelisierungen für die Simulationen mit den beiden Solvern in Tab. 6.4 dargestellt.

Tab. 6.4 Parallelisierung und Rechenzeiten der durchgeführten Simulationen. Die Gittergrößen repräsentieren das mit *blockMesh* erzeugte Gitter. Die mithilfe von *setRefinedFields* (vgl. Abschnitte 6.2.1 und 6.2.2) durchgeführten Gitterverfeinerungen sind in den Zahlen nicht berücksichtigt, verändern das Gitter jedoch nur in einem kleinen Bereich um wenige 100 bis 1000 Gitterzellen.

Solver	Gittergröße	Prozessoren	Simulierter Zeitpunkt	Rechenzeit (ca.)
<i>blastFoam</i>	5.000	12	10 s	2 h
<i>blastFoam</i>	5.000.000	72	10 s	4 d
<i>blastEulerFoam</i>	2.500.000	96	5 s	40 d

Bei Betrachtung der Werte in Tab. 6.4 fällt auf, dass die Berechnungen mit dem Solver *blastEulerFoam* erheblich mehr Rechenaufwand und entsprechend mehr Rechenzeit benötigen als die Simulationen mit dem Solver *blastFoam*. Einerseits liegt dies in der Verwendung der dynamischen Lastverteilung (vgl. Abschnitt 5.7.3: *loadBalance*) beim Solver *blastFoam* begründet. Diese Funktion stand in der verwendeten Version *blastFoam v.4* nicht für den Solver *blastEulerFoam* zur Verfügung, was dazu führt, dass lokale Gitterverfeinerungen bei einzelnen Prozessoren zu unverhältnismäßig viel höheren Berechnungslasten und damit Rechenzeiten führen können. Das kann die Simulationen erheblich ausbremsen. Erste Versuche mit der aktuellen Version des Solver-Pakets *blastFoam v5* zeigten, dass diese Funktion mittlerweile auf den Solver *blastEulerFoam* angewendet werden kann. Da dieser Solver augenscheinlich die experimentellen Daten besser reproduzieren kann als der Solver *blastFoam*, ist dies eine vielversprechende Entwicklung. Dennoch ist fraglich, ob der Solver *blastEulerFoam* die gleiche Leistungsfähigkeit erreichen wird, wie der Solver *blastFoam*. Letzterer scheint grundsätzlich der

am weitesten entwickelte und überprüfte Solver des Solver-Pakets von Synthetik Technologies zu sein, da hierfür deutlich mehr Beispiel-Cases existieren als für sämtliche anderen Solver. Daher ist die schlechte Performance dieses Solvers bezüglich der Ausbreitung von Sprengstoff und Teilchen umso überraschender.

7 Bewertung und Schlussfolgerungen

Wie im vorigen Abschnitt beschrieben, stimmen die Ergebnisse der beiden Solver teilweise gut miteinander überein, zeigen jedoch auch überraschende Unterschiede und teilweise ähnliche Schwächen. Der Vergleich mit dem Experiment ist schwierig, da die Auswertung der experimentellen Daten nur zu einzelnen ausgewählten Zeitpunkten (5 s, 30 s) durchgeführt wurde. Dies machte eine Interpolation erforderlich, wie in Abb. 6.1 dargestellt, um die simulierten Daten mit dem Experiment zu vergleichen.

Beim Solver *blastFoam* schien ein grundlegendes Problem vorzuliegen. Während Druckwelle und Geschwindigkeitsfeld realistische Verteilungen zeigten, wurde das Verhalten des Farbpulvers und des Sprengstoffs offensichtlich nicht korrekt wiedergegeben. Möglicherweise bietet die Verwendung der neuen Version 5 des Solver-Pakets *blastfoam* diesbezüglich verbesserte Eigenschaften. Der Solver *blastEulerFoam* liefert vielversprechende Ergebnisse, welche einer ersten Überprüfung anhand des Vergleichs mit den experimentellen Ergebnissen durchaus standhalten können. Im Gegensatz zu den Ergebnissen der Simulationen mit dem Solver *blastFoam* zeigen die Partikel ein ihrer Größe entsprechendes Verhalten. Die räumliche und zeitliche Verteilung des Aufstiegs der Teilchen- und Sprengstoffwolke erfolgte wie erwartet etwa gleichförmig, er schien jedoch insgesamt zu schnell. Bei beiden Verteilungen wurde eine schmale, schnell aufsteigende Spitze direkt über dem Detonationspunkt beobachtet. Es konnte jedoch außerdem eine erst später und etwas langsamer aufsteigende Blase innerhalb der Verteilungen ausgemacht werden, welche ein mit dem Experiment besser vergleichbares Verhalten zeigte. Schlussendlich zeigte sich jedoch auch bei diesem Teil der Sprengstoffwolke ein zu starker Auftrieb. Das gilt für die Dimensionen der aufsteigenden Blase (Höhe und Durchmesser) einerseits, und andererseits für den Zeitraum des Aufstiegs. In zukünftigen Untersuchungen ist zu klären, inwiefern die simulierten Sprengstoff- und Partikelverteilungen mit den experimentell ermittelten Sprengstoffwolken vergleichbar sind, oder ob dies gegebenenfalls nur für einzelne Teile der Verteilungen plausibel ist.

Die große Schwäche des Solvers *blastEulerFoam* liegt jedoch in der extrem langen Rechenzeit. Ein Aspekt, der möglicherweise im Rahmen des Solver-Pakets *blastfoam* in Version 5 gegenüber Version 4 verbessert worden sein könnte. Eine beschleunigte Berechnung könnte vor allem durch dynamische Lastenumverteilung zwischen den Prozessoren im Verlauf der Berechnungen ermöglicht werden. Eine beschleunigte Berechnung der Simulationen würde auch eine vertiefte und bessere Analyse insbesondere bezüglich der gewählten Eingangsparameter ermöglichen. Die langen Rechenzeiten

stellen offensichtlich den Flaschenhals der Untersuchungen dar. Erste Tests mit der neuen Version 5 des Solver-Pakets *blastfoam* deuten darauf hin, dass diese Eigenschaft im Zuge der Aktualisierung des Solver-Pakets optimiert wurde. Es sollte geprüft werden, ob eine vertiefte Untersuchung anhand der vorgegebenen Eingabeparameter eine weitere Optimierung der Ergebnisse einerseits, jedoch insbesondere auch der Rechenzeiten andererseits ermöglicht.

Das wesentliche Ziel zukünftiger Untersuchungen sollte sein, die in diesem Vorhaben entwickelten grundlegenden Vorgehensweisen zur Modellierung von USBV weiter zu vertiefen und zu optimieren. Für realistische Explosionssimulationen ist ein noch tieferes Verständnis des Verhaltens sämtlicher Eingabeparameter erforderlich. Dies gilt insbesondere für die Modellierung der Ränder der Geometrie, an welchen bei den durchgeführten Simulationen Reflexionen auftraten. Deren Auswirkungen auf die Dimensionen der Detonationswolken müssen noch genauer untersucht werden und sollten idealerweise durch geschickte Wahl der Randbedingungen eliminiert werden. Ebenso sind die Auswirkungen verschiedener Bodenbeschaffenheiten genauer zu untersuchen. Hier besteht die Möglichkeit der Definition des Bodens als weitere Phase bei Simulationen mit dem Solver *blastEulerFoam*. Die auftretende Kraterbildung könnte als weiterer Parameter zur Validierung der Simulationen im Vergleich zu Sprengversuchen untersucht werden. Das bedeutet, es muss ein weiterer Satz Gleichungen gelöst werden, was wiederum erhöhte rechnerische Anforderungen zur Folge hat. Eine weitere Möglichkeit stellt die Festlegung einer Druck-Permeabilität für den Boden der Geometrie bzw. die unterste Zellschicht dar, wobei zu prüfen wäre, inwieweit dies in OpenFOAM bzw. dem Solver-Pakets *blastfoam* umzusetzen ist. Einen weiteren wichtigen Gesichtspunkt stellt der Einfluss von Turbulenzen dar, welche in diesem Vorhaben bis jetzt noch nicht berücksichtigt wurden, insbesondere aufgrund der ohnehin schon hohen rechnerischen Anforderungen. In zukünftigen Untersuchungen, in welchen einerseits die numerische Performanz zu optimieren ist, sollten daher u. a. Turbulenzen miteinbezogen werden. Andererseits bildet das in diesem Vorhaben erlangte Verständnis der verwendeten Gleichungslöser und Randbedingungen die notwendige Grundlage für die geeignete Wahl des Turbulenzmodells sowie zugehöriger physikalisch sinnvoller Eingangs- und Randbedingungen.

Die Durchführung von Berechnungen auf komplexeren 3D-Geometrien (Straßenschluchten oder Ansammlungen von Gebäuden im Bereich der Detonation), was als

Konsequenz einer effizienteren und realitätsnäheren Umsetzung der Simulationen möglich werden könnte, stellt eine vielversprechende langfristige Perspektive der hier durchgeführten Untersuchungen dar.

Literaturverzeichnis

- /ALL 04/ Allen, R. M., Kirkpatrick, D. J., Longbottom, A. W., Milne, A. M., Bourne, N. K.: Experimental and Numerical Study of Free-Field Blast Mitigation. AIP Conference Proceedings, Bd. 706, DOI 10.1063/1.1780363, 2004.
- /AND 08/ Andersson, K. G., Mikkelsen, T., Astrup, P., Thykier-Nielsen, S., Jacobsen, L. H., Schou-Jensen, L., Hoe, S. C., Nielsen, S. P.: Estimation of health hazards resulting from a radiological terrorist attack in a city. Radiation Protection Dosimetry, Bd. 131, Nr. 3, S. 297–307, DOI 10.1093/rpd/ncn173, 2008.
- /BAL 10/ Balakrishnan, K., Nance, D. V., Menon, S.: Simulation of impulse effects from explosive charges containing metal particles. Shock Waves, Bd. 20, Nr. 3, S. 217–239, DOI 10.1007/s00193-010-0249-z, 2010.
- /BAL 12/ Ballast, H., Ballenweg, R., Bordin, P., Buhn, J., Hahn, M., Schalau, B., Schönbacher, A., Seifert, U., Westphal, F., Wörsdörfer, K.: Quelltermberechnung bei störungsbedingten Stoff- und Energiefreisetzungen in der Prozessindustrie, Methodenübersicht und industrielle Anwendung. Hrsg.: ProcessNet-Fachgemeinschaft „Anlagen- und Prozesssicherheit“, Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V. (DECHEMA), ISBN 978-3-89746-135-2: Frankfurt/Main, Oktober 2012.
- /BOI 96/ Boiko, V. M., Kiselev, V. P., Kiselev, S. P., Papyrin, A. N., Poplavskii, S. V., Fomin, V. M.: Interaction of a shock wave with a cloud of particles. Combustion, Explosion, and Shock Waves, Bd. 32, Nr. 2, S. 191–203, DOI 10.1007/BF02097090, 1996.
- /BRE 20/ Brewer, T., Heylman, J., Vonk, P.: blastFoam 3.0 Workshop. Synthetik Applied Technologies: Austin, Texas, Mai 2020.
- /CFD 21/ cfdyna: Multi-phase Flow in OpenFOAM - Multi-phase Flows and Discrete Phase Models. Stand von 2021, erreichbar unter http://www.cfdyna.com/Home/of_multiPhase.html, abgerufen am 18. Januar 2021.

- /CHA 03/ Chang, E., Kailasanath, K.: Shock wave interactions with particles and liquid fuel droplets. *Shock Waves*, Bd. 12, S. 333–341, 2003.
- /CHE 13/ Cheng, D.-S., Hung, C.-W., Pi, S.-J.: Numerical Simulation of Near-Field Explosion. *Journal of Applied Science and Engineering*, Bd. 16, Nr. 1, 2013.
- /CHE 16/ Cheng, Y.-T., Lin, Q.-H., Li, X., Zhan, G.-S., Jia, H.: Influence of constraint strength of shells on the performance of thermobaric explosives blasting in the air. DOI 10.14077/j.issn.1007-7812.2016.06.003, 2016.
- /COS 14/ Costin, N. S.: Numerical simulation of detonation of an explosive atmosphere of liquefied petroleum gas in a confined space. *Defence Technology*, Bd. 10, Nr. 3, S. 294–297, DOI 10.1016/j.dt.2014.06.008, 2014.
- /COS 17/ COSTA NETO, M. L., DOZ, G. N.: Study of blast wave overpressures using the computational fluid dynamics. *Revista IBRACON de Estruturas e Materiais*, Bd. 10, Nr. 3, S. 669–677, 2017.
- /DÍA 16/ Díaz-Ovalle, C., López-Molina, A., Vázquez-Román, R.: A CFD-based Approach to Predict Explosion Overpressure: A Comparison to Current Methods. *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly*, Bd. 30, Nr. 4, S. 419–427, DOI 10.15255/CABEQ.2015.2244, 2016.
- /DIN 13/ DIN EN ISO (Hrsg.): DIN EN 13237: Explosionsgefährdete Bereiche – Begriffe für Geräte und Schutzsysteme zur Verwendung in explosionsgefährdeten Bereichen. 01/2013. Januar 2013.
- /DUB 15/ DuBois, T. C., Jamriska, M., Skvortsov, A.: Dispersion of particles by a strong explosion. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, Bd. 92, Nr. 2, S. 23025, DOI 10.1103/PhysRevE.92.023025, 2015.
- /FED 16/ Fedorova, N. N., Valger, S. A., Fedorov, A. V.: Simulation of blast action on civil structures using ANSYS Autodyn. Präsentation, DOI 10.1063/1.4963939, AIP Conference Proceedings, 2016.

- /FRO 12/ Frost, D. L., Grégoire, Y., Petel, O., Goroshin, S., Zhang, F.: Particle jet formation during explosive dispersal of solid particles. *Physics of Fluids*, Bd. 24, Nr. 9, S. 91109, DOI 10.1063/1.4751876, 2012.
- /FRO 18/ Frost, D. L.: Heterogeneous/particle-laden blast waves. *Shock Waves*, Bd. 28, Nr. 3, S. 439–449, DOI 10.1007/s00193-018-0825-1, 2018.
- /GLA 22/ Glasstone, S., Dolan, P. J.: *The Effects of Nuclear Weapons - Glasstone and Dolan | Chapter II, Online Edition*. Hrsg.: Griffith, C., Meyer, E. A., atomicarchive.com, Stand vom 20. Januar 2023, erreichbar unter <https://atomicarchive.com/resources/documents/effects/glasstone-dolan/chapter2.html>, abgerufen am 16. März 2023.
- /GOE 15/ Goel, M. D.: Blast: Characteristics, Loading and Computation—An Overview. S. 417–434, DOI 10.1007/978-81-322-2190-6_36, 2015.
- /GRE 16/ Green, A. R., Erhardt, L., Lebel, L., Duke, M. J. M., Jones, T., White, D., Quayle, D.: Overview of the Full-scale Radiological Dispersal Device Field Trials. *Health Physics*, Bd. 110, Nr. 5, S. 403–417, DOI 10.1097/HP.0000000000000503, 2016.
- /GRE 17/ Greenshields, C. J.: User Guide, version 5.0. The OpenFoam Foundation, 24th July 2017.
- /GRE 19/ Greenshields, C. J.: OpenFOAM User Guide, Version 7. OpenFOAM Foundation Ltd., 237 S., Juli 2019.
- /GRS 04/ Thielen, H., Schrödl, E.: Sprengversuche zur Ermittlung der Abmessung der Schadstoffwolke nach Umsetzung einer USBV. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Juni 2004.
- /GRS 10/ Thielen, H., Schrödl, E.: Sprengversuche zur Erweiterung des Gültigkeitsbereichs der Freisetzungsmo- dellierungen im Modell LASAIR. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, 2010.

- /GRS 20/ Frieling, G.: Konsequenzenanalyse im Nahbereich eines Transportunfalls. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS - 602: Köln, 2020.
- /HAD 19/ Haddadi, B., Jordan Christian, Harasek, M.: OpenFOAM Basic Training. Technische Universität Wien, 5. Aufl., 179 S., Sep. 2019.
- /HAR 07/ Harper, F. T., Musolino, S. V., Wentz, W. B.: Realistic Radiological Dispersal Device Hazard Boundaries and Ramifications for Early Consequence Management Decisions. National Emergency Training Center, 2007.
- /HOM 20/ Homann, S. G., Aluzzi, F.: HotSpot, Health Physics Codes, Version 3.1.2, User's Guide. National Atmospheric Release Advisory Center (NARAC): Livermore, California, U.S.A., 11. Februar 2020.
- /HUM 17/ Hummel, D., Ivan, L.: Near-field investigation of the explosive dispersal of radioactive material based on a reconstructed spherical blast-wave flow. Journal of Environmental Radioactivity, Bd. 172, S. 30–42, DOI 10.1016/j.jenvrad.2017.02.017, 2017.
- /IVA 18/ Ivan, L., Hummel, D., Lebel, L.: A MCREXS modelling approach for the simulation of a radiological dispersal device. Journal of Environmental Radioactivity, Bd. 192, S. 551–564, DOI 10.1016/j.jenvrad.2018.07.014, 2018.
- /IVA 19/ Ivančo, M., Erdélyiová, R., Figuli, L.: Simulation of detonation and blast waves propagation. Transportation Research Procedia, Bd. 40, S. 1356–1363, DOI 10.1016/j.trpro.2019.07.188, 2019.
- /KAR 13/ Karlos, V., Solomos, G.: Calculation of Blast Loads for Application to Structural Components. European Commission Joint Research Centre (EC-JRC), EUR 26456 EN, 58 S., DOI 10.2788/61866, 2013.
- /KAR 15/ Karlos, V., Larcher, M., Solomos, G.: Analysis of the blast wave decay coefficient in the Friedlander equation using the Kingery-Bulmash data. European Commission Joint Research Centre (EC-JRC), 47 S., 2015.

- /KHO 18/ Khodadadi Azadboni, R., Heidari, A., Wen, J. X.: A Computational Fluid Dynamic Investigation of Inhomogeneous Hydrogen Flame Acceleration and Transition to Detonation. *Flow, Turbulence and Combustion*, Bd. 101, Nr. 4, S. 1009–1021, DOI 10.1007/s10494-018-9977-4, 2018.
- /LAN 87/ Landau, L. D., Lifshitz, E. M.: *Fluid Mechanics, Volume 6 of Course of Theoretical Physics*. Institute of Physical Problems, U.S.S.R Academy of Sciences, 551 S., Pergamon Press, 1987.
- /LIN 11/ Ling, Y., Haselbacher, A., Balachandar, S.: Importance of unsteady contributions to force and heating for particles in compressible flows. *International Journal of Multiphase Flow*, Bd. 37, Nr. 9, S. 1026–1044, DOI 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2011.07.001, 2011.
- /MAJ 05/ Majmudar, T. S., Behringer, R. P.: Contact force measurements and stress-induced anisotropy in granular materials. *Nature*, Bd. 435, Nr. 7045, S. 1079–1082, DOI 10.1038/nature03805, 2005.
- /MAR 14/ Marshall, J. S., Li, S. (Hrsg.): *Adhesive Particle Flows*. ISBN 9781139424547, DOI 10.1017/CBO9781139424547, Cambridge University Press: New York, 2014.
- /MAS 17/ Masi, F.: *Blast actions from high explosives. Studies on their simulation and effects*. Universität Florenz, 107 S., 2017.
- /MIT 14/ Mitelman, A., Elmo, D.: Modelling of blast-induced damage in tunnels using a hybrid finite-discrete numerical approach. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, Nr. 6, S. 565, 2014.
- /MOH 19/ Mohr, L., Benauer, R., Leitl, P., Fraundorfer, F.: Damage estimation of explosions in urban environments by simulation. *Präsentation, The International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences, GeoInformation for Disaster Management: Prag*, 3. September 2019.

- /NGO 07/ Ngo, T., Mendis, P., Gupta, A., Ramsay, J.: Blast loading and blast effects on structures - An overview. *Electronic Journal of Structural Engineering*, 2007.
- /NIE 99/ Nielsen, S. T., Deme, S., Mikkelsen, T.: Description of the Atmospheric Dispersion Module RIMPUFF. 58 S., 1999.
- /OKA 19/ Okamori, K.: Master Course for Fluid Simulation Analysis of Multi-phase Flows by Oka-san: 7. Particle tracking analysis I. Stand vom 20. Juni 2022, erreichbar unter <https://www.cradle-cfd.com/media/column/a109>, abgerufen am 23. Juni 2022.
- /OPE 18/ OpenCFD Ltd: OpenFOAM, The Open Source CFD Toolbox, A.4 Standard boundary conditions. Stand von 2018, erreichbar unter <https://www.openfoam.com/documentation/user-guide/standard-boundaryconditions.php>, abgerufen am 25. März 2020.
- /OSH 22/ United States Department of Labor: Radiological Dispersal Devices (RDD) / Dirty Bombs - Overview | Occupational Safety and Health Administration. Stand vom 23. Juni 2022, erreichbar unter <https://www.osha.gov/radiological-dispersal-devices>, abgerufen am 23. Juni 2022.
- /PAR 10/ Parmar, M.: Unsteady forces on a particle in compressible flows. University of Florida: Florida, 2010.
- /PON 18/ Pontalier, Q., Lhoumeau, M., Milne, A. M., Longbottom, A. W., Frost, D. L.: Numerical investigation of particle–blast interaction during explosive dispersal of liquids and granular materials. *Shock Waves*, Bd. 28, Nr. 3, S. 513–531, DOI 10.1007/s00193-018-0820-6, 2018.
- /REM 07/ Remennikov, A.: The state of the art of explosive loads characterisation. University of Wollongong, 26 S., 2007.
- /REN 11/ Rentai, Y. A.: Atmospheric Dispersion of Radioactive Material in Radiological Risk Assessment and Emergency Response. *Progress in Nuclear Science and Technology*, Bd. 1, S. 7–13, DOI 10.15669/pnst.1.7, 2011.

- /SHA 12/ Sharon, A., Halevy, I., Sattinger, D., Yaar, I.: Cloud rise model for radiological dispersal devices events. *Atmospheric Environment*, Bd. 54, S. 603–610, DOI 10.1016/j.atmosenv.2012.02.050, 2012.
- /SOH 16a/ Sohaimi, Arif S. M. Et. al.: Using Computational Fluid Dynamics (CFD) for Blast Wave Propagation under Structure, ICCS 2016. The International Conference on Computational Science. *Procedia Computer Science*, Nr. 80, 2016.
- /SOH 16b/ Sohaimi, A. S., Risby, M. S., Ishak, S. A., Khalis, S., Norazman, M. N., Ariffin, I., Yusof, M. A.: Using Computational Fluid Dynamics (CFD) for Blast Wave Propagation under Structure. *Procedia Computer Science*, Bd. 80, S. 1202–1211, DOI 10.1016/j.procs.2016.05.463, 2016.
- /SOO 15/ Soo, M., Goroshin, S., Bergthorson, J. M., Frost, D. L.: Reaction of a Particle Suspension in a Rapidly-Heated Oxidizing Gas. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, Bd. 40, Nr. 4, S. 604–612, DOI 10.1002/prop.201400269, 2015.
- /STO 14/ Stolz, A.: Numerical simulations for classification of blast loaded laminated glass: possibilities, limitations and recommendations. European Commission Joint Research Centre (EC-JRC), EUR 27137 EN, 39 S., DOI 10.2788/083832, 2014.
- /SYN 20/ Heylmun, J., Vonk, P., Browning, Robert, S., Brewer, T.: *blastFoam Theory and User Guide*, Version 4.0.0. Synthetik Applied Technologies, 6. November 2020.
- /SYN 21/ Heylmun, J., Vonk, P., Brewer, T., Shields, B.: *blastFoam Theory and User Guide*, Version 5.0. Hrsg.: Synthetik Applied Technologies, 154 S., 6. Oktober 2021.
- /UNI 08/ Unified Facilities Criteria: Structures to resist the effects of accidental explosions. U.S. Army Corps of Engineers, Naval Facilities Engineering Command, UFC 3-340-02, 1943 S., 2008.

- /UNI 15/ United Nations: International ammunition technical guideline, Formulae for ammunition management. United Nations Office for Disarmament Affairs (UNODA), IATG 01.80, 25 S., 2015.
- /WAL 08/ Walter, H.: Handling "Dirty Bomb" Szenarios with the Lagrangian Particle Model LASAIR. Präsentation, Bundesamt für Strahlenschutz (BfS), 12 th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes: Cavtat, Croatia, 2008.
- /ZHA 01/ Zhang, F., Frost, D. L., Thibault, P. A., Murray, S. B.: Explosive dispersal of solid particles. Shock Waves, Bd. 10, Nr. 6, S. 431–443, DOI 10.1007/PL00004050, 2001.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	Zeitlicher Druckwellenverlauf einer idealen Detonation (sog. Friedlander-Wellenform) /NGO 07/	8
Abb. 3.2	Schematische Darstellung entstehender Druckwellen beim „air burst“ (links) und dem „surface burst“ (rechts). Die gestrichelten Linien stellen die reflektierte Welle dar /REM 07/	11
Abb. 3.3	Überdruck für TNT, bei Variation der Dichte der Detonationsprodukte /MAS 17/.	15
Abb. 3.4	Schematische Darstellung der verschiedenen Kräfte, welche auf ein Partikel einwirken, welches sich in einem fluiden oder gasförmigen Medium bewegt. Die eingezeichneten Vektoren gelten für Partikel mit höherer Dichte als das umgebende Medium, /OKA 19/. Die Widerstandskraft wirkt hier horizontal.	24
Abb. 3.5	Einzelbilder aus einer Hochgeschwindigkeits-Videoaufzeichnung der explosiven Ausbreitung von Siliciumcarbid-Partikeln. Die Zeiten der Bilder sind a=140 μ s, b=300 μ s, c=1780 μ s, d=5980 μ s.	27
Abb. 4.1	Schematische Darstellung der verschiedenen Phasen einer Detonation in blastFoam /BRE 20/	35
Abb. 5.1	Sprengladung mit aufgelegtem Farbpulverbeutel /GRS 04/.....	42
Abb. 5.2	Detonationswolke für 2 kg PETN zum Zeitpunkt der Detonation (0 s) und nach 5 s /GRS 04/. Zu Beginn der Detonation wird das aufliegende Farbpulver in die Luft geschleudert. Anschließend breitet sich die Wolke aus, und Sprenggase und Partikel sind nicht mehr voneinander zu trennen.	43
Abb. 5.3	Schematische Abbildung der Modellgeometrie (Schwarz: Boden, Rot: Symmetrie, Grau: Outlet).....	45
Abb. 6.1	Interpolation von Wolkendurchmesser und Wolkenhöhe. Die Funktionen der eingezeichneten Trendlinien sind in den Formeln (6.1) und (6.2) dargestellt.....	53
Abb. 6.2	Anordnung von Sprengstoff und Farbpulver in „Symmetrie-Ecke“ des Modells bei (0, 0, 0).....	57
Abb. 6.3	Die für die Simulationen mit dem Solver <i>blastEulerFoam</i> verwendete Geometrie entspricht einem Zylindersektor.....	66
Abb. 6.4	Die Regionen, in welchen zu Beginn der Simulation der Sprengstoff (schwarz) und das Farbpulver (dunkelgrau) vorliegen. Im hellgrauen Bereich befindet sich zunächst ausschließlich Luft.	66

Abb. 6.5	Druckverteilung zum Zeitpunkt der Detonation (links) und zum Zeitpunkt, zu welchem die Druckwelle den Boden erreicht (rechts) beim Solver <i>blastFoam</i> . Der Druck ist in $\text{kg m} / \text{s}^2$ angegeben. Auf den Achsen sind die Größen in Metern angegeben.....	75
Abb. 6.6	Ausbreitung der Druckwelle beim Solver <i>blastFoam</i> im kleinen Modell. Der Druck ist in $\text{kg m} / \text{s}^2$ angegeben. Auf den Achsen sind die Größen in Metern angegeben.	75
Abb. 6.7	Ausbreitung des Geschwindigkeitsfeldes beim Solver <i>blastFoam</i> im kleinen Modell. Auf den Achsen sind die Größen in Metern angegeben, Geschwindigkeiten beziehen sich auf Meter pro Sekunde.	76
Abb. 6.8	Ausbreitung der Druckwelle beim Solver <i>blastFoam</i> im großen Modell. Der Druck ist in $\text{kg m} / \text{s}^2$ angegeben. Auf den Achsen sind die Größen in Metern angegeben.	77
Abb. 6.9	Auf dem Boden der Geometrie ist die Verteilung des Sprengstoffs dargestellt. Darüber sind nur die injizierten Teilchen sichtbar, wie sie sich in den in Abb. 6.6 und Abb. 6.7 dargestellten physikalischen Feldern in die Höhe bewegen.	79
Abb. 6.10	Partikelverteilung zu Beginn der Simulation im kleinen Modell.....	79
Abb. 6.11	Entwicklung der Partikelwolke in den ersten 10 Sekunden.....	80
Abb. 6.12	Verteilung des Farbpulvers (<i>tracer</i>) innerhalb des kleinen Modells (Ausschnitt x : 0-1 m, z : 0-2 m) über den kompletten Simulationszeitraum von 10 s	81
Abb. 6.13	Druck zum Zeitpunkt der Detonation (links) und zum Zeitpunkt, zu welchem die Druckwelle den Boden erreicht (rechts) für den Solver <i>blastEulerFoam</i> . Die beiden linken Bilder stellen den Druck in der Gasphase zu den Zeiten $1 \cdot 10^{-06}$ s und $8 \cdot 10^{-06}$ s dar. Im rechten Bild ist der Druck in der Partikelphase zum Zeitpunkt $8 \cdot 10^{-06}$ s dargestellt. Der Druck ist in $\text{kg m} / \text{s}^2$ angegeben (unterschiedliche Skalen). Dargestellt ist der Bereich x : 0-0,2 m und z : 0-0.2 m.	82
Abb. 6.14	Ausbreitung der Druckwelle beim Solver <i>blastEulerFoam</i> . Dargestellt ist der Bereich von $1 \text{ m} \cdot 1 \text{ m}$ in der x - z -Ebene. Der Druck ist in $\text{kg m} / \text{s}^2$ angegeben.	83
Abb. 6.15	Ausbreitung des Geschwindigkeitsfeldes beim Solver <i>blastEulerFoam</i> . Dargestellt ist der Bereich von $1 \text{ m} \cdot 1 \text{ m}$ in der x - z -Ebene. Der Druck ist in $\text{kg m} / \text{s}^2$ angegeben.	84

Abb. 6.16	Ausbreitung der Druckwelle beim Solver <i>blastEulerFoam</i> in der gesamten Geometrie (50 m * 50 m in der x-z-Ebene). Der Druck ist in kg m / s ² (unterschiedliche Skalen) angegeben. Auf den Achsen sind die Größen in Metern angegeben.....	85
Abb. 6.17	Farbpulververteilung innerhalb der ersten 0,1 ms nach der Detonation. Die logarithmische Skala gibt den Volumenanteil der Teilchen wieder. Dargestellt ist der Bereich von 1 m * 1 m in der x-z-Ebene.....	86
Abb. 6.18	Farbpulververteilung bis 1 s in der gesamte Geometrie (50 m * 50 m in der x-z-Ebene), <i>blastEulerFoam</i> . Auf den Achsen sind die Größen in Metern angegeben.	87
Abb. 6.19	Verteilung des Sprengstoffs bis 1 s in der gesamten Geometrie (50 m * 50 m in der x-z-Ebene), <i>blastEulerFoam</i> . Auf den Achsen sind die Größen in Metern angegeben.....	88
Abb. 6.20	Verteilung der Partikelphase und des Sprengstoffs bei 2 s und 5 s in der gesamten Geometrie (50 m * 50 m in der x-z-Ebene), <i>blastEulerFoam</i> . Auf den Achsen sind die Größen in Metern angegeben.	89

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Beispielhafte Parameter für die JWL-Zustandsgleichung /MAS 17/.....	14
Tab. 3.2	Potenzielle radiologische Schadstoffe für den Einsatz in einer schmutzigen Bombe /AND 08/	17
Tab. 5.1	Sprengversuche aus /GRS 04/	42
Tab. 6.1	Gitterdimensionen (umgesetzt über Einträge im <i>blockMeshDict</i>)	55
Tab. 6.2	Räumliche Vorgaben für Sprengstoff und Farbbeutel (vgl. Abschnitt 0)	57
Tab. 6.3	Gitterdimensionen (umgesetzt über Einträge im <i>blockMeshDict</i>)	67
Tab. 6.4	Parallelisierung und Rechenzeiten der durchgeführten Simulationen. Die Gittergrößen repräsentieren das mit <i>blockMesh</i> erzeugte Gitter. Die mithilfe von <i>setRefinedFields</i> (vgl. Abschnitte 6.2.1 und 6.2.2) durchgeführten Gitterverfeinerungen sind in den Zahlen nicht berücksichtigt, verändern das Gitter jedoch nur in einem kleinen Bereich um wenige 100 bis 1000 Gitterzellen.....	93

Abkürzungsverzeichnis

AMR	Adaptive Mesh Refinement
AP	Arbeitspaket
ARGOS	Accident Reporting and Guiding Operational System
CFD	Computational Fluid Dynamics
DDT	Deflagration zu Detonation
DMA	Dynamic Mesh Adaptation
EOS	Equation of State
FEM	Finite Elemente Methode
GUI	Graphical User Interface
HLLC	Harten Lax-van Leer-Contact
JWL	Jones-Wilkins-Lee
LES	Large Eddy Simulation
MCREXS	Multi-Cloud Radiological Explosive Source
PETN	Pentaerythryltetranitrat
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
RDD	Radiological Dispersal Device
SEWD	Sonstige Einwirkungen Dritter
TNT	Trinitrotoluol
USBV	Unkonventionelle Spreng- und Brandvorrichtung

**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