

Prädiktive Einschätzungen bestmöglicher
Modellkalibrierungen und Datenerhebungen
auf Basis kerntechnischer Experimente

Zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Ingenieurwissenschaften

der Fakultät für Maschinenbau
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

genehmigte

Dissertation

von

Dipl.-Ing. Erkan Arslan

Tag der mündlichen Prüfung: 7. November 2011

Hauptreferent: o. Prof. Dr. rer. nat. Dr. h. c. mult. D.G. Cacuci

Korreferent: Prof. Dr. A. Bayer

Korreferent: Prof. Dr. G.F. Schultheiß

„Alle Probleme sind letztendlich wissenschaftliche Probleme“

G.B. Shaw 1856 - 1950

Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit basiert auf einer allgemeinen mathematischen Methode nach [[Cacuci und Ionescu- Bujor, 2010b](#)] für simultane Kalibrierungs- und Assimilierungsprozesse durch beständige experimentelle Daten, die im Rahmen dieser Arbeit unverändert übernommen wird. Die Resultate dieser Methode werden als bestmögliche Einschätzungen der Parameter und Antworten bezeichnet. Die Verwendung der Methode gewährleistet, dass diese bestmöglichen Einschätzungen reduzierte Unsicherheiten besitzen, d.h. sowohl der Unsicherheiten in den Systemparametern als auch in den Systemantworten. Die Übereinstimmungen zwischen den numerischen Berechnungen und den zugehörigen Messaufzeichnungen werden simultan für alle Parameter und Antworten herbeigeführt. Auch die Verarbeitung der Korrelationen zwischen den Parametern und Antworten wird parallel gehandhabt. Die simultane Kalibrierung erfolgt dabei über das gesamte Berechnungsintervall.

Die überragenden Eigenschaften dieser Methode sind erstmals durch [[Petruzzi et. al, 2010](#)] nachgewiesen worden. Durch seine Ausarbeitung konnte gezeigt werden, dass die Methode für eine Untersuchungen einer kerntechnischen Anlagen, welche als Arbeitsmittel ideales Gas beinhaltet, bestmögliche Einschätzungen für die Systemparameter, Systemantworten und den Korrelationen zwischen den Systemparametern- und Systemantworten ergab. Dabei sind signifikante Reduzierungen in den Unsicherheiten der bestmöglichen Einschätzungen erzielt worden.

Aus den Untersuchungen von [[Petruzzi et. al, 2010](#)] resultiert das Ziel für diese Arbeit, die mathematische Methode erstmals für Experimente anzuwenden, die zum einen durch reale Betriebsbedingungen und zum anderen durch Arbeitsmittel charakterisiert sind, welche gängiger für kerntechnische Einrichtungen sind. Hierzu wird Wasser/ Wasserdampf und flüssiges Natrium ausgewählt. Diese Analyse stellt somit eine Neuheit dar, die bis heute noch nicht durchgeführt worden ist. Als weiteres Forschungsvorhaben ergibt sich das Ziel die Anwendbarkeit und den Fortschritt der Methode sowohl für die ausgewählten Beispielsysteme, als auch für die verwendeten Rechenprogramme der Strömungssimulation zu untersuchen.

Der Nachweis der Eignung dieser Methode für derartige Experimente wird in dieser Arbeit an Hand dreier Systeme geführt. Die erste Durchführung (i) beschreibt ein Experiment („BWR Full- Size Fine- Mesh Bundle Tests; „BFBT“), das durch die OECD/ NRC in Japan durchgeführt worden ist. Die Messergebnisse des BFBT

Benchmarks werden für eine Datenanpassung und Modellkalibrierung der Rechenprogramme FLICA4 und ANSYS CFX verwendet. Die Berechnungen beziehen sich auf axial transiente Dampfblasenverteilungen. Die Ergebnisse der Kalibrierungsprozesse zeigen auf, dass unter der Verwendung dieser beständigen experimentellen Daten deutliche Anpassungen der Systemantworten und Reduzierungen der Unsicherheiten folgen.

Die Analyse turbulenter Auftriebsstrahlen in Natriumströmungen (ii) für die Kalibrierung des Rechenprogramms ANSYS CFX wird in dieser Arbeit mittels dem TEFLU (Temperatur Fluktuationen) Experiment durchgeführt. Die Messaufzeichnungen hierfür sind im Forschungszentrum Karlsruhe (heute Campus Nord des Karlsruher Instituts für Technologie) erfolgt. Die Messdaten für die Geschwindigkeits- und Temperaturverteilungen drei unterschiedlicher Auslegungsfälle werden für die Gegenüberstellungen der CFX Berechnungen verwendet. Die Ursache der dabei ermittelten Differenzen ist auf die verwendeten Parameter und Modellierungsgrößen zurückzuführen. Die Kalibrierung und Assimilierung anhand der TEFLU Daten weist nur für die Geschwindigkeitsverteilungen Erfolge auf. Eine Verbesserung der Temperaturverteilung wird aufgrund der geringen Sensitivitäten durch das Wärmeübertragungsmodell von ANSYS CFX nicht gewährleistet.

Aus den offenen Fragen der TEFLU Untersuchung ergibt sich der Bedarf die mathematische Methode explizit für die Temperaturverteilungen in Natrium zu analysieren. Hierzu wird die TEGENA (Temperatur Geschwindigkeit Natrium) Testreihe (iii) verwendet. Die Erfassung der experimentellen Daten sind im Kernforschungszentrum Karlsruhe (heute Campus Nord des Karlsruher Instituts für Technologie) erfolgt. Diese beschreibt detailliert die Temperaturverteilung von flüssigem Natrium in einem Brennstab Bündel mit vier Brennstäben. Für die Berechnungen mit ANSYS CFX werden zwei unterschiedliche Gitterstrukturen (ein hexagonales- und Tetraeder- Gitter) verwendet. Anhand dieser wird neben dem Vorhaben der prädiktiven Einschätzung für bestmögliche Resultate auch der Einfluss der Gittergeometrie untersucht. Mittels der mathematischen Methode wird für die TEGENA Testreihe eine Verbesserung der Systemantworten und eine deutliche Verringerung der Unsicherheiten erreicht. Auch die Gründe für den Teilerfolg aus dem TEFLU Experiment können mit der durchgeführten TEGENA Berechnung geklärt werden.

Die Anwendbarkeit und der Nachweis der Eignung der Methode nach [[Cacuci und Ionescu- Bujor, 2010b](#)] werden anhand der ausgewählten Beispielsysteme in dieser Arbeit erstmals bestätigt.

Die Kombination der Rechenprogramme, in Zusammenhang mit der Methode, stellen eine Neuheit für das Anwendungsgebiet der mathematischen Prozedur dar, die in dieser Arbeit nachgewiesen wird. Die ermittelten prädiktiven Einschätzungen stellen somit einen deutlichen Fortschritt in der Assimilierung der numerischen Berechnungen und Reduzierungen der Unsicherheiten in den Parametern für alle durchgeführten Analysen dar.

Die oftmals vorhandene Deckungsgleichheit zwischen den experimentellen Daten und den bestmöglichen Einschätzungen bilden eine Quantifizierbarkeit der Analysen.

Durch diese Arbeit wird die allgemeine Verwendbarkeit der Methode nach [[Cacuci und Ionescu- Bujor, 2010b](#)] bestätigt und bietet die Möglichkeit die Methode in verschiedenen wissenschaftlichen und industriellen Bereichen anzuwenden.

Abstract

In the present work a general mathematical method [[Cacuci an Ionescu-Bujor, 2010b](#)] for simultaneous calibration and assimilation through consistent experimental data is highlighted. In this work the method has been adopted unchanged. The results of this method are identified as the best- estimations of the parameters and responses. At the same time the method ensures that the best estimates have reduced uncertainties, i.e. both the uncertainties in the system parameters as well as in the system responses. The agreement between the numerical calculations and the corresponding measurement data are induced simultaneously for all parameters and responses. The processing of the correlations between parameters and responses will be handled simultaneously, too. The calibration is performed over the entire interval calculation.

The outstanding characteristics of this method have been demonstrated for the first time by [[Petruzzi et. al, 2010](#)]. He showed that the method for studies of nuclear facilities, which include ideal gas as coolant, provides best- estimated results for system parameters, system responses and the correlations between the system parameters and system responses, with significant reductions in the uncertainties of the best-estimated results.

The goal of the work is based on the results from the investigation by [[Petruzzi et. al, 2010](#)] for the validation of the mathematical method for experiments, which are both characterized by real operating conditions and by common coolants for nuclear facilities. For this, water / water vapor and liquid sodium has been selected. This analysis represents a novelty that has not yet been conducted to date. As a further research project is to analyze the applicability of the method and the progress both for the selected experiments, as well as for the computational fluid dynamics programs.

The suitability of this method has been tested for these experiments. The first (i) describes a large-scale system ("BWR Full-size Fine-mesh Bundle Tests," BFBT "), which has been carried out by the OECD / NRC in Japan. The results of BFBT benchmarks have been used for data assimilation and model calibration of the computer programs FLICA4 and ANSYS CFX. The calculations relate to the axial transient void distribution. The results of the calibration process could reveal under constant use of consistent experimental data, significant adjustments to the system responses and reduction of uncertainties follows.

The analysis and calibration of the computer code ANSYS CFX for turbulent sodium buoyant jets (ii) has been carried out by using the TEFLU (Temperature Fluctuations) Experiment. The records for this measurement has have been carried out at the Forschungszentrum Karlsruhe (Campus North of the Karlsruhe Institute of Technology). The measuring data for the velocity and temperature distributions of three different design cases have been used for the comparisons of the CFX calculations. The cause of the differences determined thereby could be attributed to the used parameters in modeling and sizes. The calibration and data assimilation using the TEFLU Experiment effect successes only for the velocity distributions. An improvement for the temperature distribution is not guaranteed due to the low sensitivity of the heat transfer model of ANSYS CFX

The open questions from the TEFLU investigation shows the requirments for further analyze of the mathematical method for detailed temperature distributions in sodium. For this reason the TEGENA Experiment (iii) has been used (temperature, speed sodium). The record of the experimental data has been carried out at the Nuclear Research Center Karlsruhe (the North Campus North of the Karlsruhe Institute of Technology). The Experiments describes in detail the temperature distribution of liquid sodium in a fuel rod bundle with four fuel rods. For the calculations with ANSYS CFX two different mesh structures (a hexagonal and tetrahedral grid) have been used. The influence of the mesh design has been analyzed in addition to the calculations of the predicitive best-estimated results. The improvement of the system parameters and responses and a significant reduction of uncertainties have been achieved for the TEGENA analyze by using the presentd mathematical method. The reasons for the partial success of the TEFLU experiment has been clarified with the TEGENA calculations.

The applicability and suitability of the method by [[Cacuci an Ionescu-Bujor, 2010b](#)] for selected experimental examples has been confirmed in this study. Also the combination of the computer programs in connection with the method provides a new research area for the mathematical procedure that has beend demonstrated in this work. The calculated predictive best-estimated results represent a significant progress in the assimilation of the numerical calculations and a reduction of the uncertainties in the parameters for all analyzes which has been carried out. The often existing congruence between the experimental data and best estimated values provide a quantifiable analysis.

Through this work, the general applicability of the mathematical method by [[Cacuci and Ionescu-Bujor, 2010b](#)] has been confirmed and offers the possibility to use the presented mathematical method for various scientific and industrial fields.

Vorwort

Diese Arbeit entstand während meines Werdegangs zur Erlangung des Doktorgrades am Institut für Kerntechnik und Reaktorsicherheit (IKR) des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT).

Mein Dank gilt vor allem Herrn o. Prof. Dr. rer. nat. Dr. h. c. mult. D. G. Cacuci, dem Leiter des Instituts für Kerntechnik und Reaktorsicherheit, für seine zielgerichtete Betreuung sowie seinen Unterstützungen und Anregungen, die mir während der gesamten Promotionszeit eine große Hilfe waren. Weiterhin möchte ich mich bei Ihm für jene Einblicke bedanken, die ich durch seine Hilfe erlangen konnte.

Herrn Prof. Dr. A. Bayer danke ich für die Übernahme des Korreferats und für die Durchsicht dieser Arbeit.

Auch bei Herrn Prof. Dr. G. F. Schultheiß möchte ich mich für die Übernahme des zweiten Korreferats und der Durchsicht dieser Arbeit recht herzlichen bedanken.

Für das Gelingen dieser Dissertation möchte ich mich für die fachlichen und produktiven Unterstützungen bei meinen Kollegen des Instituts für Kerntechnik und Reaktorsicherheit (IKR Campus Süd, Deutschland), dem Imperial College London (IC, Großbritannien) sowie den Mitarbeitern der Commissariat à l'énergie atomique, (CEA, Frankreich) bedanken.

Weiterhin gebührt mein Dank den Herren B. Neykov, F. Aydogan, L. Hochreiter, K. Ivanov (PSU, USA), H. Utsuno, F. Kasahara (JNES, Japan), E. Sartori (OECD/NEA), M. Martin (CEA, Frankreich), J.U. Knebel (KIT Campus Nord, Deutschland) und R. Moeller (KIT Campus Nord, Deutschland) für ihre durchgeführten Arbeiten und der Bereitstellung der experimentellen Daten.

Karlsruhe, Juli 2011

Erkan Arslan

Erkan Arslan

Eigenständigkeitserklärung:

Ich erkläre hiermit, die vorliegende Arbeit selbständig angefertigt zu haben. Es wurden dabei keine unerlaubten Hilfsmittel verwendet. Wortlaute oder dem Sinne aus anderen Werken entnommenen Inhalte sind durch die angegebenen Quellen verdeutlicht.

Karlsruhe 01.07.2011

Erkan Arslan

Erkan Arslan

1. EINLEITUNG.....	1
1.1 STAND DER FORSCHUNG	2
1.2 ZIELSETZUNG UND MOTIVATION	5
2. KONSISTENTE EXPERIMENTELLE DATENANPASSUNG UND MODELLKALIBRIERUNG DURCH GEEIGNETE MATHEMATISCHE FORMALISMEN.....	8
2.1 ZEITABHÄNGIGE DATENERHEBUNG UND MODELLKALIBRIERUNG	8
2.2 DAS DATEN KONSISTENZ- UND QUALITÄTSKRITERIUM.....	24
3. EXPERIMENTELLE DATENASSIMILIERUNG UND MODELLKALIBRIERUNG	31
3.1 DATENANPASSUNG UND MODELLKALIBRIERUNG DER RECHENPROGRAMME FLICA4 UND ANSYS CFX DURCH DIE DATEN AUS DEM NUPEC BFBT EXPERIMENT.....	31
3.1.1 <i>Die Beschreibung der „BWR Full- Size Fine mesh Bundle“ Test Anlage.....</i>	32
3.1.1.1 Die Versuchsanlage	33
3.1.1.2 Das BFBT- Testbündel	34
3.1.1.3 Methoden zur Messung der Dampfblasenverteilung	36
3.1.1.4 Beschreibung des Testfalls „Pump Trip“	38
3.1.2 <i>Bestmögliche Modellkalibrierung durch die Verwendung der thermohydraulischen Rechenprogramme FLICA 4 sowie ANSYS CFX und der Datenassimilierung durch die experimentellen Messungen des BFBT Benchmarks.....</i>	39
3.1.2.1 Die BFBT Simulation durch das FLICA4 Code System	40
3.1.2.1.1 Bestmögliche transiente axiale Dampfblasenverteilungen mit FLICA4	40
3.1.2.1.2 Die Kalibrierung des Massenstroms, der Heizleistung und des Auslassdrucks als prägnante Parameter für die axiale Dampfblasenverteilung	50
3.1.2.2 Die BFBT Simulation durch ANSYS CFX.....	58
3.1.2.2.1 Bestmögliche transiente axiale Dampfblasenverteilungen mit ANSYS CFX	59
3.1.2.2.2 Die Kalibrierung des Massenstroms, der Heizleistung und des Auslassdrucks als prägnanter Parameter für die axiale Dampfblasenverteilung mit ANSYS CFX	63
3.2 DATENANPASSUNG UND MODELLKALIBRIERUNG DES CFD CODES ANSYS CFX DURCH DIE EXPERIMENTELLEN DATEN AUS DER TEFLU TESTSTRECKE	66
3.2.1 <i>Die Beschreibung der TEFLU Teststrecke.....</i>	66
3.2.1.1 Die TEFLU Versuchsanlage.....	67
3.2.1.2 Die TEFLU Teststrecke.....	68
3.2.1.3 Beschreibung der Testfälle.....	68
3.2.2 <i>Bestmögliche Modellkalibrierung durch die Verwendung des thermohydraulischen Rechencodes ANSYS CFX und der Datenassimilierung durch die experimentellen Messwerte aus der TEFLU Teststrecke</i>	69
3.2.2.1 Die Simulation der TEFLU Teststrecke mit ANSYS CFX	70
3.2.2.2 Bestmögliche Geschwindigkeits- und Temperaturverteilungen mit ANSYS CFX	70
3.3 DATENANPASSUNG UND MODELLKALIBRIERUNG DES THERMOHYDRAULISCHEN CODES ANSYS CFX DURCH DIE EXPERIMENTELLEN DATEN AUS DER TEGENA TESTREIHE	100
3.3.1 <i>Die Beschreibung der TEGENA (Temperatur- Geschwindigkeit- Natrium) Teststrecke</i>	101
3.3.1.1 Methoden zur Messung der detaillierten Temperaturverteilung.....	102
3.3.1.1.1 Beschreibung der Testfälle	104
3.3.2 <i>Bestmögliche Modellkalibrierung durch die Verwendung des Rechencodes ANSYS CFX und der Datenassimilierung durch die experimentellen Auswertungen aus der TEGENA Testreihe.....</i>	107
3.3.2.1 Die Simulation der TEGENA Teststrecke mit ANSYS CFX.....	107
3.3.2.1.1 Die TEGENA 1 CFX- Berechnungen.....	108
3.3.2.1.2 Die TEGENA 2 CFX- Berechnungen.....	112
3.3.2.2 Bestmögliche Einschätzungen der detaillierte Temperaturverteilungen.....	120
4. ZUSAMMENFASSUNG DER ERGEBNISSE	146
5. SCHLUSSFOLGERUNG UND AUSBLICK.....	149

NOMENKLATUR.....	151
AKRONYME / ABKÜRZUNGEN	156
LITERATURVERZEICHNIS	158
ABBILDUNGSVERZEICHNIS	162
TABELLENVERZEICHNIS	167
A. ZEITUNABHÄNGIGE DATENASSIMILIERUNG UND MODELLKALIBRIERUNG	168
B. ERHALTUNGSGLEICHUNGEN UND TURBULENZMODELLIERUNGEN	177
C. FLUSSDIAGRAMME	190

1. Einleitung

Die Analyse der Verhaltensmerkmale und Charakteristiken natürlicher und technischer Prozesse erfordert eine Vielzahl an qualitativen und quantitativen Modellen und Gesetzmäßigkeiten. Die Zusammenhänge aller interagierenden Größen sind in der Regel sehr komplex und benötigen intensive Untersuchungen zur Erzielung genauer Erkenntnisse. Ein derartig umfangreiches System ist z.B. ein Kernkraftwerk. Jeder Bereich dieser Großanlage erfordert eine sehr hohe Anzahl an Paradigmen, die zuverlässige Wiedergaben der physikalischen Phänomene ermöglichen. Nachbildungen dieser physikalischen Systeme durch experimentelle oder numerische Modelle dienen der Erzeugung von Kenntnissen für zukünftige Bewertungen der verwendeten Modelle. Die Fragestellungen, die sich bei der Verwendung von CFD („computational fluid dynamics“) Technologien zur Modellierung ergeben, beziehen sich auf die Anwendbarkeit, Richtigkeit und Übertragbarkeit. In der Regel koinzidieren die experimentellen Messergebnisse und computerunterstützten Berechnungen selten miteinander. Die Ursprünge dieser Diskrepanzen sind zum einen Fehler der experimentellen Messungen und zum anderen die verwendeten mathematischen Modelle. Letztere dienen zur Beschreibung der physikalischen Prozesse und sind mit unvermeidlichen Fehlern und Unsicherheiten behaftet. Oftmals beziehen sich die Parameter der Modelle auf empirische, nicht exakte, oder sogenannte Standardwerte. In Folge dessen ist die Möglichkeit einer Erhaltung zufriedenstellender Ergebnisse, unter der Berücksichtigung der erwähnten Einflüsse, selten möglich. Zusätzlich erschweren die unterschiedlichen Konzeptionen die Systemwiedergabe und bilden eine weitere Ursache für die Abweichungen. Auch Kombinationen von Teilergebnissen, oder Resultaten unterschiedlicher Quellen, beinhalten Unsicherheiten die zu diversen Fehlerausbreitungen führen. Die Daten der einzelnen Bereiche können dabei oftmals unvollständig, fehlerhaft bzw. fehlerbehaftet oder widersprüchlich zueinander sein.

Das Ziel der prädiktiven Einschätzung, das in dieser Arbeit angestrebt wird, ist es bestmögliche Ergebnisse für die Systemparameter und Systemantworten bei simultaner Ermittlung reduzierter Unsicherheiten zu erhalten. Die Generierung der probabilistischen Endergebnisse erfolgt unter Berücksichtigung und Miteinbeziehung aller erfassten Fehler und Unsicherheiten. Eine derartige Beurteilung ist nach [[Cacuci und Ionescu- Bujor, 2010](#)] durch die Merkmale der Modellkalibrierung, der Modellextapolation und letztendlich durch die Einschätzung der validierten Ergebnisse gekennzeichnet. Für die Modellkalibrierung gilt es dabei bestmögliche

Systemparameter zu erhalten, welche unerlässlich für eine optimale Beschreibung der vorliegenden physikalischen Prozesse oder Messaufzeichnungen sind um eine Übereinstimmung zwischen den Berechnungen und Experimenten zu bewirken. Der Grad der Deckungsgleichheit wird dabei als Modellgüte bezeichnet. Entscheidend für den Kalibrierungsprozess ist die Einschließung von Unsicherheiten, Diskretisierungsfehlern, Diskrepanzen zwischen experimentellen und Modellprognosen sowie physikalische Unsicherheiten in den modellierten Prozessen. Die Extrapolation der Modelle ist eine Vorwegnahme möglicher Unsicherheiten in den ausgedehnten Analysebereichen mittels ungeprüfter Parametereignung. Validierungsvorhaben mit Modellextrapolationen sind aufgrund ihrer erweiterten Betrachtung deutlich komplexer.

Die Anforderungen für realistische und zufriedenstellende Resultate für vorliegende physikalische Phänomene werden immer größer und heben die Bedeutung der Validierungs- und Kalibrierungsvorhaben von computerunterstützten Programmen kerntechnischer Großanlagen hervor.

1.1 Stand der Forschung

Ein weitgehend ausgedehnter Forschungsbereich, in dem Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen verbreitet eingesetzt werden, ist die Meteorologie, Klimaforschung, Ozeanologie sowie der Natur- und Umweltschutz. Weitere Forschungsgebiete sind die Kern- und Medizintechnik. Die Beschreibung dieser Gebiete wird grundlegend von mehreren und in der Regel stark zusammenhängenden Parametern bestimmt. Dadurch ist für eine erfolgreiche Validierung und Kalibrierung die Verwendung ganzer Parametersätze unabdingbar. Die Spezifikation der verwendeten mathematischen Modelle ist gekennzeichnet durch Variable, die eine Abhängigkeit oder Unabhängigkeit besitzen können. Auch eine Beziehung beider untereinander ist möglich und in Betracht zu ziehen [[Cacuci, 2003](#)]. Modifikationen dieser Variablen mit unterschiedlichen Wertigkeiten führen letztendlich zu abweichenden Modellergebnissen. Die Größe der Abweichung wird nach [[McCuen, 1973](#)] als Grad der Sensitivität bezeichnet. Je größer dabei die Differenz ist, desto stärker bzw. empfindlicher ist der Parameter. Weiterhin können die Modelle Variable aufweisen, die unverständlich sind und zu Kuriositäten führen. Sensitivitätsanalysen ermöglichen somit Aussagen zu treffen, welchen entscheidenden Parametern besonders große Aufmerksamkeit zu schenken sind [[Anderson & Burt, 1985](#)]. Gleichzeitig ermöglicht die Sensitivitätsanalyse eine Reduzierung der zu kalibrierenden Parameter. Durch die Vorabuntersuchungen

können die Parameter mit minimalen, d.h. nahezu ohne Veränderungen als „unempfindliche“ Parameter eingestuft werden [Janesen und Heuberger, 1995]. In Folge dessen werden derartige Parameter mit konstanten Werten festgelegt und für nachfolgende Kalibrierungsprozesse außer Betracht gelassen. Die Nutzung der Sensitivitätsanalyse hat somit nicht nur den Vorteil bei bestimmten Parametern, die nur schwer oder mit Vorsicht abzuschätzen sind [Anderson & Burt, 1995] eine Art Abhilfe zu ermöglichen, sondern bietet auch die Fähigkeit ein besseres Modellverständnis und Verhaltensbewusstsein zu erlangen [Schröder, 2000].

Der mathematische Formalismus nach [Cacuci und Ionescu-Bujor, 2010b] stellt eine umfassende Möglichkeit dar, prädiktive bestmögliche Beurteilungen zu erhalten. Die Resultate werden durch Anpassungen an die experimentelle Daten und der simultanen Kalibrierung der Systemparameter für nichtlineare, zeitabhängige Systeme verbessert. Die Klassifizierung der verwendeten Parameter erfolgt allerdings in einer Trennung zwischen Lokalität und Globalität [Cacuci, 2003], denn die Sensitivitätsanalyse kann lokal oder global erfolgen. Welcher Ansatz verfolgt wird hängt stark vom Interesse bzw. dem Anwendungsfall ab und wirkt sich signifikant auf den Arbeitsaufwand und gleichzeitig der Komplexität aus. Die wohl gängigste und einfachste Sensitivitätsanalyse ist die so genannte „Factor Perturbation“ oder „eindimensionale Sensitivitätsanalyse“. Nach [Lenhart & Eckert, 2002] wird dabei ein einzelner Parameter variiert und alle anderen konstant gehalten. Die Differenz zum nominalen Wert gibt dabei den Grad der Sensitivität an, als sogenannter „Sensitivitätsgrad“. Der wesentliche Vorteil dieser Methode liegt in seiner Einfachheit. Diese nimmt allerdings mit erhöhter Parameteranzahl rapide ab, da jede Größe einzeln betrachtet werden muss [Lenhart & Eckert, 2002]. Ein weiterer Nachteil dieser Methode ist, dass die Interaktionen der verwendeten Modellparameter in Einzelbetrachtung erfolgt. Die Korrelationen zwischen den Parametern und Antworten hängen jedoch oftmals parallel und nicht linear miteinander zusammen. Nach [Cacuci D.G, Ionescu-Bujor M. Navon I.M., 2005] ist diese Einschränkung auf den ersten Blick gravierender als sie tatsächlich ist, denn die Modellfehler können in ähnlicher Weise durch die Miteinbeziehung der Diskretisierungsintervalle in den Vektoren der Modellparameter berücksichtigt werden. Die Nichtlinearität zwischen den Systemantworten und den Parametern kann dabei iterativ erfolgen. Im ersten Schritt der Iteration werden die wichtigen Berechnungen mit den Nominalwerten durchgeführt und dienen als Vorinformationen. In einem zweiten Berechnungsschritt, nach [Cacuci und Ionescu-Bujor, 2010b] wird diese Wiederholung so lange durchgeführt, bis sich die bestmöglichen Einschätzungen nicht mehr ändern. Für die Verwendung der Methode nach [Cacuci und Ionescu-Bujor, 2010b] ist der aufwendigste, aber einflussreichste Teil, die Berechnung der Sensitivitäten. Denn diese haben weitreichenden Einfluss auf die bestmöglichen Werte der

Modellparameter, der Systemantworten und den daraus reduzierten Unsicherheiten. Für Untersuchungen mit einer hohen Parameteranzahl und der Verwendung der „eindimensionalen Sensitivitätsanalyse“ kann eine Abstrahierung durchgeführt werden. Dadurch wird zum einen der Berechnungsaufwand und zum anderen die Berechnungszeit reduziert. Nach [Cacuci D.G, Ionescu- Bujor M. Navon I.M., 2005] kann jedoch durch die Abbildung realer Modelle eine Übertragbarkeit nicht immer gewährleistet werden. Für Großanlagen ist, nach [Cacuci, 2003], die effizienteste Methode die Berechnung der Sensitivitäten durch die ASAP (Adjoint Sensitivity Analyze Prozedure). Die Vorgehensweise der Sensitivitätsanalysen für Modellauswertungen sind somit Quantifizierungen von Rechenergebnissen mit ausgesuchten Parametern und deren Nominal- bzw. variierten Werten.

Berechnungen mit ungünstig ausgewählten bzw. abgeschätzten Systemparametern sind in der Regel mit starken Unsicherheiten behaftet. Eine Gewährleistung von seriösen Vorhersagen, Beurteilungen oder Bewertungen kann nur durch die Minimierung von Unsicherheiten erfolgen. Mögliche Quellen der Unsicherheiten sind nach [Rykiel, 1996] und [Cacuci D.G, Ionescu- Bujor M. Navon I.M., 2005] sowohl in den experimentellen als auch in den numerischen Daten vorhanden. Die Wahrscheinlichkeit, dass die Unsicherheiten mit steigender Parameteranzahl wachsen, ist nach [De Roo, 1993] und [Refsgaard et al., 2007] sehr hoch. Dadurch spielt eine Klassifizierung von Parametern bzw. Parametersätzen für die Minimierung der Unsicherheiten eine entscheidende Rolle. Nach [Beven und Binley, 1992] muss die Begrenzung der Fehlerquellen, welche nahezu unvermeidbar und in fast allen Bereichen vorhanden sind, permanent erfolgen. Demnach sind Berechnungen mit weniger Parametern in ihren Ergebnissen sicherer, als jene mit erhöhter Parameterzahl. Nach [Beven und Binley, 1992] kann, unter der Berücksichtigung aller Fehlerquellen, innerhalb der Kalibrierungsprozedur kein globaler Parameterwert gefunden werden, der optimal für ein gesamtes Modell gültig ist. Jedoch kann durch die Einführung der „Equifinalität“ nach [Beven und Binley, 1992] anhand von verschiedenen Parameterwerten stets die gleiche Systemantwort folgen. Das Ziel der Unsicherheitsanalyse ist somit das Erfassen der Einflüsse der Unsicherheiten in den Parametern und den daraus resultierenden Ergebnissen.

Im Hinblick auf die Kerntechnik und Reaktorsicherheit kann die Verwendung dieser Methode überaus hilfreich und entscheidend sein. Die Zunahme einflussreicher Faktoren und Unsicherheiten, sowohl bei experimentellen Untersuchungen als auch bei Berechnungen, kann minimiert werden.

Die Eignung der ausgezeichneten Methode von [Cacuci und Ionescu- Bujor, 2010b] konnte in der Arbeit von [Petruzzi et al, 2010] nachgewiesen werden. Die verwendete

Methode, welche auch in der Lage ist eine Aussage bezüglich der Übereinstimmung zwischen der Assimilierung und den bestmöglich eingeschätzten Parametern sowie Antworten zu treffen, erweist sich als ein hervorragender Indikator. Die Berechnungen von [Petruzzi et al, 2010] für die Korrelation der Parameter, der Systemantworten und der Parameter- Systemantworten können als bestmögliche Einschätzungen betrachtet werden. Ein Außerachtlassen solcher essentieller mathematischer Methoden würde zu einer unvermeidlichen Zurückhaltung und Kosteneinsparung in der Reaktorentwicklung beitragen.

1.2 Zielsetzung und Motivation

Das Ziel dieser Arbeit ist es die mathematische Methode nach [Cacuci und Ionescu-Bujor, 2010b] unverändert für Beispielsysteme anzuwenden, die zum einen durch reale Betriebsbedingungen und zum anderen durch Arbeitsmittel charakterisiert sind, welche gängig für kerntechnische Einrichtungen sind. Dabei ist durch die Methode eine prädiktiv simultane Kalibrierung von Modellparametern und Systemantworten für die Beispielsysteme erzielbar. Die Reduzierung der enthaltenen Unsicherheiten und einer Anpassung an die experimentellen Messungen, mit dem Ziel die bestmöglich beurteilbaren Ergebnisse zu erhalten, erfolgt simultan. Die überragende Methode ist, neben vielen anderen auch, in der Lage nichtlineare und zeitabhängige Systeme zu berücksichtigen. Dadurch lassen sich für die Kerntechnik Informationen und Kenngrößen nicht nur verallgemeinern, sondern auch ausweiten, wie z.B. für extrapolierte Analysebereiche. Die Methode beinhaltet als weiteres Merkmal ein Konsistenz- und Qualitätskriterium, welches die Übereinstimmung bzw. die Abweichung zwischen den numerischen Berechnungen und den Messdaten wiedergibt.

Für eine Vielzahl von durchgeführten Untersuchungen, bezüglich der Verhaltensmerkmale und Charakteristiken nuklear thermohydraulischer Anlagen, entsprechen die Betriebsbedingungen nicht denen der Realbedingungen. Ein weiteres Problem besteht darin, dass oftmals Arbeitsmedien verwendet werden, die in der Praxis für Leistungsreaktoren nicht gängig sind. Die Lösungsvorschläge aus diesen durchgeführten Untersuchungen für Modellparameter und weiterer essentieller Größen, die oftmals als Standard- bzw. optimale Werte für die Rechenprogramme festgelegt werden, zeigen teilweise starke Unsicherheiten auf und führen zu nicht einheitlichen und oftmals widersprüchlichen Ergebnissen.

Dieser Tatbestand, für Realbedingungen und gängige kerntechnische Arbeitsmedien die bestmöglichen Einschätzungen der Systemparameter und Systemantworten nach der mathematischen Methode von [[Cacuci und Ionescu- Bujor, 2010b](#)] zu erhalten, wird in dieser Arbeit erstmals untersucht und stellt eine Neuheit dar. Gleichzeitig wird auch überprüft, inwieweit sich die verwendete Methode bewährt und zu Verbesserungen der numerischen Berechnungen führen kann. Als Arbeitsmedium werden Wasser/ Wasserdampf und flüssiges Natrium verwendet. Der Grund hierfür liegt darin, dass diese für thermische Reaktoren (Siede- und Druckwasserreaktoren) und schnelle natriumgekühlte Reaktoren (SNR) die praxisorientierten Kühlmittel sind. Für die bestmöglichen Einschätzungen bzw. der Assimilationen, sowie dem Vorhaben die enthaltenen Unsicherheiten zu reduzieren, werden in dieser Arbeit drei unterschiedliche Beispielsysteme verwendet.

- (i) Das BFBT Benchmark mit den experimentellen Daten der OECD/NRC für ein Bündelelement eines Siedewasserreaktors (SWR), das durch die Nuclear Power Engineering Corporation (NUPEC) in Japan durchgeführt worden ist.
- (ii) Das TEFLU Experiment für einen Auftriebsstrahl mit Natrium als Kühlmittel, das am Karlsruher Forschungszentrum (FZKA; heute Campus Nord) durchgeführt worden ist.
- (iii) Die TEGENA Testreihe, einer detaillierten Temperaturverteilung im Vierstabbündel mit einer Natriumkühlung, welches am Kernforschungszentrum Karlsruhe durchgeführt worden ist (KFK; heute Campus Nord)

Für eine Gewährleistung der Durchführbarkeit werden die Codes FLICA4 und ANSYS CFX vorab insoweit modifiziert und erweitert, dass Nachbildungen und Berechnungen der Teststrecken möglich sind. Insbesondere für die Natriumkühlung werden die verwendeten Programme angepasst und die notwendigen Stoffdaten aus der [[MAPLIB, 1977](#)] Datenbank eingelesen.

Die Methoden für eine Datenanpassung und simultane Kalibrierung der Systemparameter und Systemantworten für zeitabhängige Systeme werden in Kapitel 2 dieser Arbeit vorgestellt. Im gleichen Kapitel wird auch auf das Daten Konsistenz- und Qualitätskriterium eingegangen. Neben diesem Indikator werden auch Möglichkeiten erläutert, die bei inkonsistent wirkenden Daten eine bessere Beurteilung geben können. Die Gleichungen der zeitunabhängigen Datenanpassung und simultanen Kalibrierung sind im Anhang [[Anhang A. Zeitunabhängige Datenassimilierung und Modellkalibrierung](#)] dieser Arbeit aufgeführt.

Die Merkmale der BFBT Anlage und Teststrecke sind in Kapitel 3.1 dargestellt. Die numerischen Berechnungen für die axialen Dampfblasenverteilungen von (i) werden mit den Programmen FLICA4 [Filion et al, 2007], einem thermohydraulischen Codesystem der CEA (Commissariat a l'Energie Atomique, Frankreich), und ANSYS CFX 12.1 [ANSYS, 2011], einem weltweit bekannten und anerkannten CFD Code, durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen werden im zweiten Abschnitt von Kapitel 3.1 aufgezeigt. Die Ermittlung der bestmöglichen Einschätzungen, den so genannten „BESTEST“ Analysen, für (i) werden mit einem selbstentwickelten Programm und der Koppelung mit MATLAB [MATLAB, 2010b], einem mathematischen Rechenprogramm, verwirklicht.

Die Durchführung und Besonderheit der TEFLU (Temperatur- Fluktuationen) Teststrecke wird im Kapitel 3.2 vorgestellt. Im zweiten Teil von Abschnitt 3.2 werden die Ergebnisse für die Berechnungen mit ANSYS CFX erläutert. Im Zuge dieser Berechnungen wird das SAS SST Turbulenzmodell auf seine Anwendbarkeit untersucht. Die Auswahl der Systemparameter ist dabei zu klassifizieren. Anschließend werden die BESTEST Berechnungen anhand der experimentellen Werte, die sich auf die Geschwindigkeits- und Temperaturverteilungen beschränken, bewertet. Die Assimilierung an die experimentellen Daten und Reduzierung der beinhalteten Unsicherheiten nach der Methode von [Cacuci und Ionescu-Bujor, 2010b] für die untersuchten Auslegungsfälle der Auftriebsstrahlen werden im zweiten Abschnitt von Kapitel 3.2 beschrieben. Auch hier wird die Ermittlung der bestmöglichen Einschätzungen für (ii) mit einem selbstentwickelten Programm und der Koppelung mit MATLAB [MATLAB, 2010b] verwirklicht.

Die Berechnungen der detaillierten Temperaturverteilungen der TEGENA (Temperatur- Geschwindigkeit- Natrium) Testreihe mit ANSYS CFX und den BESTEST Berechnungen werden in Kapitel 3.3 dargestellt. Die durchgeführten TEGENA Berechnungen dienen in dieser Arbeit hauptsächlich dazu, um die resultierenden Fragen aus dem TEFLU Experiment zu beantworten und die Ursache für den partiellen Erfolg der TEFLU Analyse zu identifizieren. Im Zuge dieser Arbeit werden erstmals zwei unterschiedliche Gitterstrukturen für die Gleich- und Schiefplastversuche verwendet und bewertet. Die Auswahl der Systemparameter bezieht sich für diese Untersuchung auf das $k-\varepsilon$ Turbulenzmodell [Gülich J. F, 1999] und die Systemgrößen.

Im Abschnitt 4 folgt eine Zusammenfassung aller drei Berechnungen für eine systematische Kalibrierung der verwendeten Rechenmodelle mittels unterschiedlicher Kühlmittel. Die Schlussfolgerung sowie ein Ausblick für weitere Forschungstätigkeiten auf dem Gebiet der Kalibrierungsmodelle und ihren Erweiterungen sind in Kapitel 5 aufgeführt.

2. Konsistente experimentelle Datenanpassung und Modellkalibrierung durch geeignete Mathematische Formalismen

In diesem Kapitel wird die zeitabhängige Methode nach [[Cacuci und Ionescu-Bujor, 2010b](#)], mit der die prädiktive Berechnung bestmöglicher Ergebnisse durch die Interaktion von Messaufzeichnungen und numerischen Auswertungen für zeitabhängige Systeme, vorgestellt. Die Vereinigung des Bayes- Theorem und der Informationstheorie in dieser Methode gewährleisten Anpassungen an alle beständigen, experimentellen und numerischen Informationen, die mit Unsicherheiten behaftet sind. Dabei wird auch die Kalibrierung von bestmöglichen Modellparametern und Systemantworten mit reduzierten Unsicherheiten sichergestellt. Diese Methode beinhaltet auch noch einen Indikator, den so genannten Konsistenzen- Qualitätskriterium- Indikator, der in der Lage ist die Beständigkeit zwischen den Parametern und Systemantworten zu beurteilen. Die vollständigen zeitabhängigen Gleichungen der Methode werden in diesem Kapitel in Abschnitt eins vorgestellt. Die Erläuterung des Indikators als Konsistenzen- Qualitätskriterium erfolgt im zweiten Abschnitt dieses Kapitels. Die zeitunabhängigen Gleichungen sind im Anhang dieser Arbeit zu finden.

2.1 Zeitabhängige Datenerhebung und Modellkalibrierung

Die entwickelte Methode von [[Cacuci und Ionescu-Bujor, 2010b](#)] ermöglicht anhand einer durchgehenden Validierung das Ziel bestmögliche Systemantworten und Systemparameter mit reduzierten Unsicherheiten zu ermitteln. Berücksichtigt werden N_α^v Parameter und N_r^v Messungen für alle Zeitpunkte v , wobei für $v=1, \dots, N_t$ gilt. Die zeitliche Berücksichtigung obliegt auch den Vektoren α^v der Systemparameter J_α^v und den Vektoren r^v der Messungen J_r^v .

$$\alpha^v = \{\alpha_n^v \mid n = 1, \dots, N_\alpha^v\}, \quad r^v = \{r_i^v \mid i = 1, \dots, N_r^v\},$$
$$v = 1, \dots, N_t$$

(2.1)

Die Systemparameter werden dabei an jenen Zeitknoten v als Variablen mit ihren Durchschnittswerten $(\alpha_0)^v$ berücksichtigt. Die Korrelationen zwischen zwei Parametern α_i^v und α_j^μ , an zwei Zeitknoten μ und v , wird durch die allgemeine Gleichung (2.2) beschrieben.

$$C_{\alpha,ij}^{v\mu} \equiv \left\langle \left[\alpha_i^v - (\alpha_i^v)^0 \right] \left[\alpha_j^\mu - (\alpha_j^\mu)^0 \right] \right\rangle \quad (2.2)$$

Die Kovarianzen der Gleichung (2.2) bilden die Elemente der symmetrischen Kovarianzenmatrix in der Form

$$\begin{aligned} C_\alpha^{v\mu} &\triangleq \left\langle (\alpha - \alpha^0)^\mu \left[(\alpha - \alpha^0)^v \right]^\dagger \right\rangle \\ &= (C_\alpha^{\mu v})^\dagger = C_\alpha^{v\mu} = (C_\alpha^{v\mu})^\dagger \end{aligned} \quad (2.3)$$

Auch die gemessenen Daten, in der Regel aus experimentellen Untersuchungen, werden äquivalent wie die Systemparameter an einem Zeitknoten v durch gemittelte Werte charakterisiert. Im Fall von zwei Zeitknoten gilt auch hier, dass diese durch eine Kovarianzensymmetriematrix an den Zeitpunkten μ und v dargestellt werden.

$$\begin{aligned} C_m^{v\mu} &\triangleq \left\langle (r - r_m)^\mu \left[(r - r_m)^v \right]^\dagger \right\rangle \\ &= (C_m^{\mu v})^\dagger = C_m^{v\mu} = (C_m^{v\mu})^\dagger \end{aligned} \quad (2.4)$$

Die Beziehungen zwischen den Systemparametern und den gemessenen Werten können im Allgemeinen durch die symmetrische Systemantwort- Parameter Korrelationsunsicherheitenmatrix wiedergegeben werden.

$$\begin{aligned}
C_{r\alpha}^{\mu\nu} &= \left\langle (r - r_m)^\mu \left[(\alpha - \alpha^0)^\nu \right]^\dagger \right\rangle \\
&= (C_{r\alpha}^{\mu\nu})^\dagger = C_{r\alpha}^{\nu\mu} = (C_{r\alpha}^{\nu\mu})^\dagger
\end{aligned}
\tag{2.5}$$

Die Matrizen $C_{r\alpha}^{\mu\nu}$ sind dabei keine echten Varianzen - Kovarianzen Matrizen indem sie quadratisch positive Matrizen bilden ; ihre Form entspricht in der Regel einer Rechtecksmatrix. Die Elemente der Hauptdiagonalen, unter Annahme einer vorliegenden quadratischen Matrix, bilden weiterhin eher Kovarianzen oder Korrelationen als Varianzen. Zu einem gegebenen Zeitpunkt ν kann eine Systemantwort r_i^ν lediglich eine Funktion der Systemparameter zum Zeitpunkt ν aber auch zu den Systemparametern aller vorhergehenden Zeitpunkt μ , $1 \leq \mu \leq \nu$ sein. Dadurch ergibt sich für $r^\nu = R^\nu(p^\nu)$, wobei $p^\nu \triangleq (\alpha^1, \dots, \alpha^\mu, \dots, \alpha^\nu)$ ist. Im Allgemeinen wird die Antwort durch eine Modellabhängigkeit der Nichtlinearität und unter Einbezug der Modellparameter berechnet. Die Unsicherheiten in den Parametern und verwendeten Modellen erzeugen Unsicherheiten in den berechneten Antworten. Die Erfassung dieser Unsicherheiten können durch Methoden der statistischen Mittelung (für relativ einfache Modelle mit wenigen Parametern) oder durch deterministische Methoden durch die Verwendung von bekannten Fehlerausbreitungsmethoden [[Cacuci, 2003](#)] durchgeführt werden. In dieser Methode sind die berechneten Antworten anhand einer Taylorreihenentwicklung um den nominal Wert, $p_0^\nu \triangleq ((\alpha^0)^1, \dots, (\alpha^0)^\mu, \dots, (\alpha^0)^\nu)$ des Parameters p^ν linearisiert. Daraus folgt

$$\begin{aligned}
r^\nu &= R^\nu(p^\nu) \\
&= R^\nu(p_0^\nu) + \sum_{\mu=1}^{\nu} S^{\nu\mu}(p_0^\mu) \left[\alpha^\mu - (\alpha^0)^\mu \right] + \dots, \\
&\quad \nu = 1, \dots, N_t
\end{aligned}
\tag{2.6}$$

wobei $R^\nu(p_0^\nu)$ den Vektor der berechneten Antworten zum Zeitpunkt ν mittels den Nominal- Parameterwerten p_0^ν darstellt. $S^{\nu\mu}(p_0^\mu)$, ($1 \leq \mu \leq \nu$) stellt die $(J_r^\nu \times J_\alpha^\mu)$ Dimensionsmatrix dar und beinhaltet zugleich die erste Gateaux- Ableitung der berechneten Antworten in Bezug zu den Parametern.

$$S^{v\mu}(p_0^\mu) \triangleq \begin{pmatrix} S_{11}^{v\mu} & \dots & S_{1N}^{v\mu} \\ \vdots & & \vdots \\ S_{I1}^{v\mu} & \dots & S_{IN}^{v\mu} \end{pmatrix} \triangleq \begin{pmatrix} \frac{\partial R_1^v(p_0^\mu)}{\partial \alpha_1^\mu} & \dots & \frac{\partial R_1^v(p_0^\mu)}{\partial \alpha_N^\mu} \\ \vdots & \frac{\partial R_i^v}{\partial \alpha_1^\mu} & \vdots \\ \frac{\partial R_I^v(p_0^\mu)}{\partial \alpha_1^\mu} & \dots & \frac{\partial R_I^v(p_0^\mu)}{\partial \alpha_N^\mu} \end{pmatrix}, 1 \leq \mu \leq v \quad (2.7)$$

Während die Antwort $R^v(p_0^v)$ zum Zeitpunkt v lediglich von den Parametern $(\alpha^0)^\mu$ abhängt, die zum momentanen Zeitpunkt v erscheinen, folgt für $S^{v\mu} = 0$, wenn $\mu > v$ und nach Gleichung (2.6) die Nicht- Null- Elemente nur im Bereich von $1 \leq \mu \leq v$ auftreten. Durch Einführung der Blockmatrix

$$S \triangleq \begin{pmatrix} S^{11} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ S^{N_r 1} & \dots & S^{N_r N_r} \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

und den (Block) Spaltenvektoren

$$\alpha \triangleq (\alpha^1, \dots, \alpha^\mu, \dots, \alpha^{N_r}) \quad (2.9)$$

$$r \triangleq (r^1, \dots, r^\mu, \dots, r^{N_r}) \quad (2.10)$$

$$R(\alpha^0) \triangleq (R^1, \dots, R^\mu, \dots, R^{N_r}) \quad (2.11)$$

kann die Gleichung (2.6) wie folgt geschrieben werden

$$r = R(\alpha^0) + S(\alpha - \alpha^0) + HOT \quad (2.12)$$

Die Anwendung der Fehlerausbreitungsmodelle nach [Cacuci, 2003] für Gleichung (2.12), welche die formale Integration der unbekannt gemeinsamen Verteilung der Parameter beinhaltet, führt zu dem Ausdruck des Erwartungswert $\langle r \rangle$, der Antwort r und der dazugehörigen Kovarianzenmatrix $C_{rc}(\alpha^0)$ der berechneten Antworten.

$$\langle r \rangle = R(\alpha^0) \tag{2.13}$$

und

$$\begin{aligned} C_{rc}(\alpha^0) &\triangleq \langle \delta r \delta r^\dagger \rangle = [S(\alpha^0)] \langle \delta \alpha \delta \alpha^\dagger \rangle [S(\alpha^0)]^\dagger \\ &= [S(\alpha^0)] C_\alpha [S(\alpha^0)]^\dagger \end{aligned} \tag{2.14}$$

Die Kovarianzenmatrix der berechneten Antworten C_{rc} hat dabei eine symmetrische Struktur

$$C_{rc} \triangleq \begin{pmatrix} C_{rc}^{11} & \dots & C_{rc}^{1N_i} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{rc}^{N_i 1} & \dots & C_{rc}^{N_i N_i} \end{pmatrix} \tag{2.15}$$

Für die Gleichung (2.15) ergibt sich in Komponentenschreibweise:

$$C_{rc}^{\mu\nu} = \sum_{\eta=1}^{\nu} \sum_{\rho=1}^{\mu} S^{\nu\eta} C_\alpha^{\eta\rho} (S^{\mu\rho})^\dagger = (C_{rc}^{\mu\nu})^\dagger; \quad \nu, \mu = 1, \dots, N_i \tag{2.16}$$

Der Erwartungswert der berechneten Antworten, nach Gleichung (2.13), für linearisierte Modelle, in denen die numerischen Fehler vernachlässigt werden, wird durch den Wert der berechneten Antworten für die Nominalparameterwerte wiedergegeben.

Der Maximale- Entropie- Algorithmus [Cacuci und Ionescu- Bujor, 2010b] der experimentellen und berechneten Informationen nach Gleichung (2.1) und (2.13)

verdeutlicht, dass die wahrscheinlichste Verteilung dieser Information eine multivariate Gaussverteilung ist:

$$p(z|C)d(z) = \frac{\exp\left[-\frac{1}{2}Q(z)\right]}{\det(2\pi C)^{1/2}} d(z), \quad Q(z) \equiv z^\dagger C^{-1}z, \quad -\infty \leq z_j \leq \infty \quad (2.17)$$

wobei

$$z \equiv \begin{pmatrix} \alpha - \alpha^0 \\ r - r_m \end{pmatrix}, \quad \alpha^0 \triangleq \left((\alpha^0)^1, \dots, (\alpha^0)^\mu, \dots, (\alpha^0)^{N_t} \right) \quad (2.18)$$

$$C \equiv \begin{pmatrix} C_\alpha & C_{ar} \\ C_{ra} & C_m \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

mit

$$C_\alpha \equiv \begin{pmatrix} C_\alpha^{11} & C_\alpha^{12} & \dots & \dots \\ C_\alpha^{21} & C_\alpha^{22} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & C_\alpha^{N_t N_t} \end{pmatrix}, \quad C_{ar} \equiv \begin{pmatrix} C_{ar}^{11} & C_{ar}^{12} & \dots & \dots \\ C_{ar}^{21} & C_{ar}^{22} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & C_{ar}^{N_t N_t} \end{pmatrix}, \quad C_x \equiv \begin{pmatrix} C_x^{11} & C_x^{12} & \dots & \dots \\ C_x^{21} & C_x^{22} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & C_x^{N_t N_t} \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

Die nachfolgenden Informationen aus den Gleichungen (2.17) und (2.12) werden nun verdichtet, um die empfohlenen bestmöglichen Beurteilungen der Werte $(z^{be})^v$ zu einem Zeitpunkt v für die Parameter α^v und den Antworten r^v zusammen mit den zugehörigen bestmöglichen Beurteilungen der Unsicherheiten zu bestimmen. Ausgehend aus der Betrachtung der Terme höherer Ordnungszahl („HOT“) aus Gleichung (2.12), sowie die den numerischen Fehlern kann Gleichung (2.12) wie folgt geschrieben werden

$$Z(\alpha^0)z + d = 0, \quad d \triangleq R(\alpha^0) - r_m \quad (2.21)$$

Diese Vorgehensweise stellt eine extreme Einschränkung dar. Der Vektor, der sich auf alle experimentell gemessenen Antworten beschränkt, wird durch $r_m \triangleq (r_m^1, \dots, r_m^{\mu}, \dots, r_m^{N_t})$ in Gleichung (2.21) angegeben. $d \triangleq R(\alpha^0) - r_m$ ist der Vektor der Differenz zwischen den nominal berechneten Antworten und den nominal experimentellen Messungen, während Z die partitionierte Matrix bildet:

$$Z = (S \ U); \quad U \triangleq \begin{pmatrix} -I^{11} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & -I^{N_t N_t} \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

$I^{vv}, v=1, \dots, N_t$ stellt die Identitätsmatrix der zugehörigen Dimensionen dar. Die Berechnung eines stationären Punktes von $Q(z)$ in Abhängigkeit von Gleichung (2.21) stellt einen Einschnitt für ein minimiertes Problem dar, welche durch die Einführung von Lagrange- Multiplikatoren λ gelöst werden kann und gleichzeitig zur Erstellung der Lagrange- Funktion $P(z, \lambda)$ verwendet wird.

$$P(z, \lambda) \equiv Q(z) + 2\lambda^\dagger [Z(\alpha^0)z + d] = \min, \text{ bei } z = z^{be} \equiv \begin{pmatrix} \alpha^{be} - \alpha^0 \\ r^{be} - r_m \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

wobei $\lambda = (\lambda^1, \dots, \lambda^v, \dots, \lambda^{N_t})$ den zugehörigen Vektor der Lagrange- Multiplikatoren darstellt. Die Hochstellung der Kennzeichnung „be“ steht für die bestmögliche Beurteilung der Werte. Die Verwendung der Zahl 2 vor λ dient der Zweckmäßigkeit die algebraische Ableitung zu vereinfachen. Am Punkt z^{be} , an dem die Lagrange- Funktion $P(z, \lambda)$ ihren Extremwert (Minimum) erreicht, wird umfassend durch die Bedingungen aus Gleichung (2.24) definiert.

$$\nabla_z P(z, \lambda) = 0, \quad \nabla_\lambda P(z, \lambda) = 0, \text{ bei } z = z^{be} \quad (2.24)$$

Anhand der hier dargestellten Gleichungen von 2.1 bis 2.5 und den Berechnungen mittels FLICA4 sowie ANSYS CFX werden die Gleichungen für die bestmöglichen, vorhersagbaren Größen

- 1) der kalibrierten Systemparameter
- 2) der kalibrierten Systemantworten
- 3) und der bestmöglichen Ausdrücken für die Kovarianzen der Systemparameter und Systemantworten, in Bezug auf deren bestmöglichen Größen, sowie der Kovarianz der vorhersagbaren bestmöglichen Beziehung zwischen den Systemparametern und den Systemantworten.

nach der Methode von [[Cacuci und Ionescu-Bujor, 2010b](#)] vorgestellt.

- 1) Die bestmöglichen Einschätzungen der kalibrierten Systemparameter werden durch folgenden Ausdruck bestimmt

$$\alpha^{be} = \alpha^0 + \left(C_{ar} - C_{\alpha} [S(\alpha^0)]^{\dagger} \right) [C_d(\alpha^0)]^{-1} d \quad (2.25)$$

Die Gleichung (2.25) in Komponentenform dargestellt sieht wie folgt aus

$$\left(\alpha^{be} \right)^v = \left(\alpha^0 \right)^v + \sum_{\mu=1}^{N_t} \left[C_{ar}^{v\mu} - \sum_{\rho=1}^{\mu} C_{\alpha}^{v\rho} \left(S^{\dagger} \right)^{\mu\rho} \right] \left[\sum_{\eta=1}^{N_t} K_d^{\mu\eta} d^{\eta} \right]; \quad v = 1, \dots, N_t \quad (2.26)$$

wobei $K_d^{v\eta}$ die zugehörige Elemente (v, η) der Blockmatrix C_d^{-1} kennzeichnet. Die Blockmatrix $C_d(\alpha^0)$ wird dabei folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned} C_d(\alpha^0) &= \langle dd^{\dagger} \rangle = \left\langle \left(\delta r - S(\alpha^0) \delta \alpha \right) \left(\delta r^{\dagger} - \delta \alpha^{\dagger} [S(\alpha^0)]^{\dagger} \right) \right\rangle \\ &= C_{rc}(\alpha^0) - C_{ra} [S(\alpha^0)]^{\dagger} - [S(\alpha^0)] C_{ar} + C_m \end{aligned}$$

(2.27)

Gleichung (2.27) in Komponentenform ergibt

$$C_d \triangleq \begin{pmatrix} C_d^{11} & \dots & C_d^{1N_t} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ C_d^{N_t 1} & \dots & C_d^{N_t N_t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{rc}^{11} + C_m^{11} & \dots & C_{rc}^{1N_t} + C_m^{1N_t} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{rc}^{N_t 1} + C_m^{N_t 1} & \dots & C_{rc}^{N_t N_t} + C_m^{N_t N_t} \end{pmatrix}$$

$$- \begin{pmatrix} C_{r\alpha}^{11} (S^\dagger)^{11} + S^{11} C_{ar}^{11} & \dots & S^{11} C_{ar}^{1N_t} + \sum_{\rho=1}^{N_t} C_{r\alpha}^{1\rho} (S^\dagger)^{N_t \rho} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{r\alpha}^{N_t 1} (S^\dagger)^{11} + \sum_{\rho=1}^{N_t} S^{N_t \rho} C_{ar}^{\rho 1} & \dots & \sum_{\rho=1}^{N_t} C_{r\alpha}^{N_t \rho} (S^\dagger)^{N_t \rho} + S^{N_t \rho} C_{ar}^{\rho 1} \end{pmatrix}$$

(2.28)

2) *Bestmögliche vorhersagbare Einschätzungen der kalibrierten Systemantworten*

$$r(\alpha^{be}) = r_m + \left(C_m - C_{r\alpha} [S(\alpha^0)]^\dagger \right) [C_d(\alpha^0)]^{-1} d$$

(2.29)

Zu jenem spezifischen Zeitpunkt v besitzt jede Komponente $r(\alpha^{be})^v$ von $r(\alpha^{be})$ die explizite Form

$$(r^{be})^v = r_m^v + \sum_{\mu=1}^{N_t} \left[C_m^{v\mu} - \sum_{\rho=1}^{\mu} C_{r\alpha}^{v\rho} (S^\dagger)^{\mu\rho} \right] \left[\sum_{\eta=1}^{N_t} K_d^{\mu\eta} d^\eta \right]; \quad v=1, \dots, N_t$$

(2.30)

3) *Die bestmöglichen Ausdrücke für die Kovarianzen der Systemparameter und Systemantworten, in Bezug auf deren bestmöglichen Größen, sowie der Kovarianz der vorhersagbaren bestmöglichen Beziehung zwischen den Systemparametern und deren Systemantworten.*

Die Blockmatrizenkomponenten der Korrelationsmatrizen für die Systemparameter C_α^{be} , der Systemantworten C_r^{be} sowie der Parameter- Systemantworten $C_{r\alpha}^{be}$ werden nach den Gleichungen (2.31) bis (2.33) beschrieben.

$$\begin{aligned}
C_{\alpha}^{be} &= \left\langle (\alpha - \alpha^{be})(\alpha - \alpha^{be})^{\dagger} \right\rangle \\
&= C_{\alpha} - [C_{\alpha d}(\alpha^0)][C_d(\alpha^0)]^{-1}[C_{\alpha d}(\alpha^0)]^{\dagger}
\end{aligned} \tag{2.31}$$

$$\begin{aligned}
C_r^{be} &= \left\langle (r - r^{be})(r - r^{be})^{\dagger} \right\rangle \\
&= C_m - [C_{rd}(\alpha^0)][C_d(\alpha^0)]^{-1}[C_{rd}(\alpha^0)]^{\dagger}
\end{aligned} \tag{2.32}$$

$$\begin{aligned}
C_{r\alpha}^{be} &= \left\langle (\alpha - \alpha^{be})(r - r^{be})^{\dagger} \right\rangle \\
&= C_{r\alpha} - [C_{rd}(\alpha^0)][C_d(\alpha^0)]^{-1}[C_{\alpha d}(\alpha^0)]^{\dagger}
\end{aligned} \tag{2.33}$$

wobei für $C_{\alpha d}$ und C_{rd} folgende Definition gilt

$$C_{\alpha d}(\alpha^0) \triangleq \left\langle (\alpha - \alpha^0)d^{\dagger} \right\rangle = \left(C_{\alpha r} - C_{\alpha} [S(\alpha^0)]^{\dagger} \right) \tag{2.34}$$

$$C_{rd}(\alpha^0) \triangleq \left\langle (r - r_m)d^{\dagger} \right\rangle = \left(C_m - C_{r\alpha} [S(\alpha^0)]^{\dagger} \right) \tag{2.35}$$

Der Vollständigkeit halber werden auch die Komponenten der Blockmatrix, welche zu zwei Zeitpunkten miteinander korrelieren bzw. nicht korrelieren bezogen auf die kalibrierten bestmöglich- beurteilten Matrizen der Kovarianzen, in den Gleichungen (2.36) bis (2.38) dargestellt:

$$\begin{aligned}
(C_{\alpha}^{be})^{v\mu} &= C_{\alpha}^{v\mu} - \sum_{\eta=1}^{N_t} \sum_{\rho=1}^{N_t} \left[C_{\alpha r}^{v\rho} - \sum_{\pi=1}^{\rho} C_{\alpha}^{v\pi} (S^{\dagger})^{\rho\pi} \right] \\
&\quad \times K_d^{\rho\eta} \left[C_{r\alpha}^{\eta\mu} - \sum_{\pi=1}^{\eta} S^{\eta\pi} C_{\alpha}^{\pi\mu} \right]
\end{aligned} \tag{2.36}$$

$$\begin{aligned}
(C_r^{be})^{v\mu} &= C_m^{v\mu} - \sum_{\eta=1}^{N_l} \sum_{\rho=1}^{N_l} \left[C_m^{v\rho} - \sum_{\pi=1}^{\rho} C_{r\alpha}^{v\pi} (S^\dagger)^{\rho\pi} \right] \\
&\quad \times K_d^{\rho\eta} \left[C_m^{\eta\mu} - \sum_{\pi=1}^{\eta} S^{\eta\pi} C_{\alpha r}^{\pi\mu} \right]
\end{aligned} \tag{2.37}$$

$$\begin{aligned}
(C_{r\alpha}^{be})^{v\mu} &= C_{r\alpha}^{v\mu} - \sum_{\eta=1}^{N_l} \sum_{\rho=1}^{N_l} \left[C_m^{v\rho} - \sum_{\pi=1}^{\rho} C_{r\alpha}^{v\pi} (S^\dagger)^{\rho\pi} \right] \\
&\quad \times K_d^{\rho\eta} \left[C_{\alpha r}^{\eta\mu} - \sum_{\pi=1}^{\eta} S^{\eta\pi} C_{\alpha}^{\pi\mu} \right]
\end{aligned} \tag{2.38}$$

Unter der Berücksichtigung, dass aus Gleichung (2.20) von der Initialmatrix der Parameterkovarianzen, eine positive symmetrische Matrix subtrahiert wird, folgt dass die prädiktive bestmögliche Beurteilung der Parameterunsicherheitsmatrix C_{α}^{be} durch die Einführung von neuen Informationen aus den experimentellen Messungen anhand der Kalibrierung reduziert wird. Ähnliche Vorgehensweise folgt auch für die Initial- Kovarianzenmatrix C_m der experimentellen Messungen. Durch die Einbeziehung neuer Informationen durch experimentelle Messungen wird auch die prädiktive bestmögliche Beurteilung der Kovarianzenmatrix der Antworten deutlich verbessert, bzw. deutlich reduziert. Weiterhin wird durch Gleichung (2.31) verdeutlicht, dass die Kalibrierungsprozedur in der Lage ist Korrelationen zwischen den angepassten Parametern und angepassten Antworten aufzuzeigen, auch wenn die Initialmatrizen beider zu Beginn keine Korrelation aufweisen, wenn $C_{r\alpha}^{be} \neq 0$ und sogar wenn $C_{r\alpha} = 0$ ist.

$$C_{r\alpha}^{be} = C_m \left[C_{rc}(\alpha^0) + C_m \right]^{-1} \left[S(\alpha^0) \right] C_{\alpha}, \text{ für } C_{r\alpha} = 0 \tag{2.39}$$

Aus Gleichung (2.39) wird ersichtlich, dass die Anpassung bzw. Kalibrierung die Korrelation zwischen den Parametern durch Kopplungen, welche durch die Sensitivitäten der teilnehmenden Antworten hervorgerufen werden, verändern. Die Sensitivitäten stellen in der Kalibrierungsprozedur die Gewichtungsfunktion für die Weitergabe der Initialparameter- Kovarianzen und der experimentell- Antworten- Kovarianzen zu den angepassten prädiktiven bestmöglich beurteilten Größen dar. Die zusätzliche Aufnahme an weiteren Informationen, in die Kalibrierungsprozedur,

wie die experimentellen Messungen, verringern demnach die Varianzen der angepassten Parameter und Antworten bei gleichzeitiger Veränderung ihrer Korrelationen. Diese Reduzierung wird durch die Gleichungen (2.31), (2.32) und (2.33) verdeutlicht. Festzuhalten ist, dass Gleichung (2.32) die bestmögliche Beurteilung der Kovarianzenmatrix der Antworten C_r^{be} in Bezug auf die Initialmatrix C_m darstellt. Die Möglichkeit aus den bestmöglichen Beurteilungen der Berechnungen die C_{rc}^{be} zu ermitteln erfordert als Ausgangsbasis, dass die Linearisierung ähnlich wie für Gleichung (2.12) erfolgt, allerdings hier um α^{be} statt um α^0 . Die Indizes rc der Kovarianzenmatrix C_{rc}^{be} stehen dabei für „computed response“ und differenzieren diese von der Kovarianzenmatrix C_r^{be} , welche direkt aus der Kalibrierungsprozedur ermittelbar ist.

$$r = R(\alpha^{be}) + S(\alpha^{be})(\alpha - \alpha^{be}) + HOT \quad (2.40)$$

Aus Gleichung (2.40) folgt

$$\begin{aligned} C_{rc}^{be} &= \left\langle (r - R(\alpha^{be}))(r - R(\alpha^{be}))^\dagger \right\rangle \\ &= [S(\alpha^{be})] \left\langle (\alpha - \alpha^{be})(\alpha - \alpha^{be})^\dagger \right\rangle [S(\alpha^{be})]^\dagger \\ &= [S(\alpha^{be})] C_\alpha^{be} [S(\alpha^{be})]^\dagger \\ &= [S(\alpha^{be})] \left[C_\alpha - (C_{ar} - C_\alpha [S(\alpha^0)]^\dagger) \times [C_d(\alpha^0)]^{-1} (C_{ar} - [S(\alpha^0)] C_\alpha) \right] \\ &\quad \times [S(\alpha^{be})]^\dagger \end{aligned} \quad (2.41)$$

Der Vergleich zwischen Gleichung (2.41) und (2.32) zeigt offenkundig, dass allgemein gilt $C_{rc}^{be} \neq C_r^{be}$ für $S(\alpha^{be}) \neq S(\alpha^0)$. Trotzdem kann $C_{rc}^{be} = C_r^{be}$ erfolgen, wenn das Modell „perfekt“, d.h. frei von numerischen Fehlern und exakt linear ist. Weiterhin muss für diese Bedingung die Sensitivitätsmatrix S unabhängig von den Parameterwerten α sein. Für ein perfekt lineares Modell gilt dann

$$S(\alpha^{be}) = S(\alpha^0) = S \quad (2.42)$$

Aus Gleichung (2.41) kann anschließend gezeigt werden, dass folgende Gleichung ihre Gültigkeit bewahrt

$$\begin{aligned}
 C_{rc}^{be} &= S \left[C_{\alpha} - (C_{ar} - C_{\alpha} S^{\dagger}) C_d^{-1} (C_{ar} - S C_{\alpha}) \right] S^{\dagger} \\
 &= C_{rc} - (C_{rc} - S C_{ar}) \times \left[C_{rc} + C_e - C_{ra} S^{\dagger} - S C_{ar} \right]^{-1} \\
 &\quad (C_{rc} - C_{ar} S^{\dagger}) \\
 &= C_r^{be}
 \end{aligned}
 \tag{2.43}$$

In Betracht der Gleichung (2.27) ist festzuhalten, dass die invertierte Matrix C_d^{-1} simultan alle verfügbaren Informationen der Systemparameter und Antworten zu allen Zeitpunkten miteinbezieht. Insbesondere zu jenem Zeitpunkt v ist C_d^{-1} nicht nur in der Lage Informationen vorhergehender Zeitpunkte von v (z.B. Informationen bezogen auf die Vergangenheit und Gegenwart), sondern auch Inhalte der nachfolgenden Zeitpunkte (z.B. Informationen der Zukunft) zu berücksichtigen. Anhand der C_d^{-1} Matrix werden zu jenem Zeitpunkt die kalibrierten bestmöglichen Beurteilungen der Parameter $(\alpha^{be})^v$ und Antworten $(r^{be})^v = r^{be}$ zusammen mit ihren zugehörigen kalibrierten bestmöglichen Kovarianzen- Matrizen $(C_{\alpha}^{be})^{v\mu}$, $(C_r^{be})^{v\mu}$ und $(C_{ar}^{be})^{v\mu}$ mit allen verfügbaren Informationen über die Systemparameter und Antworten zu jedem Zeitpunkt $[v=1,2,\dots,N_t]$ aufgenommen. Weiterhin ist es bedeutend zu wissen, dass die vorgestellten Applikationen der Methode zwei ausgeprägte Berechnungsebenen beinhalten. Die gesamte Datenbasis der Sensitivitäten $(s_{ni}^{v\mu})$ zu allen Zeitpunkten $v, \mu = 1, \dots, N_t$) muss vorab generiert werden. Dieser Schritt ist für die Modellkalibrierung bzw. Modellanpassung notwendig, denn alle Sensitivitäten werden für den Kalibrierungsprozess benötigt. In den darauf folgenden Berechnungsschritten werden die kalibrierten bestmöglich beurteilten Matrizen der Kovarianzen durch die Kombination der Sensitivitäten mit den Kovarianzmatrizen ermittelt. Aufgrund der Tatsache, dass die hier vorgestellte Methode einen Zukunft- und off-Line Charakter besitzt, kann diese Methode als „zukunfts- und off- line“ Methode bezeichnet werden. Kennzeichnend ist vor allem, dass alle Sensitivitäten einzeln berechnet werden, bevor die Unsicherheitsanalyse durchgeführt wird und die Eigenschaft der zukunftsweisenden Fähigkeiten in dieser Prozedur enthalten ist. Aufgrund der Tatsache, dass die Aufnahme vorausblickender

Effekte die Inverse der C_d -Matrix maßgeblich erschwert, ist diese Methode die geeignetste für vorliegende Aufgaben mit relativ wenigen Zeitpunkten. Für Probleme größerer Ausmaße, hoher Nicht- Linearität und vielen enthaltenen Zeitpunkten wird die C_d Matrix extrem groß und benötigt immens viel Rechenzeit und Rechenaufwand. Eine Durchführung dieser Größenordnungen kann dadurch schnell zu inakzeptablen, kostenintensiven Folgen führen. Eine Umgehung dieser Problematik ist die Verwendung von weniger Daten der gesamten Betrachtungszeit, d.h. die Verwendung von ausgesuchten Informationen, z.B. transienter Probleme, innerhalb der Betrachtungsintervalle und deren Fokussierung. Die Informationen der zukunftsorientierten Systeme werden dabei außer Betracht gelassen.

In dynamischen Problemen, wie die der Meteorologie, in denen die Zeitvariablen fortschreitend sind, bleiben die Zustände außerhalb der gegenwärtigen Zeitbetrachtung unbekannt. Dadurch können keine zuverlässigen Informationen über zukünftige Zustände ermittelt werden. Folge dessen ist die wohl verbreitetste Vorgehensweise die Dimensionen der Datenassimilierung und Modellkalibrierung durch das außer Acht lassen der Informationen zukunftsorientierter Art und eine Limitation von Informationen aus der Vergangenheit.

Datenassimilierungs- bzw. Modellkalibrierungsprozeduren mit reduzierten Informationen können entweder off-line oder on- line angepasst werden mit den neuen Daten als Laufzeitindex. Der einfachste Fall für dynamische Datenassimilierungen und Modellkalibrierungen ergibt sich, wenn diese Berechnungen on- line für lediglich zwei aufeinanderfolgende Zeitschritte durchgeführt werden. Für diesen bestimmten Fall reduzieren sich die Gleichungen (2.26), (2.30), (2.36), (2.37), (2.38) und (2.39) für die prädiktiven bestmöglichen Beurteilungen zu folgenden expliziten Ausdrücken

- (i) Die Komponenten $(\alpha^{be})^k$ der Parameter zum Zeitpunkt k , welche die bestmöglichen Beurteilungen der Parameter darstellen, kann nach Gleichung (2.26) wie folgt definiert werden

$$(\alpha^{be})^k = (\alpha^0)^k + \sum_{\mu=k-1}^k \left\{ \left[C_{ar}^{k\mu} - \sum_{\rho=k-1}^{\mu} C_{\alpha}^{k\rho} (S^{\dagger})^{\mu\rho} \right] \left[\sum_{\eta=k-1}^k K_d^{\mu\eta} d^{\eta} \right] \right\}, \quad k=1,2,\dots,N_t \quad (2.44)$$

- (ii) Der Vektor $(r^{be})^k$ der Systemantworten zum Zeitpunkt k , welcher die bestmöglichen Beurteilungen der Antworten darstellt, kann nach Gleichung (2.30) wie folgt definiert werden

$$(r^{be})^k = (r_m)^k + \sum_{\mu=k-1}^k \left\{ \left[C_m^{k\mu} - \sum_{\rho=k-1}^{\mu} C_{r\alpha}^{k\rho} (S^\dagger)^{\mu\rho} \right] \left[\sum_{\eta=k-1}^k K_d^{\mu\eta} d^\eta \right] \right\}, \quad k=1,2,\dots,N_t \quad (2.45)$$

- (iii) Die Komponenten $(C_\alpha^{be})^{v\mu}$, $(v, \mu = k-1, k)$ der kalibrierten bestmöglich beurteilten Kovarianzenmatrix C_α^{be} für die kalibrierten bestmöglich beurteilten Systemparameter können durch die detaillierte Form von Gleichung (2.36) für zwei Zeitpunkte bestimmt werden

$$(C_\alpha^{be})^{v\mu} = C_\alpha^{v\mu} - \sum_{\eta=k-1}^k \sum_{\rho=k-1}^k \left[C_{\alpha r}^{v\rho} - \sum_{\pi=k-1}^{\rho} C_\alpha^{v\pi} (S^\dagger)^{\rho\pi} \right] K_d^{\rho\eta} \left[C_{r\alpha}^{\eta\mu} - \sum_{\pi=k-1}^{\eta} S^{\eta\pi} C_\alpha^{\pi\mu} \right] \\ \text{für } v=k-1, k \text{ und } \mu=k-1, k ; \quad k=1,2,\dots,N_t \quad (2.46)$$

- (iv) Die Komponenten $(C_r^{be})^{v\mu}$, $(v, \mu = k-1, k)$ der kalibrierten bestmöglich beurteilten Kovarianzenmatrix C_r^{be} für die kalibrierten bestmöglich beurteilten Systemantworten können durch die detaillierte Form von Gleichung (2.37) für zwei Zeitpunkte bestimmt werden

$$(C_r^{be})^{v\mu} = C_m^{v\mu} - \sum_{\eta=k-1}^k \sum_{\rho=k-1}^k \left[C_m^{v\rho} - \sum_{\pi=k-1}^{\rho} C_{r\alpha}^{v\pi} (S^\dagger)^{\rho\pi} \right] K_d^{\rho\eta} \left[C_m^{\eta\mu} - \sum_{\pi=k-1}^{\eta} S^{\eta\pi} C_{\alpha r}^{\pi\mu} \right] \\ \text{für } v=k-1, k \text{ und } \mu=k-1, k ; \quad k=1,2,\dots,N_t \quad (2.47)$$

- (v) Die Komponenten $(C_{\alpha r}^{be})^{v\mu}$, $(v, \mu = k-1, k)$ der kalibrierten bestmöglich beurteilten Parameter- Antwort- Kovarianzenmatrix $C_{\alpha r}^{be}$ nimmt dabei für diesen speziellen Fall nach Gleichung (2.38) folgende Form an

$$\begin{aligned} (C_{ra}^{be})^{v\mu} &= C_{ra}^{v\mu} - \sum_{\eta=k-1}^k \sum_{\rho=k-1}^k \left[C_m^{v\rho} - \sum_{\pi=k-1}^{\rho} C_{ra}^{v\pi} (S^\dagger)^{\rho\pi} \right] K_d^{\rho\eta} \left[C_{ra}^{\eta\mu} - \sum_{\pi=k-1}^{\eta} S^{\eta\pi} C_{ra}^{\pi\mu} \right] \\ &\text{für } v=k-1, k \text{ und } \mu=k-1, k ; k=1, 2, \dots, N_t \end{aligned} \quad (2.48)$$

Für jenen Zeitpunkt $k=1, 2, \dots, N_t$ werden die Größen für $K_d^{v\eta}$, welche in den Gleichungen (2.44) bis (2.48) vorkommen werden wie folgt definiert

$$\begin{aligned} K_d^{k-1, k-1} &= \left[C_d^{k-1, k-1} - C_d^{k-1, k} (C_d^{k, k})^{-1} C_d^{k, k-1} \right]^{-1} \\ &= (C_d^{k-1, k-1})^{-1} + (C_d^{k-1, k-1})^{-1} C_d^{k-1, k} K_d^{k, k} C_d^{k, k-1} (C_d^{k-1, k-1})^{-1} \end{aligned} \quad (2.49)$$

$$\begin{aligned} K_d^{k-1, k} &= -(C_d^{k-1, k-1})^{-1} - C_d^{k-1, k} \left[C_d^{k, k} - C_d^{k, k-1} (C_d^{k-1, k-1})^{-1} C_d^{k-1, k} \right]^{-1} \\ &= -(C_d^{k-1, k-1})^{-1} C_d^{k-1, k} K_d^{k, k} \end{aligned} \quad (2.50)$$

$$\begin{aligned} K_d^{k, k} &= \left[C_d^{k, k} - C_d^{k, k-1} (C_d^{k-1, k-1})^{-1} C_d^{k-1, k} \right]^{-1} \\ &= (C_d^{k, k})^{-1} + (C_d^{k, k})^{-1} C_d^{k, k-1} K_d^{k-1, k-1} C_d^{k-1, k} (C_d^{k, k})^{-1} \end{aligned} \quad (2.51)$$

und

$$\begin{aligned} K_d^{k, k-1} &= -(C_d^{k, k})^{-1} - C_d^{k, k-1} \left[C_d^{k-1, k-1} - C_d^{k-1, k} (C_d^{k, k})^{-1} C_d^{k, k-1} \right]^{-1} \\ &= -(C_d^{k, k})^{-1} C_d^{k, k-1} K_d^{k-1, k-1} \end{aligned} \quad (2.52)$$

Für zeitunabhängige Probleme reduzieren sich die Gleichungen zu den bereits bekannten Darstellungen aus (2.25), (2.29), (2.31), (2.32) und (2.33). Diese Gleichungen können unmittelbar für die Ermittlung der prädiktiven bestmöglich beurteilbaren Parameter, Antworten sowie deren zugehörigen Kovarianzen herangezogen werden. Die hier nicht explizit erwähnten Modellierungsfehler können dabei ähnlich wie die Parameterunsicherheiten, durch die Einbeziehung der Diskretisierungs- Intervalle zwischen den Komponenten des Parametervektors α nach [Cacuci, 2003], betrachtet werden.

Letztendlich ist es wichtig hervorzuheben, dass die hier veröffentlichten expliziten Formalismen auf einer linearisierten Beziehung zwischen den Antworten und Parametern beruhen, die üblicherweise der Momentenmethode (z.B. Gleichung 2.12) unterliegen, ohne dabei eine explizite Nichtlinearität zu berücksichtigen. Jedoch ist diese Limitation weniger gravierend wie sie auf den ersten Blick erscheint, solange eine Nichtlinearität zwischen den berechneten Antworten und Modellparametern durch Gleichung (2.12) iterativ berücksichtigt werden kann, beginnend mit den bekannten Nominalwerten der betroffenen Größen. Der erste Schritt solch einer Iteration würde sich aus den Gleichungen (2.25), (2.29), (2.31), (2,32) und (2.33) explizit ableiten. In der darauffolgenden Iteration würden die Ergebnisse der Gleichungen (2.25), (2.29), (2.31), (2.32) und (2.33) als vorhergegangene Informationen in einer zweiten Applikation dieser Formalismen für die neuen Berechnungen der bestmöglich beurteilten Größen verwendet werden. Diese Iteration würde dann so oft wiederholt werden, bis die bestmöglich beurteilten Größen keine Veränderung mehr aufweisen bzw. eine akzeptable Größe in einem festgelegten Toleranzbereich vorweisen.

2.2 Das Daten Konsistenz- und Qualitätskriterium

Die aktuellen Applikationen der Modellkalibrierungs- bzw. Datenanpassungs-Algorithmen aus den Gleichungen (2.25), (2.29), (2.31), (2,32) und (2.33) sind für die Analyse eines physikalischen Problems im Prinzip geradezu unkompliziert, wobei diese auch für beide, d.h. sowohl der Datenhandhabung und der Rechenzeit sowie dem Rechenaufwand, sehr anspruchsvoll werden können. Weiterhin muss berücksichtigt werden, dass bei einer wahllosen Aufnahme von experimentellen bzw. Antwort- Daten, kalibrierte Parameter berechnet werden können, die stark von ihren Nominalwerten abweichen. Dadurch kann sogar die Verbesserung der Übereinstimmung zwischen den Berechnungen und Messaufzeichnungen fehlschlagen. Während Kalibrier- bzw. Anpassungsprozessen von Parameterreihen wird von den kalibrierten Parametern davon ausgegangen, dass diese „richtig“ und hinreichend fehlerfrei sind. Die Kalibrierungsprozedur verwendet, wie bereits bekannt, zusätzliche Informationen zur Verbesserung der Parameterwerte und gleichzeitiger Reduzierung ihrer Unsicherheiten. Obwohl solche ergänzenden Informationen eine Modifikation hervorrufen, wird im Allgemeinen erwartet, dass die kalibrierten Werte konsistent bleiben und sich im Wesentlichen innerhalb des Toleranzbereiches der Anfangsunsicherheiten befinden. Kalibrierte Modellparameter mittels experimentellen Aufzeichnungen, die starke Differenzen zu den Berechnungen aufzeigen, werden deutlichen Einfluss auf die Anpassungen der

Parameterwerte erfahren und womöglich sogar die Einschränkung der Linearität erzwingen, die der Kalibrierungsprozedur unterliegt. Die Folgerungen dieser unwahrscheinlichen Anpassungen werden Fehler in der Reproduzierbarkeit der experimentellen Messaufzeichnung sein. Das Gegenteil hiervon wäre die Kalibrierung von Parametersätzen mittels experimentellen Daten und Berechnungen, die nur minimale Abweichungen besitzen. In solchen Fällen wird die Veränderung der Parameter minimal sein und die Wiedergabe der Messdaten stets möglich bleiben. Für diesen Fall würde die Annahme getroffen werden, dass die ermittelten Antworten konsistent mit den gegebenen Parametersätzen sind. Für eine Anpassung durch inkonsistente experimentelle Dateninformationen könnte diese jedoch nicht erfolgen. Diese Berücksichtigung bekräftigt die Notwendigkeit eines quantitativen Indikators zur Messung gemeinsamer und gegenseitiger Konsistenzen der verfügbaren Informationen für die Modellkalibrierung. Der minimale Wert $Q_{\min} \equiv Q(z^{be})$ kann dabei einfach berechnet werden, indem z^{be} in der Definition von $Q(z)$ aus Gleichung (2.17) ersetzt und umgeschrieben wird.

$$Q_{\min} \equiv Q(z^{be}) = d^* [C_d(\alpha^0)]^{-1} d, \quad d \triangleq R(\alpha^0) - r_x \quad (2.53)$$

Aus Gleichung (2.53) ist zu sehen, dass $Q_{\min} \equiv Q(z^{be})$ das Quadrat der Länge des Vektors d darstellt, wobei diese bekannter Weise die Differenz zwischen experimentellen Messungen und Berechnungen erfasst. Festgehalten werden muss auch, dass $Q_{\min} \equiv Q(z^{be})$ direkt aus Daten (Parameter und Antworten mit zugehörigen Unsicherheiten), nach der Invertierung der Differenzenunsicherheitsmatrix $C_d(\alpha^0)$, ausgewertet werden kann. Weiterhin muss erwähnt werden, dass $Q_{\min} \equiv Q(z^{be})$ unabhängig von der Kalibrierung der Originaldaten ist und somit vor der Kalibrierungsprozedur berechnet werden muss. Die Dimension von d gibt dabei die Anzahl der betrachteten Größen an, die wiederum gleich die der experimentellen Messungen ist. Als Extremfall gilt das nicht Vorhandensein experimenteller Informationen. Hierfür findet keine Kalibrierung statt da der Vektor d zu $d = R(\alpha^0)$ wird und die bestmöglich beurteilbaren Parameter ihren Nominalwerten entsprechen, z.B. $(\alpha^{be})^k = (\alpha^0)^k$. Somit wird deutlich das für die Anpassung mindestens ein experimenteller Wert vorhanden sein muss. Das Ersetzen von Gleichung (2.53) in Gleichung (2.17) zeigt das der Hauptanteil der gemeinsamen nachfolgenden

Wahrscheinlichkeitsverteilung, welche aus $z = z^{be}$ kommt, die Form der multivariaten Gaussverteilung annimmt.

$$\begin{aligned}
 p(z^{be} | C) &\sim \exp\left[-\frac{1}{2}Q(z^{be})\right] \\
 &= \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[r_x - R(\alpha^0)\right]^\dagger \left[C_d(\alpha^0)\right]^{-1} \right. \\
 &\quad \left. \times \left[r_x - R(\alpha^0)\right]\right\}
 \end{aligned}
 \tag{2.54}$$

Anhand Gleichung (2.55) wird die Beziehung deutlich, dass experimentelle Antworten als Zufallsvariablen, mit einer approximativen multivariaten Gaussverteilung und ihren Durchschnittswerten, an den Punkten, an denen die Berechnungen mittels Nominalparameter durchgeführt worden sind, beschrieben werden können. Die Zufallsvariable $Q_{\min} \equiv Q(z^{be})$ wiederum folgt einer χ^2 Verteilung mit n Freiheitsgraden, wobei n die Gesamtanzahl der experimentellen Daten im Kalibrierungsprozess darstellt. Aufgrund, dass für $Q_{\min} \equiv Q(z^{be})$ der χ^2 innerhalb der Kalibrierung bzw. Anpassung vorhanden ist, kann dieser als Indikator für eine Übereinstimmung zwischen den Berechnungen und den experimentellen Messungen verwendet werden. Auch die wesentlichen Konsistenzen der experimentellen Antworten mit den Modellparametern kann mit diesem Indikator gemessen werden. Somit kann der χ^2 - Indikator mit n Freiheitsgraden der durchgehenden Variablen ($0 \leq x \leq \infty$) wie folgt definiert werden

$$\begin{aligned}
 P(x < \chi^2 < x + dx) &\triangleq k_n(x) dx \\
 &= \frac{1}{2^{n/2} \Gamma(n/2)} x^{n/2-1} e^{-x/2} dx, \quad x > 0, \quad (n=1,2,\dots)
 \end{aligned}
 \tag{2.55}$$

Die χ^2 Verteilung stellt dabei ein Messinstrument dar, welche die Abweichung zwischen Berechnungen und realen Verteilungen misst. Hierbei wird als reale Verteilung die experimentelle Messung angenommen. Der Durchschnitt und die Varianz von χ sind $\langle \chi \rangle = n$ und $\text{var}(\chi) = 2n$ ist. Weitere praktische nützliche asymptotische Eigenschaften der χ^2 Verteilung für $n \rightarrow \infty$ sind, (i) dass χ asymptotisch normal für den Mittelwert von n und der Varianz $2n$ ist. (ii) χ/n ist

asymptotisch normalverteilt für einen Mittelwert von 1 und der Varianz von $2/n$ sowie (iii) $2^{1/2}$ ist asymptotisch normalverteilt für einen Mittelwert von $(2n-1)^{1/2}$ und einer Varianz von 1. Trotz der ausgiebigen Auflistung des χ^2 Indikators, gibt es keine einheitliche Definition in der Literatur für die verschiedenen jeweiligen Größen (insbesondere für die entsprechenden kumulativen Verteilungsfunktionen und Fraktile). Die hier erwähnten kumulativen Verteilungen $P_n(\chi^2)$ und $Q_n(\chi^2)$ werden wie folgt definiert

$$\begin{aligned} P_n(\chi_0^2) &= P(\chi^2 \leq \chi_0^2) \triangleq \int_0^{\chi_0^2} k_n(t) dt ; \\ Q_n(\chi_0^2) &= P(\chi^2 \geq \chi_0^2) \triangleq \int_{\chi_0^2}^{\infty} k_n(t) dt = 1 - P_n(\chi_0^2) ; \end{aligned} \quad (2.56)$$

In der Praxis wird von der Verwendung des χ^2 für eine gegebene Irrtumswahrscheinlichkeit α und einer hohen Anzahl an Freiheitsgraden abgeraten. Dies bedeutet, dass der Wert von $Q_{\min} \equiv \chi^2$ einen gegebenen kritischen Fraktilewert $\chi_{\alpha}^2(n)$ übersteigt. Publierte Angaben beziehen sich oftmals auf Gegenüberstellungen zwischen $\chi_{1-\alpha}^2(\alpha)$ und α . Bei einer hohen Anzahl an Freiheitsgraden ($n > 30$) ist eine asymptotische Approximation $\chi_{\alpha}^2(n) \approx \frac{1}{2}(\sqrt{2n-1} + z_{2\alpha})^2$ sinnvoll, mit $z_{2\alpha}$ der zugehörigen Verteilung der Standard- Normalverteilung $\Phi(z)$ und der Berechnung der Gleichung $2\Phi(z_{2\alpha}) = 1 - 2\alpha$. Hierfür werden die Werte für $\Phi_0(z)$ aus gegebenen Tabellen entnommen. Für große bzw. kleine Werte von α ist eine genauere Annäherung durch

$$\chi_{\alpha}^2(n) \approx n \left(1 - \frac{2}{9m} + z_{2\alpha} \sqrt{\frac{2}{9m}} \right)^3 \quad (2.57)$$

möglich. Oftmals kann die Transformierung von χ^2 zu $t = \chi^2 / n$ zweckmäßiger sein, indem die umgewandelte Verteilung $g_n(t)$ zu $g_n(t) = nk_n(nt)$ wird, mit einem Mittelwert $\langle t \rangle = 1$ und der Varianz $2/n$. Für die Modellkalibrierung (Anpassung) ist es wichtig zu gewährleisten, dass (a) die Berechnungen und experimentellen Messungen frei von groben Fehlern sind, wie unangebrachten Einstellungen oder Datenimport. Weiterhin, (b) die Messdaten konsistent für die betrachteten und verwendeten

Mittelwerte, Varianzen und Kovarianzen sind. Ergibt sich z.B. für $\chi^2/n \approx 1$ kann ausgegangen werden, dass die experimentellen Werte und Berechnungen weitgehend von groben Fehlern unbehafet und konsistent sind. Für Werte $\chi^2/n \gg 1$ oder $\chi^2/n \ll 1$ sind die Annahmen als stark suspekt zu betrachten. Enorm große Werte $\chi^2/n \gg 1$ können sich insbesondere für unterschätzte Varianzen ergeben. Eine Erhöhung dieser, außerhalb ihrer angenommenen Nominalwerte, würde eine Verringerung der angepassten Werte χ^2/n und $P_n(\chi^2)$ hervorrufen. Das Gegenteil, d.h. für $\chi^2/n \ll 1$ und $P_n(\chi^2) \sim 10^{-4}$, würde für stark überschätzte Varianzen resultieren. Als eine praktische Größenbeurteilung für die Akzeptanz bzw. einer Abweisung von experimentellen Werten, in Bezug auf ein theoretisches Modell, ist die Akzeptanz des Wertebereichs zwischen $0.15 \leq P_n(\chi^2) \leq 0.85$ für χ^2/n , in Übereinstimmung mit der 1σ Ordnung der Normalverteilung. Bei der Angabe eines Akzeptanzkriteriums für χ^2/n in allgemeiner Form

$$\alpha < P_n(\chi^2) < 1 - \alpha \quad (2.58)$$

muss berücksichtigt werden, dass der genaue Wert von α dabei auf eine persönliche Beurteilung beruht und nicht ausschlaggebend ist. Grund hierfür ist, dass $P_n(\chi^2)$ weiterhin sensitiv für die Werte von χ^2/n bleibt, da $\chi^2/n \approx 1 \pm (2/n)^{1/2}$ unter der Annahme dass nur eine geringe Anzahl an Freiheitsgraden $n \leq 5$ vorhanden ist und somit der Akzeptanzbereich für χ^2/n an $1/\sqrt{n}$ annähert. Somit wird deutlich, dass moderate Veränderungen in χ^2/n zu signifikanten relativen Modifikationen von $P_n(\chi^2)$ führen. Als Beispiel gelten für den mittleren Bereich (50%) für $\chi^2/20$ Werte zwischen 0.77, 1.19 und Bereich von 90% liegt die Akzeptanz zwischen 0.54, 1.57. Die Unterschreitung für $\chi^2/20$, z.B. für einen Akzeptanzbereich unterhalb von 0.4 und oberhalb von 2.0, führt nicht nur zu einer Unzufriedenheit, sondern zugleich auch zu einer inakzeptablen Berechnung. Neben der Beständigkeit für einen gegebenen Parametersatz und Antworten gibt die Größe χ^2/n zugleich auch die Konsistenz der gemessenen Daten an. Demnach sollten für zu große oder zu kleine Angaben der Größe χ^2/n die gesamten Datenmenge (Modellparameter und/ oder experimentelle Daten) nicht willkürlich verworfen werden, da bereits einzelne Abweichungen der Antworten die Kohärenz herabsetzt. Bereits eine einfache Beurteilung und Einstufung von fragwürdigen Ergebnissen, bezogen auf die Werte

der einzelnen Konsistenzen (z.B. die Werte von χ^2 , die für jede Antwort erhalten werden, auch wenn für den gesamten Parametersatz nur ein einziger Wert vorhanden wäre) wäre irreführend. Grund hierfür ist, dass die Summe der betreffenden Einzelkonsistenzen (die numerisch durch die Division der Quadrate der Abweichungen d_i^2 und der Summe der betrachteten Varianzen der berechneten $\text{var}(r_i^{\text{comp}})$ und zugleich experimentellen $\text{var}(r_i^{\text{exp}})$ Antworten erhalten werden) nicht gleich der Gesamtkonsistenzen (z.B. die gesamte χ^2) der gesamten experimentellen Datensätze wäre. Ursache dafür ist, dass die Unsicherheitsmatrix der Abweichungen $C_d(\alpha^0) \triangleq C_{rc}(\alpha^0) - C_{r\alpha} [S(\alpha^0)]^\dagger - [S(\alpha^0)] C_{\alpha r} + C_x$, im Allgemeinen nicht diagonal ist, selbst wenn $C_{rc}(\alpha^0)$ und C_x diagonal sind. Die Prüfung aller Teilmengen auf ihre Übereinstimmung des gesamten Vektors für n Antworten mit den gegebenen Tabellen ist kaum zu verwirklichen, da die Anzahl der Teilmengen eines Vektors mit n Antworten gleich $2^n - 1$ ist. Solch eine Untersuchung ist nur durchführbar, wenn die Anzahl der gegebenen experimentellen Daten enorm klein ist. Eine erfolgreiche Prozedur für die Bestimmung der Antworten mit der minimalsten Beständigkeit, für eine gegebene Reihe von Parametern, basiert auf dem Prinzip eine Antwort zu einem Zeitpunkt auszulassen und $\chi_{n-1}^2(1)$ der übrig gebliebenen Antworten $n-1$ zu evaluieren. Die Wiedergabe der ausgelassenen Antwort erfolgt im Anschluss in der Liste der Antworten. Dabei wird eine andere Antwort (nächster Wert) ausgelassen und die zugehörige $\chi_{n-1}^2(2)$ evaluiert. Die Wiederholung dieser Vorgehensweise erfolgt solange bis alle $\chi_{n-1}^2(i), i=3, \dots, n$ erfolgreich evaluiert sind. Die Antwort mit dem geringsten χ_{n-1}^2 , während der Auslassung, wird infolgedessen als die Antwort mit der minimalsten Beständigkeit gekennzeichnet. Weiterhin wird diese Antwort in der Konsistenzbeurteilung ganz unten platziert und für weitere Betrachtungen außen vor gelassen. Die weitere Evaluierung der verbleibenden Antworten $n-1$ bzw. die Antworten mit einer höheren Beständigkeit, wird wiederholt um die nächste Antwort mit der zweitgeringsten Beständigkeit zu identifizieren. Diese Wiederholung erfolgt bis die gesamte konsistente Sequenz erzeugt ist. Der Rechenaufwand für solch eine Abfolge liegt dabei bei $n(n+1)/2$ für χ^2 . Im Vergleich dazu sind für alle möglichen Teilmengen von n Antworten $(2^n - 1)$ Berechnungen erforderlich. Die Größe χ^2/n misst somit die Beständigkeit an n experimentellen Daten für die gegebenen Parametersätze der Modelle. In Bezug hierzu, dass wenn χ_1^2 sich für einen bestimmten Satz an n experimentellen Daten und χ_2^2 sich für einen anderen Satz an n Daten bezieht, gilt, dass $\chi_1^2 < \chi_2^2$. Dies bedeutet, dass der erste Satz im Vergleich zum zweiten beständiger ist. Bei Veränderung der Anzahl der Antworten ist es nicht von vorneherein eindeutig, wenn auch für kleine χ^2/n Werte,

in wie weit die Antworten im Einklang mit den gegebenen Parametern sind. Als Beispiel kann ein Wert für $P_n(\chi^2) = 0.85$ berücksichtigt werden. Dieser kann sich sowohl für $\chi^2/5 = 1.623$ als auch für $\chi^2/10 = 1.453$ beziehen. Für einen berechneten Wert bei gegebenen Parametersätzen und fünf Antworten, von z.B. $\chi^2/5 = 1.6$ und einem zweiten Wert für zehn Antworten $\chi^2/10 = 1.5$ wird der erste Satz für eher beständig betrachtet, da dieser im Mittelbereich von 70% liegt und der zweite nicht. In solchen Fällen ist es ratsamer, die Größe $Q_n(\chi^2) = 1 - P_n(\chi^2)$ als zusätzliche Messung der Beständigkeit zu verwenden. Die Kalibrierung für Parametersätze muss ganz allgemein die Verifikation der wechselseitigen Konsistenz enthalten, welche erst durch die Erzeugung der Konsistenten- Sequenz und dann durch die Wahrscheinlichkeiten $Q_i(\chi^2), i=1,2,\dots,n$, während der Sequenzgenerierung, bestimmt wird. Die Antwort mit der geringsten Beständigkeit wird am Ende der Sequenz dargestellt und die Wahrscheinlichkeiten $Q_i(\chi^2)$ verringern dabei die Gesamtanzahl der Antworten. Solch eine Untersuchung stellt nicht nur die Antwort mit der geringsten Beständigkeit dar, sondern gleichzeitig auch die Hierarchie der zugehörigen Antworten und deren Konsistenzen für die Konsistenz- Sequenz.

Bei Bedarf müssen auch die regelwidrigen Modellparameter bestimmt werden. Dies kann, neben der Möglichkeit für jede Antwort die zugehörigen χ^2 zu berechnen, auch durch Gleichung (2.25), also den zugehörigen bestmöglich beurteilten Parametern $\alpha^{be} = \alpha^0 + (C_{\alpha r} - C_{\alpha} [S(\alpha^0)]^{\dagger}) [C_d(\alpha^0)]^{-1} d$, erfolgen. Diese Vorgehensweise der individuellen Parameteranpassung für die betrachteten Antworten, kann durch eine schrittweise Untersuchung entlang der Konsistenz- Abfolge erfolgen. Dabei wird festgehalten welcher Parameter stärker variiert. Die Parameteranpassungen durch die konsistenten Teilmengen der Antworten neigen eher dazu grenzwertig zu sein. Die weniger beständigen Antworten und fragwürdigen Parameter tendieren dazu starken Anpassungen zu unterliegen und erfordern somit speziellere und weitere Untersuchungen.

3. Experimentelle Datenassimilierung und Modellkalibrierung

3.1 Datenanpassung und Modellkalibrierung der Rechenprogramme FLICA4 und ANSYS CFX durch die Daten aus dem NUPEC BFBT Experiment

Die Erhöhung oder Reduzierung der Leistung eines Siedewasserreaktors kann durch den Kühlmitteldurchsatz, anhand der Umwälzpumpen, reguliert werden. Die dabei im Reaktordruckbehälter entstehenden Siede- und Kondensationsvorgänge haben enormen Einfluss auf die Reaktorphysik und der nuklearen Thermohydraulik. Charakteristisch für diesen Reaktortyp ist der Phasenwechsel im Reaktordruckbehälter, d.h. das Arbeitsmedium wird bewusst zum Sieden gebracht. Die Komplexität hierfür ist das Ausfindigmachen bzw. die Vermeidung von unerwarteten Siedevorgängen. Enge Passagen, z.B. zwischen den Brennstäben und den Abstandshaltern, oder in Transportleitungen mit starken Krümmungen sind während den Anfahrvorgängen, dem Normalbetrieb und bei Störfällen des Reaktors permanent kritische Stellen, die ein rasches Filmsieden hervorrufen können. Die Aufgabe der Reaktorsicherheit ist es somit, diese oftmals dreidimensionalen und äußerst komplexen Vorgänge durch präzise Kenntnisse der Verhaltensmerkmale und ihre Auswirkungen vorhersagen zu können, um eine sichere Auslegung technischer Bauteile in Großanlagen zu ermöglichen. Die Verwendung von rechnerunterstützten Simulationsprogrammen für die nukleare Thermohydraulik spielt dabei eine entscheidende Rolle. Core- oder Systemcodes müssen sich allerdings erst einmal für die vorgesehenen Anwendungsgebiete behaupten, d.h. sie müssen geprüft werden in wie weit und wie genau sie das vorliegende Problem wiedergeben können. Bekannte und bewährte Rechenprogramme auf diesem Forschungsgebiet sind aktuell TRACE, ATHLET, CATHARE und FLICA4. Diese gehören zu jenen Rechenprogrammen, die durch langjährige internationale Verifikationsprogramme geprüft worden sind und heute den Stand der Technik auf diesem Gebiet bilden. Die stetigen Entwicklungen der CFD Technologien ermöglichen, aufgrund der Tatsache, dass in den letzten Jahren eine permanente Verbesserung in der Computeranwendung stattfindet, Verwendung von allgemeinen, dreidimensionalen Rechenprogrammen für Kernreaktorsimulationen. Eines dieser Programme ist das weltweit bekannte und anerkannte Programm ANSYS CFX.

In diesem Abschnitt von Kapitel 3.1 werden, anhand der experimentellen Daten aus der „BWR Full Size Fine Mesh Bundle Test (BFBT)“, die durch die NUPEC

durchgeführt worden ist, das thermohydraulische Corecode FLICA4 und das allgemeine dreidimensionale CFD Programm ANSYS CFX für eine Berechnung des BFBT Benchmarks verwendet und gegenübergestellt.

Die enthaltenen Modelle, sowohl in FLICA4 als auch in CFX, zur Beschreibung der physikalischen Verdampfungs- und Kondensationsphänomene erfordern das Lösen mathematischer Gleichungen, die Kenntnisnahme der Eingabegrößen und die Verwendung von Randbedingungen. Die Mehrzahl dieser verwendeten Größen bezieht sich auf experimentelle oder empirische Untersuchungen, die mit Fehlern und Unsicherheiten behaftet sind. Somit bleibt in Kapitel 3.1.2 die Intention für die durchzuführenden CFD Simulationen die Kalibrierung der Modellparameter zur bestmöglichen Einschätzung der Systemantworten für die axialen Dampfblasenverteilungen, unter der Verwendung der mathematischen Methode nach [[Cacuci und Ionescu-Bujor, 2010b](#)].

3.1.1 Die Beschreibung der „BWR Full- Size Fine mesh Bundle“ Test Anlage

Validierungsvorhaben weiterentwickelter oder neuer CFD Programme erfordern detaillierte und qualitativ hochwertige experimentelle Messungen. Analysen von realen Siedevorgängen für Bündel Elemente eines SWR in realer Größe und mit Wasser / Wasserdampf als Arbeitsmedium sowie unter realen Arbeitsbedingungen sind in der Vergangenheit durch Modellierungen durchgeführt worden. Dadurch wird deutlich, dass derartige experimentelle Durchführungen technischer Großanlagen unter angepassten Randbedingungen, d.h. nicht unter realen Arbeitsbedingungen, nur beschränkt die Möglichkeit für die CFD Codes bietet, futuristische Ergebnisse von Weiterentwicklungen zu liefern. Studien von Großmodellen für Siede- und Druckwasserreaktoren konnten durch das Nuclear Power Engineering Center ([NUPEC](#)) zahlreich durchgeführt werden. Die Ergebnisse und Betriebsgrößen dieser Ausarbeitungen stellen heute eine zuverlässige Datenbasis dar, die auf langjährige Erfahrungen und Verwendung neuester Messinstrumentierungen zurückzuführen sind. Die Ermittlung der Dampfblasenverteilungen wird z.B. durch Computertomographische Technologien (CT) durchgeführt. Diese Methode bildet bis heute den Stand der Technik für derartige Vorhaben. Eine auf dieser Grundlage basierende experimentelle Ausarbeitung ist das internationale OECD/NRC BFBT („BWR full-size Fine-mesh Bundle Test“) Benchmark, welches unter beachtlichem Aufwand eine Datenreihe zur Verfügung stellt. Diese ermöglicht erstmals Rechenmodelle zu verwenden, die unter Realbedingungen und beständigen experimentellen Daten durchführbar sind.

3.1.1.1 Die Versuchsanlage

Die Anlage des BFBT Benchmarks bezieht sich auf die Untersuchung von verschiedenen Parametern, wie z.B. der Dampfblasenverteilungen oder der kritischen Auslegungsparameter für ein Bündelelement eines Siedewasserreaktors. Die Realbedingungen werden dabei durch elektrische Heizstäbe und implementierte Druckbehälter erzeugt. Die Versuchsanlage ist für einen maximal erzeugbaren Druck von 10.3 MPa und einer Temperatur von 315 °C, einer Leistung von 12 MW und einem maximalen Durchsatz von 20.83 kg/s limitiert. Die enorme Kühlmittelumwälzung wird, wie in Abbildung 1 zu sehen ist, durch entsprechende Zirkulationspumpen (1) gewährleistet. Als Kühlmittel wird dabei demineralisiertes Wasser verwendet, welches hauptsächlich durch Bauteile aus rostfreiem Stahl gefördert und anhand von Filtern (2) sauber gehalten wird. Die, je nach Testfall benötigte, Kühlmittelmenge wird anhand der installierten Ventile (3) eingestellt, die sich unmittelbar hinter den Pumpenfiltern befinden. Zur Vermeidung von Thermoschocks wird das noch einphasige Kühlmittel in einer Einlaufstrecke (4) vorgewärmt und auf die gewünschte Eintrittstemperatur gebracht. Anhand des Massenstroms, der Ein- und Auslassdrücke, der Wärmeleistung sowie Einlasstemperatur können in der Teststrecke (5), die zu untersuchenden Strömungsformen erzeugt werden. Die Messinstrumentierung befindet sich innerhalb der Teststrecke (5), die in Kapitel 3.1.1.3 näher erläutert wird. Nach Austritt des verwendeten Kühlmittels wird in einer Separationskammer (7) der vorhandene Dampfanteil von der Kühlmittelmischung abgeschieden und im Kondensator (8) durch Sprayduschen (9) abgekühlt und dem Kreislauf wieder zugeführt. Die Regulierung der Sprayköpfe erfolgt durch angebrachte Ventile. Für die Kondensierung selbst wird ein zweiter Kühlkreislauf verwendet, in dem das Kondenswasser durch eine Pumpe (10) und einen luftgekühlten Wärmetauscher (11) zirkuliert wird, bevor es wieder in die Separationskammer eingespeist werden kann. Der Druckausgleichsbehälter in (6), gewährleistet eine Einhaltung des gewünschten Analysedrucks in der Teststrecke bei zu geringer Wärmeleistung. Die Anlage besitzt die Möglichkeit sowohl stationäre als auch komplexe instationäre Betriebsbedingungen zu simulieren.

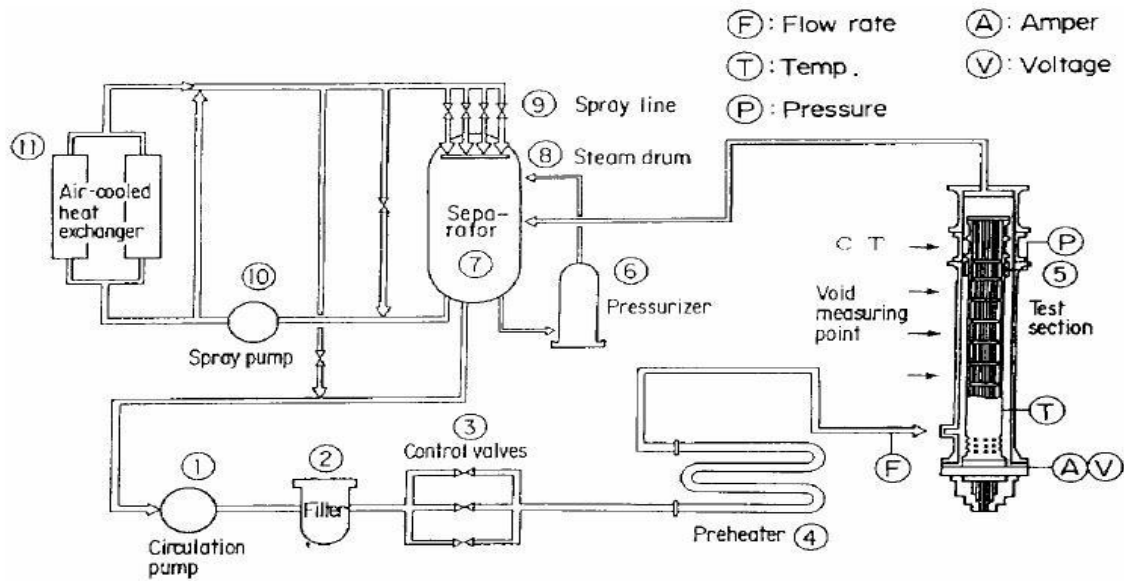


Abbildung 1: Die gesamte BFBT Benchmark Versuchsanlage

(Quelle: NEA Nuclear Science Committee)

3.1.1.2 Das BFBT- Testbündel

Die Abwandlung der Brennelementgeometrie richtet sich hauptsächlich nach dem jeweiligen Anwendungsfall. In der BFBT Benchmark Teststrecke sind zwei Bündelarten verwendbar, die „Current Burnup“ Analyse mit den Abstandshalter im „Grid Design“ und die „High Burnup“ Analyse mit den Abstandshaltern im „Ferrule Design“. Vorab sei hier erwähnt, dass in dieser Arbeit ausschließlich die Analyse des „High Burnup“ Testfalls für das thermohydraulische Corecode FLICA4 und dem allgemeinen CFD Programm ANSYS CFX verwendet wird. Für beide Bündeltypen gilt, dass die Brennstäbe elektrisch beheizt werden. Diese Vorgehensweise dient zur Simulation der nuklearen Kernspaltung in einem realen Brennstab. Dabei werden die Brennstäbe in einer 8 x 8 Anordnung belegt. Ihr Außendurchmesser beträgt 12.3mm und der Mittenabstand der jeweiligen Heizstäbe 16.2mm . Die Werkstoffe für das Hüllmaterial der Heizstäbe, den Isolator und der Heizwendel selbst bestehen aus Inconel 600, Bornitrid sowie Nickelchrom. Im Fall „Current Burnup“ werden 62 Heizstäbe und zwei Wasserkanäle, die diagonal zueinander gerichtet sind, verwendet. Der „High Burnup“ Auslegungsfall besteht aus 60 Heizstäben und einem zentralen Wasserkanal. Die Abbildung 2 zeigt das erstellte CAD Modell mit ProEngineer für den Current Fall mit 62 Heizstäben und zwei Wasserkanälen sowie

den zugehörigen sieben Abstandshaltern. In Abbildung 3 ist der Auslegungsfall für den „High Burnup“ mit 60 Heizstäben und einem Wasserkanal zu sehen. Der Außendurchmesser für den mittigen Wasserkanal im Fall „High Burnup“ beträgt 34mm und ist 2.26 mal größer als die jeweiligen Wasserkanäle im „Current Burnup“. Als Werkstoffmaterial wird auch hier Inconel 600 verwendet.

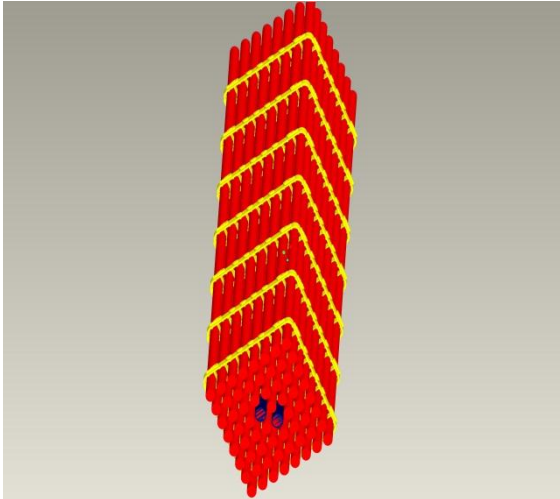


Abbildung 2: Current Burnup
mit Grid Desing Abstandshaltern

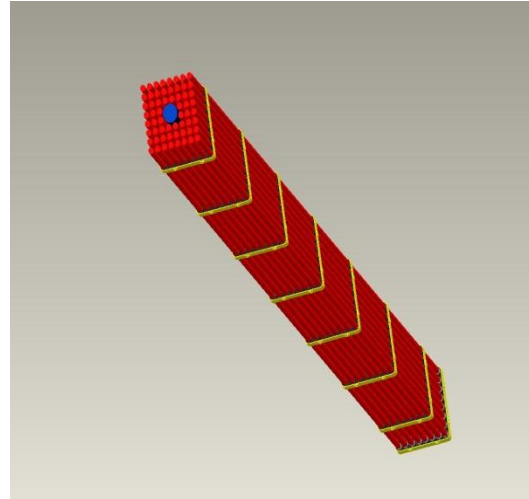


Abbildung 3: High Burnup mit Ferrule
mit Ferrule Desing Abstandshaltern

Die Unterschiede beider Auslegungsfälle sind in der Tabelle 1 aufgelistet. Weiterhin ist noch festzuhalten, dass die Höhe beider Abstandshalter einen Unterschied von 10mm besitzen. Unter Berücksichtigung aller implementierten Festkörper im Brennstabbündel, verbleibt im „High Burnup“ dem Kühlmittel eine Durchflussfläche von 9463mm^2 . Im „Current Burnup“ liegt dieser bei 9781mm^2 .

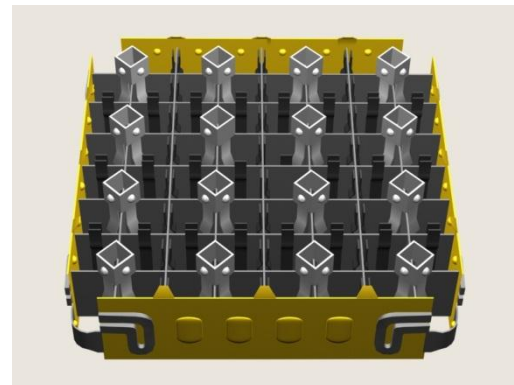
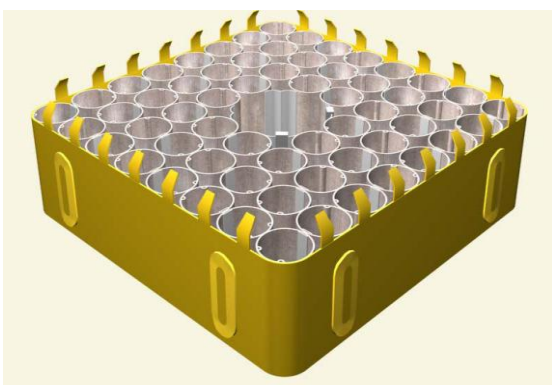


Abbildung 4: Abstandshalter Ferrule (links) und Grid (rechts)
(Quelle: NEA Nuclear Science Committee)

Das besondere Augenmerk für die Abstandshalter beruht darauf, dass für beide Designentwürfe gilt, dass unter geometrisch günstiger Auswahl ein vorteilhafter Strömungsverlauf für den kritischen Fluss erzeugt werden kann. Die enorme Querschnittsverengung zwischen Abstandshalter und Heizstab sorgt für eine erhöhte Wärmeübergangszahl des Kühlmittels und einen Druckabfall an den jeweiligen Positionen. Somit bilden die Abstandshalter auch eine größere Fläche, an denen sich bevorzugt Dampfblasen ablagern und ein rasches Filmsieden, unter kritischen Wärmeflussbedingungen, die Folge ist. An dieser Stelle sei nochmals erwähnt, dass in dieser Arbeit ausschließlich der Fall der „High Burnup“ für das thermohydraulische Core Code FLICA4 und dem allgemeinen CFD Code ANSYS CFX untersucht wird.

	Current	High burnup
Anzahl der Brennstäbe	62	60
Brennstabaußendurchmesser (mm)	12.3	12.3
Heizlänge (mm)	3708	3708
Anzahl der Wasserkanäle	2	1
Wasserkanalaußendurchmesser (mm)	15.0	34.0
Brennstabmittenabstand (mm)	16.2	16.2
Länge der Durchflussfläche (mm)	132	132
Anzahl der Abstandshalter	7	7
Abstandshalterdesign	Grid	Ferrule

Tabelle 1: BFBT Benchmark Current und High burnup Auslegungsparameter

3.1.1.3 Methoden zur Messung der Dampfblasenverteilung

In der BFBT Teststrecke sind zwei Messsysteme implementiert. Zum einen der Gammastrahlen- CT (Computer Tomographie) - Scanner und zum anderen mehrere Gammastrahlen Densitometer. Die feinskaligen Messungen werden mittels der CT Methode erfasst, die sich 50mm oberhalb der Messtrecke befinden. Die Messaufzeichnungen für die Dampfblasenverteilung innerhalb der Teststrecke werden auf drei unterschiedlichen Messhöhen durchgeführt in dieser Arbeit für die Rechenprogramme FLICA4 und ANSYS CFX verwendet. Die Messaufzeichnungen, wie in Abbildung 5 zu sehen ist, werden auf den Höhen 682mm , 1706mm und 2730mm durchgeführt. An diesen axialen Positionen befinden sich auch die dazugehörigen Densitometer. Von diesen sind auf jeder Messebene 512 vorhanden. Zur Vermeidung von Ungenauigkeiten in den Messungen, die durch ein Überhitzen der Heizstäbe entstehen können und eine Strukturveränderung hervorrufen, sind diese mit einer Beryllium- Schutzverkleidung umhüllt. Titanverkleidungen werden für die Druckbehälterversiegelungen verwendet. Die Vermeidung von Fluktuation in den

Messergebnissen werden durch die mehrfache Wiederholung und anschließende zeitliche Mittelung gewährleistet. Das Prinzip der Messsysteme für die gemittelten transienten Dampfverteilungen ist in Abbildung 6 dargestellt. Die Gammastrahlen werden dabei über einem Objekt gescannt, bei der die Strahlausbreitung einer „Fächerform“ entspricht. Dabei erfahren die abgesonderten Strahlen eine Schwächung, die für Wasser und Dampfblasen unterschiedlich ist. Genau diese Abschwächung wird durch die Detektoren erfasst und ermittelt. Dieses Messprinzip ist eine gängige Vorgehensweise in der Medizintechnik. Die Kalibrierung der Detektoren wird dabei durch einen Referenzdetektor sichergestellt. In den transienten Testfällen des BFBT Benchmark werden neben den Größen für die Dampfblasenverteilungen auch die Druck-, Fluss-, Leistungs- und Temperaturveränderungen analysiert. Anhand der Aufzeichnungen der Gammastrahlen- Densitometer wird in dieser Arbeit die transiente Berechnung für die Dampfblasenverteilung auf den drei vorgestellten Messebenen durchgeführt.

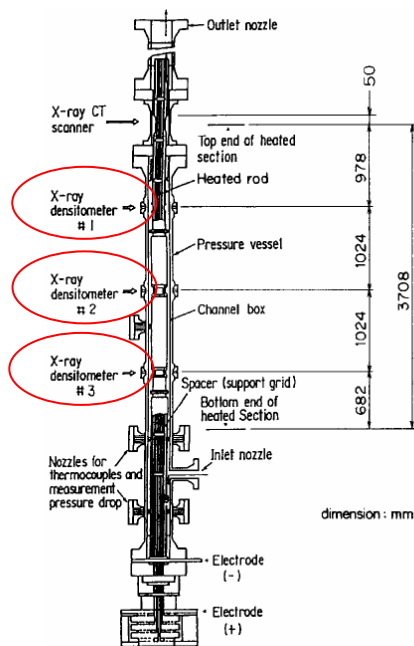
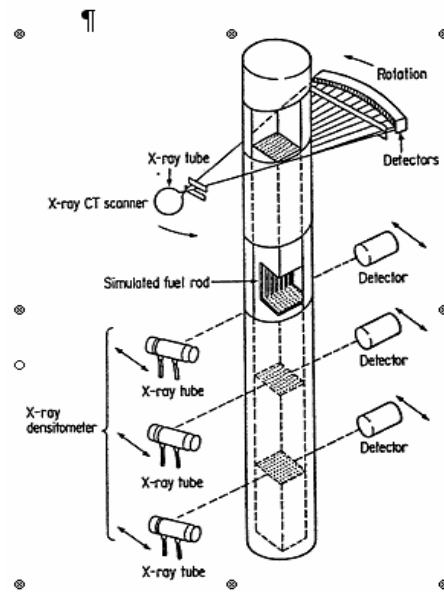


Abbildung 5: BFBT-Benchmark Teststrecke Positionen der Messsysteme



(a) Measuring

Abbildung 6: Funktionsweise der axialen Gammastrahlen Densitometer Messsysteme

3.1.1.4 Beschreibung des Testfalls „Pump Trip“

Der für diese Arbeit ausgewählte Testfall ist der so genannte „Pump Trip“. Zur Vermeidung von Missverständnissen werden in dieser Arbeit die Bezeichnungen des ausgesuchten Testfalls aus dem BFBT Benchmark übernommen. Auch die Bezeichnungen für die Datenreihen werden wie im BFBT Benchmark gekennzeichnet. Somit stellt der zu untersuchende Testfall, 4-102-009-27 aus der BFBT Benchmark Datenreihe, einen transienten Fall vor. Die axiale Wärmeleistung ist dabei einheitlich und in 24 gleiche Abschnitte unterteilt. Jeder Abschnitt selbst hat eine Länge von $154.5 [mm]$. Die radiale Wärmeleistung entspricht derer aus Abbildung 7, wobei die Heizstäbe in fünf verschiedene Gruppen eingeteilt sind, die in Tabelle 2 näher beschrieben werden. Die zeitabhängigen Randbedingungen sind in der Abbildung 8 dargestellt.

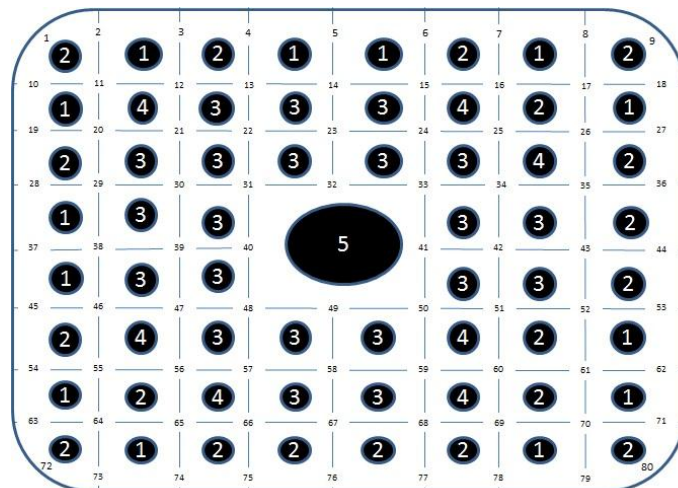


Abbildung 7: Radiale Wärmeverteilung für den Auslegungsfall High Burnup mit seinen 5 Heizstabgruppen

Gruppennummer	Gruppentyp	Power Peaking Faktor
1	Heizstab	1.30
2	Heizstab	1.15
3	Heizstab	0.89
4	Heizstab	0.45
5	Wasserkanal	0.00

Tabelle 2: Radiale Heizstabverteilung für den Auslegungsfall „High Burnup“

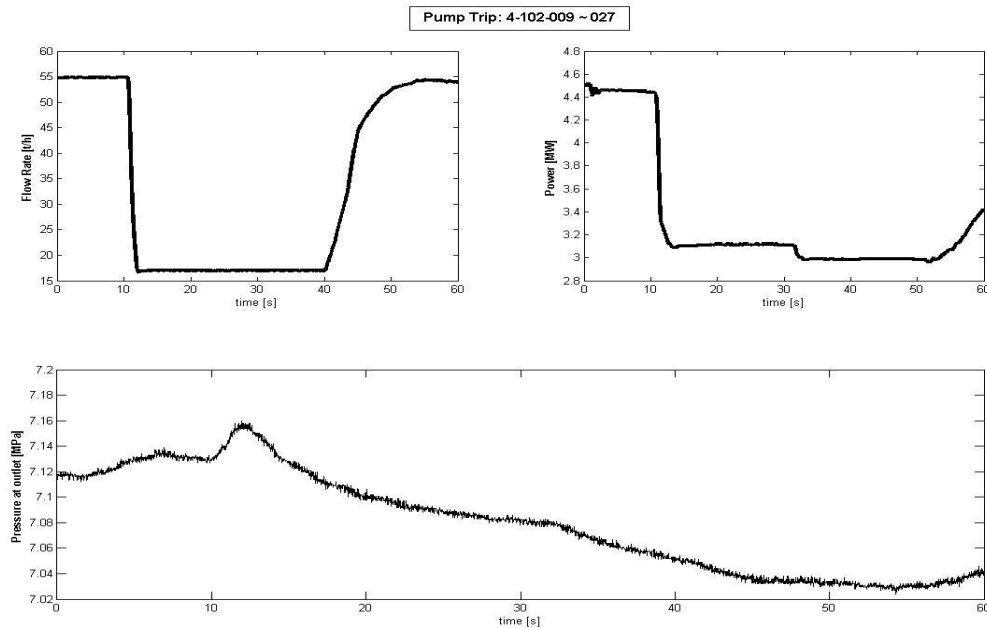


Abbildung 8: Zeitliche Entwicklung der Kühlmitteldurchströmung (links oben), der Heizleistung (rechts oben) und des Auslassdrucks (unten Mitte)

3.1.2 Bestmögliche Modellkalibrierung durch die Verwendung der thermohydraulischen Rechenprogramme FLICA 4 sowie ANSYS CFX und der Datenassimilierung durch die experimentellen Messungen des BFBT Benchmarks

Die Analyse der Dampfblasenverteilung aus der Datenreihe 4102-001~027 bildet den im vorherigen Kapitel erwähnten transienten Fall des „PumpTrips“, welcher mittels der Gammastrahlen Densitometer gemessen wird. In den folgenden Abschnitten dieses Kapitels werden die CFD Berechnungen für den Pump Trip mittels FLICA4 und ANSYS CFX vorgestellt. Anschließend wird für beide Codes unter der Verwendung der experimentellen Daten aus der Testreihe 4102-001~27, die mathematische Methode von [Cacuci und Ionescu-Bujor, 2010b] für eine Datenanpassung und Kalibrierung der gewichtigsten Modellparameter verwendet. Das Prinzip der Durchführung wird in Abbildung 99 (im Anhang dieser Arbeit) durch ein Flussdiagramm dargestellt.

3.1.2.1 Die BFBT Simulation durch das FLICA4 Code System

Für die detaillierte Analyse der Gesamtgeometrie bis in ihre letzten Details, ist ein entsprechendes CAD Modell nötig und dessen feinste Vernetzung. Das erzeugte FLICA4 Modell besteht aus einem einheitlichen hexagonalen Gitter mit 10^3 axialen Unterteilungen. Diese hohe Anzahl an Gitterelementen ermöglicht, eine exakte Ermittlung der Dampfblasenverteilungen an den Messebenen zu erhalten. Weiterhin gewährleistet dieses Rechengitter eine adäquate Berechnungszeit. Die Abrundungen der Bündelgeometrie werden mittels des hydraulischen Durchmessers berücksichtigt. Die Beschreibung der Brennstäbe ist dabei gemäß der Vorgaben aus dem BFBT Benchmark, die in Kapitel 3.1.1.4 beschrieben worden sind, implementiert. Für die Berechnungen der „Pump Trip“ Analyse mit FLICA4 werden folgende Korrelationen verwendet:

- Die Ishii Korrelation zur Beschreibung der relativen Geschwindigkeiten der Phasen
- Die Forster- und Greif-Korrelation zur Beschreibung der Wandüberhitzung bei ausgeprägter Keimsiedung
- Die Dittus- Bölder Korrelation zur Beschreibung der Nusseltzahl
- Das Reibungsmodell nach dem F3 Type
- Das Re- Kondensationsmodell nach dem F3 Type
- Das Turbulente Mischungs- und Diffusivitätsmodell nach Type F3
- Die Groeneveld Korrelation für die kritische Aufheizung

Das vollständig entwickelte FLICA4 Modell wird für die Berechnung der transienten Dampfblasenverteilung auf den jeweiligen 3 Messebenen, die in den Abbildungen 5 und 6 dargestellt sind, eingesetzt.

3.1.2.1.1 Bestmögliche transiente axiale Dampfblasenverteilungen mit FLICA4

Die aus den Messsystemen aufgezeichneten Mittelwerte der axialen Dampfblasenverteilungen werden in diesem Abschnitt für die Kalibrierung von ausgesuchten Modellparametern des thermohydraulischen Corecodes FLICA4 verwendet. Das Ziel dieser Analyse ist dabei bestmögliche Beurteilungen der Modellparameter für die numerischen Berechnungen zu erzielen. Die ausgewählten

Parameter, unter denen sich auch die Größen wie Ausgangsdruck, Heizleistung und Massenstrom befinden, haben ausschlaggebenden Einfluss auf die Berechnungen. Aus diesem Grund wird fortan die Begriffsverwendung, „prägnante Parameter“ für diese verwendet. Die nähere Betrachtung dieser erfolgt im anschließenden Abschnitt. Zusätzlich zu diesen „prägnanten Parametern“ werden neuen weitere Systemparameter verwendet, die unter anderem entscheidende Beiträge für die Berechnung der Dampfblasenverteilung mit FLICA4 haben. Zu diesen zählen die Größen aus der Ishii Korrelation (α_1) zur Beschreibung der relativen Phasengeschwindigkeit zueinander, die Größen (α_2 , α_3) und (α_4) aus der Forster- und Greif- Korrelation für die Beschreibung der Sättigungstemperatur an den überhitzten Oberflächen der Heizstäbe im Fall vom unterkühlten Sieden, die Größen (α_5 , α_6) und (α_7) aus der Dittus- Bölter- Korrelation zur Beschreibung der Nusseltzahl und schließlich die Größen aus den Reibungsmodellen (α_8) und (α_9). Diese neuen Parameter sind dabei wie folgt definiert:

- α_1 = Aus der Ishii Korrelation, die die relative Geschwindigkeit beider Phasen zueinander beschreibt.
- $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ = Aus der Forster- und Greif- Korrelation für die Sättigung bei Wandüberhitzung und ausgebildeter Keimsiedung

$$\Delta T_{Sat} = \alpha_2 \cdot \left(\frac{\Phi}{10^5} \right)^{\alpha_3} \cdot \left(\frac{P}{10^4} \right)^{\alpha_4}$$

- $\alpha_5, \alpha_6, \alpha_7$ = Aus der Dittus- Bölter Korrelation zur Bestimmung der Nusseltzahl
 - (Re < 2000)

$$Nu_{lam} = 4.36$$

- (Re > 5000)

$$Nu_{turb} = \alpha_5 \cdot Re^{\alpha_6} \cdot Pr^{\alpha_7}$$

- (2000 ≤ Re ≤ 5000)

$$Nu_{trans} = \left(Nu_{lam} \cdot \frac{5000 - Re}{3000} \right) + \left(Nu_{turb} \cdot \frac{Re - 2000}{3000} \right)$$

- α_8, α_9 = Aus der dem Reibungsmodell zur Berechnung des isothermen Reibungskoeffizienten bei dem gilt:

- $(Re < Re_{lam})$

$$f_{iso} = \frac{A_{turb}}{Re_{lam}^B}$$

- $(Re > Re_{turb})$

$$f_{iso} = \frac{A_{turb}}{Re_{turb}^B}$$

- $(Re_{lam} < Re < Re_{turb})$

$$f_{iso} = \frac{A_{turb}}{Re_{turb}^B} \cdot \frac{Re - Re_{lam}}{Re_{turb} - Re_{lam}} + \frac{A_{lam}}{Re_{lam}^B} \cdot \frac{Re_{turb} - Re}{Re_{turb} - Re_{lam}}$$

Anhand der Systemparameter aus Tabelle 3 werden die transienten Dampfblasenverteilungen, mittels der Messung durch die Gammastrahlen Densitometer, kalibriert. Die gemessenen Werte aus dem BFBT Benchmark, die in Abbildung 9 dargestellt sind, enthalten die Dampfblasenverteilungen auf den Ebenen 2703, 1706 und 682. Diese drei experimentellen Datenreihen werden fortan als Systemantworten bezeichnet und mit R_1 für die Datenreihe 2703, R_2 für die Datenreihe 1706 und R_3 für die Datenreihe 682 gekennzeichnet. Die Messdaten für R_1 , R_2 und R_3 aus Abbildung 9 (gekennzeichnet mit „Experimental“) sowie deren Randbedingungen, aus der Abbildung 8, für den Testfall 4102-001~027 beinhalten alle 20 Millisekunden zeitliche Mittelwerte über eine Gesamtzeit von 60 Sekunden. Eine BESTEST Analyse für solch kurze Zeitschritte ist mit einer zu hohen Rechenzeit verbunden und nicht zweckgemäß in ingenieurtechnischen Anwendungen.

Parameter	Nominal $R_1 \wedge R_2 \wedge R_3$	BESTEST R_1	BESTEST R_2	BESTEST R_3
α_1 (Verteilungsparameter)	0.98 +/- 1%	1.001 +/- 0.70%	0.989 +/- 0.71%	1.001 +/- 0.71%
α_2 (Verdampfungsmodell KCR)	4.44 +/- 4%	4.433 +/- 3.99%	4.495 +/- 3.94%	4.380 +/- 4%
α_3 (Verdampfungsmodell A1)	-0.23 +/- 4%	-0.2302 +/- 3.99%	-0.232 +/- 3.95%	-0.226 +/- 4. %
α_4 (Verdampfungsmodell B1)	0.385 +/- 4%	0.3857 +/- 3.99%	0.3918 +/- 3.92%	0.3798 +/- 4%
α_5 (Nusseltmodell Koeffizient A)	0.023 +/- 4%	0.0230 +/- 3.98%	0.0239 +/- 3.83%	0.0224 +/- 4%
α_6 (Nusseltmodell Koeffizient B)	0.8 +/- 4%	0.8294 +/- 3.45%	1.1215 +/- 0.71%	0.8198 +/- 0.344%
α_7 (Nusseltmodell Koeffizient C)	0.4 +/- 4%	0.399 +/- 4%	0.399 +/- 4%	0.400 +/- 4%
α_8 (Reibungsmodell IsoAturb)	0.3164 +/- 4%	0.3165 +/- 0.79%	0.3166 +/- 0.79%	0.3164 +/- 0.79%
α_9 (Reibungsmodell IsoBturb)	0.25 +/- 1%	0.2554 +/- 0.72%	0.2523 +/- 0.71%	0.2554 +/- 0.71%

Tabelle 3: Nominale und bestmögliche Modellparameter für den Kalibrierungsprozess

Parameter	Nominalwerte
α_{10} (Massenstrom)	15.27 [kg/s] +/- 4%
α_{11} (Heizleistung)	4.5 [MW] +/- 4%
α_{12} (Auslassdruck)	7.16 [MPa] +/- 4%

Tabelle 4: Prägnante Parameter für die axiale Messung der Phasenverteilung

Die Kalibrierung der Parameter α_1 bis α_9 wird dadurch für die Zeitschritte von 100 Millisekunden durchgeführt; über eine Zeitspanne von 50.9 Sekunden, beginnend ab 9 Sekunden. Dies bedeutet, dass für die Kalibrierung der jeweiligen drei Ebenen insgesamt 1530 experimentelle Werte analysiert werden. Die berücksichtigten

Unschärfen der Systemparameter liegen alle im Mittelbereich ihrer Toleranzgrenzen und gewährleisten eine Einhaltung der zulässigen Parameterlimitationen. Als relativer Messfehler wird für alle drei Datenreihen mit einer Ungenauigkeit von 5% gerechnet. Die Verwendung dieser Daten für die Modellkalibrierung erfolgt unter der Annahme, dass unter den einzelnen Messwerten keine Beziehung, sowohl in Raum und Zeit, vorhanden ist. Anhand der ermittelten Sensitivitäten und der Standardabweichung der Modellparameter, aus Tabelle 3, kann nach Gleichung (2.32) die Kovarianzenmatrix der Systemantworten berechnet werden. Unter der weiteren Verwendung von Gleichung (2.27) kann, mit Hilfe der Abweichungen der Messergebnisse, der Chi-Square Indikator nach Gleichung (2.53) ermittelt werden. Dieser beträgt für die Analyse R_1 der Dampfblasenverteilung $\chi_1^2 = 462.25$, für den Analysefall R_2 liegt dieser bei $\chi_2^2 = 368.93$ und für R_3 bei $\chi_3^2 = 781.12$. Für jeweils 510 Systemantworten folgen die jeweiligen Konsistenz- Indikatoren der zugehörigen Datenreihen mit $\chi_1^2 = 0.906$, $\chi_2^2 = 0.722$ und $\chi_3^2 = 1.53$. Die aus den BESTEST Einzelberechnungen ermittelten bestmöglichen Modellparameter mit ihren reduzierten Unsicherheiten gegenüber ihren Nominalwerten sind in Tabelle 3 aufgelistet. Hervorzuheben ist dabei, dass die Modellparameter bereits vor der BESTEST Berechnung nahezu ideal bestimmt sind. Dies wird zum einen durch die weitgehend guten Berechnungen mit FLICA4 (durchgehende schwarze Linie), aus Abbildung 9, und zum anderen mit den geringen Verbesserungen der bestmöglichen Parameter gezeigt. Diesbezüglich werden jene Parameter durch die BESTEST Berechnung nur geringfügig verbessert. Die Parameter mit stärkeren Unsicherheiten und deren Reduzierungen variieren deutlich von ihren Nominalbeträgen. Besonders ersichtlich wird das für den Parameter α_6 aus dem Nusseltmodell. Die beständigen Daten und die geringen Variationen der Systemparameter ermöglichen stets die Wiedergabe der experimentellen Untersuchungen, welche in Kapitel 2.2 besprochen worden sind. Die bestmöglichen Systemantworten für die R_1 , R_2 und R_3 sind in der Abbildung 9 zu sehen. Die FLICA4 Berechnungen zeigen wesentliche Differenzen im Bereich von $9 \div 14$ Sekunden und $44 \div 59$ Sekunden. Dazwischen befinden sich die Werte überwiegend im Toleranzbereich der experimentellen Daten. Im Fall der BESTEST Berechnungen liegen nahezu alle Werte im Toleranzbereich. Dadurch wird die Beschreibung der Datenreihe 4-001-009~27 des BFBT nahezu perfekt und führt zu signifikanten Verbesserungen gegenüber den FLICA4 Werten. Im letzten Drittel der Analyse wird deutlich, dass die Sensitivitäten für die R_2 und R_3 Datenreihe nahezu Null sind und somit eine Deckung zwischen den experimentellen Messaufzeichnungen und den BESTEST Werten hervorrufen. Auch die Reduzierung der oberen und unteren Unsicherheitsbänder zeigt deutliche Verringerungen durch

die BESTEST Analyse für alle drei Messebenen. Diese sind in Abbildung 10, für die oberen, Abbildung 11, für die unteren Unsicherheitsbänder dargestellt. Dabei kennzeichnen die farbigen Flächen (R_1 orange, R_2 blau, R_3 grün) die Unsicherheitsbereiche der experimentellen Daten. Die in beiden Abbildungen vorzufindende Legendenbezeichnung „EXP“ weist auf die experimentellen Daten hin. Die Bezeichnung „CALC“ gibt die numerischen Berechnungen wieder und steht für „Calculation“. Die Begriffe „LUB“ und „UUB“ stehen für die unteren „lower uncertainty band“ und oberen Unsicherheitsbänder „upper uncertainty band“.

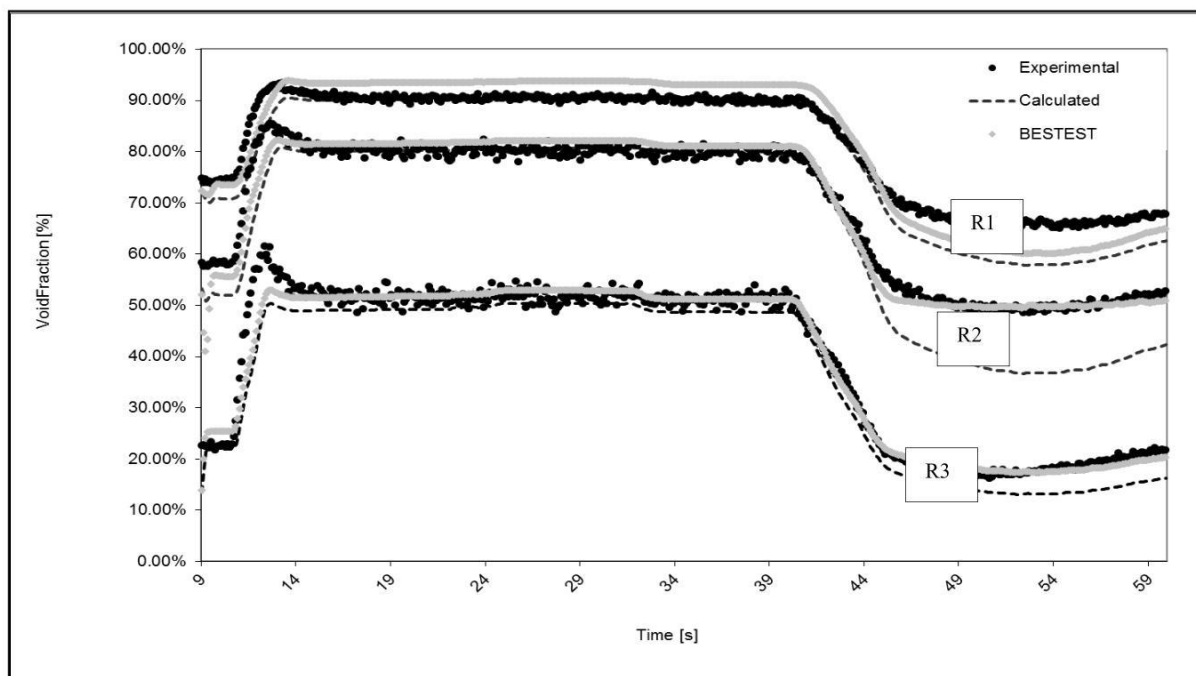


Abbildung 9: Vergleich zwischen experimentellen Messdaten aus dem BFBT Benchmark, den numerischen Berechnungen mit FLICA4 und den BESTEST Werten als bestmögliche Systemantworten.

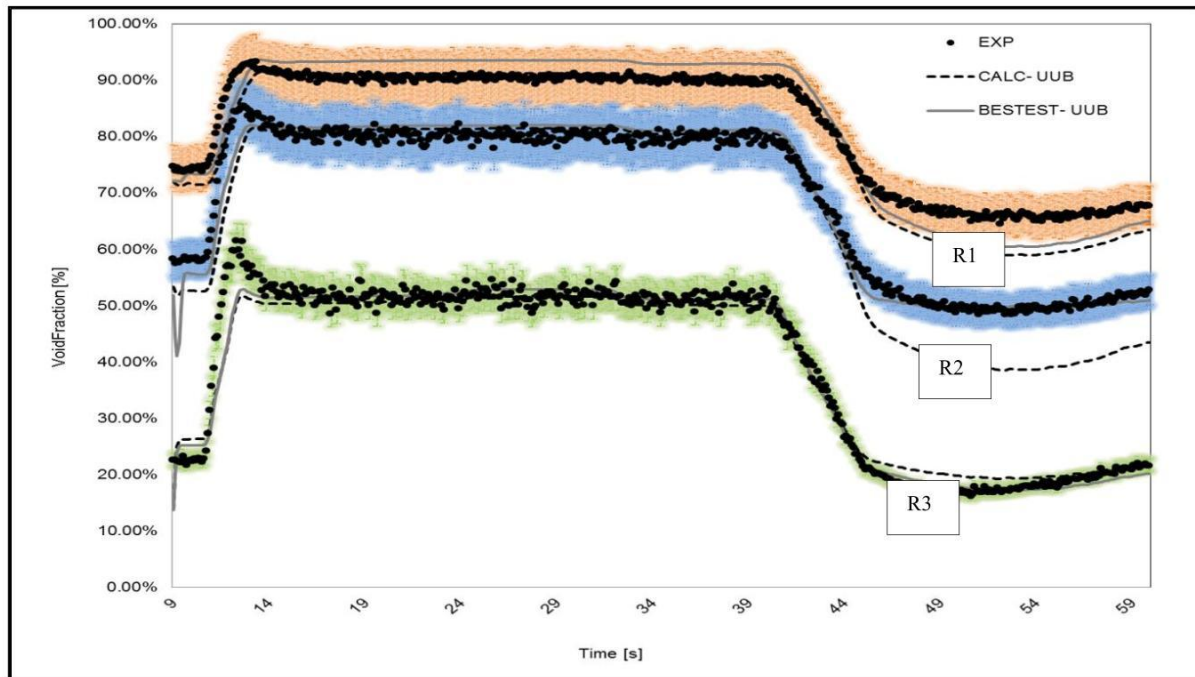


Abbildung 10: Unsicherheiten der experimentellen Daten der „oberen Unsicherheitenbänder“ der FLICA4 Berechnungen sowie der BESTEST Berechnungen

Die Korrelationen der Systemparameter werden in den Abbildungen 12, 13 und 14 abgebildet. Die maximalen Werte (+1) der normierten Matrixelemente werden dabei in rot und die minimalen (-1) in blau gekennzeichnet. Die dazwischen liegenden Wertigkeiten sind entsprechend durch die Farbcodes aus den Abbildungen zu entnehmen. Dabei wird die Nullwertigkeit mit der Farbe Grün dargestellt. Diese Farbcodierung wird fortan für alle weiteren Abbildungen der normierten Matrizen verwendet. Die Korrelation zwischen den Systemparametern und den Systemantworten werden in den Abbildungen 15, 16 und 17 dargestellt.

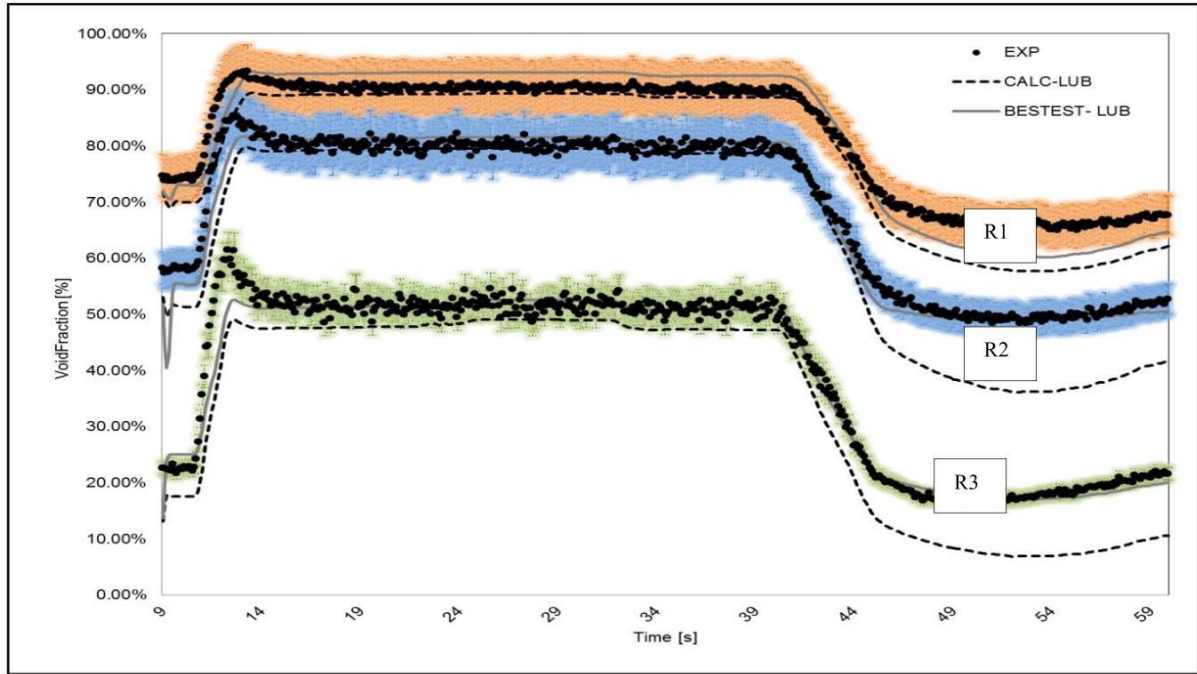


Abbildung 11: Unsicherheiten der experimentellen Daten der „unteren Unsicherheitenbänder“ der FLICA4 Berechnungen sowie der BESTEST Berechnungen

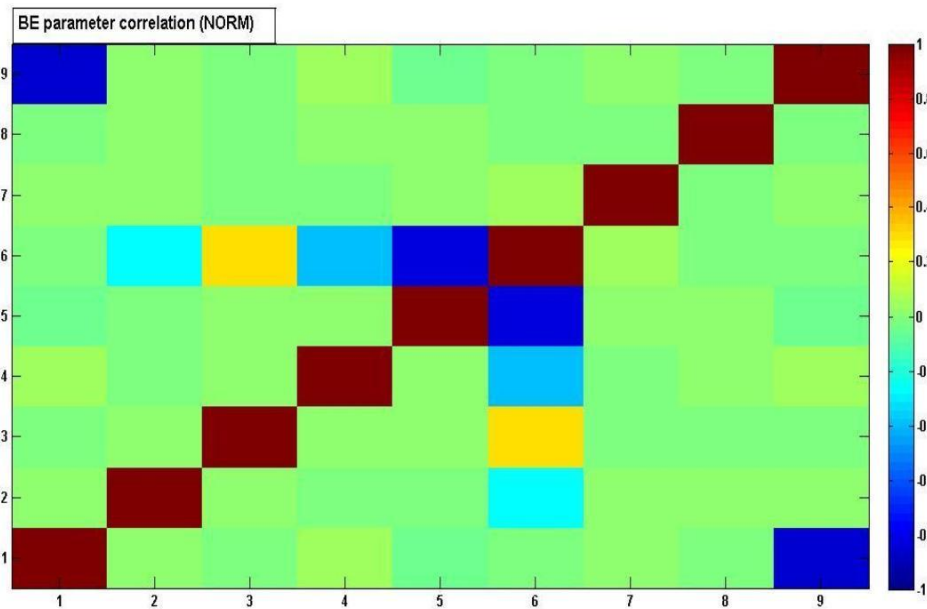


Abbildung 12: Bestmögliche Einschätzungen der Korrelationen der Systemparameter in normalisierter Darstellung für x682

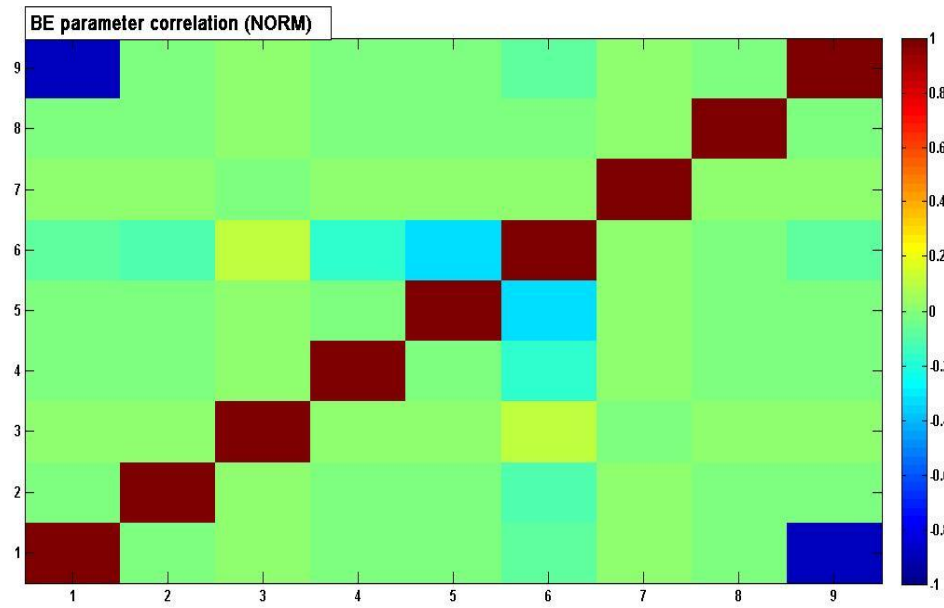


Abbildung 13: Bestmögliche Einschätzungen der Korrelationen der Systemparameter in normalisierter Darstellung für x1706

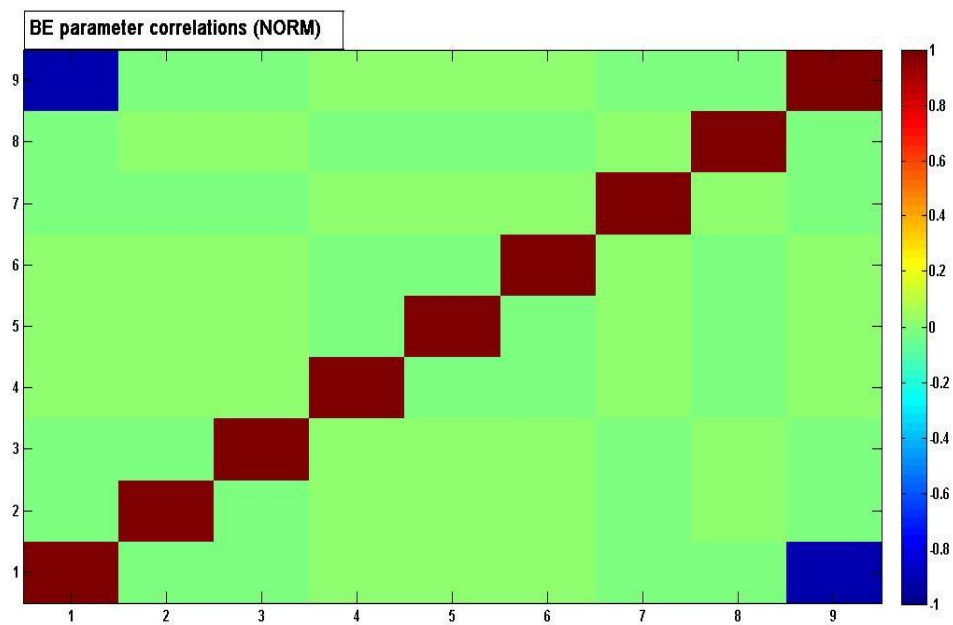


Abbildung 14: Bestmögliche Einschätzungen der Korrelationen der Systemparameter in normalisierter Darstellung für x2730

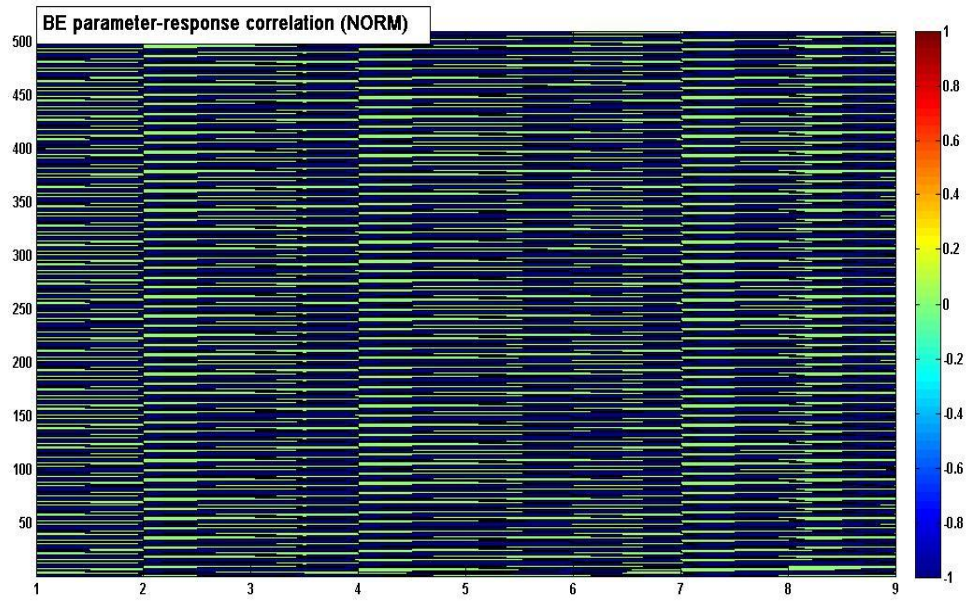


Abbildung 15: Bestmögliche Einschätzungen der Korrelationen zwischen den Systemantworten und Systemparametern für x682

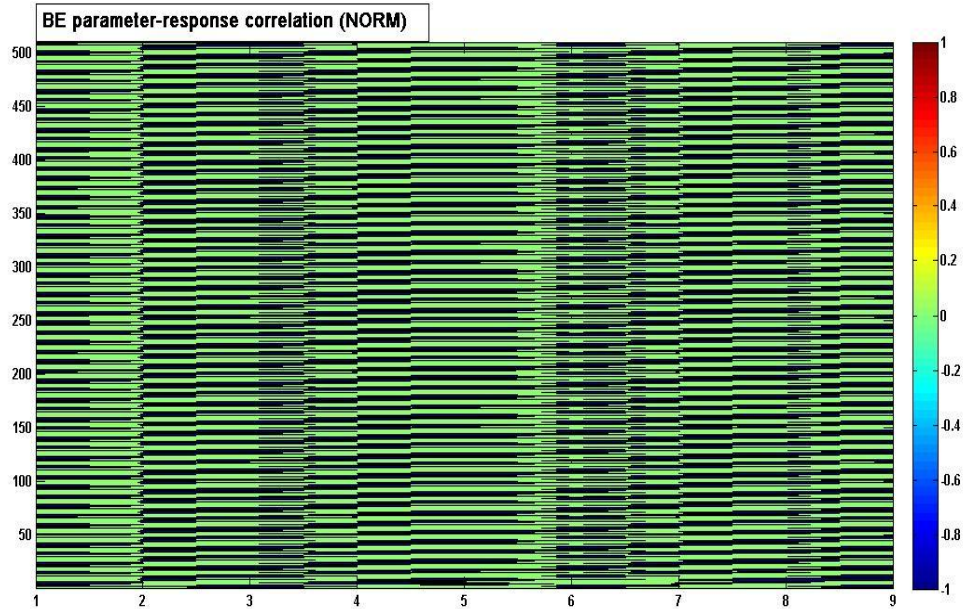


Abbildung 16: Bestmögliche Einschätzungen der Korrelationen zwischen den Systemantworten und Systemparametern x1706

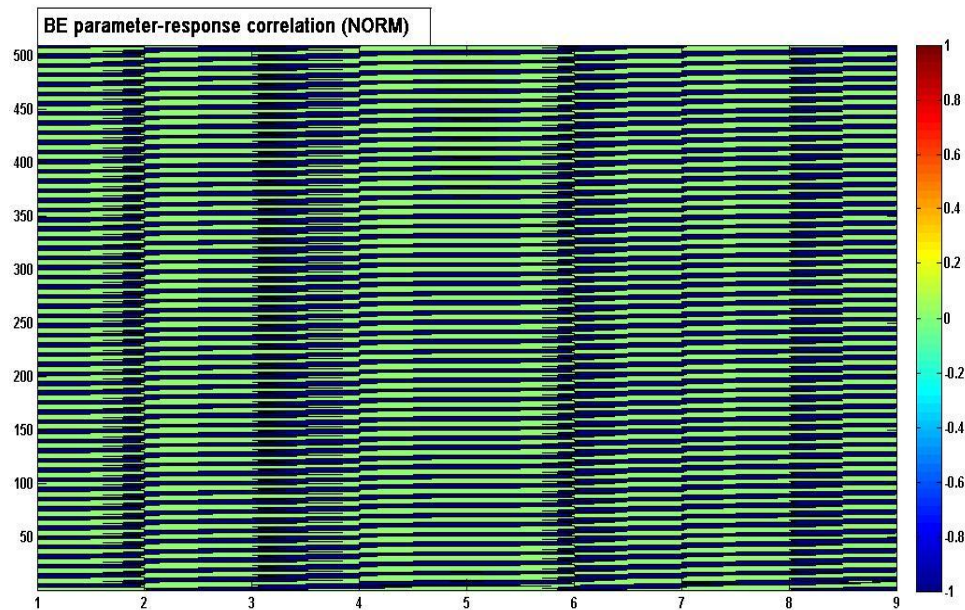


Abbildung 17: Bestmögliche Einschätzungen der Korrelationen zwischen den Systemantworten und Systemparametern x2730

3.1.2.1.2 Die Kalibrierung des Massenstroms, der Heizleistung und des Auslassdrucks als prägnante Parameter für die axiale Dampfblasenverteilung

Die bereits als „prägnante Parameter“ bezeichneten Größen des Durchflusses, der Heizleistung und des Auslassdrucks haben entscheidenden Einfluss auf die transienten FLICA4 Berechnungen. Die Werte aller drei Größen werden aus der Datenreihe 4-102-009~027 des BFBT Benchmark entnommen. Die BESTEST Berechnungen der prägnanten Parameter werden für alle 100 Millisekunden, im Zeitintervall von 9 Sekunden bis 59.9 und den bestmöglich eingeschätzten kalibrierten Parameter aus Kapitel 3.1.2.1.1 durchgeführt. Dies bedeutet, dass für diese ausgewählten Parameter 1530 partikuläre Sensitivitätsberechnungen jener Ebene durchgeführt werden. Die axialen eindimensionalen transienten Ergebnisse der Dampfblasenverteilungen, unter der Verwendung der prägnanten Parameter, werden wie im vorhergehenden Kapitel durch die Systemantworten R_1 , R_2 und R_3 für die jeweiligen Messebenen gekennzeichnet. Das Erfassen der Phasenanteile führt bei dauerhaften Variationen der prägnanten Parameter zu signifikanten Komplikationen für das Lösen der Erhaltungsgleichungen und in Folge dessen der numerischen Stabilität. Für die Berechnungen der Sensitivitäten soll hier noch angemerkt sein, dass die Berücksichtigung der unterschiedlichen Phasenverteilung

für alle drei Ebenen durchgeführt wird. Die BESTEST Berechnung werden für die prägnanten Größen mit einer Unsicherheit des Massenstroms von 1.5% der Heizleistung von 1.5% und dem Auslassdrucks von 1% berücksichtigt. Durch diese Festlegung der Unschärfen sind Einhaltung der Grenzen der Parameterwertigkeiten und somit der Berechnungsstabilität stets gewährleistet. Die Messungenauigkeiten der Dampfblasenverteilung werden mit einer Unsicherheit von 3.5% beachtet, die in Raum und Zeit unabhängig voneinander sind. Anhand der Sensitivitäten und Ihrer Standardabweichung aus Tabelle 4, kann wie für die Modellparameter nach Gleichung (2.32) die Kovarianzenmatrix der Systemantworten berechnet werden. Unter der weiteren Verwendung von Gleichung (2.27) kann anschließend, mit Hilfe der Abweichungen der Messergebnisse, der χ^2 Indikator nach Gleichung (2.53) bestimmt werden. Dieser beträgt für die Analyse R_1 $\chi_1^2 = 271.08$, für den Analysefall R_2 $\chi_2^2 = 522.97$ und für R_3 $\chi_3^2 = 519.58$. Für jeweils 510 Systemantworten folgen die jeweiligen Konsistenz- Indikatoren der zugehörigen Datenreihen mit $\chi_1^2 = 0.53$, $\chi_2^2 = 1.02$ und $\chi_3^2 = 1.01$.

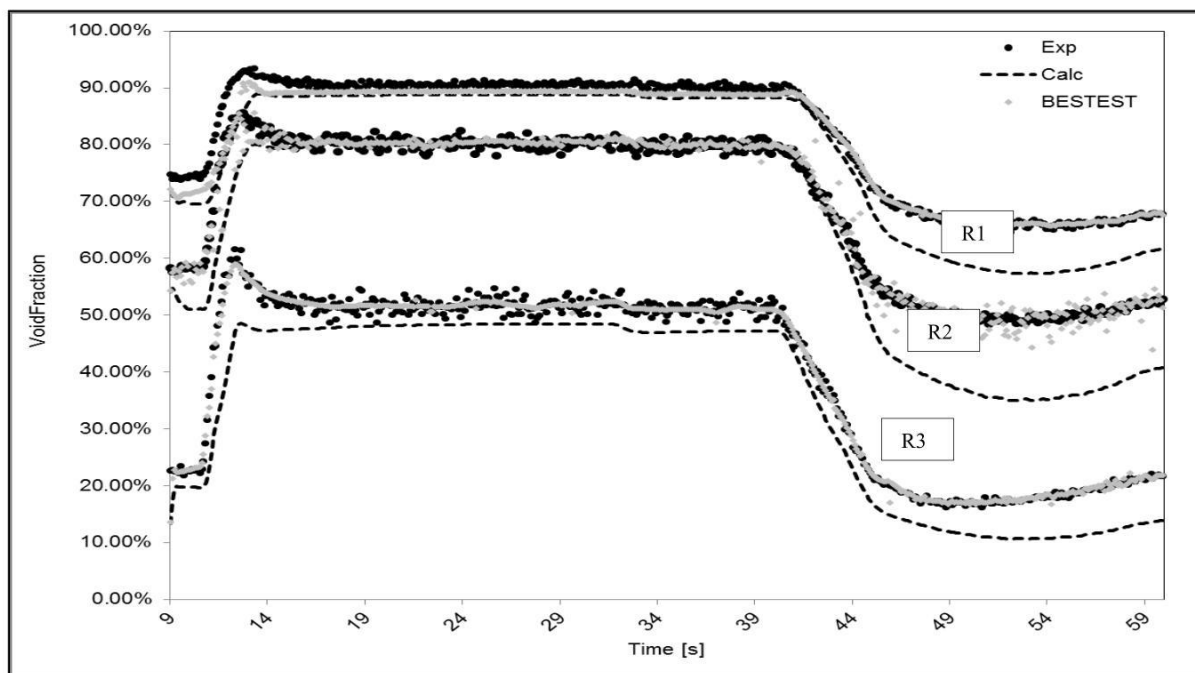


Abbildung 18: Vergleich zwischen experimentellen Messdaten aus dem BFBT Benchmark, den numerischen Berechnungen mit FLICA4 und den BESTEST Werten als bestmögliche Systemantworten mittels den prägnanten Parametern

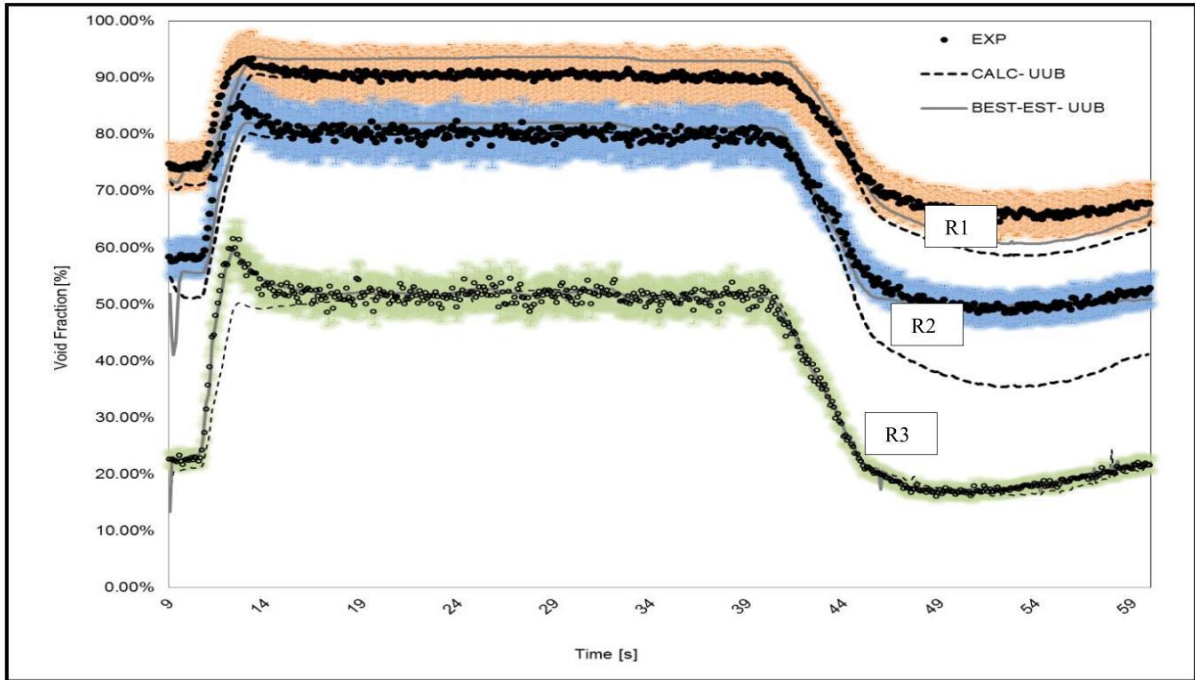


Abbildung 19: Unsicherheiten der experimentellen Daten der oberen Unsicherheitenbänder der FLICA4 Berechnungen sowie der BESTEST Berechnungen mittels den prägnanten Parametern

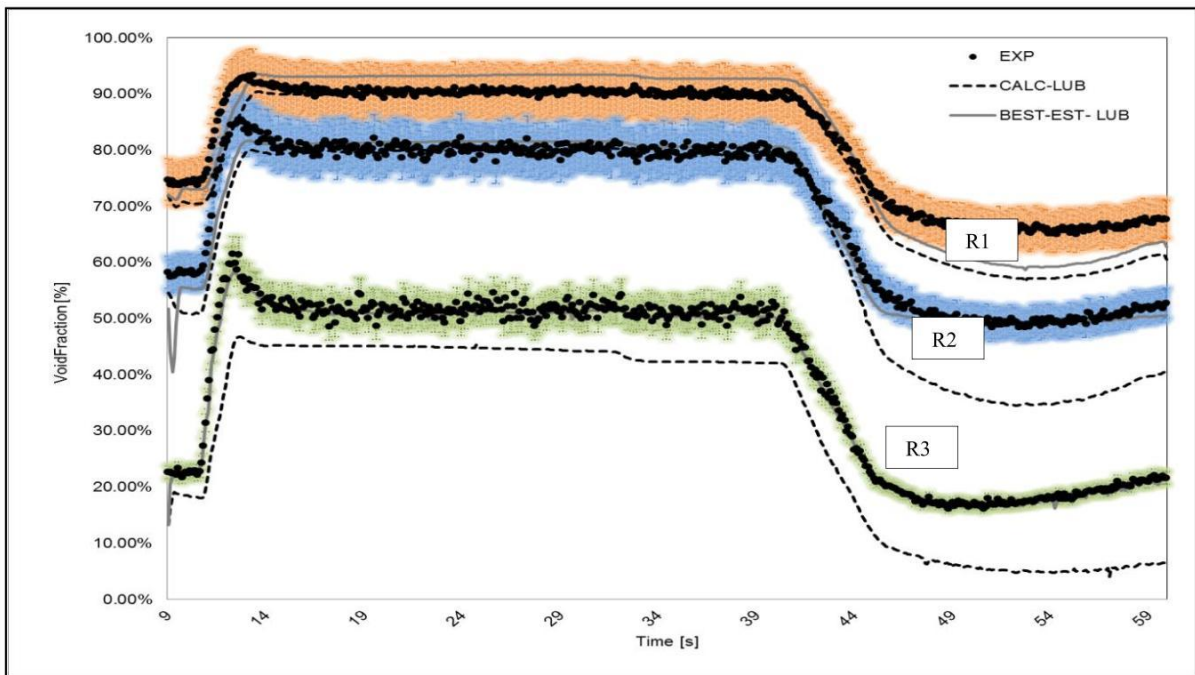


Abbildung 20: Unsicherheiten der experimentellen Daten der oberen Unsicherheitenbänder der FLICA4 Berechnungen sowie der BESTEST Berechnungen mittels den prägnanten Parametern

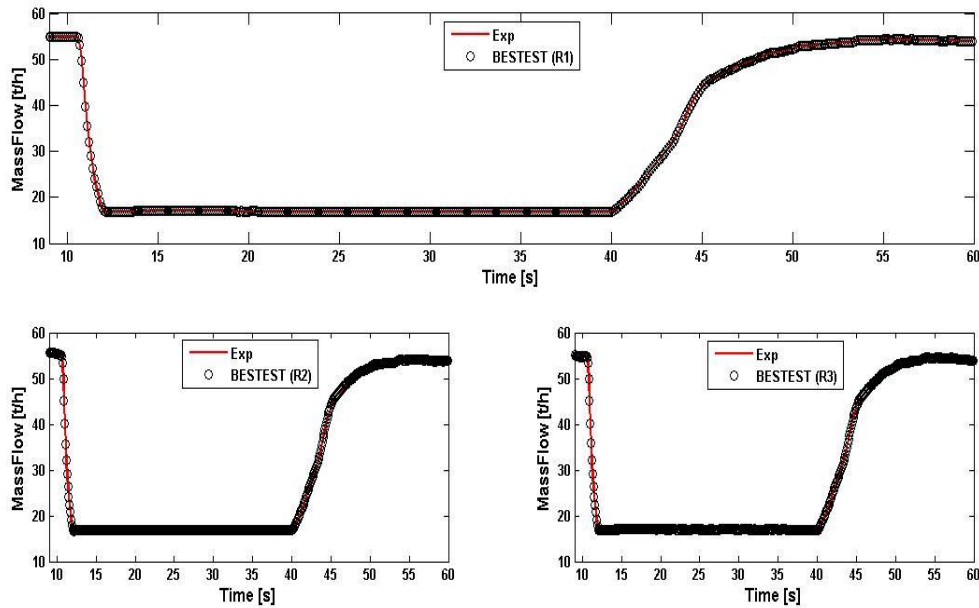


Abbildung 21: Experimentelle und bestmögliche Einschätzungen der „prägnanten Parameter des Massenstroms“ für die Systemantworten R_1 , R_2 und R_3 in jeweils Einzelbetrachtung

Der χ^2 Indikator liegt für die R_3 und R_2 bei nahezu 1 und bekräftigt die Beständigkeit der experimentellen Daten. Als positive Folgerung dieser beiden Werte kann aus Abbildung 18 die deutliche Verbesserung der Systemantworten (BESTEST Werte) abgelesen werden. Im letzten Drittel des Analysebereichs zeigen die Sensitivitäten keine signifikanten Variationen und führen zu einer Deckung zwischen den experimentellen Aufzeichnungen und den BESTEST Werten. Die oberen und unteren Unsicherheitsbänder der FLICA4 und BESTEST Berechnungen sowie die der Datenreihe R_1 , R_2 und R_3 sind in den Abbildungen 19 und 20 abgebildet. Dabei kennzeichnen die farbigen Flächen (R_1 orange, R_2 blau, R_3 grün), wie in Kapitel 3.1.2.1.1, die Unsicherheitsbereiche der experimentellen Daten. Die aus Gleichung (2.25) ermittelten bestmöglichen Parameter für den Massenstrom und der Heizleistung der Systemantworten R_1 , R_2 und R_3 sind in Abbildung 21 und 22 dargestellt. Deutlich wird in Abbildung 21, dass die experimentellen (durchgehende rote Linie) und bestmöglich (schwarze Kreise) eingeschätzten Werte kaum abweichen. Ein nahezu ähnliches Verhalten ist auch für die Heizleistung aus Abbildung 22 zu sehen. Im Fall des Ausgangsdrucks P bestimmen vor allem die axialen Positionen und die zeitlichen Variationen die bestmöglichen Parameter für alle drei Messebenen. Extrem starke Streuungen ergeben sich für den Auslassdruck im letzten Drittel des Analysebereichs, d.h. im Zeitbereich von $45 \div 59$ Sekunden, für die R_2 Datenreihe. Die nach Gleichung (2.31) berechneten Korrelationen der

Systemparameter für den Ausgangsdruck sind dabei sehr gering. In Abbildung 23, 24 und 25 sind die Korrelationen der Systemantworten abgebildet. Diese zeigen insbesondere für die R_1 Datenreihe (Abbildung 23) eine erhöhte Anzahl an Nebenelementen. Nach Gleichung (2.33) werden die Korrelationen der Systemparameter und der Systemantworten, wie in Abbildung 26, 27 und 28 dargestellt, bestimmt.

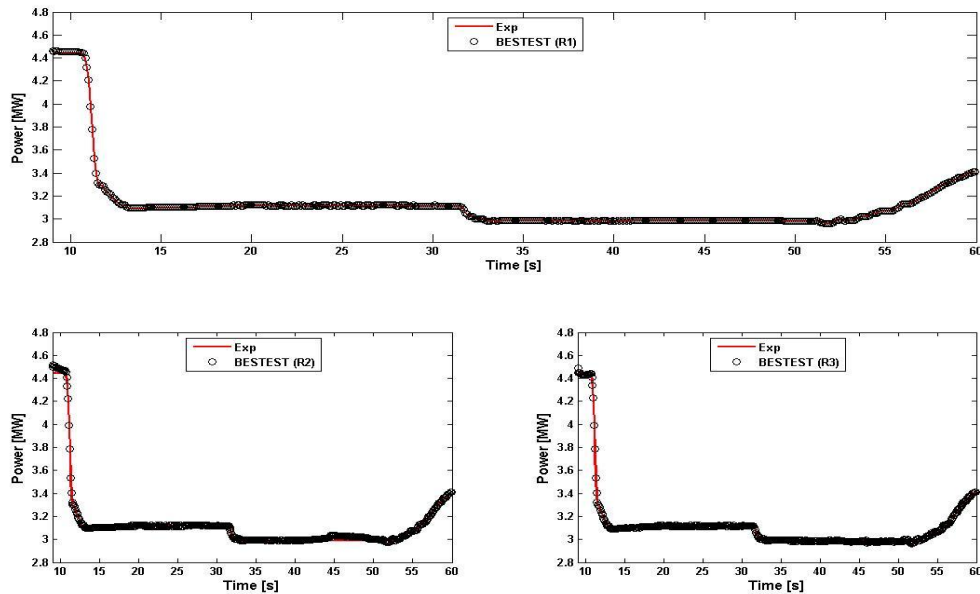


Abbildung 22: Experimentelle und best mögliche „prägnante Parameter der Heizleistung“ für die Systemantworten R_1 , R_2 und R_3 in jeweils Einzelbetrachtung

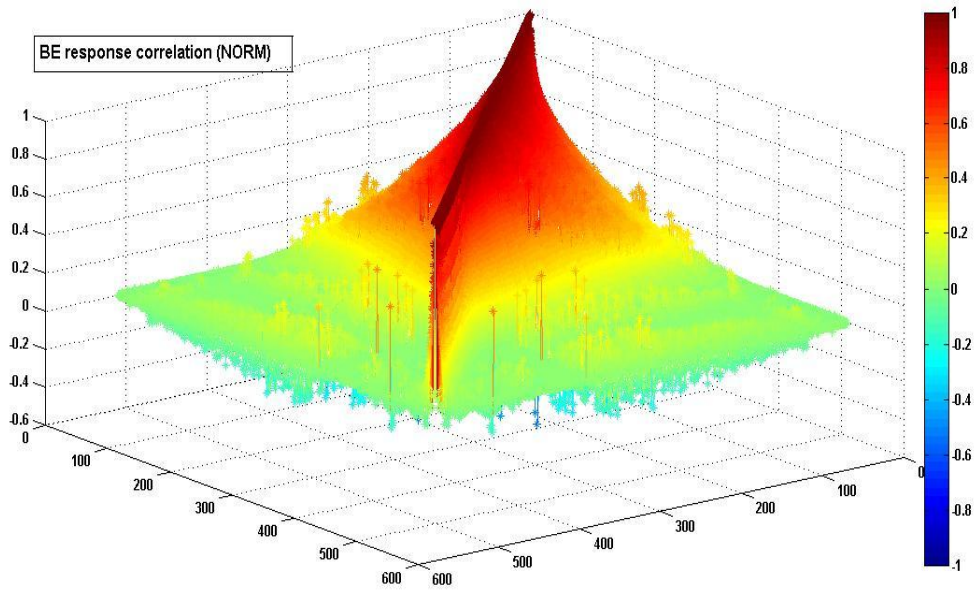


Abbildung 23: Bestmögliche Korrelationen der Systemantworten der Reihe R1 in normalisierter Darstellung

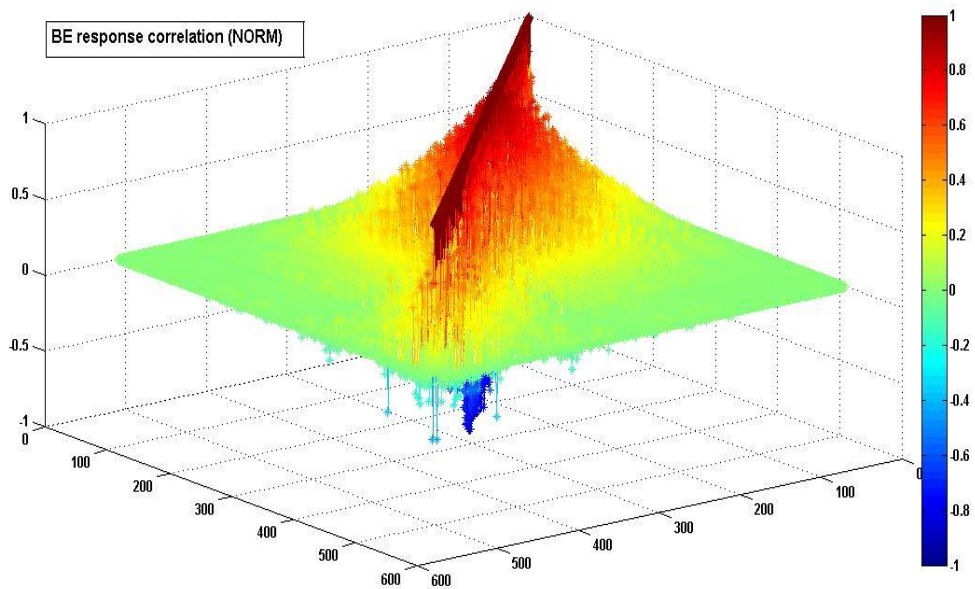


Abbildung 24: Bestmögliche Korrelationen der Systemantworten der Reihe R2 in normalisierter Darstellung

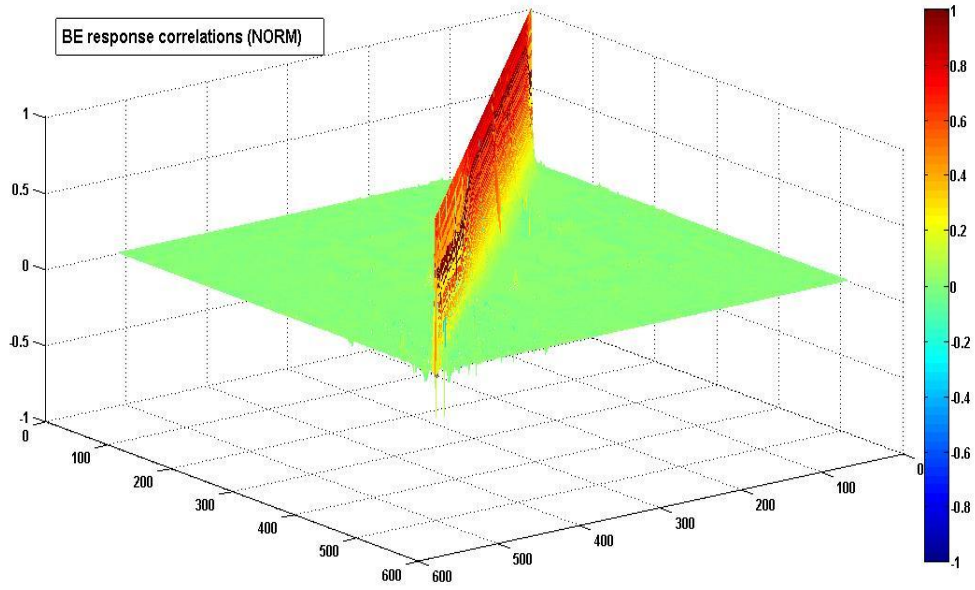


Abbildung 25: Bestmögliche Korrelationen der Systemantworten der Reihe R3 in normalisierter Darstellung

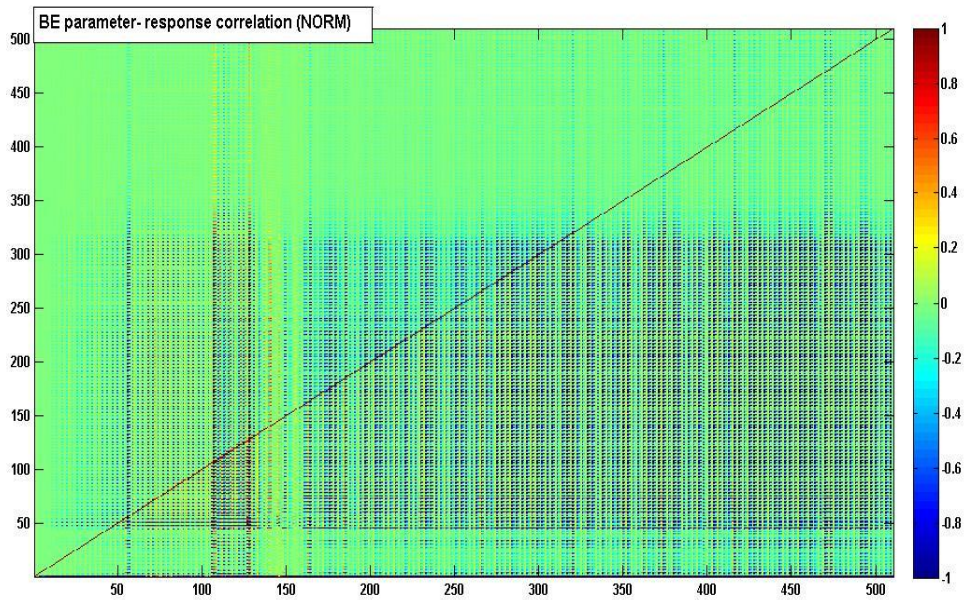


Abbildung 26: Bestmögliche Korrelationen der Systemparameter- Systemantworten der Reihe R1 in normalisierter Darstellung

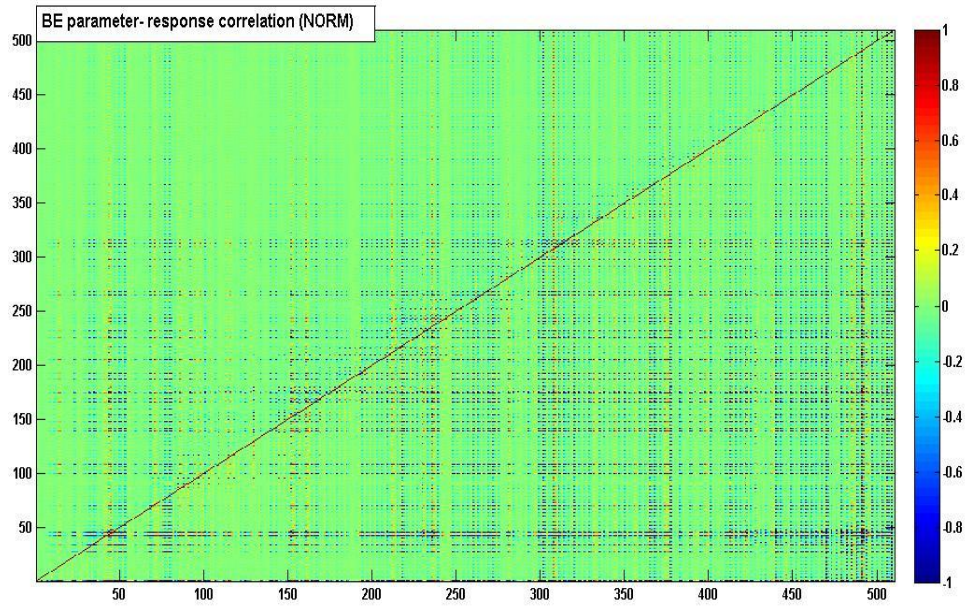


Abbildung 27: Bestmögliche Korrelationen der Systemparameter- Systemantworten der Reihe R2 in normalisierter Darstellung

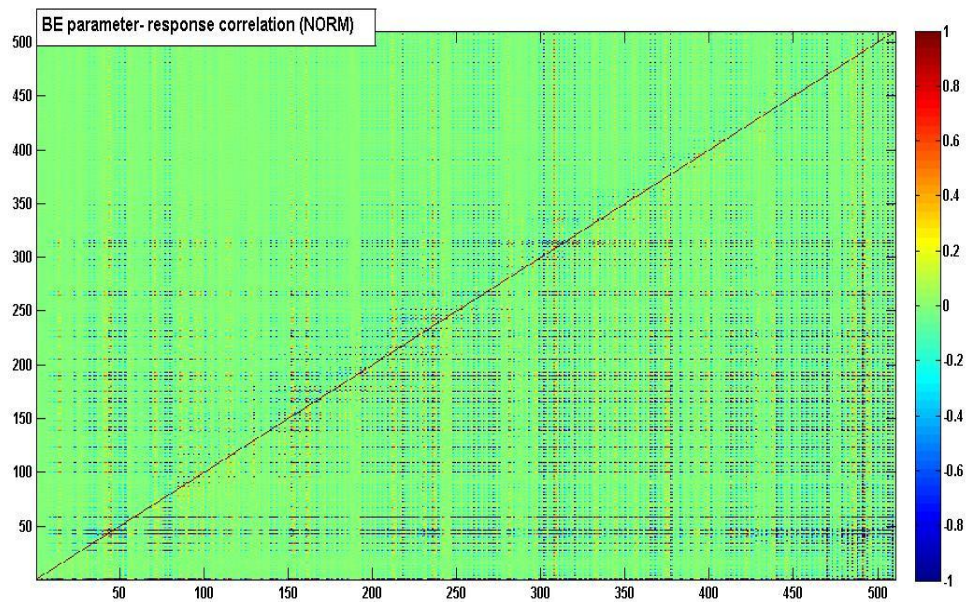


Abbildung 28: Bestmögliche Korrelationen der Systemparameter- Systemantworten der Reihe R3 in normalisierter Darstellung

3.1.2.2 Die BFBT Simulation durch ANSYS CFX

Die Modellierung des BFBT Benchmark, mittels ANSYS CFX, bedarf eines Prozess aus drei Schritten. Der erste liegt dabei in der Erstellung der Geometrie, welcher in dieser Arbeit mit dem CAD Programm „ProEngineer“ erfolgt. Der zweite Schritt ist die Vernetzung der erstellten Geometrie und der letzte Prozessschritt ist die CFD Analyse selbst. Für die Gittergenerierung wird die Software „ANSYS CFXmesher“ verwendet. Das hier erzeugte Gitter besteht aus einer Mischung von Tetra- und Prisma- Elementen. Die Gesamtanzahl dieser beträgt über $8 \cdot 10^5$ Elemente. In der Ausarbeitung von [Menter et al., 2002] werden die nötigen Bedingungen für eine CFD Simulation mit ANSYS CFX weitgehend erläutert. Das erzeugte Modell stellt einen Kompromiss zwischen den Aspekten der physikalischen Umsetzbarkeit, der geometrischen Vereinfachung mit den nötigsten Details und der Handhabung der Vernetzung sowie des Rechen- und Zeitaufwandes dar. Anhand dieser Abstimmungen wird ein CFX Rechenmodell erstellt, dass die Teststrecke des BFBT Benchmarks bis zu der Höhe von 700 mm beschreibt. Dadurch sind lediglich die Ergebnisse zwischen den Daten des Gammastrahlendensitometers Nummer 3 (siehe Abbildung 5) mit den CFX Berechnungen zu vergleichen. Zur Analyse der Phasenverteilung werden folgende implementierte Modelle der CFX Analyse verwendet:

- Das Phasenumwandlungsmodell
- Das Wärmeübergangsmodell für Mehrphasen
- Das Impulsübertragungsmodell
 - mit der Widerstandskraft
- Das Impulsübertragungsmodell für die Nicht- Widerstandskräfte
 - wie der transversalen Liftkraft („Lift Force“)
 - der virtuellen Massenkraft („Virtual Mass Force“)
 - der Wandkraft („Wall Lubrication Force“) nach dem Modell von Antal
 - der turbulenten Dispersionskraft („Turbulent Disperionsforce“) nach dem Model von „Favre Averaged Drag Force“
- Das Verdampfungsmodell an festen Oberflächen mit
 - dem Einflussfaktor auf die Blasendurchmesser („Bubble Diam. Influence Factor“)
 - der maximalen Flächenfraktion durch den Blaseneinfluss („Max. Area Frac. of Bubble Influence“)

- dem Festgelegter Y+ Wert für das unterkühlte Sieden („Fixed Yplus for liquid Subcooling“)
- der Massenquelle unter Relaxation („Mass Soure Under Relacation“)
- dem Blasenablösedurchmesser nach dem Modell von Tolubinski Kostanchuk („Bubble Departure Diam.“)
- der Wandverdampfungsdichte nach dem Modell von Lemmert Chawla („nucleate site density“)
- der Trennhäufigkeit der Blasen („Bubble Detachment Frequency“)
- der Blasenverweilzeit („Bubble waiting time“)
- der Wärmeübergangskoeffizienten für das abgeschreckte Kühlmittel nach dem Modell von Del Valle Kenning („Liquid Quenching Heat Transfer Coefficient“)
- dem Wärmeübergangsmodell nach Ranz- Marshall

3.1.2.2.1 Bestmögliche transiente axiale Dampfblasenverteilungen mit ANSYS CFX

Die Intention der BESTEST Analyse für die CFX Berechnung ist, wie auch in der FLICA4 Analyse, anhand der mathematischen Formulierung von [*Cacuci und Ionescu- Bujor, 2010b*], die bestmöglichen Einschätzungen für die Systemantworten und Systemparameter der numerischen Berechnungen durch die Kalibrierung einflussreicher Parameter, zu erzielen. Hierzu werden zehn bedeutende Modellparameter verwendet, die in Tabelle 5 aufgelistet sind. Neben diesen Modellparametern wird im Anschluss zu diesem Kapitel der Einfluss der „prägnanten Parameter“ gesondert untersucht. Die gesamte CFX Analyse besitzt einen enormen hohen Rechenaufwand, der geprägt wird durch die hohe Anzahl von Gitterelementen und Knotenpunkten, die allerdings für eine feinskalierte Berechnung von Nöten ist. Zur Reduzierung dieser gewaltigen Berechnungszeit werden für das CFX Modell alle 500 Millisekunden Daten aus dem BFBT Benchmark berücksichtigt. Mit den BESTEST Berechnungen für die zehn ausgewählten Systemparameter und dem Ziel ihrer Kalibrierung, die in Tabelle 5 mit ihren nominalen Werten aufgelistet sind, ergeben die Gesamtberechnungen folgende Ergebnisse die in Abbildung 29 dargestellt sind.

Die Auswahl dieser entscheidenden Modellparameter wird vorab durch eine vereinfachte Untersuchung in den Unterkanälen 34, 35 und 36, aus Abbildung 7, durchgeführt. Die nähere Erläuterung der verwendeten Parameter ist im Anhang dieser Arbeit wiederzufinden. Die entsprechenden Berechnungen werden für die mit der R3 gekennzeichnete Datenreihe auf der Messebene 682 verglichen. Die Durchführung der BESTEST Berechnung mittels der Datenreihe 4-102-009-27 für den Pumptrip und den numerischen Werten der CFX Analyse für die Kalibrierung der CFX Modellparameter α_1 bis α_{10} wird für insgesamt 111 Zeitschritte der Systemantworten R_3 des Pumptrips durchgeführt; beginnend bei 4 Sekunden. Die berücksichtigten Unschärfen der Parameter aus Tabelle 5 werden für eine abbruchsfreie Berechnung und Einhaltung der Parametergrenzen ausgewählt. Als Messungengenauigkeit wird für die experimentelle Datenreihe ein Wert von 5% angenommen. Bei der Durchführung der BESTEST Analyse wird nach wie vor zur Kenntnis genommen, dass die einzelnen Messwerte räumlich und zeitlich gesehen keine Beziehung untereinander haben. Unter der weiteren Verwendung von Gleichung (2.27) kann, mit Hilfe der Abweichungen der Messergebnisse, der Chi-Square Indikator nach Gleichung (2.53) berechnet werden. Dieser beträgt für die CFX Analyse R_3 der Dampfblasenverteilung $\chi_3^2 = 854.42$. Für jeweils 111 Systemantworten folgen die jeweiligen Konsistenz- Indikatoren der zugehörigen Datenreihen mit $\chi_3^2 = 7.76$. Die aus den BESTEST Berechnungen ermittelten bestmöglichen Modellparameter mit ihren reduzierten Unsicherheiten, gegenüber ihren Nominalwerten, sind in Tabelle 5 dargestellt. Die bestmöglichen Systemantworten, für R_3 , sind in der Abbildung 29 zu sehen. Die CFX Berechnungen zeigen über den gesamten Berechnungsbereich eine deutliche Differenz gegenüber den experimentellen Werten. Die BESTEST Berechnungen liegen vorwiegend zwischen den CFX und experimentellen Messaufzeichnungen und führen zu einer Verbesserung der gesamten Analyse. Diese sind auch in der Verminderung der Unsicherheiten aus Abbildung 30 und 31 zu erkennen. In beiden Abbildungen sind die oberen („upper Uncertainty band, UUB“) und unteren („lower Uncertainty band, UUB“) Unsicherheitsbänder gekennzeichnet. Die Unschärfen der BFBT Datenreihe wird durch entsprechende Fehlerindikatoren aufgezeigt. Die Korrelationen der Systemparameter ist in der Abbildungen 32 dargestellt. Die Korrelationen zwischen den Parametern und Systemantworten sind dabei sehr gering.

Parameter	Nominalwerte	BESTEST
α_1 (Auftriebskraft)	0.01 ± 2.5%	0.0099728 ± 2.49%
α_2 (Wandkraftkoeff. 1)	-0.03 ± 2.5%	-0.030111 ± 2.49%
α_3 (Wandkraftkoeff. 2)	0.06 ± 2.5%	0.0626505 ± 2.47%
α_4 (turb. Dispersion)	0.01 ± 2.5%	0.0100131 ± 2.49%
α_5 (max. Flächenfraktion durch den Blaseneinfluss)	0.50 ± 1.0%	0.50078544 ± 1.00%
α_6 (Referenz Blasenablösedurchmesser)	0.0006 ± 2.0%	0.00044504 ± 1.48%
α_7 (Trennhäufigkeit der Dampfblasen)	1.00 ± 1.0%	1.01160225 ± 1.00%
α_8 (Blasenverweilzeit)	0.80 ± 1.0%	0.80193319 ± 1.00%
α_9 (Durchschnittsdurchmesser der Blasen)	1.00 ± 4.0%	1.236480394 ± 3.41%
α_{10} (Widerstandskraft)	0.44 ± 2.0%	0.433504556 ± 1.99%

Tabelle 5: Nominale und best mögliche Modellparameter für den Kalibrierungsprozess der axialen Phasenverteilung für den „PumpTrip“ Testfall mit ANSYS CFX

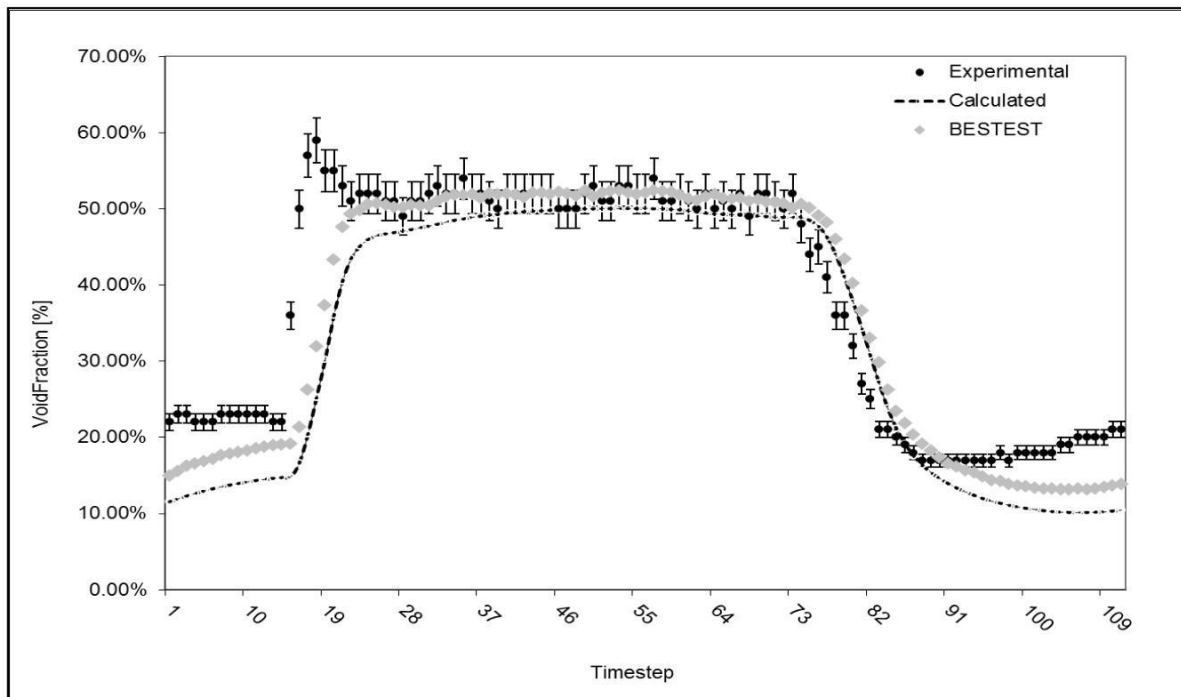


Abbildung 29: Vergleich zwischen den experimentellen Messdaten aus dem BFBT Benchmark, den numerischen Berechnungen mit ANSYS CFX und den BESTEST Werten als bestmögliche Systemantworten

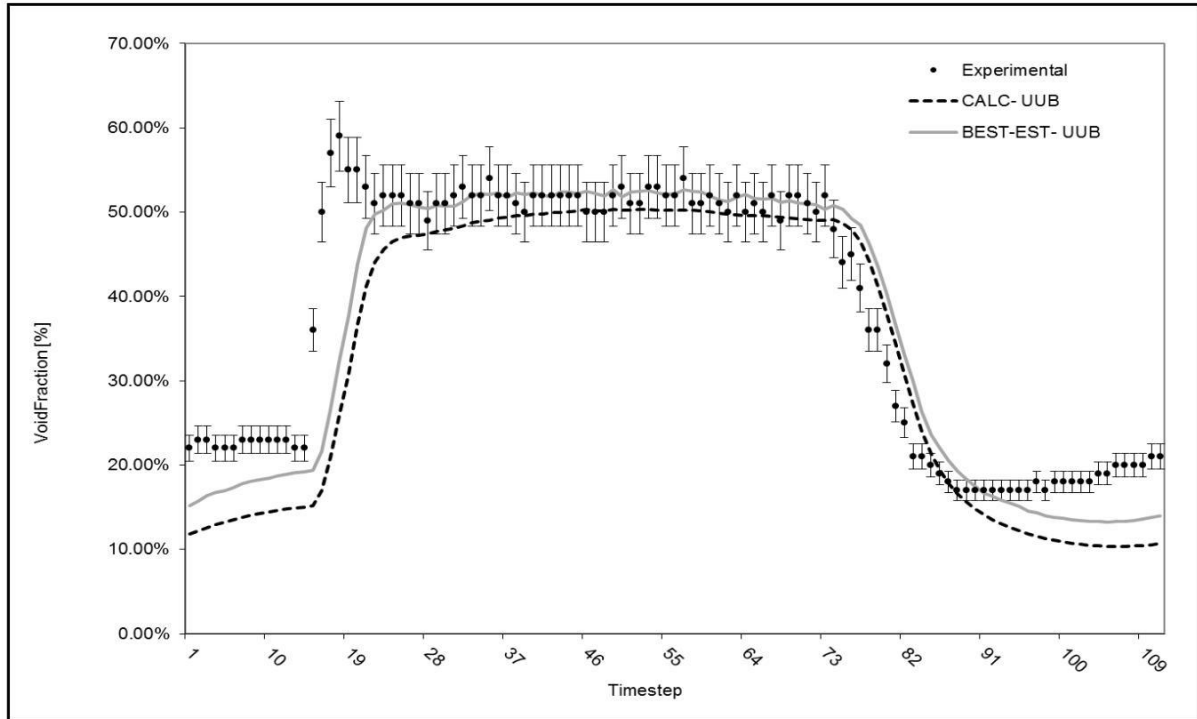


Abbildung 30: Unsicherheiten der experimentellen Daten, der "oberen Unsicherheitenbänder" der CFX sowie der BESTEST Berechnungen

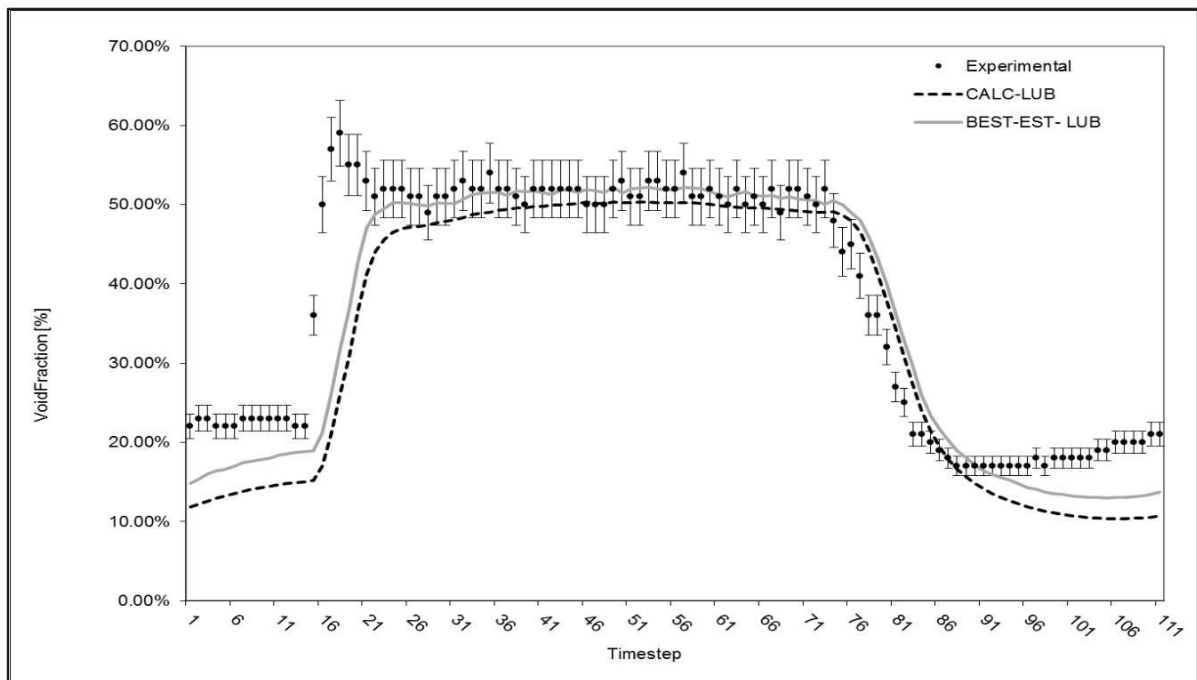


Abbildung 31: Unsicherheiten der experimentellen Daten, der „unteren Unsicherheitenbändern“ der CFX sowie der BESTEST Berechnungen

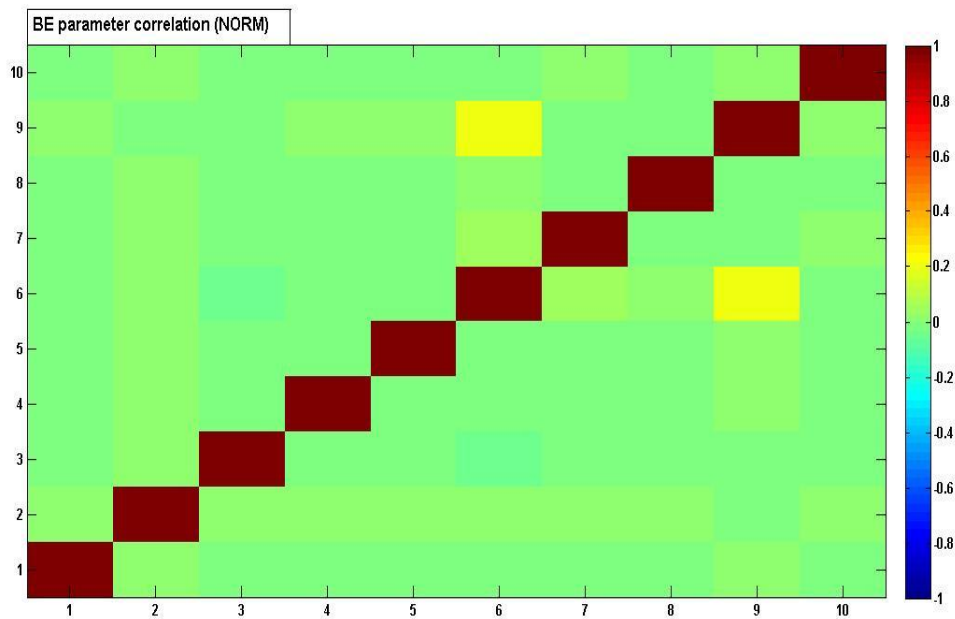


Abbildung 32: Korrelation der bestmöglichen Einschätzungen der Systemparameter in normierter Darstellung

3.1.2.2.2 Die Kalibrierung des Massenstroms, der Heizleistung und des Auslassdrucks als prägnanter Parameter für die axiale Dampfblasenverteilung mit ANSYS CFX

Die Einwirkungen der prägnanten Parameter werden in diesem Kapitel für ANSYS CFX vorgestellt. Beschränkt ist die Analyse auf die R_3 Datenreihe. Die numerischen Werte werden aus der Datenreihe 4-102-009~027 des BFBT Benchmark entnommen und sind somit identisch zu den der FLICA4 Analysen. Die BESTEST Berechnungen der prägnanten Parameter werden, beginnend ab 10 Sekunden, für 38 Zeitschritte und alle 500 Millisekunden durchgeführt. Dies bedeutet, dass für diese ausgewählten Parameter über 70 partikuläre Sensitivitätsberechnungen durchgeführt werden. Im Vergleich zur FLICA4 Berechnung scheint dieser Wert nur minimal zu wirken, doch unter der Berücksichtigung der Rechenzeit, die um ein 18 faches höher liegt, ist diese Durchführung immens. Das axiale eindimensionale transiente Ergebnis der Dampfblasenverteilung, unter der Verwendung der prägnanten Parameter, wird durch die Systemantwort R_3 , für die jeweilige Messebene gekennzeichnet. Die Ergebnisse der CFX Berechnungen sind in der Abbildung 33 vorzufinden. Verbesserungen sind durch die BESTEST Werte deutlich zu erkennen, jedoch ist der Einfluss durch die zeitlichen Variationen nicht zu übersehen. Insbesondere im Bereich der Lastwechsel, wie in Abbildung 8 dargestellt, sind die Prägungen der

Parameter signifikant zu erkennen. Für die durchgeführte Untersuchung mit CFX wird die Unsicherheit des Massenstroms und der Heizleistung auf 5% angehoben. Diese Unschärfen sind im Vergleich zu den FLICA4 Berechnungen deutlich größer können jedoch bei geringeren Werten nicht die gleichen Auswirkungen aufzeigen. Für die Messungenauigkeiten wird der gleiche Wert festgelegt mit der Bedingung einer Unabhängigkeit in Raum und Zeit. Die Berechnung des χ^2 ergibt einen Wert von $\chi_3^2 = 16.81$. Für die jeweils 38 Systemantworten folgt für den Konsistenz- Indikator der Datenreihe R_3 ein Wert von $\chi_3^2 = 0.44$. Die ermittelten bestmöglichen Systemparameter, nach Gleichung (2.25), sind in der Abbildung 34 dargestellt. Differenzen sind lediglich für den Massenstrom im ersten Zeitbereich vorzufinden. Die Abweichungen der Heizleistung sind vernachlässigbar. Anhand der Sensitivitäten für die prägnanten Parameter des Massenstrom und der Heizleistung, mit Ihrer Standardabweichung aus Tabelle 4, wird die Kovarianzenmatrix der Systemantworten berechnet. Abbildung 35 zeigt dabei die Kovarianzenmatrix der Systemantworten. Die Ergebnisse der Korrelationen der Systemparameter und die der Systemparameter- Systemantworten sind sehr gering. In normierter Darstellung sind alle Nebendiagonalen gleich Null und die Hauptdiagonalen gleich eins.

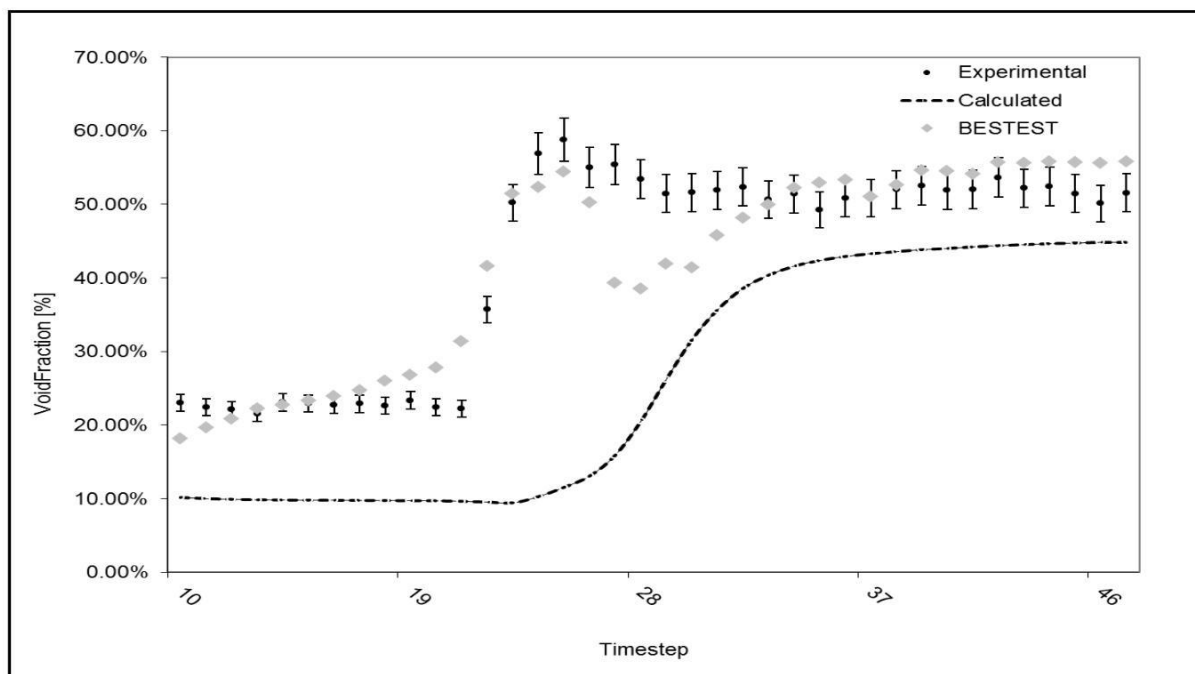


Abbildung 33: Vergleich zwischen experimentellen Messdaten aus dem BFBT Benchmark, den numerischen Berechnungen mit CFX und den BESTEST Werten als best mögliche Systemantworten.

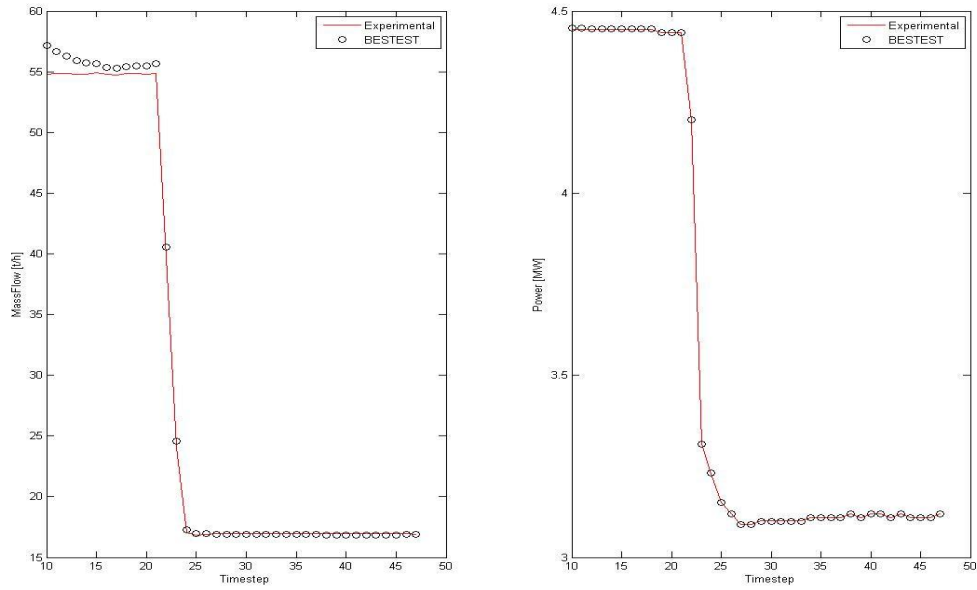


Abbildung 34: Experimentelle und best mögliche „prägnante Parameter des Massenstroms“ für die Systemantwort R_3 in jeweils Einzelbetrachtung

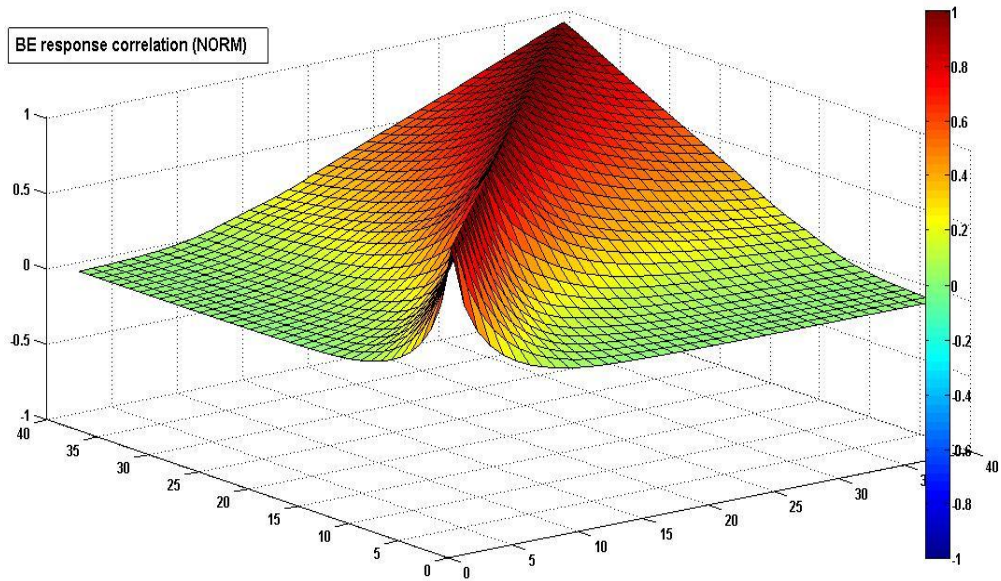


Abbildung 35: Bestmögliche Korrelationen der Systemparameter- Systemantworten der R3 Datenreihe

3.2 Datenanpassung und Modellkalibrierung des CFD Codes ANSYS CFX durch die experimentellen Daten aus der TEFLU Teststrecke

3.2.1 Die Beschreibung der TEFLU Teststrecke

Die Validierung von CFD Rechenprogrammen wie ANSYS CFX zur Beschreibung des physikalischen Verhaltens von Flüssigmetallen, wie Natrium, erfordert eine Reihe von Anpassungen zur Wiedergabe der experimentellen Untersuchungen. ANSYS CFX ist ein weltweit bekanntes allgemeines CFD Programm, das für eine Vielzahl von physikalischen Problemen ausgiebig untersucht worden ist. Diese Analysen beziehen sich jedoch oftmals auf Prandtl- Zahlen deren Werte in der Nähe von Wasser oder Luft liegen. Analysen vom Verhalten von flüssigem Natrium sind dabei seltener vorzufinden. Eine experimentelle Natrium- Durchführung, zur Verbesserung von Rechencodes, ist das TEFLU Experiment [[J.U. Knebel, 1993](#)] aus dem Karlsruher Institut für Technologie Campus Nord. Diese Umsetzung beschreibt einen Auftriebsstrahl mit dem Merkmal einer Mischkonvektion. Dieses physikalische Phänomen ist aus Sicht der Reaktorsicherheit ein wichtiger Bestandteil, da „Schnelle Natriumgekühlte Reaktoren (SNR)“ nach Abschalten einer derartige Konvektion aufweisen. In der Regel befindet sich diese stets oberhalb des Reaktorkessels. In der TEFLU Teststrecke wird durch das Einstellen der Geschwindigkeiten und Temperaturen am Eintritt der Teststrecke die Erzeugung verschiedenartiger Formen der Mischkonvektion ermöglicht. Somit stellt die TEFLU Datenreihe einen ausgeprägten Messbereich zwischen der Natur- und Zwangskonvektion dar [[J.U. Knebel, 1993](#)].

In diesem Abschnitt von Kapitel 3.2 werden die Bezeichnungen der Falluntersuchungen und Messebenen sowie die Auftriebsstrahlen analog zum TEFLU Experiment gekennzeichnet. Dadurch soll eine Vermeidung von Missverständnissen und die daraus folgenden Abweichungen verhindert werden. Weiterhin wird im ersten und zweiten Abschnitt von Kapitel 3.2 das TEFLU Experiment weitgehend wiedergegeben.

3.2.1.1 Die TEFLU Versuchsanlage

Der Natriumdurchsatz in der TEFLU Teststrecke wird durch eine elektromagnetische Pumpe (P) mit einer max. Leistung von $60 \text{ m}^3 / \text{h}$ gewährleistet (Abbildung 36). Ein Vorratsbehälter (B1) mit einem Volumen von 2 m^3 ist für eine ausreichende Kühlmittelversorgung angebracht. Die Vermeidung von Verunreinigungen bzw. die Reinigung des Kühlmittels selbst wird durch eine Bypass Regulierung in der Kaltfalle (KF) durchgeführt. Die Temperatur für die Reinigung beträgt $120 \text{ }^\circ\text{C}$ bei einem Durchsatz von $2.5 \text{ m}^3 / \text{h}$.

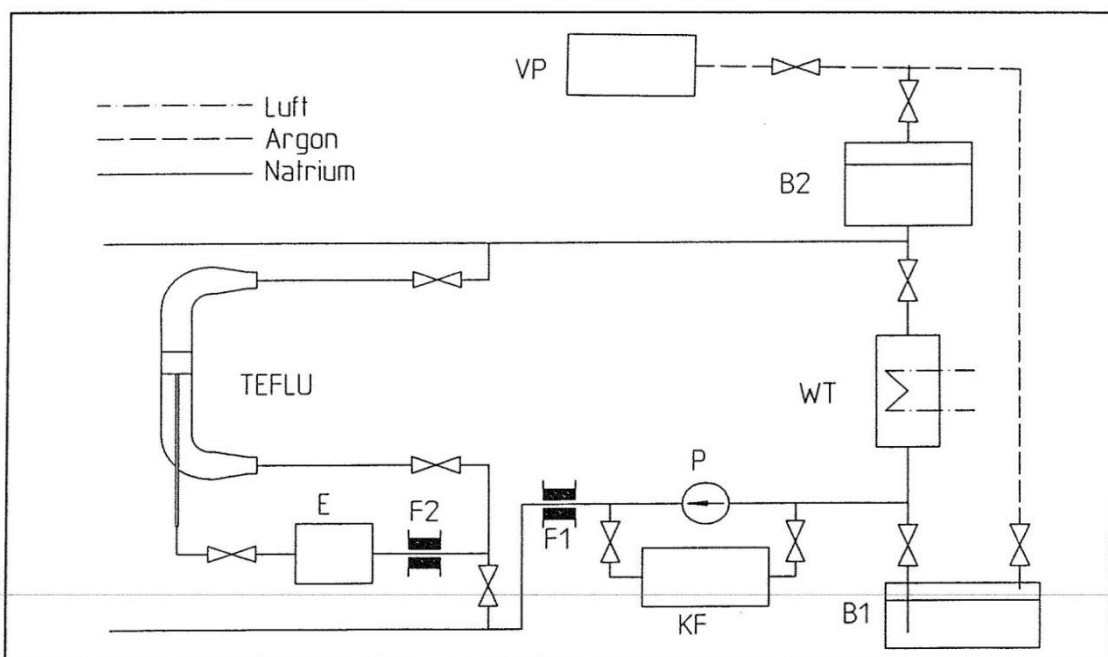


Abbildung 36: Gesamtanlage der TEFLU Teststrecke (Quelle: J.U. Knebel, 1993)

Die Messung des gesamten Durchsatzes wird induktiv am Messgerät (F1) ermittelt. Eine äquivalente Messung erfolgt für den Durchsatz des Strahlrohrs am Messgerät (F2). Durch das Heizgerät (E) kann die gewünschte Übertemperatur für den Strahlkanal erzeugt werden. Das aus der Teststrecke herauskommende Kühlmittel kann sich, aufgrund der Temperaturänderungen, im Ausdehnungsbehälter (B2) entspannen. Gleichzeitig wird in (B2) die Entstehung eines mehrphasigen Kühlmittels verhindert. Anhand des Luft Wärmetauschers (WT), mit einer Leistung von 120 kW , wird das Natrium abgekühlt. Durch ein zusätzliches Heizsystem wird die Anlage nahezu isotherm gehalten. Die Vakuumpumpe (VP) ermöglicht eine Evakuierung der Teststrecke. Das Inertgas Argon ist auf allen freien Oberflächen beaufschlagt.

3.2.1.2 Die TEFLU Teststrecke

Die TEFLU- Teststrecke besteht aus einem vertikalen Strömungsrohr mit einem Innendurchmesser von $D=110\text{mm}$ und einer Gesamtlänge von $L=2146\text{mm}$. Durch den Einbau eines Düsenblocks mit 158 Bohrungen von $d=7.2\text{mm}$ Durchmesser wird eine Positionsänderung in axialer Richtung ermöglicht. Die Beschränkung der Messsonden, im Variationsbereich von $1.4 \leq x/d \leq 140$, kann dabei gewährleistet werden. Die Bohrungen sind in gleichseitige Dreiecke, bei einer Gesamthöhe des Düsenblock von $l=120\text{mm}$ und Abstand von $p=8.2\text{mm}$ zueinander, angebracht. Durch Variation der Geschwindigkeiten und Temperaturen zum Anströmfeld, können Impulsstrahlen sowie schwache und starke Auftriebsstrahlen erzeugt werden. Die Einstellung der mittleren Anströmgeschwindigkeiten \bar{U}_i und Temperaturen \bar{T}_i kann dabei unabhängig von der äußeren Kanalströmung \bar{U}_a und \bar{T}_a verändert werden [J.U. Knebel, 1993]. Abweichungen und mögliche Temperaturschwankungen durch Wärmeverluste im inneren Strahlrohr werden durch doppelwandige Rohrausführungen und einer Evakuierung sichergestellt. Aus dem Experiment werden die Fälle des Impulsstrahls („forced jet“), des schwachen („buoyant jet“) und des starken Auftriebsstrahls („plume jet“) an verschiedenen Messepunkten untersucht. Die Messungen der mittleren Geschwindigkeits- und Temperaturverteilungen werden zeitgleich durch die MPP- (Miniatur-Permanentmagnet- Potentialsonden) Sonden erfasst.

3.2.1.3 Beschreibung der Testfälle

Der erste Testfall „force“ ist charakterisiert durch eine Temperaturdifferenz von $\Delta\bar{T}=30\text{K}$, zwischen äußerer und innerer Anströmung. Die Fälle „bouyant“ und „plume“ beschreiben einen schwachen und starken Auftriebsstrahl. Die Temperaturdifferenzen sind für den zweiten Testfall durch $\Delta\bar{T}=25\text{K}$ und für den dritten Testfall durch $\Delta\bar{T}=75\text{K}$ gekennzeichnet. Die Differenzen zwischen den Eintrittsgeschwindigkeiten liegen für den Impulsstrahl bei $\Delta\bar{u}=0.50\text{ m/s}$, für den schwachen Auftriebsstrahl bei $\Delta\bar{u}=0.33\text{ m/s}$ und letztendlich für den starken Auftriebsstrahl bei $\Delta\bar{u}=0.17\text{ m/s}$. Die Untersuchungen werden sowohl für die Geschwindigkeits- als auch für die Temperaturverteilung entlang der mittleren Kanalachse durchgeführt. Die Messungen in radialer Richtung, der Testfälle „force“, „bouyant“ und „plume“, sind auf den Messebenen $x/d=6$ und $x/d=20$ erfolgt. In

dieser Ausarbeitung konnten nur eine begrenzte Anzahl an Messwerten aus dem TEFLU Experiment verwendet werden die für die exakten Platzierungen der CFX Detektoren verwendet werden.

	<i>force</i>	<i>buoyant</i>	<i>plume</i>
Re_a	$1.4 \cdot 10^4$	$2.8 \cdot 10^4$	$2.8 \cdot 10^4$
Re_i	$1.01 \cdot 10^4$	$7.9 \cdot 10^3$	$4.96 \cdot 10^3$
Fr_i	521	365	43.1

Tabelle 6: Reynolds- und Froudezahlen der TEFLU Teststrecke für alle drei Auslegungsfälle

Die Tabelle 6 zeigt die Reynoldszahlen der jeweiligen Testfälle. Aus diesen ersten Angaben wird deutlich, dass die Natriumeigenschaften nur bedingt mit denen des Wassers vergleichbar sind. Die graphische Visualisierung der vorhandenen Messdaten erfolgt dimensionslos über das Verhältnis der axialen bzw. radialen Abstände zum Innendurchmesser der Zentralbohrung. In Abbildung 37 sind in der oberen Darstellung die experimentellen Geschwindigkeitsverteilungen des Impulsstrahl, des schwachen und starken Auftriebsstrahls zusammen mit den CFX Berechnungen abgebildet. In der unteren Darstellung sind die Temperaturverteilungen zu finden. Die Abbildungen 38 und 39 zeigen die Messergebnisse und Berechnungen für die radialen Verteilungen.

3.2.2 Bestmögliche Modellkalibrierung durch die Verwendung des thermohydraulischen Rechencodes ANSYS CFX und der Datenassimilierung durch die experimentellen Messwerte aus der TEFLU Teststrecke

Die Analyse der Geschwindigkeits- und Temperaturverteilungen aus den Datenreihen der TEFLU Teststrecke bilden die bereits erwähnten Testfälle „force“, „bouyant“ und „plume“. Die experimentellen Messaufzeichnungen werden in dieser Arbeit für das allgemeine dreidimensionale Rechenprogramm ANSYS CFX verwendet. Weiterhin wird in diesem Abschnitt, unter der Verwendung der experimentellen Daten, die mathematische Methode von [[Cacuci und Ionescu-Bujor, 2010b](#)] für eine Datenanpassung und Kalibrierung der bedeutendsten Modellparameter verwendet. Das Prinzip der Durchführung wird in Abbildung 100 (im Anhang dieser Arbeit) durch ein Flussdiagramm dargestellt.

3.2.2.1 Die Simulation der TEFLU Teststrecke mit ANSYS CFX

Das erstellte CFX Modell beschränkt sich auf ein achsensymmetrisches Rechenmodell. Die Verwendung und Rechtfertigung hierfür liegt darin, dass ab dem Achsabstand $x/d=6$ die Strömung eine Achsensymmetrie aufweist, die auch durch das Experiment nachweisbar ist [J. U. Knebel, 1993]. Eine weitere Begründung ist durch die Auswahl der Turbulenzmodellierung gegeben. Für die Berechnungen der TEFLU Teststrecke wird in diesem Kapitel der Arbeit das SAS SST (Scale-Adaptive Simulation Shear Stress Transport) Modell nach [Menter et al, 2005] verwendet. Das CAD Modell wird mit dem „Design Moduler“ von ANSYS erstellt. Die Gittergenerierung wird mit dem „CFX Mesher“ realisiert und besteht aus einem feinskalierten Mischgitter mit überwiegend tetragonalen Gitterelementen. Für die Berechnung der TEFLU Messdaten wird in CFX das SAS SST Turbulenzmodell und Wärmeübertragungsmodell verwendet. Die Stoffdaten, für das nicht enthaltene Natrium, werden durch entsprechende Erweiterungen aus dem MAPLIB Programm eingelesen.

3.2.2.2 Bestmögliche Geschwindigkeits- und Temperaturverteilungen mit ANSYS CFX

Die CFX Geschwindigkeitsverteilung, entlang der Symmetrieachse aus Abbildung 37 (oben), zeigt für alle drei Analysefälle deutliche Differenzen. Für den Impulsstrahl und schwachen Auftriebsstrahl nehmen die Abweichungen gegen Ende des Messbereich, d.h. für $x/d > 30$, deutlich ab. Eine Übereinstimmung im „plume“ Testfall ist nicht gegeben. In Anbetracht der Temperaturverteilungen (Abbildung 37 unten) liegt eine bessere Auswertung vor. Die Testreihen force und bouyant können dabei, bis auf wenige Abweichungen, sehr gut wiedergegeben werden. Auch im Fall plume ist die Berechnung suffizient.

Die obere Darstellung aus Abbildung 38 zeigt die Geschwindigkeitsverteilung in radialer Richtung auf der Messebene $x/d=6$. Für diese Untersuchung ist zu erkennen, dass in der zweiten Messhälfte eine Unterschreitung der experimentellen Daten vorliegt. In Folge dessen befinden sich die CFX Werte teilweise in großer Entfernung zu den der TEFLU Auswertungen. Die Temperaturverteilungen, aus Abbildung 38 unten, zeigen dabei eine sehr gute Analyse. Alle CFX Auswertungen liegen im Toleranzbereich und sorgen für eine nahezu ideale Wiedergabe der experimentellen Daten.

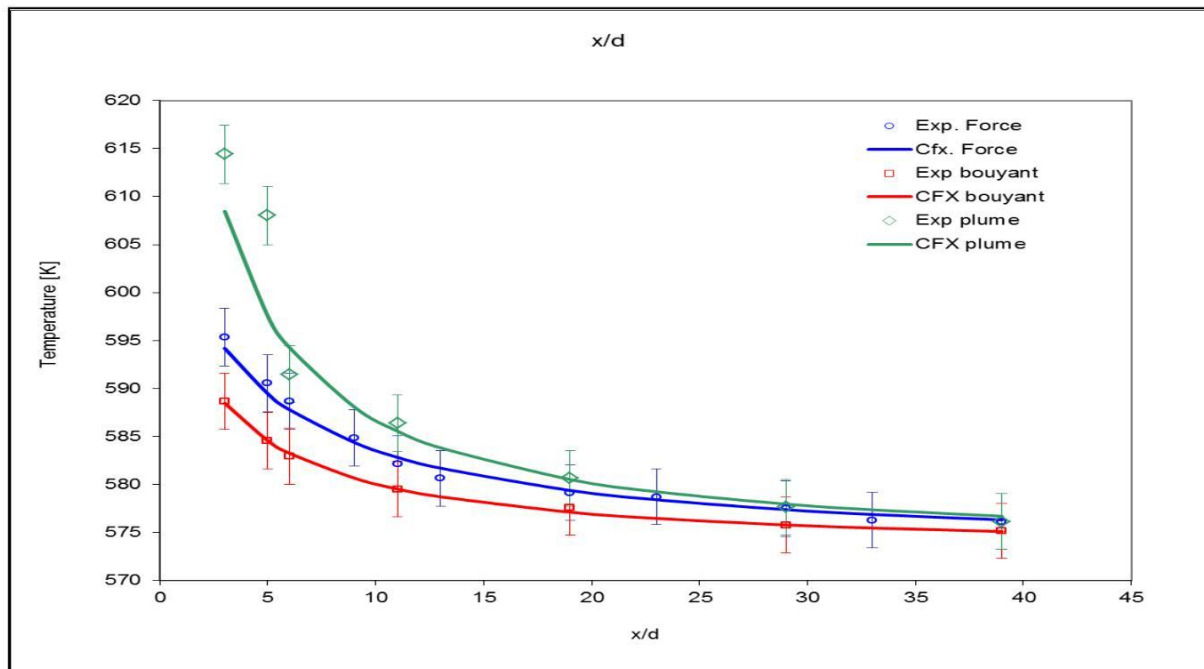
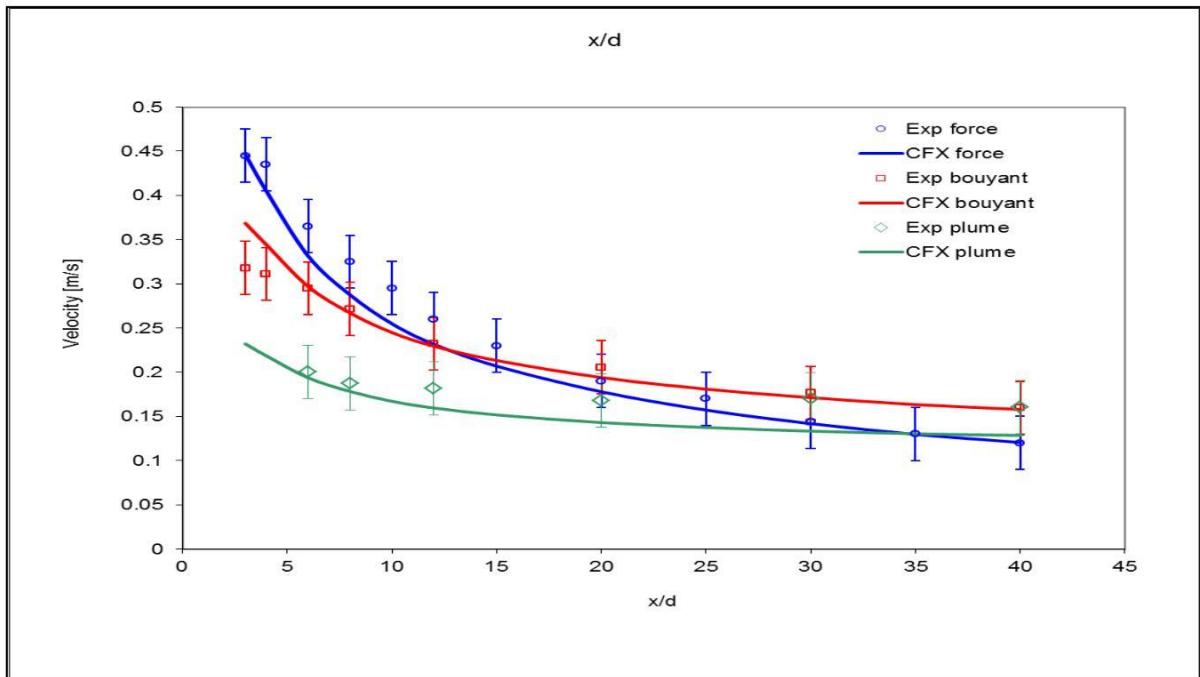


Abbildung 37: TEFLU Versuchsreihe mit den Auswertungen der axialen Geschwindigkeits- und Temperaturverteilung entlang der Symmetrieachse (x/d)

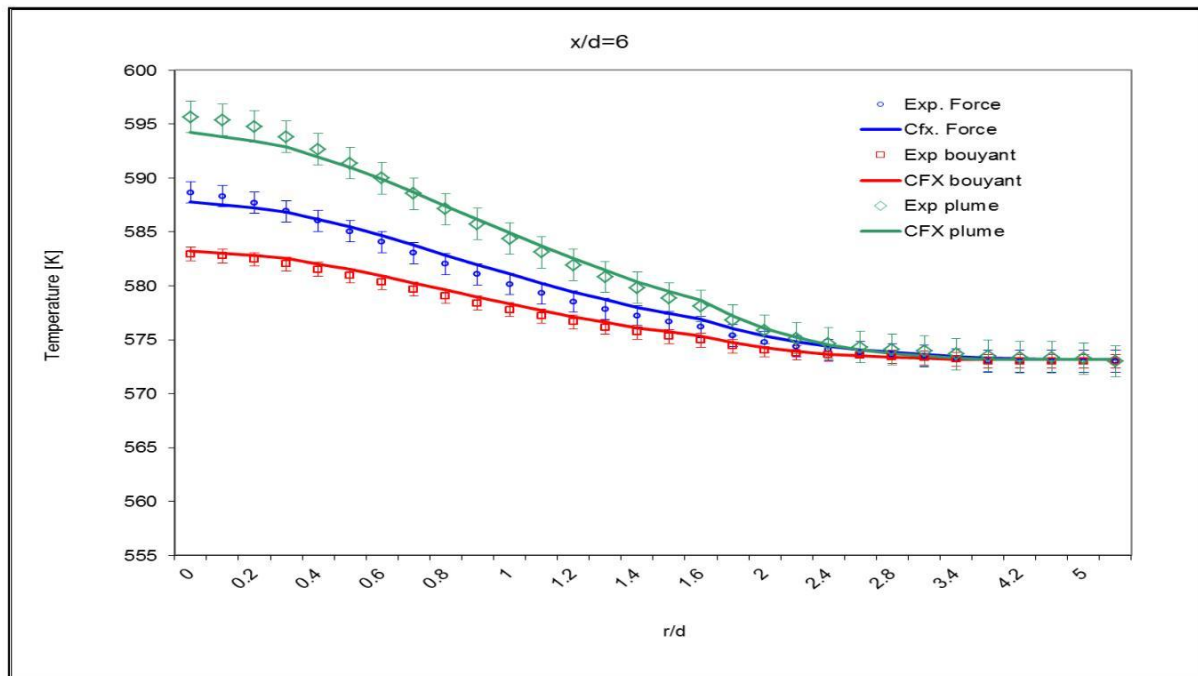
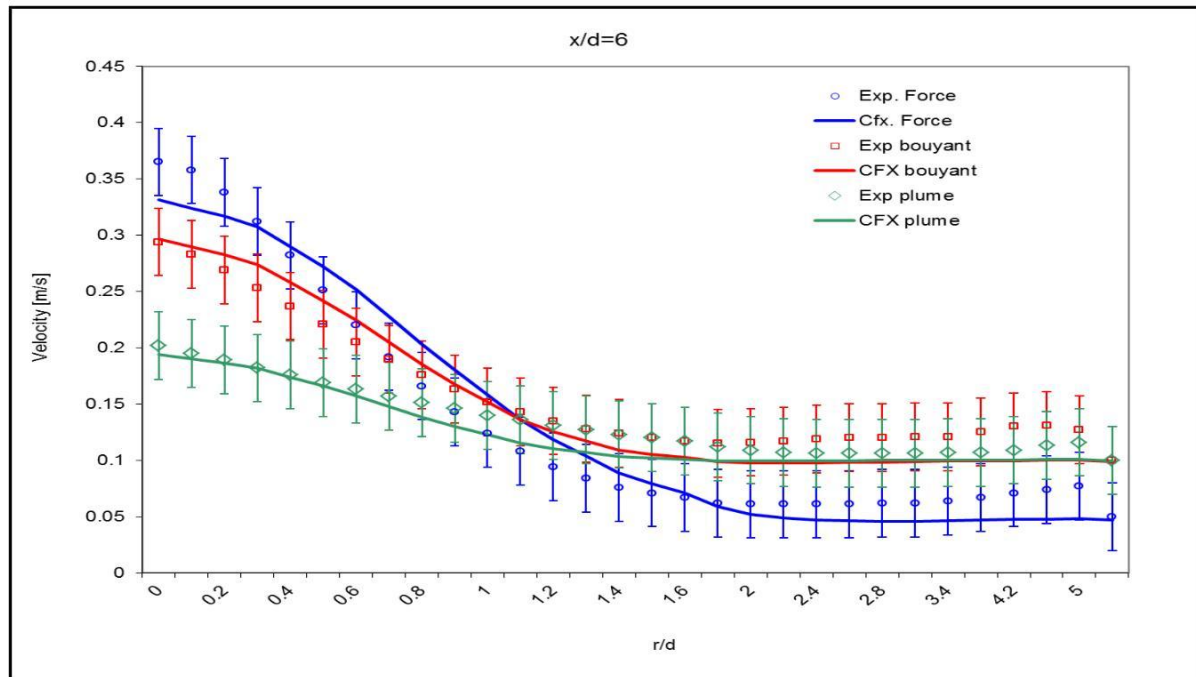


Abbildung 38: TEFLU Versuchsreihe mit den Auswertungen der radialen Geschwindigkeits- und Temperaturverteilung auf der Messebene ($x/d=6$)

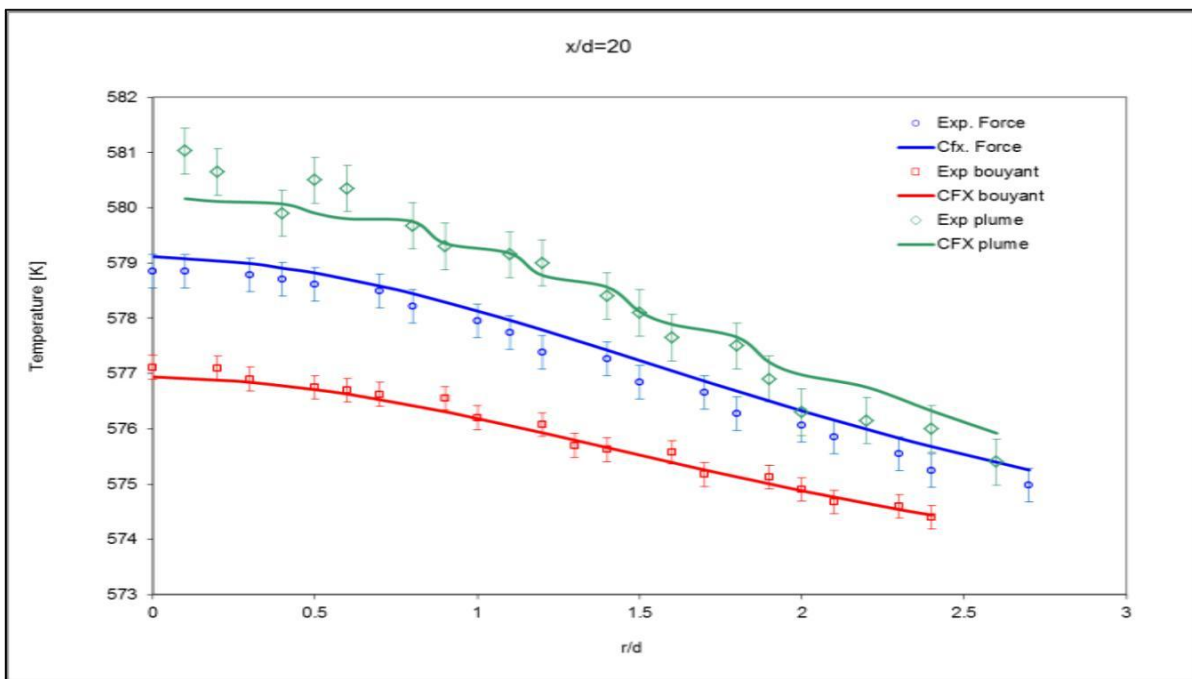
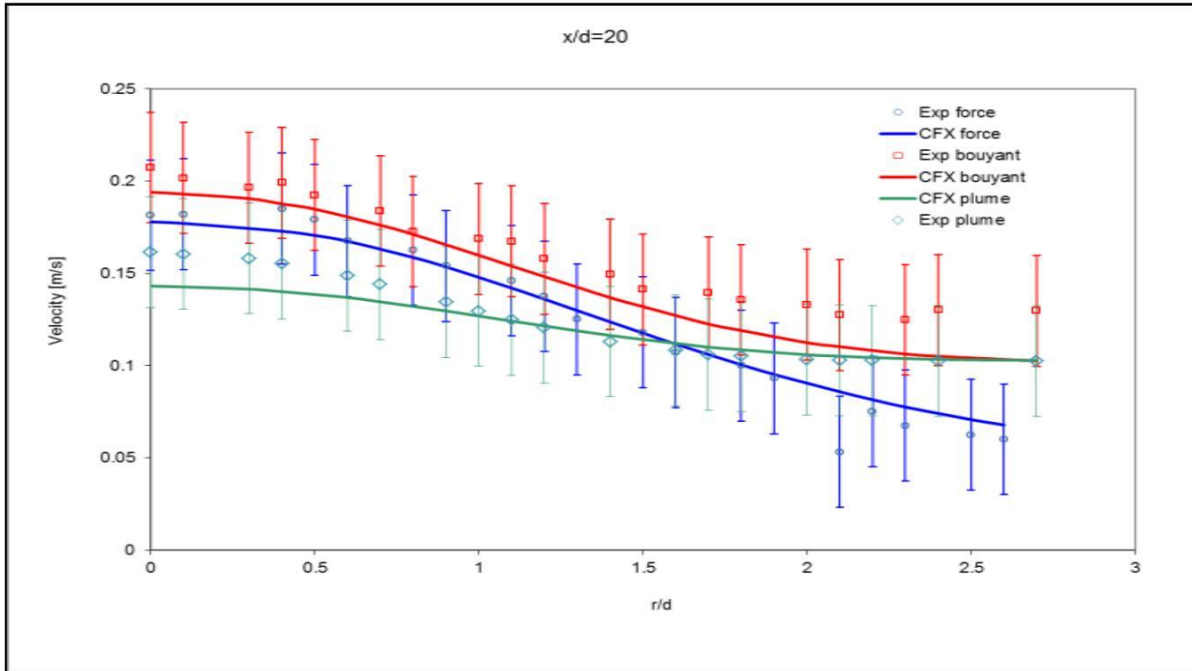


Abbildung 39: TEFLU Versuchsreihe mit den Auswertungen der Geschwindigkeitsverteilung (links) und Temperaturverteilung (rechts) in radialer Richtung auf der Messebene ($x/d=20$)

Für die Geschwindigkeitsverteilungen auf der Messebene $x/d=20$ liegen lediglich die Berechnungen des Impulsstrahls im Toleranzbereich (Abbildung 39 oben). Die Abweichungen für den schwachen Auftriebsstrahl erhöhen sich stark gegen die Kanalaußenwand.

Im Fall des starken Auftriebsstrahls ist ein entgegengesetzter Verlauf zu beobachten. Abgesehen von den Streuungen des starken Auftriebsstrahls stellen die Berechnungen der Temperaturverteilung (Abbildung 39 unten) auf der Ebene $x/d = 20$ ein zufriedenstellendes Ergebnis dar.

Für die Geschwindigkeits- und Temperaturberechnungen, in axialer und radialer Richtung, wird deutlich dass die vorhandenen Differenzen zwischen experimentell gemessenen und numerisch berechneten Werten stark von den Modellparametern und deren Randbedingungen geprägt sind. Die Differenzen lassen schlussfolgern, dass die verwendeten Modellgrößen ungenügend angepasst sind und nur teilweise, z.B. in bestimmten geometrischen Bereichen die Versuchsreihen suffizient wiedergeben können. Auch die Verwendung des Standard SAS SST Turbulenzmodells, mit Natrium als Kühlmittel zeigt, dass adaptive Modellparameter notwendig sind. Die Ermittlung der erforderlichen Größen werden durch die mathematische Methode nach [Cacuci und Ionescu- Bujor ,2010b] bestimmt. Diesbezüglich wird für das erstellte CFX Modell, sowohl in axialer als auch in radialer Richtung, die Geschwindigkeits- und Temperaturverteilung anhand der Systemparameter aus Tabelle 7 kalibriert. Die berücksichtigten Unschärfen der Parameter liegen alle im Mittelbereich ihrer Toleranzgrenzen. Dadurch wird eine Einhaltung der Parametergrenzen gewährleistet. Die Verwendung der experimentellen Daten für die Modellkalibrierung erfolgt dabei unter der Annahme, dass die einzelnen Werte keine Beziehung in Raum und Zeit besitzen. Als relativer Fehler wird für die TEFLU Daten in axialer Richtung x/d und in radialer Richtung $x/d = 6$ eine Ungenauigkeit von 5% angenommen. Für die radiale Richtung $x/d = 20$ wird dieser auf 7% angehoben.

Parameter	Nominalwert
$\alpha_1 = \text{Betastar Koeffizient } \beta^*$	$0.09 \pm 4\%$
$\alpha_2 = \text{Turbulente Smidt Zahl aus dem } k - \omega$	$0.90 \pm 4\%$
$\alpha_3 = \text{Turbulente Smidt Zahl aus dem } k - \varepsilon$	$1.00 \pm 4\%$
$\alpha_4 = \text{SAS1 Koeffizient}$	$1.25 \pm 4\%$
$\alpha_5 = \text{SAS2 Koeffizient}$	$1.76 \pm 4\%$
$\alpha_6 = \text{SAS3 Koeffizient}$	$3.00 \pm 4\%$
$\alpha_7 = \text{Turb. Smidt Zahl aus dem } k - \omega - \varepsilon$	$1.17647 \pm 4\%$
$\alpha_8 = \text{Dichte des Natriums } \rho \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right]$	$879.981 \pm 5\%$

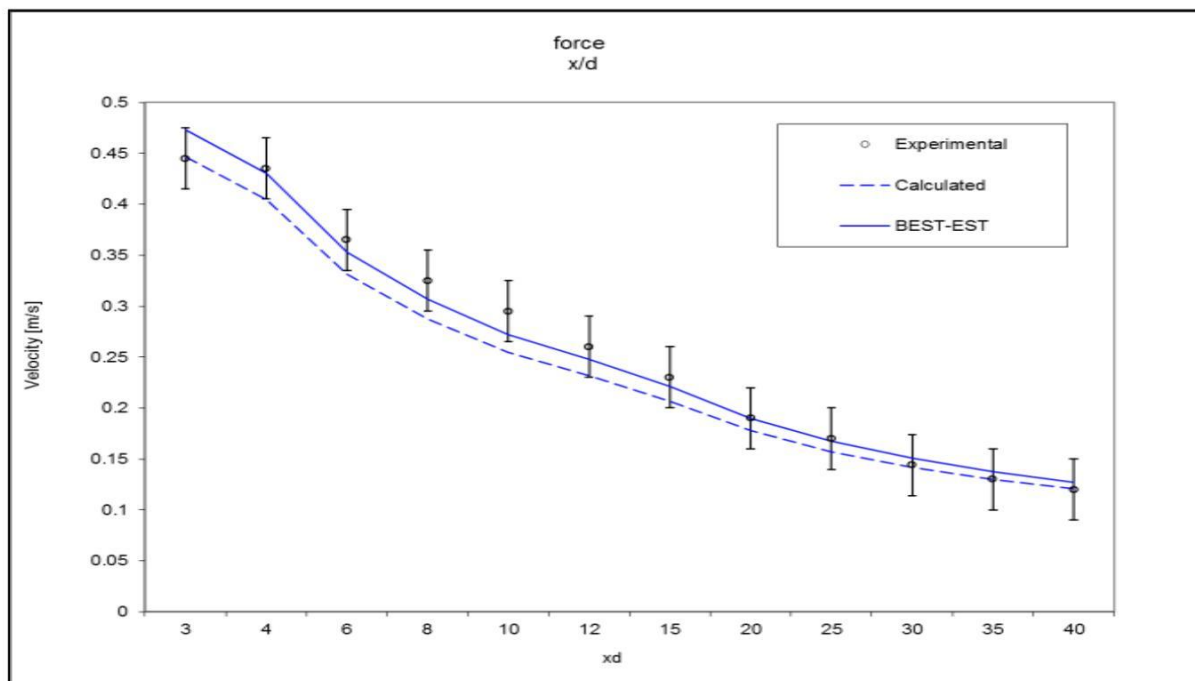
α_9 = Wärmekapazität des Natriums $c_p \left[\frac{J}{kg \cdot K} \right]$	$1304.49 \pm 5\%$
α_{10} = Wärmeleitfähigkeit $\lambda \left[\frac{W}{m \cdot K} \right]$	$76.58 \pm 5\%$
α_{11} = Dynamische Viskosität $\eta \left[Pa \cdot s \right]$	$344E-6 \pm 5\%$
α_{12} = turbulente Prandtlzahl Pr_t	$3.00 \pm 5\%$
α_{13} = Wirbelviskosität ν_t C2 $\left[Pa \cdot s \right]$	$0.0307993 \pm 5\%$
F $\left[Pa \cdot s \right]$	$0.015839658 \pm 5\%$
P $\left[Pa \cdot s \right]$	$0.010559772 \pm 5\%$
α_{14} = Kanaleinlassgeschwindigkeit	Tab.2 $\pm 5\%$
α_{15} = Jet- Einlassgeschwindigkeit	Tab.2 $\pm 5\%$

Tabelle 7: Modellparameter für die Kalibrierung der axialen und radialen Geschwindigkeits- und Temperaturverteilungen

Die Berechtigung dieser Anhebung beruht auf der Tatsache, dass die Datenreihen, aus Diagrammen abgelesen werden mussten und dieser Prozess, insbesondere für die Datenreihe $x/d = 20$, unpräzise und diffizil geworden ist. Die Ermittlung der prädiktiv bestmöglichen Beurteilungen werden, für die Geschwindigkeitsverteilungen, mit den Parameter $\alpha_1 \div \alpha_7$, α_{11} und $\alpha_{13} \div \alpha_{15}$ durchgeführt. Im Fall der Temperaturermittlung werden die Parameter $\alpha_7 \div \alpha_{15}$ verwendet. Die Nominalwerte und die dazugehörigen Unsicherheiten der Modellparameter sind aus Tabelle 7 zu entnehmen. Für die bestmöglichen Systemantworten aus Gleichung (2.29) ergeben sich, für die Geschwindigkeitsverteilung des Impulsstrahls entlang der Symmetrieachse, folgende Ergebnisse, die in Abbildung 40 in der oberen Darstellung zu sehen sind. Dabei werden die CFX Berechnungen von Anfang an deutlich verbessert und können gewährleisten, dass sich die bestmöglichen Einschätzungen weitgehend im Toleranzfeld der experimentellen Daten befinden. In der unteren Darstellung von Abbildung 40 wird ersichtlich, dass die Unsicherheiten der BESTEST Berechnungen deutlich geringer sind als die der CFX. Eine besonders gute Anpassung an die Daten der TEFLU Testreihe kann anhand der mathematischen Methode für die radiale Geschwindigkeitsverteilung auf der Messebene $x/d = 6$ erzielt werden. Eine deutliche Anpassung der Systemantworten (Abbildung 41, oberes Bild) und signifikante Reduzierung der Unsicherheiten (Abbildung 41, unteres Bild) heben nochmals die Vorteile hervor, die sich durch die Verwendung der mathematischen Methode nach [Cacuci und Ionescu- Bujor, 2010b] ergeben.

Gleichartige Verbesserungen können für die radiale Geschwindigkeitsverteilungen auf der Messebene $x/d = 20$ erzielt werden. Die Ergebnisse für diese Analyse sind in den Abbildungen 42 dargestellt. Die bestmöglichen Einschätzungen der Systemparameter für den Impulsstrahl sind in der Tabelle 8 aufgelistet. Zusätzlich zu diesen bestmöglichen Werten enthält die Tabelle die Angaben der reduzierten Unsicherheiten. Die Korrelationen der Systemparameter sowie die Korrelation der Systemparameter und Systemantworten für die Geschwindigkeitsverteilung des Impulsstrahls sind in den Abbildungen 43 bis 45 dargestellt. Die BESTEST Berechnungen für die axialen und radialen Temperaturverteilungen des Impulsstrahls können für die bestmöglichen Einschätzungen der Systemantworten keine Erfolge erbringen. Die Reduzierung der Unsicherheiten in den Parametern ist lediglich mit minimalstem Erfolg erzielbar.

Die Anpassungsindikatoren für die Geschwindigkeitsverteilungen des Impulsstrahls, aus Tabelle 9, belegen für den Impulsstrahl in axialer Richtung die deutlichen Verbesserungen und Übereinstimmungen zwischen den BESTEST Berechnungen und den experimentellen Messungen. Für die Untersuchungen in radialer Richtung zeigen die Indikatoren weniger ideale Übereinstimmungen auf. Die Ergebnisse der Indikatoren zeigen dabei ideale bis mittlere Übereinstimmung auf.



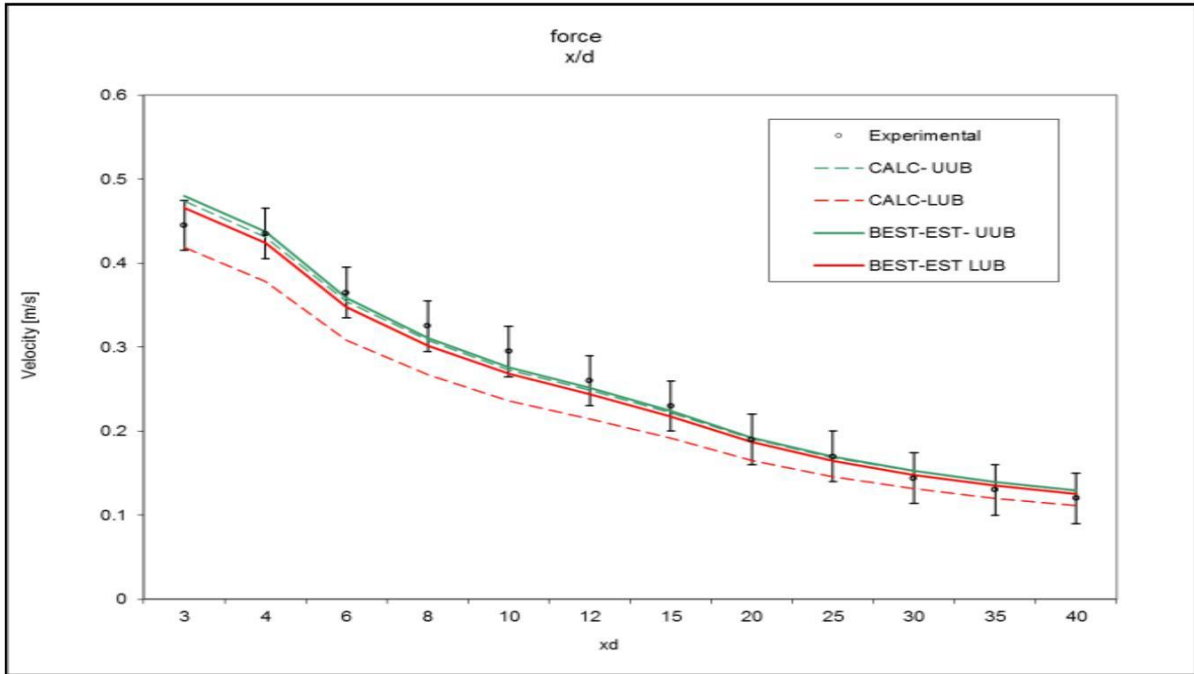
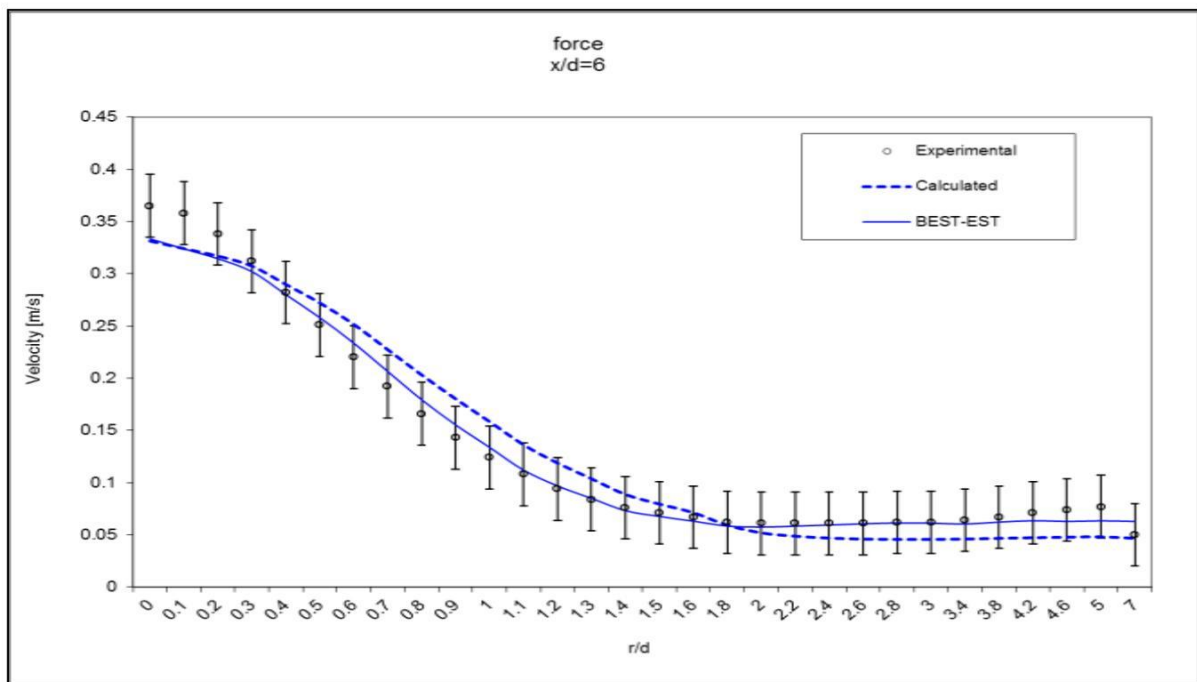


Abbildung 40: Vergleich zwischen den experimentellen Geschwindigkeitsverteilungen, den CFX sowie BESTEST Berechnungen (Bild oben) und die oberen und unteren Bänder der Unsicherheiten (Bild unten) für die CFX- und BESTEST Berechnungen für den Impulsstrahl entlang der Symmetrieachse (x/d)



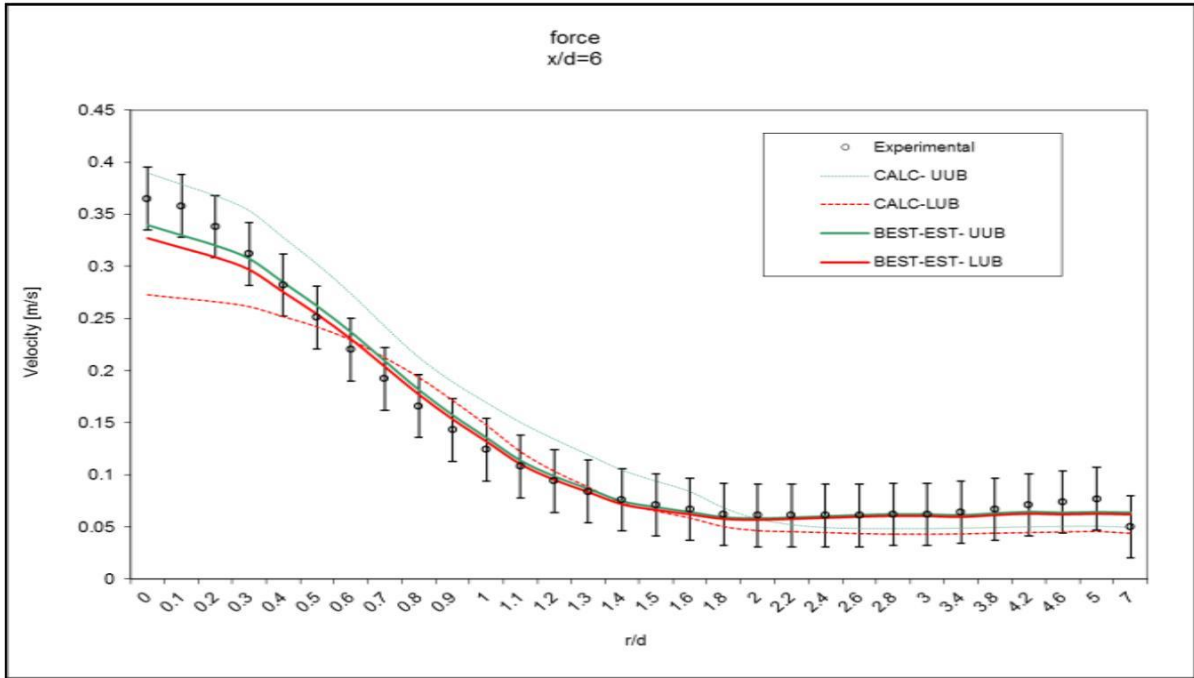
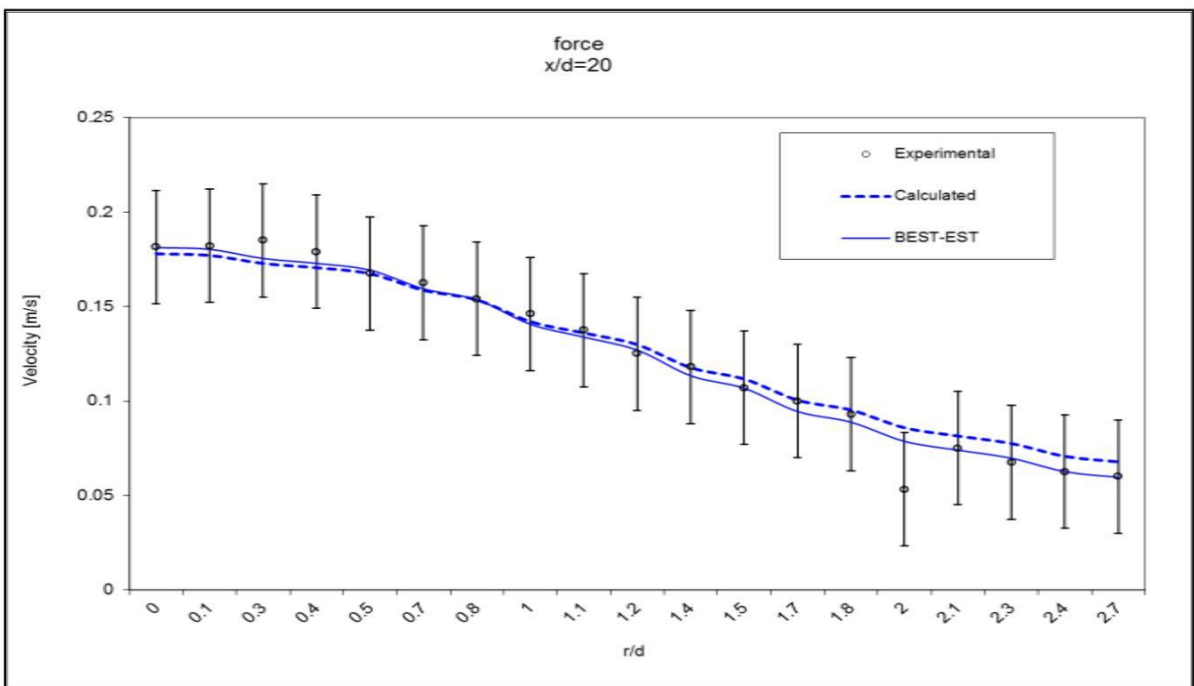


Abbildung 41: Vergleich zwischen den radialen experimentellen Geschwindigkeitsverteilungen, den CFX sowie BESTEST Berechnungen (Bild oben) und die oberen und unteren Bänder der Unsicherheiten (Bild unten) für die CFX- und BESTEST Berechnungen für den Impulsstrahl auf der Messebene ($x/d=6$)



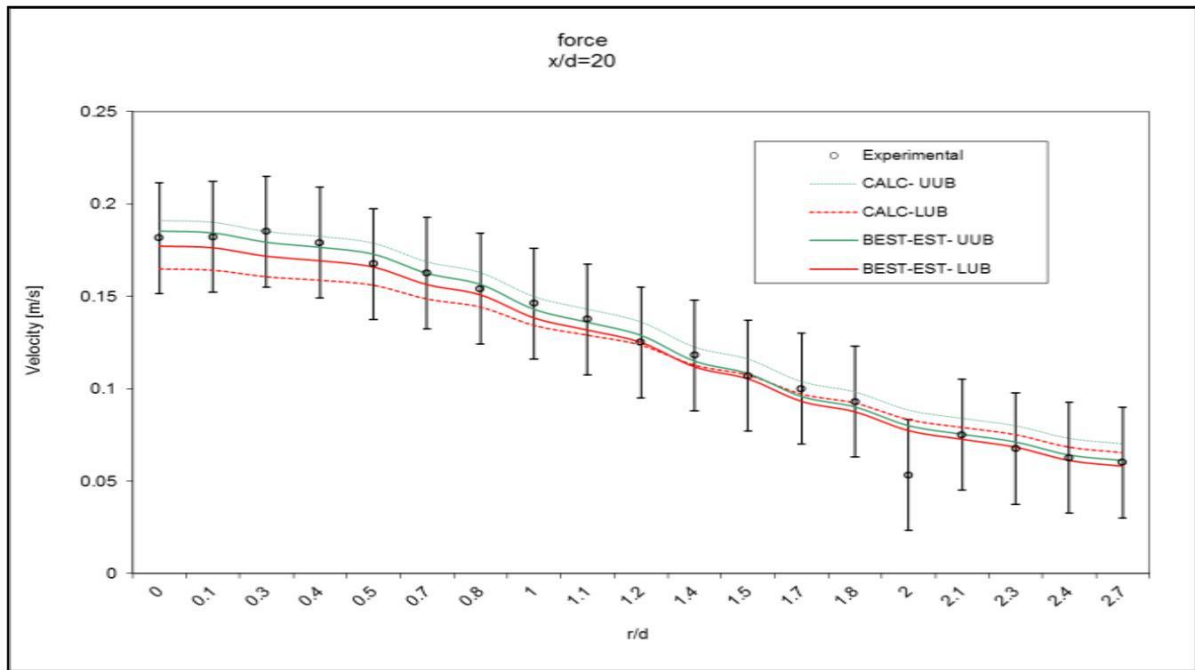


Abbildung 42: Vergleich zwischen den radialen experimentellen Geschwindigkeitsverteilungen, den CFX sowie BESTEST Berechnungen (Bild oben) und die oberen und unteren Bänder der Unsicherheiten (Bild unten) für die CFX- und BESTEST Berechnungen für den Impulsstrahl auf der Messebene ($x/d=20$)

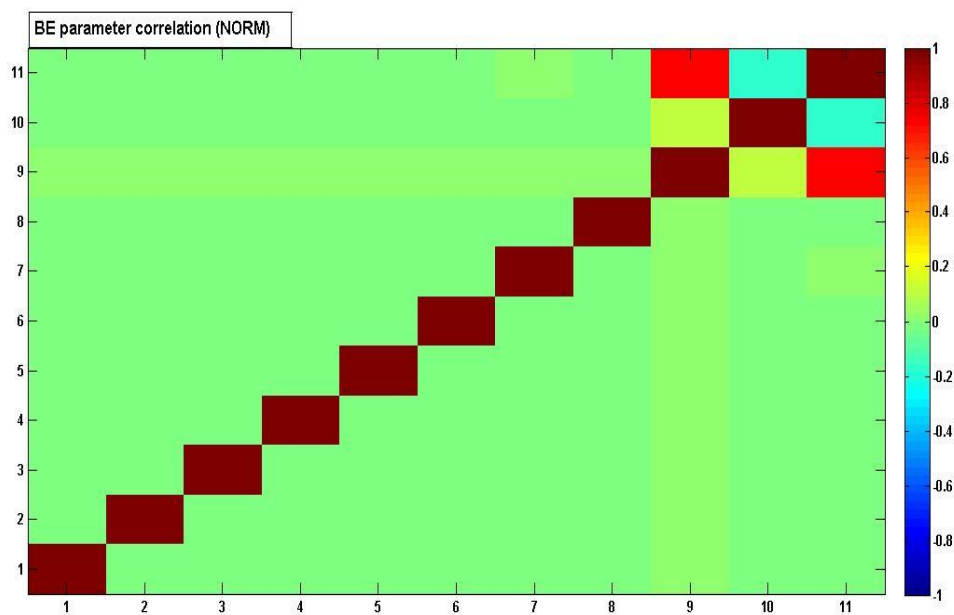
Parameter	Nominal	force (x/d)	force ($x/d=6$)	force ($x/d=20$)
α_1 = Betastar Koeffizient β^*	$0.09 \pm 4\%$	$0.089 \pm 4\%$	$0.089 \pm 4\%$	$0.089 \pm 4\%$
α_2 = Turbulente Smidt Zahl aus dem $k-\omega$	$0.90 \pm 4\%$	$0.89 \pm 4\%$	$0.890 \pm 4\%$	$0.89 \pm 4\%$
α_3 = Turbulente Smidt Zahl aus dem $k-\varepsilon$	$1.00 \pm 4\%$	$0.99 \pm 4\%$	$0.99 \pm 4\%$	$0.99 \pm 4\%$
α_4 = SAS1 Koeffizient	$1.25 \pm 4\%$	$1.24 \pm 4\%$	$1.22 \pm 4\%$	$1.24 \pm 4\%$
α_5 = SAS2 Koeffizient	$1.76 \pm 4\%$	$1.75 \pm 4\%$	$1.73 \pm 4\%$	$1.75 \pm 4\%$
α_6 = SAS3 Koeffizient	$3.00 \pm 4\%$	$2.99 \pm 4\%$	$2.94 \pm 4\%$	$2.98 \pm 4\%$
α_7 = Turb. Smidt Zahl aus dem $k-\omega-\varepsilon$	$1.17647 \pm 4\%$	$1.17318 \pm 4\%$	$1.15679 \pm 4\%$	$1.16994 \pm 4\%$

α_{11} = Dyn. Viskosität η [$Pa \cdot s$]	344E-6 $\pm 5\%$	341E-6 $\pm 5\%$	351E-6 $\pm 4.88\%$	335E-6 $\pm 4.8\%$
α_{13} = Wirbelviskosität ν_t [$Pa \cdot s$]	0.0307993 $\pm 5\%$	0.030563 4.69%	\pm 0.028763 $\pm 0.50\%$	0.027306 $\pm 4.48\%$
α_{14} Kanaleinlassgeschwindigkeit	0.05 $\pm 5\%$	0.048 $\pm 4.85\%$	0.06 $\pm 1.35\%$	0.04 $\pm 3.11\%$
α_{15} = Jet- Einlassgeschwindigkeit	0.55 $\pm 5\%$	0.57 $\pm 1.68\%$	0.46 $\pm 1.50\%$	0.54 $\pm 2.41\%$

Tabelle 8: Nominale und BESTEST Modellparameter der Geschwindigkeitsverteilung für den Impulsstrahl

	force (x/d)	force (x/d=6)	force (x/d=20)
χ^2	12.31	127.80	61.89
χ^2/N_r	1.02	4.26	3.25

Tabelle 9: Anpassungsindikatoren für die Geschwindigkeitsverteilung des Impulsstrahls



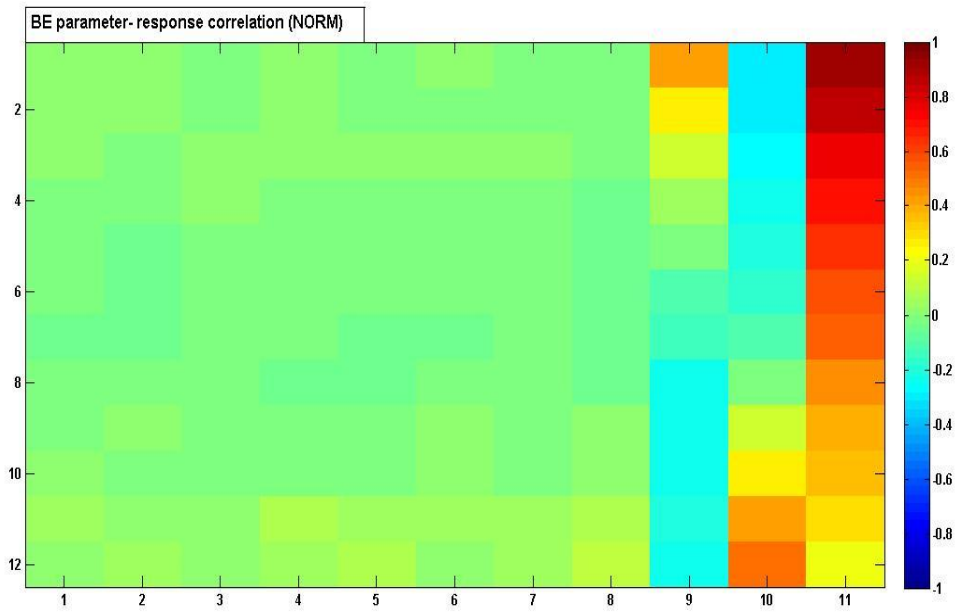
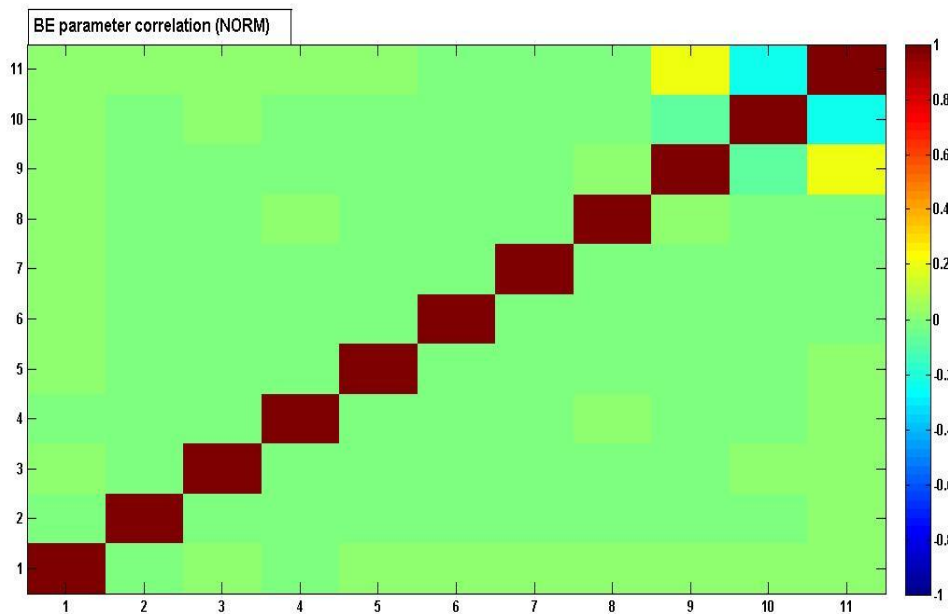


Abbildung 43: Bestmögliche Parameter Korrelation (Bild oben) und bestmögliche Parameter-Systemantwort Korrelation (Bild unten) für den Impulsstrahl der Geschwindigkeitsverteilung in axialer Richtung (x/d) in normalisierter Darstellung



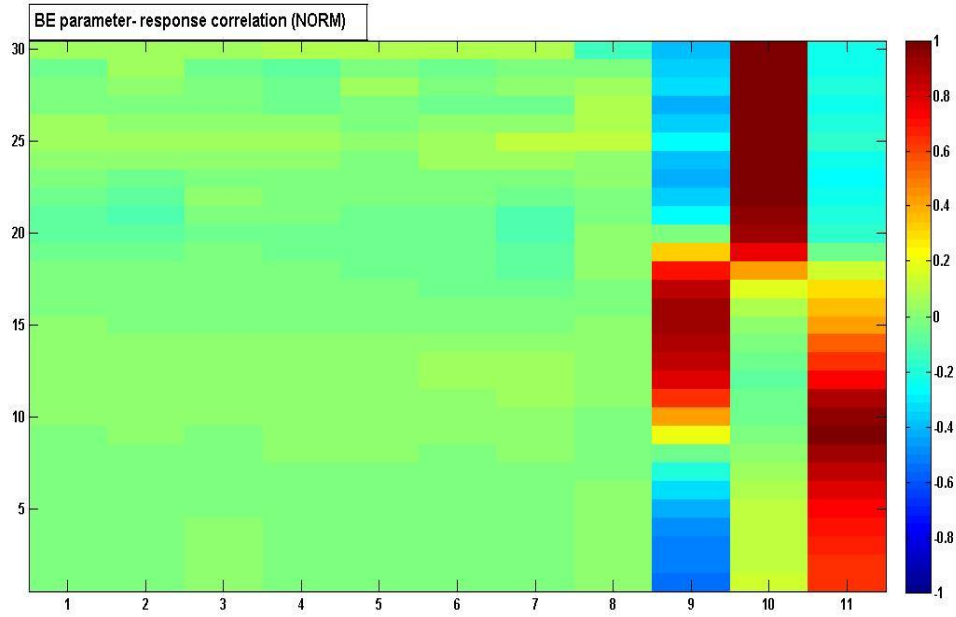
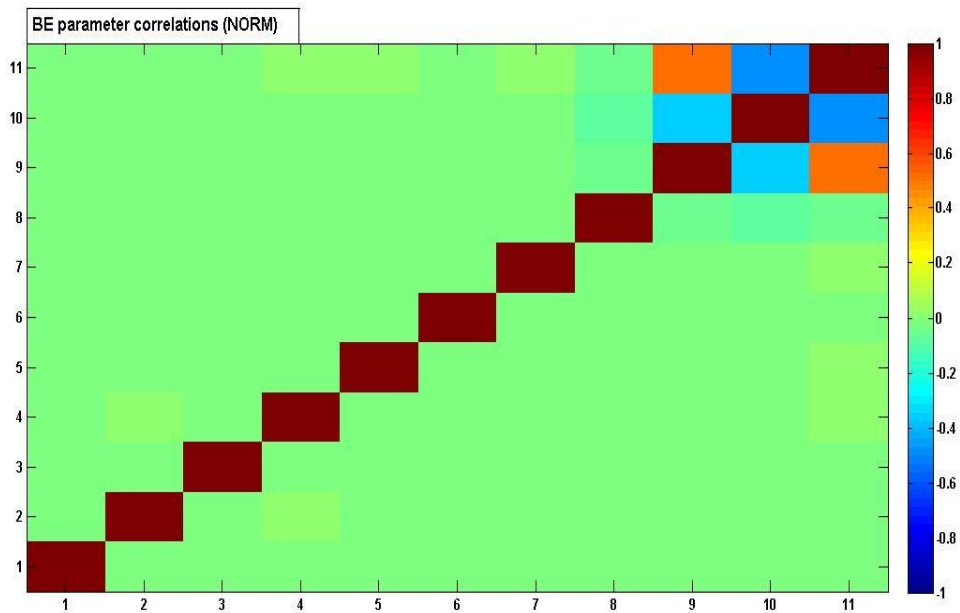


Abbildung 44: Bestmögliche Parameter Korrelation (Bild oben) und bestmögliche Parameter-Systemantwort Korrelation (Bild unten) für den Impulsstrahl der Geschwindigkeitsverteilung in radialer Richtung ($x/d=6$) in normalisierter Darstellung



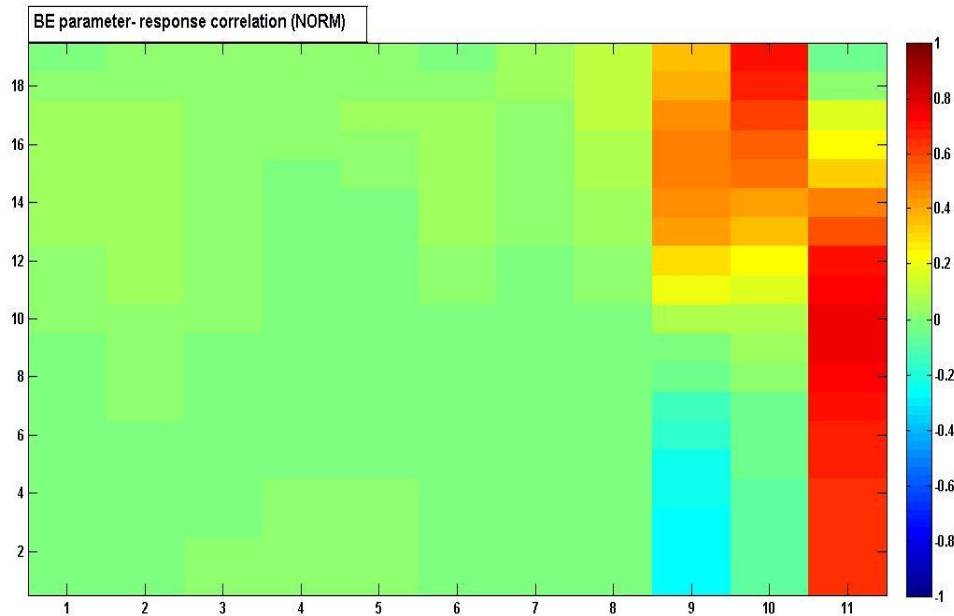


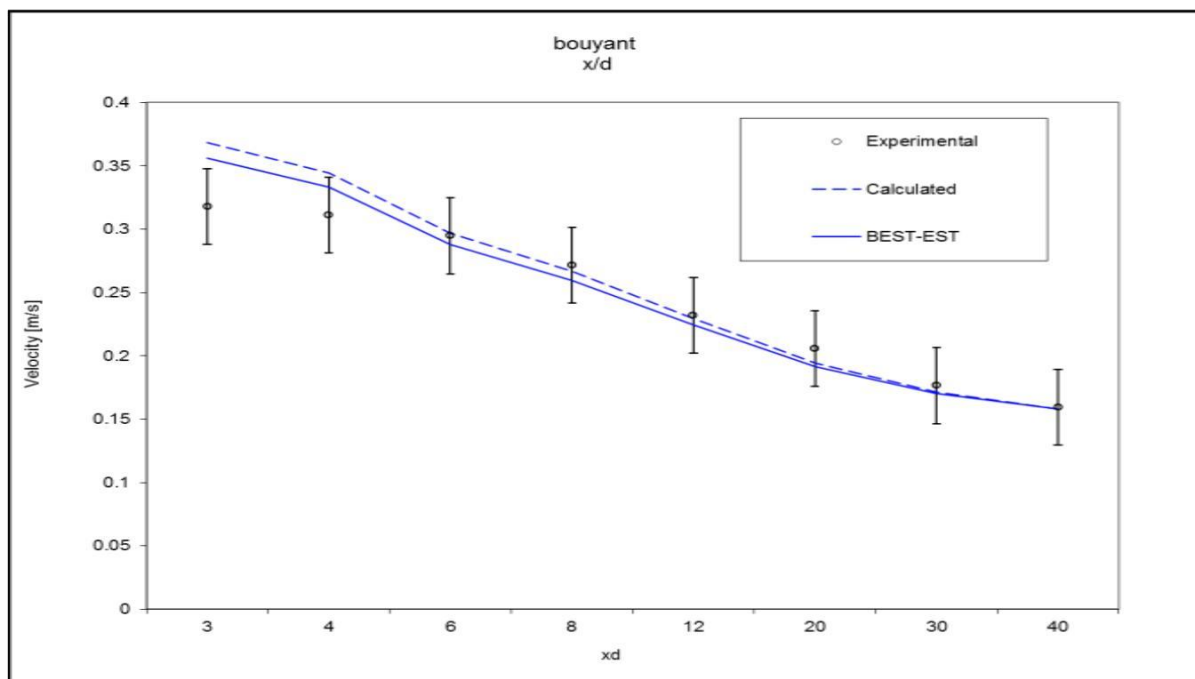
Abbildung 45: Bestmögliche Parameter Korrelation (oberes Bild) und bestmögliche Parameter-Systemantwort Korrelation (Bild unten) für den Impulsstrahl der Geschwindigkeitsverteilung in radialer Richtung ($x/d=20$) in normalisierter Darstellung

Die bestmöglichen Einschätzungen der Systemantworten für den schwachen Auftriebsstrahl entlang der Symmetrieachse (obere Darstellung) und die dazugehörigen Unsicherheiten (untere Darstellung), werden in Abbildung 46 gezeigt. Die Verbesserung durch die Assimilierung der bestmöglichen Beurteilungen der Systemantworten ist aus Abbildung 46 deutlich zu entnehmen. Auch die Reduzierung der Unsicherheiten für diese Analyse ist von Anfang an bemerkenswert. Deutlich stärkere Anpassungen erfahren die radialen Geschwindigkeitsverteilungen des schwachen Auftriebsstrahls. Die bestmöglich eingeschätzten Systemantworten, nach Gleichung (2.29), befinden sich dadurch sehr nahe an den experimentellen Daten. In der oberen Darstellung aus Abbildung 47 wird die Analyse auf der radialen Berechnung auf Messebene $x/d = 6$ gezeigt. In Abbildung 48 (obere Darstellung) ist diese für die Messebene $x/d = 20$ dargestellt. Auch die deutlichen Reduzierungen der Unsicherheiten können aus den Abbildungen (jeweils untere Darstellungen) aufgezeigt werden. In diesen werden die Unsicherheiten der experimentellen Daten durch ihre Fehlerindikatoren gekennzeichnet. Die Unsicherheiten der CFX Berechnungen werden durch Strichlinien und für die BESTEST durch durchgehende Linien dargestellt. Die bestmöglichen Einschätzungen der Systemparameter, nach Gleichung (2.25), für den schwachen Auftriebsstrahl und deren teilweise reduzierten Unsicherheiten sind in der Tabelle 10 aufgelistet. Überwiegende Reduzierungen der Unsicherheiten sind dabei für die Parameter α_7 , α_{11} und $\alpha_{13} \div \alpha_{15}$ erfolgt. Die

Modellparameter aus dem Turbulenzmodell bleiben nahezu unverändert. Die Korrelationen der Systemparameter sowie die Korrelationen der Parameter- Antwort-Korrelation, für die Geschwindigkeitsverteilung des schwachen Auftriebsstrahls, sind in den Abbildungen 49 bis 51 dargestellt.

Anhand der bestmöglichen Einschätzungen der Systemantworten für die Temperaturverteilungen, wie auch für die Untersuchung des Impulsstrahl, können, trotz mehrfacher Versuche, keine Erfolge für die Analyse des schwachen Auftriebsstrahls erzielt werden.

Die Anpassungsindikatoren für die Geschwindigkeitsverteilungen des schwachen Auftriebsstrahls, aus Tabelle 11, belegen die Verbesserungen und überwiegend guten Übereinstimmungen zwischen den BESTEST Berechnungen und den experimentellen Messungen.



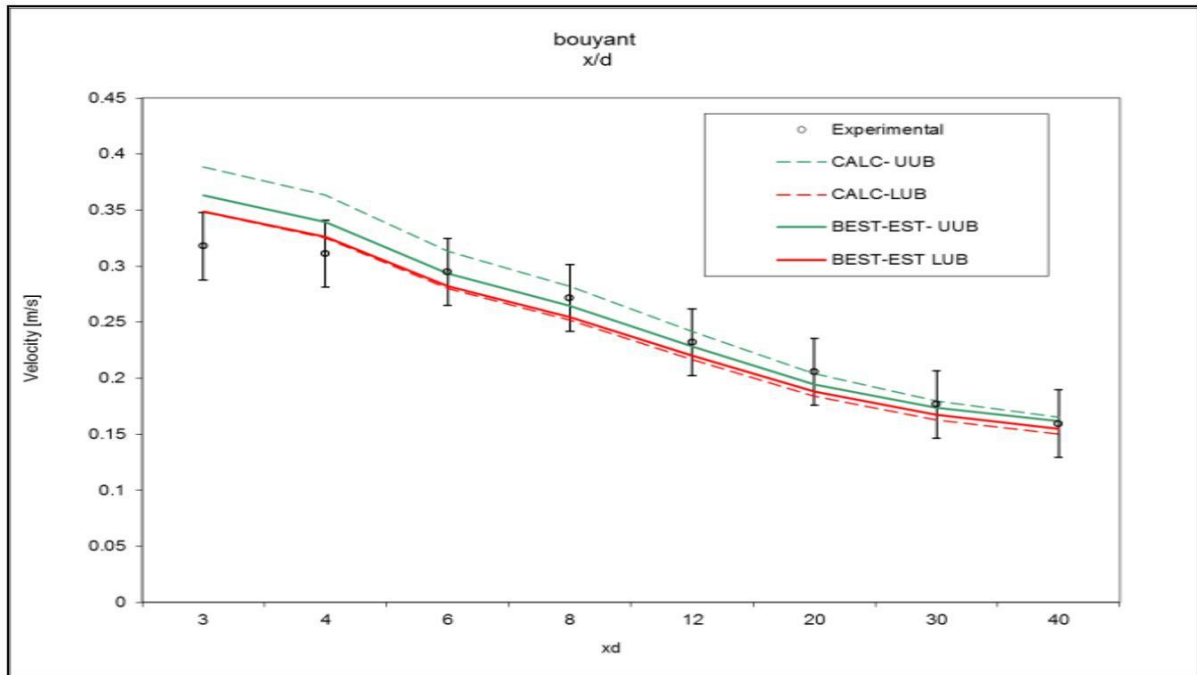
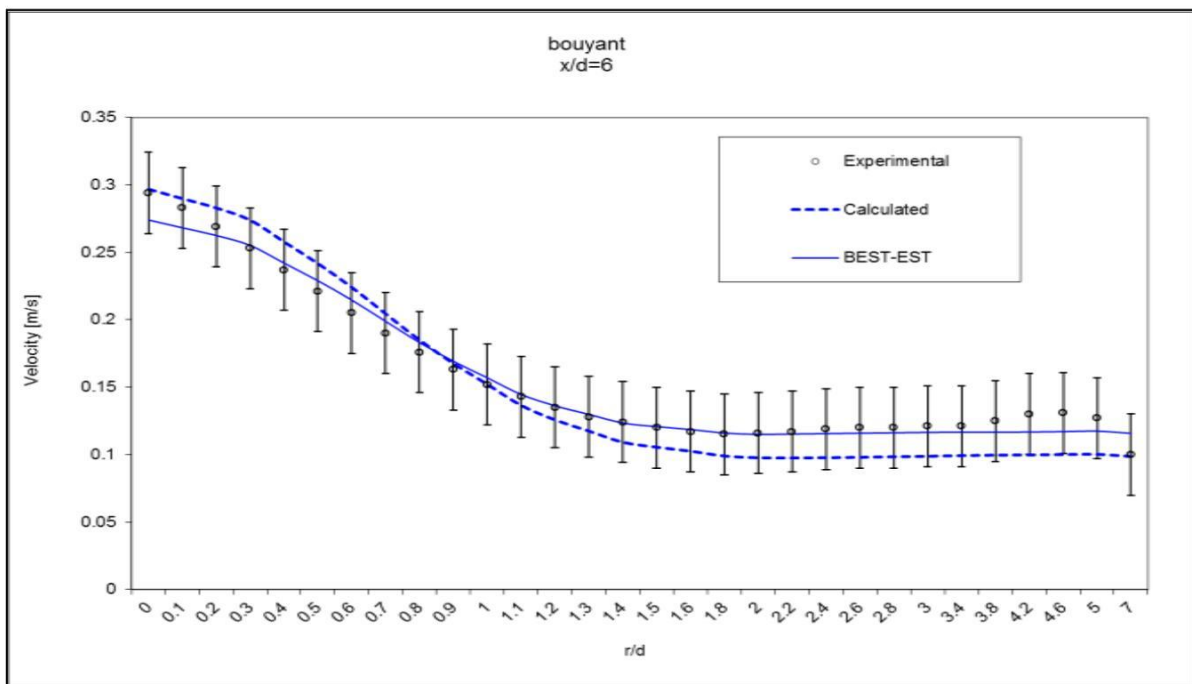


Abbildung 46: Vergleich zwischen den experimentellen Geschwindigkeitsverteilungen, den CFX sowie BESTEST Berechnungen (Bild oben) und die oberen und unteren Bänder der Unsicherheiten (Bild unten) für die CFX- und BESTEST Berechnungen für den schwachen Auftriebsstrahl entlang der Symmetrieachse (x/d)



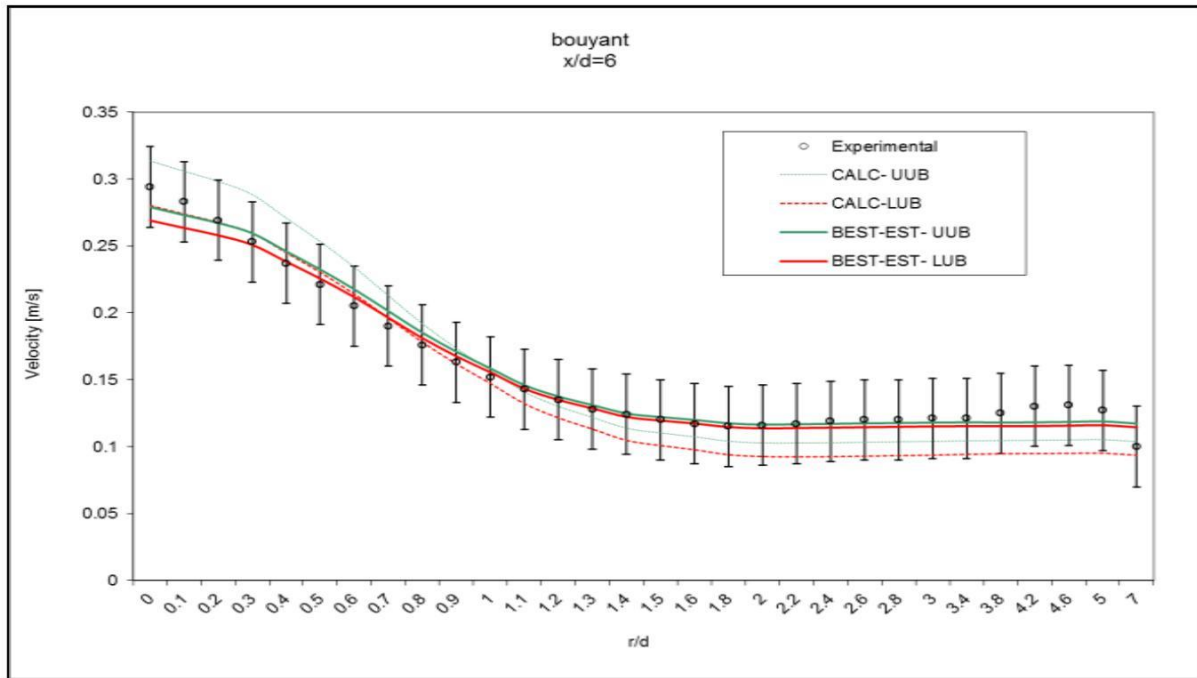
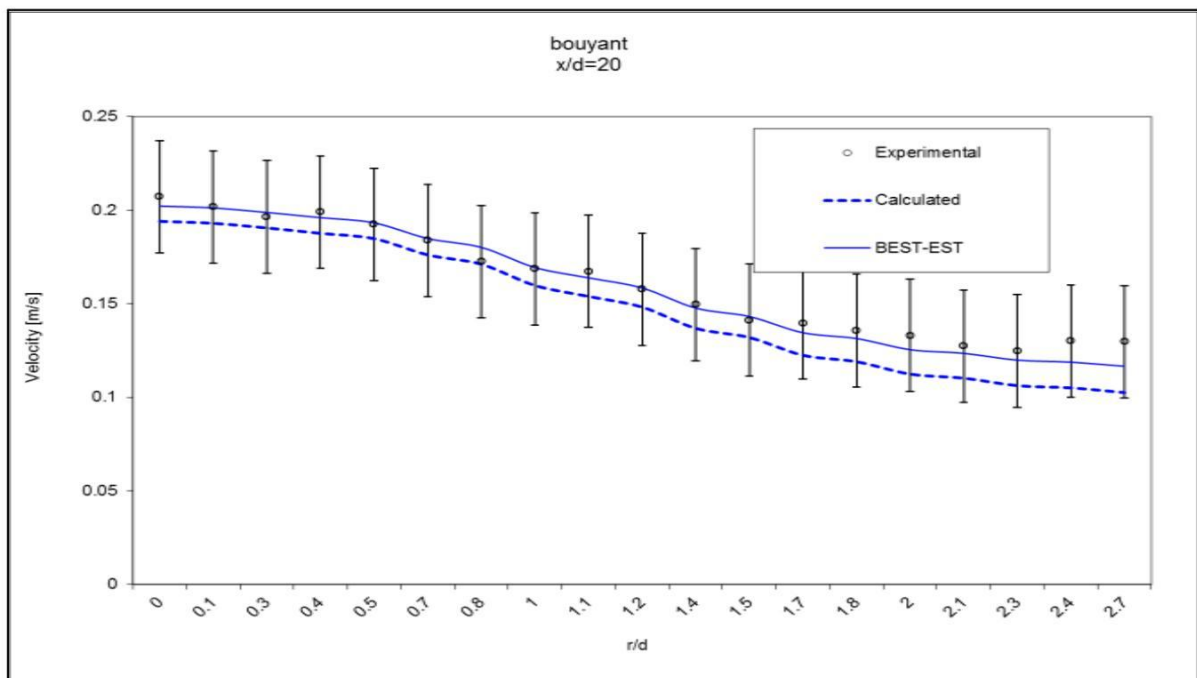


Abbildung 47: Vergleich zwischen den experimentellen Geschwindigkeitsverteilungen, den CFX sowie BESTEST Berechnungen (Bild oben) und die oberen und unteren Bänder der Unsicherheiten (Bild unten) für die CFX- und BESTEST Berechnungen für den schwachen Auftriebsstrahl auf der Messebene ($x/d=6$)



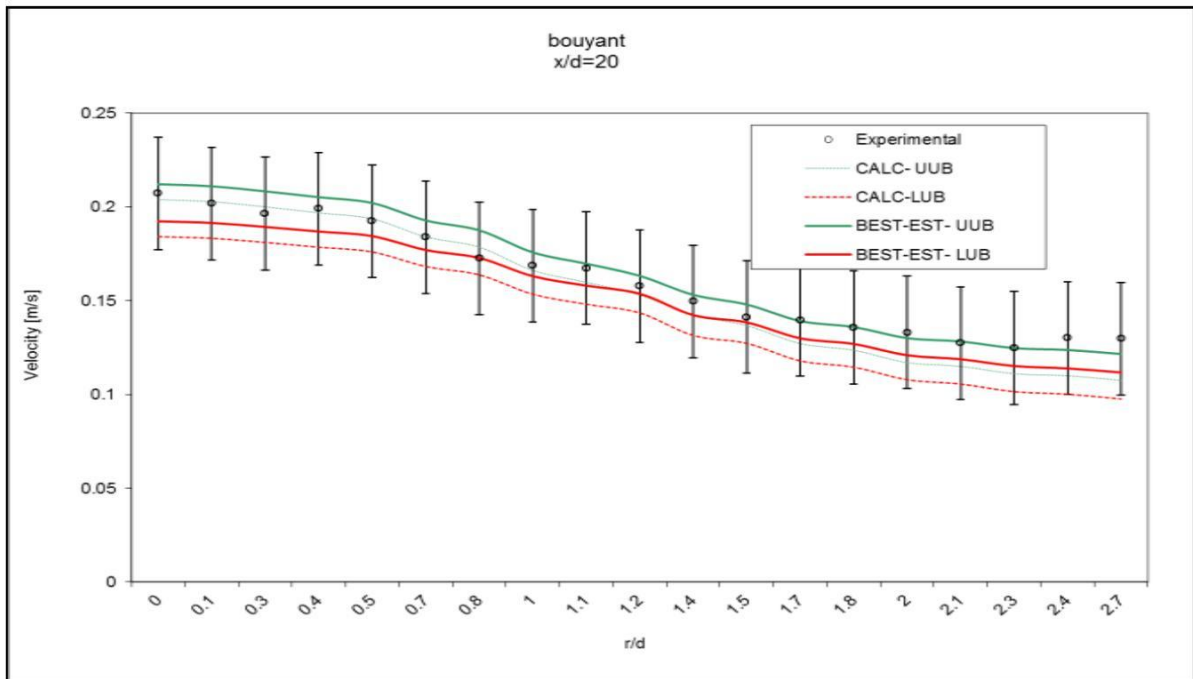


Abbildung 48: Vergleich zwischen den experimentellen Geschwindigkeitsverteilungen, den CFX sowie BESTEST Berechnungen (Bild oben) und die oberen und unteren Bänder der Unsicherheiten (Bild unten) für die CFX- und BESTEST Berechnungen für den schwachen Auftriebsstrahl auf der Messebene ($x/d=20$)

Parameter	Nominal	bouyant (x/d)	bouyant ($x/d=6$)	bouyant ($x/d=20$)
α_1 = Betastar Koeffizient β^*	$0.09 \pm 4\%$	$0.09 \pm 3.99\%$	$0.09 \pm 3.99\%$	$0.09 \pm 3.98\%$
α_2 = Turbulente Smidt Zahl aus dem $k-\omega$	$0.90 \pm 4\%$	$0.9 \pm 3.99\%$	$0.89 \pm 4.00\%$	$0.90 \pm 3.99\%$
α_3 = Turbulente Smidt Zahl aus dem $k-\varepsilon$	$1.00 \pm 4\%$	$1.00 \pm 3.99\%$	$0.99 \pm 4.00\%$	$1.00 \pm 3.99\%$
α_4 = SAS1 Koeffizient	$1.25 \pm 4\%$	$1.25 \pm 3.99\%$	$1.24 \pm 3.99\%$	$1.25 \pm 3.99\%$
α_5 = SAS2 Koeffizient	$1.76 \pm 4\%$	$1.76 \pm 3.99\%$	$1.75 \pm 4.00\%$	$1.76 \pm 3.99\%$
α_6 = SAS3 Koeffizient	$3.00 \pm 4\%$	$3.00 \pm 3.99\%$	$3.00 \pm 3.99\%$	$3.00 \pm 3.99\%$
α_7 = Turb. Smidt Zahl aus dem $k-\omega-\varepsilon$	$1.17647 \pm 4\%$	$1.1770 \pm 3.99\%$	$1.17752779 \pm 4.00\%$	$1.1801686 \pm 3.99\%$

α_{11} = Dyn. Viskosität η [$Pa \cdot s$]	344E-6 $\pm 5\%$	345E-6 $\pm 4.98\%$	344E-6 $\pm 5.00\%$	346E-6 $\pm 4.97\%$
α_{13} = Wirbelviskosität ν_t [$Pa \cdot s$]	0.010583 $\pm 5\%$	0.015548 $\pm 4.98\%$	0.015473 $\pm 4.90\%$	0.016078 $\pm 4.78\%$
α_{14} = Kanaleinlassgeschwindigkeit	0.10 $\pm 5\%$	0.104 $\pm 4.14\%$	0.110 $\pm 1.16\%$	0.110 $\pm 2.53\%$
α_{15} = Jet- Einlassgeschwindigkeit	0.43 $\pm 5\%$	0.41 $\pm 1.90\%$	0.39 $\pm 1.70\%$	0.41 $\pm 2.74\%$

Tabelle 10: Nominale und BESTEST Modellparameter der Geschwindigkeitsverteilung für den schwachen Auftriebsstrahl

	bouyant (x/d)	bouyant (x/d=6)	bouyant (x/d=20)
χ^2	12.99	47.04	13.71
χ^2/N_r	1.62	1.57	0.72

Tabelle 11: Anpassungsindikatoren für die Geschwindigkeitsverteilungen des schwachen Auftriebsstrahls

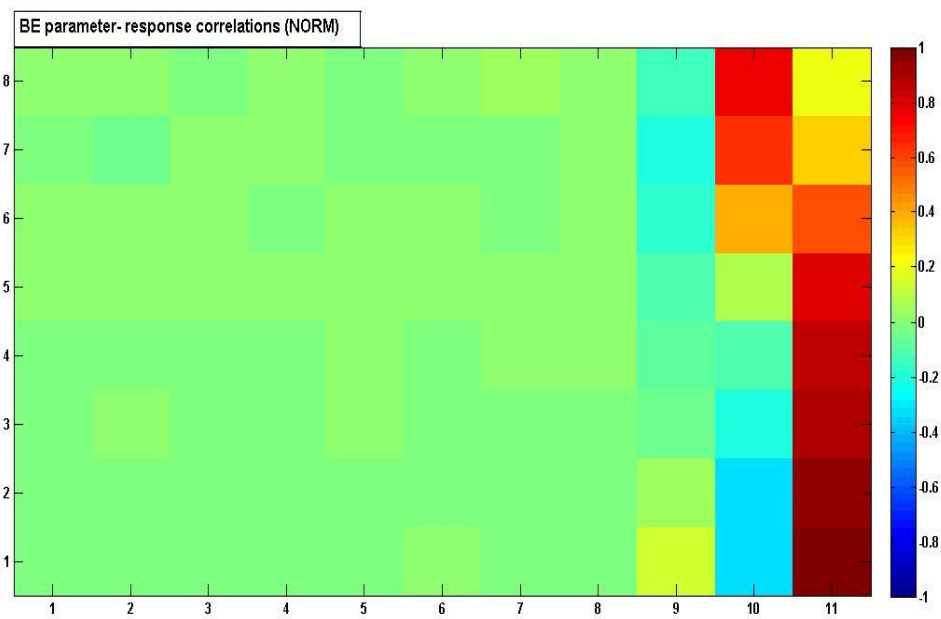
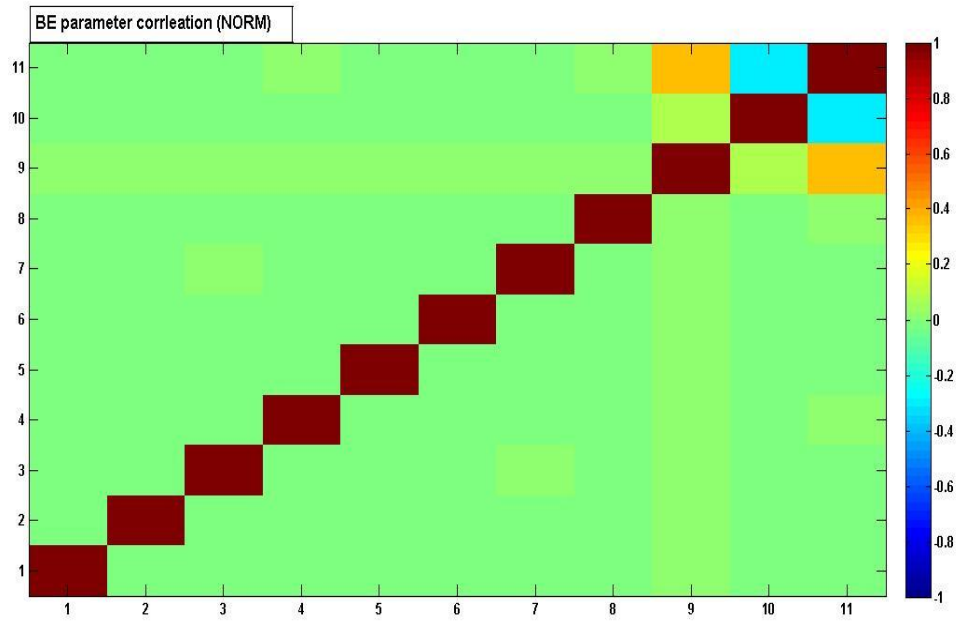


Abbildung 49: Bestmögliche Parameter Korrelation (Bild oben) und bestmögliche Parameter-Systemantwort Korrelation (Bild unten) für schwachen Auftriebsstrahl der Geschwindigkeitsverteilung in axialer Richtung (x/d) in normalisierter Darstellung

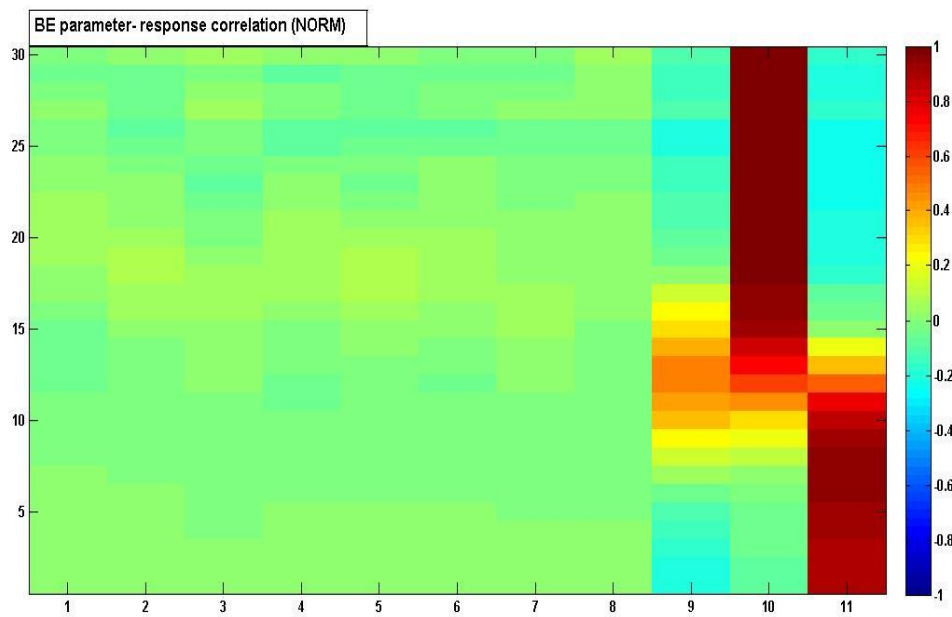
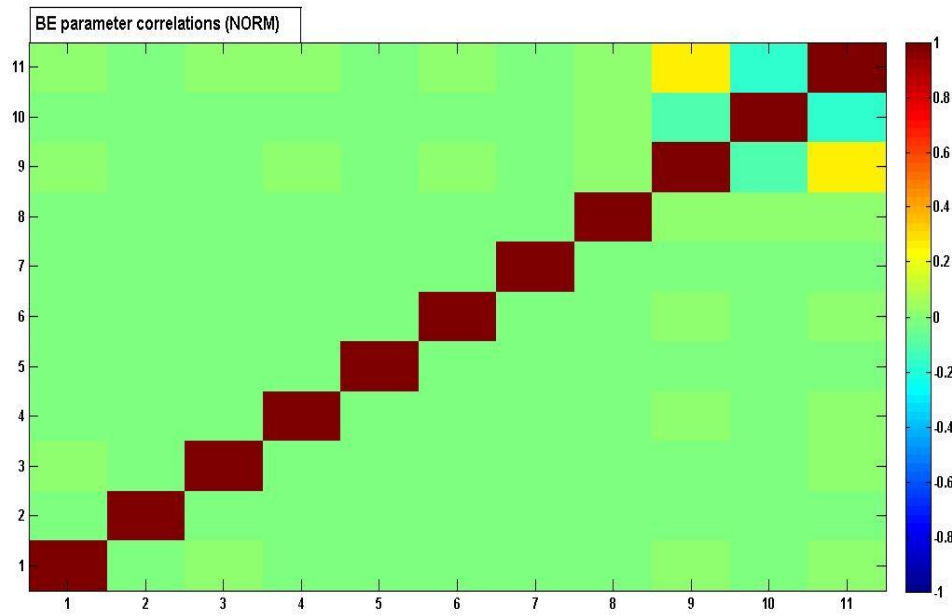


Abbildung 50: Bestmögliche Parameter Korrelation (Bild oben) und bestmögliche Parameter-Systemantwort Korrelation (Bild unten) für den schwachen Auftriebsstrahl der Geschwindigkeitsverteilung in radialer Richtung ($x/d=6$) in normalisierter Darstellung

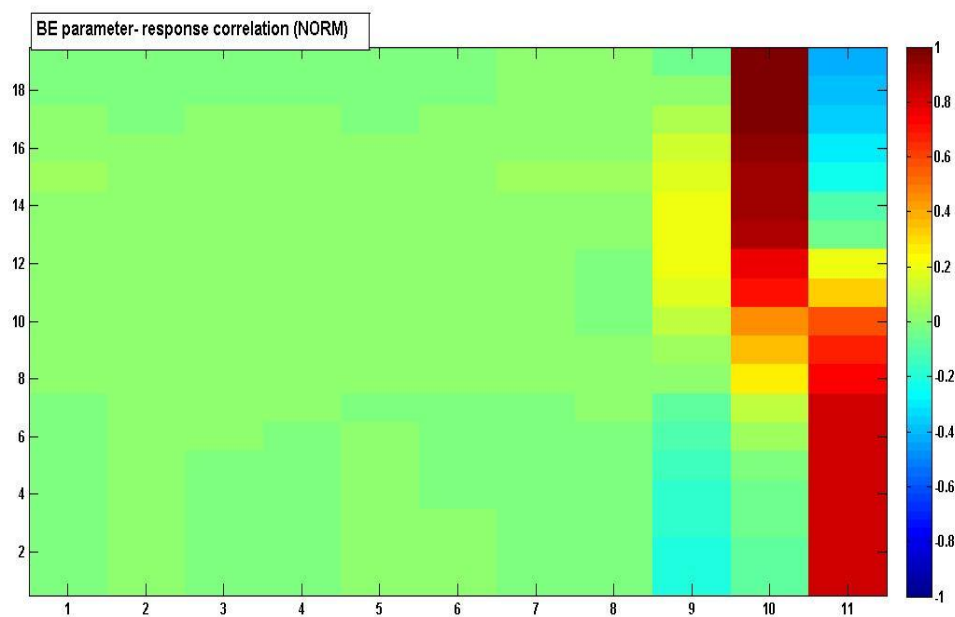
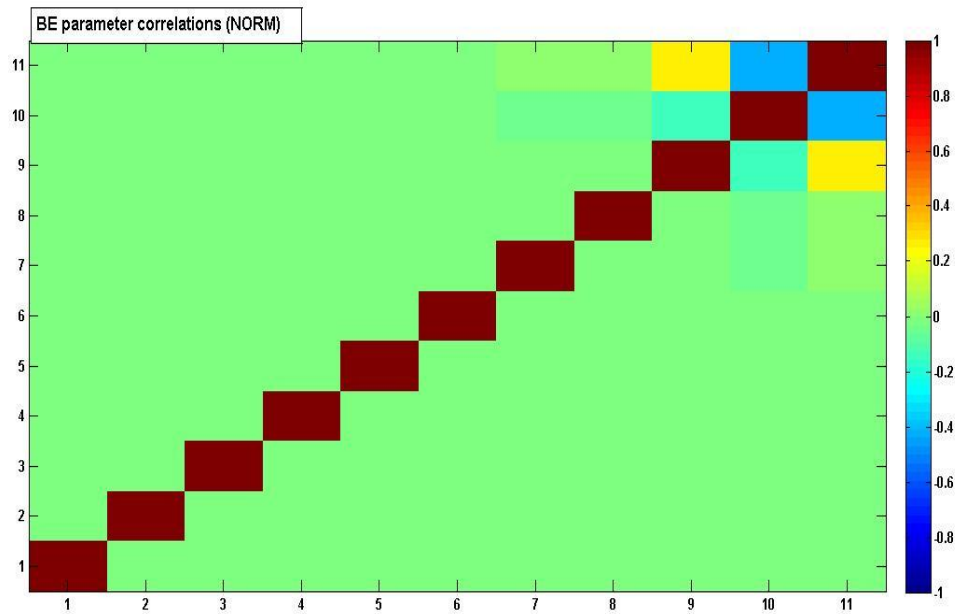


Abbildung 51: Bestmögliche Parameter Korrelation (Bild oben) und bestmögliche Parameter-Systemantwort Korrelation (Bild unten) für den schwachen Auftriebsstrahl der Geschwindigkeitsverteilung in radialer Richtung ($x/d=20$) in normalisierter Darstellung

Die Ergebnisse der bestmöglichen Einschätzungen der Systemantworten der Geschwindigkeitsverteilung, mittels der experimentellen Messaufzeichnungen des TEFLU Experiments für den starken Auftriebsstrahl, liegen für den axialen

Untersuchungsfall deutlich näher an den experimentellen Messergebnissen, als die CFX Berechnungen. In Abbildung 52, obiger Darstellung, sind die bestmöglichen Systemantworten und in unterer Darstellung die Unsicherheitenbänder der CFX und BESTEST Berechnungen dargestellt. Für die radiale Geschwindigkeitsverteilung auf der Messebene $x/d = 6$ gewährleiten die BESTEST Berechnungen, aus Abbildung 53 (oben), eine nahezu ideale Wiedergabe der TEFLU Daten. Auch hier ist die extrem starke Reduzierung der Unsicherheiten (Abbildung 53, Darstellung unten) beachtlich. Die Assimilation der Systemantworten und Verringerung der Unsicherheiten auf der Messebene $x/d = 20$ ist äquivalent wie die der $x/d = 6$. Die starken Verbesserungen für diese Falluntersuchung sind in Abbildung 54 vorzufinden. Die Korrelationen der Systemparameter sowie die Korrelationen zwischen den Systemparameter und Systemantworten, für die Geschwindigkeitsverteilung des starken Auftriebsstrahls, sind in den Abbildungen 55 bis 57 dargestellt. Die bestmöglichen Einschätzungen der Systemparameter für den starken Auftriebsstrahl und deren teilweise reduzierten Unsicherheiten sind in der Tabelle 12 aufgelistet. Auch hier sind geringfügige Variationen in den Modellparametern des Turbulenzmodells zu verzeichnen. Signifikantere Reduzierungen erfolgen wieder für die Unsicherheiten der Parameter α_7 , α_{11} und $\alpha_{13} \div \alpha_{15}$. Die Anpassungsindikatoren für die Geschwindigkeitsverteilungen des starken Auftriebsstrahls, aus Tabelle 13, belegen für die radialen Berechnungen Verbesserungen und überwiegend gute Übereinstimmungen zwischen den BESTEST Berechnungen und den experimentellen Messungen. Anhand der bestmöglichen Einschätzungen der Systemantworten für die Temperaturverteilungen können auch für diese Falluntersuchung keine Erfolge erzielt werden.

Parameter	Nominal	plume (x/d)	plume (x/d=6)	plume (x/d=20)
$\alpha_1 =$ Betastar Koeffizient β^*	0.09 ± 4%	0.089 ± 4.00%	0.089 ± 4.00%	0.089 ± 4.00%
$\alpha_2 =$ Turbulente Smidt Zahl aus dem $k - \omega$	0.90 ± 4%	0.89 ± 4.00%	0.90 ± 4.00%	0.89 ± 4.00%
$\alpha_3 =$ Turbulente Smidt Zahl aus dem $k - \varepsilon$	1.00 ± 4%	0.99 ± 4.00%	0.99 ± 4.00%	0.99 ± 4.00%
$\alpha_4 =$ SAS1 Koeffizient	1.25 ± 4%	1.24 ± 4.00%	1.25 ± 4.00%	1.25 ± 4.00%

α_5 = SAS2 Koeffizient	1.76 ± 4%	1.75 ± 4.00%	1.75 ± 4.00%	1.75 ± 4.00%
α_6 = SAS3 Koeffizient	3.00 ± 4%	2.99 ± 4.00%	2.99 ± 4.00%	2.99 ± 4.00%
α_7 = Turb. Smidt Zahl aus dem $k-\omega-\varepsilon$	1.17647 ± 4%	1.1731719 ± 4.00%	1.17725417 ± 4.00%	1.172181 ± 4.00%
α_{11} = Dyn. Viskosität η [$Pa \cdot s$]	344E-6 ± 5%	341E-6 ± 5.00%	341E-6 ± 5.00%	343E-6 ± 5.00%
α_{13} = Wirbelviskosität ν_t [$Pa \cdot s$]	0.01055597 ± 5%	0.010479 ± 4.69%	0.010769 ± 4.83%	0.010252 ± 5.00%
α_{14} = Kanaleinlassgeschwindigkeit	0.10 ± 5%	0.09 ± 4.85%	0.11 ± 1.12%	0.09 ± 1.80%
α_{15} = Jet- Einlassgeschwindigkeit	0.23 ± 5%	0.28 ± 1.68%	0.27 ± 1.91%	0.29 ± 2.70%

Tabelle 12: Nominale und BESTEST Modellparameter der Geschwindigkeitsverteilung für den starken Auftriebsstrahl

	plume (x/d)	plume (x/d=6)	plume (x/d=20)
χ^2	23.05	31.01	12.01
χ^2/N_r	3.84	1.03	0.63

Tabelle 13: Anpassungsindikatoren für die Geschwindigkeitsverteilungen des starken Auftriebsstrahls

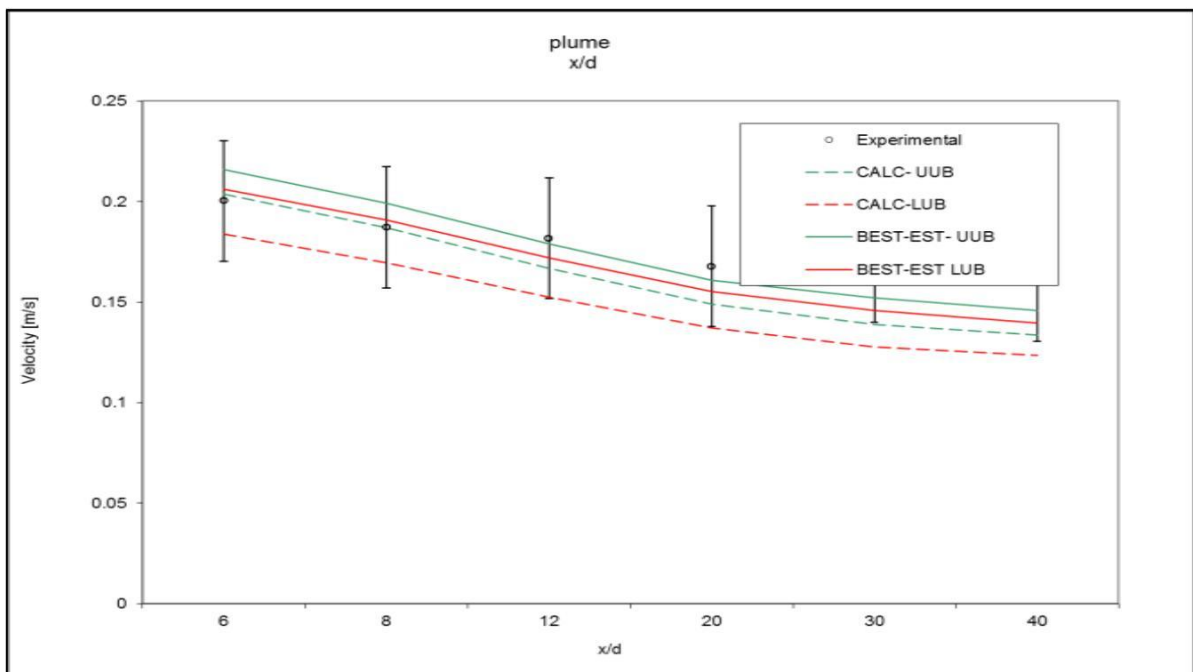
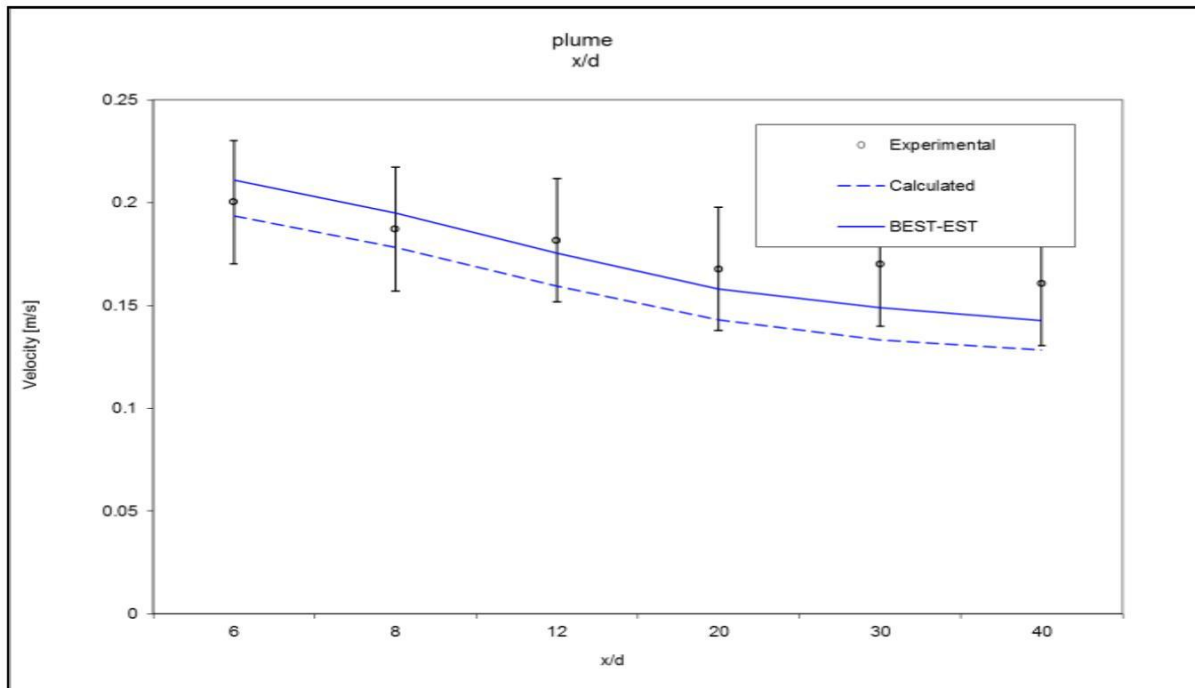


Abbildung 52: Vergleich zwischen den experimentellen Geschwindigkeitsverteilungen, den CFX sowie BESTEST Berechnungen (Bild oben) und die oberen und unteren Bänder der Unsicherheiten (Bild unten) für die CFX- und BESTEST Berechnungen für den starken Auftriebsstrahl entlang der Symmetrieachse (x/d)

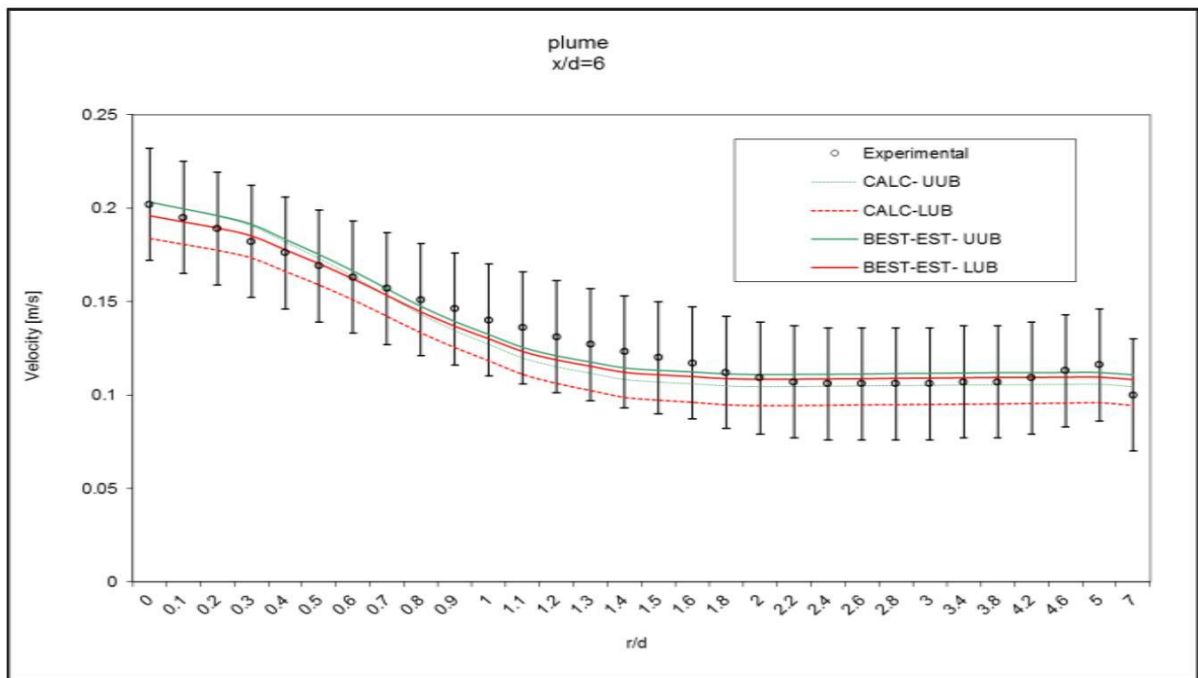
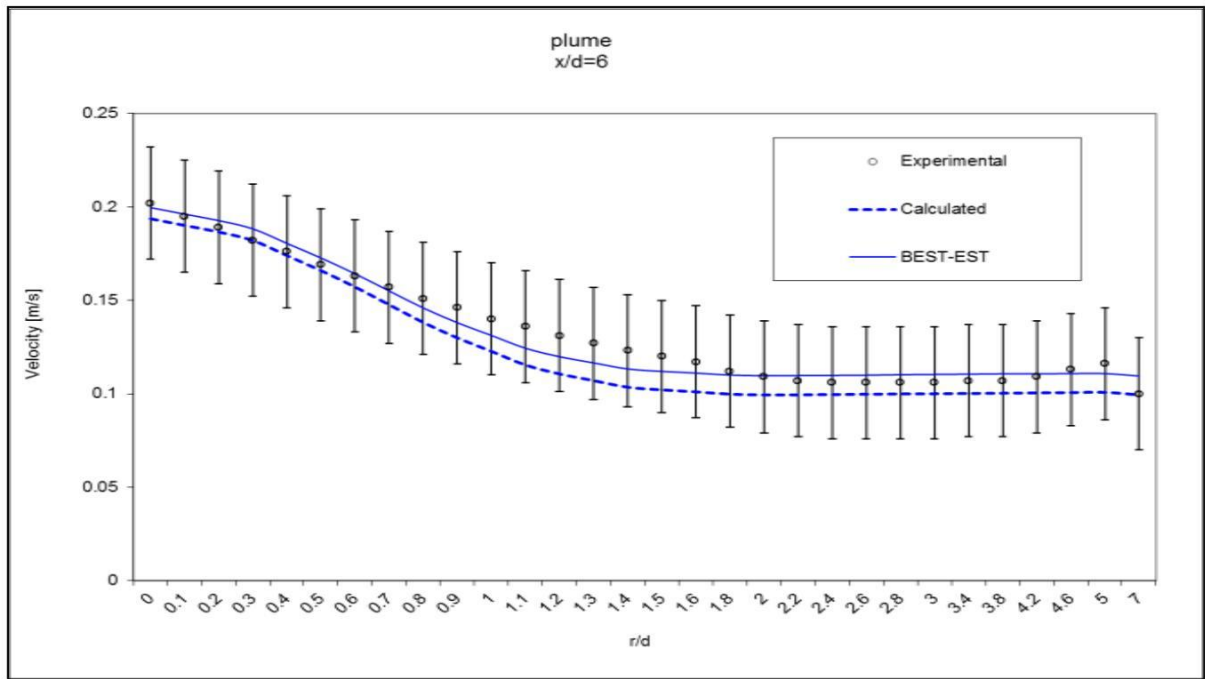


Abbildung 53: Vergleich zwischen den experimentellen Geschwindigkeitsverteilungen, den CFX sowie BESTEST Berechnungen (Bild oben) und die oberen und unteren Bänder der Unsicherheiten (Bild unten) für die CFX- und BESTEST Berechnungen für den starken Auftriebsstrahl auf der Messebene ($x/d=6$)

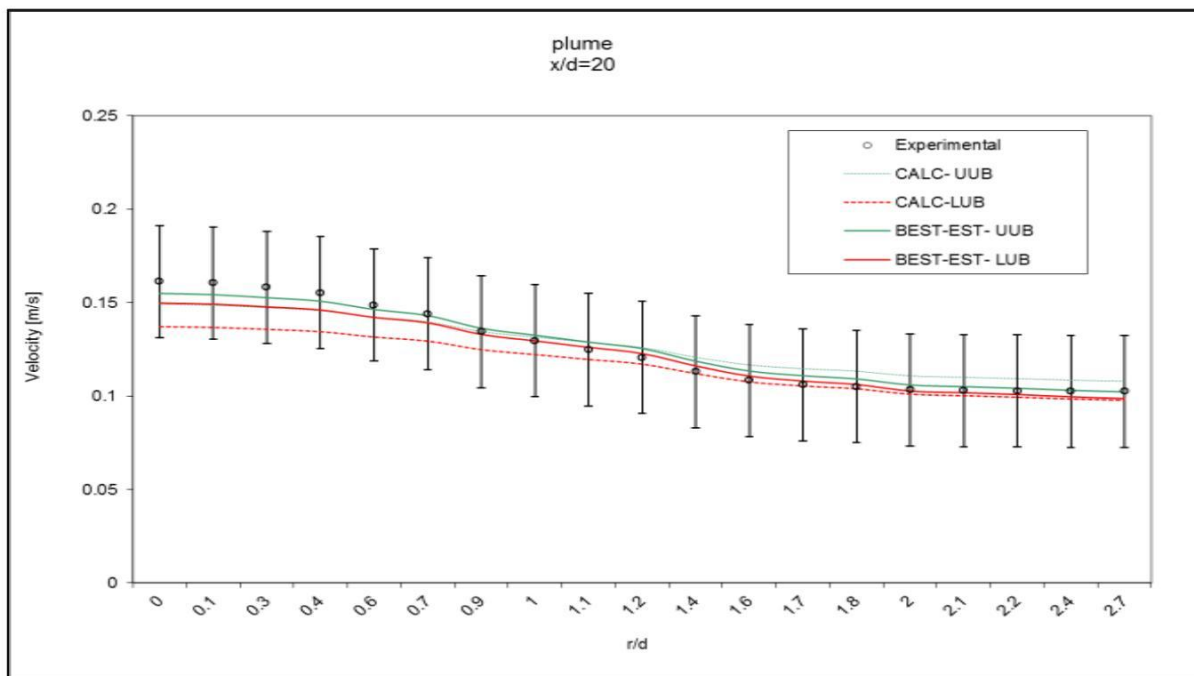
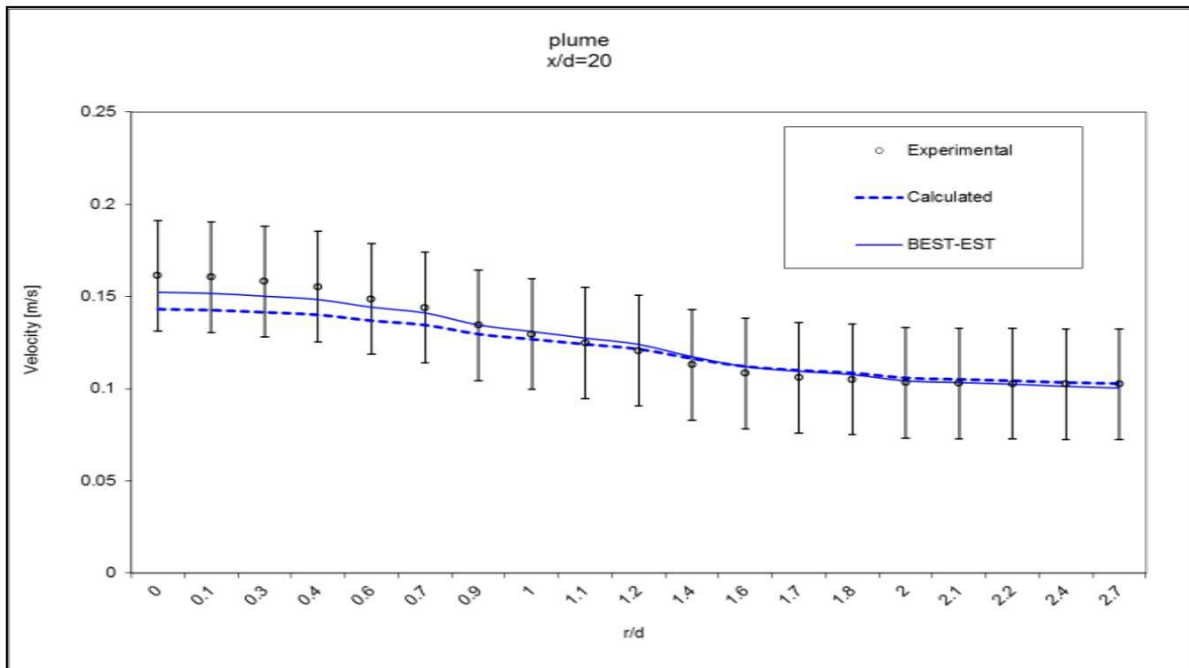


Abbildung 54: Vergleich zwischen den experimentellen Geschwindigkeitsverteilungen, den CFX sowie BESTEST Berechnungen (linkes Bild) und die oberen und unteren Bänder der Unsicherheiten (Bild unten) für die CFX- und BESTEST Berechnungen für den starken Auftriebsstrahl auf der Messebene ($x/d=20$)

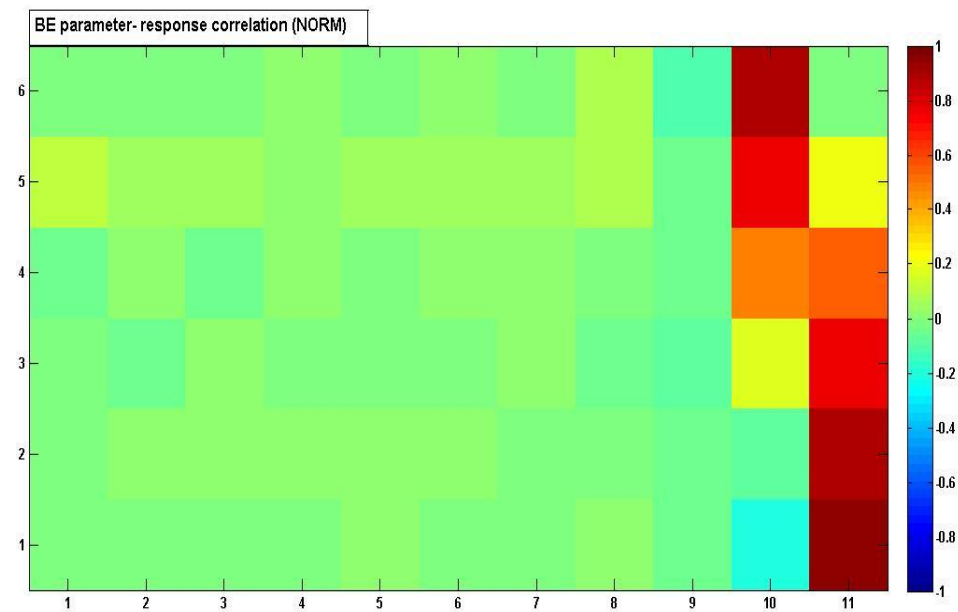
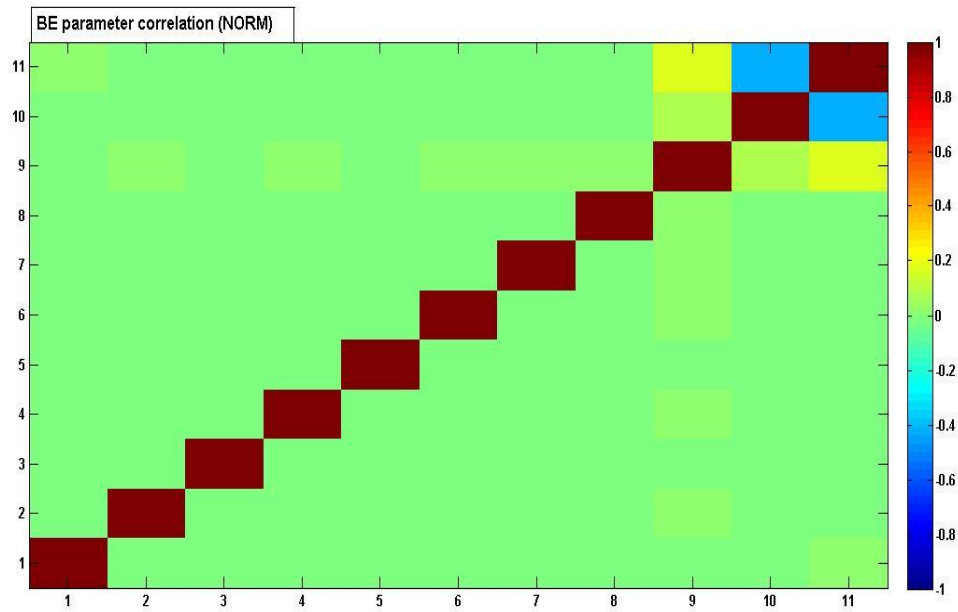


Abbildung 55: Bestmögliche Parameter Korrelation (Bild oben) und bestmögliche Parameter-Systemantwort Korrelation (Bild unten) für den starken Auftriebsstrahl der Geschwindigkeitsverteilung in axialer Richtung (x/d) in normalisierter Darstellung

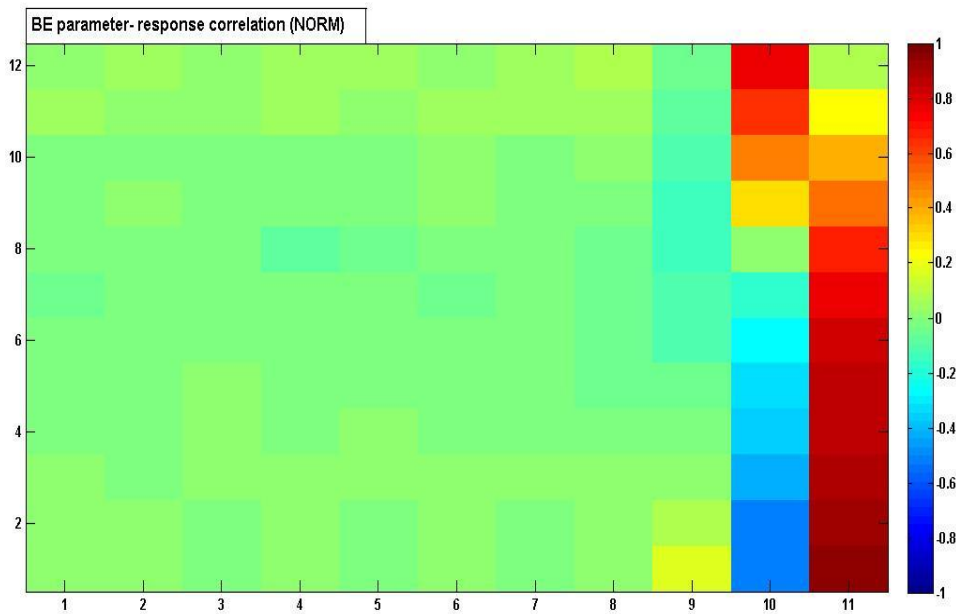
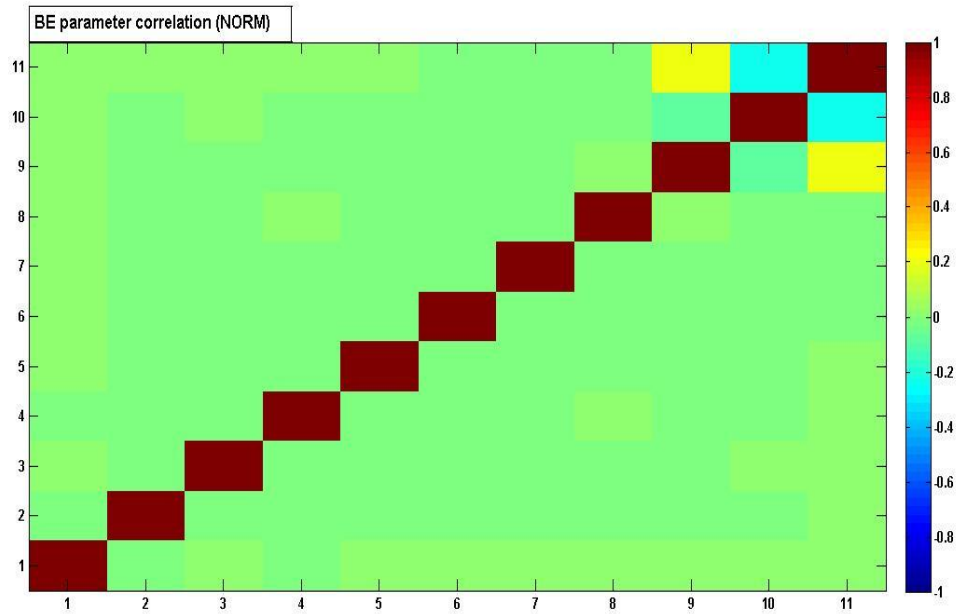


Abbildung 56: Bestmögliche Parameter Korrelation (Bild oben) und bestmögliche Parameter-Systemantwort Korrelation (Bild unten) für den starken Auftriebsstrahl der Geschwindigkeitsverteilung in radialer Richtung ($x/d=6$) in normalisierter Darstellung

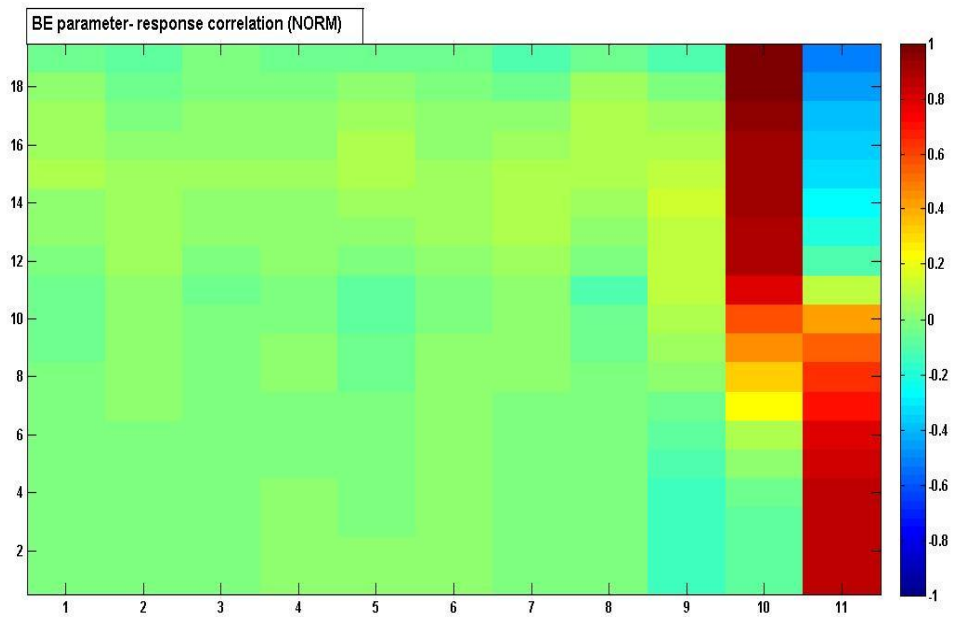
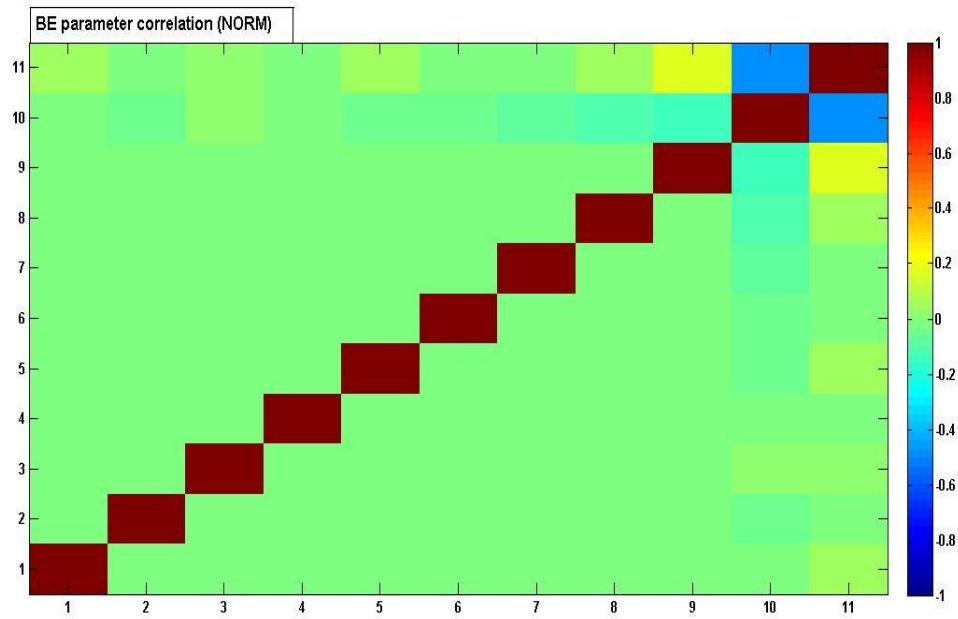


Abbildung 57: Bestmögliche Parameter Korrelation (linkes Bild) und bestmögliche Parameter-Systemantwort Korrelation (rechtes Bild) für den starken Auftriebsstrahl der Geschwindigkeitsverteilung in radialer Richtung ($x/d=20$) in normalisierter Darstellung

3.3 Datenanpassung und Modellkalibrierung des Thermohydraulischen Codes ANSYS CFX durch die experimentellen Daten aus der TEGENA Testreihe

In Bezug auf die schnellen Brutreaktoren, wie dem SFR (Sodium cooled Fast Reactor), und der Reaktorsicherheit sind bestimmte Auslegungskriterien und Parameter mit besonderer Aufmerksamkeit zu wählen. Mit Rücksicht auf die Festigkeitsanalyse darf z.B. die Natriumaustrittstemperatur die maximal zulässige Hülltemperatur nicht überschreiten. Diese kann über die Eintrittstemperatur des Kühlmittels und der Wärmeleistung reguliert werden. Eine geringe Eintrittstemperatur bedeutet eine höhere Aufheizspanne und gleichzeitig einen geringeren Druckabfall, der sich wiederum positiv auf die Pumpleistung und somit auf den Aspekt der Betriebskosten auswirkt. Allerdings bedeutet dies auch in der Gesamtbetrachtung einen geringeren thermischen Wirkungsgrad. Weiterhin können geringere Eintrittstemperaturen zu lokalen Thermoschocks führen, welche mit extremen mechanischen Spannungen der verwendeten Materialien verbunden sind, die wiederum zu einer Verfestigung und letztendlich zu einer Blockade führen. Das Gegenteil hiervon sind die so genannten Heißkanäle. Dabei übersteigt die Kühlmitteltemperatur ungewollt ihren Siedepunkt und bildet Natriumdampfblasen. Die Verdrängungen des Kühlmittels und die damit verbundene Veränderung der Reaktivität erfordert, in Bezug auf die Reaktorauslegung und den Betrieb, die Handhabung und Vermeidung beider Extremfälle. Die Verwendung von neuen allgemeinen dreidimensionalen Programmen für Kühlmittelberechnungen von Flüssigmetallen kann hierfür eine Möglichkeit sein, die sich jedoch erst einmal bewähren muss. Die Nutzung von derartigen Berechnungsprogrammen muss weiterhin für stets veränderbare Geometrie- und Auslegungskriterien zufriedenstellende Resultate liefern können. Zur Validierung dieser Codes bedarf es an experimentellen Durchführungen mit detaillierten Messaufzeichnungen. Eines dieser Experimente ist das TEGENA (Temperatur- Geschwindigkeit- Natrium) Experiment, aus dem Karlsruher Institut für Technologie Campus Nord (KIT)

Hierbei handelt es sich um ein Bündelelement mit vier Heizstäben, welches mit verschiedenen Auslegungsparametern analysiert wird [[Moeller R., 1989](#)]. Die Versuchsreihen sind in die TEGENA1 und TEGENA2 aufgeteilt, die sich untereinander durch ihre Randbedingungen, Instrumentierungen und Messbereiche unterscheiden.

In diesem Abschnitt von Kapitel 3.3 werden die Berechnungen mit ANSYS CFX vorgestellt und den Messaufzeichnungen der jeweiligen Testreihen gegenübergestellt. Die Untersuchung mehrerer Modellparameter, Initial- und Randbedingungen werden dabei auf den Grad ihrer Sensitivität untersucht. Die Mehrzahl dieser verwendeten Größen bezieht sich auf experimentelle oder empirische Werte, die mit Unsicherheiten für eine Natriumuntersuchung behaftet sind. Somit bleibt in Kapitel 3.3 die Intention für die durchzuführenden CFD-Simulationen die Bestimmung der bestmöglichen Einschätzungen der Modellparameter für eine Gewährleistung der Kalibrierung zur bestmöglichen Einschätzung der Systemantworten für die Temperaturverteilungen im Vierstabbündel unter der Verwendung der mathematischen Methode Verwendung nach [[Cacuci und Ionescu-Bujor, 2010b](#)].

3.3.1 Die Beschreibung der TEGENA (Temperatur- Geschwindigkeit- Natrium) Teststrecke

Die TEGENA Anlage (Abbildung 58) besteht aus einem rechteckigen Kanal mit einer Gesamtlänge von $L = 2485 \text{ mm}$. Dabei ist die Teststrecke in einen Vorlauf-, Einlauf- und einen Heizbereich eingeteilt. Die Gesamtlänge des Vorlaufbereichs beträgt $l_{\text{vor}} = 1288 \text{ mm}$ und die des Einlaufs $l_{\text{ein}} = 2000 \text{ mm}$. Dabei sind beide Bereiche unbeheizt. Die eingesetzten Brennstäbe haben einen Durchmesser von $D = 25 \text{ mm}$. Eine Fixierung der Heizstäbe erfolgt durch einfache Abstandshalter in Form von Stiften. Diese sind an den Umfängen befestigt und sorgen dafür, dass ein radialer Abstand von $r = 3.7 \text{ mm}$ eingehalten wird. Die auf der Staboberfläche maximal erzeugbare Wärmestromdichte beträgt $q_{\text{max}} = 60 \text{ W/cm}^2$ bei einer maximal erzeugbaren elektrischen Leistung des Bündels von 475 KW . Die Natriumtemperaturen variieren dabei zwischen $250 \text{ }^\circ\text{C}$ bis $400 \text{ }^\circ\text{C}$ und erfahren eine Aufheizung von bis zu 100 K . Die mittleren Strömungsgeschwindigkeiten reichen dabei von 0.1 m/s bis 2.4 m/s . Diese ergeben dadurch Reynoldszahlen von $Re = 3700 \div 76000$. Die Aufzeichnungen der TEGENA1 und TEGENA2 Daten sind an den Messebenen ME6 und MP6 ermittelt worden. Diese befinden sich im ersten Fall $l_1 = 29 \text{ mm}$ und für den zweiten Fall $l_2 = 31.5 \text{ mm}$ vor dem Ende der Teststrecke. Durch die Aufteilung der gesamten Heizstrecke in fünf Messebenen kann gezeigt werden, ob bis zur letzten Messebene es noch zu starken thermischen Variationen kommt oder nicht. Dies wird nach [[Möller R., 1989](#)] als thermisches Einlaufen bzw.

nicht Einlaufen bezeichnet. Die detaillierten Ermittlungen der Temperaturen erfolgen mit zwei Messsonden.

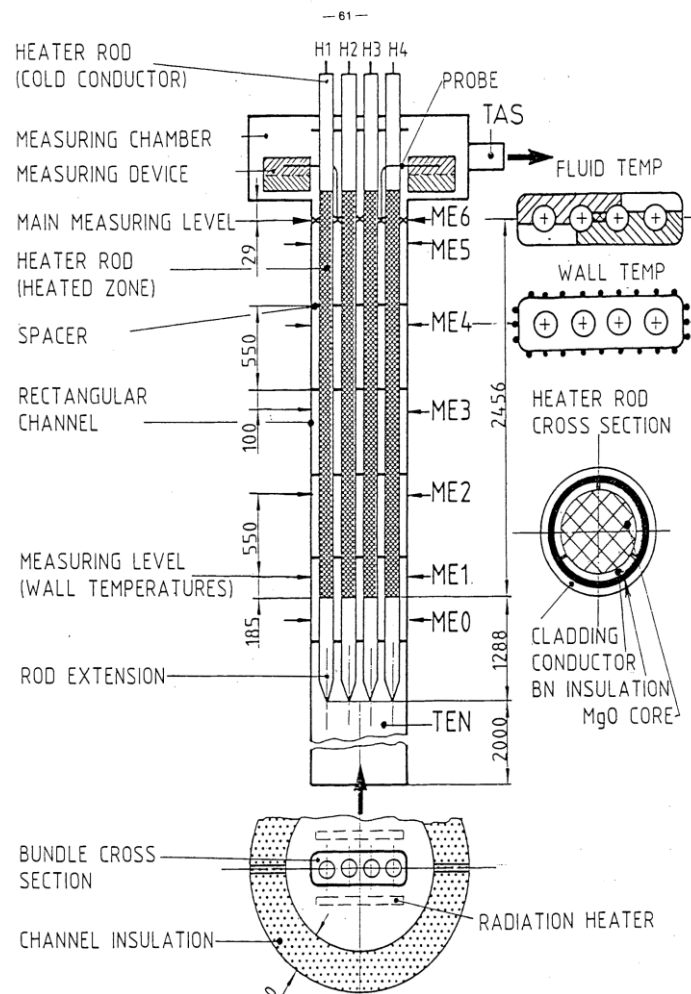


Abbildung 58: TEGENA Teststrecke (Quelle: Möller Experiment)

3.3.1.1 Methoden zur Messung der detaillierten Temperaturverteilung

Vorab sei hier erwähnt, dass sich die Analysen in dieser Arbeit, der detaillierten Temperaturverteilungen, lediglich auf die Fluidmessungen beziehen. Die Wandtemperaturen werden nicht ermittelt. Die Erfassung der Temperaturverteilungen für die TEGENA 1 und TEGENA 2 Testreihe erfolgt über zwei Messsonden (Abbildung 60). Diese beiden unterscheiden sich sowohl in ihrer Positionierung, der Geometrie und ihrer Anzahl von Thermoelementen. Der Durchmesser der Thermoelemente aus der Sonde 1 ist für die TEGENA 1 Testreihe um 0.14 mm kleiner als die der Sonde 2. Die Abstände der Thermoelemente zueinander, in der

Sonde 1, sind um 0.13 mm länger als in der Sonde 2. Insgesamt werden für die TEGENA 1 Testreihe acht Thermoelemente (4 für jede Sonde) verwendet. Die Bezeichnungen und charakteristischen Daten können aus Tabelle 14 entnommen werden. Die Anzahl der Thermoelemente in den Sonden 1 und 2 gewährleisten, dass möglichst nahe Temperaturmessungen und Erfassungen der Temperaturgradienten durchgeführt werden können.

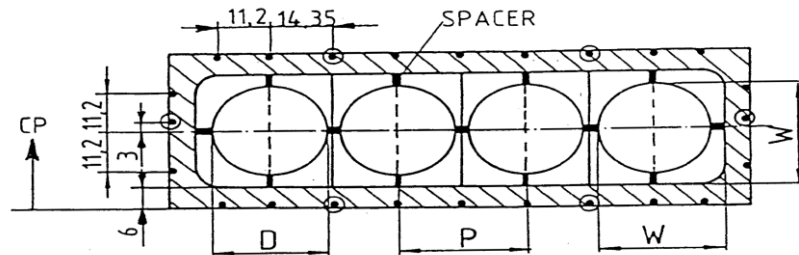


Abbildung 59: Querschnitt der TEGENA Teststrecke (Quelle: R. Möller, 1989)

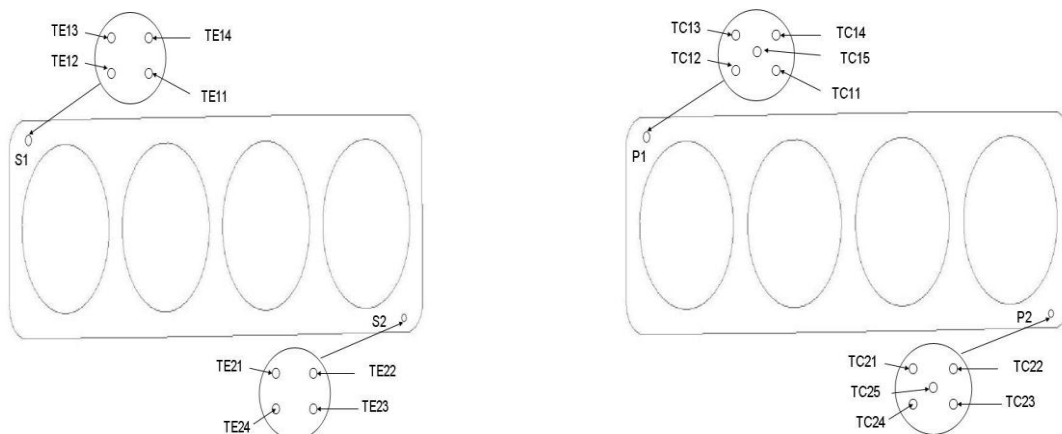


Abbildung 60: Sonden 1 und 2 (linkes Bild) der TEGENA 1 Teststrecke sowie Sonden P1 und P2 (rechtes Bild) der TEGENA 2 Teststrecke

Die Sonden der TEGENA 2 Testreihe ist mit P1 für die Sonde 1, und P2 für die Sonde 2 gekennzeichnet. Der Durchmesser der Thermoelemente aus P1 ist einheitlich und um 0.02 mm kleiner als die der Sonde 2. Durch ein zusätzlich implementiertes Thermoelement, das mittig platziert ist, beträgt der Abstand der vier außen liegenden 2.05 mm zueinander. Das mittlere Element ist dabei um 8.1 mm von den jeweiligen äußeren entfernt und hat die Aufgabe, in Kombination mit einem der Äußeren, die Laufzeitmessungen zu erfassen [Möller R., 1989]. Die Thermoelemente der Sonde P2 sind ähnlich aufgebaut wie die der P1, allerdings

beträgt deren Durchmesser 0.37 mm und der Abstand der äußeren Thermoelemente 2.65 mm zueinander. Der Abstand zum mittleren Element beträgt dabei nur noch 8 mm . Eine Isolierung der Thermoelemente, wie in TEGENA 1, ist auch für die TEGENA 2 Testreihe versehen. Für beide Testfälle sind die Sondenverschiebungen in X- Richtung auf maximal 75 mm und in Y- Richtung auf 25 mm limitiert.

Sonde 1	Thermoelement			
	1	2	3	4
Bezeichnung	TE11	TE12	TE13	TE14
Durchmesser [mm]	0.24	0.24	0.24	0.24
Sonde 2	Thermoelement			
	1	2	3	4
Bezeichnung	TC21	TC22	TC23	TC24
Durchmesser [mm]	0.38	0.38	0.38	0.38

Tabelle 14: Kennzeichnung der einzelnen Thermoelemente für die Sonden der TEGENA1 und TEGENA2 Testreihe

3.3.1.1.1 Beschreibung der Testfälle

Die in dieser Arbeit verwendeten Messdaten aus den TEGENA 1 und TEGENA 2 Testreihen beschränken sich auf Aufzeichnungen der Natriumtemperaturen in den Unterkanälen. Dabei werden Temperaturprofile, welche für die Gleich- und Schieflastauslegungen erzeugt werden, durch Quer bzw. Längsverschiebungen der Sonden erfasst. Zur Vermeidung von Unklarheiten werden die Bezeichnungen der TEGENA Datenreihen und Messaufzeichnungen in dieser Arbeit übernommen.

3.3.1.1.1.1 Beschreibung der experimentellen Gleichlastfälle

Eine überwiegende Durchführung der Gleichlastfälle (Verwendung aller vier Heizstäbe) wird durch die TEGENA 2 Testreihe gewährleistet. Die TEGENA1 Messung besteht vorwiegend aus Schieflastversuchen (Verwendung lediglich ausgewählter Heizstäbe). Für die TEGENA 1 und 2 durchgeführten Gleichlastfälle haben eine mittlere Geschwindigkeit von 1.9 m/s und einen mittleren Durchsatz von

3.12 kg/s. Die Aufheizung der Brennstäbe erfolgt mit einer nahezu identischen Wärmestromdichte. Die Randbedingungen der durchgeführten Berechnungen sind für die TEGENA1 Testreihe in Tabelle 15 und die für die TEGENA2 in Tabelle 16 aufgelistet.

Datenreihe	TBI/ TEN °C	\bar{w}_{in} m/s	Re	\dot{m} [kg/s]	QH_1 [$\frac{W}{cm^2}$]	QH_2 [$\frac{W}{cm^2}$]	QH_3 [$\frac{W}{cm^2}$]	QH_4 [$\frac{W}{cm^2}$]
F04Q12B	257.98	1.91	60100	3.12	49.38	49	48.42	49.74
F06LWSA	256.55	1.96	61300	3.19	51.01	50.59	50.02	51.37
F06LWSB	256.41	1.95	61000	3.17	50.48	50.06	49.49	50.84
F31Q12B	296.54	0.97	30300	1.59	0	0	0	7.79
F37QWSA	296.19	0.99	30100	1.58	0	0	0	7.58
F35QW4A	296.68	0.97	30300	1.59	0	0	0	7.78
F30LWSB	296.71	0.96	30000	1.57	0	0	0	7.39
F32LW4A	296.32	0.98	30400	1.59	0	0	0	7.86
F38LW4A	296.39	0.97	30200	1.58	0	0	0	7.63

Tabelle 15: Randbedingungen der TEGENA 1 Testfälle

Die Abbildung 62 stellt eine Analyse der TEGENA1 Testreihe in negativer Richtung zwischen Brennstab drei und Brennstab vier dar, bei der alle vier Brennstäbe beheizt werden. Das Temperaturmaximum ergibt sich für diesen Testfall im Mittelpunkt der beiden Brennstäbe. Gleichzeitig bildet diese Position den engsten Kühlmittelquerschnitt. Die Temperaturminima treten, wie in Abbildung 62 zu sehen ist, im oberen und unteren Unterkanal auf. Die Aufzeichnungen in positiver und negativer x- Richtung, der TEGENA1 Testreihe, sind in den Abbildungen 63 und 64 dargestellt. In der ersteren beginnt die Messaufzeichnung im Unterkanal vor dem vierten Brennstab und endet im Unterkanal nach dem zweiten Brennstab. Für die Abbildung 65 liegt genau das Gegenteil vor. Evident ist aus beiden Darstellungen, dass trotz gleicher Messinstrumentierung und Messstrecke, Abweichungen in den Temperaturprofilen vorhanden sind. Die Ursache hierfür liegt in den Randbedingungen der Wärmestromdichten für die jeweiligen Brennstäbe, die in Tabelle 15 aufgelistet sind. Dadurch wird der Unterschied und die Differenz zwischen den Messungen plausibel. Auffällig für die Temperaturprofile aus den Abbildungen 63 und 64 ist, dass ein Anstieg in positiver x- Richtung zu verzeichnen ist. Wird die Wärmestromdichte zwischen Brennstab drei und vier verglichen, kann festgestellt werden, dass eine vier prozentige Leistungsverringerung vom Brennstab drei zu vier vorhanden ist. Allerdings wird diese Leistungserhöhung durch den größeren und unbeheizten Durchflussbereich zwischen Brennstab vier und Kanalwand kompensiert (Abbildung 59) und kann somit nicht die Ursache dieses Temperaturprofils sein.

Datenreihe	T_{in} [°C]	\bar{w}_{in} m/s	Re	ΔT [°C]	QH_1 [$\frac{W}{cm^2}$]	QH_2 [$\frac{W}{cm^2}$]	QH_3 [$\frac{W}{cm^2}$]	QH_4 [$\frac{W}{cm^2}$]
M332	304.7	1.94	66569	96.6	50.8	50.7	50.4	50.7
M336	311.7	1.97	68143	97.1	51.5	51.4	51.1	51.4
M104	294.9	0.49	16322	80.4	10.8	10.7	10.7	10.7
M080	293.3	0.48	15958	81.8	10.8	10.7	10.7	10.7
M094	296.0	0.98	32438	78.2	20.8	20.7	20.8	20.8
M198	317.2	0.99	33442	58.9	21.08	0	20.88	20.99
M190	333.0	0.97	33266	40.7	21.31	0	0	21.22
M169	333.2	0.96	32974	41.7	0	21.65	21.53	0

Tabelle 16: Randbedingungen der TEGENA 2 Testfälle

Die ausgewählten Messaufzeichnungen der TEGENA 2 Gleichlastuntersuchungen sind in den Abbildungen 71 bis 75 dargestellt. Charakteristisch der experimentellen Daten für die Abbildungen 71 und 72 ist, dass diese durch enorm hohe Reynoldszahlen und hohe Wärmestromdichten gekennzeichnet sind. Dabei zeigt die erste Darstellung eine ähnliche Messung wie die aus Abbildung 62, bei der auch ein Temperaturmaximum im engsten Querschnitt zwischen den Brennstäben drei und vier vorzuweisen ist. Der Unterschied zu Abbildung 62 liegt in der Messinstrumentierung und den Randbedingungen. Eine weitere Analyse der TEGENA 2 Gleichlastuntersuchung, in negativer y- Richtung, ist in Abbildung 72 dargestellt. Die Messaufzeichnung in negativer x- Richtung ist in Abbildung 73 und in positiver Richtung in den Abbildungen 74 und 75 dargestellt. Ähnlich wie die Gleichlastuntersuchung der TEGENA 1 Testreihe ist auch in der TEGENA 2 ein Temperaturanstieg in positiver x- Richtung in den Abbildungen 73 und 74 zu sehen. Abweichend zu den Ergebnissen zeigt die Abbildung 75 ein Temperaturgefälle, welches nun im Widerspruch zu den vorherigen Messdaten liegt.

3.3.1.1.2 Beschreibung der experimentellen Schiefastversuche

Die Analyse der Schiefastversuche aus der TEGENA 1 Testreihe (Abbildungen 65 bis 70) beschränkt sich in dieser Arbeit allein auf die Beheizung von Brennstab vier mit einer Wärmeleistung von ungefähr $7.7 W/cm^2$. Die Messungen befinden sich dabei zwischen Brennstab drei und vier (Abbildung 65), sowie Brennstab vier und äußerer Kanalwand (Abbildung 66 und 67) in positiver und negativer y- Richtung. Die Messaufzeichnungen in x- Richtung beschreiben dabei die Verteilungen der Temperaturen vom Unterkanal des Brennstabs zwei bis Brennstab vier (Abbildung

68), des Weiteren zwischen Brennstab drei und vier sowie Brennstab vier (Abbildung 69) und Kanalauswand (Abbildung 70). Die Schiefplastversuche der TEGENA2 Reihe (Abbildungen 76 bis 78) sind dadurch gekennzeichnet, dass mindestens zwei Brennstäbe beheizt werden, allerdings variieren diese untereinander. Alle Versuchsreihen der TEGENA2 Schiefplastuntersuchungen werden dabei in positiver und negativer x- Richtung analysiert. Das Ziel aller Schiefplastversuche ist dabei festzustellen, ob ein thermisches Einlaufen bis zu den Messebenen ME6 und MP6 nachzuweisen ist oder nicht.

3.3.2 Bestmögliche Modellkalibrierung durch die Verwendung des Rechencodes ANSYS CFX und der Datenassimilierung durch die experimentellen Auswertungen aus der TEGENA Testreihe

Die Analyse der Temperaturverteilungen aus den Datenreihen der TEGENA Testreihe bilden die bereits erwähnten Testfälle für die Gleich- und Schiefplastversuche. In diesem Abschnitt dieser Arbeit werden, unter der Verwendung der ausgewählten experimentellen Daten der TEGENA Testreihe, die mathematische Methode nach [[Cacuci und Ionescu-Bujor, 2010b](#)] für eine Datenanpassung und Kalibrierung der wichtigsten Modellparameter des CFX Codes verwendet. Das Prinzip der Durchführung ist in Abbildung 101 (im Anhang dieser Arbeit) durch ein Flussdiagramm dargestellt.

3.3.2.1 Die Simulation der TEGENA Teststrecke mit ANSYS CFX

Für die TEGENA Untersuchungen werden zwei Rechenmodelle erstellt, die in ihren geometrischen Abmessungen identisch sind, sich jedoch in ihrer Vernetzungsart unterscheiden. Das erste Modell besteht aus einem Mischgitter mit überwiegend Tetraeder -Elementen. Dieses Modell wird mit dem Programm CFX MESHER erstellt. Das zweite Rechenmodell besteht aus einem reinen hexagonalen Gitter, wobei die Erzeugung des zweiten Modells durch die Software ANSYS ICEM realisiert wird. Beide Modelle werden für die TEGENA 1 und 2 Testreihen der Gleich- und Schiefplastversuche verwendet und gegenübergestellt. Die jeweiligen Randbedingungen entsprechen denen der ausgesuchten Testfälle und werden aus den Tabellen 15 und 16 entnommen. Die Berechnungen der jeweiligen Testreihen werden durch die Implementierung der Natrium- Stoffdaten aus dem MAPLIB Programm gewährleistet. Für alle Analysen wird das Wärmeübertragungsmodell, das

$k-\varepsilon$ Turbulenzmodell, die „USER – Defined“ Funktionen sowie die MAPLIB Stoffdaten verwendet.

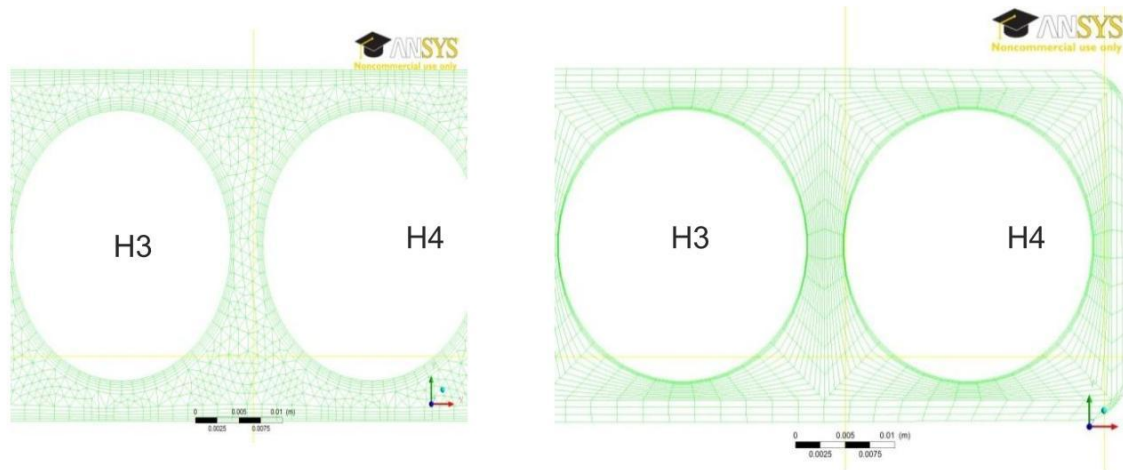


Abbildung 61: Rechengitter für TEGENA Validierung. Links das tetragonale und rechts das hexagonale Gitter.

3.3.2.1.1 Die TEGENA 1 CFX- Berechnungen

Beginnend mit der TEGENA 1 Reihe für die Gleichlastversuche zeigen beide Modelle in Abbildung 62 einen Temperaturanstieg im engsten Querschnittsbereich zwischen Brennstab drei und vier, wobei die Berechnung durch das tetragonale Gitter weitaus dem des hexagonalen unterlegen sind. Zwischen den beiden Rechenmodellen können keine Identitäten aufgezeigt werden. Das hexagonale Modell kann über den ersten Messabschnitt sogar eine Übereinstimmung mit den experimentellen Daten vorweisen. Dies ändert sich jedoch in der Kanalmitte und führt zu starken Überbewertungen. Die Verwendung des tetragonalen Gitters unterliegt über den gesamten Betrachtungsbereich und stellt kein zufriedenstellendes Ergebnis dar. Die Temperaturverteilung zwischen den Brennstäben und der unbeheizten Außenwand, d.h. entlang der Unterkanäle, sind in den Abbildungen 63, 64 und 68 dargestellt, wobei die letzte Darstellung eine Schiefelastanalyse ist. In den Abbildungen 63 und 64 wird deutlich, dass beide Rechenmodelle ein Maxima und Minima an den zu erwartenden Stellen aufweisen. Diese sind beim hexagonalen Gitter ausgeprägter, wobei teilweise eine zu starke Prägung vorzufinden ist. Für das tetragonale Gitter liegt genau das Gegenteil vor. Hier werden die Maxima der Messaufzeichnungen deutlich besser beschrieben, allerdings die Minima kaum erreicht.

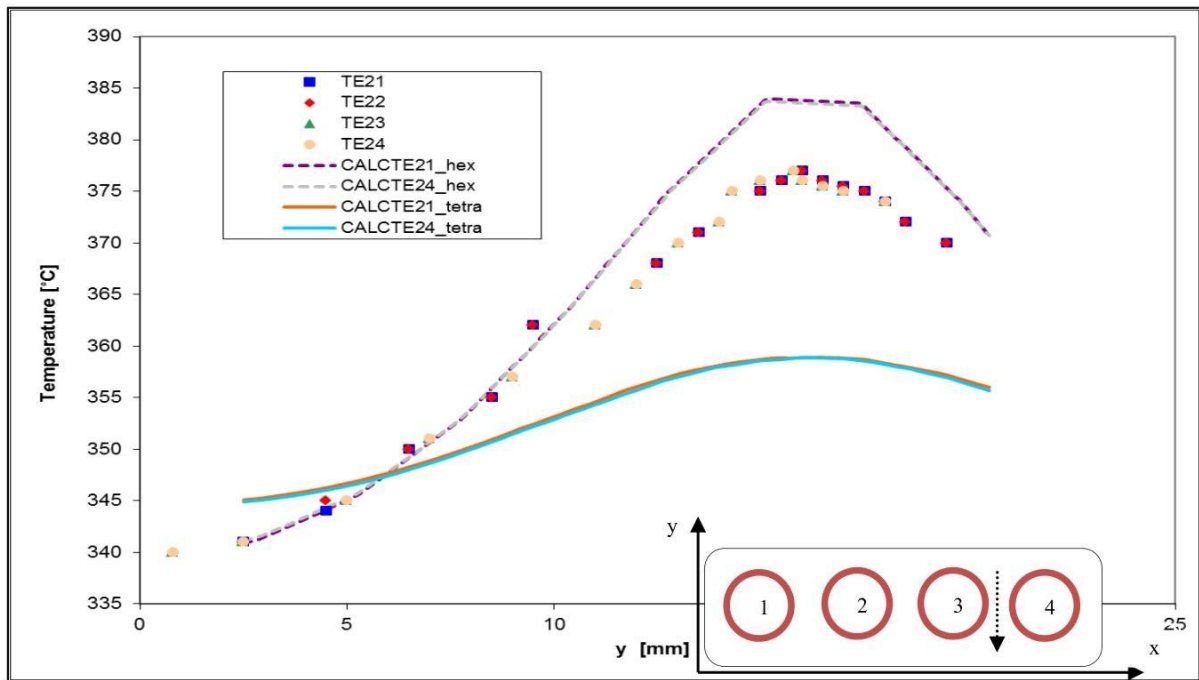


Abbildung 62: Darstellung der Messaufzeichnungen der Datenreihe F04Q12B.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 1 Gleichlastversuch

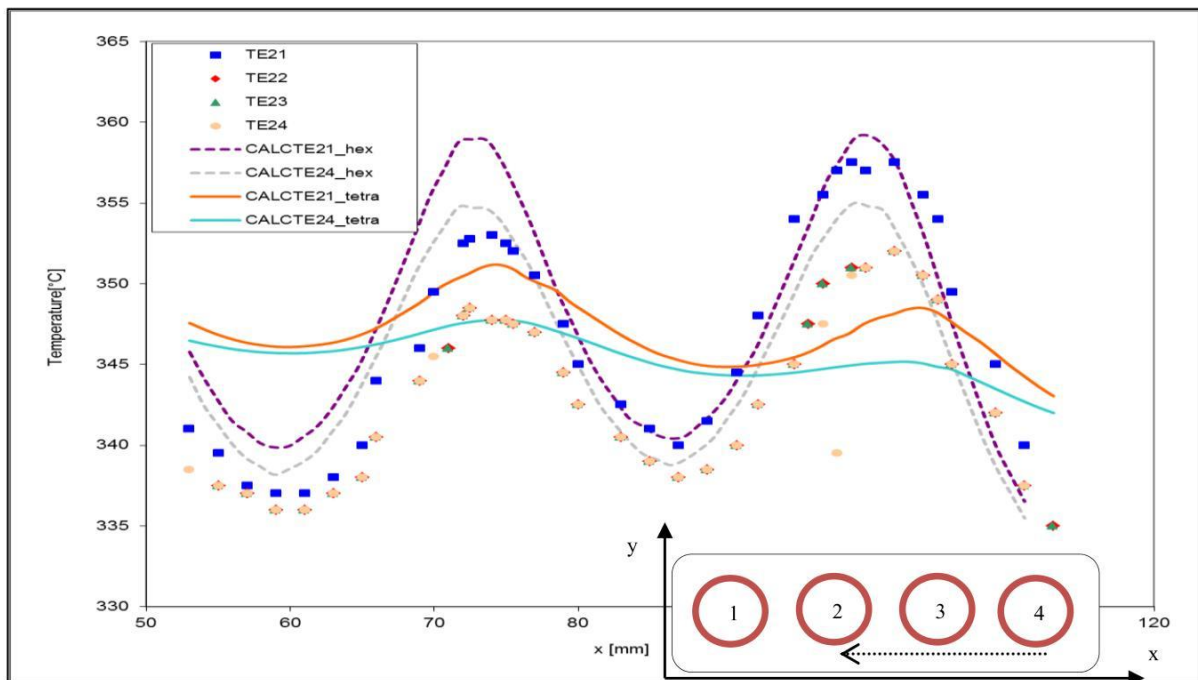


Abbildung 63: Darstellung der Messaufzeichnungen der Datenreihe F06LWSA.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 1 Gleichlastversuch

Für beide Analyseauslegungen, d.h. in positiver und negativer x - Richtung, ist ersichtlich, dass das Tetragitter in Richtung Außenwand einer deutlichen Temperaturverminderung unterliegt. Für das hexagonale Gitter ist in beiden Abbildungen (63, 64) das nur minimal zu erkennen, wobei die experimentellen Werte, sowohl in positiver als auch negativer x - Richtung, genau das Gegenteil von beiden darstellen. Diese Feststellung ist bereits in Kapitel 3.3.1.1.1 angesprochen worden und soll hier nun erklärt werden. Ausgehend (Abbildung 59) aus der Raumaufteilung für die Unterkanäle zwischen Brennstab vier und Außenwand sowie Brennstab zwei und drei und Brennstab drei und vier oder zwischen P/D und W/D ist zu vermerken, dass das Kühlmittel im Unterkanalbereich W/D eine deutlich geringere Wärmezufuhr hat als die Unterkanäle im Bereich P/D . Anhand der CFX Berechnung kann somit die Überlegung bestätigt werden, dass bei einer Kühlfläche um Heizstab vier ein geringeres Temperaturmaxima vorhanden sein muss als zwischen Brennstab drei und vier. Die Fläche zwischen Brennstab vier und Kanalauswand beträgt 22% der gesamten Durchflussfläche und ist somit doppelt so groß ist wie die zwischen Brennstab drei und vier.

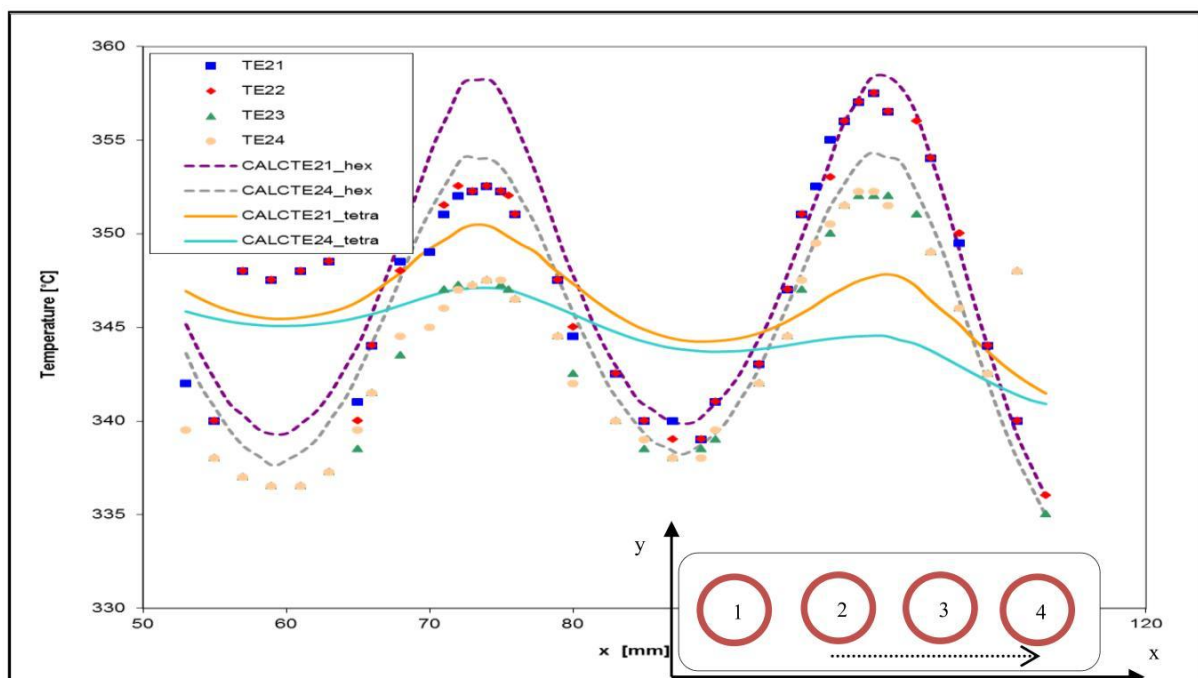


Abbildung 64: Darstellung der Messaufzeichnungen der Datenreihe F06LWSB.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 1 Gleichlastversuch

Der unerwartete Temperaturverlauf der experimentellen Auswertungen beruht auf der Ursache, dass während der Versuchsdurchführungen die Heizstäbe eine

mögliche Verschiebung erfahren haben. Dies wird auch im TEGENA Bericht erwähnt [[Möller R., 1989](#)].

Die Durchführung der TEGENA 1 Schiefplastversuche erfolgen ausschließlich entlang des Brennstabs vier, bei Reynoldszahlen im Bereich von $Re \approx 30 \cdot 10^3$. Die Brennstäbe eins, zwei, drei bleiben somit unbeheizt. Die Berechnungen mit den tetragonalen Gitter, in x- und y- Richtungen, können in den Abbildungen 65, 66, 68 und 69 deutliche Vorteile gegenüber dem hexagonalen aufweisen. Die Differenzen zwischen den Messaufzeichnungen durch die Thermoelemente der TEGENA1 Testreihe und dem tetragonalen Gitter, sind oftmals minimal. Für diese vier erwähnten Analysen, bis auf die von Abbildung 68, liegt eine Überbewertung durch das hexagonale Gitter vor. In dieser Berechnung (Abbildung 68) kann erstmals eine teilweise gute Übereinstimmung zwischen beiden Rechenmodellen gezeigt werden. Diese Gegebenheit gilt allerdings nur in den Unterkanalbereichen, in der das Kühlmittel keine Wärmezufuhr erfährt. In Nähe des beheizten Heizstabs vier beginnen die Differenzen und erhöhen sich in der Heizstabmitte. Die Untersuchungen in positiver y- Richtung, aus Abbildung 67, und negativer x- Richtung, Abbildung 70, können durch beide Gitter keine zufriedenstellende Ergebnisse vorweisen.

Die bis hier ermittelten teilweise starken Unterschiede zwischen den experimentellen und den Berechnungen beziehen sich überwiegend auf die Temperaturverteilungen in wandnahen Bereichen. Bei der Betrachtung des tetragonalen Gitters besteht dieses in den wandnahen Bereichen aus feinskalierten Prismen und geht dann im Bereich der Unterkanäle in tetragonale Elemente über. Wobei um die Brennstäbe herum die Feinskalierung durch die Prismen wieder vorzufinden ist. Im Gegenzug dazu besteht das zweite Rechengitter aus einheitlichen hexagonalen Elementen. Die Feinskalierung wird dabei durch eine Erhöhung der Elemente- Anzahl gewährleistet. Eine mögliche Ursache für diese enormen Abweichungen zwischen den Messaufzeichnungen und Berechnungen, sowie den hexagonalen und tetragonalen Ergebnissen, kann durch das $k-\varepsilon$ Turbulenzmodell hervorgerufen werden, das die Eigenschaften eines zu späten oder zu frühen Ablösens aufweist. Die Untersuchung der Parameter dieses Modells und weiterer Größen wird in Kapitel 3.3.2.2 durch die BESTEST Analyse näher erläutert.

3.3.2.1.2 Die TEGENA 2 CFX- Berechnungen

Die Temperaturverteilungen der TEGENA2 Untersuchungen zeigen für die x- und y- Richtungen gleichartige Eigenschaften auf, wie für die TEGENA 1 Testreihe. Die Abweichungen zwischen den Berechnungen in negativer y- Richtungen sind z.B. in den Abbildungen 71 und 72 dargestellt. Aus beiden Grafiken ist ersichtlich, dass die Untersuchungen, wie auch im vorherigen Kapitel beschrieben, zwischen Brennstab drei und vier durch das hexagonale Gitter stets besser beschrieben werden. Das tetragonale Gitter weist eine deutliche Unterschreitung auf. Diese ist besonders deutlich aus Abbildung 73 zu sehen, dass eine Berechnung in negativer x- Richtung darstellt.

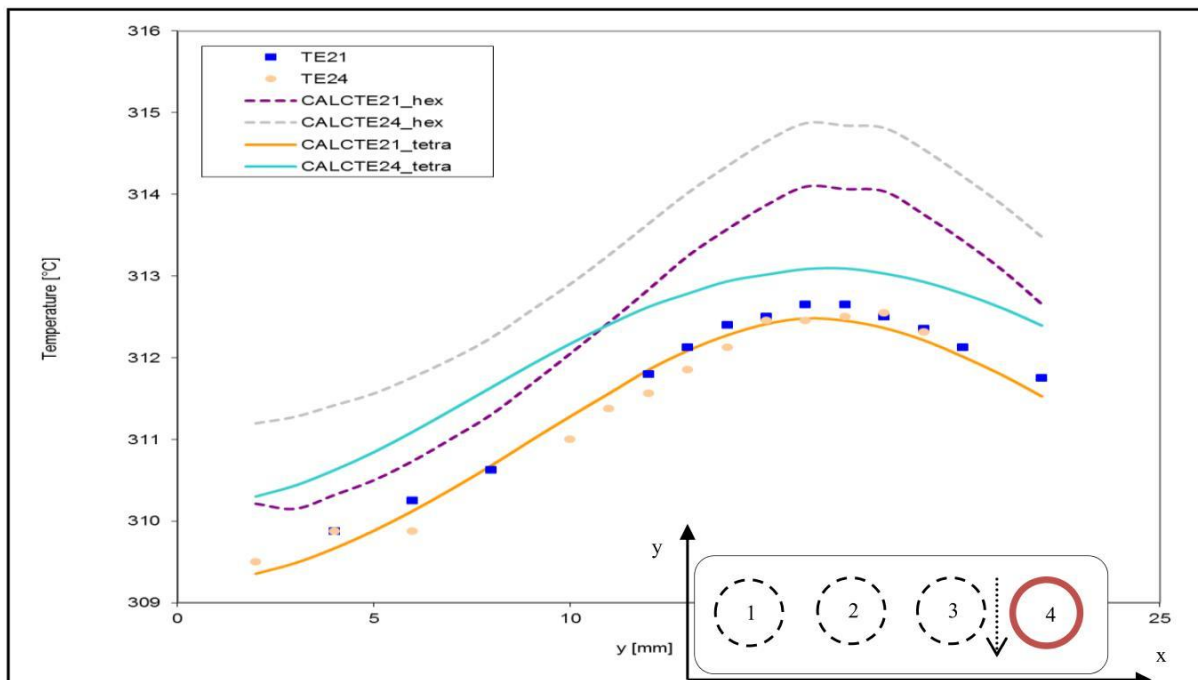


Abbildung 65: Darstellung der Messaufzeichnungen der Datenreihe F31Q12B.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 1 Schiefblastversuch

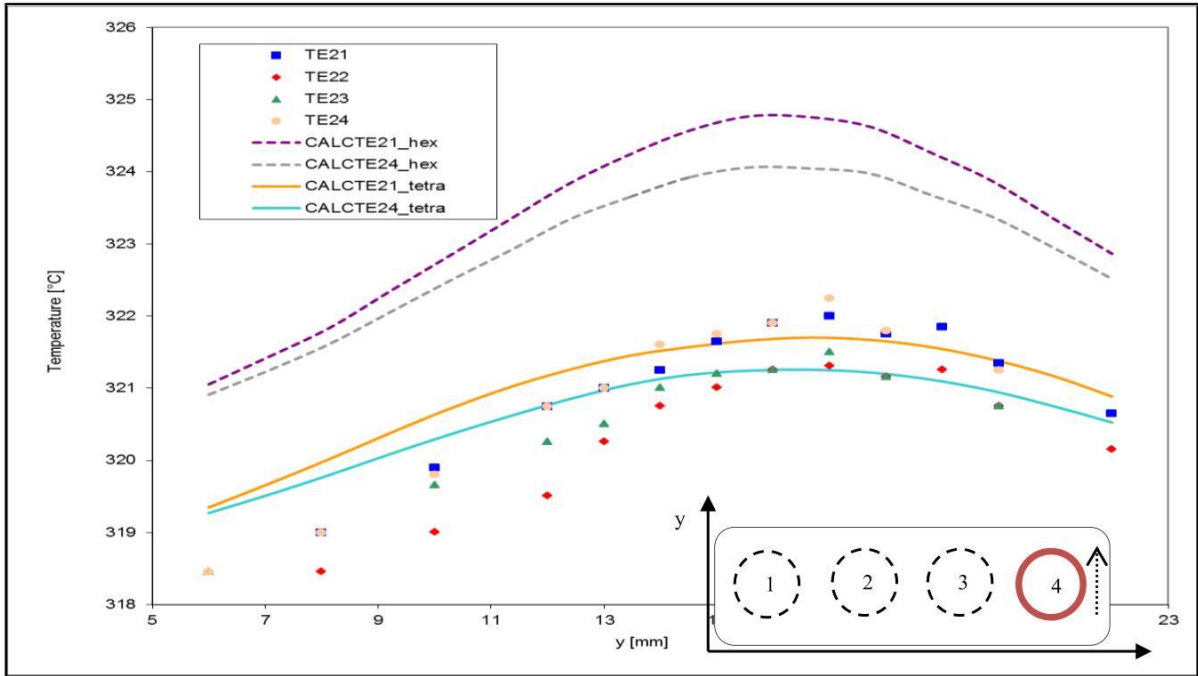


Abbildung 66: Darstellung der Messaufzeichnungen der DatenreiheF37QWSA.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 1 Schiefplastversuch

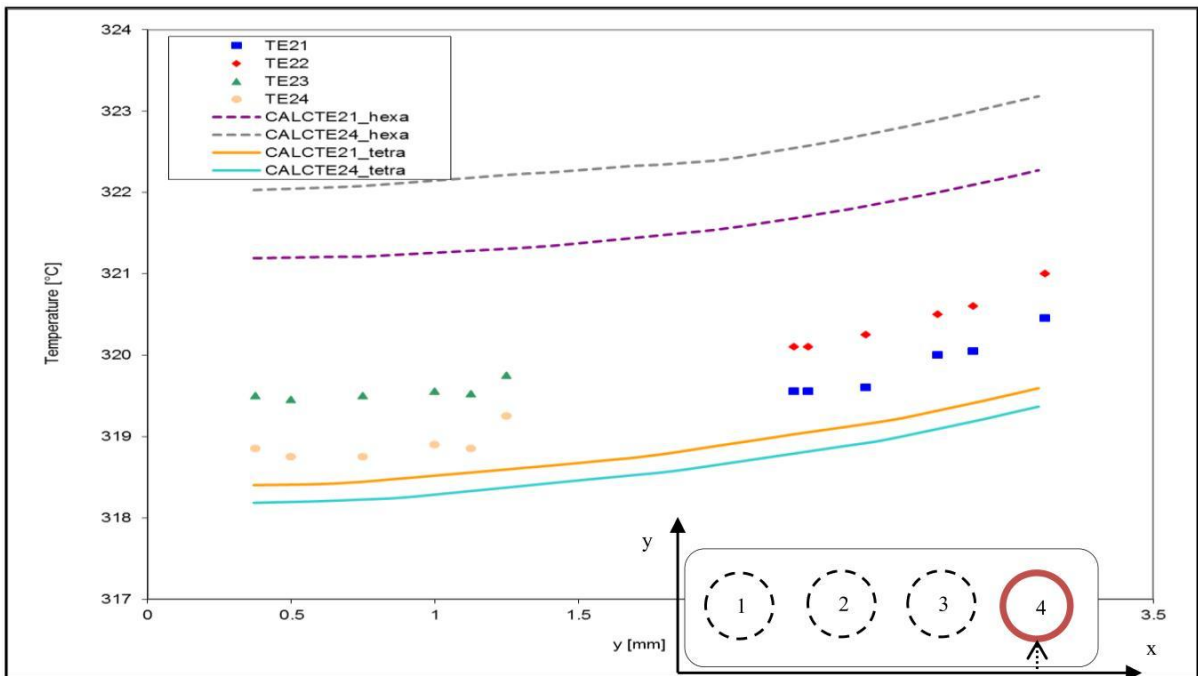


Abbildung 67: Darstellung der Messaufzeichnungen der DatenreiheF35QW4A.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 1 Schiefplastversuch

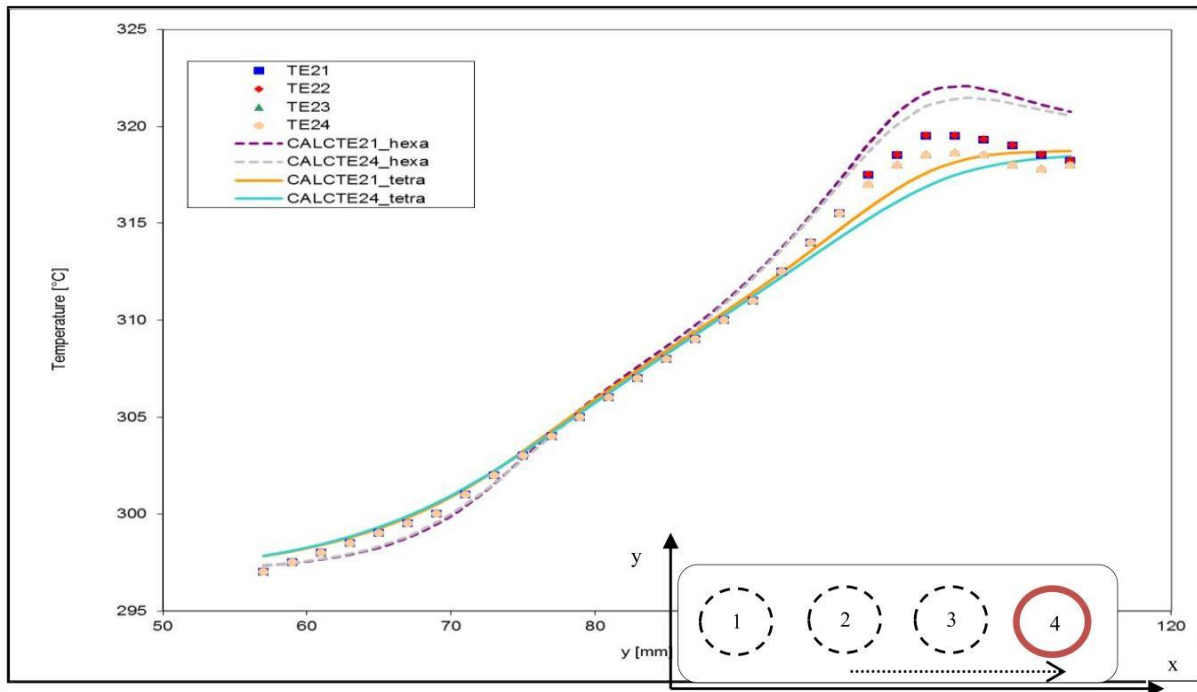


Abbildung 68: Darstellung der Messaufzeichnungen der DatenreiheF30LWSB.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 1 Schiefplastversuch

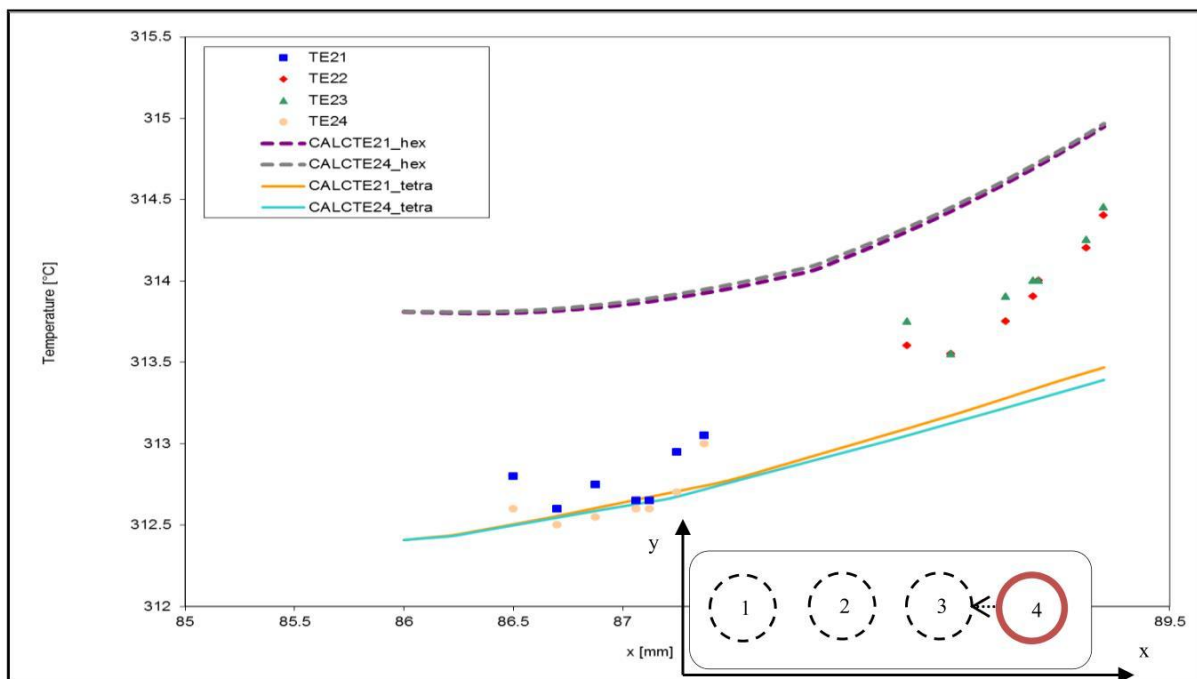


Abbildung 69: Darstellung der Messaufzeichnungen der DatenreiheF32LW43A.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 1 Schiefplastversuch

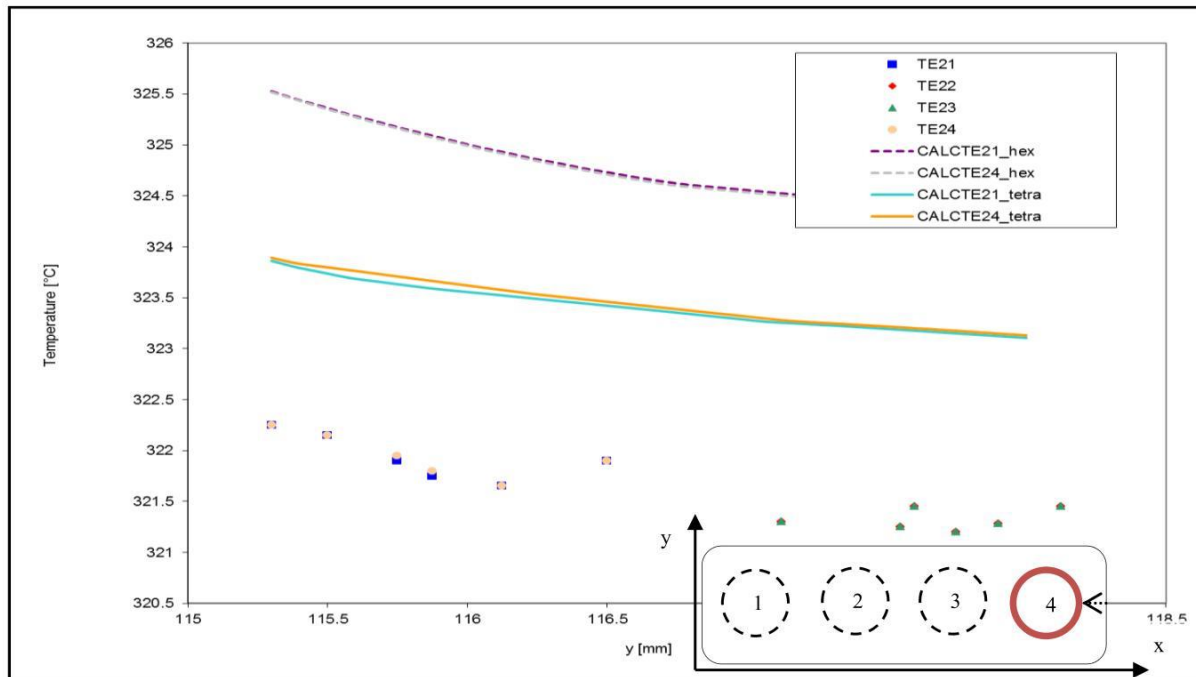


Abbildung 70: Darstellung der Messaufzeichnungen der Datenreihe F38LW4A.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 1 Schiefplastversuch

Mit Abnahme der Reynoldszahlen und der Heizleistung ändern sich für beide Modelle die Ergebnisse und Profile signifikant. So ist aus Abbildung 74 zu sehen, dass das tetragonale Gitter eine deutlich geringere Differenz zu den Messaufzeichnungen und hexagonalen Gitter aufweist. Das letztere erwähnte Gitter, beginnt dabei mit einer starken Überbewertung. Dieses Verhalten ist auch in der Abbildung 75 zu sehen. Erstmals wird aus der TEGENA2 Testreihe für die Abbildung 75 erkennbar, dass für eine Gleichlastuntersuchung die Temperatur in Richtung Außenwand abnimmt. Begründet wird dieser Verlauf [Möller R., 1989] mit einer Korrektur der Anlage während der Betriebszeit. Der Verlauf der experimentellen Temperaturverteilung für die Abbildung 75 ist somit ein weiterer Beweis, dass, trotz teilweise starker Abweichungen der CFX Berechnungen, eine abnehmende Temperatur in Richtung der Kanalauswand richtig sein muss.

Diese Verbesserung der Rechenergebnisse, bei geringerer Reynoldszahl und Aufheizspanne, lässt sich insbesondere für die Schiefplastversuche der TEGENA2 Reihe beobachten. In diesen liegt die Aufheizspanne gerade mal bei $40 \div 60 \text{ K}$. Die Resultate sind hierbei deutlich besser. Ein Beleg dafür ist die Auswertung der Temperaturverteilung in den Abbildungen 76, 77 und 78. In allen drei Abbildungen weisen die Gitterstrukturen eine gute Übereinstimmung mit den TEGENA Messdaten auf. Eine nahezu ideale Berechnung stellt die Abbildung 77 dar, in der die Abweichungen minimal sind. Die Gleichlastversuche der TEGENA2 Reihe, mit hohen Reynoldszahlen, werden somit durch das hexagonale Gitter besser

beschrieben. In wandnahen Bereichen und geringeren Reynoldszahlen sowie Aufheizspannen zeigen sich jedoch Vorteile für das tetragonale Gitter. Die Schiefplastversuche werden durch beide Gitter zufriedenstellend wiedergegeben.

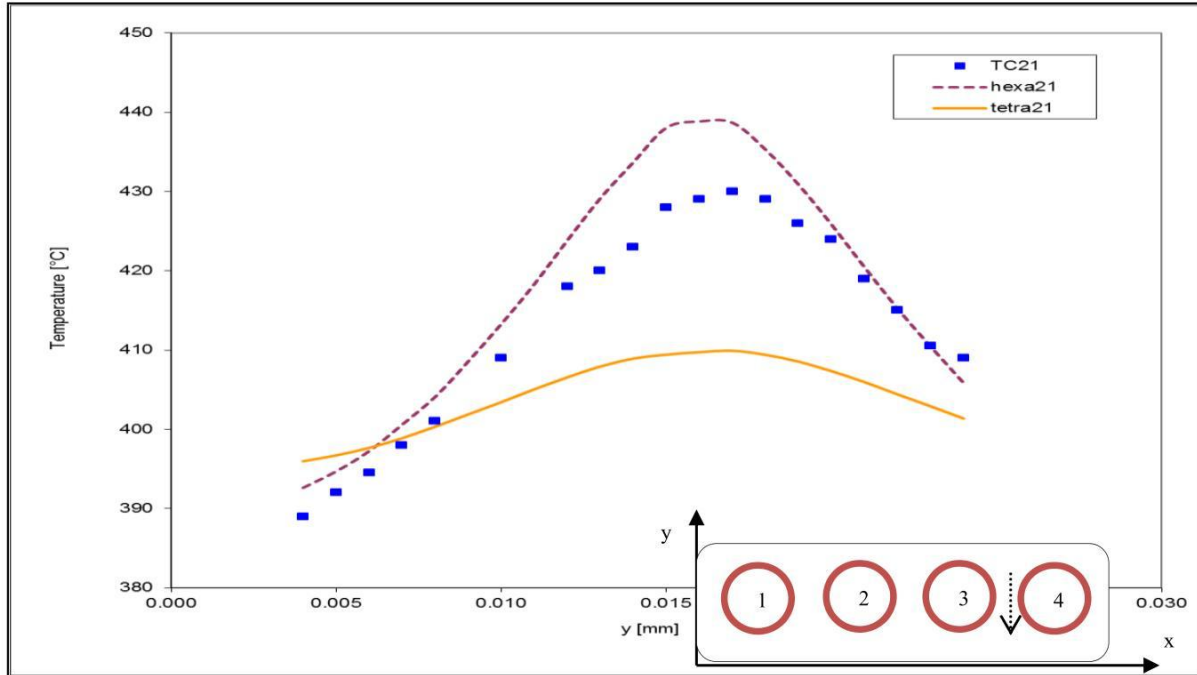


Abbildung 71: Darstellung der Messaufzeichnungen der Datenreihe M332.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 2 Gleichlastversuch

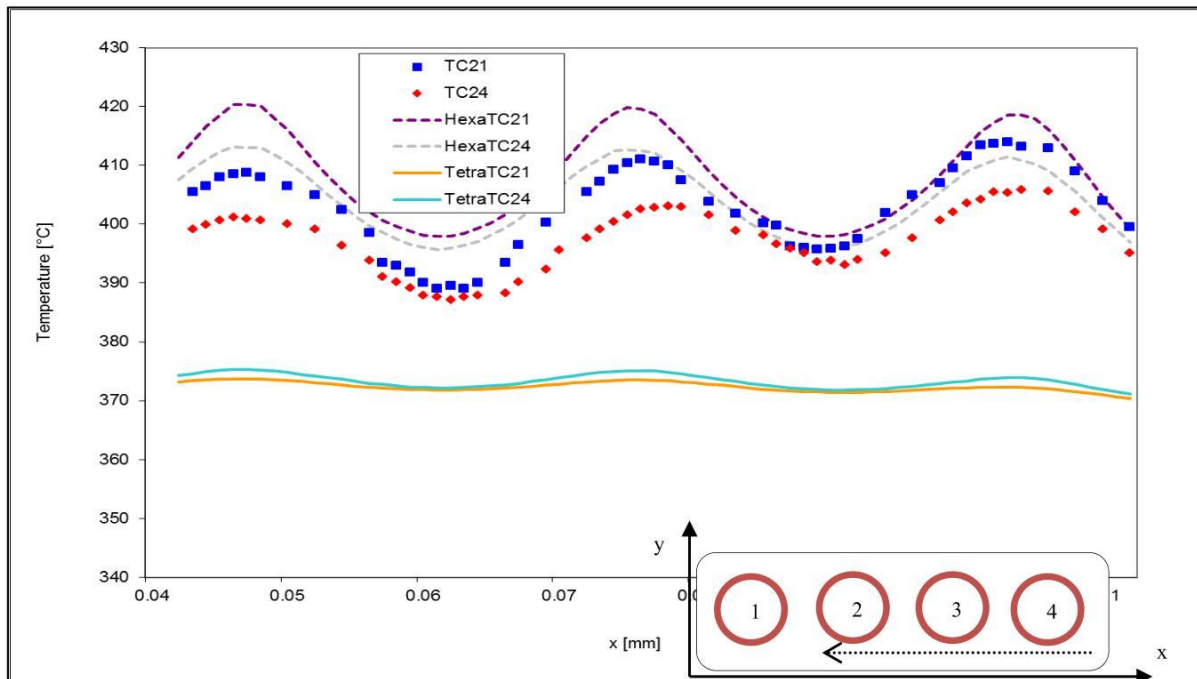


Abbildung 72: Darstellung der Messaufzeichnungen der Datenreihe M336.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 2 Gleichlastversuch

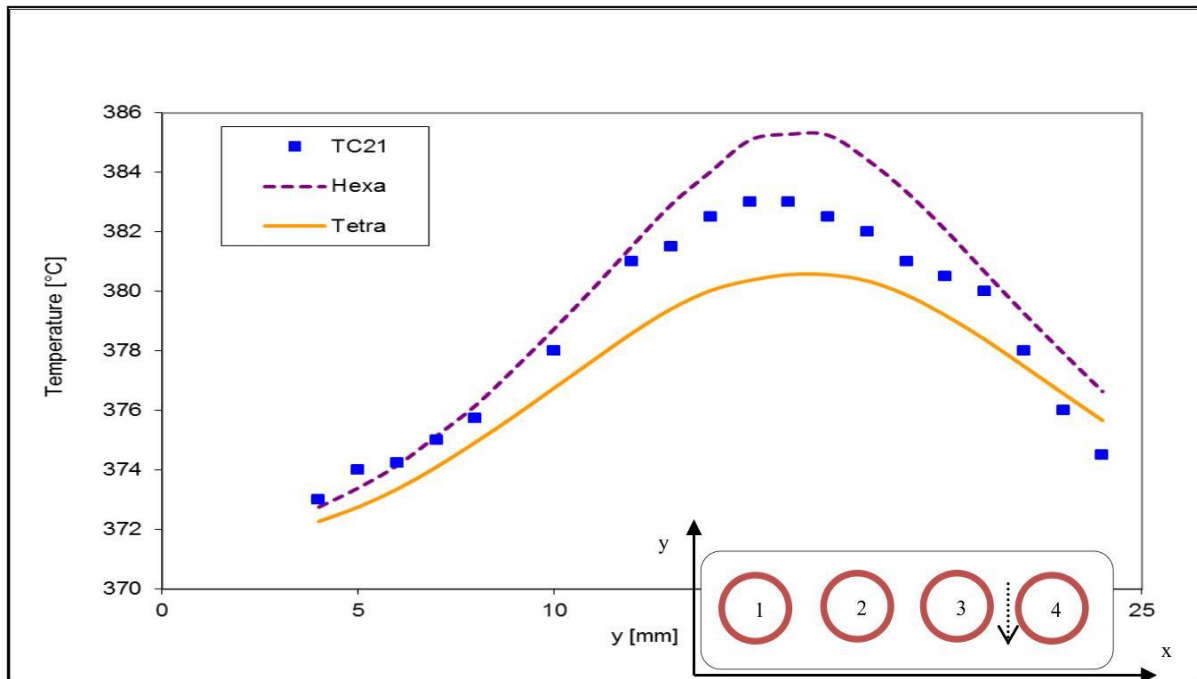


Abbildung 73: Darstellung der Messaufzeichnungen der Datenreihe M104.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 2 Gleichlastversuch

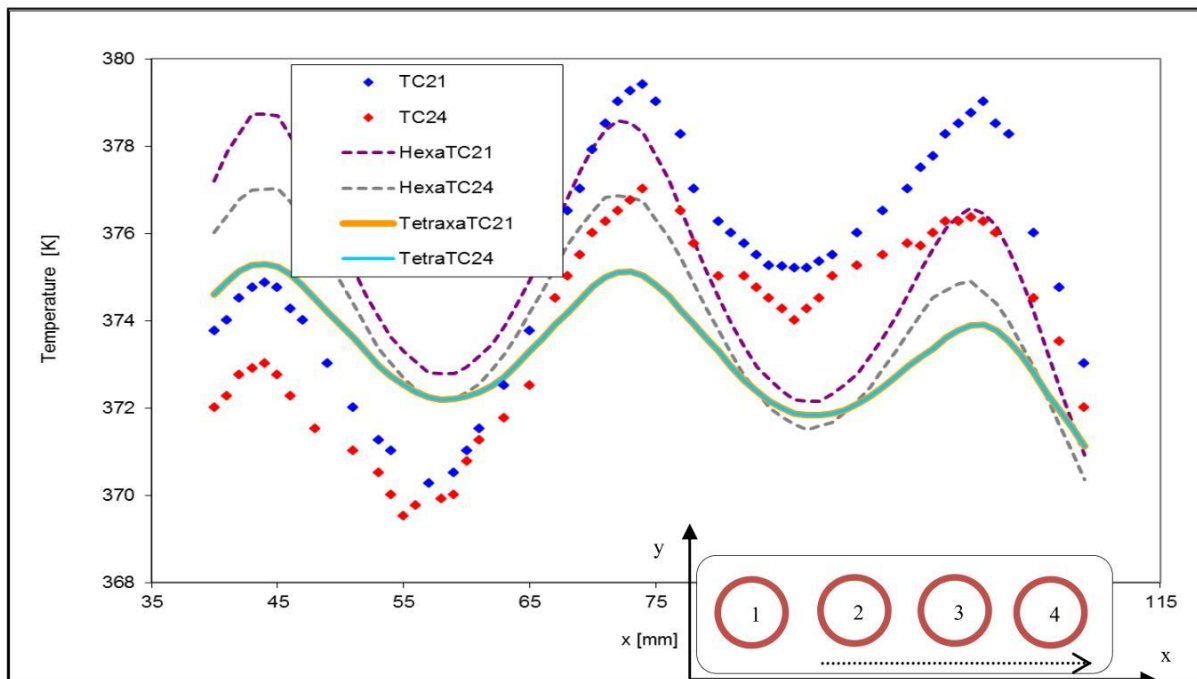


Abbildung 74: Darstellung der Messaufzeichnungen der Datenreihe M080.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 2 Gleichlastversuch

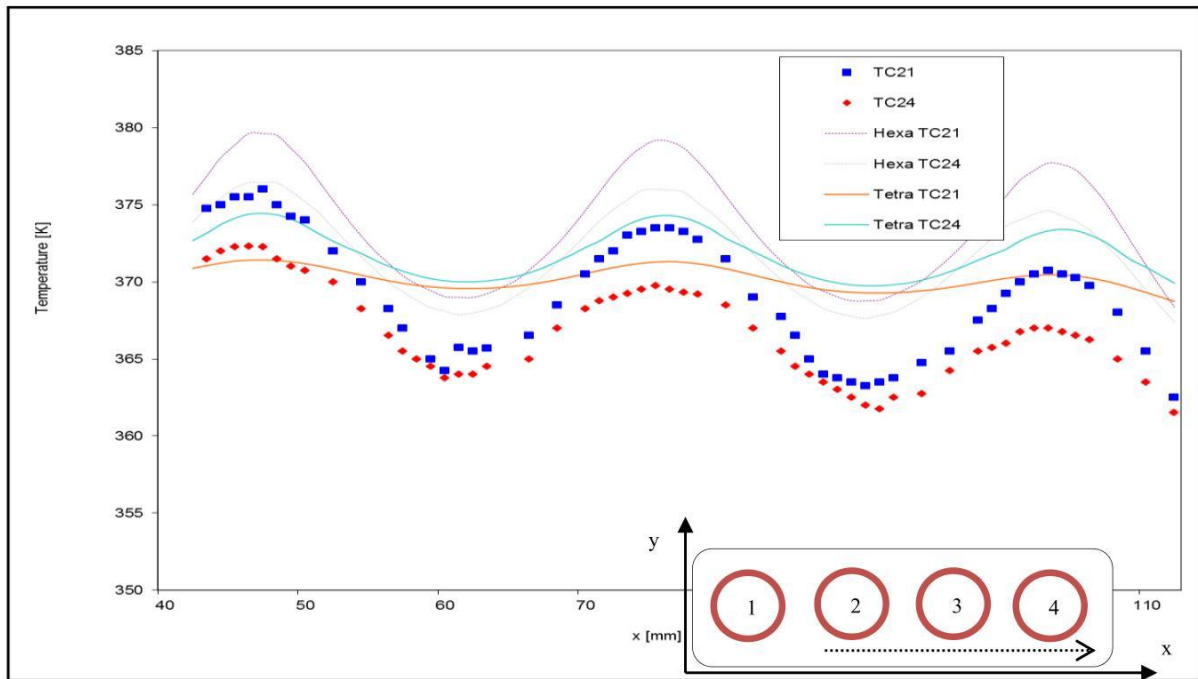


Abbildung 75: Darstellung der Messaufzeichnungen der Datenreihe M094.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 2 Gleichlastversuch

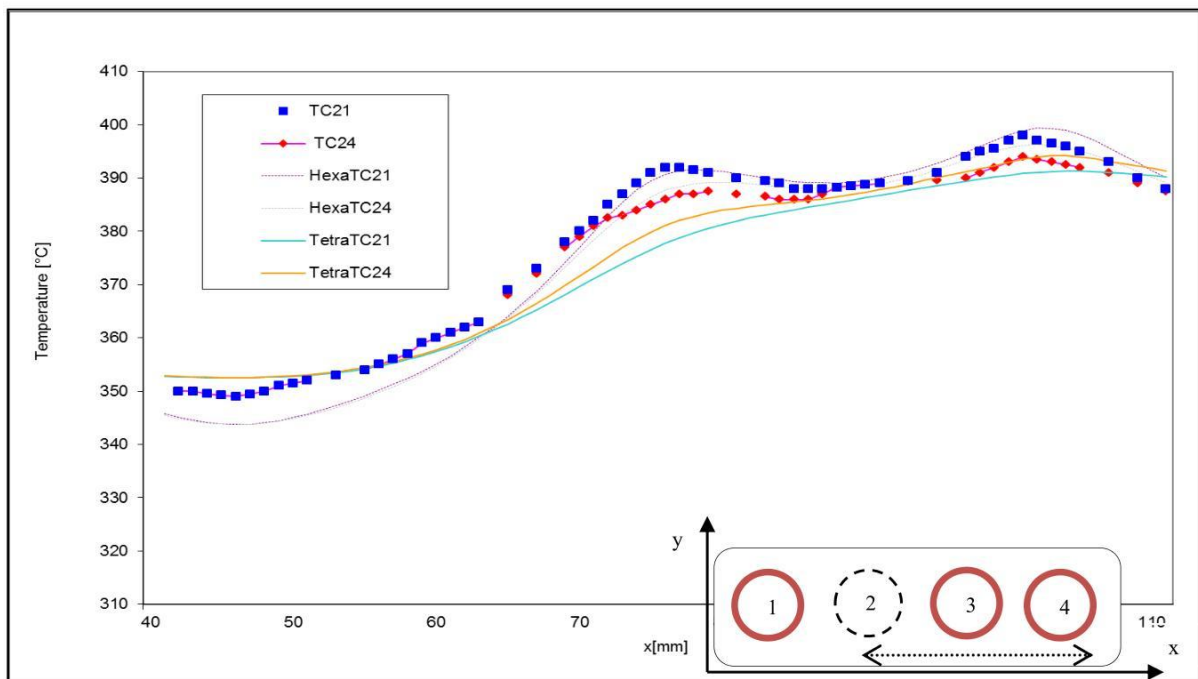


Abbildung 76: Darstellung der Messaufzeichnungen der Datenreihe M198.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 2 Schiefelastversuch

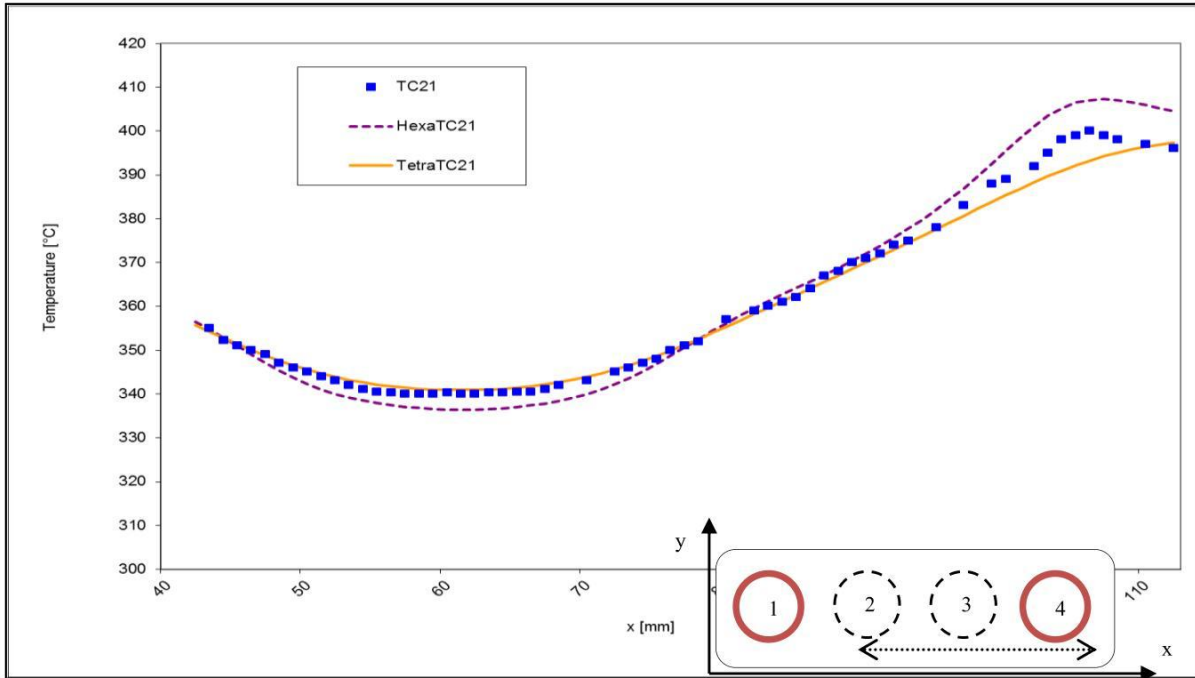


Abbildung 77: Darstellung der Messaufzeichnungen der Datenreihe M190.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 2 Schiefplastversuch

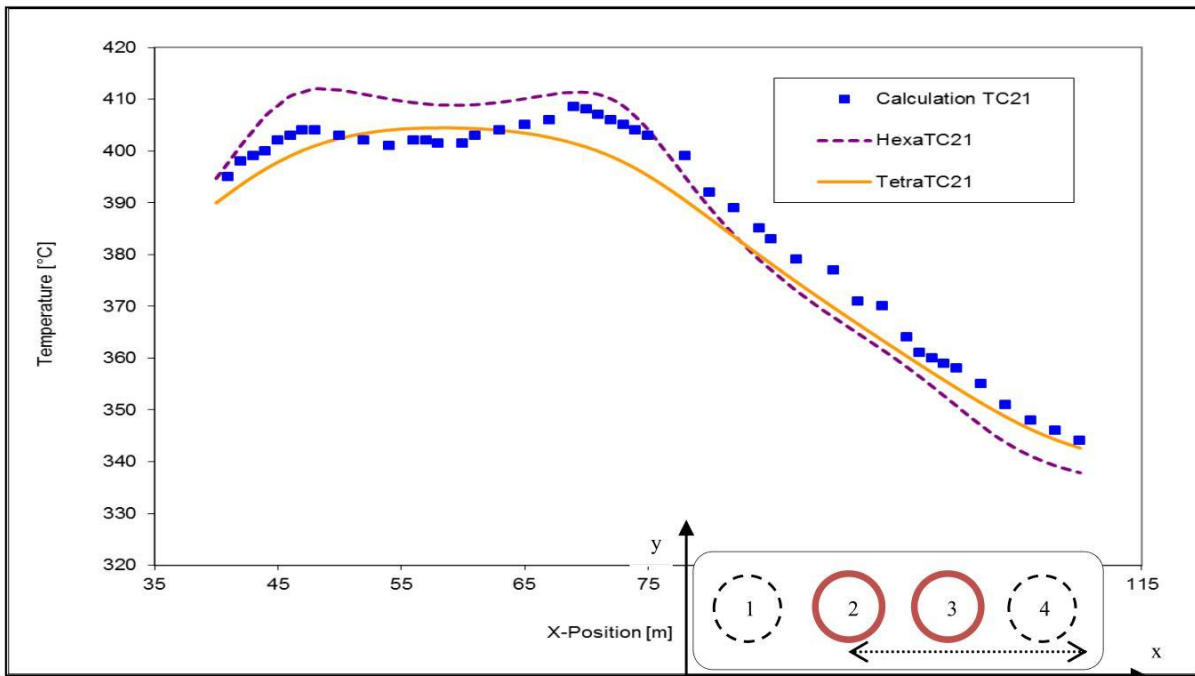


Abbildung 78: Darstellung der Messaufzeichnungen der Datenreihe M169.DAT sowie den CFX Berechnungen für den TEGENA 2 Schiefplastversuch

3.3.2.2 Bestmögliche Einschätzungen der detaillierte Temperaturverteilungen

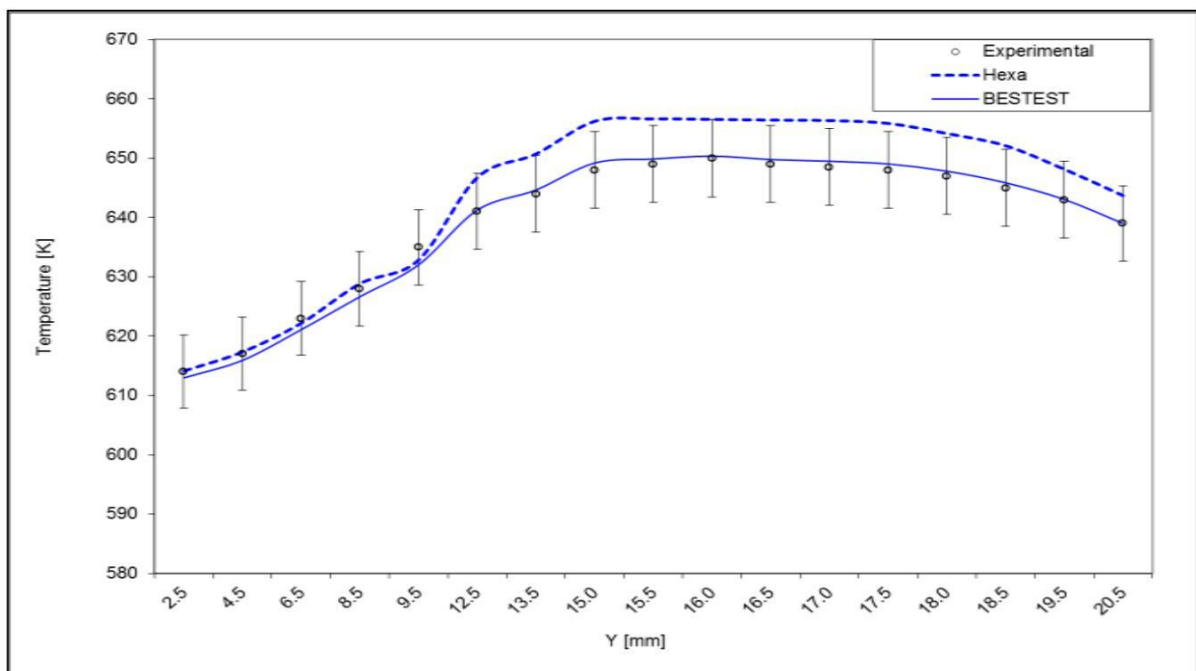
Mit den in Abschnitt 3.3.1.1 erläuterten Messsystemen werden die detaillierten Temperaturverteilungen in der TEGENA Testreihe gemessen. Die daraus gewonnenen Daten werden in dieser Arbeit für die Kalibrierung von ausgesuchten Modellparametern des CFD Codes ANSYS CFX verwendet. Die Intention dieser Analyse ist dabei bestmögliche Systemparameter für die numerischen Berechnungen zu erzielen. Die in Kapitel 3.3.2.1 berechneten Ergebnisse zeigen, dass hohe Reynoldszahlen und große Aufheizspannen zu deutlichen Differenzen führen. Auch eine inkorrekte Temperaturverteilung der experimentellen Auswertungen kann durch die numerischen Untersuchungen bestätigt werden. Aus diesem Grund wird die BESTEST Analyse mittels der ausgewählten experimentellen Daten lediglich in y-Richtungen durchgeführt. Hierfür werden für die Gleichlastversuche elf, und für die Schiefastversuche acht Parameter für eine Modellkalibrierung verwendet. Die verwendeten Unschärfen der jeweiligen Größen gewährleisten permanente Berechnungsstabilität und die Einhaltung der Parametergrenzen. Die ausgewählten Parameter haben entscheidenden Einfluss auf die Berechnungsbeiträge und sind in Tabelle 17 aufgelistet.

Parameter	Nominalwerte
$\alpha_1 = C_\mu$ aus dem $k - \varepsilon$ Modell	$0.09 \pm 7\%$
$\alpha_2 = C_{\varepsilon,1}$ aus dem $k - \varepsilon$ Modell	$1.44 \pm 7\%$
$\alpha_3 = C_{\varepsilon,2}$ aus dem $k - \varepsilon$ Modell	$1.92 \pm 7\%$
$\alpha_4 =$ Turbulente Schmidt Zahl aus ε	$1.00 \pm 7\%$
$\alpha_5 =$ Turbulente Schmidt Zahl aus k	$1.30 \pm 7\%$
$\alpha_6 =$ Eintrittsgeschwindigkeit	$\overline{w_i} \pm 7\%$
$\alpha_7 =$ Turbulente Prandtl Zahl	$0.90 \pm 7\%$
$\alpha_{8,9,10,11} =$ Heizleistung	$q_{1,2,3,4} \pm 7\%$

Tabelle 17: Modellparameter für die Kalibrierung Temperaturverteilungen

Anhand dieser Modellparameter werden beide CFX Modelle durch die Messungen der TEGENA Testreihe und der Mathematischen Methode nach [Cacuci und Ionescu- Bujor, 2010b] kalibriert. Die gemessenen Gleich- und Schiefasttemperaturverteilungen enthalten Daten aus den Messebenen ME6 und MP6. Die BESTEST Berechnungen werden für alle verfügbaren experimentellen

Messwerte durchgeführt. Gekennzeichnet werden diese Ergebnisse als Systemantworten. Insgesamt werden für die Berechnungen in positiver und negativer Y- Richtung 79 Daten berücksichtigt. Für die BESTEST Berechnungen wird der relative Wert der Messungenauigkeit mit 1% berücksichtigt. Die Verwendung dieser Daten für die Modellkalibrierung erfolgt unter der Annahme, dass unter den einzelnen Werten keine Beziehung, sowohl in Raum und Zeit, vorhanden ist. Die bestmöglichen Systemantworten der Testreihe F04Q12B.DAT sind in den Abbildungen 79 und 80 dargestellt: Oben für die hexagonale und unten für die tetragonale Berechnung. Für beide Untersuchungen wird deutlich wie stark die BESTEST Berechnungen die CFX Ergebnisse verbessern. Insbesondere für die tetragonale Auswertung ist dieser Progress immens. Auch die enthaltenen Unsicherheiten der verwendeten Systemparameter erfahren eine deutliche Reduzierung und ermöglichen es die Unsicherheiten der oberen und unteren Unsicherheitsbänder auf den Fehlertoleranzbereich der experimentellen Daten zu minimieren. Insbesondere die Unsicherheiten der Heizleistungen werden für diese Analyse verringert. Die geringe Veränderung der Werte der Systemparameter verdeutlicht die geeignete Wahl der verwendeten Größen. Die Verringerung der Unsicherheiten aus den Konstanten der Turbulenzmodellierung ist für diese Berechnung teilweise abweichend. Die Differenzen werden dabei für die Heizleistung und Eintrittsgeschwindigkeiten signifikanter (Tabelle 18).



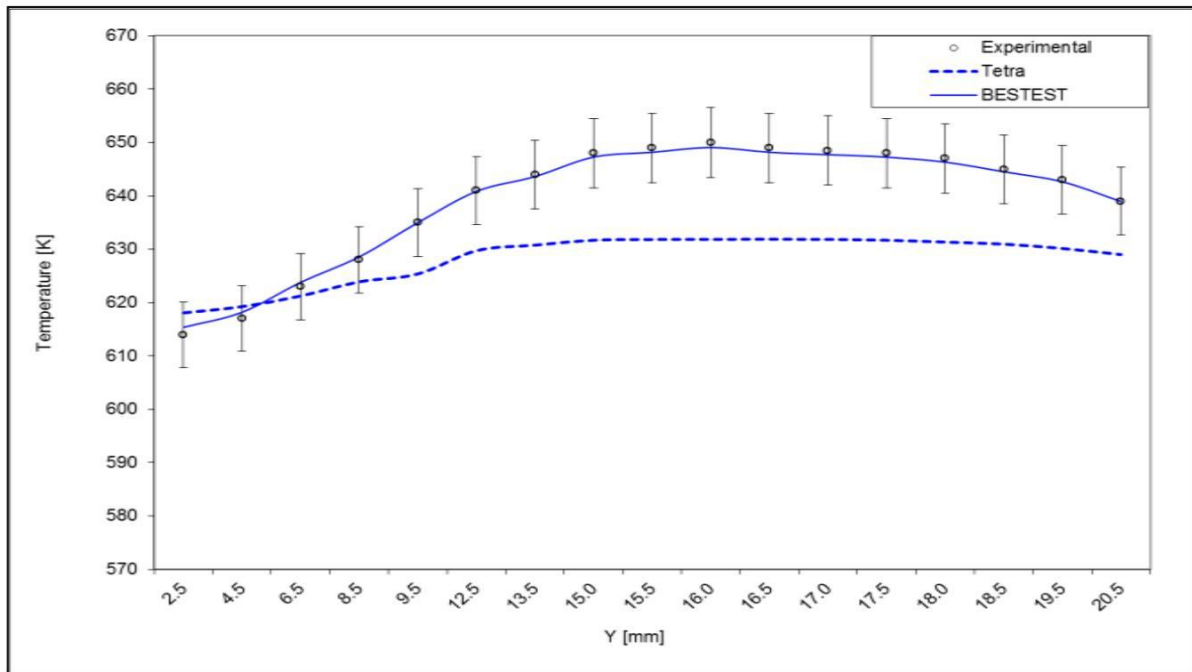
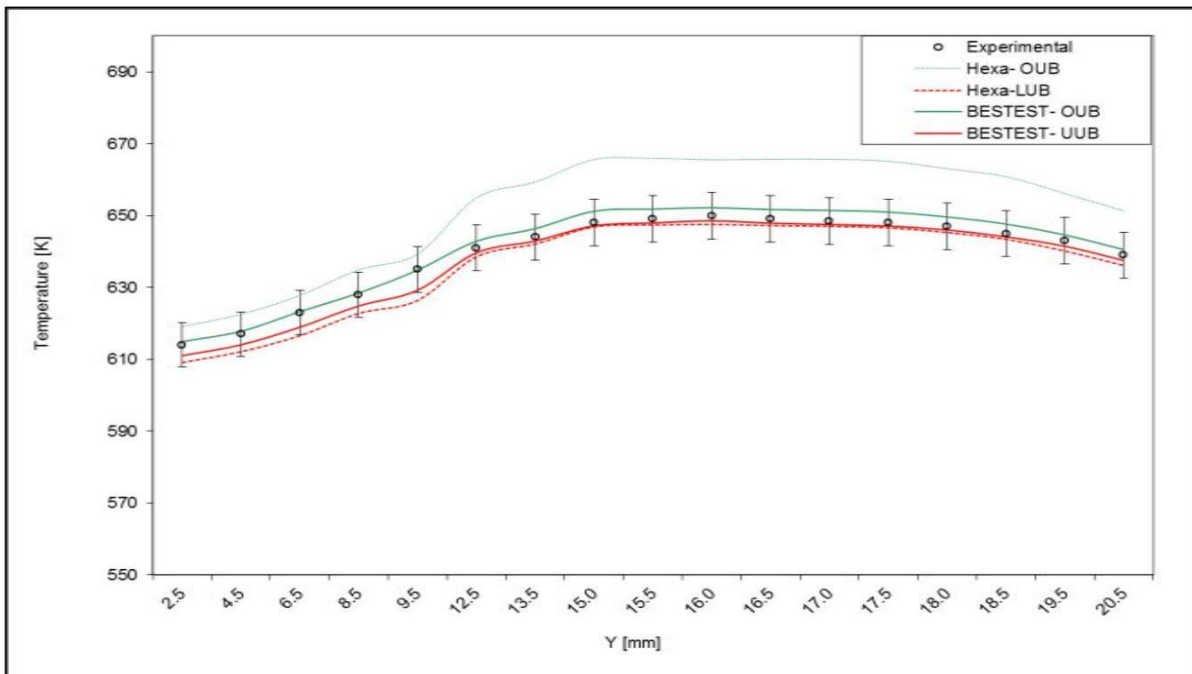


Abbildung 79: Experimentelle Daten der TEFLU Testreihe, den CFX Berechnungen (hexagonal Bild oben; tetragonal Bild unten) sowie den BESTEST Werten (Datenreihe F04Q12B. DAT)



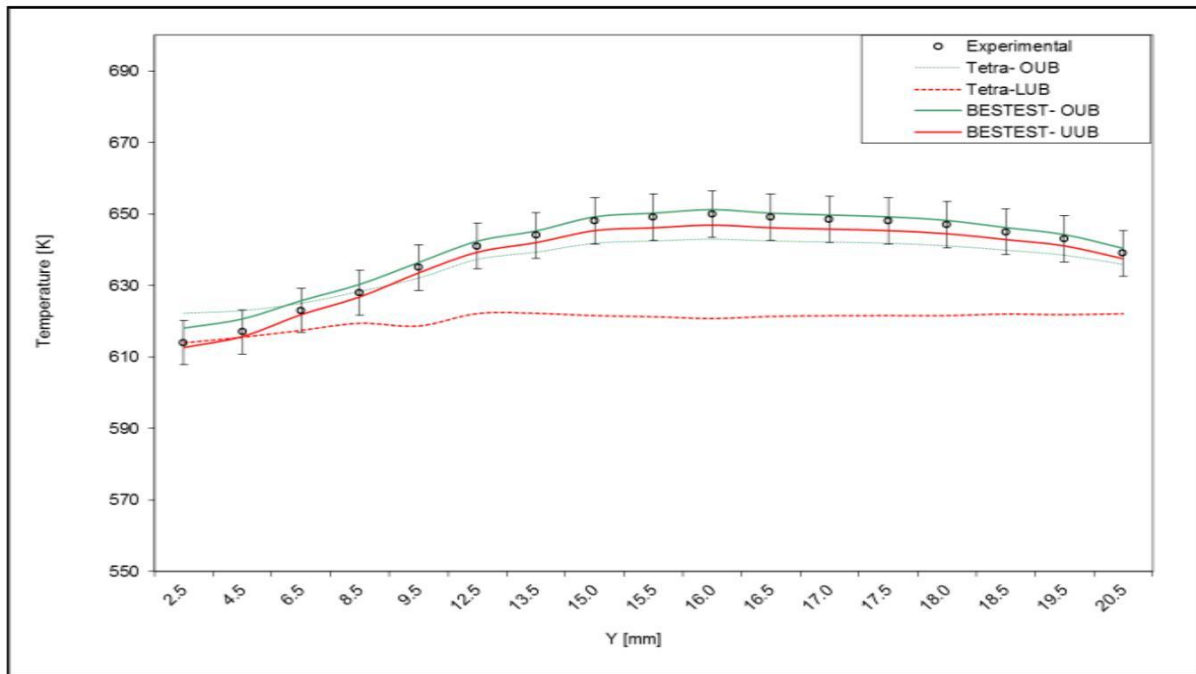


Abbildung 80: Experimentelle Daten mit ihren relativen Ungenauigkeiten sowie den oberen und unteren Unsicherheitsbänder der CFX und BESTEST Berechnungen (hexagonal Bild oben; tetragonal Bild unten) der Datenreihe F04Q12B.DAT

In den folgenden Diagrammen werden die oberen Unsicherheitsbänder mit „UUB“ und die unteren mit „LUB“ gekennzeichnet. Diese Bezeichnungen sind in allen Diagrammlegenden wiederzufinden. Die Korrelationen der bestmöglichen Einschätzungen der Systemparameter und den Korrelationen zwischen den Systemparametern und Systemantworten für die Datensatz F04Q12B sind in den Abbildungen 81 und 82 dargestellt.

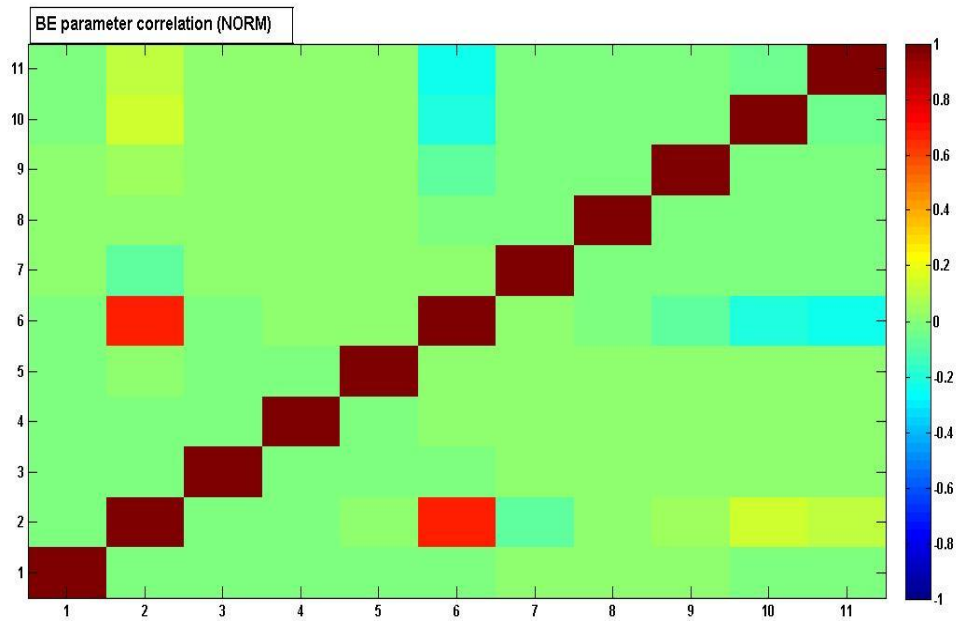
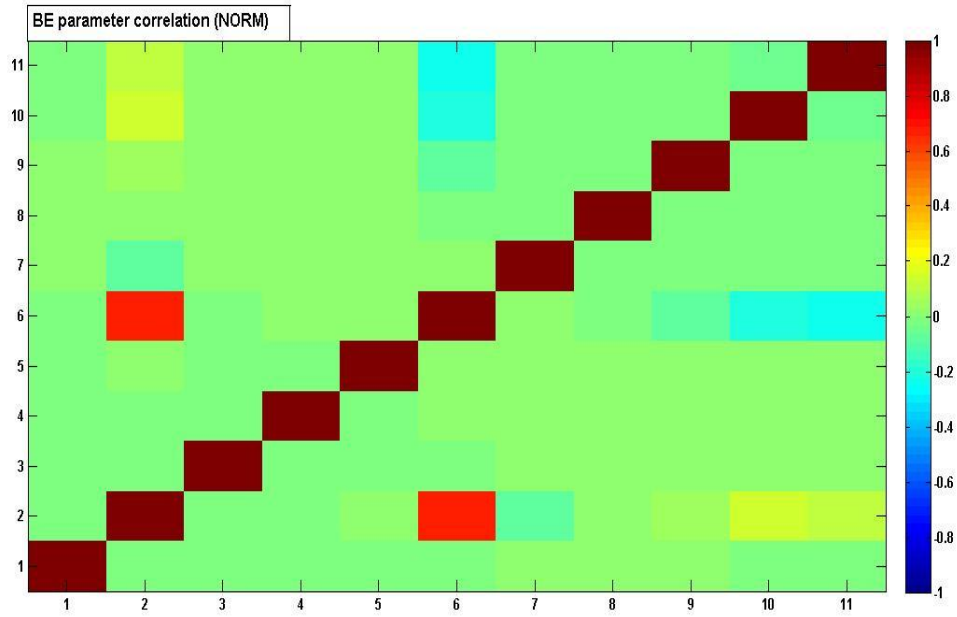


Abbildung 81: Bestmögliche Parameter Korrelation der hexagonalen (Bild oben) und tetragonalen (Bild unten) Berechnung für die Datenreihe F04Q12B.DAT in normalisierter Darstellung

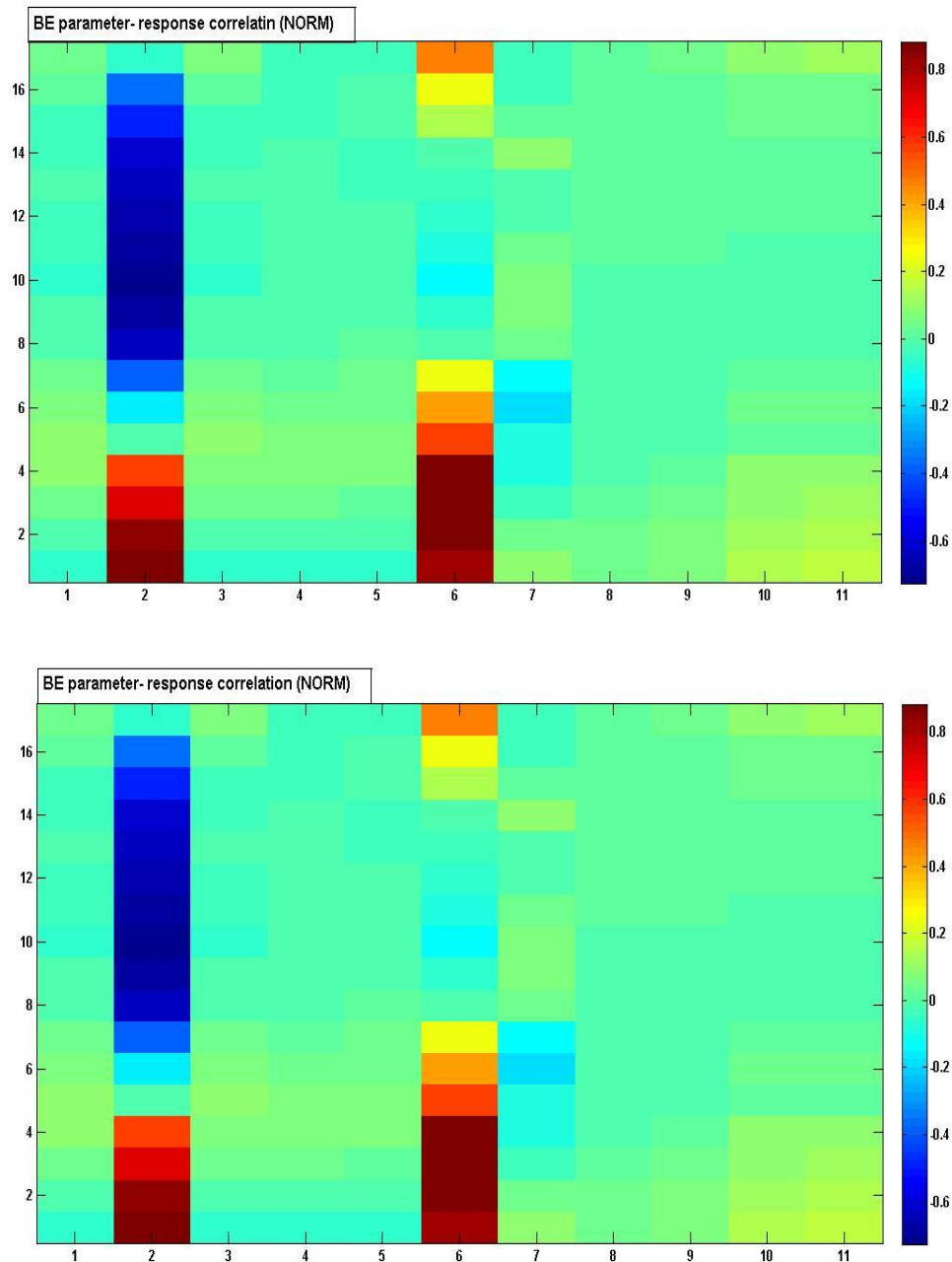


Abbildung 82: Bestmögliche Parameter- Antwort- Korrelation der hexagonalen (Bild oben) und tetragonalen (Bild unten) Berechnung für die Datenreihe F04Q12B.DAT in normalisierter Darstellung

Die Analyse der Testreihe F31Q12B.DAT in Abbildung 83, mittels der Messaufzeichnungen des Thermoelements TE21, kann für die hexagonale Berechnung einen signifikanten Erfolg zeigen. Die tetragonalen Berechnungen können bereits durch die CFX Berechnungen eine gute Übereinstimmung darstellen. Hauptsächlich werden für die oberen Unsicherheitenbänder der hexagonalen Berechnung Anpassungen getroffen, wobei die für die tetragonalen geringer ausfallen (Abbildung 84). Aus Tabelle 18 wird für diese Analyse etwas deutlicher, dass die bestmöglichen Einschätzungen der Systemparameter nahezu identisch mit

den Nominalwerten sind. Für das hexagonale Gitter treten vereinzelt Veränderungen auf. Diese richten sich hauptsächlich an die Werte der Turbulenzmodellierung. Die Reduzierung der Unsicherheiten ist für das hexagonale und tetragonale Gitter fast identisch. Abweichungen treten hier für die Eintrittsgeschwindigkeiten und der Heizleistung auf. Die Korrelationen der bestmöglichen Einschätzungen der Systemparameter und Systemparameter- Systemantwort Korrelationen für die Datensatz aus F31Q12B.DAT sind in den Abbildungen 85 und 86 dargestellt.

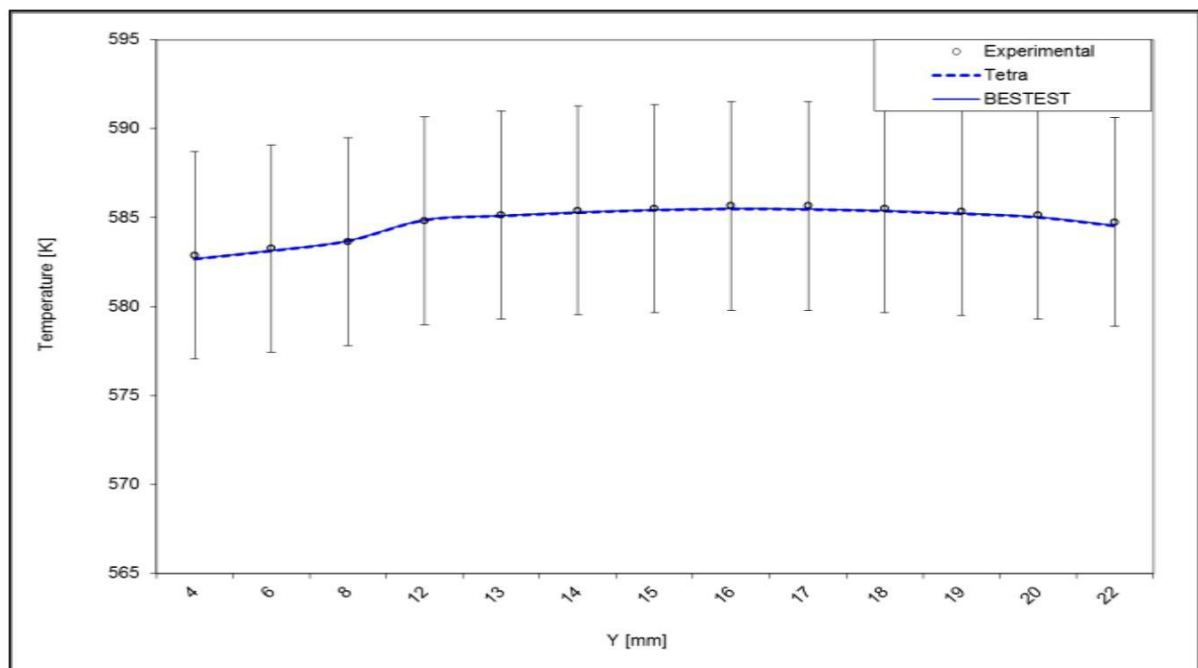
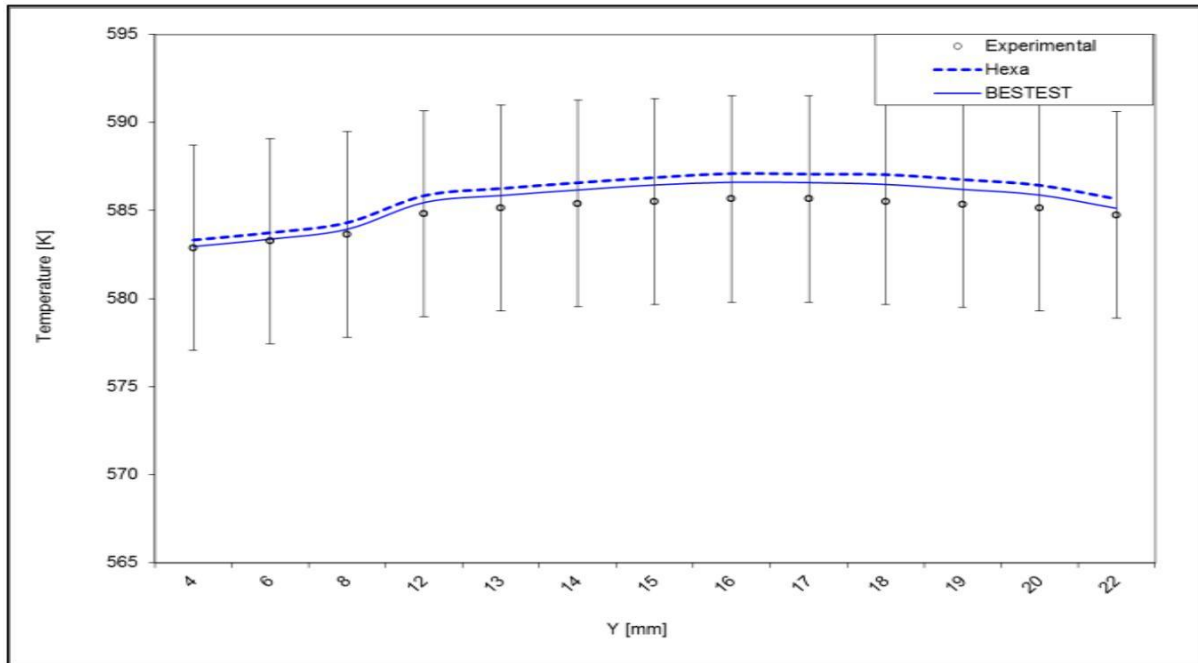


Abbildung 83: Experimentelle Daten der TEFLU Testreihe, den CFX Berechnungen (hexagonal Bild oben; tetragonal Bild unten) sowie den BESTEST Werten (Datenreihe F31Q12B. DAT)

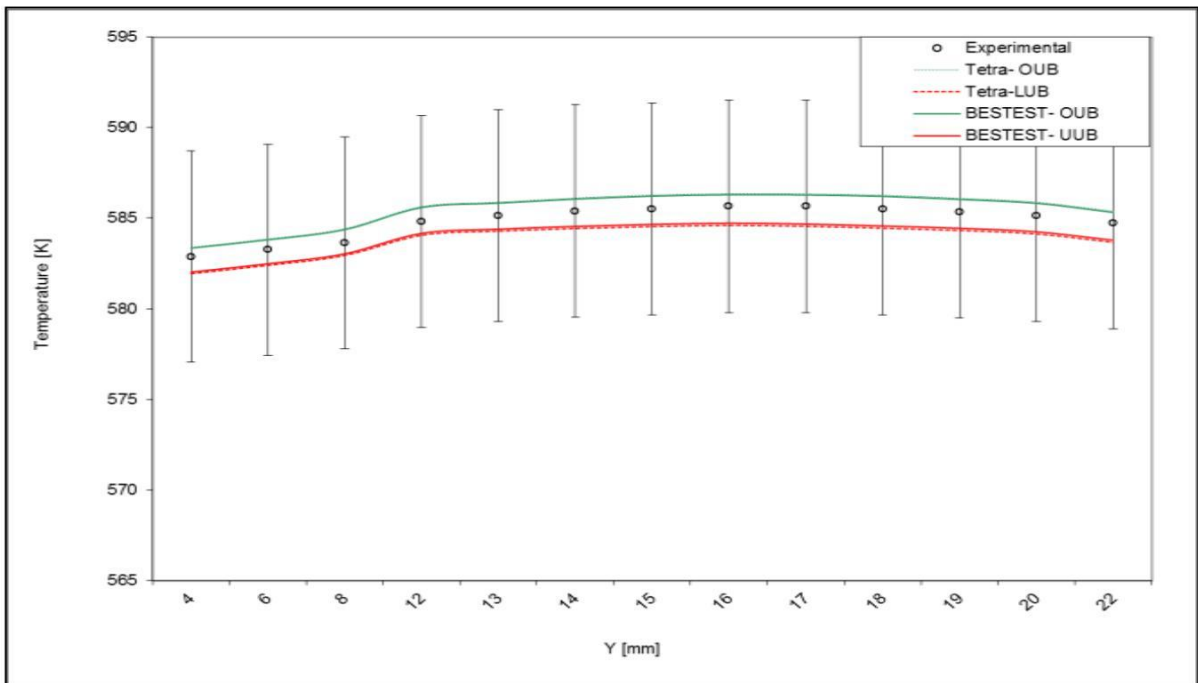
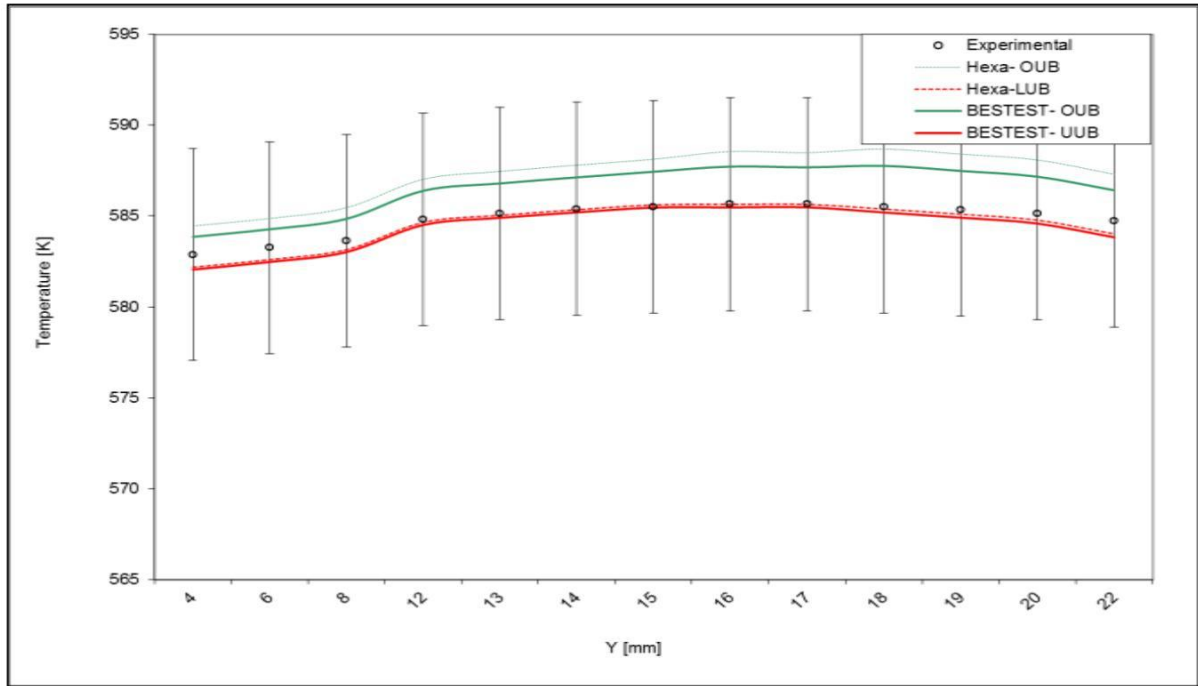


Abbildung 84: Experimentelle Daten mit ihren relativen Ungenauigkeiten sowie den oberen und unteren Unsicherheitsbänder der CFX und BESTEST Berechnungen (hexagonal Bild oben; tetragonal Bild unten) für die Datenreihe F31Q12B.DAT

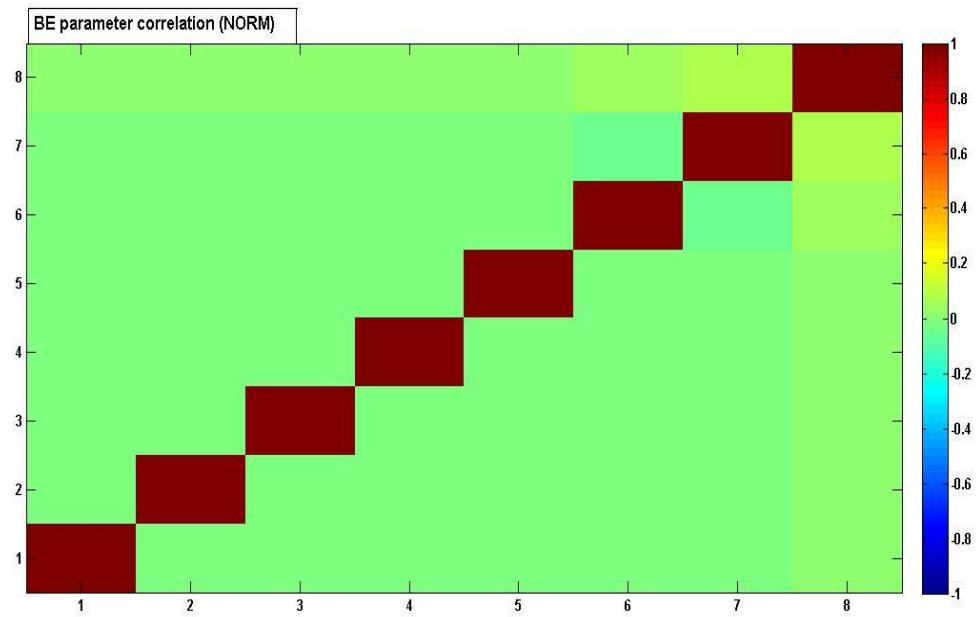
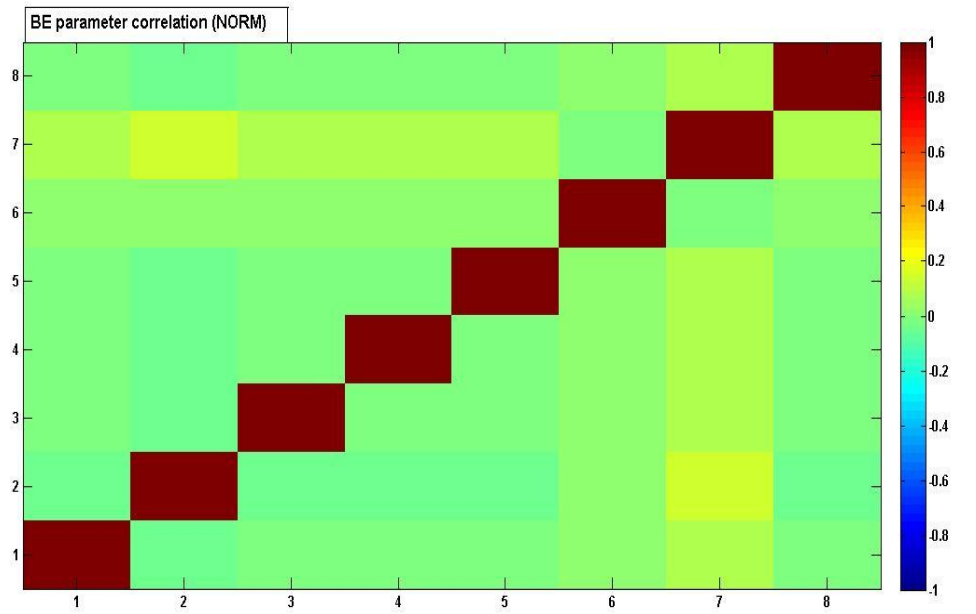


Abbildung 85: Bestmögliche Parameter Korrelation der hexagonalen (Bild oben) und tetragonalen (Bild unten) Berechnung für die Datenreihe F31Q12B.DAT in normalisierter Darstellung

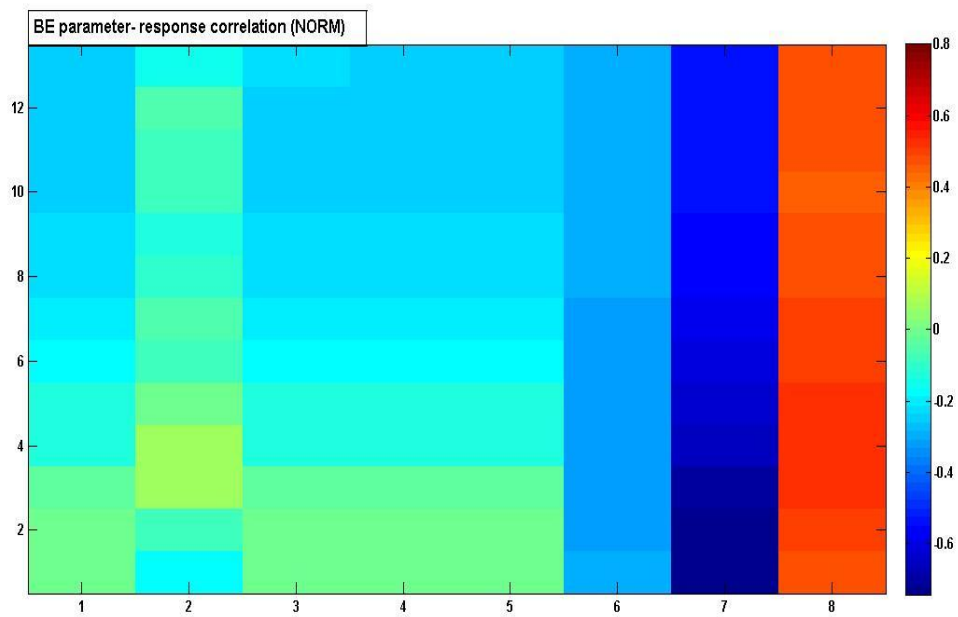
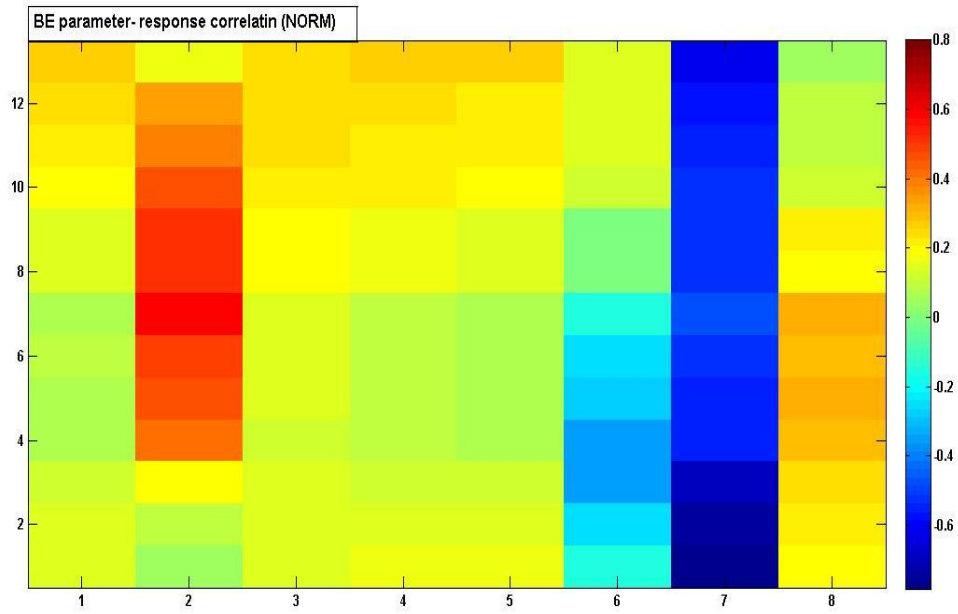
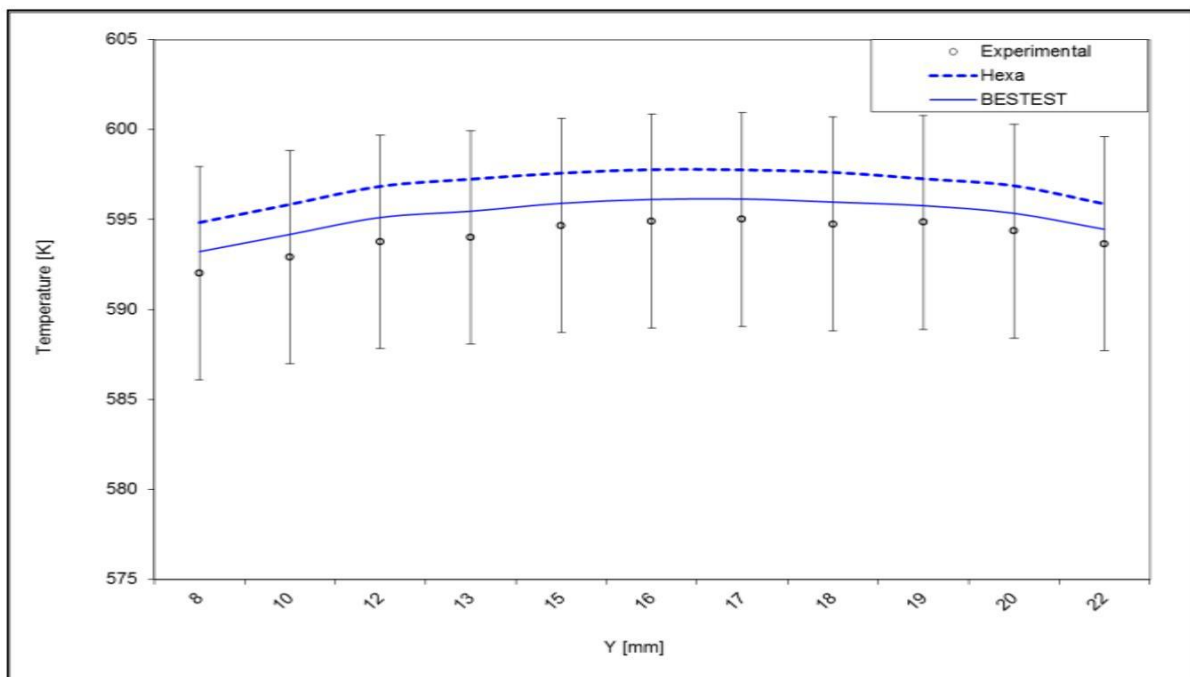


Abbildung 86: Bestmögliche Parameter- Antwort Korrelation der hexagonalen (Bild oben) und tetragonalen (Bild unten) Berechnung für die Datenreihe F31Q12B.DAT in normalisierter Darstellung

Ersichtlichere Verbesserungen sind für die Berechnungen der Testreihe F37QWS4A.DAT aus Abbildung 87 zu entnehmen. Für beide Rechengitter ermöglicht die BESTEST Analyse eine starke Anpassung an die experimentellen Daten. Die bestmöglichen Einschätzungen der Systemantworten liegen dadurch im Toleranzbereich der Messaufzeichnungen. Jedoch ist eine etwas stärkere Anpassung für das tetragonale Gitter aus Abbildung 87 nicht zu übersehen. Die Reduzierungen der Unsicherheitenbänder sind besonders für die oberen Unsicherheitenbänder zu erkennen (Abbildung 88). Die Variation der Systemparameter ist für die tetragonale nahezu minimal und entspricht denen der Nominalwerte. Das hexagonale Gitter zeigt leichte Veränderungen auf. Differenzen sind auch für die reduzierten Unsicherheiten der verwendeten Parameterwerte aus Tabelle 18 ersichtlich.

Die Korrelationen der bestmöglichen Einschätzungen der Systemparameter und Systemparameter- Systemantwort Korrelationen für die Datensatz aus F37QWS4A.DAT sind in den Abbildungen 89 und 90 dargestellt.



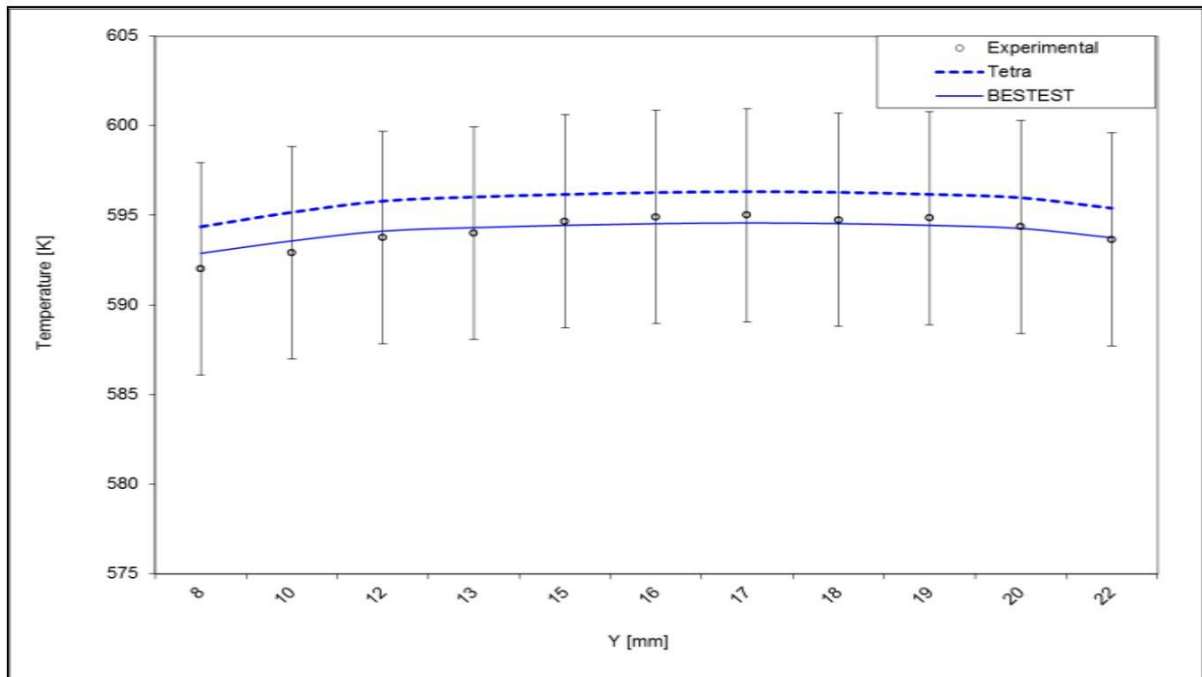
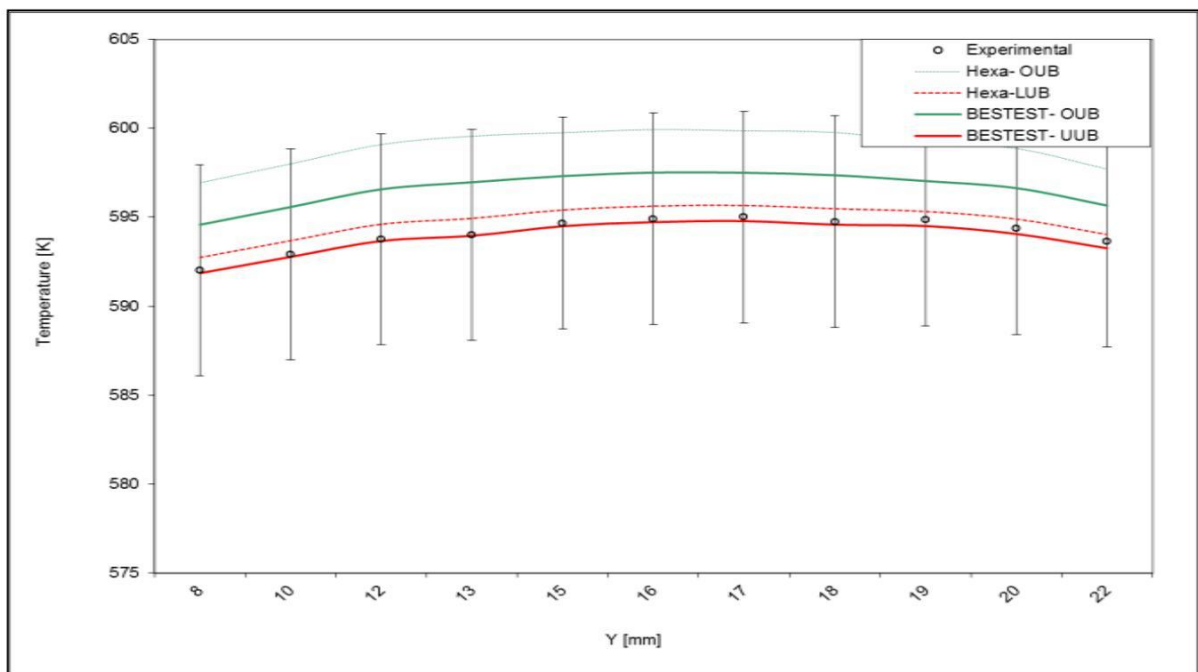


Abbildung 87: Experimentelle Daten der TEFLU Testreihe, den CFX Berechnungen (hexagonal Bild oben; tetragonal Bild unten) sowie den BESTEST Werten (Datenreihe F37QWS4A. DAT)



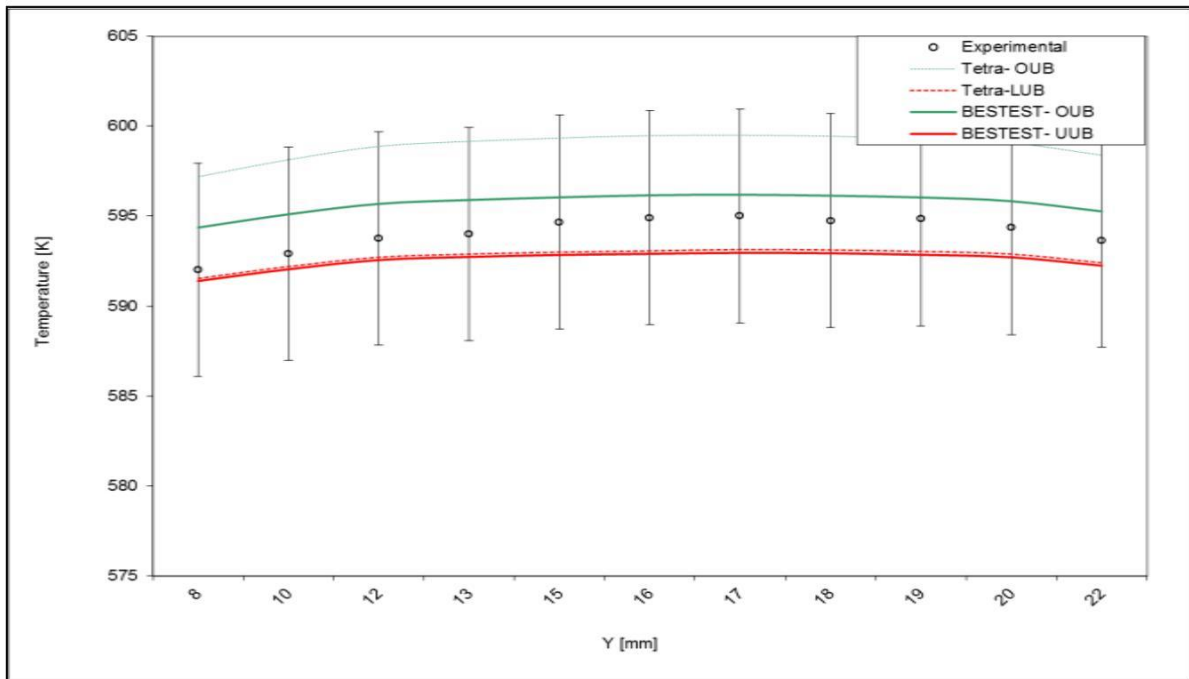
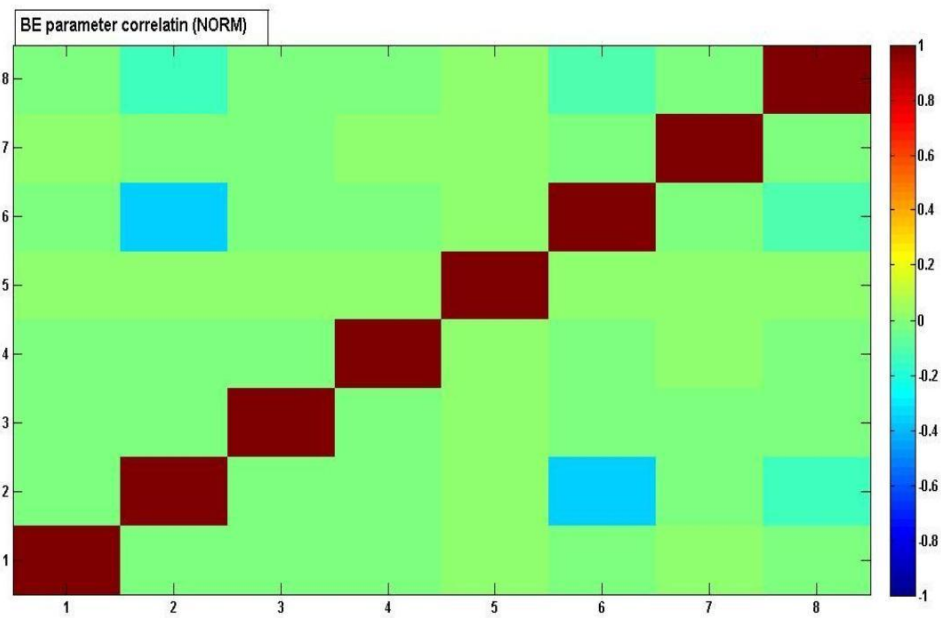


Abbildung 88: Experimentelle Daten mit ihren relativen Ungenauigkeiten sowie den oberen und unteren Unsicherheitsbänder der CFX und BESTEST Berechnungen (hexagonal Bild oben; tetragonal Bild unten) der Datenreihe F37QWSA.DAT



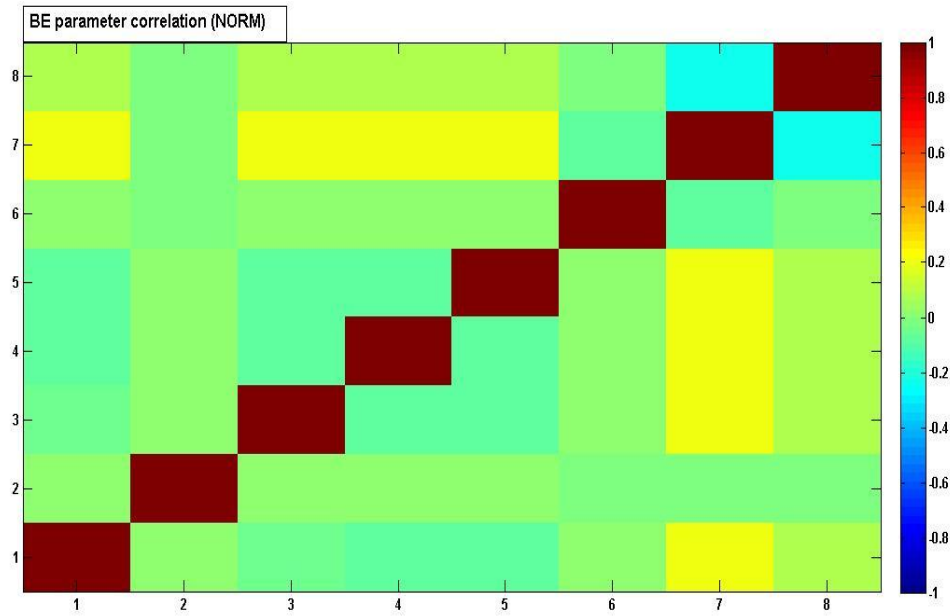
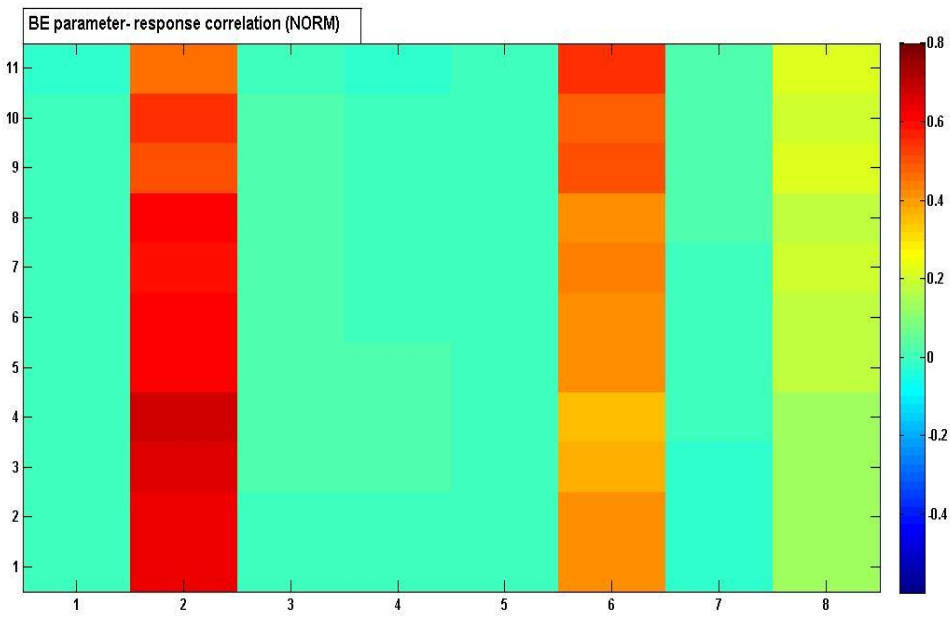


Abbildung 89: Bestmögliche Parameter- Antwort Korrelation der hexagonalen (Bild oben) und tetragonalen (Bild unten) Berechnung für die Datenreihe F37QWSA.DAT in normalisierter Darstellung



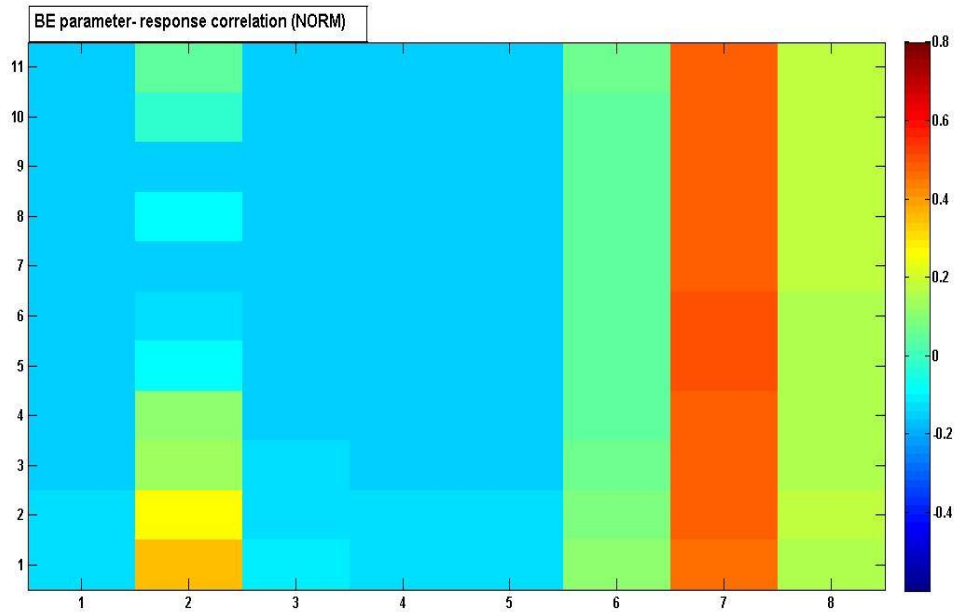


Abbildung 90: Bestmögliche Parameter- Antwort Korrelation der hexagonalen (Bild oben) und tetragonalen (Bild unten) Berechnung (hexagonal Bild oben; tetragonal Bild unten) der Datenreihe F37QWSA.DAT in normalisierter Darstellung

Eine besonders starke Anpassung erfahren die CFX Werte für die Analysen der Testreihen M332.DAT und M104.DAT, die in den Abbildungen 91, 92 sowie 93,94 zu finden sind. Die BESTEST Berechnungen stimmen mit den experimentellen Daten nahezu ideal überein oder führen zu beachtlichen Verbesserungen (Abbildung 91 und 93). Weiterhin ist für beide Berechnungen deutlich, dass die Unsicherheiten durch die BESTEST Auswertung deutlich reduziert werden und diese überwiegend sich im Toleranzbereich der Messaufzeichnungen befinden (Abbildung 92 und 94). Enorm starke Verringerungen der Unsicherheiten, aus Tabelle 18, erfahren die Größen der Heizleistung wobei diese von 7% auf fast 2% verringert werden. Die Parameterwerte sind für beide Gitterstrukturen nahezu äquivalent. Die Korrelationen der bestmöglich beurteilten Parameter und Parameter- Antworten befinden sich für die Analysen der Testreihen in den Abbildungen 95 bis 98. Die Einschätzungen der bestmöglichen Modellparameter der TEGENA 1 und TEGENA 2 Berechnungen sind in der Tabelle 18 vorzufinden.

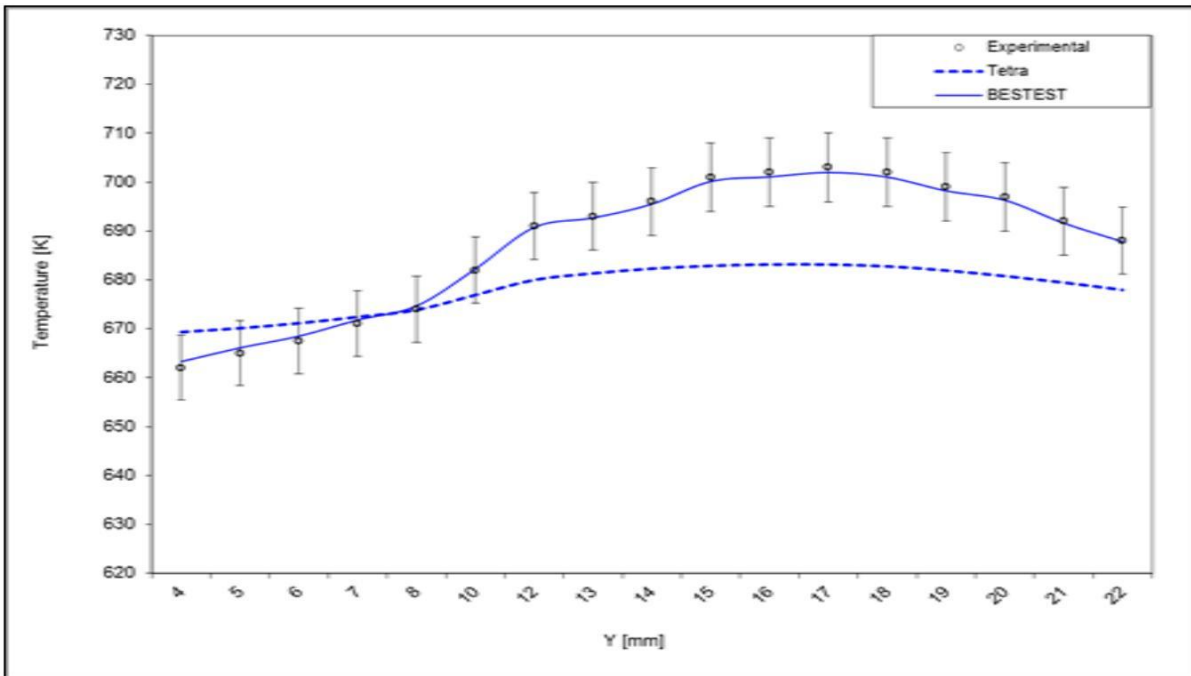
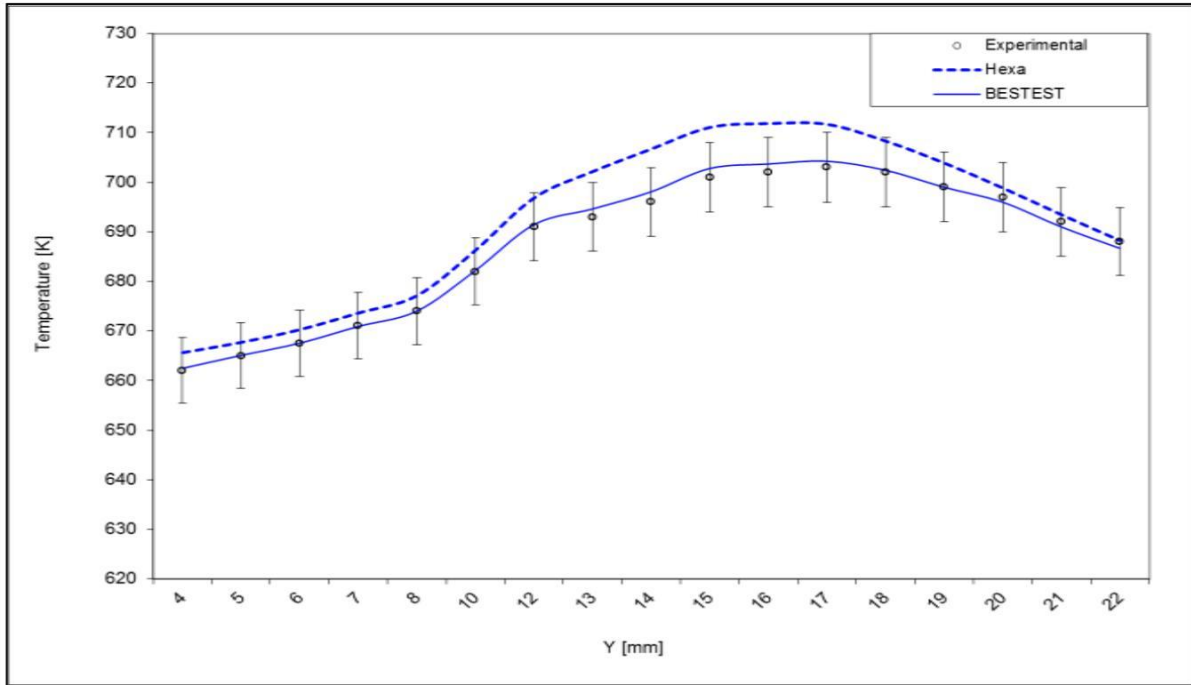


Abbildung 91: Experimentelle Daten der TEFLU Testreihe, den CFX Berechnungen (hexagonal Bild oben; tetragonal Bild unten) sowie den BESTEST Werten (Datenreihe M322. DAT)

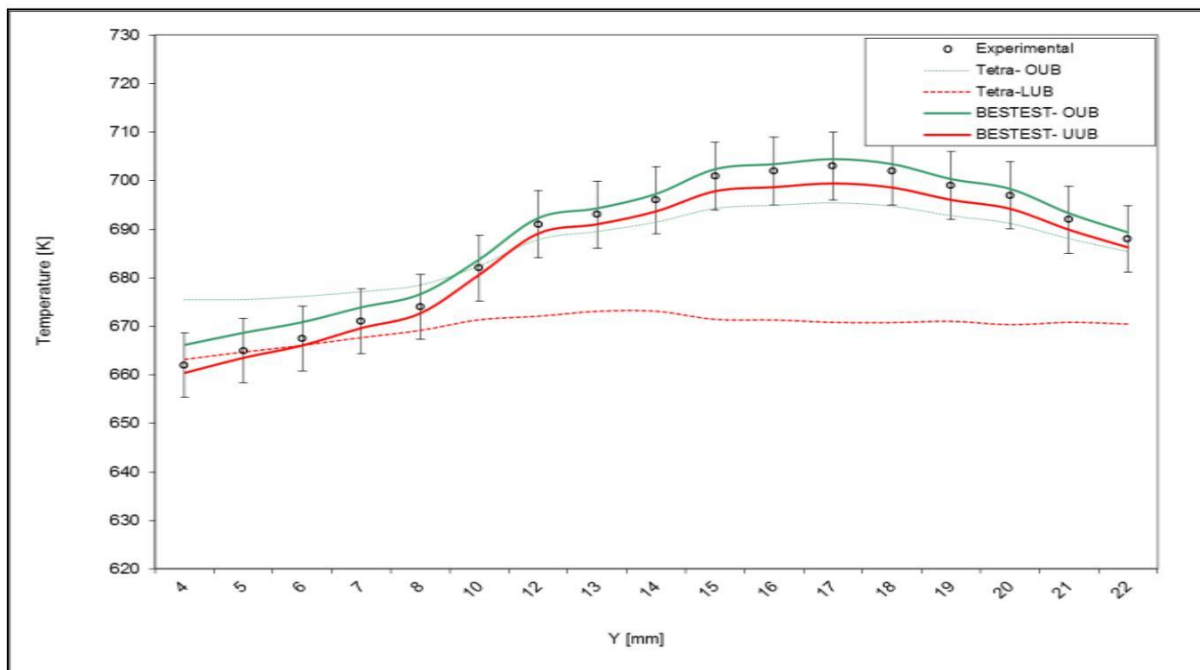
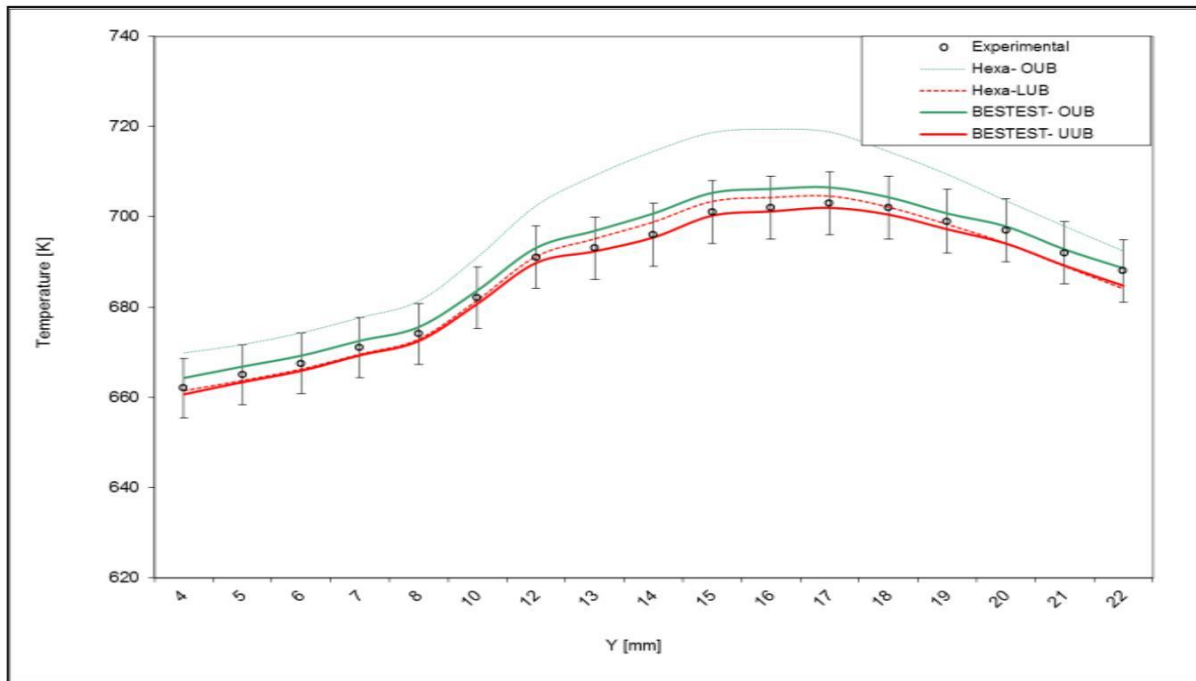


Abbildung 92: Experimentelle Daten mit ihren relativen Ungenauigkeiten sowie den oberen und unteren Unsicherheitsbänder der CFX und BESTEST Berechnungen (hexagonal Bild oben; tetragonal Bild unten) der Datenreihe M332.DAT

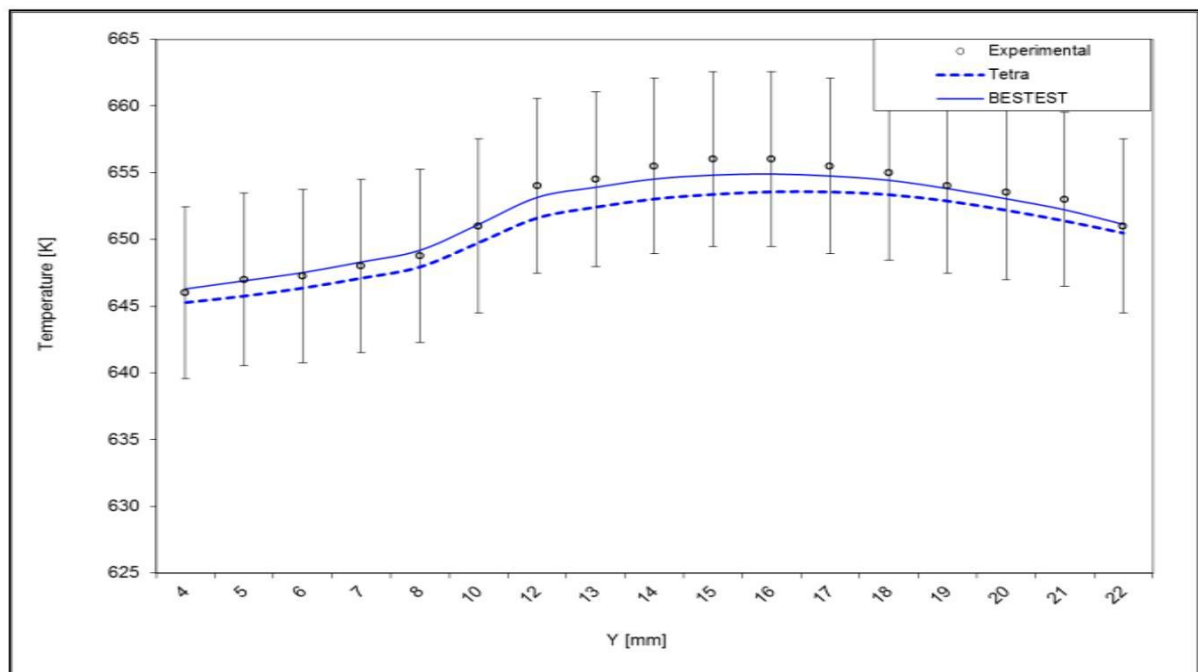
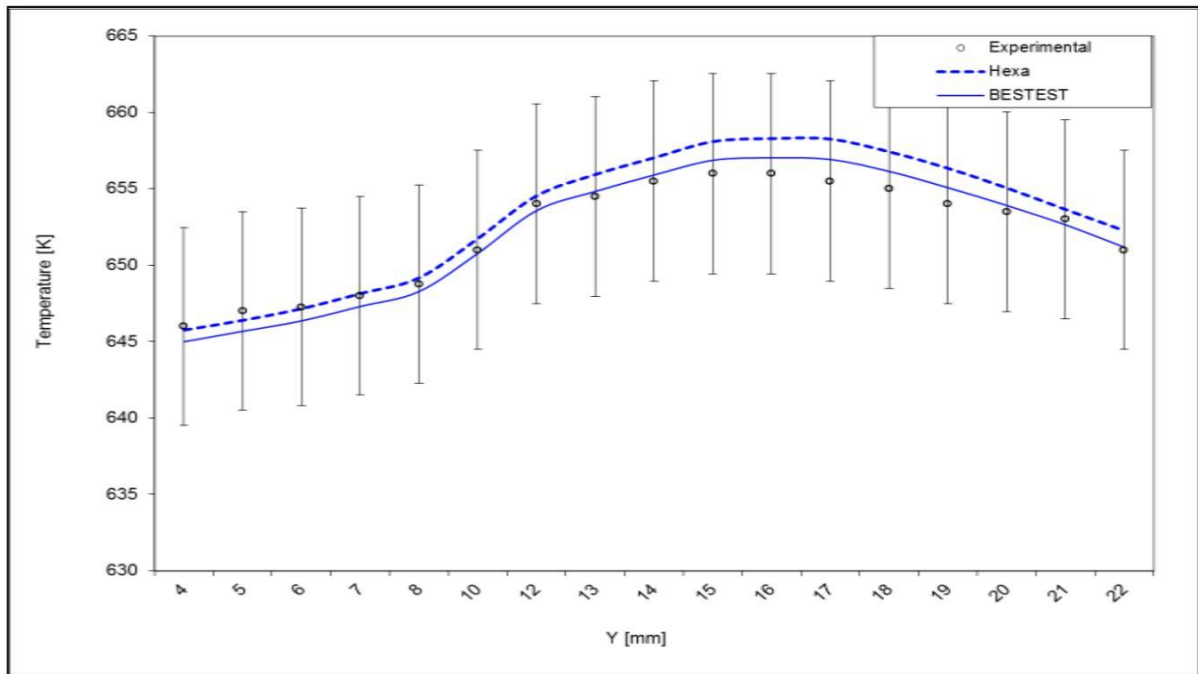


Abbildung 93: Experimentelle Daten der TEFLU Testreihe, den CFX Berechnungen (hexagonal Bild oben; tetragonal Bild unten) sowie den BESTEST Werten (Datenreihe M104. DAT)

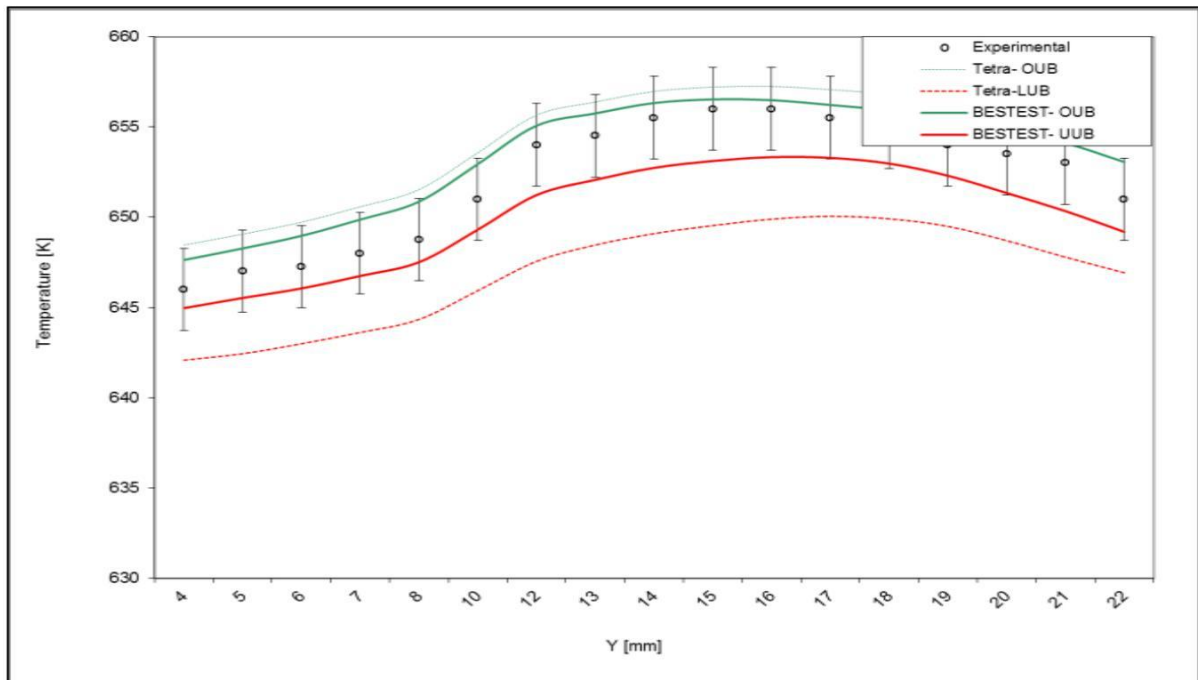
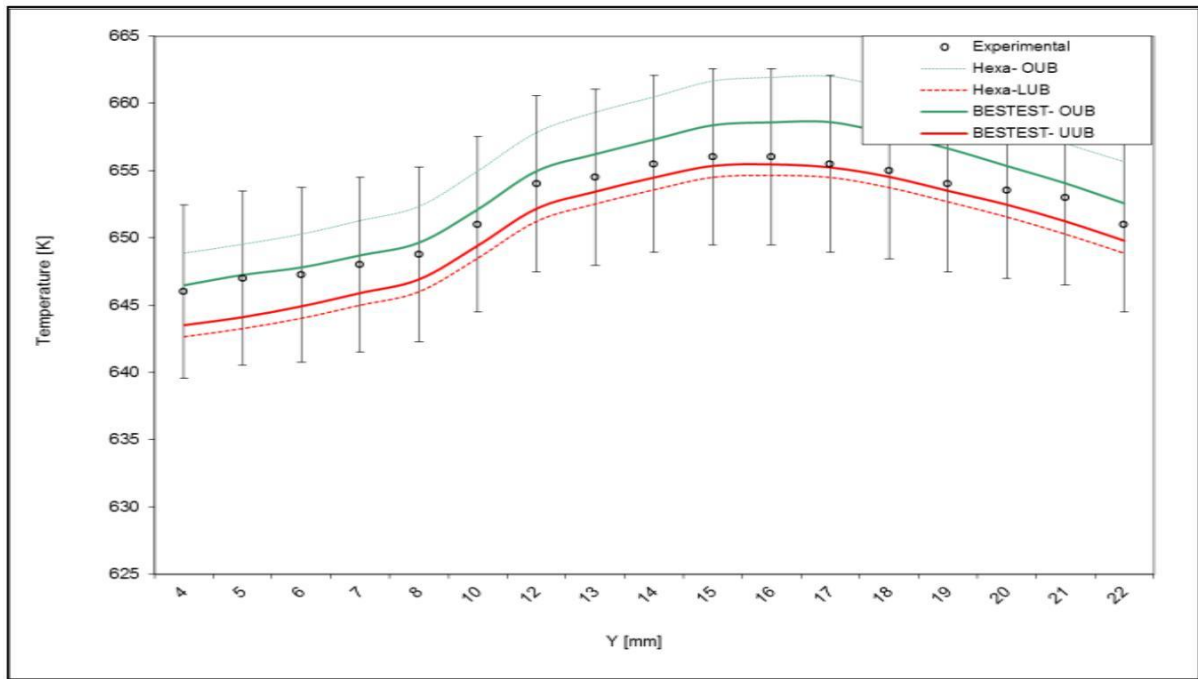


Abbildung 94: Experimentelle Daten mit ihren relativen Ungenauigkeiten sowie den oberen und unteren Unsicherheitsbänder der CFX und BESTEST Berechnungen (hexagonal Bild oben; tetragonal Bild unten) der Datenreihe M104.DAT

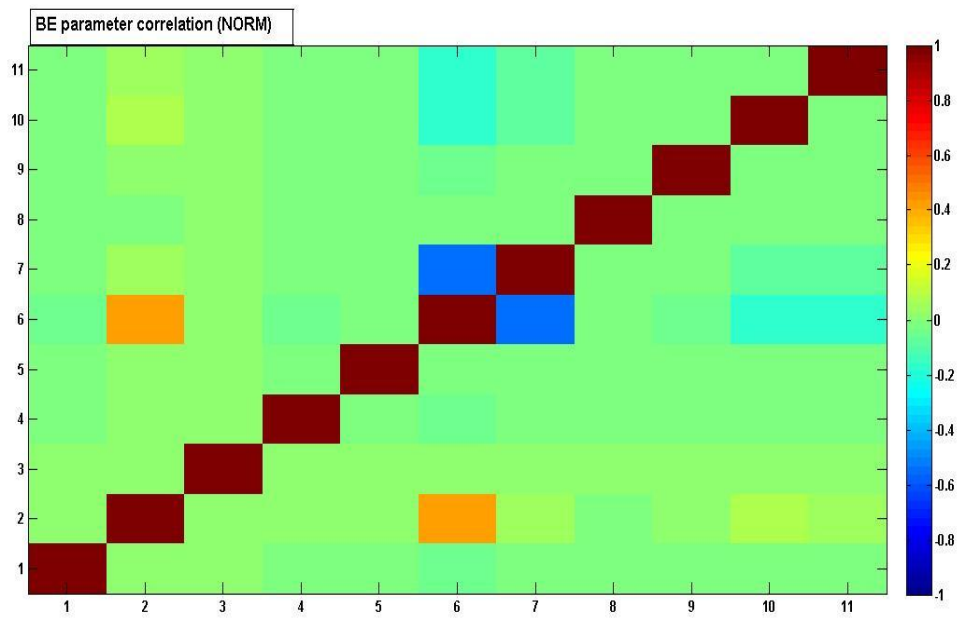
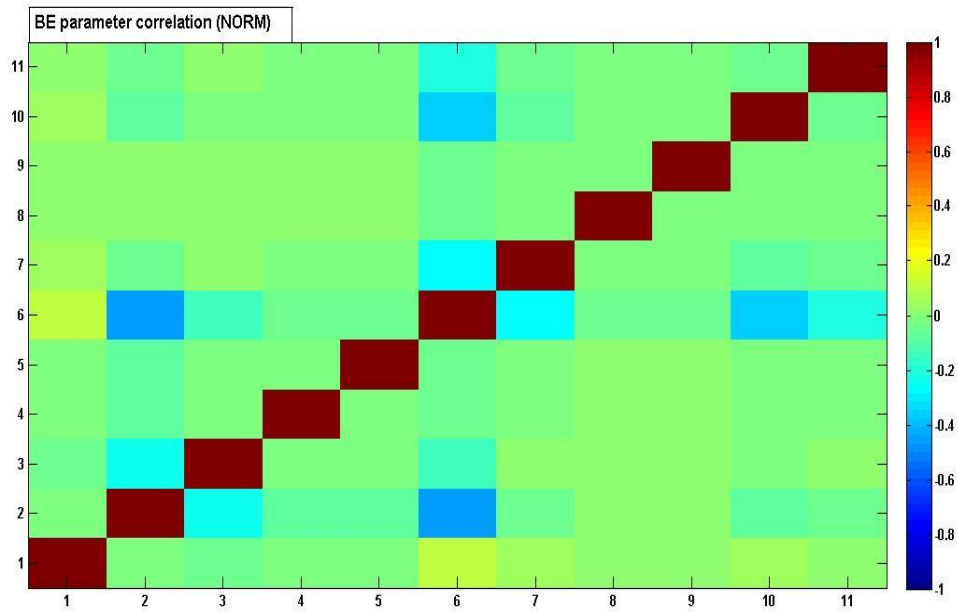


Abbildung 95: Bestmögliche Parameter Korrelation der hexagonalen (Bild oben) und tetragonalen (Bild unten) Berechnung für die Datenreihe M332.DAT in normalisierter Darstellung

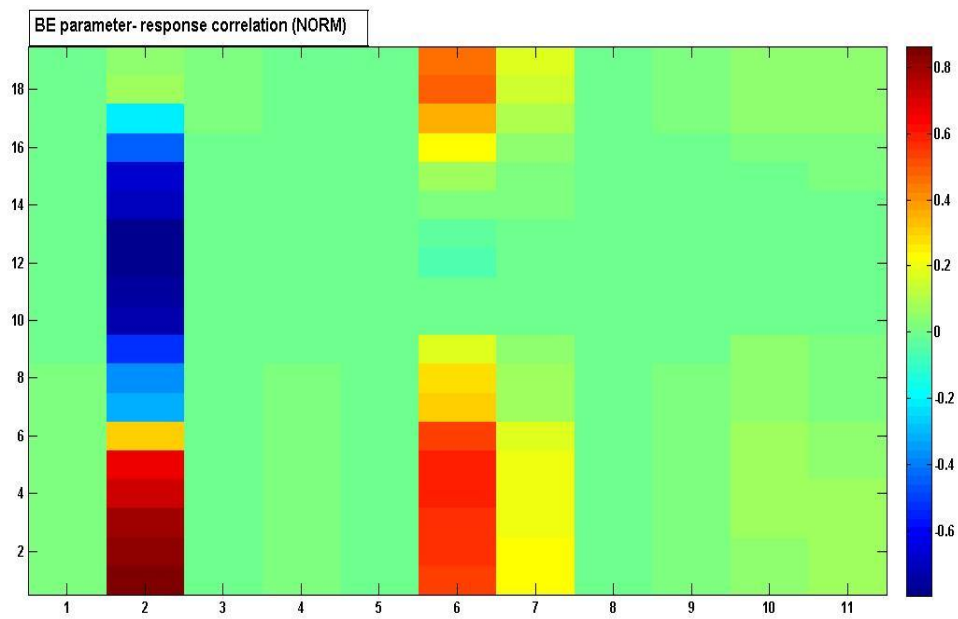
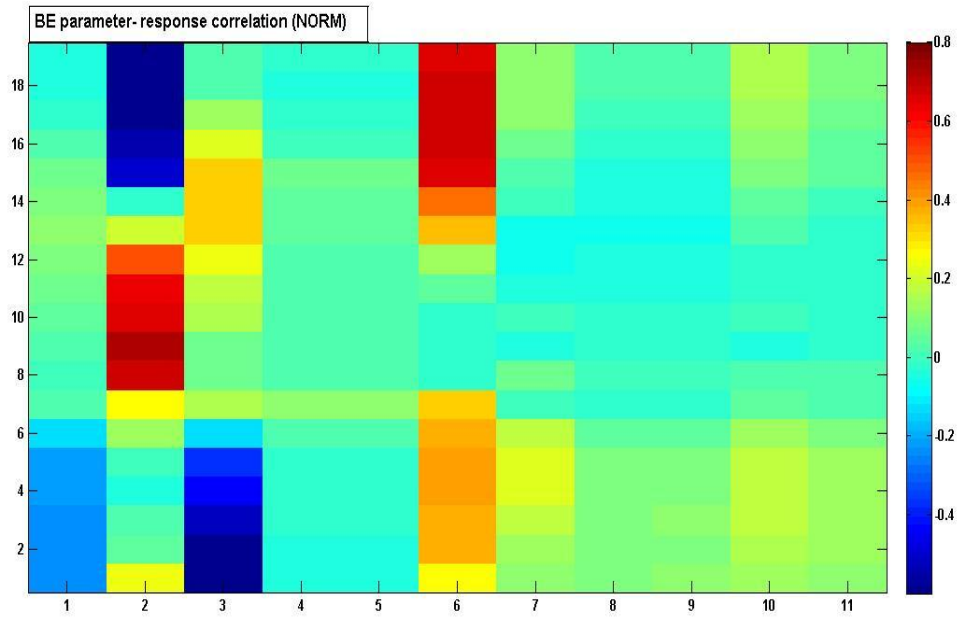


Abbildung 96: Bestmögliche Parameter- Antwort Korrelation der hexagonalen (Bild oben) und tetragonalen (Bild unten) Berechnung für die Datenreihe M332.DAT in normalisierter Darstellung

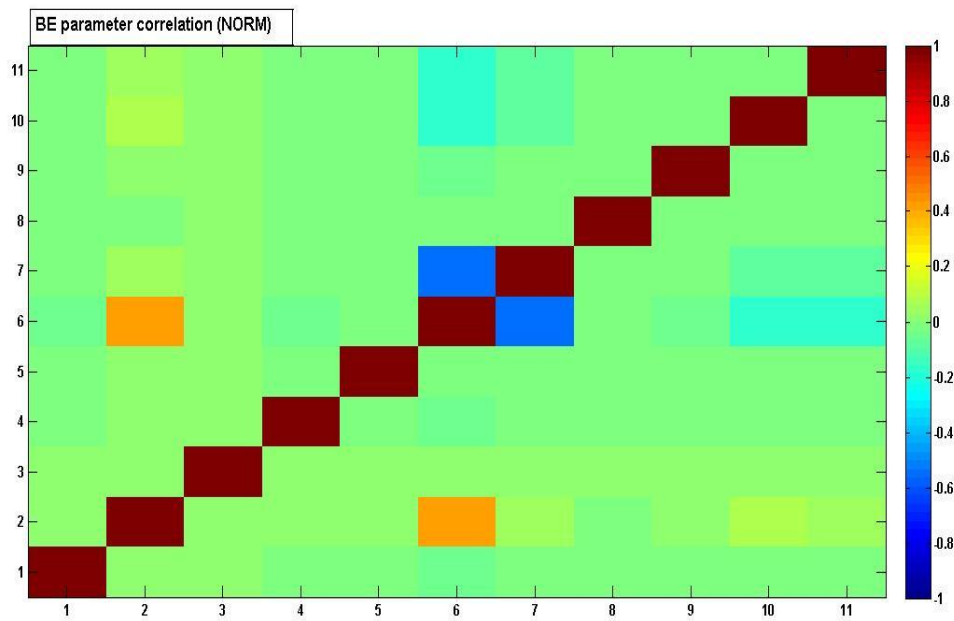
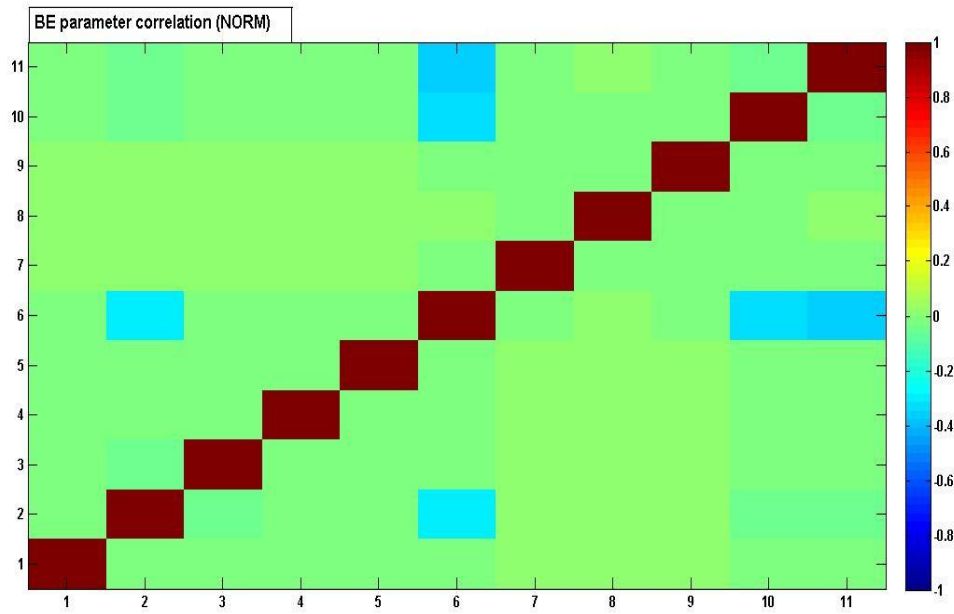


Abbildung 97: Bestmögliche Parameter Korrelation der hexagonalen (Bild oben) und tetragonalen (Bild unten) Berechnung für die Datenreihe M104.DAT in normalisierter Darstellung

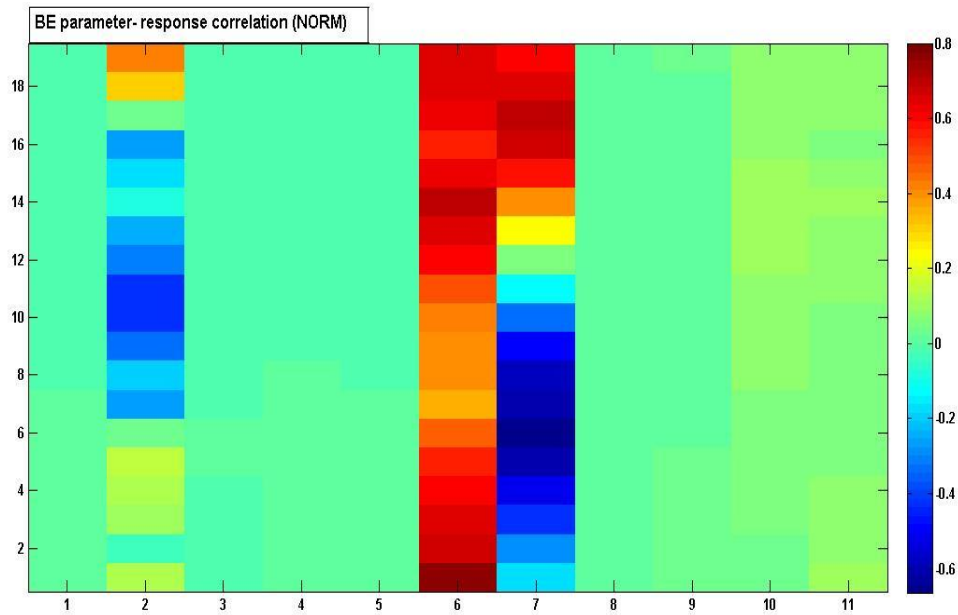
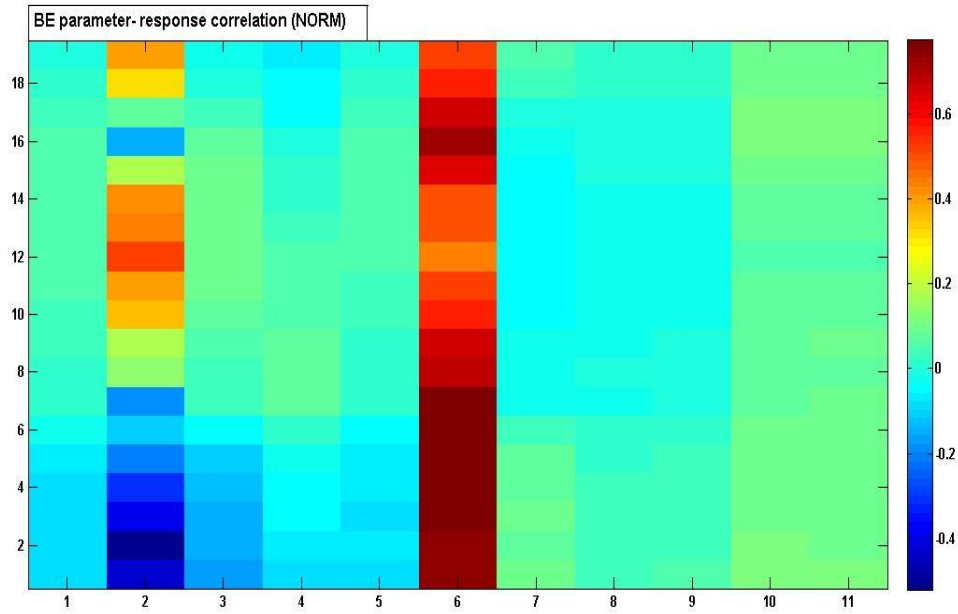


Abbildung 98: Bestmögliche Parameter- Antwort Korrelation der hexagonalen (Bild oben) und tetragonalen (Bild unten) Berechnung für die Datenreihe M104.DAT in normalisierter Darstellung

Parameter	Nominal	Hexa	Tetra	Nominal	Hexa	Tetra	Nominal	Hexa	Tetra
	F04Q12B.DAT			F31Q12B.DAT			F37QWS4A.DAT		
α_1	0.09 ± 7%	0.089 ± 4.00%	0.09 ± 3.99%	0.09 ± 7%	0.089 ± 3.96%	0.089 ± 3.98%	0.09 ± 7%	0.089 ± 4.00%	0.09 ± 3.87%
α_2	1.44 ± 7%	1.38 ± 2.88%	1.44 ± 1.38%	1.44 ± 7%	1.42 ± 3.81%	1.43 ± 3.99%	1.44 ± 7%	1.40 ± 3.33%	1.43 ± 3.96%
α_3	1.92 ± 7%	1.90 ± 3.92%	1.92 ± 4.02%	1.92 ± 7%	1.91 ± 3.95%	1.91 ± 3.98%	1.92 ± 7%	1.91 ± 4.00%	1.92 ± 3.88 %
α_4	1.00 ± 7%	0.99 ± 3.99%	1.00 ± 4.00%	1.00 ± 7%	0.99 ± 3.96%	0.99 ± 3.98%	1.00 ± 7%	0.99 ± 4.00%	1.00 ± 3.87%
α_5	1.30 ± 7%	1.30 ± 3.99%	1.30 ± 3.99%	1.30 ± 7%	1.29 ± 3.96%	1.29 ± 3.98%	1.30 ± 7%	1.30 ± 3.99%	1.30 ± 3.87%
α_6	1.91 ± 7%	1.91 ± 3.37%	1.91 ± 2.61%	0.90 ± 7%	0.90 ± 4.27%	0.89 ± 4.25%	0.99 ± 7%	0.97 ± 3.62%	0.98 ± 3.98%
α_7	0.90 ± 7%	0.88 ± 5.53%	0.90 ± 7.13%	0.97 ± 7%	0.90 ± 5.71%	0.96 ± 6.20%	0.90 ± 7%	0.89 ± 6.99%	0.89 ± 5.34%

α_8	49.38 ± 7%	49.32 ± 1.97%	49.38 ± 2.00%	7.79 ± 7%	7.77 ± 1.97%	7.79 ± 1.93%	7.58 ± 7%	7.55 ± 1.96%	7.55 ± 1.92%
α_9	49.00 ± 7%	48.94 ± 1.97%	49.00 ± 1.99%						
α_{10}	48.42 ± 7%	48.32 ± 1.89%	48.42 ± 1.97%						
α_{11}	49.74 ± 7%	48.64 ± 1.89%	49.81 ± 1.96%						
	M332.DAT			M104.DAT					
α_1	0.09 ± 7%	0.089 ± 3.93%	0.09 ± 3.99%	0.09 ± 7%	0.089 ± 3.99%	0.089 ± 4.00%			
α_2	1.44 ± 7%	1.37 ± 2.54%	1.34 ± 1.26%	1.44 ± 7%	1.42 ± 3.73%	1.42 ± 3.76%			
α_3	1.92 ± 7%	1.90 ± 3.68%	1.92 ± 3.99%	1.92 ± 7%	1.91 ± 3.98%	1.91 ± 4.00%			
α_4	1.00 ± 7%	0.99 ± 4.00%	1.00 ± 3.99%	1.00 ± 7%	0.99 ± 3.99%	1.00 ± 3.99%			

α_5	1.30 $\pm 7\%$	1.29 $\pm 4.00\%$	1.30 $\pm 3.99\%$	$1.30 \pm 7\%$	1.29 $\pm 3.99\%$	1.29 $\pm 3.99\%$			
α_6	1.94 $\pm 7\%$	1.91 $\pm 2.51\%$	1.95 $\pm 2.47\%$	$0.49 \pm 7\%$	0.48 $\pm 2.19\%$	0.49 $\pm 2.13\%$			
α_7	0.90 $\pm 7\%$	0.89 $\pm 6.84\%$	0.90 $\pm 6.39\%$	$0.90 \pm 7\%$	0.90 $\pm 6.97\%$	0.88 $\pm 5.48\%$			
α_8	50.80 $\pm 7\%$	50.82 $\pm 1.99\%$	50.79 $\pm 1.99\%$	$10.80 \pm 7\%$	10.80 $\pm 1.99\%$	10.80 $\pm 1.99\%$			
α_9	50.70 $\pm 7\%$	50.72 $\pm 1.99\%$	50.70 $\pm 1.99\%$	$10.70 \pm 7\%$	10.70 $\pm 1.99\%$	10.70 $\pm 1.99\%$			
α_{10}	50.40 $\pm 7\%$	50.31 $\pm 1.92\%$	50.44 $\pm 1.97\%$	$10.70 \pm 7\%$	10.69 $\pm 1.95\%$	10.71 $\pm 1.95\%$			
α_{11}	50.70 $\pm 7\%$	50.66 $\pm 1.97\%$	50.72 $\pm 1.97\%$	$10.70 \pm 7\%$	10.69 $\pm 1.95\%$	10.71 $\pm 1.96\%$			

Tabelle 18: Nominale und BESTEST Modellparameter der radialen Temperaturverteilung (x/d) für den Impulsstrahl

4. Zusammenfassung der Ergebnisse

In der hier vorgestellten Arbeit wird die mathematische Methode von [[Cacuci und Ionescu- Bujor, 2010b](#)] unverändert für eine prädiktiv simultane Kalibrierung von Modellparametern und Systemantworten verwendet. Die Reduzierung der enthaltenen Unsicherheiten in den Parametern und Antworten und einer Anpassung an die experimentellen Messungen, mit dem Ziel die bestmöglich beurteilbaren Ergebnisse zu erhalten, erfolgt parallel. Der Nachweis der Eignung dieser Methode wird in dieser Arbeit durch drei Beispielsysteme verwirklicht. Diese beinhalten zum einen reale Betriebsbedingungen und zum anderen Arbeitsmittel die gängig für kerntechnische Einrichtungen sind. Weiterhin sind alle drei Experimente durch eine Zeitabhängigkeit charakterisiert.

Im ersten handelt es sich dabei um eine Bündelgeometrie eines Siedewasserreaktors der OECD/ NRC BWR Full- Size- Fine- Mesh Bundle. Die Sicherheitsanalysen für dieses transiente Großanlagenexperiment, mit zeitabhängigen Zuständen als Randbedingungen, haben eine große Bedeutung für die Verbesserung von Rechencodes. Die CFD Berechnung des BFBT Benchmarks werden in dieser Arbeit mittels zweier unterschiedlicher Programme durchgeführt. Zum einen handelt es sich um einen thermohydraulischen Corecode FLICA4, ein Produkt der CEA ([Commissariat a l' energie atomique, Zentrum für Atomenergie, Frankreich](#)) und zum anderen um das weltweit bekannte und anerkannte CFD Programm ANSYS CFX. Die Berechnungen der komplexen Mehrphasen-Strömungen mittels der verwendeten Rechencodes unter dem Bestreben realistische Ergebnisse in Bezug auf Design und Sicherheit zu erzielen, bringen Umsetzungsschwierigkeiten mit sich. Die Modellierungen können, je nach verwendeter Software, durch unterschiedliche, jedoch stets komplexe Gleichungen und Parameter beschrieben werden. Die enthaltenen Lastwechselforgänge des BFBT Benchmarks wirken sich signifikant auf die eingesetzten Modellparameter aus. Dies wird insbesondere für die CFX Berechnungen deutlich. Die Gegenüberstellung beider Codes zeigt deutliche Vorteile für FLICA4, das die experimentellen Messungen zufriedenstellend wiedergeben kann. Auch die Durchführbarkeit der gesamten Messstrecke wird mit diesem Programm realisiert. Die Berechnungszeiten der FLICA4 Analyse beschränken sich auf mehrere Minuten. Im Vergleich hierzu betragen die CFX Auswertungen mehrere Tage bis Wochen, obwohl hier nur ein Teil der Teststrecke analysiert wird. Die Notwendigkeit der Kalibrierung gewinnt durch diese durchgeführte Analyse stark an Bedeutung. Das thermohydraulische Corecode FLICA4 ist durch langjährige Validierungsprogramme permanent verbessert worden und beinhaltet weitaus geeignetere Korrelationen für eine Beschreibung der physikalischen Phänomene in

einem Reaktordruckbehälter als das allgemeine dreidimensionale Programm CFX. Es ist anzunehmen, dass die Standardwerte der Modellparameter von FLICA4 im Vergleich zu CFX von vorne herein besser angepasst sind. Diese Annahme kann, bis auf einzelne Parameter, anhand der BESTEST Berechnungen für die FLICA4 Untersuchung belegt werden. Im Wesentlichen wird der Parameter aus der Dittus-Bölder- Korrelation für die FLICA4 Berechnung stark kalibriert. Die weiteren Modellparameter erfahren geringere bis minimale Anpassungen. Das Verdampfungsmodell des CFX Codes kann weniger kalibriert werden. Zu starke Variationen in den Parametern führen oftmals zu enormen Instabilitäten und letztendlich zu Berechnungsabbrüchen. Als Beurteilung der Kalibrierungsprozesse und als Maß der Berechnungsgüte liegen die Konsistenz- Indikatoren für die FLICA4 Analysen deutlich im Akzeptanzbereich oder dem so genannten Mittelbereich. Die CFX Berechnungen liegen hier außerhalb.

Auch die Untersuchung der prägnanten Parameter stellt den Unterschied zwischen den FLICA4 und CFX Berechnungen durch den Beurteilungsindikator dar. Für die FLICA4 Analysen liegen diese bei nahezu 1 und belegen die ideale Datenassimilierung und Kalibrierung der Prozesse. Signifikante Verbesserungen der Systemantworten für die FLICA4 Berechnungen werden für alle drei Messebenen erzielt. Dabei folgt eine minimale Anpassung des Massenstroms und der Heizleistung. Auch für die CFX Berechnungen und dem Vorhaben der Kalibrierung der prägnanten Parameter werden deutliche Erfolge erzielt. Diese unterliegen jedoch weitgehend denen der FLICA4 Analysen.

Die Verwendung des Rechencodes ANSYS CFX ist durch die Analyse des BFBT Benchmarks, durch Aneignungen von Kenntnissen und Modellverständnissen, für die Auftriebsstrahlen des TEFLU Experiments ermöglicht geworden. Für die TEFLU Untersuchung, die als Kühlmittel flüssiges Natrium enthalten, ist die Auswahl eines geeigneten Turbulenzmodells und die Berücksichtigung der Randbedingungen der ausgewählten Testfälle von primärer Bedeutung. Zur Erzielung von zufriedenstellenden Ergebnissen werden vor allem die Natriumstoffdaten eingelesen und eine Reihe von Parametern angepasst. Die Nutzung des Standardturbulenzmodells, SAS-SST, liefert in den Berechnungen nur partiell gute Lösungen. Die Notwendigkeit, die Systemparameter für das Flüssigmetall anzupassen, wird sowohl in den Geschwindigkeits-, als auch in den Temperaturuntersuchungen deutlich. Enorm starken Einfluss hat dabei die turbulente Prandtlzahl und die Wirbelviskosität. Zufriedenstellende Ergebnisse für den Impulsstrahl, den schwachen, sowie starken Auftriebsstrahl können vorab nur durch Anpassungen beider Größen erfolgen. Dieser Tatbestand, zu jedem Berechnungsfall

die bestmöglichen bzw. erforderlichen Parameter zu beurteilen und zu ermitteln kann mit der Methode nach [Cacuci und Ionescu- Bujor, 2010b] realisiert werden. Die Verwendung der Methode ermöglicht für die CFX Berechnungen der Geschwindigkeitsverteilungen, neben der Assimilierung der Systemantworten, vor allem die Reduzierung der Unsicherheiten der verwendeten Systemparameter. Diese werden insbesondere für den Impuls- und schwachen Auftriebsstrahl auf den Messebenen x/d und $x/d=20$ deutlich. Für die Geschwindigkeitsverteilung werden somit signifikante Verbesserungen durch die BESTEST Berechnungen erzielt.

Der Versuch mit Hilfe der mathematischen Methode eine Verbesserung der Temperaturverteilungen zu erzielen bleibt stets ohne Erfolg. Die ausgewählten Parameter weisen nur sehr schwache Sensitivitäten auf. Folge dessen bleiben die Systemantworten und Unsicherheiten nahezu gleich. Die Ursache für die nicht zufriedenstellenden Verbesserungen der BESTEST Berechnungen liegt in dem Wärmeübertragungsmodell von CFX, das für Stoffe mit sehr geringen molekularen Prandtl- Zahlen (z.B. Natrium $Pr \approx 0.006$) lediglich die Wärmeleitung berücksichtigt. Die Konvektion des turbulenten Wärmetransports, bei unbeheizter Wärmequelle, wird dabei vernachlässigt. Diese Ursache kann mit der durchgeführten TEGENA Berechnung nachgewiesen werden. Lösungswege für das vorhandene Problem mit weiterentwickelten Korrelationen bzw. Modellen, die diese Problematik umgehen und eine geeignetere Möglichkeit darstellen, bringen jedoch eine Reihe von unbekanntem Größen mit sich. Diese müssen allerdings vorab experimentell bestimmt werden. Im Vergleich zu den Geschwindigkeitsverteilungen (weitgehend im Mittelbereich und teilweise ideale Übereinstimmung) liegen die Anpassungsindikatoren der Temperaturverteilungen somit um ein Vielfaches tiefer.

Die offenstehenden Fragen des TEFLU Experimentes werden durch die TEGENA Berechnungen identifizierbar und können die Anwendbarkeit der mathematischen Methode nachweisen. Die CFX Berechnungsergebnisse der TEGENA 1 als auch der TEGENA 2 Testreihen für die erstellten Modelle sind sehr unterschiedlich. Durch die Gegenüberstellungen der generierten Gitter und den Messdaten wird gezeigt, dass sich die Eignung der jeweiligen Rechengitter stark unterscheidet. In Gleichlastfällen und Reynoldszahlen von $Re \approx 60 \cdot 10^3$ behauptet sich das hexagonale Gitter gegenüber dem tetragonalen. Das tetragonale Gitter stellt in den Gleichlastfällen den zu erwartenden, reellen, abfallenden Temperaturverlauf dar. Für die Schiefastfälle bewährt sich das tetragonale Gitter deutlich positiver und zeigt in nahezu allen Berechnungen eine geringere Differenz zu den experimentellen Daten. Auch die Temperaturgradienten werden mit diesem Gitter besser erfasst. Die Problematik eines zu frühen oder zu späten Ablösens, durch das $k-\varepsilon$ Turbulenzmodell, zeigt

sich deutlich in den wandnahen Bereichen. Die BESTEST Berechnungen verbessern die Systemantworten beider Rechenmodelle signifikant. Auch die Reduzierung der jeweiligen Unsicherheiten ist erheblich. Die Ergebnisse der prädiktiven bestmöglich eingeschätzten Systemantworten liegen dabei nahezu gleich. Dadurch werden für beide Gitter BESTEST Ergebnisse erzeugt, die für weitere Anwendungen als beständig betrachtet werden können.

Die Anwendbarkeit und der Nachweis der Eignung der Methode nach [[Cacuci und Ionescu- Bujor, 2010b](#)] werden anhand der ausgewählten Beispielsysteme in dieser Arbeit erstmals bestätigt. Dies ist auch für die Verwendbarkeit der Rechenprogramme, in Zusammenhang mit der Methode, gültig. Die ermittelten prädiktiven Einschätzungen stellen einen deutlichen Fortschritt in der Assimilierung der numerischen Berechnungen und Reduzierung der Unsicherheiten in den Parametern und Antworten für alle durchgeführten Analysen dar. Eine Quantifizierbarkeit ergibt sich für die Deckungsgleichheit zwischen den experimentellen Daten und den bestmöglichen Einschätzungen der Analysen.

Durch die Arbeit wird die allgemeine Verwendbarkeit der Methode nach [[Cacuci und Ionescu- Bujor, 2010b](#)] bestätigt und bietet die Möglichkeit die Methode in verschiedenen wissenschaftlichen und industrie Bereichen zu nutzen.

5. Schlussfolgerung und Ausblick

Die in dieser Arbeit durchgeführten Analysen zeigen auf, dass CFD Berechnung auf dem aktuellen Wissenstand des Entwicklers bzw. des Anwenders und alle enthaltenen Modelle und Parametergrößen in der Regel auf dem Stand der Forschung basieren. Die Nachbildung von physikalischen Phänomenen beruht somit auf einer Abschätzung von Wissen und Erfahrung. Eine Erweiterung dieser beiden wichtigen Eigenschaften von Wissen und Erfahrung für nicht vorhandene oder ausgeweitete Analysen ist von Beginn an mit Unsicherheiten behaftet. Der Ausbau von CFD Codes (wie auch in dieser Arbeit durchgeführt) für Untersuchungen mit Flüssigmetallen ist ein Beispiel hierfür. Die meisten Rechenprogramme basieren auf Erfahrungen und Wissensaneignungen, sowie den daraus resultierenden Modellen für die Untersuchungen mit bekannten und kostengünstigen Arbeitsmedien. Eine Gewährleistung für realistische Wiedergaben beliebiger Medien erfordert, auch bei Weiterentwicklungen und Designveränderungen, stets zuverlässige und sichere

Ergebnisse. Diese neuen Resultate werfen eine Reihe von ungewöhnlichen Fragen auf, die durch bekannte und erfahrungsgemäß richtig gekennzeichnete Aufzeichnungen und Berechnungen nicht belegt werden können. In solchen Fällen sind experimentelle Daten erforderlich. Je komplexer und undurchsichtiger das vorliegende Problem ist, desto teurer werden die erforderlichen Nachweise. Zusätzliche Langzeitversuche für unumgängliche Informationen, wie z.B. die Untersuchungen von Materialien unter Dauerbelastung, können die Kosten rapide anheben.

Der Bedarf an Methoden mit der Fähigkeit Prognosen von bekannten und extrapolierten Analysebereichen über mögliche Zustände, Verhaltensmerkmale und Charaktere abzugeben wird immer deutlicher. Entsprechende Arbeiten die sich insbesondere mit dem Themengebiet der Extrapolation befassen, können im Anschluss an diese Arbeit folgen. Ein weiteres ungelöstes Problem der hier vorgestellten mathematischen Methode ist die Vermeidung der hohen Rechenzeit für die Invertierung der Kovarianzenmatrix mit dem Vektor der jeweiligen Abweichung zwischen den berechneten und experimentell gemessenen Daten. So besteht der Bedarf Methoden für eine effiziente Umkehrung bei gleichzeitiger Reduzierung der Matrizendimensionen zu entwickeln.

Weitere offene Forschungsaufgaben auf diesem Themengebiet sind für Berechnungen, die unter der Erweiterung der vorgestellten expliziten Formeln nicht nur die Sensitivitäten-Matrix, hier in erster Ordnung, sondern auch die Hessesche-Matrix, somit dann als zweite Ordnung, für die Berechnung der Systemantworten miteinbeziehen. Eine weitere ungelöste Forschungsaufgabe ist die Aufhebung der charakteristischen Limitation der Gaußverteilungen, die im Grunde genommen bis heute alle Assimilierungs- und Kalibrierungsprozeduren kennzeichnet. Eine derartige Umsetzung kann eine vielversprechende Möglichkeit darstellen, die zum entscheidenden Verständnis für zusammenhängende nichtlineare physikalische Probleme (die zum Beginn einer Untersuchung keine Zusammenhänge aufzeigen) beitragen kann. In Folge dessen könnten auch damit einhergehende Unsicherheiten und ihr Wachstum verstanden und erklärt werden.

Das Ziel dieser Vorhaben verfolgt eine Kostenreduzierung von aufwendigen und intensiven experimentellen Vorhaben durch möglichst reelle numerische Berechnungen. Realisiert werden können Verbesserungen und Weiterentwicklungen von Programmen nur durch Validierungen. Abzuwägen ist dabei, in welchem Umfang in Vorhersagen von nicht validierten Daten vertraut werden kann.

Nomenklatur

α^{be}	bestmögliche Einschätzung der Systemparameter
α_1	Konstante aus dem SAS SST Turbulenzmodell
α_i	Systemparameter
β_1	Konstante aus dem SAS SST Turbulenzmodell
β_2	Konstante aus dem SAS SST Turbulenzmodell
β^*	Koeffizient aus dem SAS SST Turbulenzmodell
Γ_k	Wärmezufuhr an die jeweilige Phase
ε	Isotrope Dissipationsrate
ζ_2	Konstante aus dem SAS SST Turbulenzmodell
η	dynamische molekulare Viskosität
η_t	turbulente dynamische Wirbelviskosität
λ	Lagrange- Multiplikator
λ	Wärmeleitfähigkeit
μ	Viskosität
μ	Zeitknoten
ν	Zeitknoten
ν	Kinetische molekulare Viskosität
ν_t	Turbulente kinetische Wirbelviskosität
Π_k	Massentransfer zwischen den jeweiligen Phasen
ρ_k	Dichte der jeweiligen Phase
σ_t	Turbulente Schmidt- Zahl des Turbulenzmodells
σ_Φ	Konstante aus dem SAS SST Turbulenzmodell
σ_k	Turbulente Schmidt- Zahl $k - \varepsilon$ Turbulenzmodell
σ_{k1}	Konstante aus dem SAS SST Turbulenzmodell
σ_{k2}	Konstante aus dem SAS SST Turbulenzmodell
$\sigma_{\omega 1}$	Konstante aus dem SAS SST Turbulenzmodell
$\sigma_{\omega 2}$	Konstante aus dem SAS SST Turbulenzmodell
σ_ε	Turbulente Schmidt- Zahl $k - \varepsilon$ Turbulenzmodell
τ	Viskose Spannungstensor
χ^2	Konsistenzen- Qualitätskriterium- Indikator
ω	Charakteristische Frequenz des Turbulenzmodells

Nomenklatur

a_1	Konstante aus dem SAS SST Turbulenzmodell
a_2	Konstante aus dem SAS SST Turbulenzmodell
A	Identitätenmatirx
A_l	Phasenanteil des Kühlmittels
A_k	Maximale Flächenfraktion durch den Blaseneinfluss
A_{lam}	Laminarer Koeffizient aus dem FLICA4 Reibungsmodell
A_p	Partikelfläche
A_{turb}	Turbulenter Koeffizient aus dem FLICA4 Reibungsmodell
A_v	Dampfblasenanteil
B	Identitätenmatirx
B	Koeffizient aus dem FLICA4 Reibungsmodell
$B1$	Vorratsbehälter
$B2$	Natriumbehälter
c_D	Widerstandsbeiwert
c_{LF}	Liftkoeffizient
c_p	Wärmekapazität
c_{CD}	Impulstransferkoeffizient der turbulenten Dispersionskraft
c_{TD}	Beiwert der turbulenten Dispersionskraft
c_{VM}	Liftkraftbeiwert
c_{WL}	Beiwert der Wandkraft
I	Identitätsmatirx
C	Konstante aus dem SAS SST Turbulenzmodell
C_α	Korrelationen zwischen den Parametern
$C_{\varepsilon 1}$	Koeffizient aus dem $k - \varepsilon$ Turbulenzmodell
$C_{\varepsilon 2}$	Koeffizient aus dem $k - \varepsilon$ Turbulenzmodell
C_m	Korrelation zwischen den Messaufzeichnungen
$C_{r\alpha}$	Korrelation zwischen den Antworten und Parametern
C_{rc}	Korrelation zwischen den berechneten Antworten
C_μ	Koeffizient aus dem $k - \varepsilon$ Turbulenzmodell
d_{ref}	Referenzblasendurchmesser
d_w	Blasenablösedurchmesser
D	Identitätenmatirx
D	Durchmesser des äußeren Kanals der TEFLU Teststrecke

D	Durchmesser des Brennstäbe der TEGENA Anlage
D_k	Deformationstensor der jeweiligen Phase
d	Durchmesser des inneren Kanals der TEFLU Teststrecke
e_k	Innere Energie der jeweiligen Phase
E	Heizgerät
$E\ddot{o}$	Etvöszahl
E_k	Gesamte Energie der jeweiligen Phase
f	Ablöserate der Blasen
$F1$	Induktives Messgerät
$F2$	Induktives Messgerät
F_k^d	Widerstandskraft
F_k^{LF}	Liftkraft
F_k^{LUB}	Wandkraft
F_k^{TD}	Turbulente Dispersionskraft
F_k^{VM}	Virtuelle Massenkraft
Fr	Froudzahl
g	Erdbeschleunigung
H_k	Gesamte Enthalpie der jeweiligen Phase
J_α^v	Vektor der Systemparameter
J_r^v	Vektor der Systemantworten
k	Kinetische Energie der Turbulenzmodelle
k	Kennzeichnung der jeweiligen Phase
KF	Kaltfalle
t_w	Blasenverweilzeit
l	Gesamthöhe des Düsenblocks
m	Koeffizient der Wandverdampfungsdichte
\dot{m}	Massenstrom
M_k	Massendiffusionsterm
M_k	Impulstransfer der Phase
M_k'	Austauschterm der Phasen
ME	Messebene der TEGENA 1 Testreihe
Mo	Morten Zahl
MP	Messebene der TEGENA 2 Testreihe
n_p	Anzahl der Partikel in einem Volumen

N_α	Anzahl der Systemparameter
N_r	Anzahl der Systemantworten
Nu	Nusseltzahl
Nu_0	Konstante Nusseltzahl
q_k	Wärmestromdichte der jeweiligen Phase
Q	Heizleistung
Q_c	Konvektiver Wärmestrom
Q_L	Wärmestrom zum Aufheizen des Kühlmittel
Q_q	Wärmeabschreckung
Q_{ior}	Gesamte Heizleistung
Q_W	Wärmestrom an der Wand
P	Mittenabstand der Heizstäbe im BFBT Benchmark
p	Koeffizient der Wandverdampfungsichte
$p(z C)$	Maximale Entropie Algorithmus
P	Ausgangsdruck
P	Pumpe
P	Mittenabstand der Brennstäbe der TEGENA Anlage
$P1$	TEGENA 2 Sonde
$P2$	TEGENA 2 Sonde
Pr	Prandtlzahl
$P_{\varepsilon b}$	Einflussgröße auf die Auftriebskraft
P_{kb}	Einflussgröße auf die Auftriebskraft
Pr_t	Turbulente Prandtlzahl
QH	Heizleistung der Brennstäbe der TEGENA Anlage
r^{be}	Bestmögliche Einschätzung der Systemantworten
R	Systemantworten
Re	Reynoldszahl
Re_a	Reynoldszahl des äußeren Kanals
Re_i	Reynoldszahl des inneren Kanals
Re_{lam}	Laminare Reynoldszahl
Re_{turb}	Turbulente Reynoldszahl
S	Sensitivitätsmatrix
$S1$	TEGENA 1 Sonde
$S2$	TEGENA 1 Sonde
S_k	Quellterm

Nomenklatur

$SAS1$	Koeffizient des Turbulenzmodells
$SAS2$	Koeffizient des Turbulenzmodells
$SAS3$	Koeffizient des Turbulenzmodells
t_w	Blasenverweilzeit
T_l	Kühlmitteltemperatur
T_{sat}	Saturationstemperatur
T_w	Wandtemperatur
TC	Thermoelemente der TEGENA2 Sonde
TE	Thermoelemente der TEGENA1 Sonde
ΔT	Temperaturdifferenz
ΔT_{Sat}	Saturationstemperatur
\bar{T}_a	Mittlere Temperatur des äußeren Kanals
\bar{T}_i	Mittlere Anströmgeschwindigkeit des inneren Kanals
$\overline{\Delta T}$	Mittlere Temperaturdifferenz
u_k	Strömungsgeschwindigkeit der jeweiligen Phase
u_r	Relative Geschwindigkeiten der Phasen zueinander
\overline{U}_a	Mittlere Anströmgeschwindigkeit des äußeren Kanals
\overline{U}_i	Mittlere Anströmgeschwindigkeit des inneren Kanals
V_p	Partikelvolumen
VP	Vakuumpumpe
W	Abstand von Brennstab und Kanalwand der TEGEN Anlage
x / d	Dimensionsloser Abstand entlang der axialen Symmetrieachse
$x / d = 6$	Dimensionsloser Abstand auf der radialen Messebene
$x / d = 20$	Dimensionsloser Abstand auf der radialen Messebene
y^+	Dimensionsloser Wandabstand
z^{be}	Zeitknoten

Akronyme / Abkürzungen

ANSYS CFX	Weltweit bekannter und anerkannter dreidimensionaler Code für die Fluidodynamik
ATHLET	Thermohydraulischer System Code ((Analysis of THERmal-hydraulics of LEaks and Transients
ASAP	Adjoint Sensitivity Analyze Procedure
BE	Best estimate
BESTEST	Best estimate
BFBT	Full- Size Fine- Mesh Bundle Tests
BWR	Boiling Water Reactor
CAD	Computer Aided Design
CALC	Calculation with FLICA4 or ANSYS CFX
CALCTE21_hex	Calculation with ANSYS CFX for thermo element 21 hexa
CALCTE24_hex	Calculation with ANSYS CFX for thermo element 24 hexa
CALCTE21_tet	Calculation with ANSYS CFX for thermo element 21 tetra
CALCTE24_tet	Calculation with ANSYS CFX for thermo element 24 tetra
CATHARE	Code for Analysis of THERmalhydraulics during an Accident of Reactor and safety Evaluation
CEA	Commisariat a l'Energie Atomique, France
CFD	Computational Fluid Dynamics
CT	Computertomographie
EXP	Experimental
FLICA4	A three-dimensional two-phase flow computer code with advanced numerical methods for nuclear applications
IKR	Institut für Kerntechnik und Reaktorsicherheit
JNES	Japan Nuclear Energy Safety
KIT	Karlsruher Institute für Technologie
LUB	Lower Uncertainty Band for the BFBT and TEFLU Calculations
MAPLIB	Ein Programm zur Bereitstellung von Stoffdaten
ME6	Messebene 6 der TEGENA1 Testanlage
MP6	Messebene 6 der TEGENA2 Testanlage
MPP	Miniatur- Permanentmagnet- Potentialsonden
MATLAB	The Language for technical Computing
NEA	Nuclear Energy Agency
NRC	Nuclear Regulatory Commission
NUPEC	Nuclear Power Engineering Corporation of Japan
OUB	Obere Unsicherheiten Bänder der TEGENA Analyse
OECD	Organisation for Economic Co-operation and Development
ProEngineer	Is a parametric, integrated 3D CAD/CAM/CAE solution created by Parametric
PSU	Pennsylvania State University

RELAP	Reactor Excursion and Leak Analysis Program
SAS SST	Turbulence model
SFR	Sodium cooled Fast Reactor
SNR	Schneller Natriumgekühlter Reaktor
TEFLU	Temperatur Fluktuationen
TEGENA	Temperatur Geschwindigkeit Natrium
TEGENA1	Temperatur Geschwindigkeit Natrium der ersten Teststrecke
TEGENA2	Temperatur Geschwindigkeit Natrium der zweiten Teststrecke
TRAC	Transient Reactor Analysis Code
TRACE	TRAC/ RELAP Advanced Computational Engine
UUB	Upper Uncertainty Band for the BFBT and TEFLU Calculations
UUB	Untere Unsicherheiten Bänder der TEGENA Analyse

Literaturverzeichnis

- Anderson M.G., Burt T.P., 1985: Hydrological Forecasting, A Wiley- Interscience Publication, Great Britain*
- Antal, S. P., Lahey, R. T., and Flaherty, J. E., 1991: Analysis of phase distribution in fully developed laminar bubbly two-phase flow, Int. J. Multiphase Flow, 7, pp. 635-652*
- Beven and Binley., 1992: The future of distributed models: Model calibration and uncertainty calibration, HYDROLOGICAL PROCESSES, VOL. 6,279-298*
- Burns A.D.B., Frank Th., Hamill I., and Shi, J-M., 2004: Drag Model for Turbulent Dispersion in Eulerian Multi-Phase Flows, 5th International Conference on Multiphase Flow, ICMF-2004, Yokohama, Japan*
- Bohl, Elmendorf., 2005: Technische Strömungslehre, Vogel, Würzburg*
- Boeswirth L., 2010: Technische Strömungslehre, Vieweg + Teubner, Wiesbaden*
- Cacuci D.G., 2003: Sensitivity and Uncertainty Analysis Volume I- Theory, Chapman & Hall/CRC*
- Cacuci D.G., Ionescu-Bujor M., 2004a: A comparative Review of Sensitivity and Uncertainty Analysis of Large- Scale Systems-I: Deterministic Methods; Nuclear Science and Engineering 147 Pages 189-203*
- Cacuci D.G., Ionescu-Bujor M., 2004b: A comparative Review of Sensitivity and Uncertainty Analysis of Large- Scale Systems-II: Statistical Methods, Nuclear Science and Engineering 147 Pages 204-217*
- Cacuci D.G, Ionescu- Bujor M. Navon I.M., 2005: Sensitivity and Uncertainty Analysis Volume II- Application to Large-Scale- Systems, Chapman & Hall/CRC*
- Cacuci D.G., Ionescu-Bujor M., 2010a: On the evaluation of Discrepant Scientific Data with Unrecognized Errors, Nuclear Science and Engineering 165 Pages 1-17*
- Cacuci D.G., Ionescu-Bujor M., 2010b: Best- Estimate Model Calibration and Prediction Through Experimental Data Assimilation—: Mathematical Framework , Nuclear Science and Engineering 165 Pages 18-44*
- Cacuci D.G., Petruzzi A., 2010c: Best- Estimate Model Calibration and Prediction Through Experimental Data Assimilation –II: Application to a Blowdown Benchmark Experiment, Nuclear Science and Engineering 165 Pages 45-100*
- Clift R., Grace J.R., Weber M.E., 1978: Bubbles, Drops and Particles, Academic Press, New York, U.S.A.*
- Cole R, 1960: A photographic study of pool boiling in the region of CHF, AIChEJ, 6 pp. 533-542*

de Roo, A. D. J., 1993: Modelling surface runoff and soil erosion in catchments using geographical information systems, Validity and applicability of the "ANSWERS" model in two catchments in the loess area of South Limburg (the Netherlands) and one in Deven (UK), Netherlands 25 Geographical Studies, 157, 1993

Europe's Energy Portal: <http://www.energy.eu/>

Egorov, Y. and Menter, F., 2004: Experimental implementation of the RPI boiling model in CFX-5.6, Technical Report ANSYS / TR-04-10

Fillion P.H. et al., 2007: FLICA4 Reference manual of modules and procedures, User Guide Version V1.10.1, CEA

Forster E. and Greif R., 1958: Heat transfer to a boiling liquid, mechanism and correlations, Progress Report 7, US

Frank, 2008: Validation of CFD models for mono- and polydisperse air–water two-phase flows in pipes, Nuclear Engineering and Design Pages 647- 659

Gülich J.F., 1999.: Kreiselpumpen- Handbuch für Entwicklung Anlagenpumpen und Betrieb, Springer Verlag

Groetzbach G., Carteciano L.N., 2003: Validation of turbulence Models in the computer Code Flutan for a free hot sodium jet in different buoyancy regimes, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6600, 2003

Groeneveld D.G. et al, 1996.: The 1995 look-up table for critical heat flux in tubes, Nuclear Engineering and Design, 163, 1-23

International Atomic Energy Agency: Nuclear Reactors Knowledge, <http://www.iaea.org/inisnkm/nkm/aws/reactors.html>

Ishii, M. and Zuber N., 1979: Drag Coefficient and Relative Velocity in Bubbly, Droplet or Particulate Flows, AIChE J., 25, 843-855

Janesen and Heuberger., 1995: Calibration of process- oriented models, Ecological Modelling 83 Pages 55-66

Kirkby, Michael J., 1987: Computer simulation in physical geography; John Wiley and Sons New York

Knebel J.U., 1993 Experimentelle Untersuchungen in turbulenten Auftriebsstrahlen in Natrium, KFK 5175

Knebel J.U. Mueller M. Hoelle C., Bunk M., 2002: Berechnung von turbulenten Auftriebsströmungen mit dem $k - \varepsilon - \overline{T'^2}$ Turbulenzmodell, Wissenschaftliche Berichte FZKA 5519

Kocamustafaogullari, G. and Ishii, M., 1983: Interfacial area and nucleation site density in boiling systems, nt. J. Heat Mass Transfer, 26 p. 1377

Krepper, E., and Prasser, H-M., 2000: Measurements and CFX Simulations of a bubbly flow in a vertical pipe, in AMIFESF Workshop, Computing Methods in Two-Phase Flow

Kurul, N. and Podowski, M. Z., 1991: On the modeling of multidimensional effects in boiling channels, ANS Proc. 27th National Heat Transfer Conference, Minneapolis, MN, July 28-31

Legendre, D. and Magnaudet, J, 1998: The lift force on a spherical bubble in a viscous linear shear flow, J. Fluid Mech., 368, pp. 81–126

Lenhart T., K. Eckhardt, N. Fohrer, H.G. Frede, 2002: Comparisons of two different approaches of sensitivity analysis, Physics and Chemistry of the Earth 27 Pages 45–65

Lemmert, M. and Chawla, J. M., 1977: Influence of flow velocity on surface boiling heat transfer coefficient, Heat Transfer and Boiling (Eds. E. Hahne and U. Grigull), Academic Press

Lopez de Bertodano, M, 1998: Two Fluid Model for Two-Phase Turbulent Jet, Nuclear Engineering and Design 179, 65-74

MAPLIB, 1977: Darstellung der Stoffdaten des Systems MAPLIB in tabellarischer und graphischer Form

MATLAB: <http://www.mathworks.de/products/matlab/>

McCuen, 1972: The role of sensitivity analysis in hydrologic modelling, Journal of Hydrology Pages 37- 53

Menter et al.: A Scale-Adaptive Simulation Model using Two-Equation Models", AIAA paper 2005-1095, Reno/NV, 2005.

Merker G. P., Schwarz C: Technische Verbrennung- Simulation verbrennungsmotorischer Prozesse, Teubner, Stuttgart 2001

Moeller R., 1989: TEGENA Detaillierte experimentelle Untersuchungen der Temperatur- und Geschwindigkeitsuntersuchungen in Stabbündel- Geometrien mit turbulenter Natriumströmung, Wissenschaftliche Berichte KFK

Neykov B., F. Aydogan, L. Hochreiter, K. Ivanov, 2005: NUPEC BWR FULL SZIE FINEMESH BUNDLE TEST (BFBT) BENCHMARK; Nuclear Engineering Program, The Pennsylvania State University

Oertel H. jr., Boehle M., 1999: Strömungsmechanik, Vieweg

Petruzzi et al., 2010: Best- Estimate Model Calibration and Prediction Through Experimental Data Assimilation- II: Application to a Blowdown Benchmark Experiment, Nuclear Science and Engineering 165 Pages 45-100

Rykiel. E.J., 1996: Testing ecological models: The meaning of validation, Ecological modeling 90

Refsgaard J.C., 1996: Parameterization, calibration and validation of distributed hydrological models, Journal of Hydrology 198 Pages 69-97

Saffman, P. G., 1965: The lift on a small sphere in a slow shear flow, J. Fluid Mech., 22, p. 385

Saffman, P. G., 1968: The lift on a small sphere in a slow shear flow, J. Fluid Mech., 31, p. 624

Schlichting H., Gersten K, 2005: Grenzschichttheorie 10. überarbeitete Auflage, Springer,

Schröder, 2000: Results of Applications at the plot scale, J. Schmidt, Editor, Soil Erosion—Application of Physically Based Models, New York

The Generation IV international Forum: www.gen-4.org

Tomiyaama, A, 1998: Struggle with computational bubble dynamics, ICMF'98, 3rd Int. Conf. Multiphase Flow, Lyon, France, pp. 1-18, June 8-12

Tolubinski, V. I. and Kostanchuk, D. M, 1970: Vapour bubbles growth rate and heat transfer intensity at subcooled water boiling, 4th. International Heat Transfer Conference, Paris, France

Utsuno H., K. Fumio, 2005: NUPEC BWR FULL SIZE FINE MESH BUNDLE TEST(BFBT) BENCHMARK, Nuclear Engineering Program, Japan Nuclear Energy Safety Organization, Japan

Warnatz J., Maas U., 2001 , Dibble R.W., Verbrennungen, Springer

Zun., 1980: The transverse migration of bubbles influenced by walls in vertical bubbly flow, International Journal of Multiphase Flow Volume: 6

Abbildungsverzeichnis

ABBILDUNG 1: DIE GESAMTE BFBT BENCHMARK VERSUCHSANLAGE.....	34
ABBILDUNG 2: CURRENT BURNUP	
ABBILDUNG 3: HIGH BURNUP MIT FERRULE	35
ABBILDUNG 4: ABSTANDSHALTER FERRULE (LINKS) UND GRID (RECHTS).....	35
ABBILDUNG 5: BFBT-BENCHMARK TESTSTRECKE	
ABBILDUNG 6: FUNKTIONSWEISE DER AXIALEN POSITIONEN DER MESSSYSTEME	
GAMMASTRAHLEN DENSITOMETER MESSSYSTEME	37
ABBILDUNG 7: RADIALE WÄRMEVERTEILUNG FÜR DEN AUSLEGUNGSFALL HIGH BURNUP MIT SEINEN 5 HEIZSTABGRUPPEN	38
ABBILDUNG 8: ZEITLICHE ENTWICKLUNG DER KÜHLMITTELDURCHSTRÖMUNG (LINKS OBEN), DER HEIZLEISTUNG (RECHTS OBEN) UND DES AUSLASSDRUCKS (UNTEN MITTE).....	39
ABBILDUNG 9: VERGLEICH ZWISCHEN EXPERIMENTELLEN MESSDATEN AUS DEM BFBT BENCHMARK, DEN NUMERISCHEN BERECHNUNGEN MIT FLICA4 UND DEN BESTEST WERTEN ALS BESTMÖGLICHE SYSTEMANTWORTEN.....	45
ABBILDUNG 10: UNSICHERHEITEN DER EXPERIMENTELLEN DATEN DER „OBEREN UNSICHERHEITENBÄNDER“ DER FLICA4 BERECHNUNGEN SOWIE DER BESTEST BERECHNUNGEN	46
ABBILDUNG 11: UNSICHERHEITEN DER EXPERIMENTELLEN DATEN DER „UNTEREN UNSICHERHEITENBÄNDER“ DER FLICA4 BERECHNUNGEN SOWIE DER BESTEST BERECHNUNGEN	47
ABBILDUNG 12: BESTMÖGLICHE EINSCHÄTZUNGEN DER KORRELATIONEN DER SYSTEMPARAMETER IN NORMALISIRTER DARSTELLUNG FÜR x682	47
ABBILDUNG 13: BESTMÖGLICHE EINSCHÄTZUNGEN DER KORRELATIONEN DER SYSTEMPARAMETER IN NORMALISIRTER DARSTELLUNG FÜR x1706.....	48
ABBILDUNG 14: BESTMÖGLICHE EINSCHÄTZUNGEN DER KORRELATIONEN DER SYSTEMPARAMETER IN NORMALISIRTER DARSTELLUNG FÜR x2730.....	48
ABBILDUNG 15: BESTMÖGLICHE EINSCHÄTZUNGEN DER KORRELATIONEN ZWISCHEN DEN SYSTEMANTWORTEN UND SYSTEMPARAMETERN FÜR x682	49
ABBILDUNG 16: BESTMÖGLICHE EINSCHÄTZUNGEN DER KORRELATIONEN ZWISCHEN DEN SYSTEMANTWORTEN UND SYSTEMPARAMETERN x1706.....	49
ABBILDUNG 17: BESTMÖGLICHE EINSCHÄTZUNGEN DER KORRELATIONEN ZWISCHEN DEN SYSTEMANTWORTEN UND SYSTEMPARAMETERN x2730.....	50
ABBILDUNG 18: VERGLEICH ZWISCHEN EXPERIMENTELLEN MESSDATEN AUS DEM BFBT BENCHMARK, DEN NUMERISCHEN BERECHNUNGEN MIT FLICA4 UND DEN BESTEST WERTEN ALS BESTMÖGLICHE SYSTEMANTWORTEN MITTELS DEN PRÄGNANTEN PARAMETERN.....	51
ABBILDUNG 19: UNSICHERHEITEN DER EXPERIMENTELLEN DATEN DER OBEREN UNSICHERHEITENBÄNDER DER FLICA4 BERECHNUNGEN SOWIE DER BESTEST BERECHNUNGEN MITTELS DEN PRÄGNANTEN PARAMETERN	52
ABBILDUNG 20: UNSICHERHEITEN DER EXPERIMENTELLEN DATEN DER OBEREN UNSICHERHEITENBÄNDER DER FLICA4 BERECHNUNGEN SOWIE DER BESTEST BERECHNUNGEN MITTELS DEN PRÄGNANTEN PARAMETERN	52
ABBILDUNG 21: EXPERIMENTELLE UND BESTMÖGLICHE EINSCHÄTZUNGEN DER „PRÄGNANTEN PARAMETER DES MASENSTROMS“ FÜR DIE SYSTEMANTWORTEN R_1 , R_2 UND R_3 IN JEWEILS EINZELBETRACHTUNG	53
ABBILDUNG 22: EXPERIMENTELLE UND BEST MÖGLICHE „PRÄGNANTE PARAMETER DER HEIZLEISTUNG“ FÜR DIE SYSTEMANTWORTEN R_1 , R_2 UND R_3 IN JEWEILS EINZELBETRACHTUNG	54
ABBILDUNG 23: BESTMÖGLICHE KORRELATIONEN DER SYSTEMANTWORTEN DER REIHE R1 IN NORMALISIRTER DARSTELLUNG.....	55
ABBILDUNG 24: BESTMÖGLICHE KORRELATIONEN DER SYSTEMANTWORTEN DER REIHE R2 IN NORMALISIRTER DARSTELLUNG.....	55
ABBILDUNG 25: BESTMÖGLICHE KORRELATIONEN DER SYSTEMANTWORTEN DER REIHE R3 IN NORMALISIRTER DARSTELLUNG.....	56
ABBILDUNG 26: BESTMÖGLICHE KORRELATIONEN DER SYSTEMPARAMETER- SYSTEMANTWORTEN DER REIHE R1 IN NORMALISIRTER DARSTELLUNG.....	56
ABBILDUNG 27: BESTMÖGLICHE KORRELATIONEN DER SYSTEMPARAMETER- SYSTEMANTWORTEN DER REIHE R2 IN NORMALISIRTER DARSTELLUNG.....	57
ABBILDUNG 28: BESTMÖGLICHE KORRELATIONEN DER SYSTEMPARAMETER- SYSTEMANTWORTEN DER REIHE R3 IN NORMALISIRTER DARSTELLUNG.....	57

ABBILDUNG 29: VERGLEICH ZWISCHEN DEN EXPERIMENTELLEN MESSDATEN AUS DEM BFBT BENCHMARK, DEN NUMERISCHEN BERECHNUNGEN MIT ANSYS CFX UND DEN BESTEST WERTEN ALS BESTMÖGLICHE SYSTEMANTWORTEN.....	61
ABBILDUNG 30: UNSICHERHEITEN DER EXPERIMENTELLEN DATEN, DER "OBEREN UNSICHERHEITENBÄNDER" DER CFX SOWIE DER BESTEST BERECHNUNGEN.....	62
ABBILDUNG 31: UNSICHERHEITEN DER EXPERIMENTELLEN DATEN, DER „UNTEREN UNSICHERHEITENBÄNDERN“ DER CFX SOWIE DER BESTEST BERECHNUNGEN.....	62
ABBILDUNG 32: KORRELATION DER BESTMÖGLICHEN EINSCHÄTZUNGEN DER SYSTEMPARAMETER IN NORMIERTER DARSTELLUNG.....	63
ABBILDUNG 33: VERGLEICH ZWISCHEN EXPERIMENTELLEN MESSDATEN AUS DEM BFBT BENCHMARK, DEN NUMERISCHEN BERECHNUNGEN MIT CFX UND DEN BESTEST WERTEN ALS BEST MÖGLICHE SYSTEMANTWORTEN.....	64
ABBILDUNG 34: EXPERIMENTELLE UND BEST MÖGLICHE „PRÄGNANTE PARAMETER DES MASSENSTROMS“ FÜR DIE SYSTEMANTWORT R_3 IN JEWEILS EINZELBETRACHTUNG.....	65
ABBILDUNG 35: BESTMÖGLICHE KORRELATIONEN DER SYSTEMPARAMETER- SYSTEMANTWORTEN DER R3 DATENREIHE.....	65
ABBILDUNG 36: GESAMTANLAGE DER TEFLU TESTSTRECKE (QUELLE: J.U. KNEBEL, 1993).....	67
ABBILDUNG 37: TEFLU VERSUCHSREIHE MIT DEN AUSWERTUNGEN DER AXIALEN GESCHWINDIGKEITS- UND TEMPERATURVERTEILUNG ENTLANG DER SYMMETRIEACHSE (x/D).....	71
ABBILDUNG 38: TEFLU VERSUCHSREIHE MIT DEN AUSWERTUNGEN DER RADIALEN GESCHWINDIGKEITS- UND TEMPERATURVERTEILUNG AUF DER MESSEBENE (x/D=6).....	72
ABBILDUNG 39: TEFLU VERSUCHSREIHE MIT DEN AUSWERTUNGEN DER GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNG (LINKS) UND TEMPERATURVERTEILUNG (RECHTS) IN RADIALER RICHTUNG AUF DER MESSEBENE (x/D=20).....	73
ABBILDUNG 40: VERGLEICH ZWISCHEN DEN EXPERIMENTELLEN GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNGEN, DEN CFX SOWIE BESTEST BERECHNUNGEN (BILD OBEN) UND DIE OBEREN UND UNTEREN BÄNDER DER UNSICHERHEITEN (BILD UNTEN) FÜR DIE CFX- UND BESTEST BERECHNUNGEN FÜR DEN IMPULSSTRAHL ENTLANG DER SYMMETRIEACHSE (x/D).....	77
ABBILDUNG 41: VERGLEICH ZWISCHEN DEN RADIALEN EXPERIMENTELLEN GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNGEN, DEN CFX SOWIE BESTEST BERECHNUNGEN (BILD OBEN) UND DIE OBEREN UND UNTEREN BÄNDER DER UNSICHERHEITEN (BILD UNTEN) FÜR DIE CFX- UND BESTEST BERECHNUNGEN FÜR DEN IMPULSSTRAHL AUF DER MESSEBENE (x/D=6).....	78
ABBILDUNG 42: VERGLEICH ZWISCHEN DEN RADIALEN EXPERIMENTELLEN GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNGEN, DEN CFX SOWIE BESTEST BERECHNUNGEN (BILD OBEN) UND DIE OBEREN UND UNTEREN BÄNDER DER UNSICHERHEITEN (BILD UNTEN) FÜR DIE CFX- UND BESTEST BERECHNUNGEN FÜR DEN IMPULSSTRAHL AUF DER MESSEBENE (x/D=20).....	79
ABBILDUNG 43: BESTMÖGLICHE PARAMETER KORRELATION (BILD OBEN) UND BESTMÖGLICHE PARAMETER-SYSTEMANTWORT KORRELATION (BILD UNTEN) FÜR DEN IMPULSSTRAHL DER GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNG IN AXIALER RICHTUNG (x/D) IN NORMALISIERTER DARSTELLUNG.....	81
ABBILDUNG 44: BESTMÖGLICHE PARAMETER KORRELATION (BILD OBEN) UND BESTMÖGLICHE PARAMETER-SYSTEMANTWORT KORRELATION (BILD UNTEN) FÜR DEN IMPULSSTRAHL DER GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNG IN RADIALER RICHTUNG (x/D=6) IN NORMALISIERTER DARSTELLUNG .	82
ABBILDUNG 45: BESTMÖGLICHE PARAMETER KORRELATION (OBERES BILD) UND BESTMÖGLICHE PARAMETER-SYSTEMANTWORT KORRELATION (BILD UNTEN) FÜR DEN IMPULSSTRAHL DER GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNG IN RADIALER RICHTUNG (x/D=20) IN NORMALISIERTER DARSTELLUNG	83
ABBILDUNG 46: VERGLEICH ZWISCHEN DEN EXPERIMENTELLEN GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNGEN, DEN CFX SOWIE BESTEST BERECHNUNGEN (BILD OBEN) UND DIE OBEREN UND UNTEREN BÄNDER DER UNSICHERHEITEN (BILD UNTEN) FÜR DIE CFX- UND BESTEST BERECHNUNGEN FÜR DEN SCHWACHEN AUFTRIEBSSTRAHL ENTLANG DER SYMMETRIEACHSE (x/D).....	85
ABBILDUNG 47: VERGLEICH ZWISCHEN DEN EXPERIMENTELLEN GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNGEN, DEN CFX SOWIE BESTEST BERECHNUNGEN (BILD OBEN) UND DIE OBEREN UND UNTEREN BÄNDER DER UNSICHERHEITEN (BILD UNTEN) FÜR DIE CFX- UND BESTEST BERECHNUNGEN FÜR DEN SCHWACHEN AUFTRIEBSSTRAHL AUF DER MESSEBENE (x/D=6).....	86
ABBILDUNG 48: VERGLEICH ZWISCHEN DEN EXPERIMENTELLEN GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNGEN, DEN CFX SOWIE BESTEST BERECHNUNGEN (BILD OBEN) UND DIE OBEREN UND UNTEREN BÄNDER DER UNSICHERHEITEN (BILD UNTEN) FÜR DIE CFX- UND BESTEST BERECHNUNGEN FÜR DEN SCHWACHEN AUFTRIEBSSTRAHL AUF DER MESSEBENE (x/D=20).....	87
ABBILDUNG 49: BESTMÖGLICHE PARAMETER KORRELATION (BILD OBEN) UND BESTMÖGLICHE PARAMETER-SYSTEMANTWORT KORRELATION (BILD UNTEN) FÜR SCHWACHEN AUFTRIEBSSTRAHL DER GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNG IN AXIALER RICHTUNG (x/D) IN NORMALISIERTER DARSTELLUNG.....	89

ABBILDUNG 50: BESTMÖGLICHE PARAMETER KORRELATION (BILD OBEN) UND BESTMÖGLICHE PARAMETER-SYSTEMANTWORT KORRELATION (BILD UNTEN) FÜR DEN SCHWACHEN AUFTRIEBSSTRAHL DER GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNG IN RADIALER RICHTUNG ($x/d=6$) IN NORMALISIRTER DARSTELLUNG .	90
ABBILDUNG 51: BESTMÖGLICHE PARAMETER KORRELATION (BILD OBEN) UND BESTMÖGLICHE PARAMETER-SYSTEMANTWORT KORRELATION (BILD UNTEN) FÜR DEN SCHWACHEN AUFTRIEBSSTRAHL DER GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNG IN RADIALER RICHTUNG ($x/d=20$) IN NORMALISIRTER DARSTELLUNG	91
ABBILDUNG 52: VERGLEICH ZWISCHEN DEN EXPERIMENTELLEN GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNGEN, DEN CFX SOWIE BESTEST BERECHNUNGEN (BILD OBEN) UND DIE OBEREN UND UNTEREN BÄNDER DER UNSICHERHEITEN (BILD UNTEN) FÜR DIE CFX- UND BESTEST BERECHNUNGEN FÜR DEN STARKEN AUFTRIEBSSTRAHL ENTLANG DER SYMMETRIEACHSE (x/d)	94
ABBILDUNG 53: VERGLEICH ZWISCHEN DEN EXPERIMENTELLEN GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNGEN, DEN CFX SOWIE BESTEST BERECHNUNGEN (BILD OBEN) UND DIE OBEREN UND UNTEREN BÄNDER DER UNSICHERHEITEN (BILD UNTEN) FÜR DIE CFX- UND BESTEST BERECHNUNGEN FÜR DEN STARKEN AUFTRIEBSSTRAHL AUF DER MESSEBENE ($x/d=6$)	95
ABBILDUNG 54: VERGLEICH ZWISCHEN DEN EXPERIMENTELLEN GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNGEN, DEN CFX SOWIE BESTEST BERECHNUNGEN (LINKES BILD) UND DIE OBEREN UND UNTEREN BÄNDER DER UNSICHERHEITEN (BILD UNTEN) FÜR DIE CFX- UND BESTEST BERECHNUNGEN FÜR DEN STARKEN AUFTRIEBSSTRAHL AUF DER MESSEBENE ($x/d=20$)	96
ABBILDUNG 55: BESTMÖGLICHE PARAMETER KORRELATION (BILD OBEN) UND BESTMÖGLICHE PARAMETER-SYSTEMANTWORT KORRELATION (BILD UNTEN) FÜR DEN STARKEN AUFTRIEBSSTRAHL DER GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNG IN AXIALER RICHTUNG (x/d) IN NORMALISIRTER DARSTELLUNG	97
ABBILDUNG 56: BESTMÖGLICHE PARAMETER KORRELATION (BILD OBEN) UND BESTMÖGLICHE PARAMETER-SYSTEMANTWORT KORRELATION (BILD UNTEN) FÜR DEN STARKEN AUFTRIEBSSTRAHL DER GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNG IN RADIALER RICHTUNG ($x/d=6$) IN NORMALISIRTER DARSTELLUNG .	98
ABBILDUNG 57: BESTMÖGLICHE PARAMETER KORRELATION (LINKES BILD) UND BESTMÖGLICHE PARAMETER-SYSTEMANTWORT KORRELATION (RECHTES BILD) FÜR DEN STARKEN AUFTRIEBSSTRAHL DER GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNG IN RADIALER RICHTUNG ($x/d=20$) IN NORMALISIRTER DARSTELLUNG	99
ABBILDUNG 58: TEGENA TESTSTRECKE (QUELLE: MÖLLER EXPERIMENT)	102
ABBILDUNG 59: QUERSCHNITT DER TEGENA TESTSTRECKE (QUELLE: R. MÖLLER, 1989)	103
ABBILDUNG 60: SONDEN 1 UND 2 (LINKES BILD) DER TEGENA 1 TESTSTRECKE SOWIE SONDEN P1 UND P2 (RECHTES BILD) DER TEGENA 2 TESTSTRECKE	103
ABBILDUNG 61: RECHENGITTER FÜR TEGENA VALIDIERUNG. LINKS DAS TETRAGONALE UND RECHTS DAS HEXAGONALE GITTER.	108
ABBILDUNG 62: DARSTELLUNG DER MESSAUFZEICHNUNGEN DER DATENREIHE F04Q12B.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 1 GLEICHLASTVERSUCH	109
ABBILDUNG 63: DARSTELLUNG DER MESSAUFZEICHNUNGEN DER DATENREIHE F06LWSA.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 1 GLEICHLASTVERSUCH	109
ABBILDUNG 64: DARSTELLUNG DER MESSAUFZEICHNUNGEN DER DATENREIHE F06LWSB.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 1 GLEICHLASTVERSUCH	110
ABBILDUNG 65: DARSTELLUNG DER MESSAUFZEICHNUNGEN DER DATENREIHE F31Q12B.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 1 SCHIEFLASTVERSUCH	112
ABBILDUNG 66: DARSTELLUNG DER MESSAUFZEICHNUNGEN DER DATENREIHE F37QWSA.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 1 SCHIEFLASTVERSUCH	113
ABBILDUNG 67: DARSTELLUNG DER MESSAUFZEICHNUNGEN DER DATENREIHE F35QW4A.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 1 SCHIEFLASTVERSUCH	113
ABBILDUNG 68: DARSTELLUNG DER MESSAUFZEICHNUNGEN DER DATENREIHE F30LWSB.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 1 SCHIEFLASTVERSUCH	114
ABBILDUNG 69: DARSTELLUNG DER MESSAUFZEICHNUNGEN DER DATENREIHE F32LW43A.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 1 SCHIEFLASTVERSUCH	114
ABBILDUNG 70: DARSTELLUNG DER MESSAUFZEICHNUNGEN DER DATENREIHE F38LW4A.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 1 SCHIEFLASTVERSUCH	115
ABBILDUNG 71: DARSTELLUNG DER MESSAUFZEICHNUNGEN DER DATENREIHE M332.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 2 GLEICHLASTVERSUCH	116
ABBILDUNG 72: DARSTELLUNG DER MESSAUFZEICHNUNGEN DER DATENREIHE M336.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 2 GLEICHLASTVERSUCH	116
ABBILDUNG 73: DARSTELLUNG DER MESSAUFZEICHNUNGEN DER DATENREIHE M104.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 2 GLEICHLASTVERSUCH	117
ABBILDUNG 74: DARSTELLUNG DER MESSAUFZEICHNUNGEN DER DATENREIHE M080.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 2 GLEICHLASTVERSUCH	117
ABBILDUNG 75: DARSTELLUNG DER MESSAUFZEICHNUNGEN DER DATENREIHE M094.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 2 GLEICHLASTVERSUCH	118

ABBILDUNG 76: DARSTELLUNG DER MESSAUFEICHNUNGEN DER DATENREIHE M198.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 2 SCHIEFLASTVERSUCH.....	118
ABBILDUNG 77: DARSTELLUNG DER MESSAUFEICHNUNGEN DER DATENREIHE M190.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 2 SCHIEFLASTVERSUCH.....	119
ABBILDUNG 78: DARSTELLUNG DER MESSAUFEICHNUNGEN DER DATENREIHE M169.DAT SOWIE DEN CFX BERECHNUNGEN FÜR DEN TEGENA 2 SCHIEFLASTVERSUCH.....	119
ABBILDUNG 79: EXPERIMENTELLE DATEN DER TEFLU TESTREIHE, DEN CFX BERECHNUNGEN (HEXAGONAL BILD OBEN; TETRAGONAL BILD UNTEN) SOWIE DEN BESTEST WERTEN (DATENREIHE F04Q12B. DAT)	122
ABBILDUNG 80: EXPERIMENTELLE DATEN MIT IHREN RELATIVEN UNGENAUIGKEITEN SOWIE DEN OBEREN UND UNTEREN UNSICHERHEITSBÄNDER DER CFX UND BESTEST BERECHNUNGEN (HEXAGONAL BILD OBEN; TETRAGONAL BILD UNTEN) DER DATENREIHE F04Q12B.DAT	123
ABBILDUNG 81: BESTMÖGLICHE PARAMETER KORRELATION DER HEXAGONALEN (BILD OBEN) UND TETRAGONALEN	124
ABBILDUNG 82: BESTMÖGLICHE PARAMETER- ANTWORT- KORRELATION DER HEXAGONALEN (BILD OBEN) UND TETRAGONALEN (BILD UNTEN) BERECHNUNG FÜR DIE DATENREIHE F04Q12B.DAT IN NORMALISIERTER DARSTELLUNG	125
ABBILDUNG 83: EXPERIMENTELLE DATEN DER TEFLU TESTREIHE, DEN CFX BERECHNUNGEN (HEXAGONAL BILD OBEN; TETRAGONAL BILD UNTEN) SOWIE DEN BESTEST WERTEN (DATENREIHE F31Q12B. DAT)	126
ABBILDUNG 84: EXPERIMENTELLE DATEN MIT IHREN RELATIVEN UNGENAUIGKEITEN SOWIE DEN OBEREN UND UNTEREN UNSICHERHEITSBÄNDER DER CFX UND BESTEST BERECHNUNGEN (HEXAGONAL BILD OBEN; TETRAGONAL BILD UNTEN) FÜR DIE DATENREIHE F31Q12B.DAT	127
ABBILDUNG 85: BESTMÖGLICHE PARAMETER KORRELATION DER HEXAGONALEN (BILD OBEN) UND TETRAGONALEN	128
ABBILDUNG 86: BESTMÖGLICHE PARAMETER- ANTWORT KORRELATION DER HEXAGONALEN (BILD OBEN) UND TETRAGONALEN (BILD UNTEN) BERECHNUNG FÜR DIE DATENREIHE F31Q12B.DAT IN NORMALISIERTER DARSTELLUNG	129
ABBILDUNG 87: EXPERIMENTELLE DATEN DER TEFLU TESTREIHE, DEN CFX BERECHNUNGEN (HEXAGONAL BILD OBEN; TETRAGONAL BILD UNTEN) SOWIE DEN BESTEST WERTEN (DATENREIHE F37QWS4A. DAT).....	131
ABBILDUNG 88: EXPERIMENTELLE DATEN MIT IHREN RELATIVEN UNGENAUIGKEITEN SOWIE DEN OBEREN UND UNTEREN UNSICHERHEITSBÄNDER DER CFX UND BESTEST BERECHNUNGEN (HEXAGONAL BILD OBEN; TETRAGONAL BILD UNTEN) DER DATENREIHE F37QWSA.DAT	132
ABBILDUNG 89: BESTMÖGLICHE PARAMETER- ANTWORT KORRELATION DER HEXAGONALEN (BILD OBEN) UND TETRAGONALEN (BILD UNTEN) BERECHNUNG FÜR DIE DATENREIHE F37QWSA.DAT IN NORMALISIERTER DARSTELLUNG	133
ABBILDUNG 90: BESTMÖGLICHE PARAMETER- ANTWORT KORRELATION DER HEXAGONALEN (BILD OBEN) UND TETRAGONALEN (BILD UNTEN) BERECHNUNG (HEXAGONAL BILD OBEN; TETRAGONAL BILD UNTEN) DER DATENREIHE F37QWSA.DAT IN NORMALISIERTER DARSTELLUNG	134
ABBILDUNG 91: EXPERIMENTELLE DATEN DER TEFLU TESTREIHE, DEN CFX BERECHNUNGEN (HEXAGONAL BILD OBEN; TETRAGONAL BILD UNTEN) SOWIE DEN BESTEST WERTEN (DATENREIHE M322. DAT). 135	
ABBILDUNG 92: EXPERIMENTELLE DATEN MIT IHREN RELATIVEN UNGENAUIGKEITEN SOWIE DEN OBEREN UND UNTEREN UNSICHERHEITSBÄNDER DER CFX UND BESTEST BERECHNUNGEN (HEXAGONAL BILD OBEN; TETRAGONAL BILD UNTEN) DER DATENREIHE M322.DAT	136
ABBILDUNG 93: EXPERIMENTELLE DATEN DER TEFLU TESTREIHE, DEN CFX BERECHNUNGEN (HEXAGONAL BILD OBEN; TETRAGONAL BILD UNTEN) SOWIE DEN BESTEST WERTEN (DATENREIHE M104. DAT). 137	
ABBILDUNG 94: EXPERIMENTELLE DATEN MIT IHREN RELATIVEN UNGENAUIGKEITEN SOWIE DEN OBEREN UND UNTEREN UNSICHERHEITSBÄNDER DER CFX UND BESTEST BERECHNUNGEN (HEXAGONAL BILD OBEN; TETRAGONAL BILD UNTEN) DER DATENREIHE M104.DAT	138
ABBILDUNG 95: BESTMÖGLICHE PARAMETER KORRELATION DER HEXAGONALEN (BILD OBEN) UND TETRAGONALEN	139
ABBILDUNG 96: BESTMÖGLICHE PARAMETER- ANTWORT KORRELATION DER HEXAGONALEN (BILD OBEN) UND TETRAGONALEN (BILD UNTEN) BERECHNUNG FÜR DIE DATENREIHE M332.DAT IN NORMALISIERTER DARSTELLUNG	140
ABBILDUNG 97: BESTMÖGLICHE PARAMETER KORRELATION DER HEXAGONALEN (BILD OBEN) UND TETRAGONALEN	141
ABBILDUNG 98: BESTMÖGLICHE PARAMETER- ANTWORT KORRELATION DER HEXAGONALEN (BILD OBEN) UND TETRAGONALEN (BILD UNTEN) BERECHNUNG FÜR DIE DATENREIHE M104.DAT IN NORMALISIERTER DARSTELLUNG	142
ABBILDUNG 99: FLUSSDIAMGRAMM DER BFBT BENCHMARK	190

Abbildungsverzeichnis

ABBILDUNG 100: FLUSSDIAMGRAMM DES TEFLU EXPERIMENTS.....	191
ABBILDUNG 101: FLUSSDIAMGRAMM DES TEGENA EXPERIMENTS	191

Tabellenverzeichnis

TABELLE 1: BFBT BENCHMARK CURRENT UND HIGH BURNUP AUSLEGUNGSPARAMETER.....	36
TABELLE 2: RADIALE HEIZSTABVERTEILUNG FÜR DEN AUSLEGUNGSFALL „HIGH BURNUP“.....	38
TABELLE 3: NOMINALE UND BESTMÖGLICHE MODELLPARAMETER FÜR DEN KALIBRIERUNGSPROZESS	43
TABELLE 4: PRÄGNANTE PARAMETER FÜR DIE AXIALE MESSUNG DER PHASENVERTEILUNG.....	43
TABELLE 5: NOMINALE UND BEST MÖGLICHE MODELLPARAMETER FÜR DEN KALIBRIERUNGSPROZESS DER AXIALEN PHASENVERTEILUNG FÜR DEN „PUMPTrip“ TESTFALL MIT ANSYS CFX	61
TABELLE 6: REYNOLDS- UND FROUDEZAHLEN DER TEFLU TESTSTRECKE FÜR ALLE DREI AUSLEGUNGSFÄLLE	69
TABELLE 7: MODELLPARAMETER FÜR DIE KALIBRIERUNG DER AXIALEN UND RADIALEN GESCHWINDIGKEITS- UND TEMPERATURVERTEILUNGEN	75
TABELLE 8: NOMINALE UND BESTEST MODELLPARAMETER DER GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNG FÜR DEN IMPULSSTRAHL	80
TABELLE 9: ANPASSUNGSINDIKATOREN FÜR DIE GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNG DES IMPULSSTRAHLS	80
TABELLE 10: NOMINALE UND BESTEST MODELLPARAMETER DER GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNG FÜR DEN SCHWACHEN AUFTRIEBSSTRAHL	88
TABELLE 11: ANPASSUNGSINDIKATOREN FÜR DIE GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNGEN DES SCHWACHEN AUFTRIEBSSTRAHLS	88
TABELLE 12: NOMINALE UND BESTEST MODELLPARAMETER DER GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNG FÜR DEN STARKEN AUFTRIEBSSTRAHLS	93
TABELLE 13: ANPASSUNGSINDIKATOREN FÜR DIE GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNGEN DES STARKEN AUFTRIEBSSTRAHLS	93
TABELLE 14: KENNZEICHNUNG DER EINZELNEN THERMOELEMENTE FÜR DIE SONDEN DER TEGENA1 UND TEGENA2 TESTREIHE	104
TABELLE 15: RANDBEDINGUNGEN DER TEGENA 1 TESTFÄLLE	105
TABELLE 16: RANDBEDINGUNGEN DER TEGENA 2 TESTFÄLLE	106
TABELLE 17: MODELLPARAMETER FÜR DIE KALIBRIERUNG TEMPERATURVERTEILUNGEN.....	120
TABELLE 18: NOMINALE UND BESTEST MODELLPARAMETER DER RADIALEN TEMPERATURVERTEILUNG (X/D) FÜR DEN IMPULSSTRAHL	145
TABELLE 19: STANDARDWERTE AUS DEM K-EPSILON MODELL	186
TABELLE 20: STANDARDWERTE AUS DEM SAS SST MODELL	189

A. Zeitunabhängige Datenassimilierung und Modellkalibrierung

Mit den Gleichungen (2.23) und (2.24) kann die Bedingung $\nabla_{\lambda} P(z, \lambda) = 0$ sicherstellen, dass die Abhängigkeit $Z(\alpha^0)z = d = 0$ für $z = z^{be}$, während die Bedingung $\nabla_z P(z, \lambda) = 0$ zu folgendem Ausdruck führt:

$$\begin{aligned} \nabla_z P(z, \lambda) &= \nabla_z \left\{ z^{\dagger} C^{-1} z + 2 \left[\lambda^{\dagger} S(\alpha), -\lambda^{\dagger} \right] z + 2 \lambda^{\dagger} d \right\} \\ &= 2 C^{-1} z + 2 \begin{pmatrix} S^{\dagger}(\alpha) \lambda \\ -\lambda \end{pmatrix} = 0, \quad \text{für } z = z^{be} \end{aligned} \tag{A. 1}$$

Die Multiplikation der letzten Zeile aus Gleichung (A.1) auf der linken Seite und dem anschließenden Lösen nach z^{be} ergibt

$$z^{be} = C \begin{pmatrix} S^{\dagger}(\alpha) \lambda \\ -\lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{\alpha} & C_{ar} \\ C_{r\alpha} & C_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S^{\dagger}(\alpha) \lambda \\ -\lambda \end{pmatrix} \tag{A. 2}$$

Die Gleichung (A.2) in Komponentenform ergibt die bestmöglich kalibrierten Gleichungen der Antworten und Parameter:

$$\alpha^{be} = \alpha^0 + \left(C_{ar} - C_{\alpha} \left[S(\alpha^0) \right]^{\dagger} \right) \lambda \tag{A. 3}$$

$$r^{be} = r_m + \left(C_m - C_{r\alpha} \left[S(\alpha^0) \right]^{\dagger} \right) \lambda \tag{A. 4}$$

Mit den Gleichungen (A.3) und (A.4) kann für z^{be} der Lagrange- Multiplikator λ bestimmt werden, um

$$\begin{aligned}
 d &\equiv R(\alpha^0) - r_m \\
 &= \left[C_{rc}(\alpha^0) - C_{r\alpha} [S(\alpha^0)]^\dagger - [S(\alpha^0)] C_{\alpha r} + C_m \right] \lambda
 \end{aligned}
 \tag{A. 5}$$

Der Ausdruck aus Gleichung (A.5), welcher mit λ multipliziert wird, ist die so genannte Kovarianzenmatrix $C_d(\alpha^0)$, dem Abweichungsvektor der Antworten d :

$$\begin{aligned}
 C_d(\alpha^0) &\triangleq \langle dd^\dagger \rangle \\
 &= \left\langle \left(\delta r - S(\alpha^0) \delta \alpha \right) \left(\delta r^\dagger - \delta \alpha^\dagger [S(\alpha^0)]^\dagger \right) \right\rangle \\
 &= C_{rc}(\alpha^0) - C_{r\alpha} [S(\alpha^0)]^\dagger - [S(\alpha^0)] C_{\alpha r} + C_m
 \end{aligned}
 \tag{A. 6}$$

Dadurch ergibt sich für den Lagrange- Multiplikator λ , bei z^{be} , folgender Ausdruck:

$$\lambda = [C_d(\alpha^0)]^{-1} d
 \tag{A. 7}$$

Die zweiten und dritten Terme in Gleichung (A.6) sind transponierte Ausdrücke voneinander und stellen quadratische Matrizen dar. Dadurch folgt für die Matrix $C_d(\alpha^0)$ eine Symmetriebedingung. Durch das Einsetzen von Gleichung (A.7) in (A.3) und (A.4) ergeben sich für beide Ausdrücke die folgenden Gleichungen:

$$\alpha^{be} = \alpha^0 + \left(C_{\alpha r} - C_{\alpha} [S(\alpha^0)]^\dagger \right) [C_d(\alpha^0)]^{-1} d
 \tag{A. 8}$$

$$r^{be} = r_m + \left(C_m - C_{r\alpha} [S(\alpha^0)]^\dagger \right) [C_d(\alpha^0)]^{-1} d
 \tag{A. 9}$$

Die bestmöglichen Einschätzungen der Kovarianzen- Matrizen C_α^{be} und C_r^{be} in Bezug auf die bestmöglich eingeschätzten Parameter α^{be} und Antworten $r(\alpha^{be})$ zusammen mit der Parameter- Antwort- Kovarianzen- Matrix $C_{\alpha r}^{be}$ werden wie folgt definiert:

$$C_\alpha^{be} \triangleq \left\langle (\alpha - \alpha^{be})(\alpha - \alpha^{be})^\dagger \right\rangle \quad (\text{A. 10})$$

$$C_r^{be} \triangleq \left\langle (r - r(\alpha^{be}))(r - r(\alpha^{be}))^\dagger \right\rangle \quad (\text{A. 11})$$

$$C_{r\alpha}^{be} = C_{\alpha r}^{be} \triangleq \left\langle (\alpha - \alpha^{be})(r - r(\alpha^{be}))^\dagger \right\rangle \quad (\text{A. 12})$$

Die explizite Form von C_α^{be} wird durch das Einsetzen von Gleichung (A.8) in (A.10) und der Durchführung der zugehörigen Mittelungen, unter der Berücksichtigung von

$$d \triangleq R(\alpha^0) - r_m = r - r_m - S(\alpha^0)(\alpha - \alpha^0) \quad (\text{A. 13})$$

bestimmt. Dadurch ergibt sich für C_α^{be}

$$\begin{aligned} C_\alpha^{be} = & \left\langle (\alpha - \alpha^0)(\alpha - \alpha^0)^\dagger \right\rangle \\ & - \left\langle (\alpha - \alpha^0) d^\dagger [C_d(\alpha^0)]^{-1} (C_{\alpha r} - [S(\alpha^0)]C_\alpha) \right. \\ & - \left. (C_{\alpha r} - C_\alpha [S(\alpha^0)]^\dagger) [C_d(\alpha^0)]^{-1} \left\langle d(\alpha - \alpha^0)^\dagger \right\rangle \right. \\ & + \left. (C_{\alpha r} - C_\alpha [S(\alpha^0)]^\dagger) [C_d(\alpha^0)]^{-1} \left\langle dd^\dagger \right\rangle [C_d(\alpha^0)]^{-1} (C_{\alpha r} - [S(\alpha^0)]C_\alpha) \right. \end{aligned} \quad (\text{A. 14})$$

Die Gleichung (A.14) kann unter Berücksichtigung von Gleichung (A.6) und

$$C_{ad}(\alpha^0) \triangleq \langle (\alpha - \alpha^0) d^\dagger \rangle = \left(C_{rc} - C_\alpha [S(\alpha^0)]^\dagger \right) \quad (\text{A. 15})$$

$$C_{d\alpha}(\alpha^0) \triangleq \langle d(\alpha - \alpha^0)^\dagger \rangle = \left(C_{rc} - [S(\alpha^0)] C_\alpha \right) = [C_{ad}(\alpha^0)]^\dagger \quad (\text{A. 16})$$

vereinfacht werden. Das Einsetzen von Gleichung (A.14), (A.15) und (A.16) in C_α^{be} ergibt folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned} C_\alpha^{be} &= C_\alpha - \left(C_{ar} - C_\alpha [S(\alpha^0)]^\dagger \right) [C_d(\alpha^0)]^{-1} \left(C_{ar} - [S(\alpha^0)] C_\alpha \right) \\ &= C_\alpha - [C_{ad}(\alpha^0)] [C_d(\alpha^0)]^{-1} [C_{ad}(\alpha^0)]^\dagger \end{aligned} \quad (\text{A. 17})$$

und mit

$$C_{rd}(\alpha^0) \triangleq \langle (r - r_m) d^\dagger \rangle = \left(C_m - C_{r\alpha} [S(\alpha^0)]^\dagger \right) \quad (\text{A. 18})$$

$$C_{dr}(\alpha^0) \triangleq \langle d(r - r_m)^\dagger \rangle = \left(C_m - [S(\alpha^0)] C_{r\alpha} \right) = [C_{rd}(\alpha^0)]^\dagger \quad (\text{A. 19})$$

ergibt sich durch das Einsetzen von Gleichung (A.19) in (A.16) der Ausdruck der bestmöglichen Einschätzung der Parameter- Kovarianzen- Matrix.

$$\begin{aligned} C_r^{be} &= C_m - \left(C_m - C_{r\alpha} [S(\alpha^0)]^\dagger \right) [C_d(\alpha^0)]^{-1} \left(C_m - [S(\alpha^0)] C_{r\alpha} \right) \\ &= C_m - [C_{rd}(\alpha^0)] [C_d(\alpha^0)]^{-1} [C_{rd}(\alpha^0)]^\dagger \end{aligned} \quad (\text{A. 20})$$

Der Ausdruck für die Parameter- Antworten- Kovarianzen- Matrix ergibt sich durch ähnliche Vorgehensweise und kann wie folgt definiert werden:

$$\begin{aligned} C_{r\alpha}^{be} &= C_{ar}^{be} = C_{r\alpha} \left(C_m - C_{r\alpha} [S(\alpha^0)]^\dagger \right) [C_d(\alpha^0)]^{-1} \left(C_{ar} - [S(\alpha^0)] C_\alpha \right) \\ &= C_{r\alpha} - [C_{rd}(\alpha^0)] [C_d(\alpha^0)]^{-1} [C_{ad}(\alpha^0)]^\dagger \end{aligned} \quad (\text{A. 21})$$

Aus Gleichung (A.17) wird deutlich, dass aus der Initial- Parameter- Kovarianzen- Matrix eine symmetrisch, positive Matrix subtrahiert wird. Folge dessen ist die bestmögliche Einschätzung der Unsicherheiten- Matrix der Parameter C_α^{be} durch den Kalibrierungsprozess (Anpassung), unter der Einbringung neuer Informationen aus den experimentellen Messungen, reduziert. Ähnliche Vorgehensweise erfolgt für das Subtrahieren der Kovarianzen- Matrix C_m und dadurch ergeben sich Verbesserungen bzw. Verringerungen der C_r^{be} - Matrix. Unter der Einbringung von Gleichung (A.21) wird letztendlich die Korrelation zwischen den kalibrierten Parametern und Antworten aufgezeigt, auch wenn die Initialparameter und Antworten keine Korrelation für $C_r^{be} \neq 0$ und $C_{r\alpha} = 0$ besitzen.

$$C_{r\alpha}^{be} = C_m [C_{rc}(\alpha^0 + C_m)]^{-1} [S(\alpha^0)] C_\alpha, \text{ wenn } C_{r\alpha} = 0 \quad (\text{A. 22})$$

Wie aus Gleichung (A.22) zu erkennen ist, verändert die Kalibrierung die Korrelation zwischen den Parametern durch Zusammenhänge, die durch die Sensitivitäten der berücksichtigten Antworten hervorgerufen werden. Diese Sensitivitäten beziehen sich dabei auf die Parameter und Experimentelle- Antworten- Kovarianzen. Zusammenfassend kann nun gesagt werden, dass unter Miteinbeziehung zusätzlicher Informationen der Kalibrierungsprozess die Varianzen der angepassten Parameter und Antworten verringert und gleichzeitig deren Korrelationen verändert. Der Ausdruck aus Gleichung (A.20) stellt die bestmöglich eingeschätzte Kovarianzen- Matrix der Antworten C_r^{be} dar. Der Ausdruck der bestmöglich eingeschätzten Antworten der numerischen Berechnung C_{rc}^{be} kann direkt durch das Modell abgeleitet werden. Hier stehen die Indizes rc („response computed“) für die numerischen Berechnungen und r („responses“) für die Antworten z.B. von C_r^{be} , die direkt aus dem Kalibrierungsprozess ermittelt werden können. Die Ermittlung von C_{rc}^{be}

beginnt dabei mit der Linearisierung, ähnlich wie die zu Gleichung (2.12), allerdings hier um α^{be} statt um α^0 , wie z.B.:

$$r = r(\alpha^0) + S(\alpha^{be})(\alpha - \alpha^0) + HOT$$

(A. 23)

Ausgehend aus Gleichung (A.27) ergibt sich

$$\begin{aligned} C_{rc}^{be} &= \left\langle (r - R(\alpha^{be}))(r - R(\alpha^{be}))^\dagger \right\rangle \\ &= [S(\alpha^{be})] \left\langle (\alpha - \alpha^{be})(\alpha - \alpha^{be})^\dagger \right\rangle [S(\alpha^{be})]^\dagger \\ &= [S(\alpha^{be})] C_\alpha^{be} [S(\alpha^{be})]^\dagger \\ &= [S(\alpha^{be})] \left[C_\alpha - (C_{ar} - C_\alpha [S(\alpha^0)]^\dagger) \right] [C_d(\alpha^0)]^{-1} (C_{ar} - [S(\alpha^0)] C_\alpha) [S(\alpha^{be})]^\dagger \end{aligned}$$

(A. 24)

Dadurch wird im Vergleich von Gleichung (A.24) und (A.23) deutlich, dass im Allgemeinen für $S(\alpha^{be}) \neq S(\alpha^0)$ die Beziehung $C_{rc}^{be} \neq C_r^{be}$ gilt. Für ein ideales, d.h. frei von numerischen Fehlern und exakt lineares System wird die Sensitivitäten Matrix S unabhängig von den Parameter α .

$$S(\alpha^{be}) = S(\alpha^0) = S, \text{ für ideale und lineare Modelle}$$

(A. 25)

Als Konsequenz folgt aus Gleichung (A.25) für C_{rc}^{be}

$$\begin{aligned} C_{rc}^{be} &= S \left[C_\alpha - (C_{ar} - C_\alpha S^\dagger) C_d^{-1} (C_{ar} - S C_\alpha) \right] S^\dagger \\ &= C_{rc} - (C_{rc} - S C_{ar}) \left[C_{rc} + C_e + C_{ra} S^\dagger - S C_{ar} \right]^{-1} (C_{rc} - C_{ar} S^\dagger) \\ &= C_r, \text{ für ideale lineare Modelle} \end{aligned}$$

(A. 26)

Die in Gleichung (A.26) aufgeführte Gleichheit kann durch folgende Identität und durch das Ersetzen von $A \rightarrow C_{rc}, B \rightarrow C_m, C \rightarrow C_{zz} S^\dagger$ bewiesen werden für reguläre quadratische Matrizen A, B und C :

$$\begin{aligned} & A - (A - C^\dagger)(A + B - C - C^\dagger)^{-1}(A - C) \\ &= B - (B - C)(A + B - C - C^\dagger)^{-1}(B - C^\dagger) \end{aligned} \tag{A.27}$$

Die Gleichung (A.27) wird dabei aus der Identität ermittelt

$$\begin{aligned} I &= (A - C^\dagger)(A + B - C - C^\dagger)^{-1} \\ &+ (B - C)(A + B - C - C^\dagger)^{-1} \end{aligned}$$

und durch die Multiplikation auf der rechten Seite mit $(A - C)$ ergibt sich dann

$$\begin{aligned} A - C &= (A - C^\dagger)(A + B - C - C^\dagger)^{-1}(A - C) \\ &+ (B - C)(A + B - C - C^\dagger)^{-1}(A - C + B - B + C^\dagger - C^\dagger) \\ &= (A - C^\dagger)(A + B - C - C^\dagger)^{-1}(A - C) \\ &+ (B - C)(A + B - C - C^\dagger)^{-1}(A + B - C - C^\dagger) \\ &- (B - C)(A + B - C - C^\dagger)^{-1}(B - C^\dagger) \end{aligned}$$

das obige Ergebnis, welches sich durch geringe Veränderungen zu Gleichung (A.27) reduzieren lässt.

Die Ermittlung der bestmöglich einschätzbaren Parameter und Antworten zusammen mit Ihren Unsicherheiten nach den Gleichungen (A.8), (A.9), (A.17), (A.20) und (A.21) erfordert stets die Invertierung einer Einzelmatrix der sogenannten $C_d(\alpha^0)$. In der Regel ist die Handhabung dieser Durchführung mit geringem Aufwand verbunden, solange die Anzahl der Messaufzeichnungen bzw. numerischen Antworten kleiner ist als die Anzahl der Parameter. Übersteigt die Anzahl der Parameter die der Antworten deutlich, ist es möglich geeignetere Ausdrücke für die bestmöglichen Einschätzungen der kalibrierten Parameter und deren zugehörigen Kovarianzen zu verwenden, indem alle Ableitungen im Parameterbereich, statt im Antwortbereich erfolgen. Daraus wird

aus Gleichung (A.24) die Eliminierung der Antworten r für das Auflösen der Minimierungsprozedur, ausschließlich für die Parameter, erforderlich. Alternativ kann eine Vereinfachung, durch die Verwendung der Sherman- Morrison- Woodbury Erweiterung erfolgen:

$$(A + CBD)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}C(B^{-1} + D^{\dagger}A^{-1}C)^{-1}D^{\dagger}A^{-1}$$

(A. 28)

Wobei A und B invertierbar und $D = C$ ist. Dadurch dann nun die Matrix $[C_d(\alpha^0)]^{-1}$ wie folgt geschrieben werden:

$$\begin{aligned} C_d^{-1} &\triangleq (C_{rc} - C_{r\alpha}S^{\dagger} - SC_{\alpha r} + C_m)^{-1} \\ &= A^{-1} - A^{-1}S(C_{\alpha}^{-1} + S^{\dagger}A^{-1}S^{-1})S^{\dagger}A^{-1} \\ &\text{mit } A \triangleq C_m - C_{r\alpha}S^{\dagger} - SC_{\alpha r} \end{aligned}$$

(A. 29)

Die Gleichung (A.29) stellt somit die Verbindung zwischen dem Antworten- und Parameterraum- Formalismen dar. Dabei wird ersichtlich, dass im ersteren (Antworten) die Invertierung einer einzelnen quadratisch- symmetrischen Matrix erforderlich ist, welche die gleiche Dimension besitzt wie die Antworten. Für die Betrachtung des Parameterraums erfordern diese drei Invertierungen. Dabei weisen zwei die gleiche Dimension wie die Parameter und eine die gleiche wie die Antworten auf. Im Fall, dass die Initialparameter und Antworten keine Korrelation besitzen, z.B. wenn $C_{r\alpha} = 0$, können die Gleichungen für den Parameterraum vereinfacht werden und ergeben dann eine besondere Form von Gleichung (A.28)

$$BC^{\dagger}(A + CBC^{\dagger})^{-1} = (B^{-1} + C^{\dagger}A^{-1}C)^{-1}C^{\dagger}A^{-1}$$

(A. 30)

mit der dann Gleichung (A.29) in folgender Form geschrieben werden kann:

$$C_\alpha S^\dagger C_d^{-1} = (C_\alpha^{-1} + S^\dagger C_m^{-1} S)^{-1} S^\dagger C_m^{-1}, \text{ wenn } C_{rc} = 0$$

(A. 31)

Somit ergeben sich für die Ausdrücke aus dem Parameterraum und der obigen Gleichung für α^{be} und C_α^{be} folgende Notationen:

$$\alpha^{be} = \alpha^0 - (C_\alpha^{-1} + S^\dagger C_m^{-1} S)^{-1} S^\dagger C_m^{-1} d, \text{ wenn } C_{ra} = 0$$

(A. 32)

und

$$C_\alpha^{be} = (C_\alpha^{-1} + S^\dagger C_m^{-1} S)^{-1}, \text{ wenn } C_{ra} = 0$$

(A. 33)

Die numerische Ermittlung der Gleichungen (A.32) und (A.33) erfordert dennoch das Invertieren zweier Matrizen, wobei die eine die gleiche Dimension wie die der Parameter besitzt und die andere die gleiche der Antworten. Aus diesem Grund ist es aus Sicht der Berechnungszeit und dem Aufwand stets ratsamer die Berechnung über den Parameterraum zu vermeiden.

B. Erhaltungsgleichungen und Turbulenzmodellierungen

Erhaltungsgleichungen

Flica4 beinhaltet das bekannte Drift-Strömungsmodell mit einer impliziten numerischen Methode zweiter Ordnung. Die Erhaltungsgleichungen bestehen zum einen aus der Kontinuums-Gleichung für Mischungen zum anderen aus der Massenphasengleichung die eine Berechnung für unterkühltes Sieden ermöglicht

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_k \alpha_k \rho_k + \nabla \sum_k (\alpha_k \rho_k u_k) = 0 \quad (\text{B. 1})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_v \rho_v + \nabla \alpha_v \rho_v u_v - \alpha_v M_v = \Gamma_v \quad (\text{B. 2})$$

Weiterhin wird die Impulsgleichung für das Gemisch wie folgt berücksichtigt.

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_k \alpha_k \rho_k u_k + \nabla \sum_k (\alpha_k \rho_k u_k \otimes u_k + \alpha_k \Pi_k) = \sum_k \alpha_k \rho_k g + \tau \quad (\text{B. 3})$$

Für die zugehörige Energieerhaltungsgleichung des Gemisches gilt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_k \alpha_k \rho_k E_k + \nabla \sum_k (\alpha_k \rho_k u_k E_k - \alpha_k \Pi_k u_k - \alpha_k q_k) = \sum_k \alpha_k \rho_k u_k g + Q_{tot} \quad (\text{B. 4})$$

Wobei $k=l$ für die liquide Phase und $k=v$ für die dampfförmige Phase steht. Der Dampfanteil wird durch α beschrieben und es gilt $(\alpha_l + \alpha_v) = 1$. ρ ist die jeweilige

Phasendichte, u der jeweilige Phasengeschwindigkeitsvektor und $E_k = e_k + \frac{u_k^2}{2}$ die jeweilige totale Energie jener Phase und e_k die zugehörige innere Energie. Für die gesamte bzw. totale Berücksichtigung der Enthalpie einer Phase gilt $H_k = h_k + \frac{u_k^2}{2}$. Die durch die Zweiphasenströmung entstehende Turbulenz wird durch den Massendiffusionsterm M_k berücksichtigt und der viskose Spannungstensor sowie die beinhalteten Turbulenzeffekte durch Π_k aufgefasst. Die Wärmeleitung durch das Fluid und dessen turbulente Energiediffusion sind in der Energieerhaltungsgleichung durch q_k erfasst. Die Wärmezufuhr bzw. der erzeugte Wärmestrom an den Heizstaboberflächen sind durch Q_{tot} in der Energiegleichung implementiert.

Der Massentransfer zwischen den Phasen wird durch Γ_k modelliert. τ beschreibt die Widerstandskraft und g die Erdbeschleunigung. Weiterhin wird in dem Drift-Strömungsmodell die relative Geschwindigkeit zwischen dem Fluid und Dampf $u_r = u_v - u_l$ berücksichtigt. Die Verwendung des Drift-Strömungsmodells gilt jedoch nur bei starker Kopplung beider Phasen. Für die FLICA4 Modellierung der Nusseltzahl stark turbulenter Strömungen in axialen Rohrleitungen gilt folgende Beziehung:

$$Nu = \left(Nu_0 + 0.023 \cdot Re^{0.8} Pr^{0.4} \right) \left(\frac{\mu(T_l)}{\mu(T_w)} \right)^0 \quad (\text{B. 5})$$

mit T_l der Kühlmitteltemperatur, T_w der Wandtemperatur und $Nu_0 = 0$. Für die Wandtemperatur gilt folgender Fall des Blasensiedens:

$$T_w = T_{sat} + \Delta T_{sat} \quad (\text{B. 6})$$

Wobei ΔT_{sat} durch die Korrelation der Forster- und Greif- Gleichung beschrieben wird. Diese ist bereits in Kapitel 3.1 vorgestellt worden.

Die Gleichungen für das Zwei-Phasen-Modell in CFX lauten wie folgt für die Masse:

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_k \alpha_k \rho_k + \nabla \sum_k (\rho_k \alpha_k u_k) = 0 \quad (\text{B. 7})$$

Impuls:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla (\rho_k \alpha_k u_k + \alpha_k M_k) \\ = \Gamma_l + \Gamma_v \end{aligned} \quad (\text{B. 8})$$

Wobei k für die jeweilige Phase steht: ($k=v$) Dampf; ($k=l$) Flüssigkeit. Der Dampfvolumenteil α_k ($\alpha_v + \alpha_l = 1$), die Dichte ρ_k und die Geschwindigkeit u_k sind die dazugehörigen Größen. Der Phasenwechsel durch die Wärmezufuhr an das Fluid wird durch Γ_k berücksichtigt. Wobei die gesamte Änderung $\Gamma_l + \Gamma_v = 0$ ist.

Die Impulserhaltung ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \sum_k \alpha_k \rho_k u_k \\ + \nabla \sum_k (\rho_k \alpha_k u_k \otimes u_k) \\ = -\alpha_k \nabla p + \nabla \alpha_k (2\mu D_k - \frac{2}{3} \nabla u_k \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\tau}}_t) \\ M_k + M'_k + \rho_k \alpha_k g + S_k \end{aligned} \quad (\text{B. 9})$$

mit p für den Druck, g für die Gravitation und für $\tau_k = 2\mu D_k - (2/3)(\nabla u_k \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\tau}}_t)$ den Spannungstensor der jeweiligen Phase, der in sich selbst noch den Deformationstensor $D_k = 1/2(\nabla u_k + (\nabla u_k)^\dagger)$ und den turbulenten Anteil beinhaltet. Der Impulstransfer der Phase wird nun durch M_k und der Austausch durch M'_k berücksichtigt. Letztendlich wird noch ein Quellterm in die Gleichung mit eingebaut, der den Druckverlust der Abstandshalter in Betracht zieht. Die Energieerhaltung wird dabei wie folgt definiert:

$$\frac{\partial \rho_k h_{tot}}{\partial t} + \nabla(\rho_k u_k h_{tot}) = \nabla(\lambda \nabla T) + \nabla(u_k \tau) + u_k S_M + S_E \quad (\text{B. 10})$$

wobei der Term $\nabla(u_k \tau)$ die viskose Arbeit, $u_k S_M$ den Inputterm für externe Impulsterme, S_M die Impulsquelle und S_E die Heizquelle darstellen. Für die gesamte Enthalpie gilt dabei $h_{tot} = h + \frac{1}{2}u^2$.

In den folgenden Seiten werden die verwendeten Modelle der CFX Berechnung nach und nach beschrieben. Diese sind zum einen die Impuls- und Phasenmodelle und das RPI- (*Rensselaer Polytechnic Institute*) Modell. Die Widerstandskraft, bezogen auf ein einzelnes Partikel, kann durch folgende Gleichung beschrieben werden:

$$F_v^d = \frac{1}{2} c_D \rho_\alpha A_p |U_\beta - U_\alpha| (U_\beta - U_\alpha) \quad (\text{B. 11})$$

mit dem zugehörigen Widerstandskoeffizient c_D , der Fluidichte ρ_α und der jeweiligen Phasengeschwindigkeit $U_{\alpha\beta}$. Der Koeffizient c_D berücksichtigt die Widerstandskraft selbst und $A_{\alpha\beta}$ die Zwischenphasengrenzfläche. Multipliziert man die Widerstandskraft eines einzelnen Partikels F_v^d mit der Partikelanzahl n_p ergibt sich aus dem Produkt nun die Gesamtwiderstandskraft:

$$F_{\alpha\beta}^d = F_v^d n_p = \frac{3}{4d} c_D \rho_\alpha r_\beta |U_\beta - U_\alpha| (U_\beta - U_\alpha) \quad (\text{B. 12})$$

Die Entstehung der transversalen Liftkraft beruht auf dem physikalischen Phänomen, dass Blasen, die von einer kontinuierlichen Phase umgeben sind, keine symmetrische Druckverteilung haben. Nach [Zun, 1980] ist es möglich die Liftkraft wie folgt zu definieren:

$$\vec{F}_f^{LF} = -c_{LF} \alpha_v \rho_l (\vec{u}_v - \vec{u}_f) \times \text{rot}(\vec{u}_f) \quad (\text{B. 13})$$

Für die Kraft der virtuellen Masse kann Folgendes festgelegt werden:

Bei kugelförmigen Partikeln wird der Wert für C_{VM} mit 0.5 angegeben, wobei die virtuelle Massenkraft proportional zur Beschleunigung der Strömung ist:

$$\vec{F}_{VM} = C_{VM} \rho_L \frac{\pi}{6} d_p^3 \left(\frac{d\vec{U}_L}{dt} - \frac{d\vec{U}_G}{dt} \right) \quad (\text{B. 14})$$

Während der Aufwärtsströmung der Blasen können von der Wand abstoßende Kräfte auf die disperse Phase wirken. Dieser Effekt wird durch [Antal, 1991] als die so genannte Wandkraft bezeichnet.

$$F_\alpha^{LUB} = -F_\beta^{LUB} = -c_{WL} r_d \rho_c |U_c - U_d|^2 n_w$$

$$c_{WL} = \max \left(C_{W1} + C_{W2} \frac{d_p}{y_w}, 0 \right) \quad (\text{B. 15})$$

Dabei ist r_d der Radius der dispersen Phase, U_r die relative Geschwindigkeit zwischen beiden Phasen $U_r = U_c - U_d$, y_w der Abstand zwischen der Wand mit dem kleinstem Weg und n_w der Normalen entgegen der Wandrichtung.

Die Modellierung der turbulenten Dispersionskraft kann zum einen durch das Favre-Averaged Modell nach [Burns, 2004] oder zum anderen durch [Lopez de Bertodano, 1998] modelliert werden. Wobei das Modell von [Burns, 2004] eines der ersten Modelle für die turbulente Dispersionskraft ist und wie folgt beschrieben werden kann:

$$F_c^{TD} = -F_d^{TD} = -C_{TD} \rho_c k_c \nabla r_c \quad (\text{B. 16})$$

Die Werte für den Kraftbeiwert zwischen $C_{TD} = 0.1 \div 0.5$ zeigen für Blasenströmungen mit kleinen Durchmessern von wenigen Millimetern akzeptable Ergebnisse. Diese Korrelationen sind jedoch nicht universell gültig. Das zweite und allgemein gültige Modell basiert auf der Favre-Mittelung der Widerstandskraft der Phasengrenzfläche.

$$F_c^{TD} = -F_d^{TD} = C_{TD} C_{cd} \frac{\nu_{tc}}{\sigma_{tc}} \left(\frac{\nabla r_d}{r_d} - \frac{\nabla r_c}{r_c} \right) \quad (\text{B. 17})$$

Dabei ist C_{cd} der Impulstransferkoeffizient, σ_{tc} die turbulente Schmidt-Zahl der liquiden Phase mit einem Standardwert von 0.9. Die Standardwerte für C_{TD} sind allgemein gültig.

Das Sieden von Flüssigkeiten an festen Oberflächen, wie den Brennstäben in Bündelelementen, beginnen in realen Prozessen in mikroskopisch kleinen Hohlräumen und Spalten. Diese Bereiche führen somit zu einer lokalen Übersättigung der Blasenbildung und weiterhin zu einem raschen Wachstum von Blasen. Numerische Charakterisierungen von Blasenentstehungen und deren Wachstum sind enorm schwierig und erfordern geeignete Modelle. Das RPI (*Rensselaer Polytechnischem Institut*) Modell bietet hier eine gute Abhilfe [*Kurul und Podowski, 1991*]. Zur Beschreibung von Siede- und Kondensationsvorgängen, unter Einfluss von einer Wärmequelle, wird die zuführende Wärmestromdichte in drei Teilbereiche unterteilt:

- Bereiche, die Wand nah sind und eine Blasenentstehung ermöglichen
- Bereiche, in denen es zu einer Überhitzung kommen kann und
- Bereiche, die keinen Beitrag zur Blasenbildung haben

Diese sind in ANSYS CFX als folgende Wärmeströme implementiert

$$Q_W = Q_L + Q_e. \quad (\text{B. 18})$$

Wobei Q_W den Wärmestrom an der Wand, Q_L den Wärmestrom zum Aufheizen der unterkühlten Flüssigkeit und Q_e den Wärmestrom zur Verdampfung beschreibt. Dabei wird Q_L nochmals in die Teile des konvektiven Wärmestroms Q_c und der Wärmeabschreckung Q_q unterteilt:

$$\begin{aligned}
 Q_W &= Q_c + Q_q + Q_e \\
 Q_c &= A_l \cdot h_c \cdot (T_w - T_l) \\
 Q_q &= A_v \cdot h_q \cdot (T_w - T_l) \\
 \text{mit } h_q &= 2\lambda_l f \sqrt{\frac{t_w}{\pi a_1}}
 \end{aligned}
 \tag{B. 19}$$

Der Wärmeübergangskoeffizient h_c hängt dabei stark von der Ablösung und der Neubildung der Blasen ab. A_l ist der Fraktionsanteil der Flüssigkeit. Die Beschreibung der Wandverdampfungsdichte wird durch das Modell von [[Lemmert, Chawla, 1977](#)] beschrieben.

$$n[m^{-2}] = \left(m \left(\Delta T_{\text{sup}} [K] \right) \right)^p
 \tag{B. 20}$$

Mit den Werten für $m = 210$ und $p = 1.085$. Im RPI Modell ist für einen allgemeinen Korrekturwert von 0.8 und für $m = 185$ angenommen worden. [[Egorov and Menter, 2004](#)] formulierte eine weitere Beziehung:

$$n = n_{\text{ref}} [m^{-2}] \left(\frac{\Delta T_{\text{sup}}}{\Delta T_{\text{ref}}} \right)^p
 \tag{B. 21}$$

Wobei $n_{\text{ref}} = 0.8 \cdot 9.922E+5$ und $\Delta T_{\text{ref}} = 10[K]$. Für die Blasenablösedurchmesser gelten die angepassten Korrelationen von [[Kurul, Podowski, 1991](#)] durch [[Tolubinski, Kostanchuk, 1970](#)] und besitzen folgende Notation:

$$d_w = \min \left(d_{ref} \cdot \exp \left(-\frac{\Delta T_{sub}}{\Delta T_{ref}} \right), d_{max} \right) \quad (\text{B. 22})$$

Dabei werden für die Werte $d_{max} = 1.4 \text{ mm}$, $d_{ref} = 0.6 \text{ mm}$ sowie $\Delta T_{ref} = 45 \text{ K}$ angenommen. Aufgrund der nicht universalen Anwendbarkeit des Modells und der starken Abhängigkeit der Fluidtemperatur sind diese für Zellen in Wandnähe auf einen festen Wert von $y^+ = 250$ festgelegt. Gleichzeitig bedeutet das natürlich, dass die Nutzung des Modells stark vom Rechengitter abhängig ist. Die Beschreibung der Ablöserate der Blasen erfordert ein weiteres Modell das durch [Cole, 1960] entwickelt worden ist.

$$f = \sqrt{\frac{4g(\rho_l - \rho_g)}{3C_D d_w \rho_l}} \quad (\text{B. 23})$$

Die Verweilzeit zwischen den ablösenden und den darauf folgenden Blasen wird wie folgt berücksichtigt:

$$t_w = \frac{0.8}{f} \quad (\text{B. 24})$$

Turbulenzmodelle

Die Berechnung der Austauschgröße μ_t wird in den Zwei- Gleichungsmodellen, anhand der RANS (Reynold Averaged Navier- Stokes) und zwei weiterer Transportgleichungen für k und einer Variable ζ bzw. der turbulenten Geschwindigkeit V_t und der charakteristischen Länge L_t durchgeführt. Daraus folgt für die Viskositätsermittlung:

$$v_t \propto \zeta^{\frac{1}{n}} \cdot k^{\frac{m}{2n}} \quad (\text{B. 25})$$

Mit den Konstanten $n = -1$ und $m = 3/2$ kann das bekannte $k - \varepsilon$ Modell ermittelt werden indem die Variable ζ zur Dissipationsgeschwindigkeit ε wird.

$$\varepsilon = \frac{k^{3/2}}{L_t} = \frac{\text{Energie}}{\text{Zeit}} \quad (\text{B. 26})$$

Die gesuchte Austauschgröße $v_t = C_\mu \cdot L \cdot \sqrt{k}$ kann dann über die Beziehung

$$v_t = C_\mu \cdot \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (\text{B. 27})$$

bestimmt werden. Die Dissipation aus (B.26) wird nun durch eine weitere partielle Differentialgleichung gelöst, die wiederum weitere Konstante benötigt.

Die Gleichungen (B.28) und (B.29) stellen nun die beiden gesuchten Transportgleichungen dar:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \rho \varepsilon + P_{kb} \quad (\text{B. 28})$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + C_{\varepsilon 1} P_{\varepsilon b}) \quad (\text{B. 29})$$

Wobei P_{kb} und $P_{\varepsilon b}$ die Einflussgrößen der Auftriebskraft beschreiben und im Fall für einen Auftriebsstrahl wie folgt definiert sind:

$$P_{kb} = -\frac{\mu_t}{\rho \sigma_p} g_i \frac{\partial p}{\partial x_i}; \quad \sigma_p = 1.0 \quad (\text{B. 30})$$

Für eine Boussineq- Annahme gilt für P_{kb}

$$P_{kb} = -\frac{\mu_t}{\rho\sigma_p} \rho\beta g_i \frac{\partial T}{\partial x_i}; \quad \sigma_p = 0.9 \quad (\text{B. 31})$$

Der Koeffizient β beschreibt dabei die thermale Expansion. Für $P_{\varepsilon b}$ gilt die Annahme, dass es direkt proportional mit P_{kb} , dadurch gilt hierfür:

$$P_{\varepsilon b} = C_3 \cdot \max(0, P_{kb}) \quad (\text{B. 32})$$

Für P_k gilt letztendlich:

$$P_k = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \left(3\mu_t \frac{\partial u_k}{\partial x_k} + \rho k \right) \quad (\text{B. 33})$$

Die Konstanten werden durch folgende Standardwerte beschrieben

C_μ	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	σ_k	σ_ε
0.09	1.44	1.92	1.0	1.3

Tabelle 19: Standardwerte aus dem k-epsilon Modell

Das $k-\varepsilon$ Modell liefert im Strömungsfeld zufriedenstellende Ergebnisse. Jedoch kommt es in wandnahen Bereichen zu Komplikationen wie dem zu späten oder zu geringen Ablösen. Ein Modell, dass diese Problematik beheben kann, ist das $k-\omega$ Modell. In diesem wird die Austauschgröße $\nu_t = k\omega^{-1}$ über die Frequenz ω bestimmt.

$$\omega = \frac{1}{C_\mu} \frac{\varepsilon}{k} \left[\frac{1}{s} \right] \quad (\text{B. 34})$$

Jedoch unterliegt dieses dem $k-\varepsilon$ im Strömungsfeld. Die Kombination der Vorteile zwischen dem $k-\varepsilon$ und dem $k-\omega$ -Modell führte zur Entwicklung eines neuen Modells; dem so genannten SST-Modell (Shear-Stress-Transport).

Die Ablösungen werden durch die guten Eigenschaften des $k-\omega$ und die innere Strömung durch das $k-\varepsilon$ Modell beschrieben. Insgesamt liefert es gute Ergebnisse und benötigt akzeptable Rechenzeiten. Dadurch hat sich das SST-Modell zum neuen Standard der Industrie etablieren können.

Wilcox – Model

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j k) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k1}} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \rho \beta^* k \omega \\ \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \omega) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 1}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \alpha_1 \frac{\omega}{k} P_k - \beta_1 \rho \omega^2 \end{aligned} \quad (\text{B. 35})$$

Transformed $k-\varepsilon$ – Model

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j k) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k2}} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \rho \beta^* k \omega \\ \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \omega) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 2}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] \\ &\quad + \frac{2\rho}{\sigma_{\omega 2}} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} + \alpha_2 \frac{\omega}{k} P_k - \beta_2 \rho \omega^2 \end{aligned} \quad (\text{B. 36})$$

Durch die Multiplikation des Wilcox Modells mit F_1 und das *Transformed $k-\varepsilon$ – Model* mit $1-F_1$ ergibt sich das SAS SST Modell, das wie folgt definiert ist:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \rho C_\mu k \omega$$

(B. 37)

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \omega) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 2}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] \\ &+ (1 - F_1) \frac{2\rho}{\sigma_{\omega 2}} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} + \alpha \frac{\omega}{k} P_k - \beta \rho \omega^2 + Q_{SAS} \end{aligned}$$

(B. 38)

wobei $\sigma_{\omega 2}$ aus dem $k - \varepsilon$ Regime ist und der Term Q_{SAS} dabei wie folgt definiert wird:

$$Q_{SAS} = \max \left[\rho \zeta_2 S^2 \left(\frac{L}{L_{vK}} \right)^2 - C \frac{2\rho k}{\sigma_\Phi} \max \left(\frac{1}{\omega^2} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, \frac{1}{k^2} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right), 0 \right]$$

(B. 39)

mit

$$\begin{aligned} F_1 &= \tanh(\arg_1^4) \\ \arg_1 &= \min \left(\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\sigma_{\omega 2} k}{C D_{k\omega} y^2} \right) \end{aligned}$$

(B. 40)

wobei y der nächste Abstand zur Wand ist:

$$C D_{k\omega} = \max \left(2\rho \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i}, 10^{-10} \right)$$

(B. 41)

Die Modellkonstanten, die in dieser Arbeit verwendet worden sind, werden dabei wie folgt beschrieben:

a_1	0.31
α_1	0.55
α_2	0.44
β^*	0.09
β_1	0.075
β_2	0.0828
σ_{k1}	1.17647
σ_{k2}	1.0
σ_{m1}	0.9
$\sigma_{\omega 2}$	1/0.856
ζ_2	3.51
σ_Φ	2/3
C	2

Tabelle 20: Standardwerte aus dem SAS SST Modell

Die Austauschgröße v_t kann dann wie folgt berechnet werden:

$$v_t = \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, S F_2)}$$

(B. 42)

mit

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}, S_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right]$$

(B. 43)

der direkten Einfluss auf Q_{SAS} und $P_k = \mu_t S^2$ hat.

C. Flussdiagramme

Abbildung 99: Flussdiagramm der BFBT Benchmark

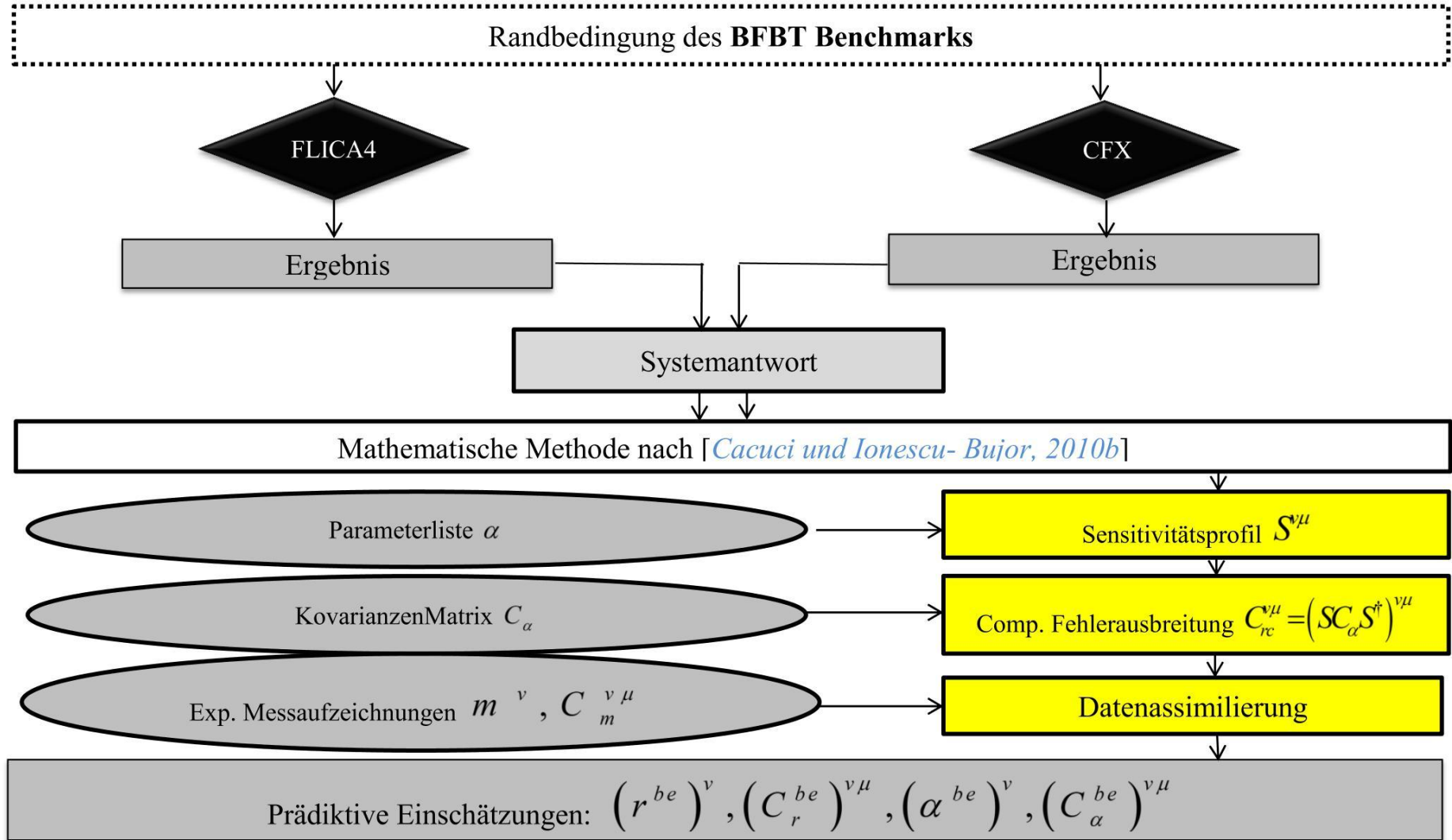


Abbildung 100: Flussdiagramm des TEFLU Experiments

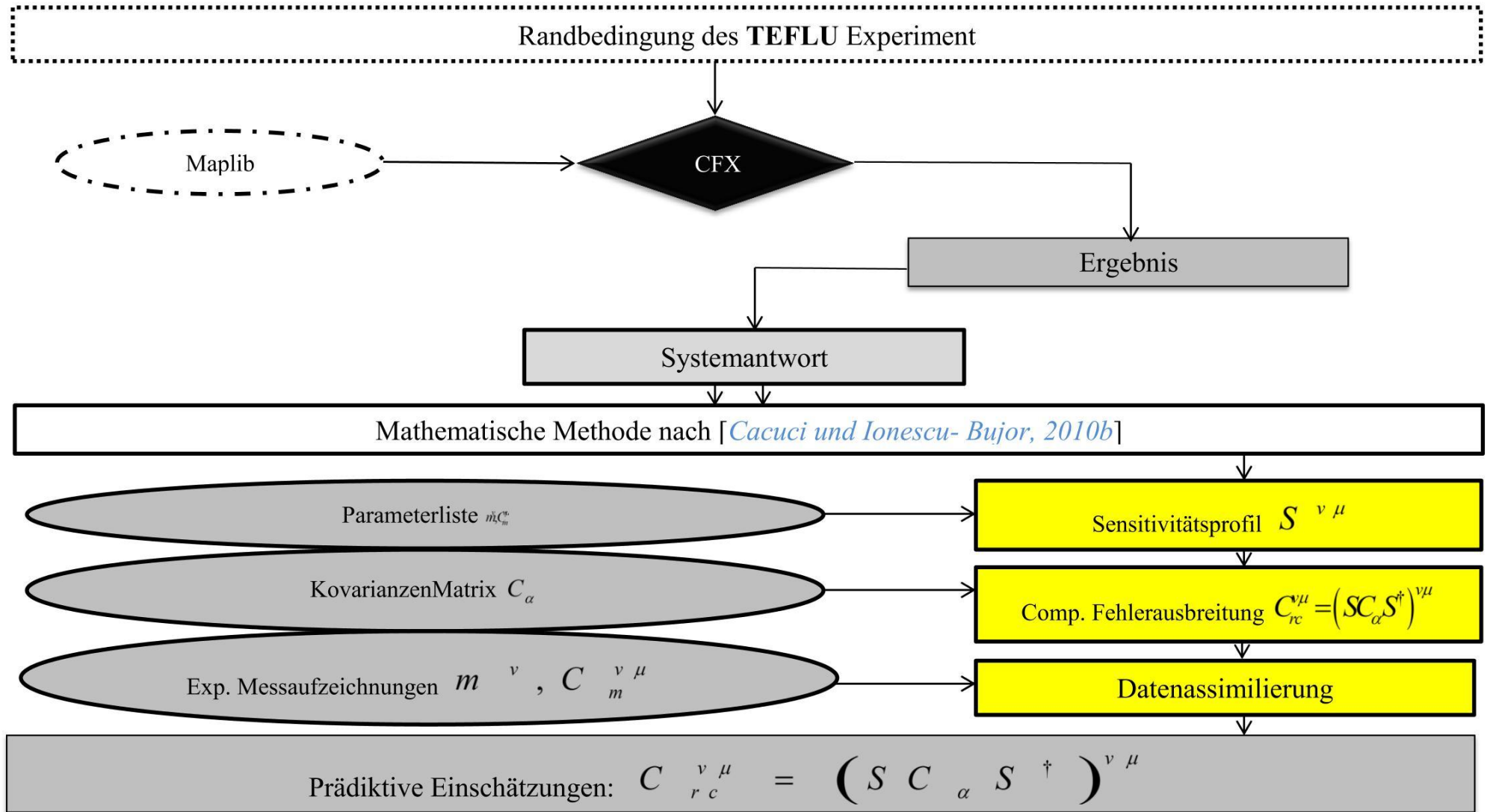


Abbildung 101: Flussdiagramm des TEGENA Experiments

