

Q gerichteter Querstrom
 T turbulenter Querstrom
 V Voiddrift

Eingegangen am 17. 10. 1988

Literatur

- [1] J. Weisman, Nucl. Sci. Engng. 57 (1975), S. 255.
 [2] V. S. Osmatschkin, in: IVth International Heat Transfer Conference, 1970, Bd. V.

- [3] G. Trippe, Experimentelle Untersuchungen turbulenter Strömungen in axial durchströmten Stabbüdeln ohne und mit gitterförmigen Abstandshaltern, Diss. Univ. Karlsruhe 1979.
 [4] R. T. Lahey, J. Heat Transfer, Trans. ASME, Ser. C93 (1971), S. 197; Progr. Heat Mass Transfer 6 (1972), S. 345.
 [5] L. Friedel, Verfahrenstechnik 13 (1979), S. 241.
 [6] I. S. Molochnikov, Teplochnergotika (1982), H. 7, S. 47 (russ.).
 [7] J. Huhn, Kernenergie, in Vorbereitung.
 [8] V. Seiffert, Quervermischung in zweiphasig längsdurchströmten Stabbüdeln bei stationären und transienten Bedingungen, Diss. Univ. Hannover 1981.

Kernenergie	32	(1989)	5	198-205
-------------	----	--------	---	---------

WAREG — Ein Programm zur nutzerorientierten Erzeugung thermophysikalischer Stoffwert-Berechnungsalgorithmen für thermodynamische und thermohydraulische Prozeßmodellierungen

T. Zschunke^a, H.-J. Kretschmar^b, J. Klinger^a

(Technische Universität Dresden, Sektion Energieumwandlung^{a1}), und

Akademie der Wissenschaften der DDR, Zentralinstitut für Kernforschung Rossendorf, Bereich Reaktorphysik^{b1})

(E 11.00) INIS DESCRIPTORS:

w codes: M1; thermodynamics: M2, Q1; hydraulics: M3 Q1; mathematical models: Q2, Q3; computer calculations; regression analysis; optimization; vapors; liquids; density; enthalpy; entropy; free energy; free enthalpy; specific heat; thermal conductivity; vapour pressure; viscosity.

Vorgestellt wird ein Lösungsweg zur Erzeugung von vereinfachten Stoffwertalgorithmen, die den beschränkten Ressourcen kleiner Computer hinsichtlich Speicherplatz und Rechengeschwindigkeit gerecht werden. Er besteht in der Herstellung von Polynomen und anderen einfachen mathematischen Funktionen mit einer Modifikation der schrittweisen Regressionsanalyse mit integrierter Ansatzoptimierung von Wagner. Das auf dieser Basis entwickelte Programm WAREG gestattet u. a., optimierte Gleichungen für alle interessierenden funktionalen Abhängigkeiten thermophysikalischer Zustandsgrößen in einem geforderten Zustandsbereich und bei vorgegebener Genauigkeit zu generieren. Mit WAREG erstellte Algorithmen ermöglichen eine effektive Stoffwertbereitstellung in thermodynamischen und thermohydraulischen Modellierungen von Kernreaktoren einschließlich der Kühlmittelkreisläufe. Sie sind insbesondere für instationäre Berechnungen geeignet.

1. Einleitung

Die rechnergestützte Projektierung, Optimierung und Betriebsführung sowie insbesondere die sicherheitsrelevante Vorausberechnung kerntechnischer Anlagen verlangen eine immer genauere thermodynamische und thermohydraulische Modellierung der ablaufenden Prozesse. Für alle hierzu notwendigen Berechnungen sind Algorithmen mit den thermophysikalischen Stoffdaten der verwendeten Arbeitsmittel eine unabdingbare Voraussetzung. Oder

anders ausgedrückt, stets müssen zwei Bausteine vorhanden sein:

1. Programme für Prozeßmodelle,
2. Programme mit Stoffwerten.

Ein möglicher Lösungsweg zur Bereitstellung solcher Stoffwertalgorithmen besteht in der Approximation von Polynomen oder anderen geeigneten mathematischen Funktionen für alle benötigten thermophysikalischen Zustandsabhängigkeiten [1, 2]. Als Datenbasis können genaue Zustandsgleichungen dienen, die für die wenigen in Betracht kommenden Arbeitsfluide vorliegen. Zu erfüllen sind dabei in erster Linie die sich aus der Prozeßmodellierung ergebenden Forderungen nach dem zu erfassenden Zustandsbereich und der Genauigkeit. Außerdem sollten die aufgestellten Beziehungen bei Einhaltung der genannten Vorgaben eine minimale Anzahl von Termen und Koeffizienten besitzen, um bei ihrer Anwendung geringste Rechenzeiten zu garantieren.

Als das für die Lösung dieser Aufgabenstellung besonders geeignete Verfahren erscheint die schrittweise Regressionsanalyse mit gleichzeitiger Ansatzoptimierung von Wagner [4, 15]. Darüber hinaus wird die davon abgeleitete verfeinerte Rechenvorschrift von De Reuck und Armstrong [5, 6] herangezogen.

Bei der Programmierung zeigte sich, daß gegenüber [4] ... [6] erhebliche Vereinfachungen möglich sind, die sich gravierend auf den Speicherplatz- und Rechenzeitbedarf des Verfahrens auswirken.

Im entstandenen Programm WAREG [7 ... 9] sind diese Veränderungen realisiert.

2. Probleme der Stoffwertbereitstellung in kerntechnischen Berechnungen

Für die Berechnung der nuklearen Anlagensicherheit werden zunehmend international empfohlene Thermohydraulikprogramme, z. B. RELAP4 [10], RELAP5 [11], TRAC [12], genutzt. Diese für die Beschreibung des Tran-

¹) Anschrift: Mommsenstraße 13, Dresden, DDR-8027.

4. Eine Modifikation für die Regressionsanalyse von Wagner

Dem Ziel, die Approximationsfunktion für die im Abschnitt 2 gestellten Forderungen so weit wie möglich zu vereinfachen, kommt ein Regressionsverfahren sehr nahe, das gleichzeitig einen optimalen Ansatz $f(x, y, a_1, \dots, a_K)$ sucht. Dieser ist dadurch gekennzeichnet, daß am Ende alle beteiligten Basisfunktionen einen *wesentlichen* Beitrag zur Darstellung des geforderten Funktionsverlaufes leisten, d. h. ihre Anzahl minimiert ist. Ein Verfahren mit diesen Eigenschaften wurde von Wagner [4] vorgeschlagen und für die eindimensionale Regression von Dampfdruckgleichungen [15] erfolgreich angewendet. De Reuck und Armstrong [5, 6] verfeinerten die Methode und benutzten sie zur Erstellung von thermischen Zustandsgleichungen. Damit war der Übergang zu den in der Realstoffthermodynamik relevanten Flächenproblemen vollzogen.

4.1. Algorithmus nach Wagner

Für M vorgegebene Basisfunktionen (BF) existieren genau $2^M - 1$ mögliche Linearkombinationen (LK), die getestet werden müßten, um die günstigste Verknüpfung bezüglich Fehlerquadratsumme und Basisfunktionsanzahl herauszufinden. Das realisierte Grundanliegen des Verfahrens besteht nun darin, daß eine gezielte Suche durchgeführt und dadurch eine vollständige Berechnung jeder Variante umgangen wird.

Da die Rechenregeln der rekursiven Vorgehensweise in [4] ausführlich angegeben sind, sollen hier nur folgende Anmerkungen gemacht werden:

1. Das bei der Minimierung der Fehlerquadratsumme (2) entstehende Normalgleichungssystem (3) wird durch die an die erste Stelle gesetzte Zeile

$$\sum_{n=1}^N F_n F_n = \sum_{n=1}^N F_n \varphi_{1n} + \sum_{n=1}^N F_n \varphi_{2n} + \dots + \sum_{n=1}^N F_n \varphi_{Mn} \quad (4)$$

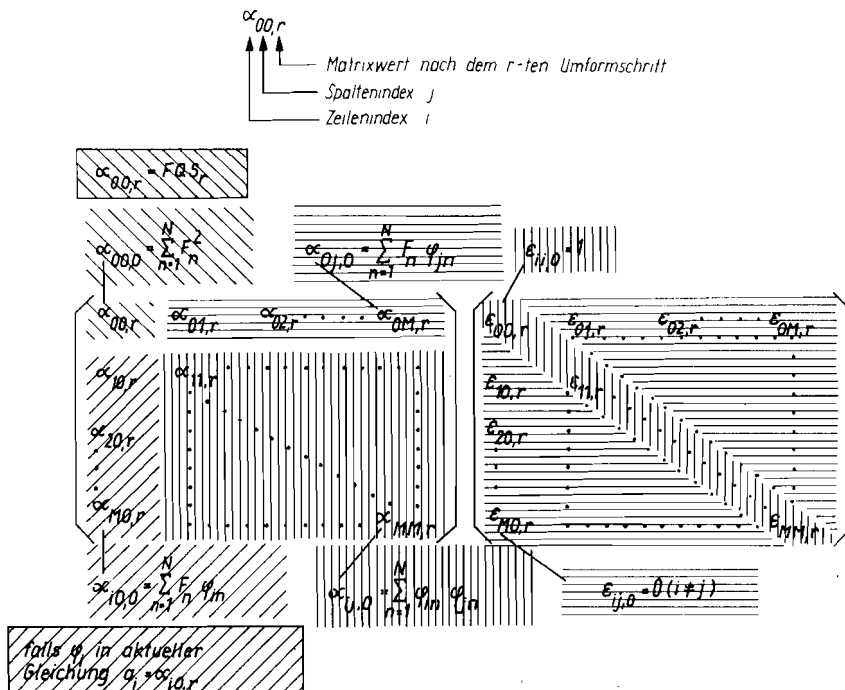


Abb. 2. Ausgangsbelegung der ($r = 0$) Regressionsmatrizen für den Suchalgorithmus nach Wagner

ergänzt. Es entsteht die in Abb. 2 dargestellte Ausgangsmatrix α .

2. Zur Anwendung kommt der Gauß-Algorithmus, wobei die Schaffung des gestaffelten Gleichungssystems in Einzelschritte zerlegt wird. Die Umformungen erfolgen in der Art, daß jeder Schritt die Aufnahme einer Basisfunktion in eine aktuelle Linearkombination simuliert. Alle Umformschritte der Zeilen der Matrix α werden parallel dazu in einer zweiten Matrix ϵ der gleichen Größe (Abb. 2) durchgeführt, die zu Beginn als Einheitsmatrix vorgegeben wird. Bei Anwendung der Regeln für die Aufnahme einer Basisfunktion in der Matrix α auf die Zeilen der zweiten Matrix ϵ ist es somit möglich, auch eine Basisfunktion aus der aktuellen Linearkombination zu eliminieren.

3. Nach jedem Schritt sind die Koeffizienten a_i ($i = 1, \dots, K$) der aktuellen Basisfunktionen direkt in der Matrix ablesbar.

4. Werden alle Umformungsschritte formal auch auf die hinzugefügte Zeile (4) angewendet, ist es möglich, auf der linken Seite dieser Zeile die Fehlerquadratsumme der aktuellen Linearkombination zu entnehmen.

Es sind somit nach jedem Aufnahme- und Eliminierungsschritt alle für die Entscheidungen nötigen Parameter direkt aus der Matrix ablesbar. Dadurch ist es möglich, den Suchablauf effektiv zu gestalten. Insbesondere kann die Auswirkung der Aufnahme oder Eliminierung einer Basisfunktion auf die Fehlerquadratsumme durch die alleinige Umformung der interessierenden Matrixelemente überprüft und somit ein entsprechender Umformschritt „simuliert“ werden. Tab. 1 beinhaltet die bisher verbal beschriebenen Rechenregeln für den ($r + 1$)-ten Umformschritt.

Die Vorgehensweise zur Realisierung dieser Schritte ist außerdem im Ablaufschema von Abb. 3 veranschaulicht. Dargestellt ist die Verkettung der noch zu erläuternden Grundelemente des Suchalgorithmus 1 ... 7 in Anlehnung an de Reuck/Armstrong [5].

Den für die Aufnahme oder/und Eliminierung einer Basisfunktion zu fällenden Entscheidungen liegen zwei Tests zugrunde:

Tab. 1. Rechenregeln für den (r + 1)-ten Umformschritt der Regressionsmatrizen α und ϵ im Suchalgorithmus nach Wagner

Regeln nach Wagner

	$j = k$	$j \neq k$	
$i = k$	$\alpha_{ij, r+1} = 1$	$\alpha_{ij, r+1} = \frac{\alpha_{ij, r}}{\alpha_{kk, r}}$	Aufnahme einer Basisfunktion
$i \neq k$	$\alpha_{ij, r+1} = 0$	$\alpha_{ij, r+1} = \alpha_{ij, r} - \frac{\alpha_{ik, r}}{\alpha_{kk, r}} \alpha_{kj, r}$	
$i = k$	$\epsilon_{ij, r+1} = \frac{1}{\alpha_{kk, r}}$	$\epsilon_{ij, r+1} = \frac{\epsilon_{ij, r+1}}{\alpha_{kk, r}}$	
$i \neq k$	$\epsilon_{ij, r+1} = -\frac{\alpha_{ij, r}}{\alpha_{kk, r}}$	$\epsilon_{ij, r+1} = \epsilon_{ij, r} - \frac{\alpha_{ik, r}}{\alpha_{kk, r}} \epsilon_{kj, r}$	
$i = k$	$\alpha_{ij, r+1} = \frac{1}{\epsilon_{kk, r}}$	$\alpha_{ij, r+1} = \frac{\alpha_{ij, r}}{\epsilon_{kk, r}}$	Eliminierung einer Basisfunktion
$i \neq k$	$\alpha_{ij, r+1} = -\frac{\epsilon_{ij, r}}{\epsilon_{kk, r}}$	$\alpha_{ij, r+1} = \alpha_{ij, r} - \frac{\epsilon_{ik, r}}{\epsilon_{kk, r}} \alpha_{kj, r}$	
$i = k$	$\epsilon_{ij, r+1} = 1$	$\epsilon_{ij, r+1} = \frac{\epsilon_{ij, r}}{\epsilon_{kk, r}}$	
$i \neq k$	$\epsilon_{ij, r+1} = 0$	$\epsilon_{ij, r+1} = \epsilon_{ij, r} - \frac{\epsilon_{ik, r}}{\epsilon_{kk, r}} \epsilon_{kj, r}$	

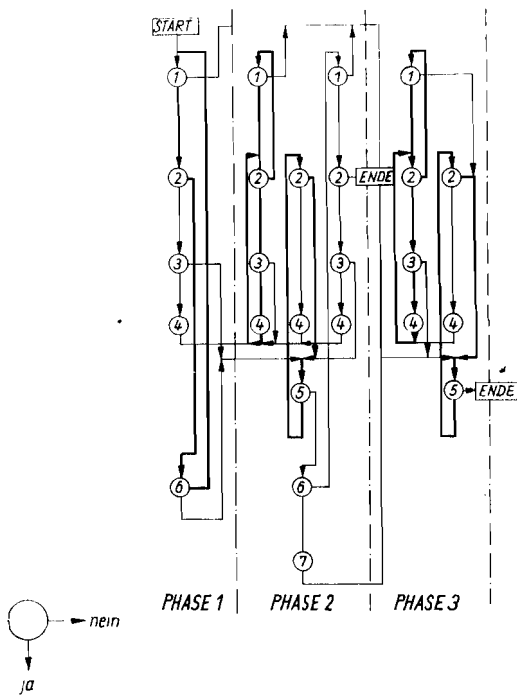


Abb. 3. Schema der verfeinerten Regressionsanalyse nach de Reuck/Armstrong

- 1 Gibt es eine Basisfunktion, die bei Aufnahme in die Linearkombination die Fehlerquadratsumme verringert? (Gegebenenfalls wird die Basisfunktion mit der deutlichsten Verringerung sofort aufgenommen.)
- 2 Ist die Signifikanz der am wenigstensignifikanten Basisfunktion kleiner als ein vorgegebener Festwert? (= Gibt es eine insignifikante Basisfunktion?)
- 3 War die insignifikante Basisfunktion schon vor der Aufnahme der letzten Basisfunktion in der Linearkombination?
- 4 Eliminierung der insignifikanten Basisfunktion.
- 5 Gibt es eine günstige Tauschvariante? (Basisfunktion in der Linearkombination gegen eine nicht enthaltene Basisfunktion) (Gegebenenfalls wird der Tausch sofort ausgeführt.)
- 6 Kann man die schlechteste Basisfunktion entfernen, ohne daß sich die Fehlerquadratsumme wesentlich ändert? (Gibt es Interkorrelationen?)
- 7 Eliminierung der am wenigsten einflußreichen Basisfunktion.

1. Bilden die Basisfunktionen der aktuellen Linearkombination ein Gefüge, aus dem ohne signifikante Vergrößerung der Fehlerquadratsumme Funktionen entfernt werden können (Abb. 3, 6)? Es wird der *F*-Test an Hand der *Fisher*-Verteilung durchgeführt.

2. Sind die Basisfunktionen der aktuellen Linearkombination, jede für sich, signifikant und hat demnach der zugehörige Koeffizient einen deutlich von Null verschiedenen Wert (Abb. 3, 2)? Diese Frage wird mit dem *T*-Test nach *Gosset* (*Student*-Verteilung) beantwortet.

Die Reaktionen des Algorithmus sind folgende:

1. Ist eine Basisfunktion im Ergebnis des *T*-Tests nicht signifikant, wird sie aus der Linearkombination eliminiert (Abb. 3, 4).

2. Aufgenommen wird immer diejenige Basisfunktion, welche im Vergleich zu den nicht in der Linearkombination enthaltenen die Fehlerquadratsumme am stärksten verringert (Abb. 3, 1).

3. Fällt Test 1 positiv aus, wird jede Basisfunktion der aktuellen Linearkombination probeweise gegen jede der nicht enthaltenen ausgetauscht. Die Tauschvariante mit der deutlichsten Verringerung der Fehlerquadratsumme wird durchgeführt (Abb. 3, 5).

4. Gelingt durch den Austausch keine Verringerung der Fehlerquadratsumme, wird die am wenigsten signifikante Basisfunktion eliminiert (Abb. 3, 7).

4.2. Modifikation

Eine Vereinfachung der Umformregeln, wie sie in Tab. 1 aufgeführt sind, konnte erreicht werden, indem:

1. die beiden Matrizen α und ϵ zu einer Matrix *R* zusammengefaßt und
2. die Umformungsregeln in ihrer Reihenfolge so angeordnet wurden, daß es nun möglich ist, die Werte der Matrix sofort durch die neu berechneten zu überspeichern.

Tab. 2. Vereinfachte Rechenregeln für den (r + 1)-ten Umformschritt der zusammengefaßten Regressionsmatrix R

Nr.	Betreffende Indizes	Regel	
		I	II
1	0 ≤ i ≤ M und i ≠ k 0 ≤ j ≤ M und j ≠ k	$R_{ij, r+1} = R_{ij, r} - \frac{R_{ik, r} R_{kj, r}}{R_{kk, r}}$	$R_{ij, r+1} = R_{ij, r} - \frac{R_{ik, r} R_{kj, r}}{R_{kk, r}}$
2	i = k 0 ≤ j ≤ M und j ≠ k	$R_{ij, r+1} = \frac{R_{kj, r}}{R_{kk, r}}$	$R_{ij, r+1} = \frac{R_{kj, r}}{R_{kk, r}}$
3	0 ≤ j ≤ M und i ≠ k j = k	$R_{ij, r+1} = -\frac{R_{ik, r}}{R_{kk, r}}$	$R_{ij, r+1} = +\frac{R_{ik, r}}{R_{kk, r}}$
4	i = k j = k	$R_{ij, r+1} = +\frac{1}{R_{kk, r}}$	$R_{ij, r+1} = -\frac{1}{R_{kk, r}}$

• FQS_{r+1} = R_{00, r+1}
 • falls s-te BF in aktueller LK (nach der Umformung): a_s = R_{s0, r+1}

Tab. 3. Modifizierte Rechenregeln für den (r + 1)-ten Umformschritt des Regressionsvektors R*

Nr.	Betreffende Indizes	Regeln
1	0 ≤ i ≤ M und i ≠ k 0 ≤ j ≤ i und j ≠ k	$R_{L(i, j), r+1}^* = R_{L(i, j), r}^* - \frac{R_{L(i, k), r}^* R_{L(k, j), r}^*}{R_{L(k, k), r}^*}$
2	i = k 0 ≤ j ≤ M j ≠ k	$R_{L(i, j), r+1}^* = \frac{R_{L(k, j), r}^*}{R_{L(k, k), r}^*}$
3	i = k j = k	$R_{L(i, j), r+1}^* = -\frac{1}{R_{L(k, k), r}^*}$

• L(i*, j*) = 1/3 {max(i*, j*) · [max(i*, j*) + 1] + min(i*, j*)}

• FQS_{r+1} = R*_{0, r+1}

• falls s-te BF in aktueller LK nach der Umformung
 a_s = R*_{L(s, 0), r+1}

j*

→

0	1	2	3
0	0	L(i*, j*) =	
1	1	2	
2	3	4	5
3	6	7	8 9

Die neue Matrix R,

$$\begin{bmatrix} R_{00} & R_{01} & \dots & R_{0M} \\ R_{10} & R_{11} & \dots & R_{1M} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ R_{M0} & R_{M1} & \dots & R_{MM} \end{bmatrix}, \quad (5)$$

deren Elemente gemäß (3) und (4) analog zur Matrix α zu bilden sind, wird jetzt nach den in Tab. 2, Regel I zusammengefaßten Gleichungen umgeformt. Es ist ersichtlich, daß für die Aufnahme und Eliminierung der Basisfunktion k jetzt gleiche Rechenregeln existieren. Die Information über die Zusammensetzung der aktuellen Linearkombination muß jedoch gesondert mitgeführt werden.

Ziel einer weiteren Modifikation ist es, die nach der Aufstellung vorhandene Symmetrie der Matrix auch während der Umformschritte zu erhalten. Bei den Umformungen nach Tab. 2 treten Asymmetrien nur auf Grund des negativen Vorzeichens in der dritten Regel auf. Eine Korrektur kann erfolgen, indem jeweils die k-te Spalte vor Anwendung der Umformregeln mit (-1) multipliziert wird. Das ist möglich, da in einem beliebig folgenden Schritt, falls die q-te Basisfunktion aufgenommen werden soll, die Rechenregeln für diese Spalte

$$R_{ik, r+1} = R_{ik, r} - \frac{R_{iq, r} R_{qk, r}}{R_{qq, r}} \quad \text{für} \quad \begin{cases} 0 \leq i \leq M, \\ i \neq q, \end{cases} \quad (6)$$

und

$$R_{qk, r+1} = \frac{R_{qk, r}}{R_{qq, r}} \quad (7)$$

lauten. Der einmal zugefügte Faktor bleibt erhalten, da in den beiden Summanden von (6) und in (7) je ein Element der Spalte k steht. Dies in die Rechenregeln einbezogen, ergibt die in Tab. 2, Regel II aufgeführten Beziehungen. Sie enthalten jetzt die Symmetriebedingungen. Damit wird es möglich, nur die untere Dreiecksmatrix von R mitzuführen. Die Abspeicherung kann platzsparend in der Vektorform

$$R_{L(i, j)}^* = R_{ij} \quad \text{mit} \quad L(i, j) = \frac{i(i+1)}{2} + j \quad \text{für} \quad j \leq i \quad (8)$$

erfolgen.

In Tab. 3 sind die als Ergebnis aller Modifikationen erhaltenen Rechenregeln für die Aufnahme und Eliminierung der k-ten Basisfunktion bei Verwendung des Regressionsvektors R* zusammengefaßt.

4.3. Schlußfolgerungen

Das jetzt vorliegende Lösungsverfahren zeigt eine enge Verwandtschaft mit dem Austauschverfahren. Es gelang in bezug auf die Lösung des Normalgleichungssystems gegenüber der Ausgangsversion [4] eine Verringerung des benötigten Speicherplatzes auf ein Achtel. Diese Vereinfachungen bewirken gleichzeitig eine Verringerung der Rundungsfehler und der Gesamtrechenzeit für die Regressionsanalyse auf 30%. Der Programmieraufwand bei Neuerstellung des Algorithmus verringert sich um etwa die Hälfte.

5. Das Programm WAREG

Der beschriebene Algorithmus ist das Kernstück des Programmes WAREG. Da als Datengrundlage das Stoffwertprogrammpaket des WB Thermodynamik [16 ... 20] dient, sind zur Generierung vereinfachter thermophysikalischer Zustandsgleichungen nur folgende Angaben notwendig:

1. Kennzahl des Stoffes im Stoffwertprogrammpaket,
2. Kennzahl für die gesuchte funktionelle Abhängigkeit,
3. Eckpunkte bzw. Funktionen (einschließlich Grenzkurven) für die Festlegung des Zustandsbereiches durch einen Polygonzug,
4. Größen, für die Daten in die Regression einfließen sollen,
5. Angaben zum Raster für die Berechnung der Regressionsdaten (Größen, Schrittweiten, Koordinatentransformationen), soweit sie vom Standard abweichen,
6. Zustandspunkte, die von der Regressionsfunktion exakt wiedergegeben werden sollen (Nebenbedingungen),
7. Zusammenstellung der Basisfunktionen aus Katalog, einschließlich Potenzreihen und/oder Erweiterung durch Vorgabe.

Darüber hinaus ist auch eine Verarbeitung von Meßwerten oder anderweitig gewonnenen Daten unabhängig vom Programmpaket möglich. Da die Anzahl der unabhängigen Größen beliebig ist, unterliegt auch die Art der betrachteten Abhängigkeiten keinen Einschränkungen und ist nicht an Zustandsgrößen gebunden. So wurden u. a. Wärmeübertragercharakteristiken mit sechs Unbekannten berechnet.

Es ist auch möglich, die Regressionsanalyse in übergeordneten Iterationen aufzurufen. Zum Beispiel kann eine Variation der statistischen Kriterien für die Bewertung der Signifikanz von Basisfunktionen für eine Approximation nach dem maximalen Fehler im geforderten Zustandsbereich genutzt werden.

Programm WAREG

Zweck

Suche nach optimalen Zustandsfunktionen auf der Basis des Regressionsverfahrens von Wagner

ergänzende Möglichkeiten:

1. Fixierung der aufzustellenden Gleichung auf vorzugebende Werte an ausgewählten Punkten (Nebenbedingungen)
2. Einbeziehung der Werte von Ableitungen der aufzustellenden Funktion, z. B. von
 - thermodynamischen Differentialquotienten,
 - Phasengleichgewichtsdaten

Bemerkungen zur Arbeitsweise für den Nutzer:

- automatischer Rückgriff auf das Stoffwertprogrammpaket nach Angaben
 - zum Bereich (Angabe der Eckpunkte eines Polygons)
 - zum Raster
 - welche Größen dienen zur Rasterfestlegung,
 - welche Schrittweiten,
 - Koordinatentransformationen bei Rasterbildung
- Basisfunktionen werden in verschlüsselter Form als Parameter eingegeben
- Dialogarbeitsweise
 - Strukturierung der Eingabedaten
 - Wiederverwendbarkeit von Zwischenergebnissen

Abb. 4. Das Programm WAREG zur Erzeugung vereinfachter Stoffwertalgorithmen (Übersicht)

Tab. 4. Zusammenstellung ausgewählter, mit dem Programm WAREG approximierter Zustandsgleichungen

Gleichung	Bereichsgrenzen bei 1% maximaler relativer Abweichung gegenüber IFC 67		
	p_{\min}/MPa	p_{\max}/MPa	$t_{\max}/^{\circ}\text{C}$
$h_r(p, T) = a_1 T_{100}^{0,4} + a_2 T_{100}^{1,8} + a_3 T_{100}^{-3} + a_4 p_r T_{100}^{-5}$ $a_1 = 1,497 \cdot 10^3 \quad a_2 = 3,742 \cdot 10^{-2}$ $a_3 = 9,468 \cdot 10^3 \quad a_4 = -1,483 \cdot 10^5$	0,1	4	700
$h_r(p, T) = a_1 T_{100} + a_2 T_{100}^{0,5} + a_3 T_{100}^{0,9} + p_r [a_4 + a_5 T_{100} + a_6 T_{100}^{-1,1}]$ $a_1 = 3,410 \cdot 10^3 \quad a_2 = 3,743 \cdot 10^3$ $a_3 = -5,281 \cdot 10^2 \quad a_4 = 1,398 \cdot 10^2$ $a_5 = -7,313 \cdot 10^0 \quad a_6 = -9,132 \cdot 10^2$	0,01	8	800
$v_r(p, T) = a_1 T_{100}/p_r + a_2 T_{100}^{-3} + a_3 T_{100}^{-5} + a_4 T_{100}^{-6} + \ln \frac{p_r}{22,1} (a_5 T_{100}^{-2} + a_6 T_{100}^{-3})$ $a_1 = 4,622 \cdot 10^{-2} \quad a_2 = -1,317 \cdot 10^0$ $a_3 = 3,780 \cdot 10^0 \quad a_4 = -4,514 \cdot 10^4$ $a_5 = 2,030 \cdot 10^{-2} \quad a_6 = -1,782 \cdot 10^{-1}$	0,001	2,4	800
$s_r(p, T) = a_1 p_{\ln}^2 + a_2 p_{\ln}^{0,02} + a_3 p_{\ln}^{0,6} + a_4 T_{100}^2/p_r + \frac{1}{T_{100}} (a_5 p_{\ln} + a_6 p_{\ln}^2 + a_7 p_{\ln}^3)$ $a_1 = -1,728 \cdot 10^{-1} \quad a_2 = 6,815 \cdot 10^0 \quad a_3 = 1,928 \cdot 10^0$ $a_4 = 3,066 \cdot 10^{-3} \quad a_5 = -8,180 \cdot 10^0 \quad a_6 = 1,360 \cdot 10^0 \quad a_7 = -5,749 \cdot 10^{-2}$	0,18	5	400
$h_r(p, s) = a_1 s_r + a_2 s_r^2 + a_3 s_r^4 + p_{\ln} [a_4 s_r^2 + a_5 s_r^3]$ $a_1 = 7,488 \cdot 10^2 \quad a_2 = -8,359 \cdot 10^4$ $a_3 = 5,475 \cdot 10^{-1} \quad a_4 = 4,239 \cdot 10^{-1}$ $a_5 = 6,163 \cdot 10^{-1}$	0,23	3	400
$c_{p,r}(p, T) = a_1 T_{100}^{0,2} + \frac{1}{T_{100}^2} (a_2 p_r + a_3 p_r^2)$ $a_1 = 1,424 \cdot 10^0 \quad a_2 = 1,846 \cdot 10^4$ $a_3 = 7,710 \cdot 10^3$	0,1	2,4	400
$h_r = h/1 \text{ kJ/kg} \quad v_r = v/1 \text{ m}^3/\text{kg} \quad s_r = s/1 \text{ kJ/kg K} \quad c_{p,r} = c_p/1 \text{ kJ/kg K}$ $T_{100} = T/100 \text{ K} \quad p_r = p/1 \text{ MPa} \quad p_{\min} \leq p \leq p_{\max} \quad T_g(p) \leq T \leq T_{\max} \quad (T \text{ in K}) \quad p_{\ln} = \ln \left(\frac{p}{0,1 \text{ MPa}} \right)$			

Im folgenden seien nochmals die Eigenschaften des Programmes WAREG zusammengefaßt:

1. Berücksichtigung von Daten auch für die Ableitungen der gesuchten Abhängigkeiten,
2. Verarbeitung von gewichteten Daten,
3. Berücksichtigung von Nebenbedingungen,
4. Generierung von Basisfunktionen,
5. Berücksichtigung von globalen Koordinatentransformationen,
6. umfangreiche Variationsmöglichkeiten bezüglich Ansatz und Regressionsdaten im Dialog,
7. übersichtliche und kompakte Ergebnisdarstellung.

Eine Übersicht soll außerdem Abb. 4 vermitteln.

6. Beispiele und Nachnutzung

Eine Zusammenstellung ausgewählter Zustandsgleichungen, die mit dem Programm WAREG für Wasserdampf approximiert wurden, zeigt Tab. 4. Die Berechnung der zur Aufstellung der Gleichungen verwendeten Regressionsdaten erfolgte mit der Formulierung „The 1967 IFC Formulation for Industrial Use“ [21], die für industrielle Anwendungen international verbindlich ist. Aus diesem Grund bezieht sich der angegebene maximale relative Fehler von 1% auch auf diese Formulierung. Die Gleichungen von Tab. 4 wurden von WAREG aus Ausgangsansätzen mit jeweils 30 ... 60 vorgegebenen Basisfunktionen als die optimalen Verknüpfungen ermittelt.

Weitere Erläuterungen und Diskussionen zu den erhaltenen Gleichungen sind in der Arbeit [25] zu finden. Eine spezielle Auswertung der gefundenen Beziehung für die spezifische Wärmekapazität c_p des überhitzten Wasserdampfes enthält [9].

Für weitere Anwendungsfälle ist es auf Grund der Flexibilität des Programmes unproblematisch, solche Gleichungen auch für andere Zustandsbereiche zu erstellen.

Da das Stoffwertprogramm auf der EDVA BESM-6 installiert ist, wurde auch das Programm WAREG auf diesem Rechner entwickelt, um eine schnelle Bereitstellung der Regressionsdaten zu ermöglichen. Die aktuelle Version liegt IBM-kompatibel in FORTRAN-77 vor. Bis Ende des Jahres 1989 wird auch eine weitestgehend kompatible Version für Personalcomputer der 16-Bit-Generation zur Nutzung bereitstehen.

7. Schlußfolgerungen

Im vorliegenden Programm WAREG wird eine der möglichen Suchstrategien genutzt. Da perspektivisch das Ziel besteht, einen Algorithmus zu schaffen, der für einen vorgegebenen maximalen Fehler die optimale Auswahl der Basisfunktionen vornimmt, sollen weitere Verfahren [22 ... 24] untersucht und verglichen werden. Eine Fixierung des Algorithmus auf den maximalen Fehler ist notwendig, da diese Größe insbesondere für die Aufgabe, vereinfachte Zustandsgleichungen herzustellen, maßgebend ist. Zunächst ist vorgesehen, das beschriebene Verfahren innerhalb einer Iteration, die den maximalen relativen Fehler als Normgröße hat, zu verwenden. Bei Veränderung der statistischen Parameter für die Signifikanz einer Basisfunktion bzw. der Gleichung insgesamt wird dann die Suche nach dem optimalen Funktionsansatz so lange fortgesetzt, bis der maximale Fehler im gesamten Zustandsbereich nicht mehr überschritten wird.

Darüber hinaus wird an einer Verknüpfung des modifizierten *Wagner*-Verfahrens mit nichtlinearer Regression gearbeitet. Das Ziel besteht darin, für die Terme eines Ansatzes, die am stärksten dessen Genauigkeit beeinflussen, nichtlineare Parameter zuzulassen und diese vor der linearen Regressionsanalyse zu bestimmen. Die Autoren haben die begründete Hoffnung, damit noch komprimiertere Approximationsfunktionen bei mindestens gleicher Genauigkeit schaffen zu können.

Das vorgestellte Verfahren ist natürlich auch auf Regressionsaufgaben anderer Fachgebiete anwendbar.

Eingegangen am 17. 10. 1988

Literatur

- [1] H.-J. Kretzschmar, J. Klünger, St. Schneider, A. Dittmann, Wiss. Ber. III Zittau (1987), Nr. 709, VI/5, S. 16 ... 22.
- [2] H.-J. Kretzschmar, J. Klünger, I. Zwickler, R. Stamm, Zur vereinfachten Bereitstellung von thermophysikalischen Stoffwerten auf Mikrorechnern und Schaffung eines Entwicklungssystems für derartige Funktionen unter Nutzung des Stoffwert-Programmpaketes, Studie TU Dresden, Sektion Energieumwandlung, WB Thermodynamik 1984.
- [3] H.-J. Kretzschmar, Zur effektiven Bereitstellung von thermophysikalischen Stoffdaten für Wasser — angewendet in instationären thermohydraulischen Modellierungen von Kernreaktoren, ZfK Rossendorf, Bereich Reaktorphysik, Arbeitsbericht RPT-1/86, Rossendorf 1986.
- [4] W. Wagner, Fortschrittsberichte VDI-Zeitschrift, Reihe 3, 39 (1974).
- [5] K. M. de Reuck, B. Armstrong, Cryogenics 19 (1979), H. 9, S. 505 ... 512.
- [6] K. M. de Reuck, SEEQ — A Computer Program for a Search Procedure based on a Step-Wise Least Squares Technique, Imperial College of Science and Technology, London 1979.
- [7] T. Zschunke, Realisierung des Approximationsverfahrens von *Wagner* zur automatischen Erzeugung vereinfachter Stoffwertalgorithmen, Diplomarb. TU Dresden, Sektion Energieumwandlung, WB Thermodynamik 1987.
- [8] T. Zschunke, H.-J. Kretzschmar, J. Klünger, Aufbereitung des Regressionsverfahrens von *Wagner* zur automatisierten Erzeugung von Stoffwertalgorithmen, Forschungsbericht TU Dresden, Sektion Energieumwandlung, WB Thermodynamik 1988.
- [9] T. Zschunke, H.-J. Kretzschmar, J. Klünger, A. Dittmann, Eine Modifikation der Regressionsanalyse mit Ansatzoptimierung von *Wagner* — angewendet für die Erzeugung von thermophysikalischen Stoffwertalgorithmen, Fluid Phase Equilibria 1989, in Vorbereitung.
- [10] J. Brittain, W. Bryce, C. Green, The RELAP-UK/MK4 Transient Thermal-Hydraulic Code: Summary and Input Data Description, Report AEEW-R 1196, 1978.
- [11] C. S. Miller, RELAP5/MOD2 Development, Report EGG-M-22786, Idaho Falls 1986.
- [12] D. R. Liles, J. H. Mainoffy, TRAC-PF1/MOD1: an Advanced Best-Estimate Computer Program for Pressurized Water Reactor Thermohydraulic Analysis, Report NUREG/CR-3858, Los Alamos 1986.
- [13] M. Heitsch, H. Wand, Kerneenergie 30 (1987), H. 9, S. 351 ... 357.
- [14] E. Adam et al., Sicherheit von Kernkraftwerken mit Druckwasserreaktor, Forschungsbericht TU Dresden, Sektion Energieumwandlung, WB Kerneenergie 1988.
- [15] W. Wagner, Brennstoff — Wärme — Kraft 27 (1975), H. 7, S. 290 ... 297.
- [16] H.-J. Kretzschmar, J. Klünger, Energietechnik 34 (1984), H. 6, S. 210 ... 215.
- [17] H.-J. Kretzschmar, Wiss. Z. techn. Univ. Dresden 33 (1984), H. 4, S. 139 ... 146.
- [18] H.-J. Kretzschmar, J. Klünger, Das neue Stoffwert-Programmpaket mit stoffunabhängigen Algorithmen für die Zustandsfunktionen, Forschungsbericht TU Dresden, Sektion Energieumwandlung, WB Thermodynamik 1985.
- [19] A. Dittmann, J. Klünger, H.-J. Kretzschmar, Preparation of Thermodynamic Property Values for Technical Process Calculations, in: The Properties of Steam, Moscow 1986.
- [20] T. Zschunke, H.-J. Kretzschmar, J. Klünger, Chem. Techn. 40 (1988), H. 5, S. 199 ... 205.
- [21] U. Grigull, Properties of Water and Steam in SI-Units, Berlin — Heidelberg — New York und München 1982.

- [22] J. Ewers, W. Wagner, VDI-Forschungsheft 609, 1982.
 [23] A. Saul, Forschungsberichte VDI-Zeitschrift, Reihe 3, 149 (1988).
 [24] A. Saul, W. Wagner, J. phys. chem. Ref. Data 1989, zur Veröffentlichung angenommen.
 [25] J. Nediakoff, Ermittlung optimaler thermodynamischer Stoffwertalgorithmen für ausgewählte Stoffe und Zustandsbereiche mit Hilfe des Programmsystems WAREG, Diplomarb. TU Dresden, Sektion Energieumwandlung, WB Thermodynamik 1988.
 [26] U. Grigull, NBS/NRC -- Wasserdampfatafel, Berlin -- Heidelberg -- New York -- London -- Paris -- Tokyo 1988.
 [27] N. Elsner, S. Fischer, J. Klinger, Thermophysikalische Stoffeigenschaften von Wasser, Leipzig 1982.

Kernenergie 32 (1989) 5 205-211

Modelluntersuchungen zur Erosionskorrosion an Bauteilen von Sattdampfturbinen

G. Sörgel, B. Goll

(Technische Universität Dresden, Sektion Energieumwandlung)¹⁾

(B 22.50; E 31.00; E 32.00) INIS DESCRIPTORS:

nuclear power plants; pwr type reactors; bwr type reactors; steam turbines: M1; corrosion: M2, Q1; erosion: M3, Q1; carbon steels: Q2, Q3; cast iron; wear; mathematical models; steam quality; test facilities.

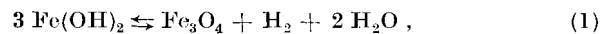
Die im HD-Teil von Sattdampfturbinen auftretende Erosionskorrosion an nichtrotierenden Bauteilen aus unlegiertem Stahl oder Stahlguß beeinflußt wesentlich die Instandhaltungsstrategie und die realisierbaren Revisionszyklen bei KKW-Turbinen. Im Hinblick auf die Vielzahl von Einflußfaktoren, von denen ein über längere Betriebszeiten zu erwartender Erosionskorrosionsverschleiß abhängt, zielen experimentell gestützte Forschungsarbeiten in verschiedenen Ländern darauf hin, hinreichend genaue empirische Berechnungsmodelle für den Erosionskorrosionsverschleiß bei unterschiedlichen Randbedingungen aufzustellen. In diese Bemühungen ordnen sich die Modelluntersuchungen am 1986 in Betrieb genommenen Erosionskorrosionsprüfstand der Sektion Energieumwandlung der TU Dresden ein, die zu einem Berechnungsmodell führen sollen, das für die Betriebsbedingungen der Kernkraftwerksturbinen in der DDR eine ausreichende Treffsicherheit besitzt.

1. Ursachen des Erosionskorrosionsverschleißes an nicht rotierenden Bauteilen der HD-Teile von Kernkraftwerksturbinen

Ausgehend von den relativ niedrigen Frischdampfparametern ($p_F = 4 \dots 6$ MPa bzw. $t_F = 250 \dots 275$ °C), die im Kernkraftwerk (KKW) mit Druckwasser- oder Siedewasserreaktor für die Turbine zur Verfügung stehen, wurden bei den zum Einsatz kommenden Sattdampfturbinen bereits im Hochdruck- (HD-) Teil die nicht rotierenden Bauteile (Gehäuse, Gehäuseeinbauten, Anzapfdampfleitungen) früher häufig aus unlegiertem Stahl oder Stahlguß ausgeführt. Im Gegensatz zu den langjährigen Erfahrungen mit einem derartigen Werkstoffeinsatz in den ebenfalls im Naßdampfgebiet arbeitenden Niederdruck- (ND-) Teilen konventioneller Kondensatorsturbinen stellte man an diesen Bauteilen einen mit der Betriebszeit ständig fortschreitenden Materialabtrag infolge Erosionskorrosion, d. h. Zusammenwirken mechanischer Erosions- und chemischer Korrosionsprozesse, fest.

Von den für das Auftreten von Erosionskorrosion maßgebenden Einflußfaktoren (Fluidparameter, Charakter der

Strömung, konstruktive Bauteilgestaltung, wasserchemisches Regime u. a.) spielt bei Bauteilen aus unlegiertem Stahl die temperaturabhängige Beständigkeit der auf der Bauteiloberfläche aus dem Kontakt mit dem Naßdampf gebildeten Fe_3O_4 - (Magnetit-) Schutzschicht eine besondere Rolle [1 ... 4]. Bei einem für KKW-Kreisläufe üblichen Wasserregime mit geringem O_2 -Gehalt entsteht oder zerfällt Magnetit nach der Beziehung



wobei sich erst bei $t > 150$ °C das Gleichgewicht deutlich in Richtung Magnetitbildung verschiebt [5]. Darüber hinaus wird die Schutzschichtbildung speziell beim Erosionskorrosionsprozeß durch mechanische Einwirkung des strömenden Fluids erschwert oder gar verhindert [6].

Aus der gleichläufigen Temperaturabhängigkeit von Schutzschichtbeständigkeit und Korrosionsgeschwindigkeit ergibt sich folgendes Erosionskorrosions-Verschleißverhalten naßdampfbeaufschlagter Bauteile aus unlegiertem Stahl: Sowohl bei sehr niedrigen Dampftemperaturen $t < 100$ °C (keine oder nur instabile Schutzschicht, aber niedrige Korrosionsgeschwindigkeit) als auch bei Werten $t > 200$ °C (hohe Korrosionsgeschwindigkeit, aber stabile Schutzschicht) ist in der Regel nur mit einem geringen Erosionskorrosionsverschleiß zu rechnen. Einen besonders starken Materialabtrag infolge Erosionskorrosion kann man vor allem im Temperaturbereich 130 (150) °C $< t < 190$ °C (noch instabile Schutzschicht, aber bereits relativ hohe Korrosionsgeschwindigkeit) erwarten.

Betrachtet man unter diesem Aspekt die Änderung der Naßdampftemperatur bei der Energieumwandlung im HD-Teil der u. a. auch im KKW Greifswald installierten Sattdampfturbine K-220-44 (Abb. 1), so zeigt sich, daß für die aus unlegiertem C-Stahl oder Stahlguß ausgeführten Bauteile im Bereich zwischen 3. und 6. Stufe eine besondere Gefährdung durch Erosionskorrosion besteht. Nach dem gegenwärtigen internationalen Erkenntnisstand kann zwar Erosionskorrosionsverschleiß bei Verwendung Cr-legierter Stähle nahezu ausgeschlossen werden [2, 7 ... 9], aber es ist vor allem aus Kostengründen nicht in jedem Falle möglich, ursprünglich aus unlegiertem Stahl ausgeführte Bauteile weit vor Erreichen ihrer geplanten Grenzlebensdauer in größerem Umfang durch solche aus Cr-Stahl zu ersetzen. Für diesen Fall ist die Schaffung experimentell abgesicherter Unterlagen zur Vorausbestimmung ihres unter speziellen Betriebsbedingungen über längere Betriebszeiten zu erwartenden Erosionskorrosionsverschleißes eine Voraussetzung für die langfristige Planung der notwendigen Instandhaltungsmaßnahmen.

¹⁾ Anschrift: Mommsenstraße 13, Dresden, DDR-8027.