



M. Kunick, H.-J. Kretschmar
Hochschule Zittau/Görlitz, Fachgebiet Technische Thermodynamik,
Zittau

Schnelle und konsistente Stoffwertberechnung mit Spline-Interpolation – Arbeiten innerhalb der IAPWS Task Group "CFD Steam Property Formulation"

Inhalt:

- Motivation, Problemstellung und Lösungsansätze
- Grundlagen der Stoffwert-Berechnung mit Spline-Interpolation
- Stoffwertberechnung für Wasser und Wasserdampf in CFD-Simulationen
- FluidSplines – ein Tool zur Erstellung von Spline-basierten Stoffwertfunktionen
- Zusammenfassung und Ausblick

Bochum, 9. März 2012

Motivation

Motivation:

- Neue Technologien zur Stromerzeugung erfordern aufwändigere Prozess-Simulationen, instationäre Prozessführung konventioneller Kraftwerke wird häufiger notwendig
- Strömungssimulationen (CFD) zur Auslegung und Optimierung von energietechnischen Komponenten und Anlagen
 - extrem viele Aufrufe von Stoffwertfunktionen
 - hohe numerische Konsistenz von Vorwärts- u. Rückwärtsfunktionen



IAPWS Task Group "CFD Steam Property Formulation"

Anforderungen an die Stoffwertberechnung:

- Hohe Genauigkeit (vergleichbar mit der Berechnung aus Fundamentalgleichungen)
- Minimale Rechenzeit (>100 mal schneller als die Berechnung aus Fundamentalgl.)
- Stetige Abbildung der thermodyn. Zustandsgrößen und deren Ableitungen
- Höchstmögliche numerische Konsistenz zwischen Vorwärts- u. Rückwärtsfunktionen

Problemstellung und Lösungsansätze

Problemstellung:

- Berechnung ausgehend von innerer Energie u und spezifischem Volumen v
- IAPWS-IF97:
 - keine Rückwärtsgleichungen in expliziter Form $z = f(u, v)$ verfügbar
 - im Einphasengebiet erfolgt die Berechnung ausgehend von (p, T)



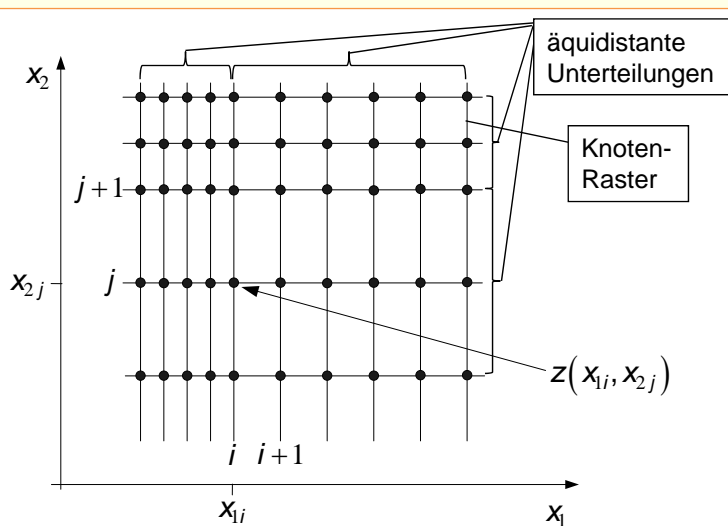
zweidimensionale Iteration für $z = f(u, v)$ notwendig

Lösungsmöglichkeiten:

- Entwicklung von Rückwärtsgleichungen für $z = f(u, v)$
 - hoher Aufwand
 - Rechenzeiten mit Rückwärtsgleichungen der IF97 vergleichbar
 - beschränkte numerische Konsistenz zwischen Vor- u. Rückwärtsgleichungen
 - Unstetigkeiten an Unterbereichsgrenzen
- Bereitstellung von Fundamentalgleichungen $s(u, v)$ für die einzelnen Bereiche der IF97
 - hoher Aufwand
 - Rechenzeiten mit Gleichungen der IF97 vergleichbar
 - Beschränkte Passfähigkeit zur IF97
- Anwendung der Stoffwertberechnung mit Spline-Interpolation
 - kürzeste Rechenzeiten
 - vollständige numerische Konsistenz zwischen Vor- u. Rückwärtsgleichungen

Grundlagen der Stoffwert-Berechnung mit Spline-Interpolation

Aufstellen einer Spline-Funktion $z^{\text{SPL}}(x_1, x_2)$ ausgehend von einer Fundamentalgl. $z^{\text{EOS}}(x_1, x_2)$:



- Erzeugung eines äquidistanten Datenrasters
- geeignete Transformation der Koordinaten
- Berechnung der Stützwerte
- Berechnung der Spline-Koeffizienten

$$z_{ij}^{\text{SPL}}(x_1, x_2) = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 a_{ijkl} (x_1 - x_{1i})^{k-1} (x_2 - x_{2j})^{l-1}$$

- Optimierung des Stützdatenrasters

Bereitstellung der Spline-Funktion für die Stoffwertberechnung:

- Speichern des Knotenrasters und der zugehörigen Spline-Koeffizienten
- Generierung rechenzeitoptimierter Quelltexte für die Stoffwertfunktion $z^{\text{SPL}}(x_1, x_2)$

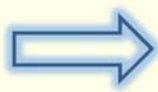


Anwendung in CFD und anderen aufwändigen numerischen Simulationen

Grundlagen der Stoffwert-Berechnung mit Spline-Interpolation

Berechnung von inversen Spline-Funktionen (Beispiel: bi-quadratisches Polynom):

$$z_{ij}^{\text{SPL}}(x_1, x_2) = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 a_{ijkl} (x_1 - x_{1l})^{k-1} (x_2 - x_{2j})^{l-1}$$



$$x_{1,ij}^{\text{INV}}(z, x_2) = \frac{(-B \pm \sqrt{B^2 - 4AC})}{2A} + x_{1i}$$

wobei $A = a_{ij31} + \Delta x_{2j} (a_{ij32} + a_{ij33} \Delta x_{2j})$

$$B = a_{ij21} + \Delta x_{2j} (a_{ij22} + a_{ij23} \Delta x_{2j})$$

$$C = a_{ij11} + \Delta x_{2j} (a_{ij12} + a_{ij13} \Delta x_{2j}) - z$$

und $\Delta x_{2j} = (x_2 - x_{2j})$



Die inverse Spline-Funktion $x_{1,ij}^{\text{INV}}(z, x_2)$ ist vollständig numerisch konsistent zur Spline-Funktion $z_{ij}^{\text{SPL}}(x_1, x_2)$.

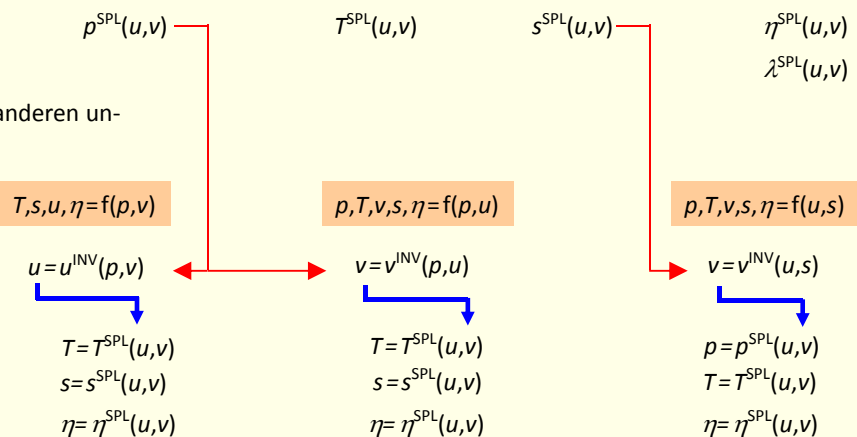
Stoffwertberechnung für Wasser und Wasserdampf in CFD-Simulationen

Anwendung von inversen Spline-Funktionen (unabhängige Variablen: u, v):

→ Spline Funktionen ausgehend von u und v :

→ Berechnung ausgehend von anderen unabhängigen Variablen:

→ Inverse Spline Funktionen:

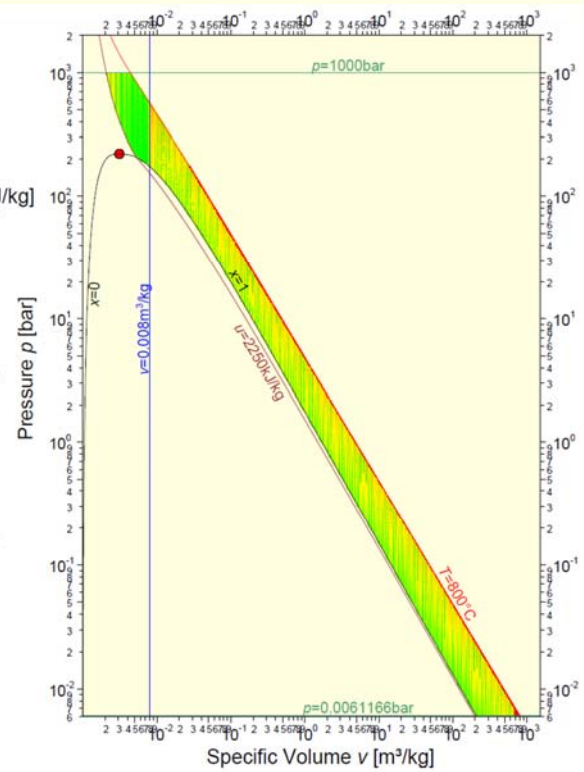
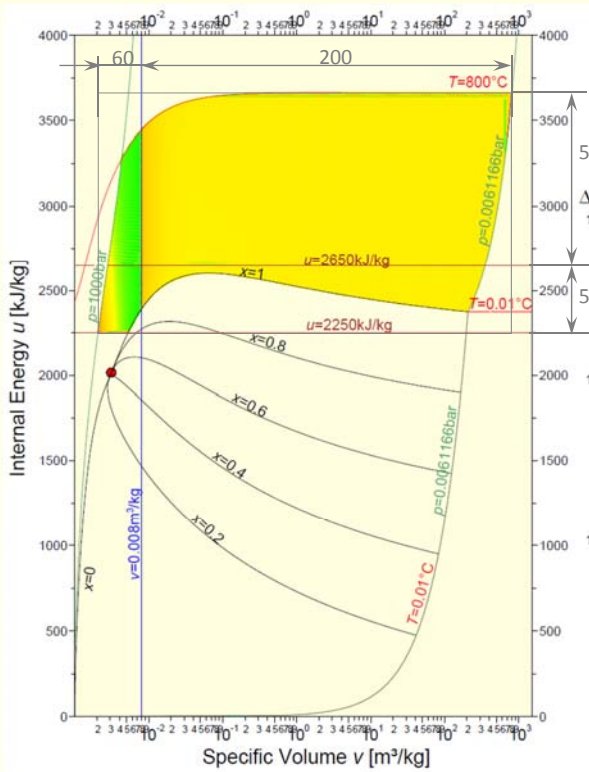


- Alle thermodynamischen Zustandsgrößen, einschließlich Rückwärtsfunktionen, können ohne Iterationen berechnet werden.
- Die Spline-Funktionen sind zueinander vollständig numerisch konsistent.

Stoffwertberechnung für Wasser und Wasserdampf in CFD-Simulationen

→ Spline-Funktion $p^{SPL}(u,v)$ basierend auf IAPWS-IF97:

→ Inverse Spline-Funktion $u^{INV}(p,v)$:



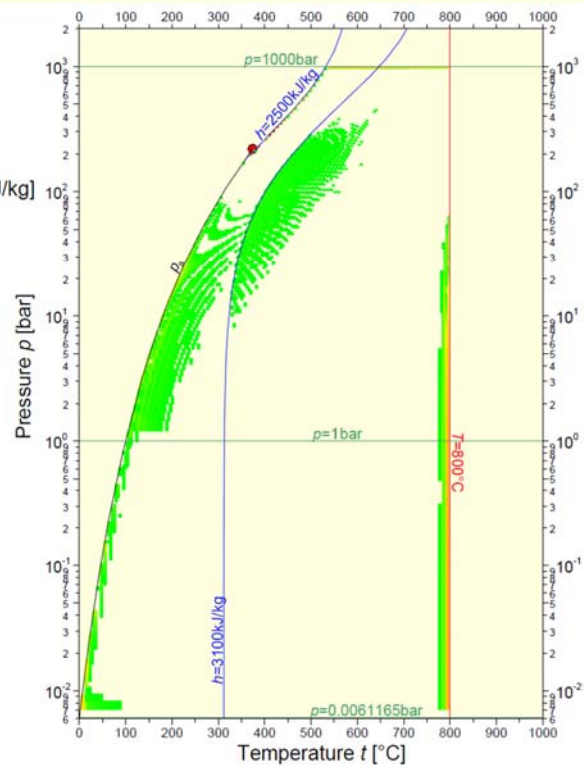
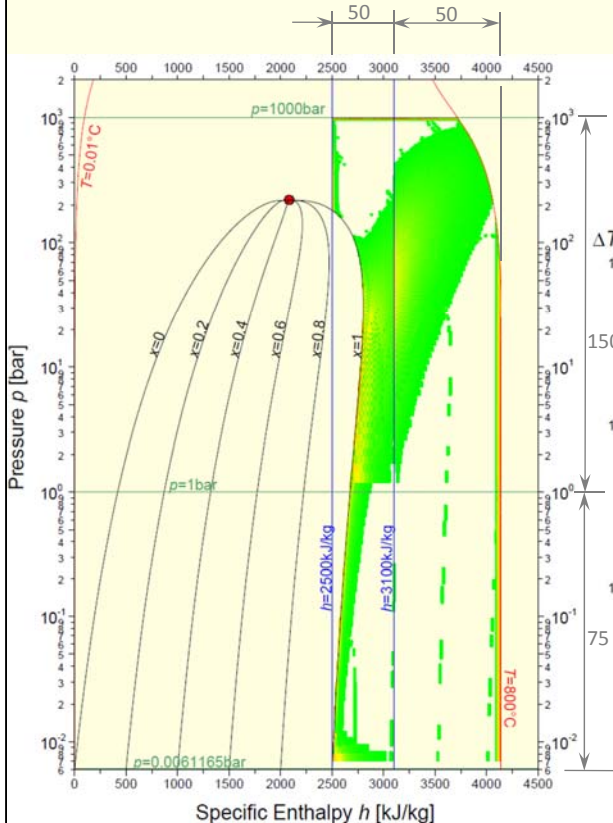
Rechenzeiten im Vergleich zur IAPWS-IF97:
CTR ≈ 260

CTR ≈ 19

Stoffwertberechnung für Wasser und Wasserdampf für instationäre Prozesse

→ Spline-Funktion $T^{SPL}(p,h)$ basierend auf IAPWS-IF97:

→ Inverse Spline-Funktion $h^{INV}(p,T)$:



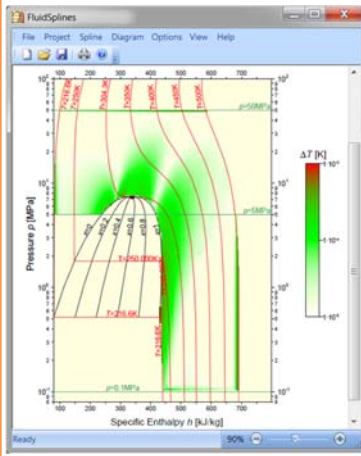
Rechenzeiten im Vergleich zur IAPWS-IF97:
CTR ≈ 2 (zur Rückwärtsgleichung $T(p,h)$)

CTR ≈ 1,2

FluidSplines – ein Tool zur Erstellung von Spline-basierten Stoffwertfunktionen

FluidSplines

Software zur Erzeugung von Stoffwert-Bibliotheken mit Spline-Interpolation



Erzeugung von Spline-Funktionen ausgehend von:

- Beschreibung des Gültigkeitsbereichs
- geforderte Genauigkeit

Weitere Funktionen:

- Erzeugung inverser Spline-Funktionen
- Genauigkeitsanalyse
- Bestimmung der Rechenzeit

Thermodynamische Stoffdaten:
(Datenbasis)

REFPROP[®]

Stoffwertbibliotheken
der HS Zittau/Görlitz

Ausgabe:

- Rechenzeit-optimierte Quelltexte
- stat./dyn. Bibliotheken
- Dokumentation hinsichtlich Genauigkeit und Rechenzeit

Einsatz der Stoffwertberechnung mit Spline-Interpolation:

- Simulation kraftwerkstechnischer Prozesse in Wärmeschaltbild-Berechnungsprogrammen
- Numerische Strömungssimulation (CFD)
- Berechnung instationärer Prozesse
- weitere Anwendungen

Zusammenfassung und Ausblick

Zusammenfassung:

- Mit Spline-basierten Table Look-up Verfahren kann eine hohe Genauigkeit bei gleichzeitig geringer Rechenzeit gewährleistet werden (CRT=100...>1000 gegenüber wissenschaftlichen Fundamentalgleichungen)
- Vollständig numerisch konsistente Vorwärts- u. Rückwärtsfunktionen möglich
- Extreme Anforderungen der Berechnung instationärer Prozesse und der numerischen Strömungssimulation können erfüllt werden (num. Konsistenz, Stetigkeit)
- Gute Passfähigkeit zu existierenden Standards (z.B. IAPWS-IF97)

Ausblick:

- Weiterentwicklung der Spline-Algorithmen und Tools
- Testrechnungen in CFD-Programmen (TRACE, entwickelt am DLR)
- Testrechnungen in WSB-Programmen (EBSILON, entwickelt bei STEAG Energy Services)
- Erarbeitung einer IAPWS-Guideline

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!