

# **Neue IAPWS-Richtlinie zur schnellen und genauen Berechnung thermophysikalischer Stoffeigenschaften in numerischen Prozesssimulationen**

*Matthias Kunick, Hochschule Zittau/Görlitz, Zittau;*

*Hans-Joachim Kretschmar, Hochschule Zittau/Görlitz, Zittau;*

*Francesca di Mare, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), Köln;*

*Uwe Gampe, Technische Universität Dresden, Dresden*

Zur Auslegung und Optimierung energietechnischer Komponenten und Anlagen kommen numerische Strömungssimulationen (CFD) und Kreisprozessberechnungen zum Einsatz. Dabei ist insbesondere die Simulation instationärer Prozesse extrem aufwändig und erfordert sehr genaue und besonders schnelle Stoffwert-Berechnungsalgorithmen. Zudem müssen die verwendeten Stoffwertfunktionen stetig sein und besonders hohe Ansprüche hinsichtlich der numerischen Konsistenz von Umkehrfunktionen erfüllen. Um diesen Anforderungen zu entsprechen wurde in einem Projekt der International Association for the Properties of Water and Steam (IAPWS) das Spline-basierte Stoffwert-Berechnungsverfahren (SBTL) entwickelt.

Ausgehend von verfügbaren Fundamentalgleichungen zur Berechnung thermodynamischer Zustandsgrößen werden für die in der Prozessberechnung benötigten Stoffwertfunktionen Stützstellenraster zur Spline-Interpolation erzeugt, die hinsichtlich der Genauigkeit und der Rechenzeit für den gewünschten Gültigkeitsbereich optimiert sind. Erreicht wird dies durch spezielle Variablentransformationen und eine geeignete Struktur des Stützstellenrasters, wodurch das Spline-Polynom an die Form der Stoffwertfunktion angepasst wird. Die so erstellten SBTL-Funktionen bilden die aus der zugrundeliegenden Fundamentalgleichung berechneten Zustandsgrößen mit hoher Genauigkeit (1-10 ppm) ab, wobei sich der Rechenzeitbedarf um Faktoren von 100 bis über 1000 reduzieren lässt. Weiterhin ermöglicht das Verfahren die schnelle Berechnung numerisch konsistenter Umkehrfunktionen.

Der Nutzen des entwickelten Verfahrens in numerischen Strömungssimulationen wurde in einem gemeinsamen Projekt mit dem Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) nachgewiesen. Die Rechenzeiten zur Simulation von Nassdampfströmungen in Dampfturbinenstufen mit der CFD-Software TRACE konnte mit dem SBTL Verfahren im Vergleich zur Anwendung der IAPWS-IF97 um den Faktor 10 reduziert werden. Gegenüber der üblichen Berechnung mit Idealgas-Modellen wird die Gesamtrechenzeit lediglich um den Faktor 1,4 erhöht. Das SBTL Verfahren wird auch in den Kreisprozess-Berechnungsprogrammen KRAWAL von Siemens PG und EBSILON Professional von STEAG Energy genutzt. Dadurch konnten in KRAWAL die Rechenzeiten halbiert werden. In RELAP-7, der vom Idaho National Laboratory entwickelten Software zur Sicherheitsanalyse von Kernreaktoren, ersetzen hochgenaue SBTL-Funktionen die bisher verwendeten Näherungsgleichungen. Die Ergebnisse der Prozesssimulationen mit dem SBTL Verfahren sind praktisch identisch zur direkten Anwendung des IAPWS-IF97 Standards.

Für das vorgestellte Verfahren wurde die "IAPWS Guideline on the Fast Calculation of Steam and Water Properties with the Spline-Based Table Look-Up Method (SBTL)" erarbeitet. Diese Richtlinie wurde im Juli 2015 als internationaler Standard für die Berechnung der Eigenschaften von Wasser und Wasserdampf in aufwändigen Prozesssimulationen offiziell angenommen.