

K. Knobloch, H.-J. Kretzschmar
Hochschule Zittau/Görlitz (FH), Fachgebiet Technische Thermodynamik



W. Wagner
Ruhr-Universität Bochum, Lehrstuhl für Thermodynamik



A. Dittmann
Technische Universität Dresden, Institut für Thermodynamik und TGA

Ergänzende Gleichungen für Umkehrfunktionen zur Industrie-Formulation IAPWS-IF97 von Wasser und Wasserdampf für energietechnische Prozessberechnungen

Inhalt

Struktur der IAPWS-IF97 und ergänzende Rückwärtsgleichungen

IAPWS-Projekt: Entwicklung von weiteren Rückwärtsgleichungen

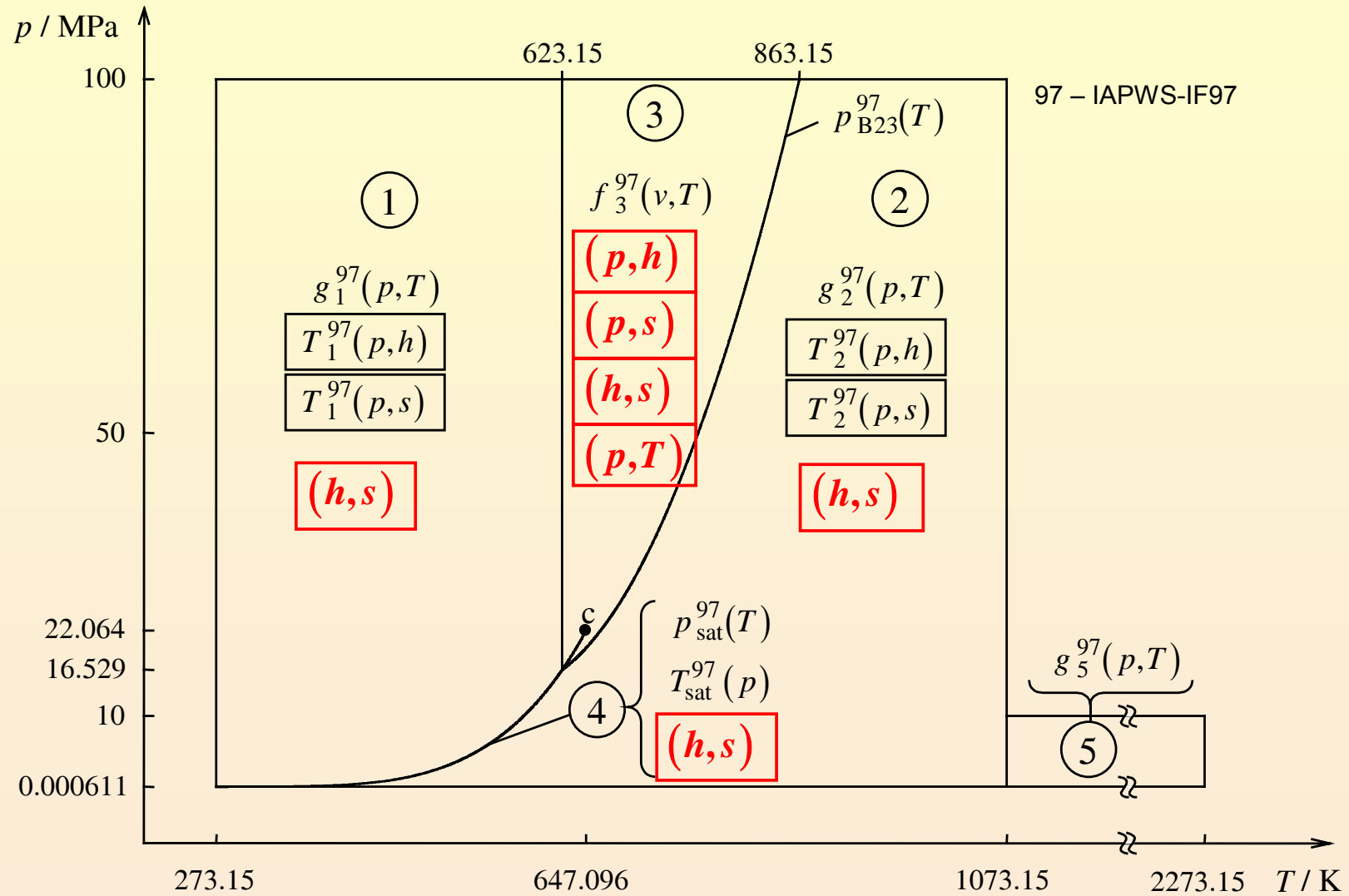
Forderungen an Rückwärtsgleichungen

Rückwärtsgleichungen für Funktionen von (h, s)

Rückwärtsgleichungen für Funktionen von (p, T) im kritischen Gebiet

Rechenzeit im Vergleich zu Iterationen mit IAPWS-IF97 Fundamentalgleichungen

IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam IAPWS-IF97



Entwicklung ergänzender Rückwärtsgleichungen

**IAPWS-Working Group
Industrial Requirements
and Solutions
(IRS)**

**IAPWS-Working Group
Thermophysical Properties
of Water and Steam
(TPWS)**

**Task Group
on Supplementary Backward Equations
for IAPWS-IF97**

H.-J. Kretzschmar, Hochschule Zittau/Görlitz (FH) (Vorsitz)

J. R. Cooper, Queen Mary University, London

A. Dittmann, Technische Universität Dresden

D. G. Friend, NIST Boulder

A. H. Harvey, NIST Boulder

K. Knobloch, Hochschule Zittau/Görlitz (FH)

R. Mareš, University of West Bohemia, Pilsen

R. Span, Universität Paderborn

I. Stöcker, Hochschule Zittau/Görlitz (FH)

W. Wagner, Ruhr-Universität Bochum

Evaluation Task Group

K. Miyagawa, Tokio (Vorsitz)

J. Gallagher, NIST Gaithersburg

N. Okita, Toshiba Corporation, Yokohama

I. Weber, Siemens AG Power Generation, Orlando

Forderungen an Rückwärtsgleichungen

1. Rechenzeitverringerung

- Berechnungen mit den Rückwärtsgleichungen müssen viel schneller sein als die Iterationen der Fundamentalgleichungen.

2. Extrem hohe numerische Konsistenz

- Differenz zwischen der Rückwärtsgleichung und Fundamentalgleichung
- Entspricht der Iterationsgenauigkeit, die für die Prozessberechnung notwendig ist
- Ermittelt durch IAPWS auf Basis einer weltweiten Befragung der Industrie

Beispiel: Rückwärtsgleichung $T(p,h)$

Diagramm

$$|\Delta T| = |T(p,h) - T|$$

↑
 $h(p,T)$ – als Ableitung der Fundamentalgleichung $g(p,T)$

Problem: Die geforderte numerische Konsistenz ist über eine Größenordnung höher als die Genauigkeit der berechneten Zustandsgrößen selbst

Approximationsverfahren

Algorithmus

- Dissertationen: *T. Zschunke* (1990), *T. Willkommen* (1995), *J. Trübenbach* (1998)

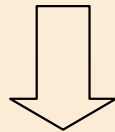
Basis Strukturoptimierungsmethode von *Setzmann* und *Wagner*

Modifikationen

- Automatisierte Generierung und Optimierung des Termvorrates
- Optimierung von nichtlinearen Parametern
- Automatische Stützpunktichtung mit dem Ziel: Minimierung der maximalen Abweichung
- Berücksichtigung der Anwendungsrechenzeit bei der Optimierung der Gleichungsstruktur

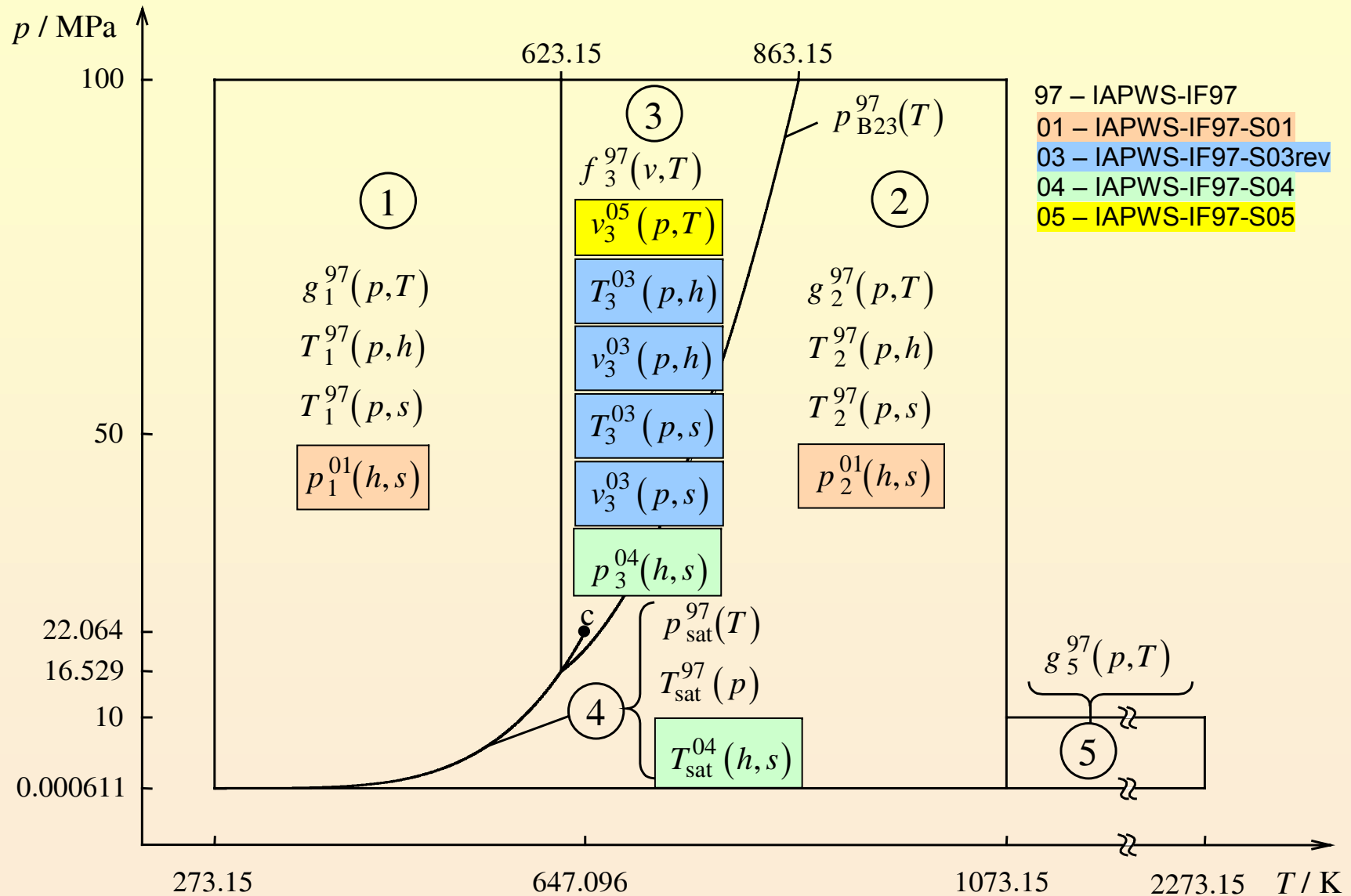
Datenbasis Industrie-Formulation IAPWS-IF97

Hardware SGI Origin2000 mit 48 Prozessoren

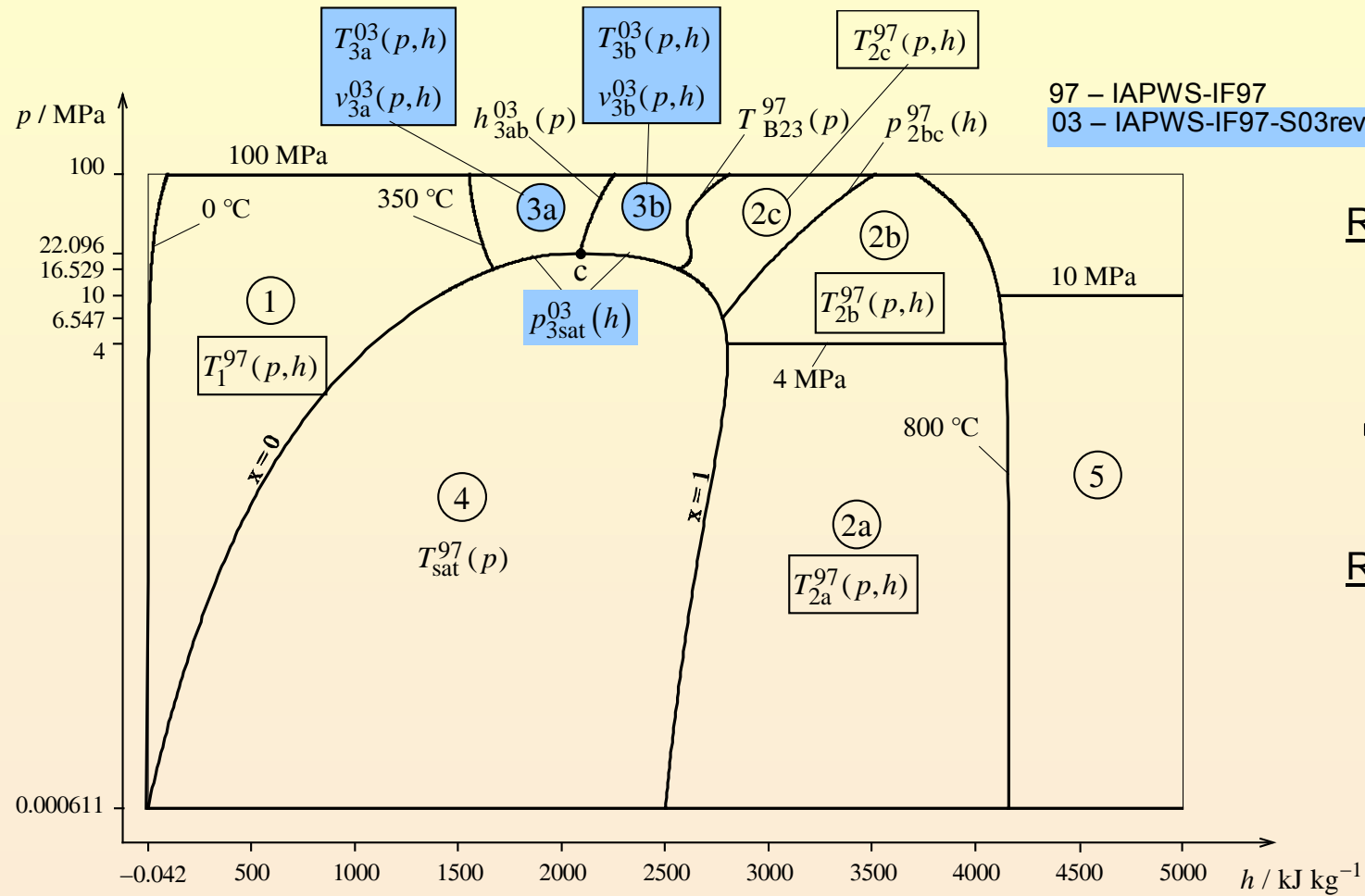


Gesamtrechenzeit: 10 Tage pro Termvorrat

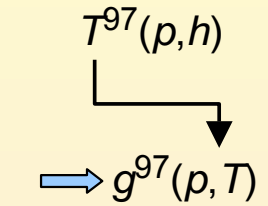
Ergänzende Rückwärtsgleichungen zur IAPWS-IF97



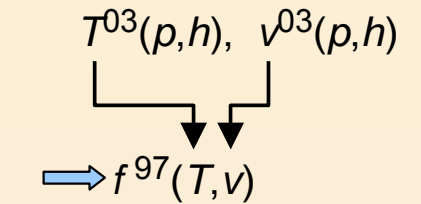
Rückwärts- und Grenzgleichungen für Funktionen von Druck und Enthalpie (p, h)



Regions 1, 2



Region 3



Rückwärtsgleichungen $T(p,h)$ und $v(p,h)$

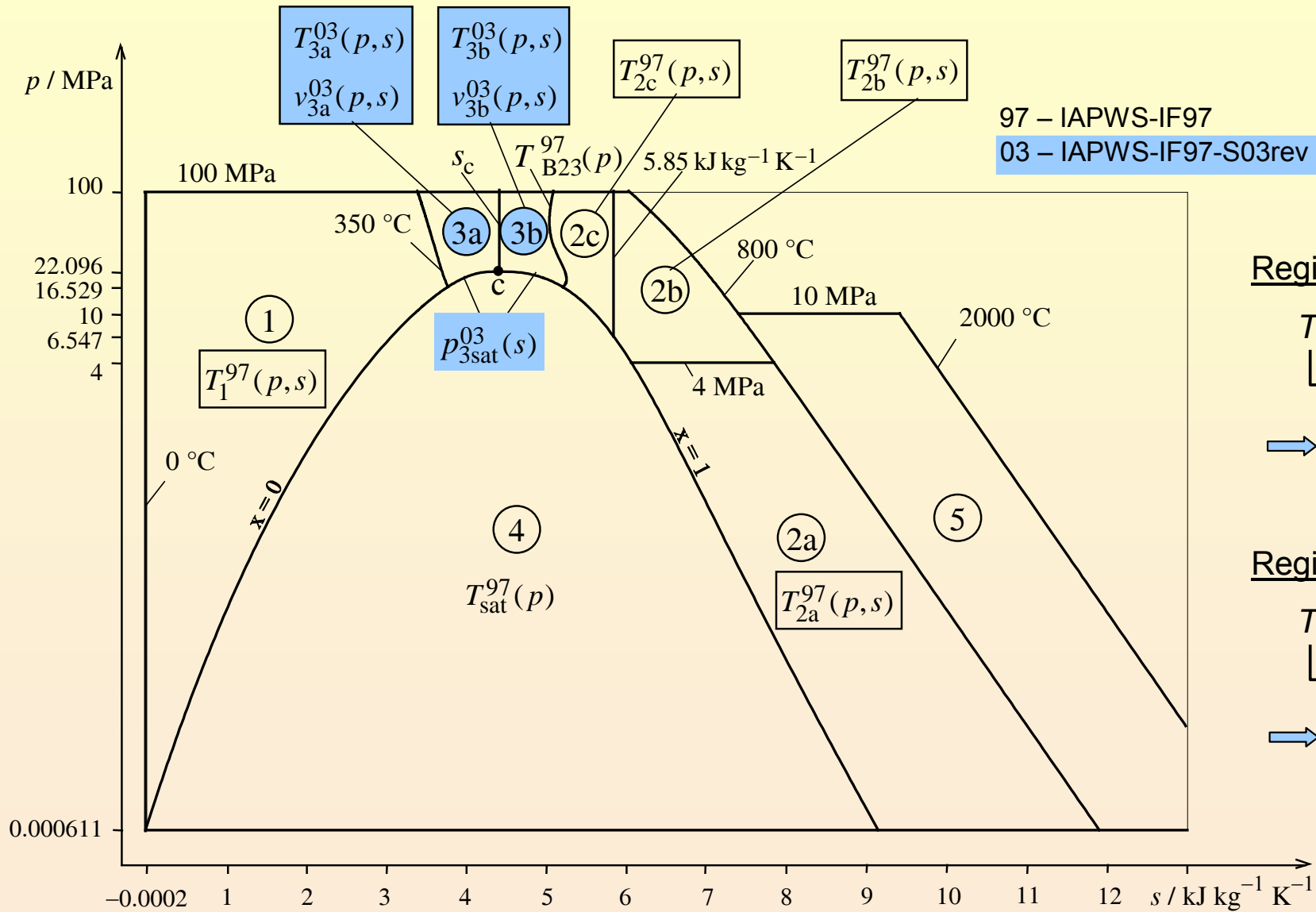
Gleichungsstrukturen

$$\frac{T(p,h)}{T^*} = \sum_{i=1}^N n_i \left(\frac{p}{p^*} + a \right)^{l_i} \left(\frac{h}{h^*} + b \right)^{j_i} \quad \frac{v(p,h)}{v^*} = \sum_{i=1}^N n_i \left(\frac{p}{p^*} + a \right)^{l_i} \left(\frac{h}{h^*} + b \right)^{j_i}$$

Numerische Konsistenz

Gleichung	N	a	b	Numerische Konsistenz	
				$ \Delta T _{\text{tol}}$ mK	$ \Delta T _{\text{max}}$ mK
$T_1^{97}(p,h)$	20	0	1	25	23.6
$T_{2a}^{97}(p,h)$	34	0	-2.1	10	9.3
$T_{2b}^{97}(p,h)$	38	-2	-2.6	10	9.6
$T_{2c}^{97}(p,h)$	23	25	-1.8	25	23.7
$T_{3a}^{03}(p,h)$	31	0.24	-0.615	25	23.6
$T_{3b}^{03}(p,h)$	33	0.298	-0.720	25	19.6
Gleichung	N	a	b	$ \Delta v/v _{\text{tol}}$ %	$ \Delta v/v _{\text{max}}$ %
$v_{3a}^{03}(p,h)$	32	0.128	-0.727	0.01	0.0080
$v_{3b}^{03}(p,h)$	30	0.0661	-0.72	0.01	0.0095

Rückwärts- und Grenzgleichungen für Funktionen von Druck and Entropie (p, s)



Regions 1, 2

$$T^{97}(p, s)$$

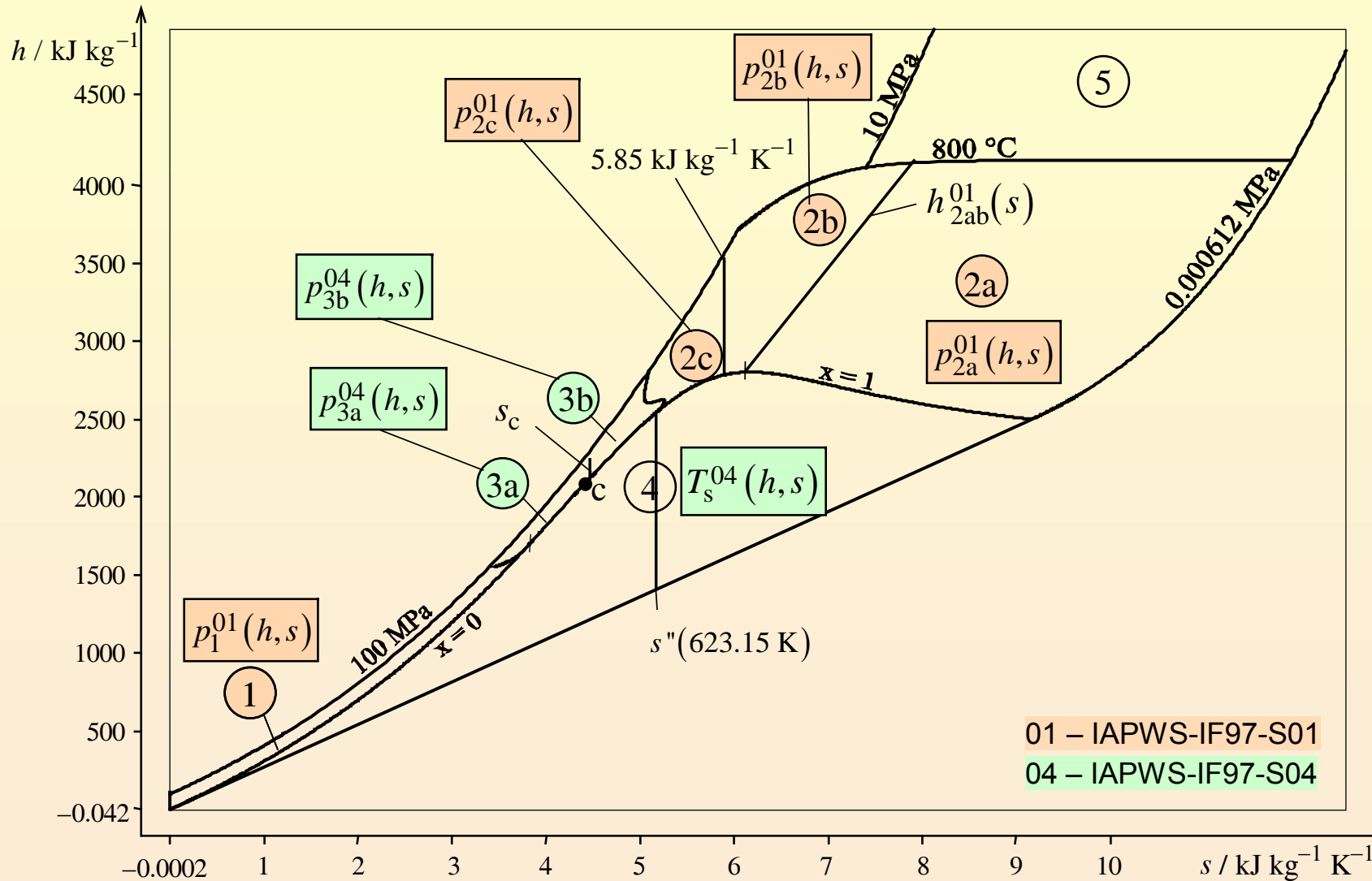
$$\rightarrow g^{97}(p, T)$$

Region 3

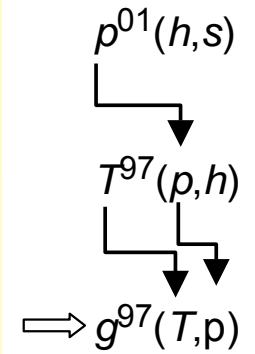
$$T^{03}(p, s), v^{03}(p, s)$$

$$\rightarrow f^{97}(T, v)$$

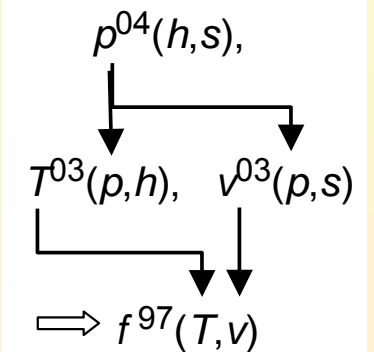
Rückwärtsgleichungen für Funktionen von Enthalpie and Entropie (h,s)



Regionen 1, 2



Region 3



Region 4

$$\begin{array}{c}
 T_s^{04}(h,s) \\
 \downarrow \\
 p_s^{97}(T_s) \\
 h' = h_1^{97}(p_s, T_s) \\
 h'' = h_2^{97}(p_s, T_s) \\
 x = \frac{h - h'}{h'' - h'}
 \end{array}$$

Rückwärtsgleichungen $p(h,s)$ und $T_s(h,s)$

Gleichungsstrukturen

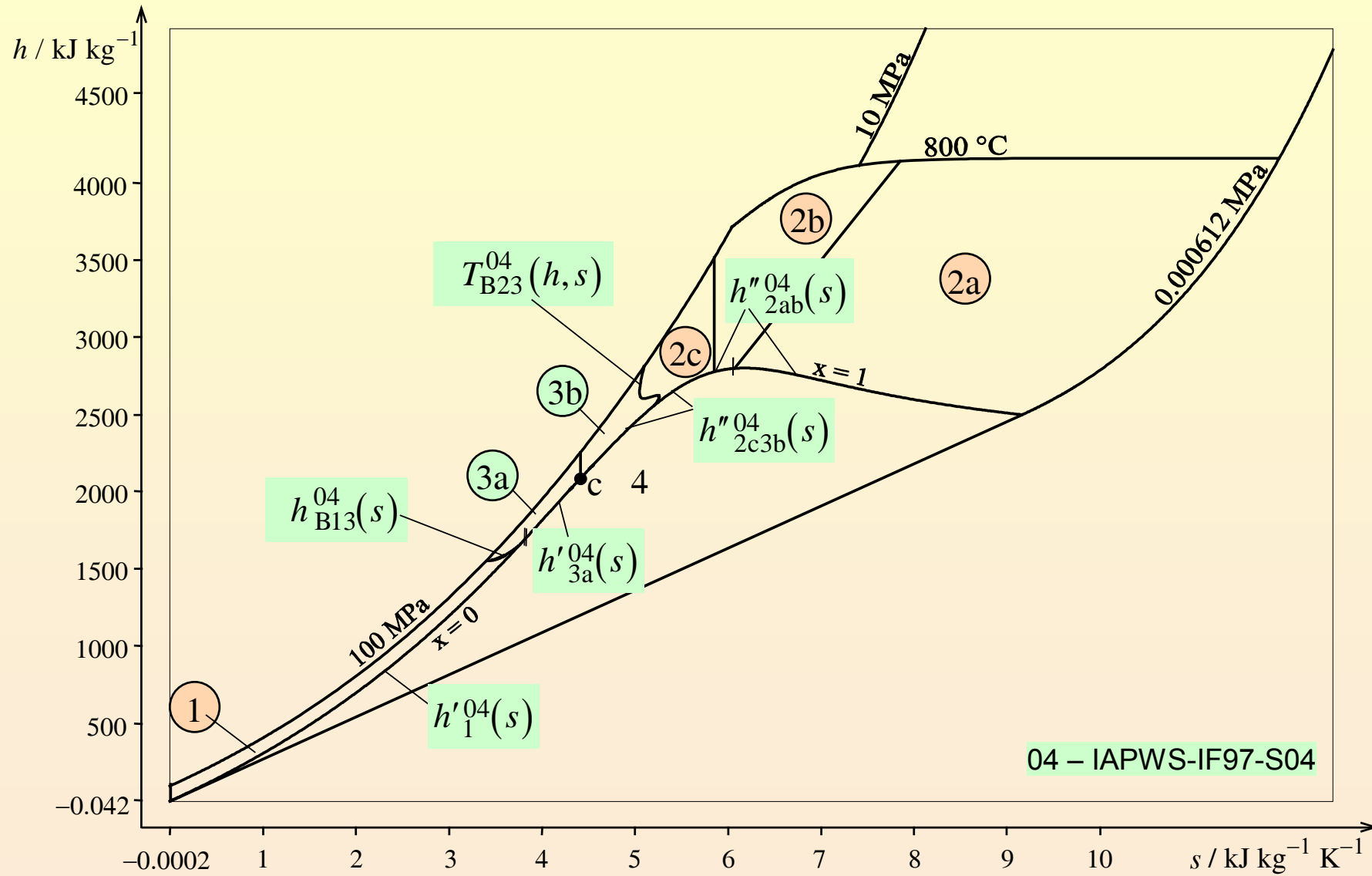
$$\frac{p(h,s)}{p^*} = \left[\sum_{i=1}^N n_i \left(\frac{h}{h^*} + a \right)^{l_i} \left(\frac{s}{s^*} + b \right)^{j_i} \right]^c$$

$$\frac{T_s(h,s)}{T^*} = \sum_{i=1}^{36} n_i \left(\frac{h}{h^*} - 0.119 \right)^{l_i} \left(\frac{s}{s^*} - 1.07 \right)^{j_i}$$

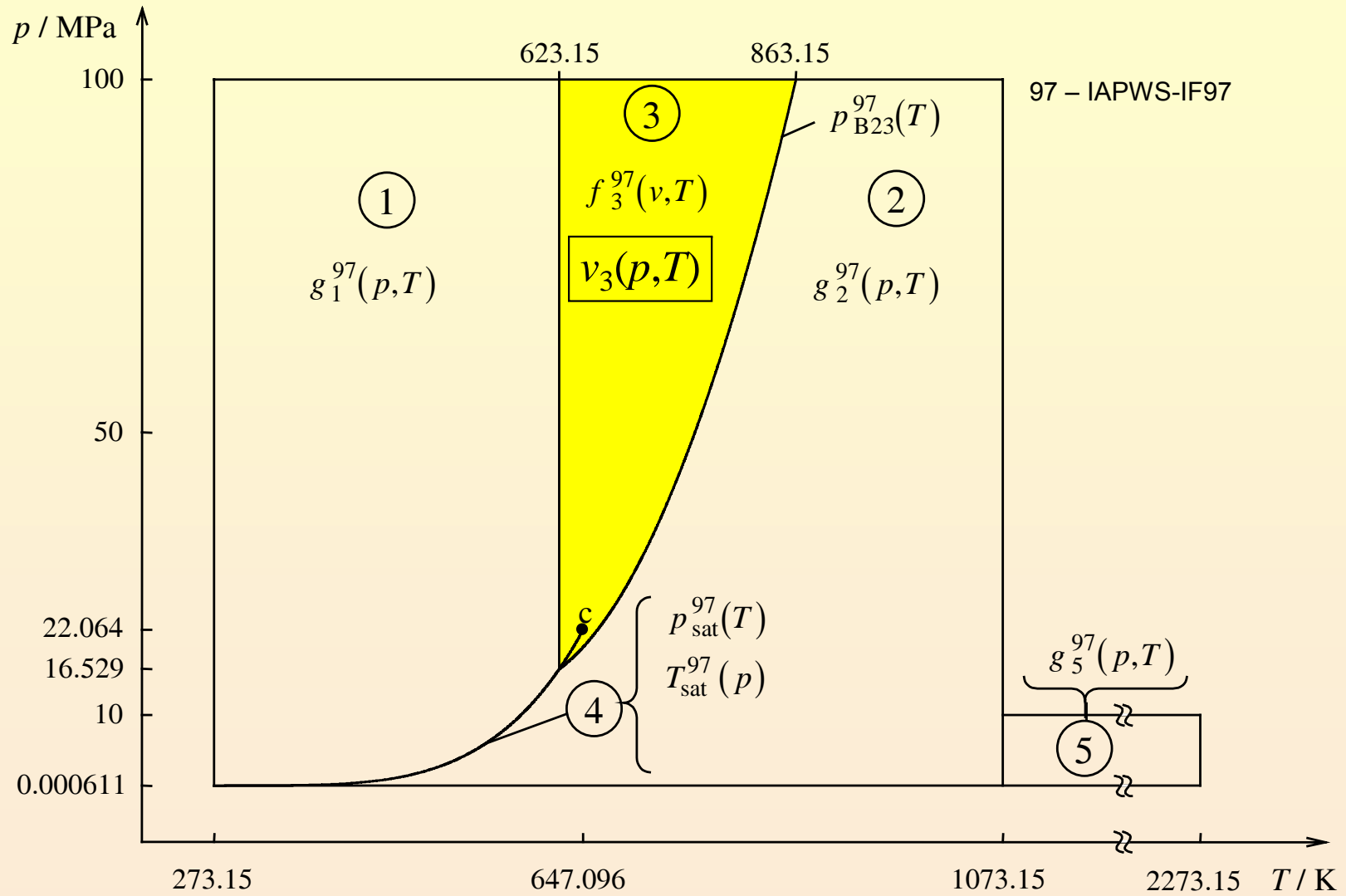
Numerische Konsistenz

Region	Gleichung	$ \Delta p/p _{\text{tol}}$ %	$ \Delta p/p _{\text{max}}$ %	$ \Delta T _{\text{tol}}$ mK	$ \Delta T _{\text{max}}$ mK	$ \Delta v/v _{\text{tol}}$ %	$ \Delta v/v _{\text{max}}$ %
①	$p_1^{01}(h,s)$ $p \leq 2.5\text{MPa}$ $p > 2.5\text{MPa}$	0.60 15 kPa	0.55 14 kPa	25	24.0		
②	$p_{2a}^{01}(h,s)$	0.0035	0.0029	10	9.7		
	$p_{2b}^{01}(h,s)$	0.0035	0.0034	10	9.8		
	$p_{2c}^{01}(h,s)$	0.0088	0.0063	25	24.9		
③	$p_{3a}^{04}(h,s)$	0.01	0.0070	25	23.7	0.01	0.0097
	$p_{3b}^{04}(h,s)$	0.01	0.0084	25	22.4	0.01	0.0095
	Gleichung	$ \Delta T _{\text{tol}}$ mK	$ \Delta T _{\text{max}}$ mK	$ \Delta p/p _{\text{tol}}$ %	$ \Delta p/p _{\text{max}}$ %	$ \Delta x _{\text{tol}}$ -	$ \Delta x _{\text{max}}$ -
④	$T_s^{04}(h,s)$ $s \leq 5.85 \text{ kJ kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	25	0.86	0.0088	0.0034	$4.4 \cdot 10^{-6}$	$0.57 \cdot 10^{-6}$
	$s > 5.85 \text{ kJ kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	10	0.67	0.0035	0.0029	$0.64 \cdot 10^{-6}$	$0.25 \cdot 10^{-6}$

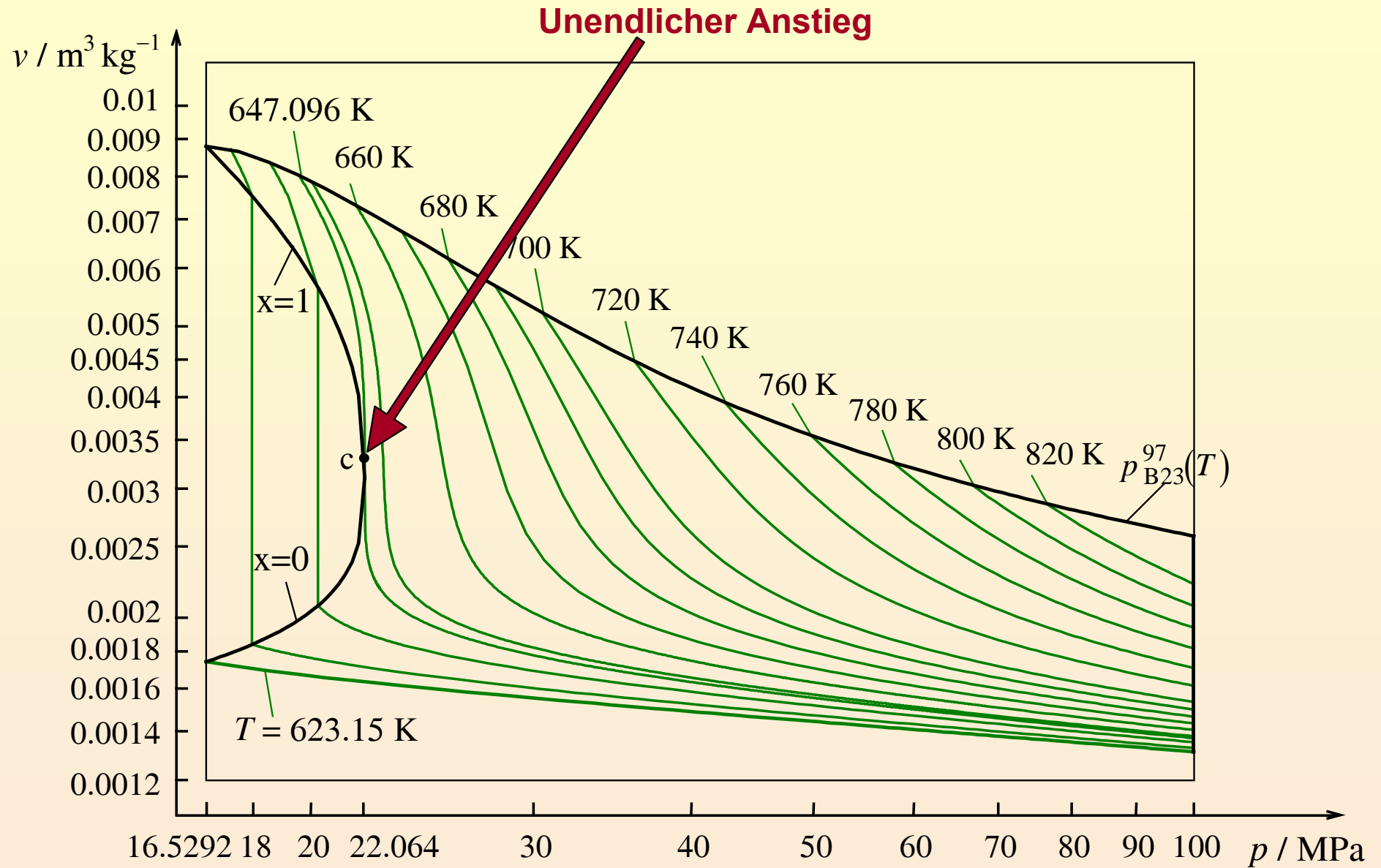
Grenzgleichungen für Funktionen von Enthalpie und Entropie (h, s)



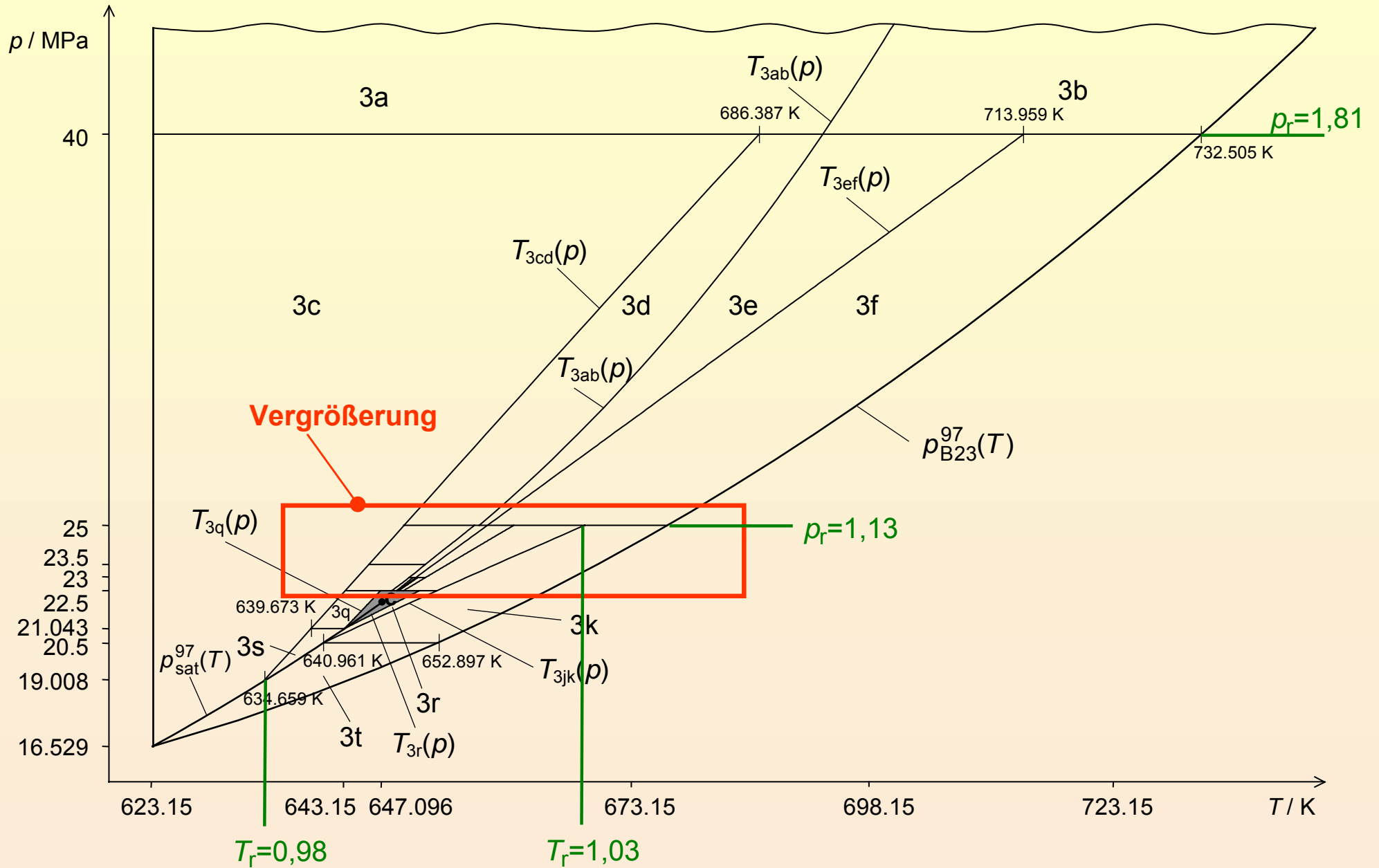
Rückwärtsgleichungen $v(p, T)$ im kritischen und überkritischen Bereich



Funktionsverlauf $v(p, T)$ im kritischen und überkritischen Bereich

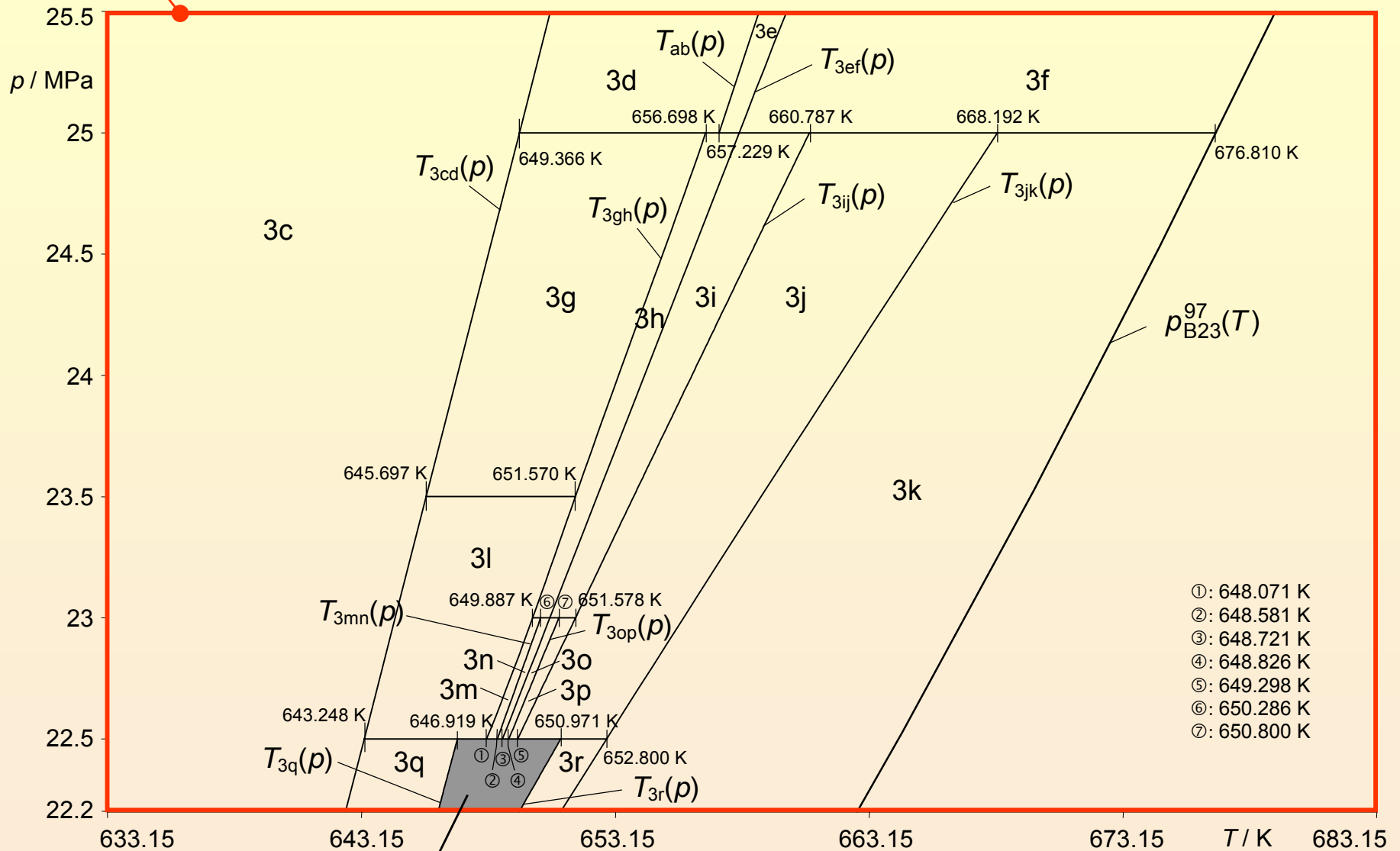


Struktur des Gleichungssatzes $v(p, T)$ für Region 3



Struktur des Gleichungssatzes $v(p, T)$ für Region 3

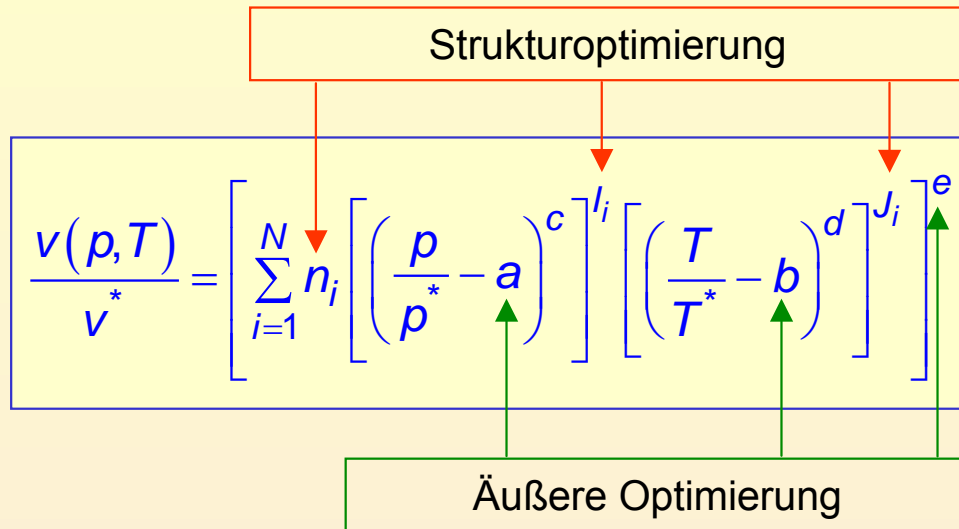
Vergrößerung



unmittelbar kritischer Bereich $0,991 \leq T_r \leq 1,006$
 $0,929 \leq p_r \leq 1,020$

Rückwärtsgleichungen $v(p, T)$ für Region 3

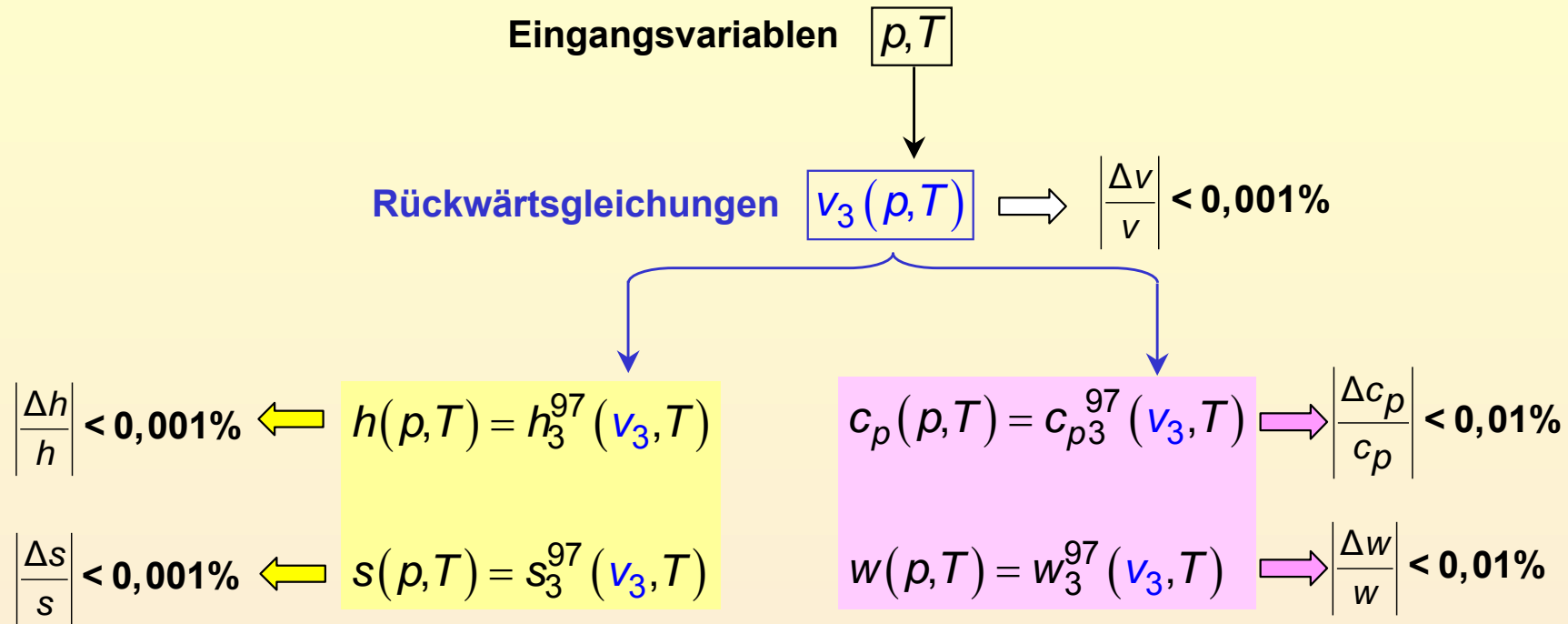
20 Unterbereiche



Sub-region	\bar{v}^* m ³ kg ⁻¹	p^* MPa	T^* K	a	b	c	d	e	N
3a	0.0024	100	760	0.085	0.817	1	1	1	30
3b	0.0041	100	860	0.280	0.779	1	1	1	32
3c	0.0022	40	690	0.259	0.903	1	1	1	35
3d	0.0029	40	690	0.559	0.939	1	1	4	38
3e	0.0032	40	710	0.587	0.918	1	1	1	29
3f	0.0064	40	730	0.587	0.891	1/2	1	4	42
3g	0.0027	25	660	0.872	0.971	1	1	4	38
3h	0.0032	25	660	0.898	0.983	1	1	4	29
3i	0.0041	25	660	0.910	0.984	1/2	1	4	42
3j	0.0054	25	670	0.875	0.964	1/2	1	4	29
3k	0.0077	25	680	0.802	0.935	1	1	1	34
3l	0.0026	24	650	0.908	0.989	1	1	4	43
3m	0.0028	23	650	1.00	0.997	1	1/4	1	40
3n	0.0031	23	650	0.976	0.997	-	-	-	39
3o	0.0034	23	650	0.974	0.996	1/2	1	1	24
3p	0.0041	23	650	0.972	0.997	1/2	1	1	27
3q	0.0022	23	650	0.848	0.983	1	1	4	24
3r	0.0054	23	650	0.874	0.982	1	1	1	27
3s	0.0022	21	640	0.886	0.990	1	1	4	29
3t	0.0088	20	650	0.803	1.02	1	1	1	33

Erreichte Numerische Konsistenz der Rückwärtsgleichungen zur Fundamentalgleichung $\left| \frac{\Delta v}{v} \right| < 0,001\%$

Berechnung weiterer thermodynamischer Größen ausgehend von den Rückwärtsgleichungen $v_3(p, T)$



Rechenzeitvergleich

Computing Time Ratio (CTR)

$$CTR = \frac{\text{Rechenzeit für Iteration der Fundamentalgleichung}}{\text{Rechenzeit der Rückwärtsgleichungen}}$$

Bereich	CTR			
	Funktionale Abhängigkeit			
	(p,h)	(p,s)	(h,s)	(p,T)
① Flüssigkeit	25	38	35	-
② Überhitzter Dampf	11	14	46	-
③ Kritischer Bereich	14	14	10	17
④ Nassdampf	-	-	77	-



Prozessberechnung 2... 3 mal schneller

Zusammenfassung

Supplementary Release	Gleichungen	Status
IAPWS-IF97-S01: Supplementary Release on Backward Equations for Pressure as a Function of Enthalpy and Entropy $p(h,s)$ to the IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam.	$p_1(h,s)$ $p_2(h,s)$	Standard 2001
IAPWS-IF97-S03rev: Revised Supplementary Release on Backward Equations for the Functions $T(p,h)$, $v(p,h)$ and $T(p,s)$, $v(p,s)$ for Region 3 of the IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam.	$T_3, v_3(p,h)$ $T_3, v_3(p,s)$ $p_{3\text{sat}}(h)$ $p_{3\text{sat}}(s)$	Standard 2003 Revision 2004
IAPWS-IF97-S04: Supplementary Release on Backward Equations $p(h,s)$ for Region 3, Equations as a Function of h and s for the Region Boundaries, and an Equation $T_{\text{sat}}(h,s)$ for Region 4 of the IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam.	$p_3(h,s)$ $T_{\text{sat}}(h,s)$ $h'(s), h''(s)$ $h_{\text{B}13}(s)$ $T_{\text{B}23}(h,s)$	Standard 2004
IAPWS-IF97-S05: Supplementary Release on Backward Equations for Specific Volume as a Function of Pressure and Temperature $v(p,T)$ for Region 3 of the IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam.	$v_3(p,T)$	Standard 2005

Download: www.iapws.de

Zusammenfassung

- ▶ Berechnung der Abhängigkeiten (p,T) , (p,h) , (p,s) , (h,s) ohne Iteration in Verbindung mit der Industrie-Formulation IAPWS-IF97
- ▶ Die numerische Konsistenz der Rückwärts- und Grenzgleichungen ist ausreichend für die energietechnischen Berechnungen
- ▶ Prozessberechnungen werden 2 bis 3 mal schneller bei Nutzung der Rückwärts- und Grenzgleichungen
- ▶ In Prozessberechnungen mit extrem hohen Anforderungen an die numerische Konsistenz können die Gleichungen zur Berechnung von Iterationsstartwerten genutzt werden.
- ▶ Neue Wasserdampf tabel "International Steam Tables" mit allen Rückwärtsgleichungen in Bearbeitung
- ▶ Programmbibliotheken mit allen Rückwärtsgleichungen erstellt an Ruhr-Universität Bochum und an Hochschule Zittau/Görlitz (FH)

Vortrag: <http://thermodynamik.hs-zigr.de>