





M. Kunick, H.-J. Kretzschmar, F. di Mare, U. Gampe

Neue IAPWS-Richtlinie zur schnellen und genauen Stoffwert-Berechnung mit dem Spline-Basierten Table Look-up Verfahren (SBTL)

Projekt der International Association for the Properties of Water and Steam (IAPWS)

"IAPWS Guideline on the Fast Calculation of Steam and Water Properties with the Spline-Based Table Look-Up Method (SBTL)"

Evaluation Committee:

Adam Novy, Doosan Skoda Francisco Blangetti, Alstom Power Reiner Pawellek, STEAG Julien Bonifay, Siemens Energy Ingo Weber, Siemens Energy







M. Kunick, H.-J. Kretzschmar, F. di Mare, U. Gampe

Neue IAPWS-Richtlinie zur schnellen und genauen Stoffwert-Berechnung mit dem Spline-Basierten Table Look-up Verfahren (SBTL)

Inhalt:

- Motivation und Ziele:
 - Anforderungen an die Stoffwert-Berechnung in der Prozesssimulation
 - Gegenwärtig genutzte Berechnungsansätze konkrete Zielstellungen
- IAPWS Richtlinie zum Spline-Basierten Table Look-up Verfahren (SBTL):
 - Grundlagen des SBTL-Verfahrens
 - SBTL-Funktionen für Wasser und Wasserdampf Genauigkeiten und Rechenzeiten
- Anwendung des SBTL Verfahrens in TRACE (DLR), RELAP-7 (INL), ...
- Software FluidSplines: Generierung von SBTL-Stoffwertfunktionen für weitere Stoffe
- Zusammenfassung und Ausblick

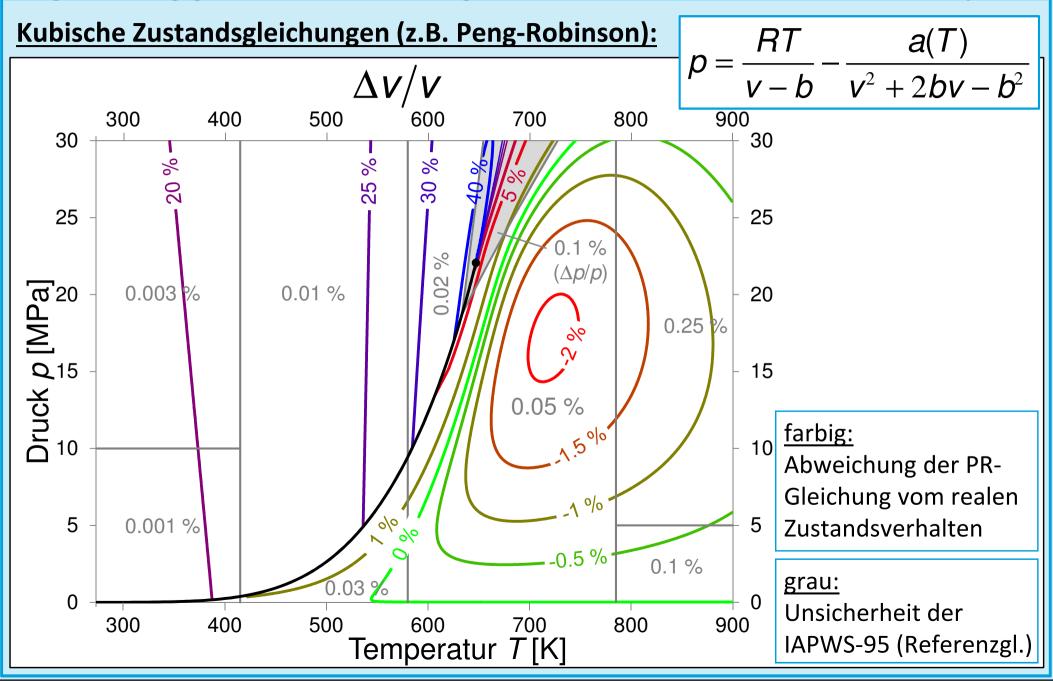
Anforderungen an die Stoffwertberechnung in der Prozesssimulation:

- > Ungenaue Stoffwerte führen zu ungenauen Simulationsergebnissen:
 - Abweichungen in den berechneten spez. Volumina *v* führen zu ungenauen Masse- und Impulsbilanzen.
 - Abweichungen in kalorischen Zustandsgrößen, z.B. Enthalpie h oder Entropie s, führen zu ungenauen Energie- und Entropiebilanzen.
 - Stoffwertfunktionen müssen sehr genau sein.
- Aufwändige Stoffwertfunktionen führen zu großen Gesamtrechenzeiten:
 - Stoffwertfunktionen werden extrem häufig aufgerufen.
 - Komplizierte Zustandsgleichungen erfordern relativ lange Rechenzeiten.
 - **⇒** Stoffwertfunktionen müssen extrem schnell sein.
- ➤ Numerische Methoden in der Prozesssimulation weitere Anforderungen:
 - \square Numerisch konsistente Umkehrfunktionen benötigt, z. B. T(p,h) und h(p,T).
 - Stetige Stoffwertfunktionen mit stetigen ersten Ableitungen.

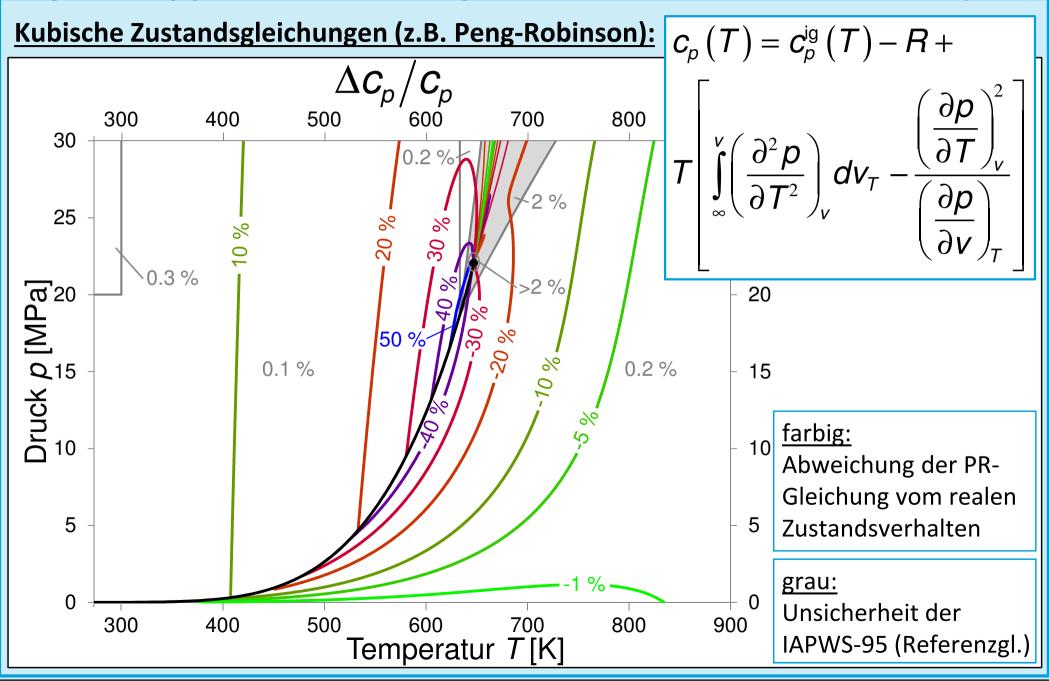
Gegenwärtig genutzte Berechnungsansätze für Wasser und Wasserdampf:

- Fundamentalgleichungen (IAPWS-95 oder IAPWS-IF97) → Rechenzeiten zu groß für CFD
- kubische Zustandsgleichungen (z.B. Peng-Robinson)
- Table Look-up Verfahren

Gegenwärtig genutzte Berechnungsansätze für Wasser und Wasserdampf:



Gegenwärtig genutzte Berechnungsansätze für Wasser und Wasserdampf:



Gegenwärtig genutzte Berechnungsansätze für Wasser und Wasserdampf:

Table Look-up Verfahren:

> Grundlagen:

- Vorgabe von Funktionswerten und gegebenenfalls auch der Ableitungen an den Stützstellen
- Interpolationsansätze:
 - Lokale bilineare Interpolation mit C⁰-Stetigkeit
 (z.B. in ANSYS CFX)
 - Lokale bikubische Interpolation mit C¹-Stetigkeit

Häufig auftretende Probleme:

- Stützstellenraster werden an nichtlineare
 Funktionen angepasst:
 nicht äquidistante Knoten → aufwändige Zellsuche
- Iterative Berechnung von Umkehrfunktionen, z.B. T(p,h) aus h(p,T), \rightarrow erhöhter Berechnungsaufwand

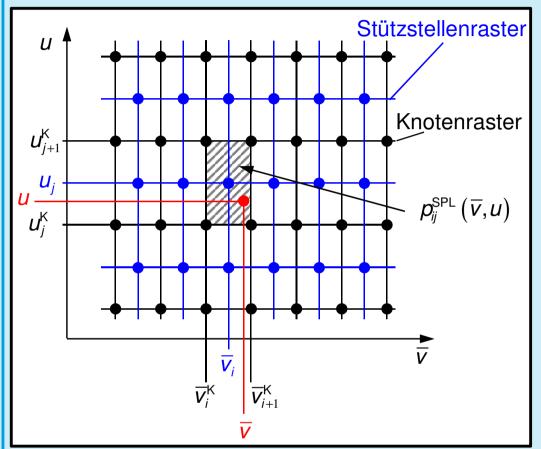
Stützstellenraster (i, j)PA p_{j+1} Zelle { *i*, *j*} $z_{ij}(p,T) = \sum_{i=1}^{4} \sum_{j=1}^{4} a_{ijkl} (T - T_i)^{k-1} (p - p_j)^{l-1}$

Zielstellungen für Entwicklung eines neuen Table Look-up Verfahrens:

- schnelle und genaue Stoffwertfunktionen
- stetige erste Ableitungen
- schnelle und numerisch konsistente Umkehrfunktionen

Grundlagen des Spline-Basierten Table Look-up Verfahrens (SBTL)

Aufstellen einer Spline-Funktion $p^{SPL}(v,u)$ ausgehend von einer Zustandsgl. $p^{EOS}(v,u)$:



Berechnung zur Laufzeit:

- Transformation von $v \rightarrow \overline{v}$
- schnelle Zell-Ermittlung (i,j)
- Auswertung des Spline-Polynoms



- Generierung eines Stützdatenrasters:
 - Berechnung der Stützstellen mit der zugrundeliegenden Zustandsgleichung:

$$p_{i,j}(v_i,u_j) = p^{EOS}(v_i,u_j)$$

- Transformation der Variablen $(v \rightarrow \overline{v})$:
 - Verbesserung der Genauigkeit
 - Umformung des Zustandsbereichs
- Zell-Definition im Knotenraster:
 - Spline-Polynom:

$$p_{ij}^{SPL}\left(\overline{v},u\right) = \sum_{k=1}^{3} \sum_{l=1}^{3} a_{ijkl} \left(\overline{v} - \overline{v}_{i}\right)^{k-1} \left(u - u_{j}\right)^{l-1}$$

- interpoliert die innere Stützstelle
- stetige Funktion und erste Ableitungen
- Optimierung für:
 - geforderte Genauigkeit
 - minimale Rechenzeit
 - minimale Datenmengen
- Interpolationstabellen werden für die Stoffwert-Berechnung gespeichert

Grundlagen des Spline-Basierten Table Look-up Verfahrens (SBTL)

Berechnung inverser Spline-Funktionen (Beispiel: biquadratische Polynom):

Spline-Funktion:
$$p_{ij}^{SPL}\left(\overline{v},u\right) = \sum_{k=1}^{3} \sum_{l=1}^{3} a_{ijkl} \left(\overline{v} - \overline{v}_{i}\right)^{k-1} \left(u - u_{j}\right)^{l-1}$$

Inverse Spline-Funktion:
$$u_{ij}^{\text{INV}}(p, \overline{v}) = \frac{\left(-B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}\right)}{2A} + u_j$$

wobei
$$A = a_{ij13} + \Delta \overline{v}_i \left(a_{ij23} + a_{ij33} \Delta \overline{v}_i \right)$$

$$B = a_{ij12} + \Delta \overline{v}_i \left(a_{ij22} + a_{ij32} \Delta \overline{v}_i \right)$$

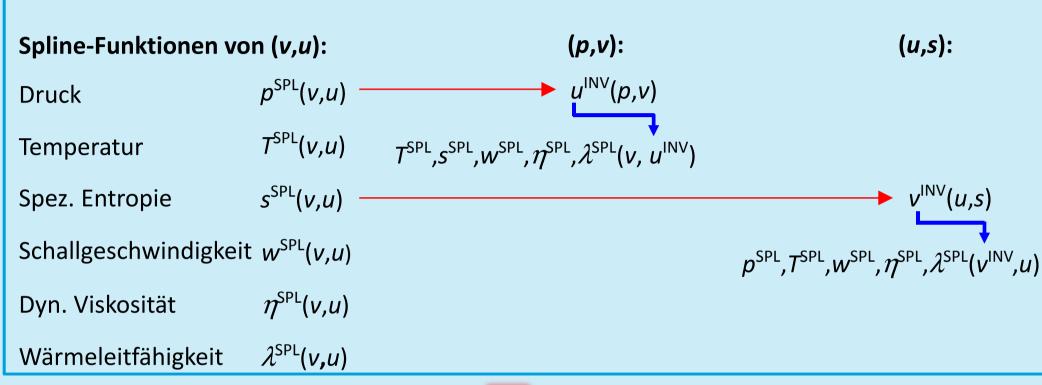
$$C = a_{ij11} + \Delta \overline{v}_i \left(a_{ij21} + a_{ij31} \Delta \overline{v}_i \right) - p$$
und $\Delta \overline{v}_i = (\overline{v} - \overline{v}_i)$

$$(\pm) = \operatorname{sign}(B)$$

- \triangleright Die inverse Spline-Funktion u(p,v) ist numerisch konsistent zu p(v,u).
- Die inverse Spline-Funktion erfordert kein zeitaufwändiges Iterationsverfahren.

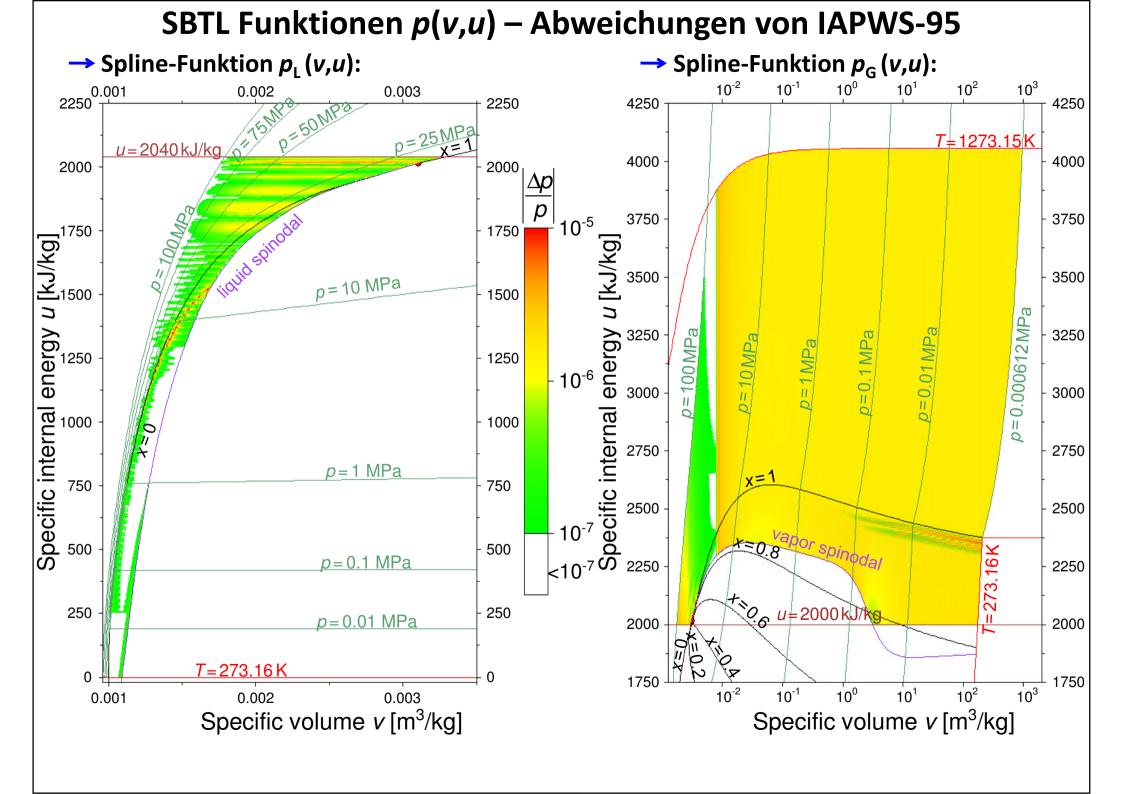
Grundlagen des Spline-Basierten Table Look-up Verfahrens (SBTL)

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





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



SBTL Funktionen von (v,u) und inverse Funktionen von (p,v) und (u,s) – Abweichungen vom IAPWS-95 Standard

| SBTL-Funktion | | Max. Abweichung (Flüssigkeit) | Max. Abweichung (Dampf) | |
|---------------|-------------------------|--|--|--|
| p(v,u) | $p \le 2.5 \text{ MPa}$ | $ \Delta p / p < 0.1 \%$ | $\left \Delta p / p\right < 0.001 \%$ | |
| | p > 2.5 MPa | $ \Delta p < 3 \text{ kPa}$ | | |
| T(v,u) | | $ \Delta T < 1 \mathrm{mK}$ | $ \Delta T < 1 \mathrm{mK}$ | |
| s(v,u) | | $ \Delta s < 10^{-6} \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ | $ \Delta s < 10^{-6} \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ | |
| w(v,u) | | $\left \Delta w / w \right < 0.001 \%$ | $\left \Delta w / w\right < 0.001 \%$ | |
| $\eta(v,u)$ | | $ \Delta \eta / \eta < 0.001 \%$ | $ \Delta \eta / \eta < 0.001 \%$ | |



- ➢ Die SBTL Funktionen geben den wissenschaftlichen Standard IAPWS-95 mit sehr hoher Genauigkeit wieder.
- ▶ Die Ergebnisse der Prozesssimulation unter Nutzung des SBTL Verfahrens zeigen vernachlässigbare Abweichungen zur direkten Anwendung des IAPWS-95 Standards.

SBTL Funktionen von (v,u) und inverse Funktionen von (p,v) und (u,s) – Rechenzeiten im Vergleich zu IAPWS-IF97 und IAPWS-95

Computing-Time Ratio $CTR = \frac{Rechenzeit \ der \ IAPWS - IF97 \ (IAPWS - 95) \ Funktion}{Rechenzeit \ der \ SBTL \ Funktion}$

| | IAPWS-IF97 Region | | | | | |
|------------------|---|--|---------------------|------------------|-----------|--|
| SBTL Funktion | 1 (Flüssigkeit) | 2 (Dampf) | 3 (krit. Gebiet) | 4 (Nassdampf) | 5 (HT) | |
| p(v,u) | 130 (243ª) | 271 (434 ^a) | 161 | 19.6 | 470 | |
| T(v,u) | 161 (251ª) | 250 (410°) | 158 | 20.6 | 442 | |
| u(p,v) | 2.0 | 6.4 | 2.8 | 5.6 | 3.2 | |
| v(u,s) | 43.5 | 66.4 | 78.8 | 16.2 | 134 | |
| T(p,h) | 2.9 ^b (≈15000 ^a) | 4.7 ^b (≈6760 ^a) | 3.0 | 4.4 | 26.5 | |
| ν(p,h) | 3.8 ^b (≈14500 ^a) | 6.1 ^b (≈6900 ^a) | 5.1 | 2.6 | 25.2 | |

a) Rechenzeiten zur Bestimmung des Zustandsbereichs nicht eingerechnet (IAPWS-95)

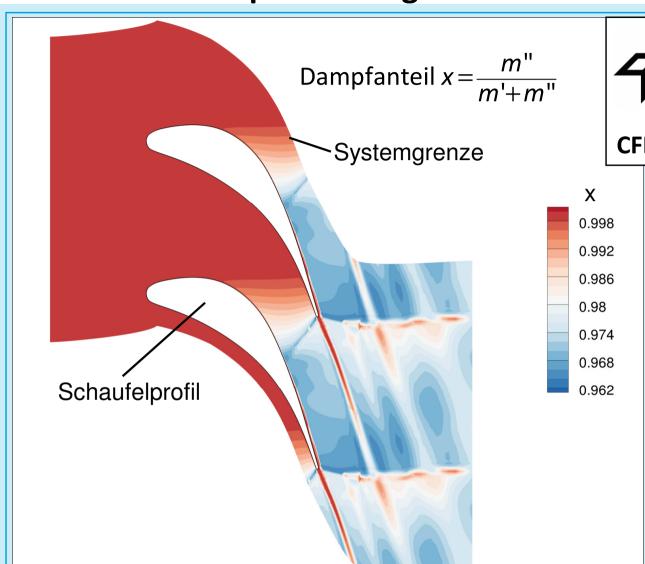
Prozessor: Intel Xeon – 3,2GHz

Betriebssystem: Windows7 (32 Bit) > SBTL Funktionen sind bis zu 300 (15000) mal schneller!

Compiler: Intel Composer XE 2011

b) Rückwärtsgleichungen mit begrenzter num. Konsistenz, z.B. T(p,h) und h(p,T)

Anwendung des SBTL Verfahrens in CFD – Nassdampfströmung an einer Leitschaufel (White et al.)





Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), Institut für Antriebstechnik, Köln

CFD-Software TRACE (DLR)

Bedingungen am Eintritt:

- Totaldruck: 41.7 kPa
- Totaltemperatur: 357.5 K $(\Delta T_s = +7.5 \text{ K})$

Bedingungen am Austritt:

• Statischer Druck: 20.6 kPa

Annahmen:

- Gleichgewichtskondensation (keine Unterkühlung)
- homogene Zweiphasenströmung
- > Im Vergleich zur Simulation mit der direkten Verwendung des IAPWS-IF97 Standards werden die Rechenzeiten mit dem SBTL Verfahren um das 10-fache reduziert.
- ➤ Im Vergleich zur Simulation mit dem Modell des idealen Gases werden die Rechenzeiten lediglich auf das 1.4-fache erhöht.

Anwendung des SBTL Verfahrens in weiteren Simulationsprogrammen

- ➤ **RELAP-7** Idaho National Laboratory (INL)
 - Reactor Excursion and Leak Analysis Program
 - SBTL Funktionen von (v,u) basierend auf IAPWS-95 (inkl. metastabile Zustände)
 - **□** Vereinfachte Stoffwert-Berechnungsalgorithmen wurden ersetzt:
 - Verbesserung der Simulationsgenauigkeit
 - Modell für Zweiphasenströmung: 7-Eq. Non-Equilibrium Two-Phase Flow Model
- > DYNAPLANT SIEMENS
 - Simulation instationärer Prozesse in Kraftwerken
 - SBTL Funktionen von (v,h) basierend auf IAPWS-IF97
 - Im Vergleich zur Verwendung des IAPWS-IF97 Standards sind die Rechenzeiten deutlich reduziert. Die Differenzen in den Ergebnissen sind vernachlässigbar.
- > KRAWAL SIEMENS
 - Wärmeschaltbild-Berechnung zur Kraftwerksauslegung
 - SBTL Funktionen von (p,h) basierend auf IAPWS-IF97
 - Im Vergleich zur Verwendung des IAPWS-IF97 Standards sind die Gesamtrechenzeiten halbiert. Die Differenzen in den Ergebnissen sind vernachlässigbar.

Generierung von SBTL-Funktionen für weitere Stoffe

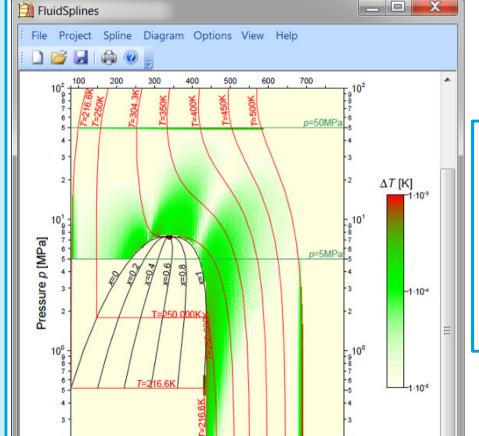
FluidSplines

Software zur Erzeugung von Spline-basierten Stoffwertfunktionen



REFPROP©

Stoffwert-Bibliotheken (Hochschule Zittau/Görlitz)



Specific Enthalpy h [kJ/kg]

Ready

90%

Generierung von SBTL-Funktionen für:

- gewünschten Gültigkeitsbereich
- geforderte Genauigkeit

Weitere Funktionen:

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

Ausgabe:

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

Zusammenfassung

- ➤ Das Spline-Basierte Table Look-up Verfahren (SBTL) eine Ergänzung zu existierenden Stoffwertgleichungen (Standards):
 - reproduziert die zugrundeliegende Stoffwertgleichungen mit hoher Genauigkeit und sehr geringen Rechenzeiten
 - liefert schnelle und numerisch konsistente Umkehrfunktionen
 - Stoffwertfunktionen und deren erste Ableitungen sind stetig
- SBTL-Funktionen basierend auf IAPWS-IF97 und IAPWS-95:
 - Stoffwertfunktionen der IAPWS Standards werden mit einer Genauigkeit von 10 – 100 ppm wiedergegeben
 - Rechenzeiten werden stark reduziert (SBTL-Funktionen von (v,u) sind bis zu 300-mal schneller als IAPWS-IF97)
- > Anwendbarkeit in der numerischen Prozesssimulation wurde nachgewiesen:
 - das Realstoffverhalten kann mit hoher Genauigkeit berücksichtigt werden
 - zeitgleich werden die Anwendungsrechenzeiten minimiert
 - In CFD: 6-10-mal schneller als Simulationen mit direkter Anwendung von IAPWS-IF97
 - nur 40% langsamer als Simulationen mit dem Ideal-Gas-Modell
 - In RELAP-7: Anwendung des 7-Eq. Non-Equilibrium Two-Phase Flow Models
- > SBTL-Stoffwertfunktionen können für beliebige Stoffe mit FluidSplines generiert werden

Ausblick

Projektvorschlag:

"Schnelle Berechnung realer Stoffeigenschaften im Programmsystem AC2 nach den neuesten Standards der IAPWS (SBRS – AC2)"

Zielstellungen:

- ➤ Erhöhung der Genauigkeit der Stoffwert-Berechnung durch Anwendung aktueller Berechnungsstandards der IAPWS:
 - thermodynamische Eigenschaften nach dem wissenschaftlichen Standard IAPWS-95
 - Transporteigenschaften (Wärmeleitfähigkeit, Viskosität) nach aktuellen IAPWS Standards
 - Erhöhung der Simulationsgenauigkeit in ATHLET/AC²
- Anwendung des Spline-Basierten Table Look-up Verfahrens (SBTL):
 - Wiedergabe der zugrundeliegenden IAPWS-Standards mit höchster Genauigkeit
 - Minimierung der Rechenzeiten (ATHLET: Gesamtrechenzeiten von mehreren Stunden)
 - schnelle und konsistente Umkehrfunktionen, stetige Funktionen und erste Ableitungen
 - Erhöhung der Rechengeschwindigkeit
 - \square Erweiterung des Einsatzgebietes von ATHLET auf Prozesse mit $p \le 0.001$ MPa:
 - Wärmerohre (heat pipes)
 - Druckaufbau bei der Einströmung von Dampf in ein Vakuum-Containment

The International Association for the Properties of Water and Steam

Stockholm, Sweden July 2015

Guideline on the Fast Calculation of Steam and Water Properties with the Spline-Based Table Look-Up Method (SBTL)

© 2015 International Association for the Properties of Water and Steam Publication in whole or in part is allowed in all countries provided that attribution is given to the International Association for the Properties of Water and Steam

President:
Dr. David Guzonas
Canadian Nuclear Laboratories
Chalk River, Ontario, Canada

Verfügbar unter: www.iapws.org

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!