



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

“IAPWS Guideline on the Fast Calculation of Water and Steam Properties in Computational Fluid Dynamics Using Spline Interpolation”


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

Task Group “CFD Steam Property Formulation”:

J. Hrubý, H.-J. Kretzschmar und A. Singh

IAPWS Annual Meeting 2012 in Boulder:

- A. Singh: Anforderungen an die Stoffwertberechnung
- J. Hrubý, M. Duška, J. Pátek: Fundamentalgl. für Wasserdampf $s(u, \rho)$
- M. Kunick, H.-J. Kretzschmar, U. Gampe: Spline-basierte Table Look-Up Methode

 **Beschluss: Vorschlag einer Guideline**

Erlangen, 08.03. 2013



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

“IAPWS Guideline on the Fast Calculation of Water and Steam Properties in Computational Fluid Dynamics Using Spline Interpolation”

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

Inhalt:

- Anforderungen an die Stoffwertberechnung in CFD
- Grundlagen der Stoffwertberechnung mit Spline-Interpolation
- Anwendung der Stoffwertberechnung mit Spline-Interpolation in CFD
- Inhalt der Guideline
- Zusammenfassung

Erlangen, 08.03. 2013

Anforderungen an die Stoffwertberechnung in CFD

Anforderungen an die Stoffwertberechnung in CFD-Simulationen:

- hohe Genauigkeit, vergleichbar mit hochgenauen Zustandsgleichungen
- geringe Rechenzeiten (>100 schneller als wissenschaftliche Gleichungen)
- stetige Funktionen und erste Ableitungen in Abhängigkeit von Dichte und innerer Energie
- vollständige numerische Konsistenz von Vorwärts- u. Rückwärtsfunktionen

Analyse von CFD-Software am Beispiel von TRACE (DLR):

Benötigte Funktionen im Ein- u. Zweiphasengebiet:

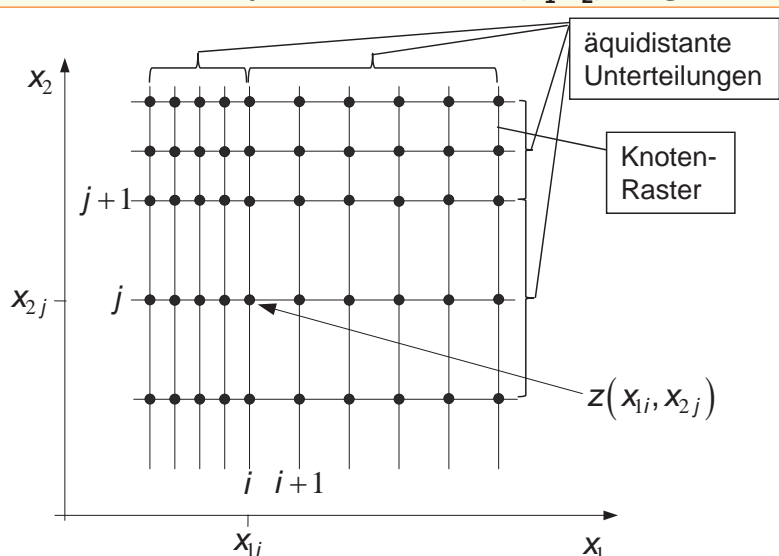
- $\rho, T, x, s, c_p, c_v, w, \kappa, \eta, \lambda = f(u, \rho)$
- $= f(\rho, \rho)$
- $= f(u, s)$
- $= f(\rho, T), f(\rho, x), f(T, x)$

Benötigte Ableitungen im Ein- u. Zweiphasengebiet:

- $\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_u, \left(\frac{\partial p}{\partial u}\right)_\rho, \left(\frac{\partial u}{\partial \rho}\right)_p$
- $\left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_u, \left(\frac{\partial T}{\partial u}\right)_\rho, \left(\frac{\partial u}{\partial \rho}\right)_T$

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

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

- Optimierung des Stützdatenrasters

Berechnung einer inversen Spline-Funktion:

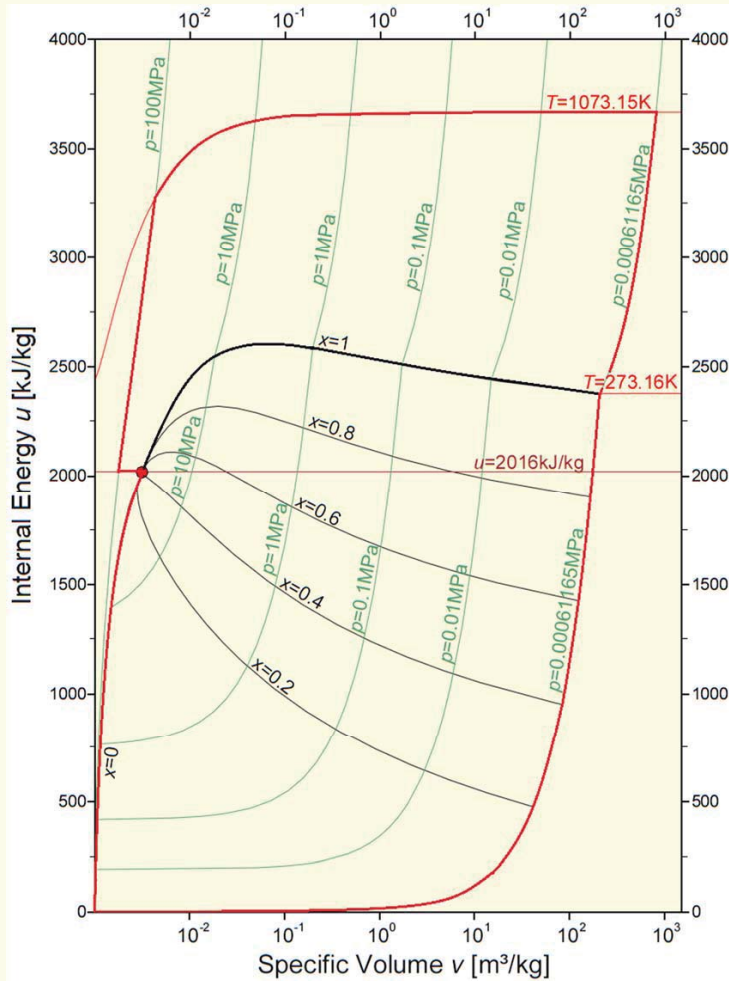
$$x_{1,ij}^{\text{INV}}(z, x_2) = \frac{(-B \pm \sqrt{B^2 - 4AC})}{2A} + x_{1i}$$

wobei $A = a_{ij31} + \Delta x_{2j} (a_{ij32} + a_{ij33} \Delta x_{2j})$ und $\Delta x_{2j} = (x_2 - x_{2j})$
 $B = a_{ij21} + \Delta x_{2j} (a_{ij22} + a_{ij23} \Delta x_{2j})$
 $C = a_{ij11} + \Delta x_{2j} (a_{ij12} + a_{ij13} \Delta x_{2j}) - z$



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

Anwendung der Stoffwertberechnung mit Spline-Interpolation in CFD



Gültigkeitsbereich

Überhitzter Dampf:

$$0.000611 \text{ MPa} \leq p \leq 100 \text{ MPa}$$

$$273.15 \text{ K} \leq T \leq 1073.15 \text{ K}$$

Nassdampfgebiet:

$$273.15 \text{ K} \leq T \leq T_c$$

$$0 \leq x \leq 1$$

Zugrundeliegende Zustandsgl.:

IAPWS-95:

Helmholtz-equation of state: $f(T, v)$

Referenz für Rechenzeiten:

IAPWS-IF97:

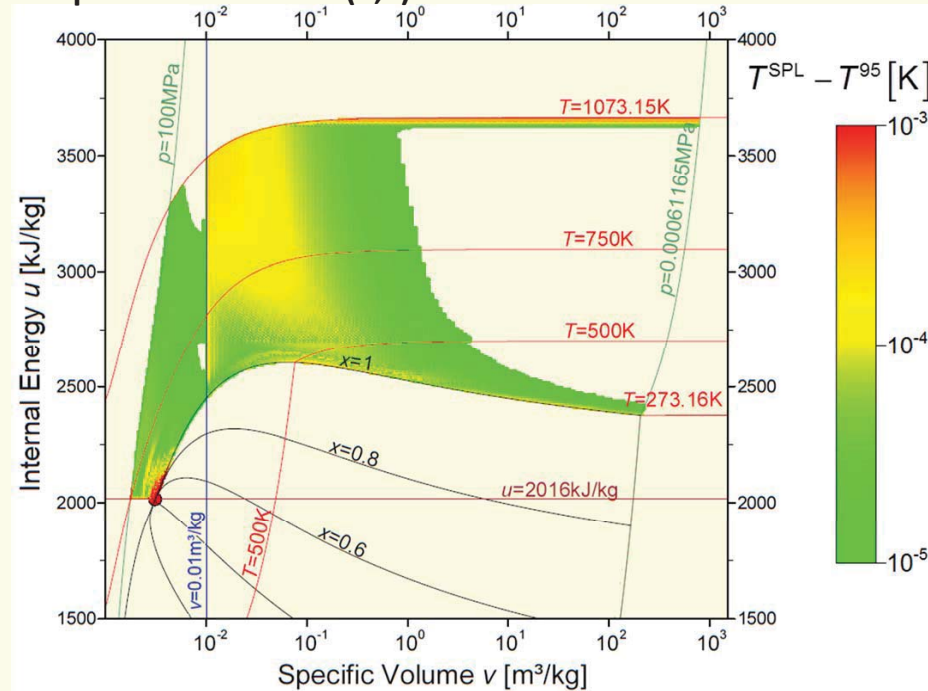
Einphasengebiet: $g(p, T)$,

Kritisches und Überkrit. Gebiet: $f(T, v)$

Nassdampfgebiet: $p_s(T)$

Anwendung der Stoffwertberechnung mit Spline-Interpolation in CFD

→ Spline-Funktion $T^{\text{SPL}}(u, v)$:



	$CTR = \frac{\text{Rechenzeit der ZGL}}{\text{Rechenzeit der Spline Funktion}}$
IAPWS-IF97	260
IAPWS-95	590

IAPWS-IF97:

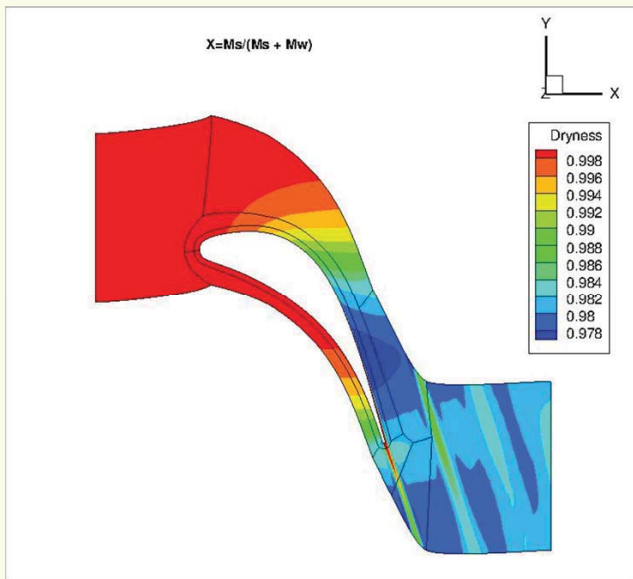
berechnet mit LibIF97
(HS Zittau/Goerlitz)

IAPWS-95:

berechnet mit REFPROP
(DEFL1, DEFL2 oder PDFL1)

Anwendung der Stoffwertberechnung mit Spline-Interpolation in CFD

Strömung an einer Leitschaufel in einer Dampfturbine (mit Kondensation):



CFD-Software TRACE (DLR)

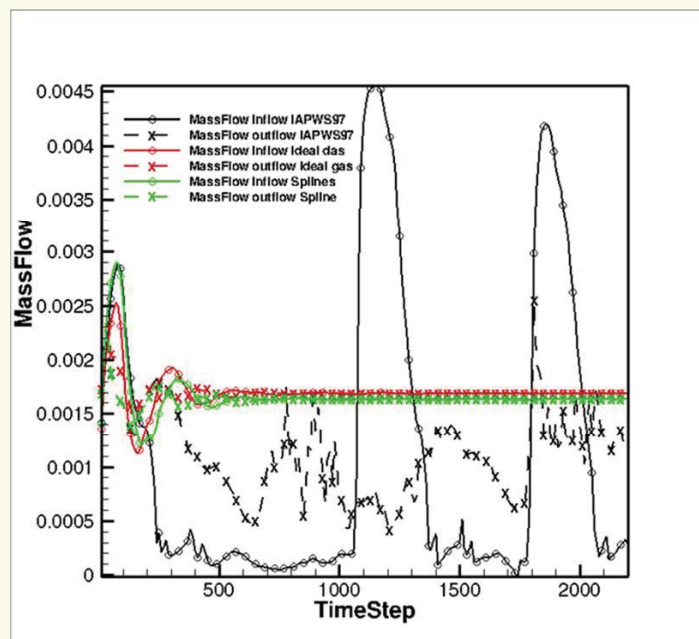
- Berechnung mit IAPWS-IF97 (Industriestandard)
- 14040 Zellen
- 8 CPUs – Rechenzeit: 18 min / 2200 Schritte
- Rechenzeitbedarf:
ca. 13 mal höher als Berechnung mit Idealgas-Modell

Praktische Berechnungen: Stufengruppen (3D), instationär – Rechenzeiten: mehrere Tage

Anwendung der Stoffwertberechnung mit Spline-Interpolation in CFD

Massestrom:

CFL-Faktor (Courant–Friedrichs–Lewy-Faktor)=30





- Berechnung mit Spline Funktionen erreicht höhere Konvergenzgeschwindigkeit aufgrund von höherer Konsistenz und Stabilität
- 8 CPUs – Rechenzeit: 1:50min/500 Schritte (IF97: 18min/2200 Schritte)
- Rechenzeitbedarf bei Berechnung als ideales Gas: 1:20min/500 Schritte

Berechnung mit Spline-Interpolation ist im Vergleich zur Berechnung mit IAPWS-IF97 10 Mal schneller und nur 1,4 Mal langsamer als die Berechnung für ideales Gas!

Inhalt der Guideline, Zeitplan

Inhalt:

- Beschreibung der Spline basierten Table-Look-up-Algorithmen im Detail
 - Spline-Funktionen basierend auf IAPWS-IF97 zur Berechnung von:
 - $p, T, s, c_p, c_v, w, \kappa, \eta, \lambda = f(u, \rho)$ im Einphasengebiet
 - $\rho'' = f(p)$
 - $(\rho', u' = f(T))$ - falls nur üb. Dampf und Nassdampf benötigt
- 
- Damit im Ein- u. Zweiphasengebiet numerisch konsistent berechenbar:
 - $T, x, u, s, c_p, c_v, w, \kappa, \eta, \lambda = f(p, \rho)$
 - $= f(u, s)$
 - $= f(p, T), f(p, x), f(T, x)$
 - Spline-Funktionen basierend auf IAPWS-IF97 zur Berechnung von:
 - $T, \rho, s, c_p, c_v, w, \kappa, \eta, \lambda = f(p, h)$ im Einphasengebiet
 - $\#_s^{97} = f(T), T_s^{97} = f(p)$
- 
- Damit im Ein- u. Zweiphasengebiet numerisch konsistent berechenbar :
 - $T, u, x, s, c_p, c_v, w, \kappa, \eta, \lambda = f(p, s)$
 - $= f(h, s)$
 - $= f(p, T), f(p, x), f(T, x)$

Inhalt der Guideline, Zeitplan

- Gültigkeitsbereich: analog IF97
- Genauigkeiten: 10^{-5} im Vergleich zur IAPWS-IF97
- Rechenzeiten: CTR in Bezug auf Extended Steam Tables Software der Ruhr-Uni. Bochum
- Software für die Berechnung dieser Funktionen zur Evaluierung der Guideline

Zeitplan:

- DRAFT-Guideline und Testprogramme bis Ende Juli 2013 und Übergabe an die Working Groups IRS und TPWS
- Vorstellung des Verfahrens und der Guideline in Vorträgen auf der 16th International Conference on the Properties of Water and Steam in London:
 - Fast Calculation of Thermodynamic Properties of Water and Steam
Using a Spline Based Table Look-up Method – STM**
M. Kunick, H.-J. Kretzschmar, Uwe Gampe
 - Advanced Three-Dimensional CFD Applications Using Spline Functions for
the Computation of Thermodynamic Properties of Real Fluids**
F. di Mare, Matthias Kunick
 - Proposal for an IAPWS Guideline on the Fast Calculation of Steam and Water
Properties in Computational Fluid Dynamics Using Spline Interpolation**
H.-J. Kretzschmar, M. Kunick, J. Hruby, Michal Duška, Václav Vinš, A. Singh
- In Abhängigkeit der Entscheidung der IAPWS Evaluierung nach dem Meeting in London
- Abstimmung zur Annahme der Guideline beim IAPWS-Meeting 2014

Zusammenfassung und Ausblick

Zusammenfassung:

- Spline basierte Table-Look-up Methode (STM):
hohe Genauigkeit bei gleichzeitig geringen Rechenzeiten
(CTR=100...>1000 gegenüber wissenschaftlichen Fundamentalgleichungen)
- vollständige numerische Konsistenz von Vorwärts- u. Rückwärtsfunktionen
- Extreme Anforderungen der Berechnung instationärer Prozesse und der numerischen Strömungssimulation können erfüllt werden (Rechenzeit, num. Konsistenz, Stetigkeit)
- Nachweis der Anwendbarkeit in Computational Fluid Dynamics (CFD) erbracht
- Guideline in Vorbereitung, DRAFT wird in London vorgestellt