Hochschule Zittau/Görlitz
Fakultät Maschinenwesen
FG Technische Thermodynamik

Technische Universität Dresden
Fakultät Maschinenwesen
Institut für Energietechnik

Schnelle Berechnung der thermophysikalischen Eigenschaften von Arbeitsfluiden in energietechnischen Prozesssimulationen

Projekt der International Association for the Properties of Water and Steam (IAPWS)
Task Group "CFD Steam Property Formulation":

Hans-Joachim Kretzschmar, Matthias Kunick, Hochschule Zittau/Görlitz
Jan Hrubý, Michal Duška, Václav Vinš, Tschechische Akademie der Wissenschaften, Prag
Francesca di Mare, Deutsches Zentrum für Luft- u. Raumfahrt (DLR), Köln
Anurag Singh, General Electric, Schenectady (NY/USA)

Gefördert durch das Sächsische Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst (SMWK)

Hochschule Zittau/Görlitz
Fakultät Maschinenwesen
FG Technische Thermodynamik

Technische Universität Dresden
Fakultät Maschinenwesen
Institut für Energietechnik

Schnelle Berechnung der thermophysikalischen Eigenschaften von Arbeitsfluiden in energietechnischen Prozesssimulationen

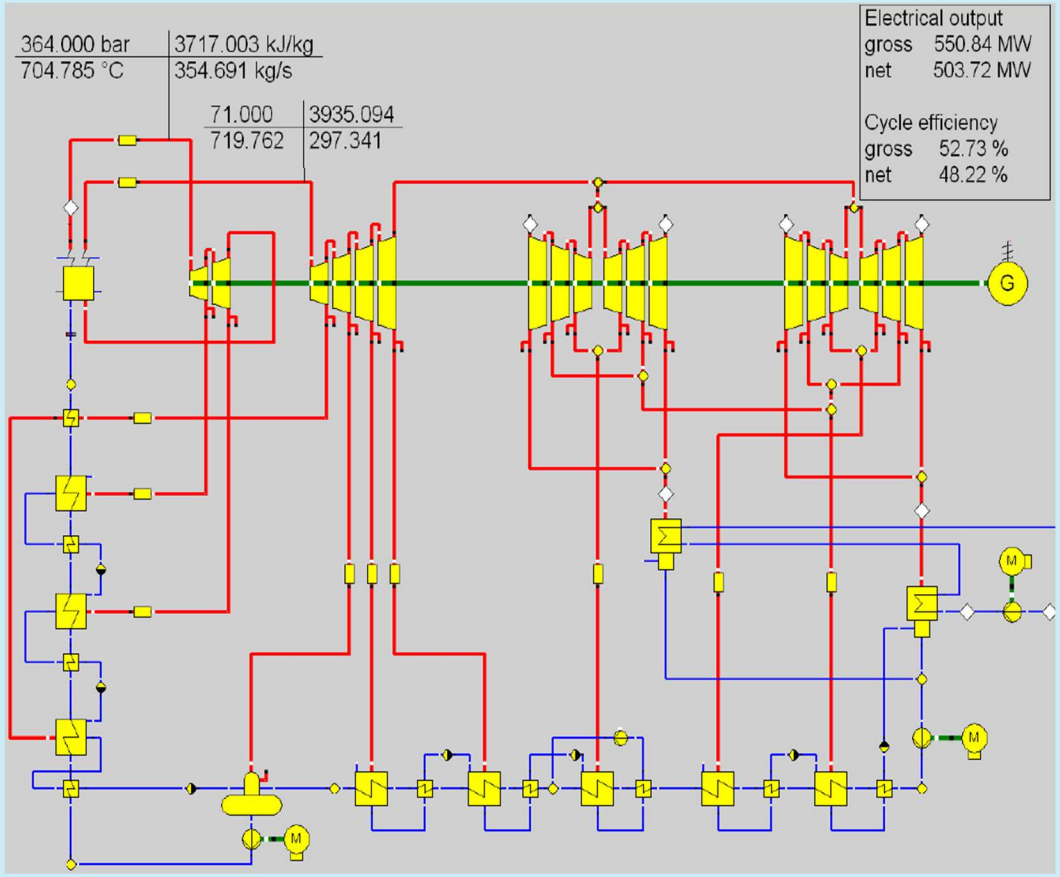
Inhalt:

- Aufwändige Prozesssimulationen – Anforderungen an die Stoffwert-Berechnung
- Diskussion derzeit verwendeter Ansätze zur Stoffwert-Berechnung – Zielstellungen für die Entwicklung eines geeigneten Stoffwert-Berechnungsverfahrens
- Grundlagen des Spline-Basierten Table Look-Up Verfahrens (SBTL)
- FluidSplines – Generierung von SBTL Stoffwert-Funktionen für spezifische Anforderungen
- SBTL Stoffwertfunktionen – Genauigkeit und Rechenzeitbedarf
- Neue IAPWS Richtlinie zum SBTL Verfahren
- Anwendung des SBTL Verfahrens in aufwändigen Prozesssimulationen
- Zusammenfassung

Aufwändige Prozesssimulationen – Anforderungen an die Stoffwert-Berechnung

Simulation kraftwerkstechnischer Anlagen mit Wärmeschaltbild-Berechnung (WSB):

Beispiel: Auslegung eines Dampfkraftwerks



500 MW Kohlekraftwerk in EBSILON Professional

- Simulation von:
  - An- u. Abfahrprozessen (instationär)
  - Kraftwerksanlagen im Netzverbund (instationär)
  - Betriebsoptimierung der Anlage (in Echtzeit)

→ hoher Rechenaufwand

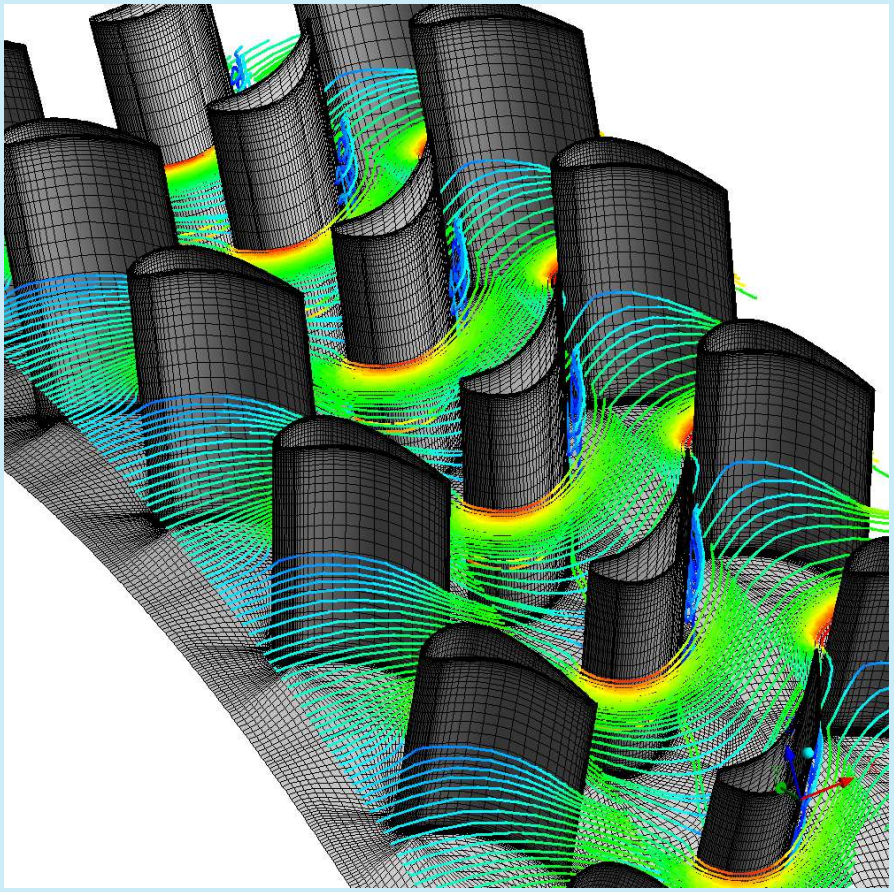
- Masse-, Energie, u. Entropiebilanzen werden als Gleichungssystem formuliert und gelöst.

→ Stoffwerte häufig als Funktion von (p,h)

Aufwändige Prozesssimulationen – Anforderungen an die Stoffwert-Berechnung

Numerische Strömungsanalyse mit Computational Fluid Dynamics (CFD):

Beispiel: Strömung in einer Dampfturbine



Strömung durch eine Stufengruppe (ANSYS)

- Simulation zur:
  - Optimierung der Schaufelgeometrie für maximale Stufenwirkungsgrade
  - Bestimmung der auf die Schaufeln wirkenden Dampfkräfte (auch gekoppelt mit FEM um die Belastungen in der Schaufel und die daraus folgenden Geometrieänderungen zu bestimmen)
  - Analyse instationärer Prozesse

  → hoher Rechenaufwand

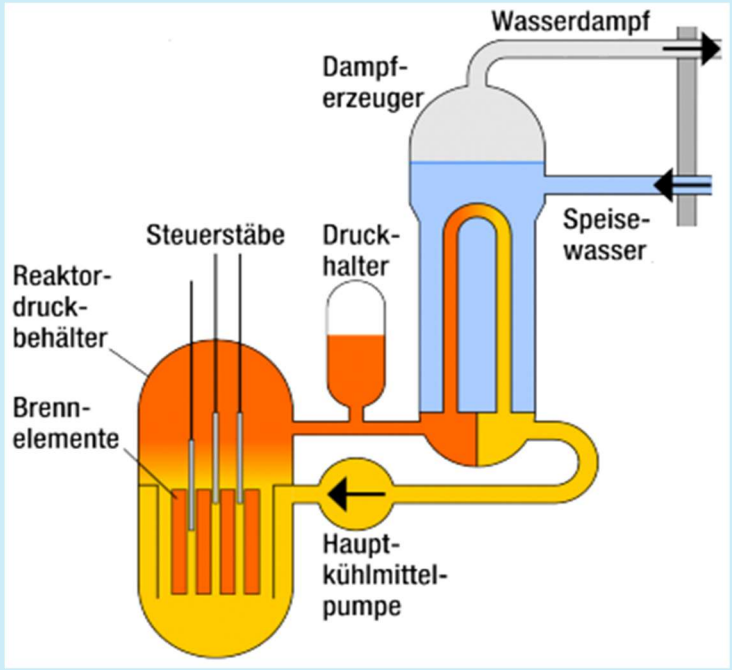
- Bilanzräume werden in finite Volumen unterteilt und die Erhaltungsgleichungen als System partieller DGL formuliert und gelöst.

  → Stoffwerte häufig als Funktion von (v,u)

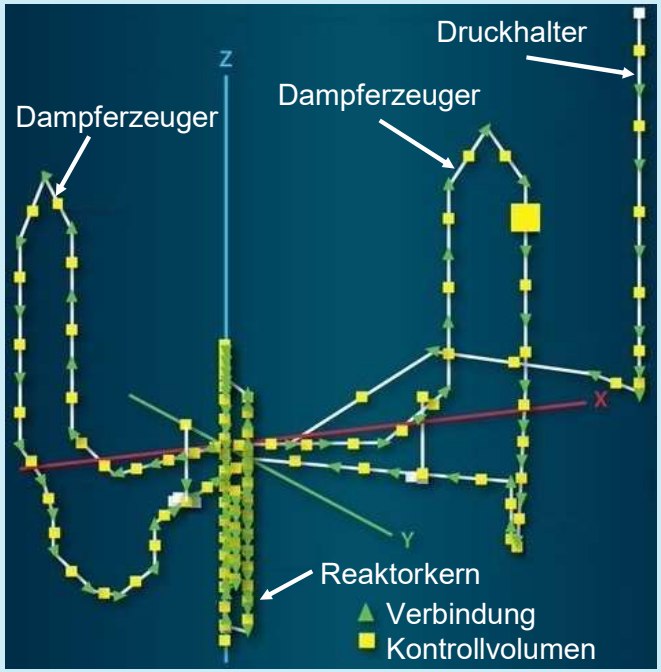
Aufwändige Prozesssimulationen – Anforderungen an die Stoffwert-Berechnung

Analyse thermohydraulischer Prozesse in Kernreaktoren mit Systemcodes:

Beispiel: Kühlmittelverlust am Druckwasserreaktor



Schematische Darstellung



Modell in RELAP-5

- Simulation von instationärer Prozesse in Kernreaktoren
  → hoher Rechenaufwand

- Bilanzräume werden in finite Volumen unterteilt und die Erhaltungsgleichungen als System partieller DGL formuliert und gelöst.

  → Stoffwerte häufig als Funktion von (v,u)

Aufwändige Prozesssimulationen – Anforderungen an die Stoffwert-Berechnung

Anforderungen an die Stoffwert-Berechnung:

- **Ungenaue Stoffwertfunktionen führen zu ungenauen Simulationsergebnissen:**
  - Abweichungen in den berechneten spezifischen Volumina *v* führen zu ungenauen Massenströmen und Geschwindigkeitsvektoren.
  - Abweichungen in den kalorischen Zustandsgrößen, wie der inneren Energie *u* und der Entropie *s*, führen zu Fehlern in den Energie- und Entropiebilanzen.

  ⇨ **Stoffwertfunktionen müssen sehr genau sein!**

- **Stoffwertfunktionen beanspruchen einen Großteil der Gesamtrechenzeiten:**
  - Stoffwertfunktionen werden millionenfach aufgerufen

  ⇨ **Stoffwertfunktionen müssen möglichst geringe Rechenzeiten aufweisen!**

- **Weitere Problemstellungen und daraus resultierende Anforderungen:**
  - Einsatz numerischer Lösungsverfahren

  ⇨ **Stoffwertfunktionen müssen mindestens einmal stetig differenzierbar sein.**

  - Kleine Zeit- bzw. Ortsdiskretisierungen

  ⇨ **Numerisch konsistente Umkehrfunktionen werden benötigt, z.B.: $u(p,v)$ und $p(v,u)$.**

Verfügbare Stoffwert-Berechnungsalgorithmen für Wasser und Wasserdampf

Fundamentalgleichungen: Wissenschaftliche Formulation IAPWS-95

Fundamentalgleichung:

$$\Phi(\delta,\tau) = \frac{f}{RT} = \Phi^{o}(\delta,\tau) + \Phi^{r}(\delta,\tau)$$

$$\delta = \frac{\rho}{\rho_c} \qquad \tau = \frac{T_c}{T}$$

Ideal-Anteil:

$$\Phi^{o}(\delta,\tau) = \ln(\delta) + n_1^{o} + n_2^{o}\tau + n_3^{o}\ln(\tau) + \sum_{i=4}^{8} n_i^{o}\ln\left[1-\exp(-\gamma_i^{o}\tau)\right]$$

Real-Anteil:

$$\Phi^{r}(\delta,\tau) = \sum_{i=1}^{7} n_i\delta^{d_i}\tau^{t_i} + \sum_{i=8}^{51} n_i\delta^{d_i}\tau^{t_i}\exp\left(-\delta^{c_i}\right)$$

$$+ \sum_{i=52}^{54} n_i\delta^{d_i}\tau^{t_i}\exp\left(-\alpha_i(\delta-\varepsilon_i)^2 - \beta_i(\tau-\gamma_i)^2\right) + \sum_{i=55}^{56} n_i\Delta^{b_i}\delta\psi$$

$$\Delta = \theta^2 + B_i\left[(\delta-1)^2\right]^{a_i}$$

$$\theta = (1-\tau) + A_i\left[(\delta-1)^2\right]^{\frac{1}{2\beta_i}}$$

$$\psi = \exp\left(-C_i(\delta-1)^2 - D_i(\tau-1)^2\right)$$

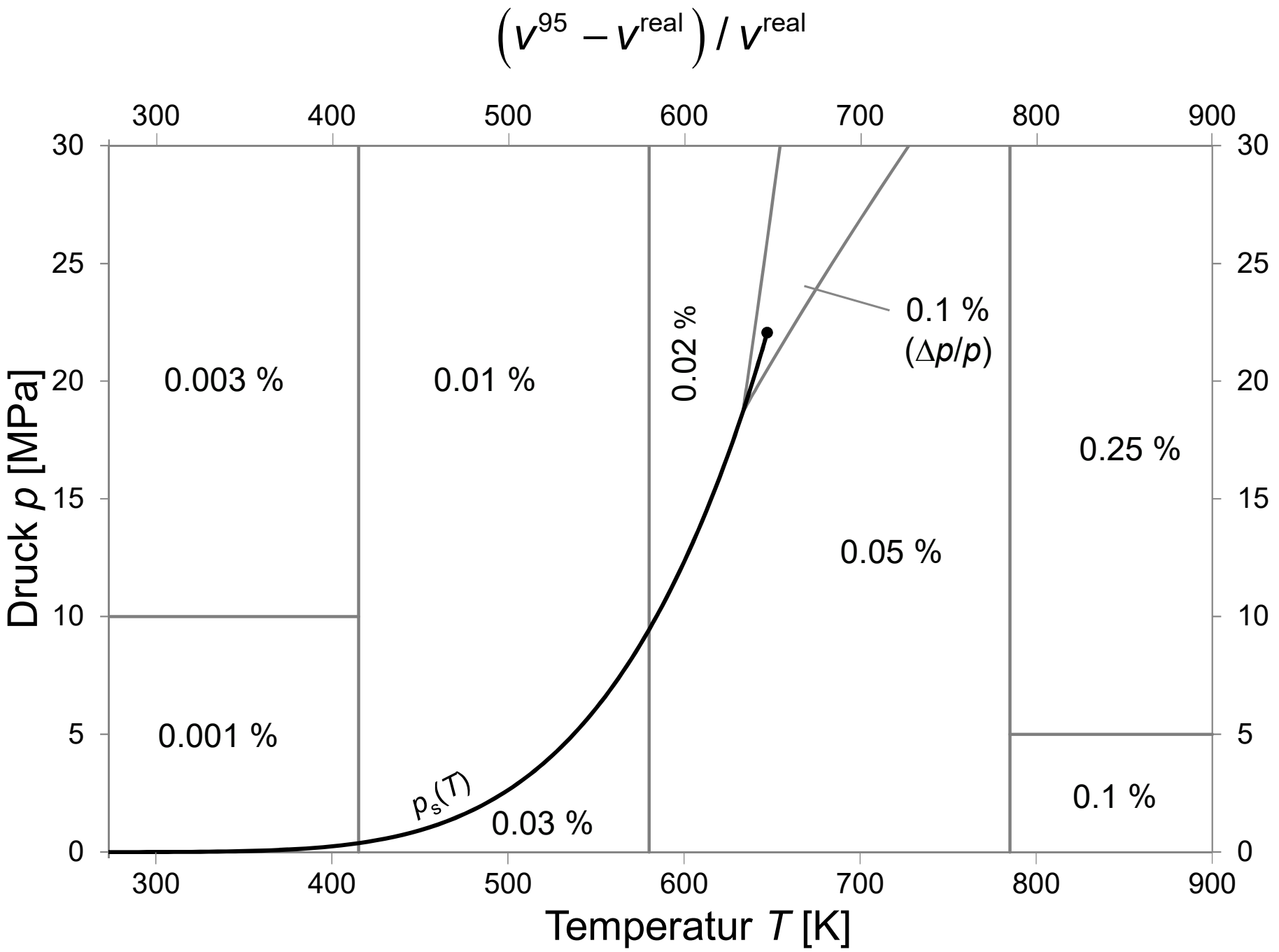
Verfügbare Stoffwert-Berechnungsalgorithmen für Wasser und Wasserdampf

Fundamentalgleichungen: Wissenschaftliche Formulation IAPWS-95

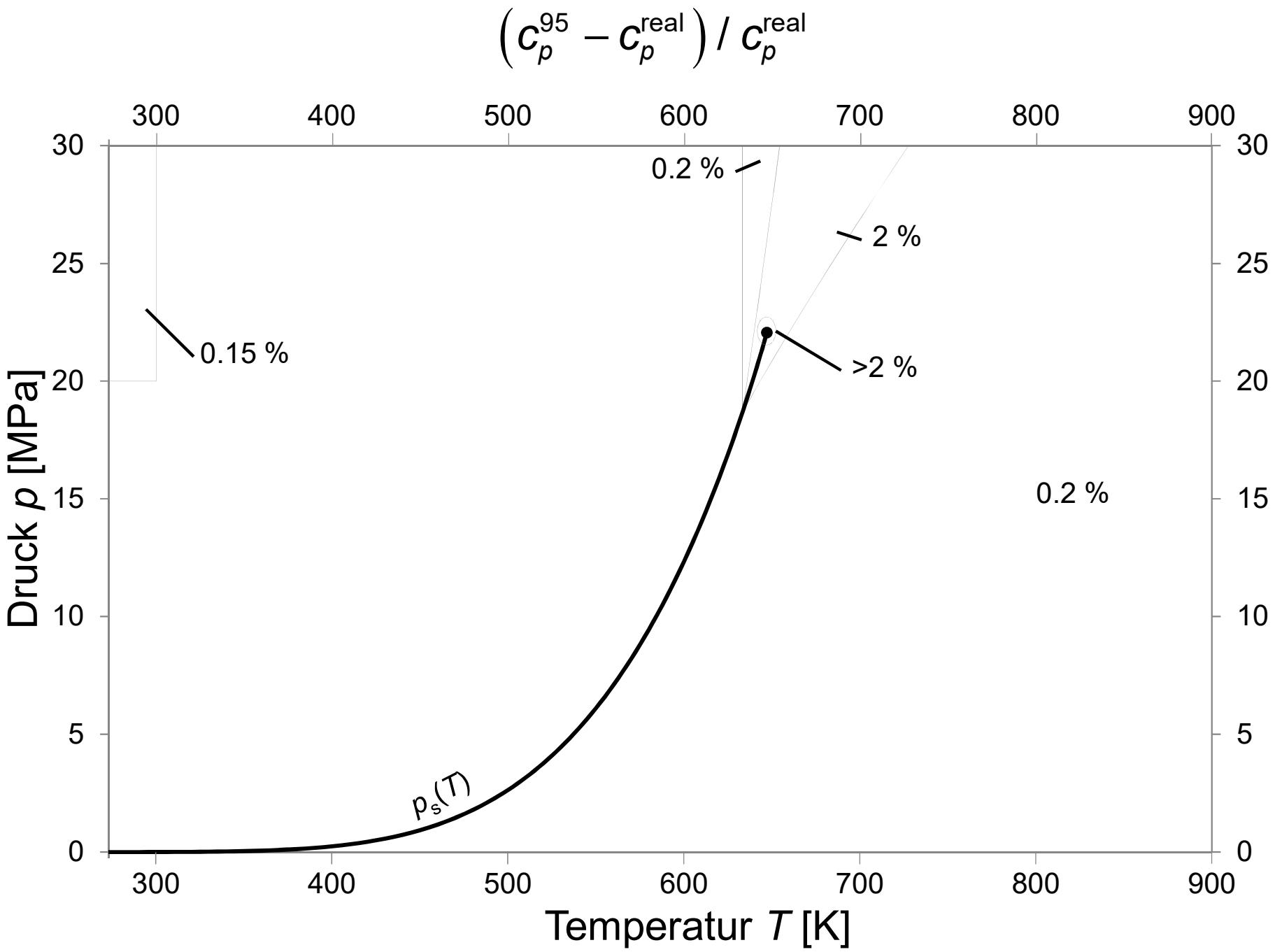
Zustandsgröße	Berechnungsformel
Druck p $p = \rho^2 \left(\partial f/\partial \rho\right)_T$	$\frac{p(\delta,\tau)}{\rho RT} = 1 + \delta \Phi^{\mathrm{r}}_{\delta}$
Innere Energie u $u = f - T\left(\partial f/\partial T\right)_\rho$	$\frac{u(\delta,\tau)}{RT} = \tau\left(\Phi^{\mathrm{o}}_{\tau} + \Phi^{\mathrm{r}}_{\tau}\right)$
Enthalpie h $h = f - T\left(\partial f/\partial T\right)_\rho + \rho\left(\partial f/\partial \rho\right)_T$	$\frac{h(\delta,\tau)}{RT} = 1 + \delta \Phi^{\mathrm{r}}_{\delta} + \tau\left(\Phi^{\mathrm{o}}_{\tau} + \Phi^{\mathrm{r}}_{\tau}\right)$
Entropie s $s = -\left(\partial f/\partial T\right)_\rho$	$\frac{s(\delta,\tau)}{R} = \tau\left(\Phi^{\mathrm{o}}_{\tau} + \Phi^{\mathrm{r}}_{\tau}\right) - \Phi^{\mathrm{o}} - \Phi^{\mathrm{r}}$
Isobare Wärmekapazität c_p $c_p = \left(\partial h/\partial T\right)_p$	$\frac{c_p(\delta,\tau)}{R} = -\tau^2\left(\Phi^{\mathrm{o}}_{\tau\tau} + \Phi^{\mathrm{r}}_{\tau\tau}\right) + \frac{\left(1 + \delta\Phi^{\mathrm{r}}_{\delta} - \delta\tau\Phi^{\mathrm{r}}_{\delta\tau}\right)^2}{1 + 2\delta\Phi^{\mathrm{r}}_{\delta} + \delta^2\Phi^{\mathrm{r}}_{\delta\delta}}$
Schallgeschwindigkeit w $w = \sqrt{\left(\partial p/\partial \rho\right)_s}$	$\frac{w^2(\delta,\tau)}{RT} = 1 + 2\delta\Phi^{\mathrm{r}}_{\delta} + \delta^2\Phi^{r}_{\delta\delta} - \frac{\left(1 + \delta\Phi^{\mathrm{r}}_{\delta} - \delta\tau\Phi^{\mathrm{r}}_{\delta\tau}\right)^2}{\tau^2\left(\Phi^{\mathrm{o}}_{\tau\tau} + \Phi^{\mathrm{r}}_{\tau\tau}\right)}$

- Die zugrunde liegenden Messwerte werden innerhalb ihrer Unsicherheiten wiedergegeben.
- Die Zustandsgleichung kann auch für hohe Drücke und Temperaturen verwendet werden, die außerhalb des vermessenen Zustandsgebiets liegen.

Wissenschaftliche Formulation IAPWS-95 für Wasser und Wasserdampf: Unsicherheiten



Wissenschaftliche Formulation IAPWS-95 für Wasser und Wasserdampf: Unsicherheiten



Verfügbare Stoffwert-Berechnungsalgorithmen für Wasser und Wasserdampf

Fundamentalgleichungen: Wissenschaftliche Formulation IAPWS-95

Fundamentalgleichung:

$$\Phi(\delta,\tau)=\frac{f}{RT}=\Phi^{o}(\delta,\tau)+\Phi^{r}(\delta,\tau) \qquad \delta=\frac{\rho}{\rho_c} \qquad \tau=\frac{T_c}{T}$$

Ideal-Anteil:

$$\Phi^{o}(\delta,\tau)=\ln(\delta)+n_1^{o}+n_2^{o}\tau+n_3^{o}\ln(\tau)+\sum_{i=4}^{8}n_i^{o}\ln\left[1-\exp(-\gamma_i^{o}\tau)\right]$$

Real-Anteil:

$$\Phi^{r}(\delta,\tau)=\sum_{i=1}^{7}n_i\delta^{d_i}\tau^{t_i}+\sum_{i=8}^{51}n_i\delta^{d_i}\tau^{t_i}\exp\left(-\delta^{c_i}\right)+\sum_{i=52}^{54}n_i\delta^{d_i}\tau^{t_i}\exp\left(-\alpha_i(\delta-\varepsilon_i)^2-\beta_i(\tau-\gamma_i)^2\right)+\sum_{i=55}^{56}n_i\Delta^{b_i}\delta\psi$$

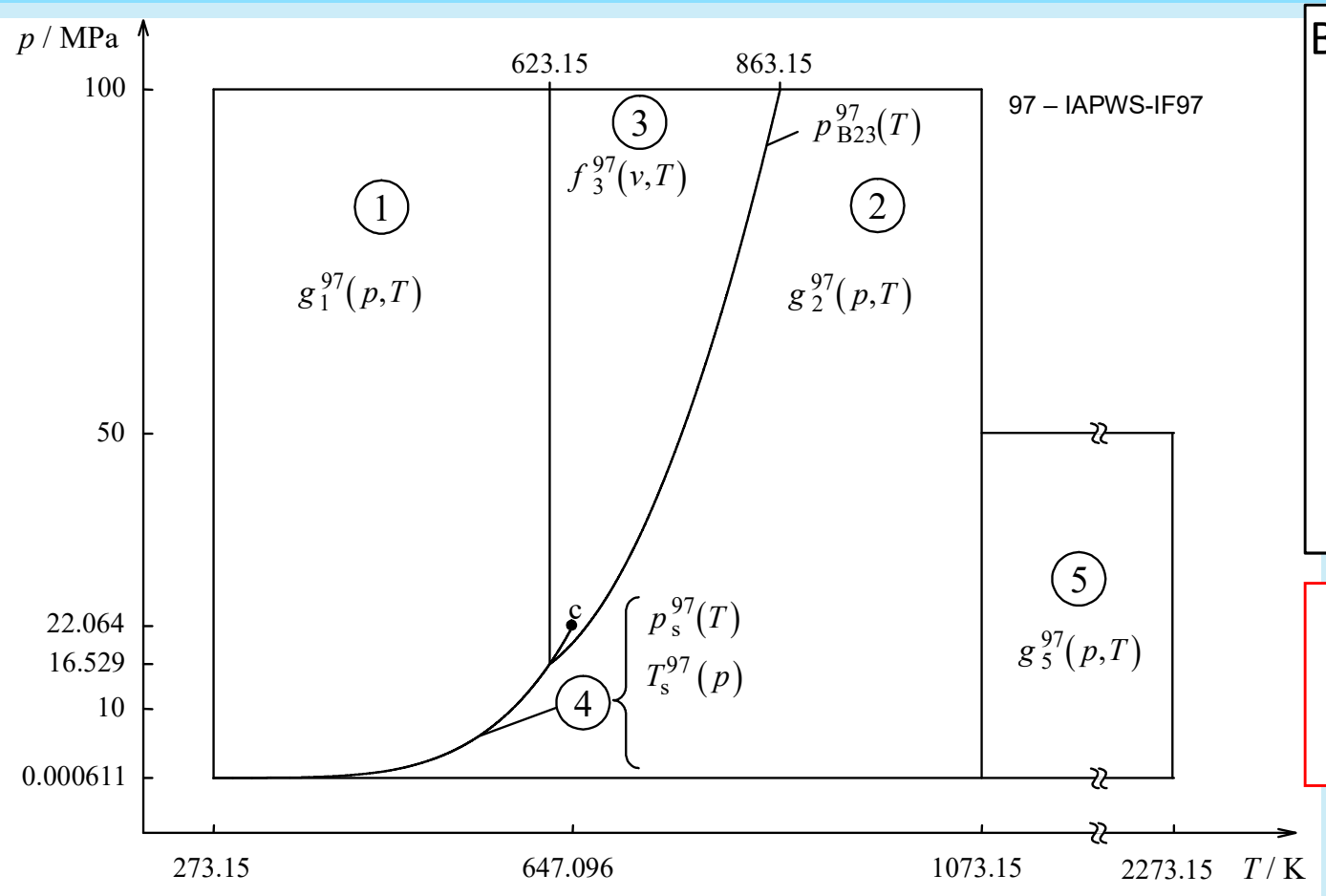
$$\Delta=\theta^2+B_i\left[(\delta-1)^2\right]^{a_i} \qquad \theta=(1-\tau)+A_i\left[(\delta-1)^2\right]^{\frac{1}{2\beta_i}} \qquad \psi=\exp\left(-C_i(\delta-1)^2-D_i(\tau-1)^2\right)$$

Zustandsgröße	Berechnungsformel
Druck p $p=\rho^2(\partial f/\partial\rho)_T$	$\frac{p(\delta,\tau)}{\rho RT}=1+\delta\Phi^{r}_{\delta}$
Innere Energie u $u=f-T(\partial f/\partial T)_\rho$	$\frac{u(\delta,\tau)}{RT}=\tau\left(\Phi^{o}_{\tau}+\Phi^{r}_{\tau}\right)$
Enthalpie h $h=f-T(\partial f/\partial T)_\rho+\rho(\partial f/\partial\rho)_T$	$\frac{h(\delta,\tau)}{RT}=1+\delta\Phi^{r}_{\delta}+\tau\left(\Phi^{o}_{\tau}+\Phi^{r}_{\tau}\right)$

- viele aufwändige mathematische Operationen (z.B.: x^a, e^x, $\ln(x)$)
- Umkehrfunktionen von (v,u), (p,h) … müssen iterativ berechnet werden
  → zu langsam für CFD und weitere aufwändige Prozesssimulationen

Verfügbare Stoffwert-Berechnungsalgorithmen für Wasser und Wasserdampf

Industrieformulation IAPWS-IF97:



Bereich 2: $\pi = \frac{p}{p^*}$ $\tau = \frac{T^*}{T}$

$$\frac{g_2(\pi,\tau)}{RT} = \gamma^o(\pi,\tau) + \gamma^r(\pi,\tau)$$

$$\gamma^o(\pi,\tau) = \ln\pi + \sum_{i=1}^{9} n_i^o \tau^{J_i^0}$$

$$\gamma^r(\pi,\tau) = \sum_{i=1}^{43} n_i \pi^{I_i} (\tau - 0.5)^{J_i}$$

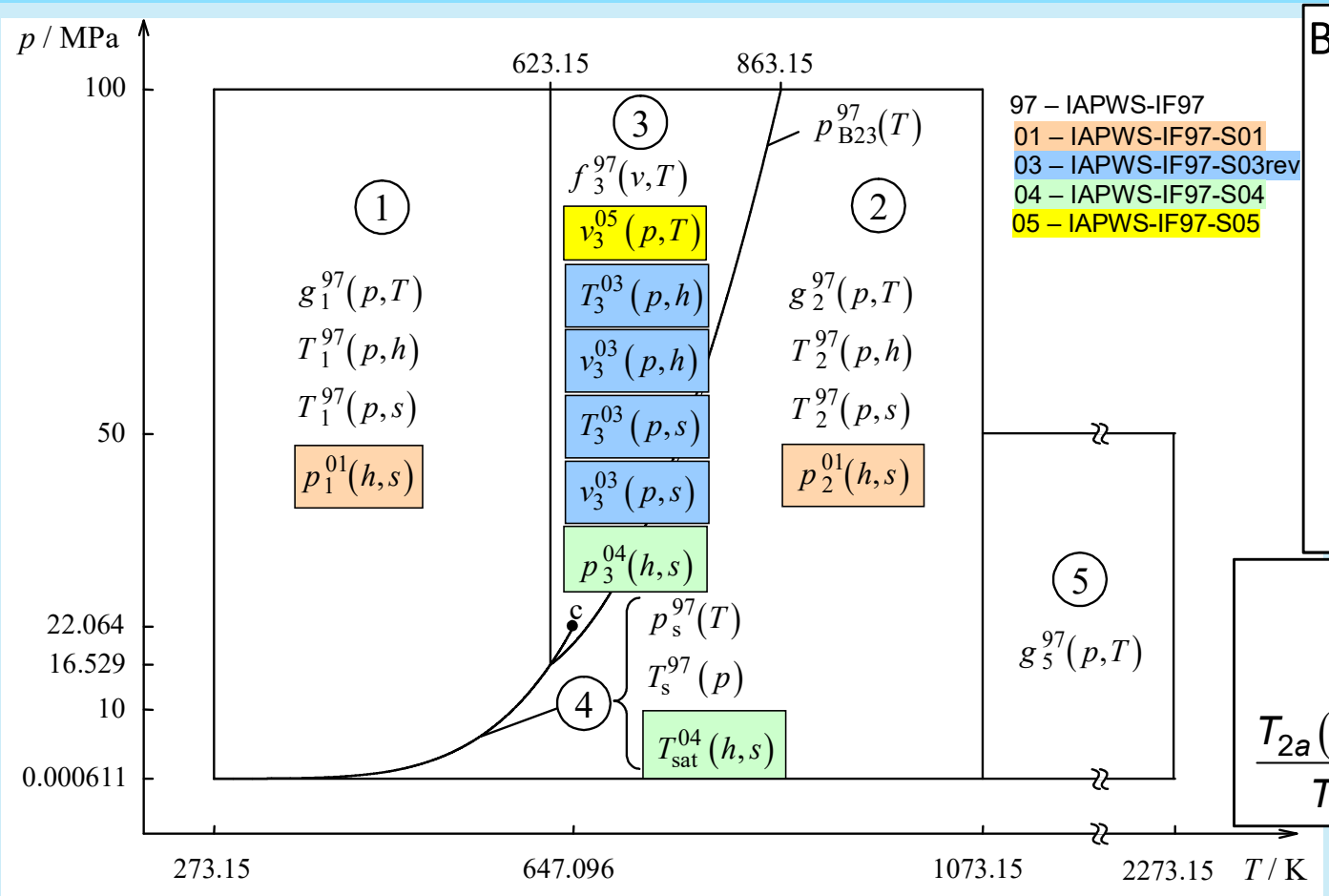
$$h_2(\pi,\tau) = RT\left[\gamma_\tau^o(\pi,\tau) + \gamma_\tau^r(\pi,\tau)\right]$$

Berechnung der Umkehrfunktion $T_2(p,h)$ durch Iteration aus $h_2(p,T)$

- Basis-Gleichungen sind für minimale Rechenzeiten optimiert
- Genauigkeit ausreichend für industrielle Anwendungen

Verfügbare Stoffwert-Berechnungsalgorithmen für Wasser und Wasserdampf

Industrieformulation IAPWS-IF97 mit Rückwärtsgleichungen:



Bereich 2: $\pi = \frac{p}{p^*}$ $\tau = \frac{T^*}{T}$

$$\frac{g_2(\pi,\tau)}{RT} = \gamma^{o}(\pi,\tau) + \gamma^{r}(\pi,\tau)$$

$$\gamma^{o}(\pi,\tau) = \ln\pi + \sum_{i=1}^{9} n_i^{o}\tau^{J_i^{0}}$$

$$\gamma^{r}(\pi,\tau) = \sum_{i=1}^{43} n_i \pi^{I_i}(\tau-0.5)^{J_i}$$

$$h_2(\pi,\tau) = RT\left[\gamma_\tau^{o}(\pi,\tau) + \gamma_\tau^{r}(\pi,\tau)\right]$$

$\pi = \frac{p}{p^*}$ $\eta = \frac{h}{h^*}$

$$\frac{T_{2a}(\pi,\eta)}{T^*} = \theta_{2a}(\pi,\eta) = \sum_{i=1}^{34} n_i \pi^{I_i}(\eta-2.1)^{J_i}$$

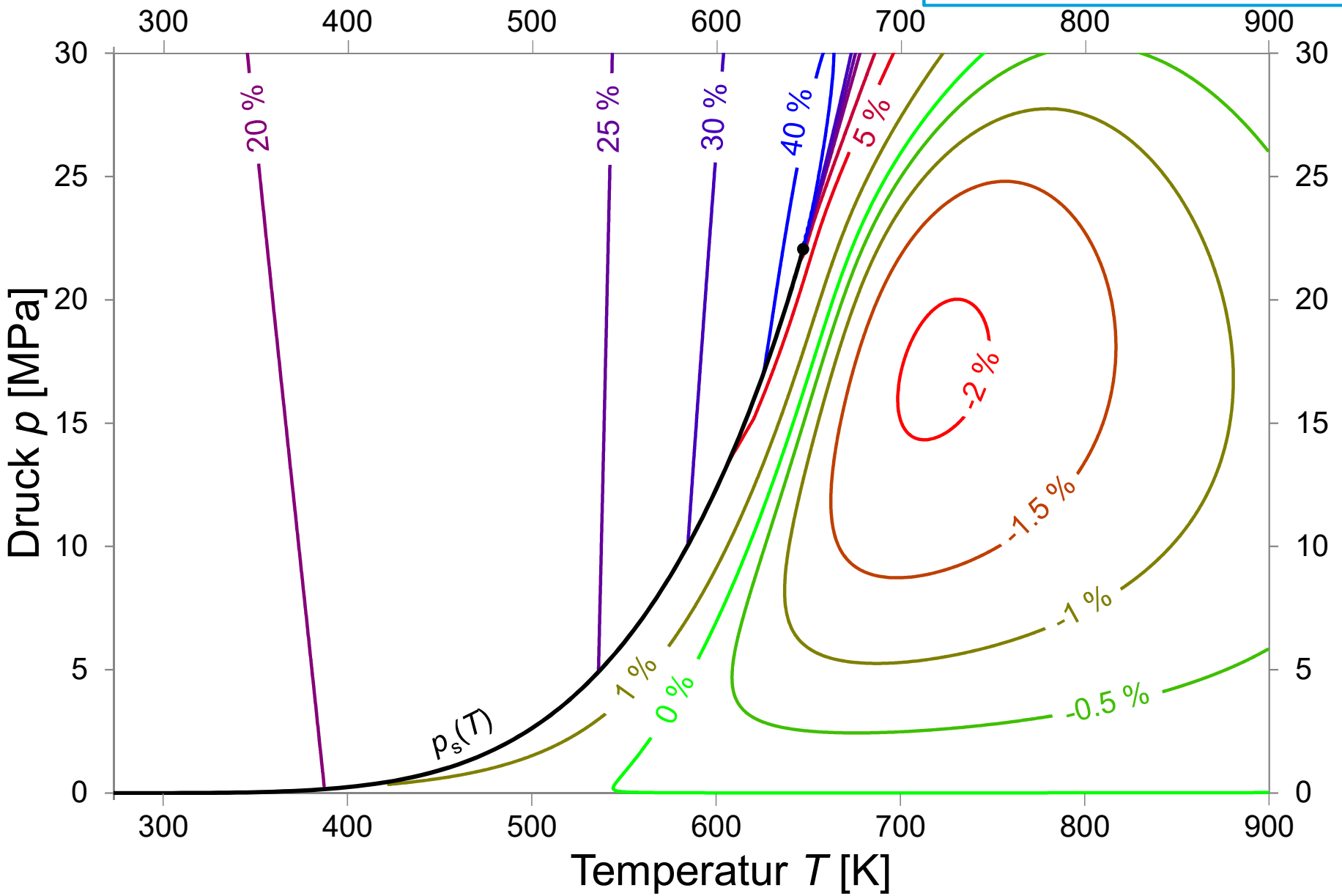
- Schnelle Berechnung von Umkehrfunktionen aus (*p*,*h*), (*p*,*s*) und (*h*,*s*)
- Numerische Konsistenz nicht ausreichend für Simulationen mit kleinen Orts- bzw. Zeitdiskretisierungen (z. B. in CFD oder der Simulation instationärer Prozesse)

Umkehrfunktionen müssen iterativ aus den Basisgleichungen berechnet werden
→ zu langsam für aufwändige Prozesssimulationen wie beispielsweise CFD

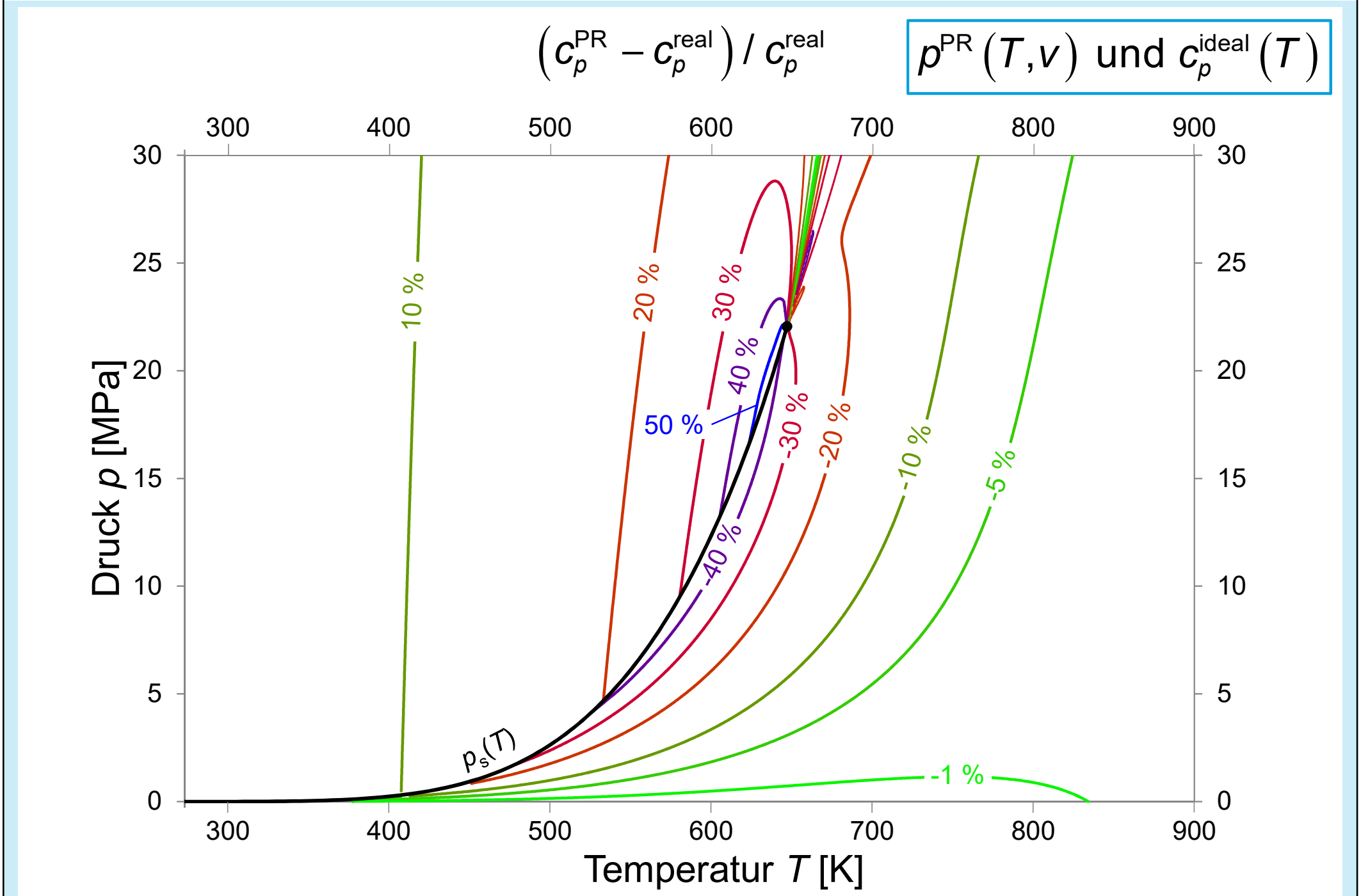
Peng-Robinson-Gleichung (Wasser und Wasserdampf): Abweichungen vom realen Zustandsverhalten

$$\left(v^{PR} - v^{real}\right) / v^{real}$$

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a(T)}{v^2 + 2bv - b^2}$$

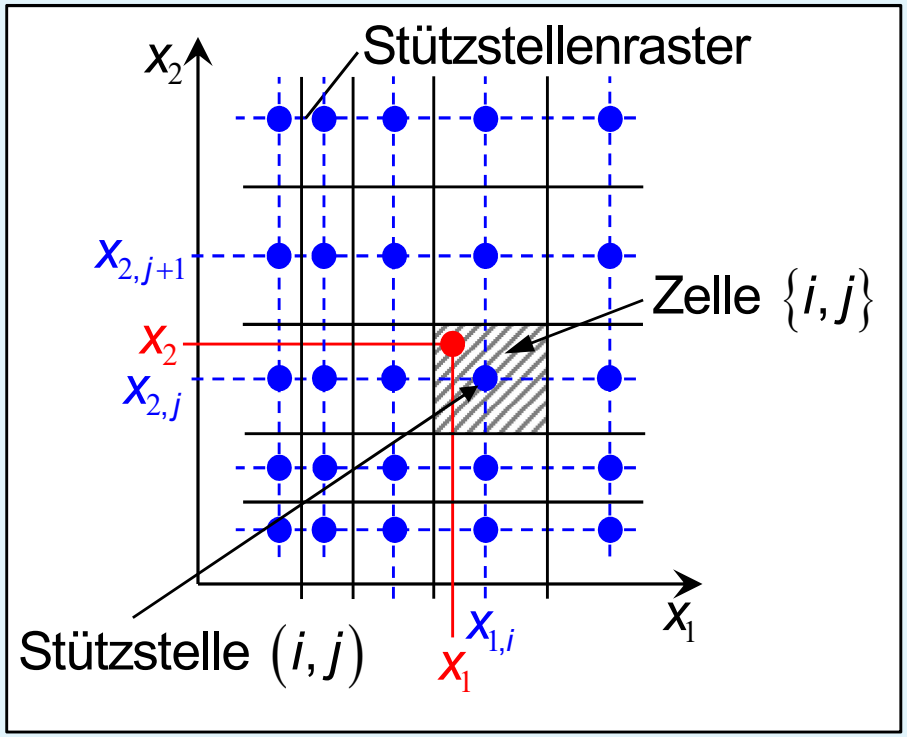


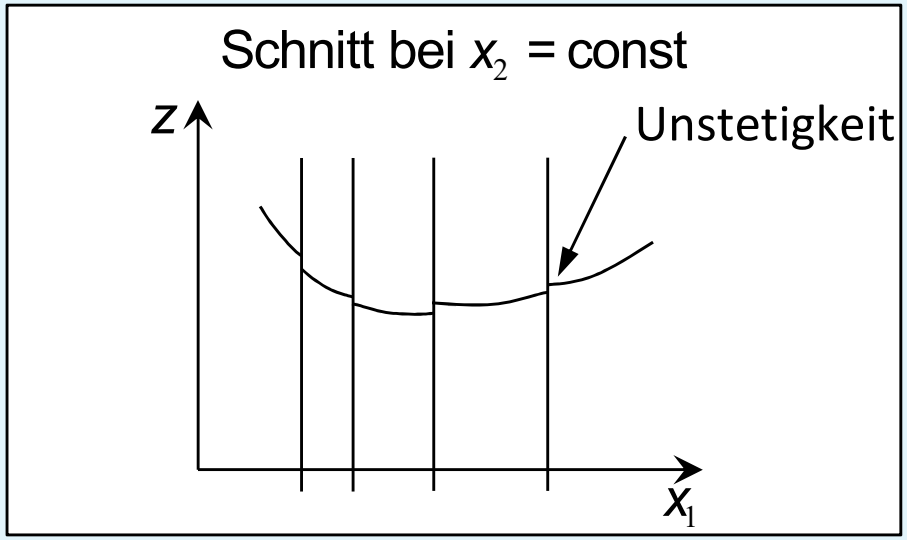
Peng-Robinson-Gleichung (Wasser und Wasserdampf): Abweichungen vom realen Zustandsverhalten



Verfügbare Stoffwert-Berechnungsalgorithmen für Wasser und Wasserdampf

Table Look-up Verfahren – z.B.: Tabular Taylor Series Expansion Method (TTSE)





Berechnung einer beliebigen Zustandsgröße $z(x_1,x_2)$:

- Aus einer zugrundeliegenden Zustandsgleichung werden an den Stützstellen (i,j) die benötigten Werte und Ableitungen tabelliert.

- Berechnung während der Simulation:
  - Zellsuche im Stützstellenraster
  - Taylor-Reihenentwicklung ausgehend von Stützstelle (i,j):

$$z_{\{i,j\}}(x_1,x_2) = z_{i,j} + \Delta x_{1,i}\left(\frac{\partial z}{\partial x_1}\right)_{x_2} + \frac{\Delta x_{1,i}^{\,2}}{2}\left(\frac{\partial^2 z}{\partial x_1^{\,2}}\right)_{x_2}$$

$$+\Delta x_{2,j}\left(\frac{\partial z}{\partial x_2}\right)_{x_1} + \frac{\Delta x_{2,j}^{\,2}}{2}\left(\frac{\partial^2 z}{\partial x_2^{\,2}}\right)_{x_1} + \Delta x_{1,i}\Delta x_{2,j}\left(\frac{\partial z}{\partial x_1 \partial x_2}\right)$$

Aufgrund der Unstetigkeiten:
Nicht anwendbar bei Simulationen mit kleinen Orts- bzw. Zeitdiskretisierungen

Verfügbare Stoffwert-Berechnungsalgorithmen für Wasser und Wasserdampf - Rechenzeitvergleich

Rechenzeitverhältnis: $$CTR = \frac{\text{Zeit für Berechnung mit der Peng-Robinson-Gleichung}}{\text{Zeit für Berechnung mit dem betrachteten Algorithmus}}$$

Anzahl der notwendigen Iterationen (Durchschnitt): *ANI*

$p(v,u)$				
Algorithm	IF97 Bereich 1 (Flüss.)		IF97 region 2 (Dampf)	
	ANI	*CTR*	*ANI*	*CTR*
Ideal gas	-	-	3.83	1.47
Peng-Robinson	3	1.00	3.08	1.00
IAPWS-IF97	2.94	1/6.08	3.64	1/11.1
IAPWS-95	2.94	1/89.6	3.68	1/107

$T(p,h)$				
Algorithm	IF97 Bereich 1 (Flüss.)		IF97 Bereich 2 (Dampf)	
	ANI	*CTR*	*ANI*	*CTR*
Ideal gas	-	-	3.68	3.66
Peng-Robinson	5.72	1.00	3.47	1.00
IF97-BWE	-	31.0	-	7.83
IAPWS-IF97	1.99 [a]	2.51 [a]	2.02 [a]	1.01 [a]
IAPWS-95	4.2	1/33.9	3.62	1/47.4
TTSE	-	-	-	4.61

a) Startwerte aus den Rückwärtsgleichungen für $T(p,h)$

Abbruchkriterien für Iterationen:

$$\left|\frac{\Delta v}{v}\right| \le 10^{-6}$$

$u \le 1\,\text{kJ/kg}$: $|\Delta u| \le 10^{-6}\,\text{kJ/kg}$

$u > 1\,\text{kJ/kg}$: $\left|\frac{\Delta u}{u}\right| \le 10^{-6}$

$$\left|\frac{\Delta p}{p}\right| \le 10^{-6}$$

$h \le 1\,\text{kJ/kg}$: $|\Delta h| \le 10^{-6}\,\text{kJ/kg}$

$h > 1\,\text{kJ/kg}$: $\left|\frac{\Delta h}{h}\right| \le 10^{-6}$

Verfügbare Stoffwert-Berechnungsalgorithmen für Wasser und Wasserdampf – Schlussfolgerungen für die Entwicklung eines neuen SW-Berechnungsverfahrens

Anforderung	Ideales Gas	Kubische Zustandsgl.	Ind. Standard IAPWS-IF97	Table Look-Up Verfahren
Genauigkeit	$\lvert\Delta v\rvert \le 50\ \%$ $\lvert\Delta c_p\rvert \le 50\ \%$	$\lvert\Delta v\rvert \le 5\ \%$ $\lvert\Delta c_p\rvert \le 40\ \%$	$\lvert\Delta v\rvert \le 0.3\ \%$ $\lvert\Delta c_p\rvert \le 0.5\ \%$	abh. von Anzahl der Stützstellen u. Algorithmus
Rechenzeit	sehr gering	akzeptabel	zu hoch	sehr gering

Probleme derzeit verwendeter Table Look-up Verfahren:

- Bilineare Interpolation: keine stetigen ersten Ableitungen (z.B. in ANSYS CFX)
- Bikubische Interpolation: rechenzeitintensive Umkehrfunktionen
- Anpassung des Stützstellenrasters an Nichtlinearität der Funktion → aufwändige Zellsuche
- Tabellierung in (p,T) Koordinaten, jedoch z.B. (p,h) am häufigsten verwendet (ANSYS CFX)

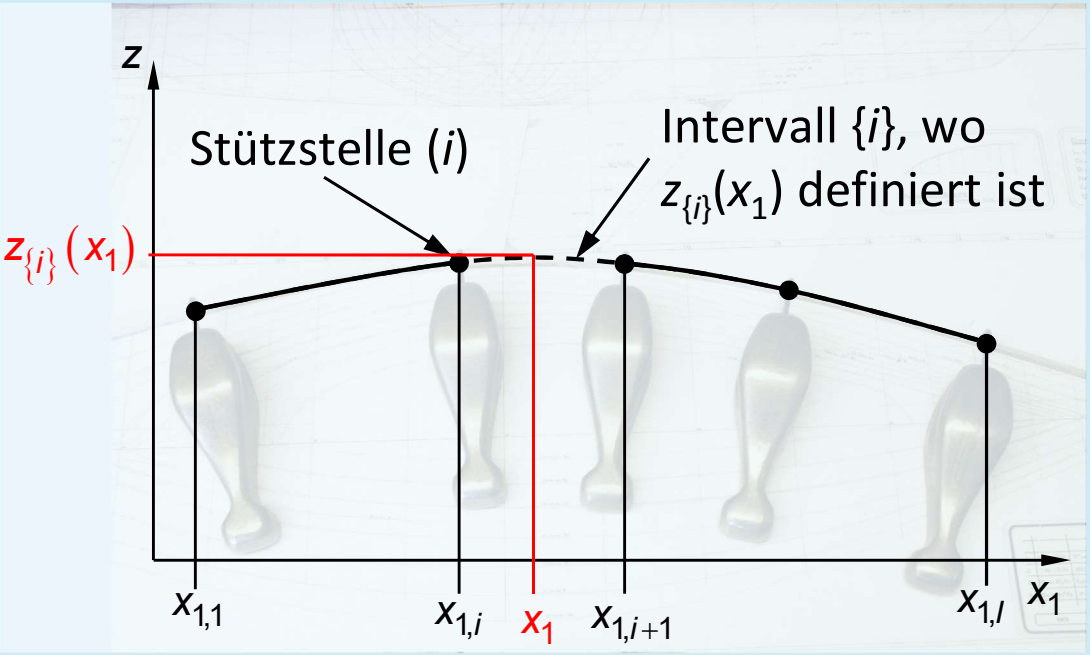
Zielstellungen für die Entwicklung eines Spline-basierten Table Look-up Verfahrens:

Mit der Entwicklung des neuen Table Look-up Verfahrens mit:

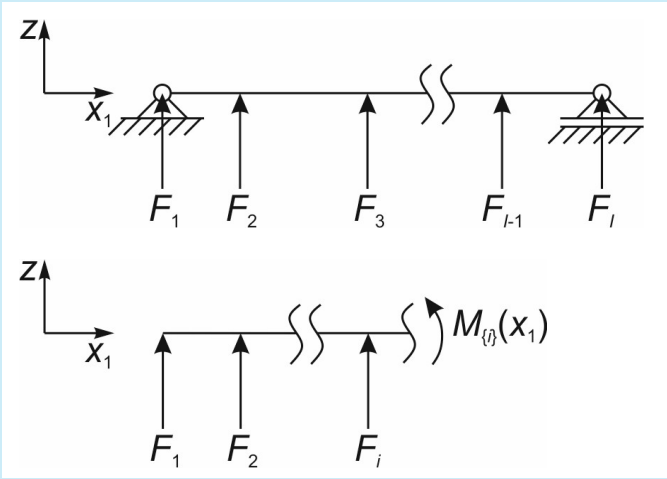
- höchstmöglicher Genauigkeit und geringstmöglichen Rechenzeiten
- stetigen Stoffwertfunktionen und stetigen ersten Ableitungen
- sehr schnellen, numerisch konsistente Umkehrfunktionen, z.B. $u(p,v)$ und $p(v,u)$

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

Spline-Funktionen:



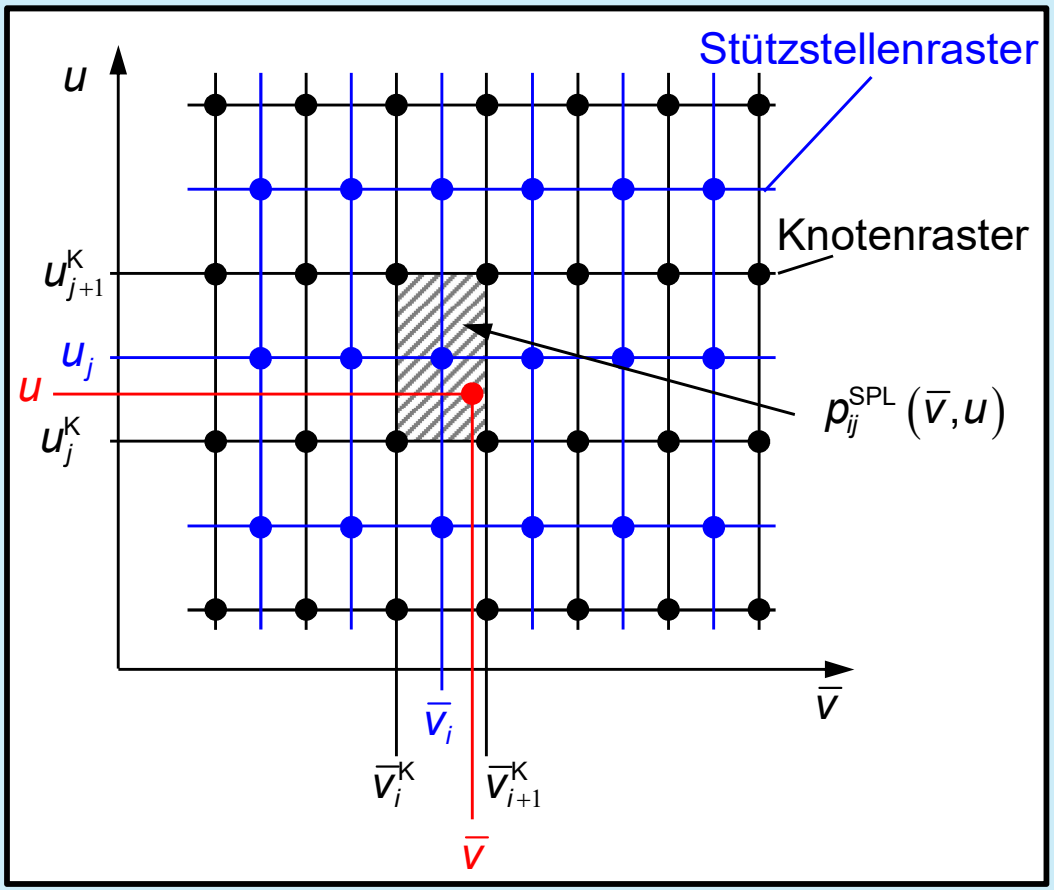
- Spline (engl.) = Kurvenlineal
- aus der technischen Mechanik:



- Beschreibung der Biegelinie mit DGL 2-ter Ordnung: $EIz''(x_1) = M(x_1)$
- Integration führt auf stückweise def. Biegelinie: $z_{\{i\}}(x_1) = \sum_{k=1}^{i} \frac{F_k}{6EI}(x_1 - x_{1,i})^3 + \bar{C}_{\{i\},1}(x_1 - x_{1,i}) + \bar{C}_{\{i\},2}$
- Analog für kubische Spline-Funktionen nach Schoenberg (1949):
  - Zwischen den Stützstellen werden kubische Polynome definiert: $z_{\{i\}}(x_1) = \sum_{k=1}^{4} a_{ik}(x_1 - x_{1,i})^{k-1}$
  - Als Übergangsbedingung wird die Gleichheit der Funktionswerte und der ersten beiden Ableitungen gefordert. Mit zwei Randbedingungen (z.B. Vorgabe der Ableitungen an den beiden Enden) ist die kubische Spline-Funktion eindeutig definiert.

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

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



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

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

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

$$p^{SPL}_{ij}\left(\bar{v},u\right) = \sum_{k=1}^{3}\sum_{l=1}^{3} a_{ijkl}\left(\bar{v}-\bar{v}_i\right)^{k-1}\left(u-u_j\right)^{l-1}$$

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

Berechnung zur Laufzeit:

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

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

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

Spline-Funktion:

$$p_{ij}^{SPL}\left(\bar{v},u\right)=\sum_{k=1}^{3}\sum_{l=1}^{3}a_{ijkl}\left(\bar{v}-\bar{v}_i\right)^{k-1}\left(u-u_j\right)^{l-1}$$

Inverse Spline-Funktion:

$$u_{ij}^{INV}\left(p,\bar{v}\right)=\frac{\left(-B\pm\sqrt{B^2-4AC}\right)}{2A}+u_j$$

wobei

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

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

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

und

$$\Delta\bar{v}_i=\left(\bar{v}-\bar{v}_i\right)$$

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

- **Die inverse Spline-Funktion *u*(*p*,*v*) ist numerisch konsistent zu *p*(*v*,*u*).**
- **Die inverse Spline-Funktion erfordert keine zeitaufwändigen Iterationen.**

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

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

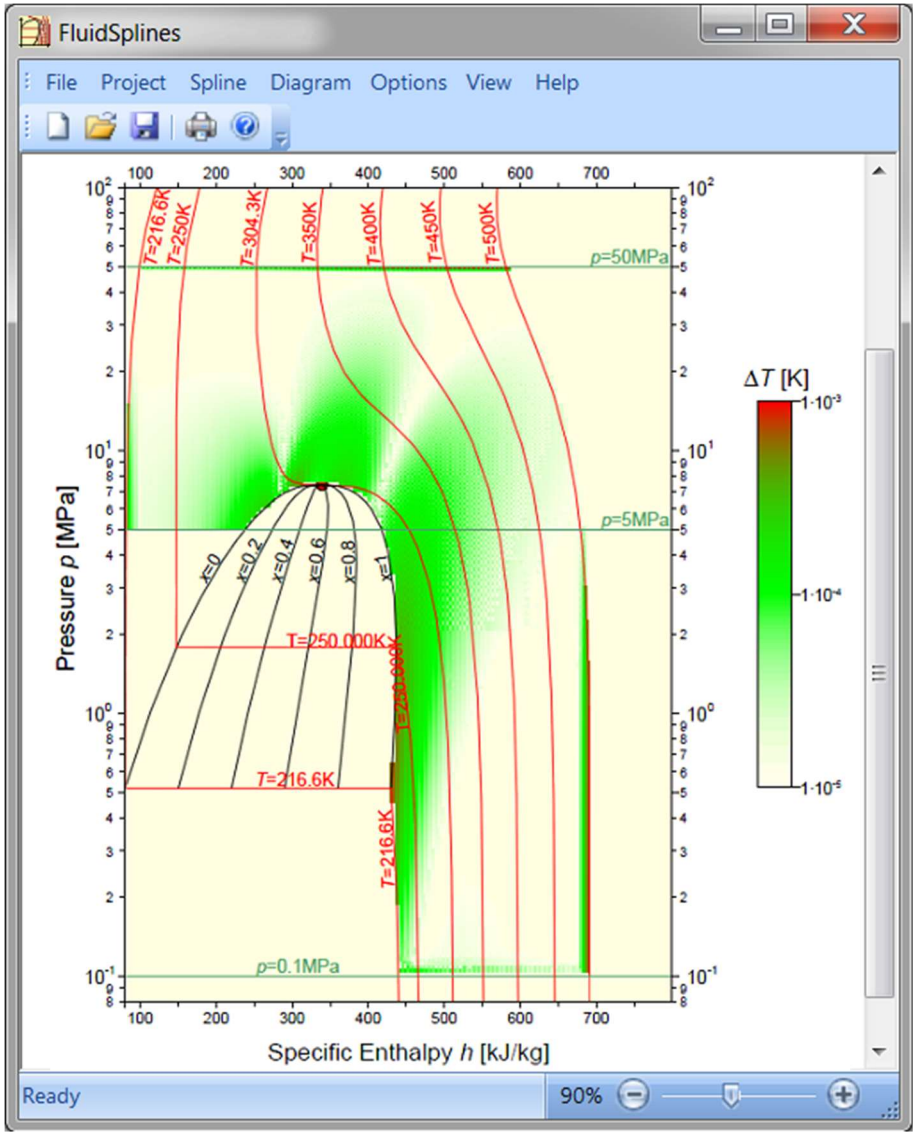
Spline-Funktionen von (*v*,*u*):		**(*p*,*v*):**	**(*u*,*s*):**
Druck	$p^{SPL}(v,u)$	$u^{INV}(p,v)$	
Temperatur	$T^{SPL}(v,u)$	$T^{SPL},s^{SPL},w^{SPL},\eta^{SPL},\lambda^{SPL}(v,\ u^{INV})$	
Spez. Entropie	$s^{SPL}(v,u)$		$v^{INV}(u,s)$
Schallgeschwindigkeit	$w^{SPL}(v,u)$		$p^{SPL},T^{SPL},w^{SPL},\eta^{SPL},\lambda^{SPL}(v^{INV},u)$
Dyn. Viskosität	$\eta^{SPL}(v,u)$		
Wärmeleitfähigkeit	$\lambda^{SPL}(v,u)$		

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

Generierung von SBTL-Funktionen für weitere Stoffe

FluidSplines

Software zur Erzeugung von
Spline-basierten Stoffwertfunktionen



Thermophysikalische Zustandsgrößen:

REFPROP©

Stoffwert-Bibliotheken
(Hochschule Zittau/Görlitz)

Generierung von SBTL-Funktionen für:

- gewünschten Gültigkeitsbereich
- geforderte Genauigkeit

Weitere Funktionen:

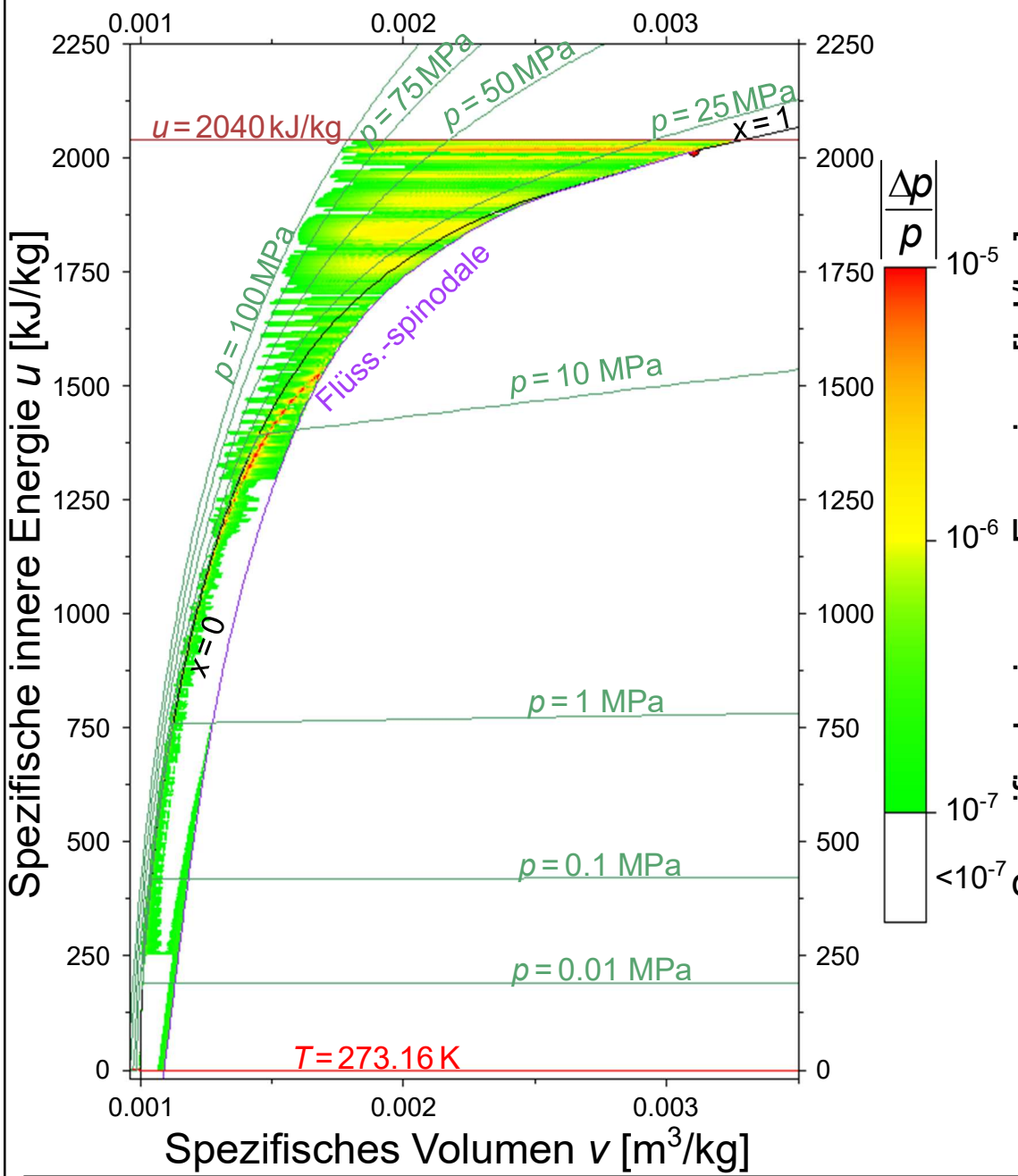
- Generierung inverser Spline-Funktionen
- Genauigkeitsanalyse
- Bestimmung der Rechenzeit

Ausgabe:

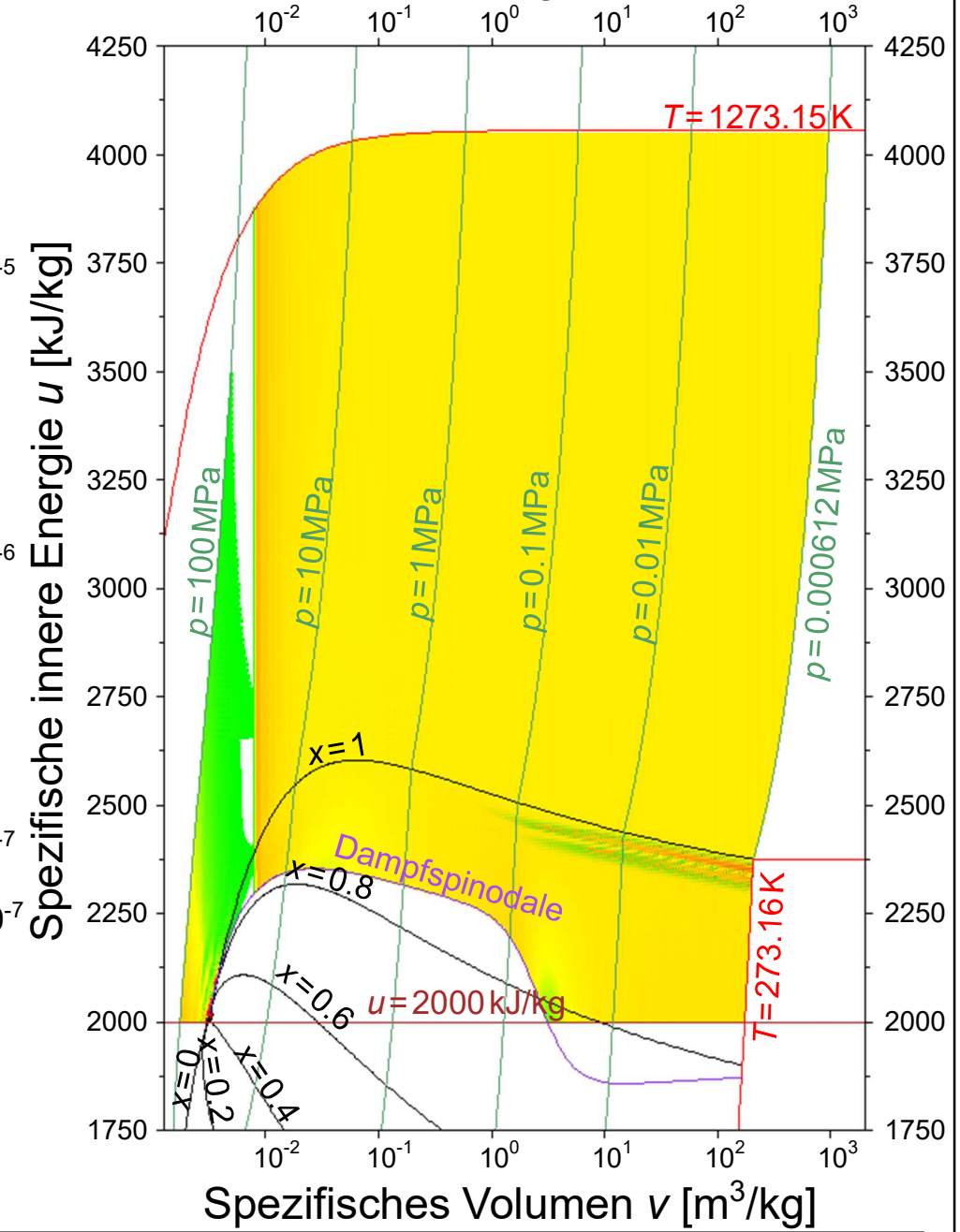
- Rechenzeit-optimierte Quelltexte
- stat./dyn. Bibliotheken
- Dokumentation hinsichtlich Genauigkeit und Rechenzeit

SBTL Funktionen für $p(v,u)$ – Abweichungen von IAPWS-95

→ **Spline-Funktion $p_L(v,u)$:**



→ **Spline-Funktion $p_G(v,u)$:**



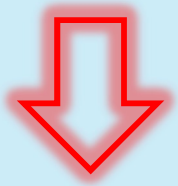
Transformationen:

$\bar{v}$ skaliert zwischen $v(100\text{MPa},u)$ und $v_{\text{SPNDL L}}(u)$

$\bar{v} = \ln(v)$

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)
$p(v,u)$	$p \le 2.5$ MPa	$\lvert\Delta p / p\rvert < 0.1\,\%$	$\lvert\Delta p / p\rvert < 0.001\,\%$
	$p > 2.5$ MPa	$\lvert\Delta p\rvert < 3$ kPa	
$T(v,u)$		$\lvert\Delta T\rvert < 1$ mK	$\lvert\Delta T\rvert < 1$ mK
$s(v,u)$		$\lvert\Delta s\rvert < 10^{-6}$ kJ kg^{-1} K^{-1}	$\lvert\Delta s\rvert < 10^{-6}$ kJ kg^{-1} K^{-1}
$w(v,u)$		$\lvert\Delta w / w\rvert < 0.001\,\%$	$\lvert\Delta w / w\rvert < 0.001\,\%$
$\eta(v,u)$		$\lvert\Delta \eta / \eta\rvert < 0.001\,\%$	$\lvert\Delta \eta / \eta\rvert < 0.001\,\%$



- **Die SBTL Funktionen geben den wissenschaftlichen Standard IAPWS-95 mit sehr hoher Genauigkeit wieder.**

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

	IAPWS-IF97 Region				
SBTL Funktion	**1 (Flüssigkeit)**	**2 (Dampf)**	**3 (krit. Gebiet)**	**4 (Nassdampf)**	**5 (HT)**
***p*(*v*,*u*)**	130 (243[a])	271 (434[a])	161	19.6	470
***T*(*v*,*u*)**	161 (251[a])	250 (410[a])	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
***v*(*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)

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

Prozessor: Intel Xeon – 3,2GHz

Betriebssystem: Windows7 (32 Bit)

Compiler: Intel Composer XE 2011

➢ **SBTL Funktionen sind bis zu 300 (15000) mal schneller!**

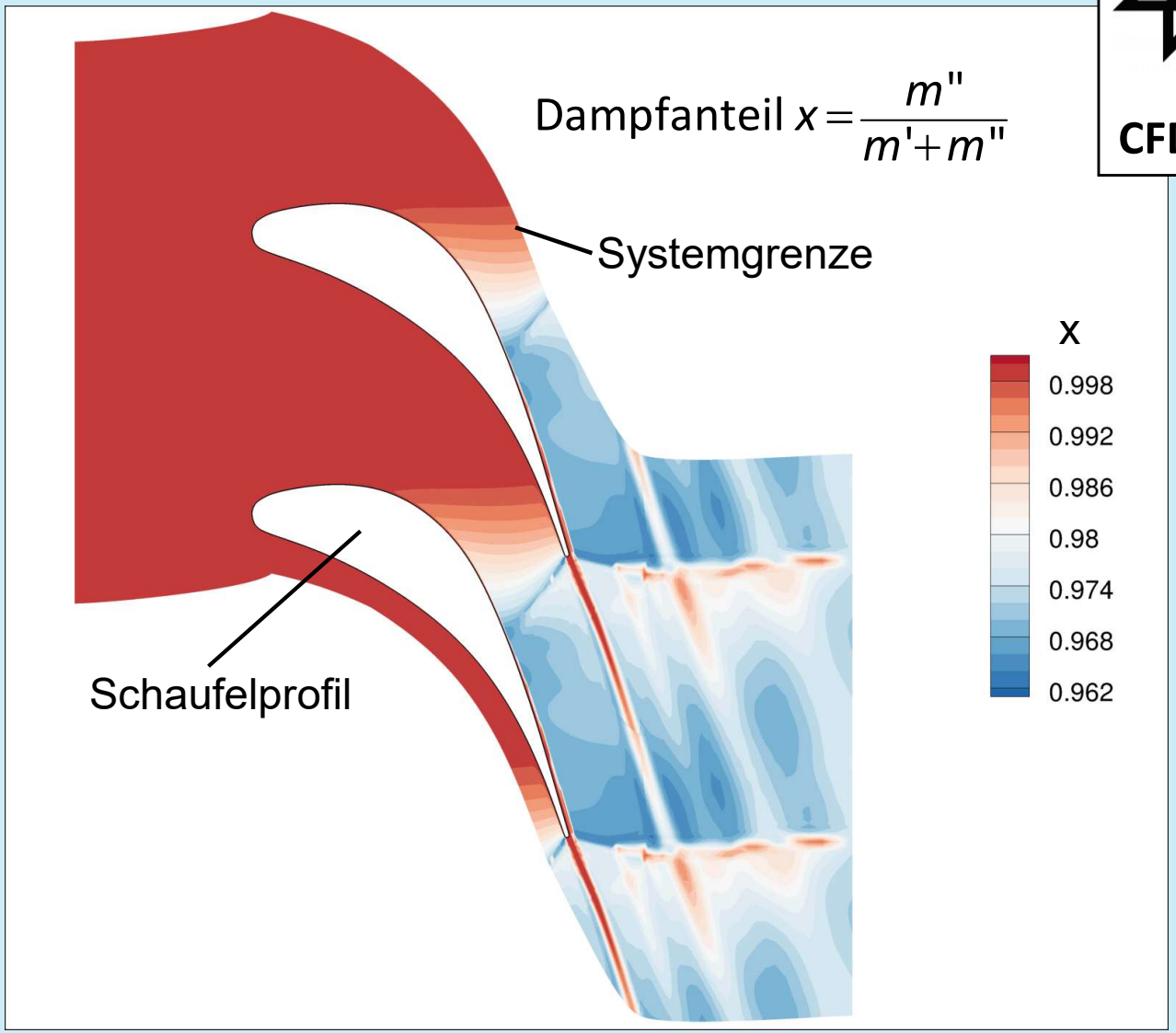
IAPWS Guideline on the Fast Calculation of Steam and Water Properties With the Spline-Based Table Look-Up Method (SBTL)

Inhalt:

- **Grundlagen des Spline-Basierten Table Look-up Verfahrens**
- **SBTL Funktionen auf Grundlage des Industriestandards IAPWS-IF97**
  - SBTL Funktionen von (v,u) mit inversen Funktionen von (p,v) und (u,s)
  - SBTL Funktionen von (p,h) mit inversen Funktionen von (p,T), (p,s) und (h,s)
  - SBTL Funktionen für das Gasgebiet einschließlich des metastabilen Gebiets
- **SBTL Funktionen auf Grundlage des wissenschaftlichen Standards IAPWS-95**
  - SBTL Funktionen von (v,u)
  - SBTL Funktionen von (p,h)
- **Dokumentation der Abweichungen der SBTL Funktionen von den zugrunde liegenden IAPWS Standards**
- **Dokumentation der Rechenzeiten**
- **Dokumentation verschiedener Anwendungen des SBTL Verfahrens in aufwändigen Prozesssimulationen**

- **Annahme als internationale Richtlinie im Juli 2015 (IAPWS Meeting)**

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 (ΔT_s=+7.5 K)

Bedingungen am Austritt :

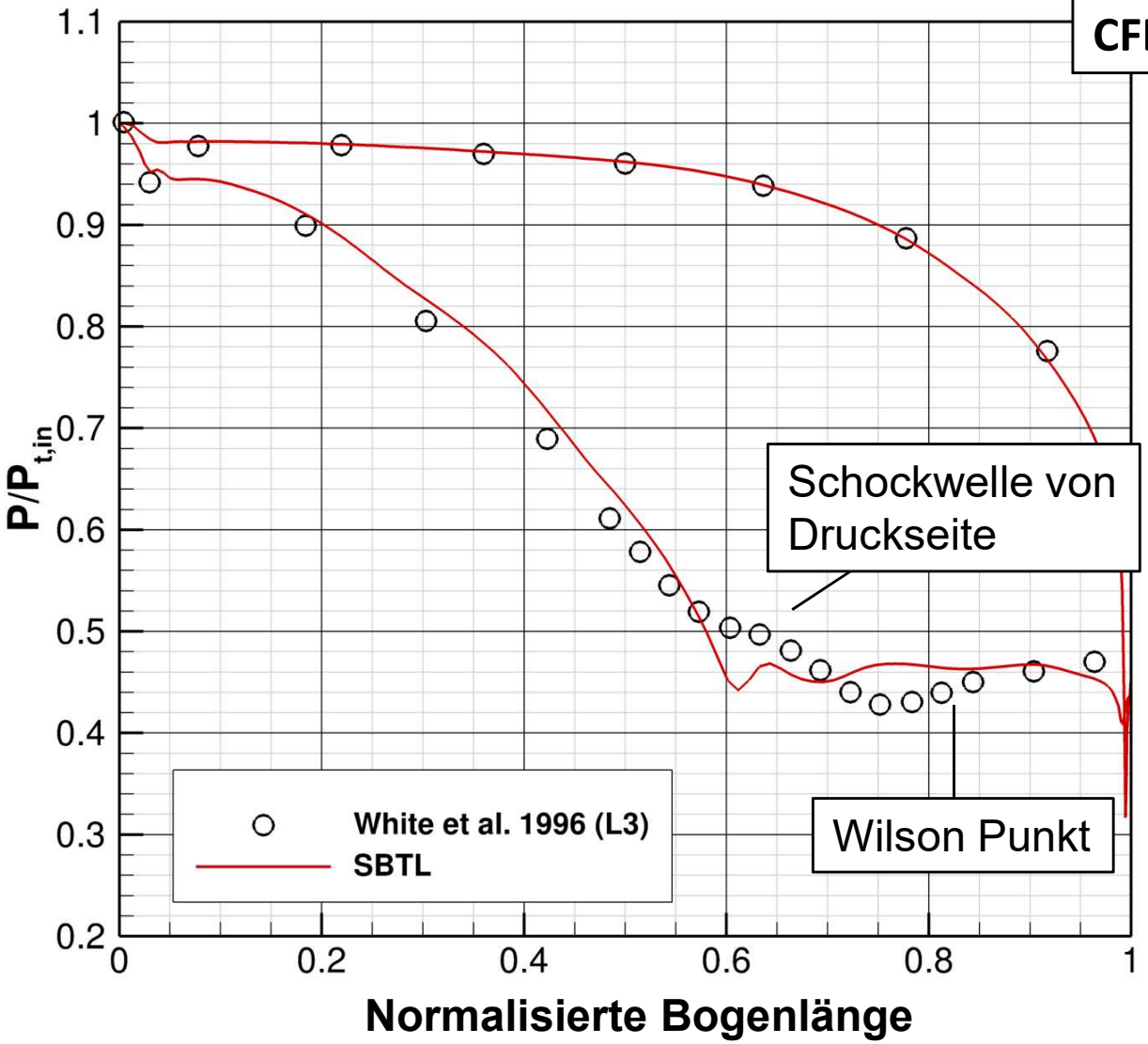
- Statischer Druck: 20.6 kPa

Annahmen:

- Gleichgewichtskondensation (keine Unterkühlung)
- homogene Zweiphasenströmung

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

Drücke entlang des Schaufelprofils:



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 (ΔT_s=+7.5 K)

Bedingungen am Austritt :

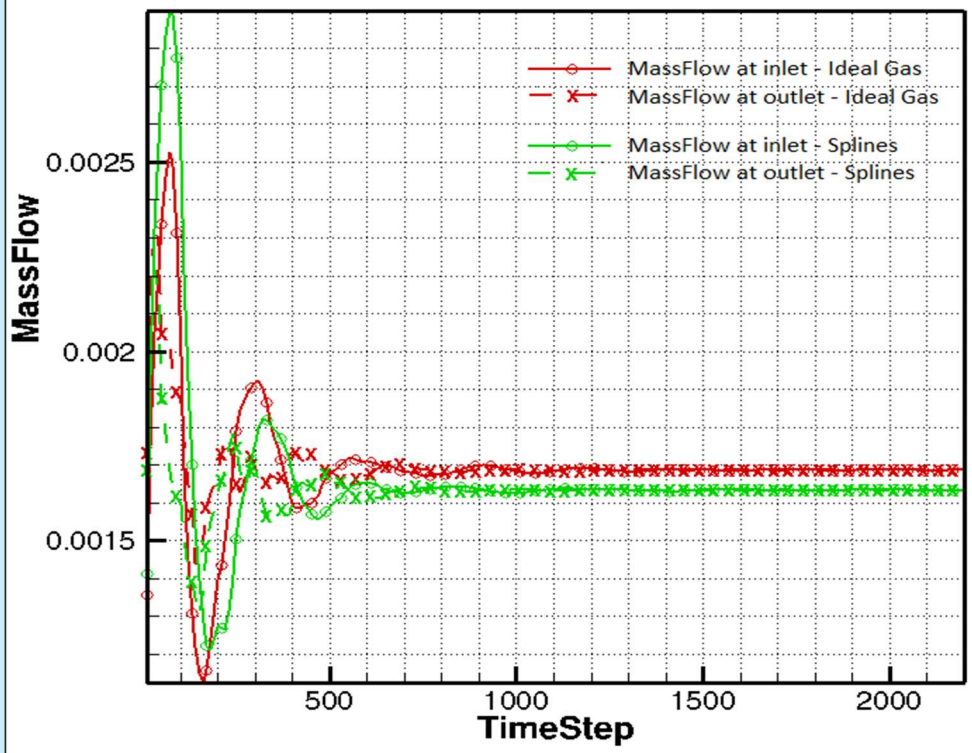
- Statischer Druck: 20.6 kPa

Annahmen:

- Gleichgewichtskondensation (keine Unterkühlung)
- homogene Zweiphasenströmung

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

Konvergenzverhalten:



Courant–Friedrichs–Lewy-Faktor=20

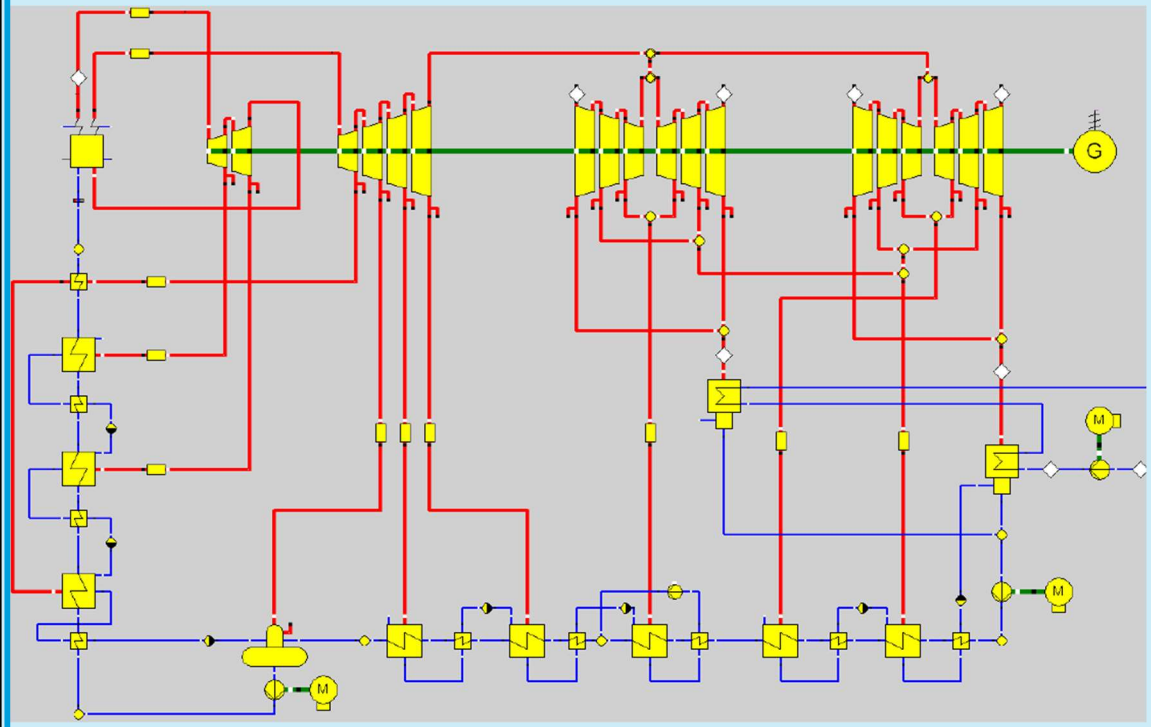
- **Berechnung mit Spline Funktionen:**
  - **hohe Konvergenzgeschwindigkeit durch vollständige numerische Konsistenz**
  - **Konvergenz erreicht nach 1:50min/1000 Schritten**
- **Vergleich mit Idealgas-Modell:**
  - **Konvergenz erreicht nach 1:20min/1000 Schritten**

- **Im Vergleich zur Simulation mit der direkten Verwendung des IAPWS-IF97 Standards werden die Rechenzeiten mit dem SBTL Verfahren um das 10-fache reduziert. Die Differenzen in den Ergebnissen der Simulation sind vernachlässigbar klein.**
- **Im Vergleich zur Simulation mit dem Modell des idealen Gases werden die Rechenzeiten lediglich um das 1.4-fache erhöht.**

(Berechnungsdauer für Simulation instationärer Prozesse: mehrere Tage)

Anwendung des SBTL Verfahrens in Wärmeschaltbild-Berechnungsprogrammen

Implementierung der SBTL Funktionen von (*p*,*h*) und den entsprechenden inversen Funktionen von (*p*,*T*), (*p*,*s*) und (*h*,*s*) auf Grundlage der IAPWS-IF97.



- **EBSILON Professional**
  (STEAG Energy Services)

- **KRAWAL-modular**
  (SIEMENS PG)

⇨ **In EBSILON Professional wird der Anteil der Stoffwert-Berechnung an den Gesamt-rechenzeiten im Vergleich zur direkten Verwendung des IAPWS-IF97 Standards von 25 % auf 8 % reduziert.**

⇨ **In KRAWAL-modular werden die Gesamtrechenzeiten im Vergleich zur direkten Verwendung des IAPWS-IF97 Standards sind halbiert.**

⇨ **Die Differenzen in den Ergebnissen sind vernachlässigbar (< 0.02 %).**

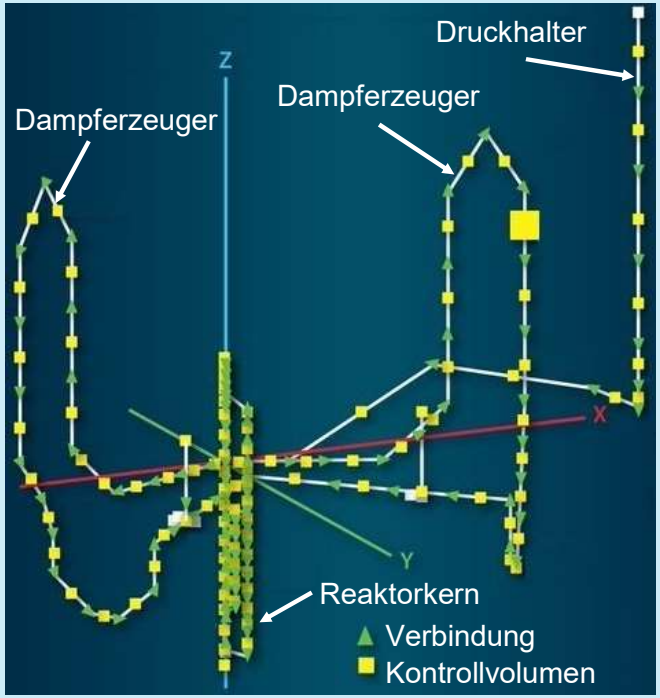
Anwendung des SBTL Verfahrens in der thermohydraulischen Simulation von Kernreaktoren

➢ **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-Gleichungsmodell,
  Zweiphasenströmung mit metastabilen Zuständen



Modell in RELAP

➢ **ATHLET** – Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS)
Analysis of THermal-hydraulics of LEaks and Transients

- SBTL Funktionen von (p,h) basierend auf IAPWS-95

⇨ **BMWi-Projekt – Beginn im Sommer 2017.**

Zusammenfassung

- **Das Spline-Basierten Table Look-up Verfahren (SBTL) – eine Ergänzung zu hochgenauen Stoffwertgleichungen (thermodynamische Zustandsgrößen und Transporteigenschaften):**
  - Stoffwertfunktionen mit hoher Genauigkeit und geringer Rechenzeit
  - Schnelle und numerisch konsistente Umkehrfunktionen
  - Stoffwertfunktionen und erste Ableitungen sind stetig
- **Software FluidSplines für Anwendung des SBTL Verfahrens auf beliebige Stoffe**
- **SBTL Funktionen auf Grundlage der IAPWS-IF97 und der IAPWS-95:**
  - IAPWS Standards werden mit einer Genauigkeit von 10 – 100 ppm wiedergegeben
  - Rechenzeiten werden beträchtlich reduziert
    (SBTL Funktionen von (v,u) sind bis zu 300-mal schneller als IAPWS-IF97)
- **Anwendung des SBTL Verfahrens in aufwändigen Prozesssimulationen:**
  - TRACE: Berücksichtigung des Realstoffverhaltens nur 1.4 langsamer als mit id. Gas
  - KRAWAL: Rechenzeiten gegenüber direkter Anwendung der IAPWS-IF97 halbiert
  - RELAP-7: Berechnung von Zweiphasenströmungen in instationären Prozessen
  - Berechnungsergebnisse gegenüber der direkten Verwendung der zugrundeliegenden Berechnungsstandards unverändert.
- **IAPWS Guideline zum Spline-Basierten Table Look-up Verfahren (SBTL) erarbeitet**

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!