HOCHSCHULE ZITTAU/GÖRLITZ,
FAKULTÄT MASCHINENWESEN,
FACHGEBIET TECHNISCHE THERMODYNAMIK

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN,
FAKULTÄT MASCHINENWESEN,
PROFESSUR FÜR THERMISCHE
ENERGIEMASCHINEN UND -ANLAGEN

DEUTSCHES ZENTRUM FÜR LUFT-
UND RAUMFAHRT,
INSTITUT FÜR ANTRIEBSTECHNIK,
NUMERISCHE METHODEN

Neue IAPWS-Richtlinie zur schnellen Berechnung realer Stoffeigenschaften in numerischen Prozesssimulationen mit dem Spline-Basierten Table Look-up Verfahren (SBTL)

Matthias Kunick, Hans-Joachim Kretzschmar, Francesca di Mare und Uwe Gampe

Motivation & Zielstellungen

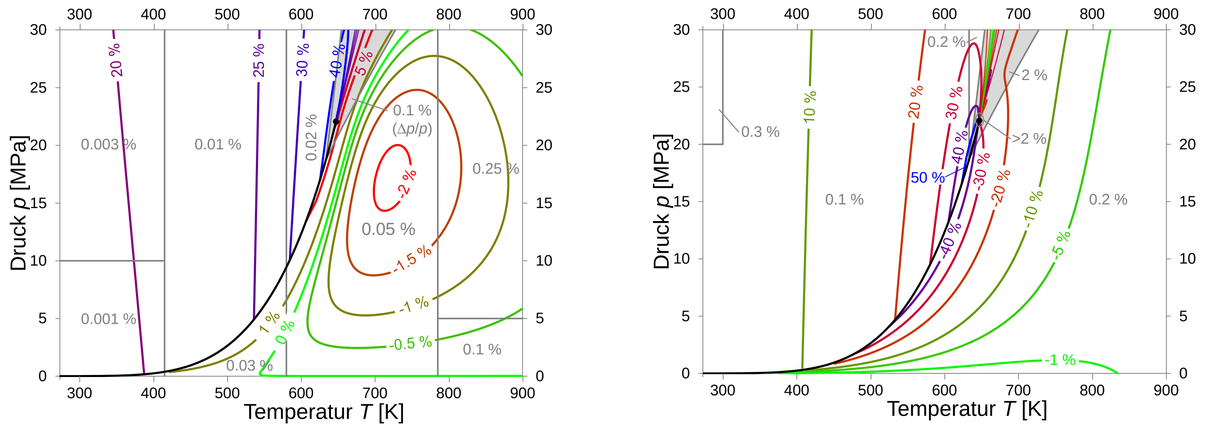
Problemstellung:

- Abweichungen in berechneten Stoffeigenschaften führen zu ungenauen Masse-, Energie-, und Entropiebilanzen. → Stoffwertalgorithmen müssen sehr genau sein.
- Stoffwerte werden extrem häufig berechnet und beanspruchen einen Großteil der Gesamtrechenzeiten. → Stoffwerfunktionen müssen extrem schnell sein.
- Die zur Simulation verwendeten numerischen Methoden erfordern stetige, numerisch konsistente Gleichungen. → Stoffwertfunktionen müssen stetig und konsistent sein.

Reale Stoffeigenschaften in CFD (Beispiel: Wasser und Wasserdampf):

- **Zustandsgleichungen (ZGL):** • Kubische ZGL, z.B. Peng-Robinson ZGL (PR-ZGL)
  • Fundamentalgl., z.B. IAPWS-95 [1] oder IAPWS-IF97 [2]

Genauigkeit: $\Delta v/v$ $\Delta c_p/c_p$



Farbige Konturen: Abweichungen der PR-ZGL von IAPWS-95
Graue Zahlen: Unsicherheiten der IAPWS-95 (Unsicherheiten der IAPWS-IF97 sind etwas höher)

Rechenzeit:

Computing-Time Ratio (*CTR*):

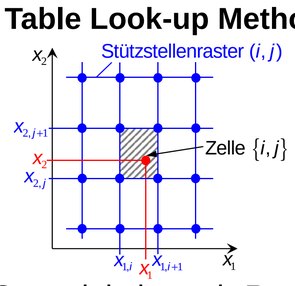
$$CTR = \frac{\text{Rechenzeit der IAPWS-IF97 (-95)}}{\text{Rechenzeit der PR-ZGL}}$$

Phasen- und Bereichstests sind in diesen *CTR*-Werten nicht enthalten, führen jedoch zu einer weiteren Erhöhung der Rechenzeiten!

	IAPWS-IF97 Bereich	
Funktion	**1 (Flüssigkeit)**	**2 (Dampf)**
$p(v,u)$	4.8 (88)	9.0 (114)
$T(v,u)$	4.8 (91)	9.3 (115)
$T(p,h)$	0.41 a) (23)	0.60 a) (43)
$v(p,h)$	0.48 a) (23)	0.91 a) (43)

a) IAPWS-IF97 Rückwärtsgleichung und ein Newton-Schritt

Table Look-up Methoden (Interpolation aus tabellierten Werten):



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

- Diskrete Werte $z_{ij}(x_{1,i},x_{2,j})$ werden an den Stützstellen (i,j) aus der Zustandsgleichung berechnet und in einer Tabelle gespeichert.
- Während der Berechnung wird die Zelle $\{i,j\}$ im Stützstellenraster bestimmt und $z(x_1,x_2)$ aus den tabellierten Werten interpoliert.

Genauigkeit und Rechenzeit sind von der Struktur des Stützstellenrasters und den verwendeten Interpolationsalgorithmen abhängig.

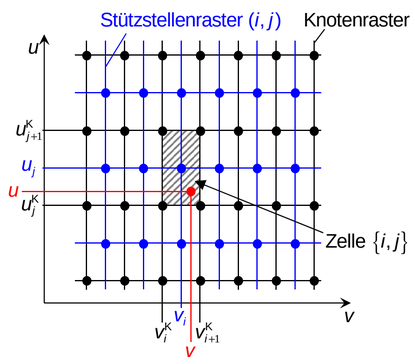
Schwächen häufig verwendeter Verfahren:

- Um das nichtlineare Verhalten der Stoffwertfunktion zu berücksichtigen, werden die Stützstellen meist lokal verdichtet, was zu aufwändigeren Algorithmen zur Zellsuche führt.
- Oft werden die am häufigsten verwendeten Stoffwertfunktionen als inverse Funktionen und nicht aus expliziten Vorwärtsfunktionen berechnet.
- Bilineare Interpolation liefert keine stetigen ersten Ableitungen.
- Bikubische Interpolationsansätze führen zu rechenzeitintensiven inversen Funktionen.

Zielstellungen des Projekts:
Entwicklung eines neuen Table Look-up Verfahrens, dass die genannten Schwächen überwindet und zudem schnelle und genaue Stoffwertfunktionen mit stetigen ersten Ableitungen, sowie schnelle und numerisch konsistente inverse Funktionen liefert.

Das Spline-Basierte Table Look-up Verfahren (SBTL)

Beispiel: *p*(*v*,*u*)



1) Variablentransformationen (z.B. $v \rightarrow \bar{v}$) um:
   - die Genauigkeit zu verbessern (Linearisierung)
   - den Zustandsbereich umzuformen (Rechteck)
2) Definition eines rechtwinkligen, stückweise äquidistanten Stützstellenrasters (schneller Algorithmus zur Zellsuche)
3) Definition der Zellen im Knotenraster
4) Berechnung aller Koeffizienten a_{ijkl} der biquadratischen Spline-Polynome (für stetige erste Ableitungen):

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

Inverse Funktionen, z.B. *u*(*p*,*v*):

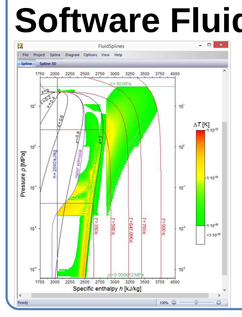
$$u^{\mathrm{INV}}_{\{i,j\}}(p,\bar{v}) = \frac{-B \pm \sqrt{B^2-4AC}}{2A} + u_j$$

$$A = a_{ij13} + \Delta\bar{v}_i\left(a_{ij23} + a_{ij33}\Delta\bar{v}_i\right)$$
$$B = a_{ij12} + \Delta\bar{v}_i\left(a_{ij22} + a_{ij32}\Delta\bar{v}_i\right)$$
$$C = a_{ij11} + \Delta\bar{v}_i\left(a_{ij21} + a_{ij31}\Delta\bar{v}_i\right) - p$$

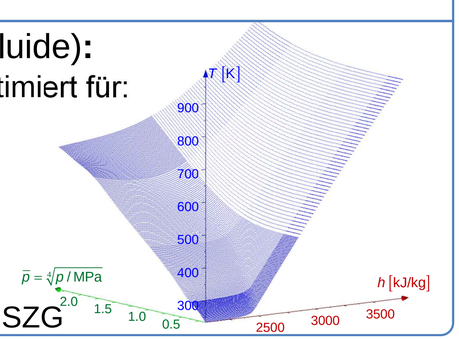
$$\Delta\bar{v}_i = \bar{v}_i\left(\bar{v}-\bar{v}_i\right) \qquad (\pm) = \mathrm{sign}(B)$$

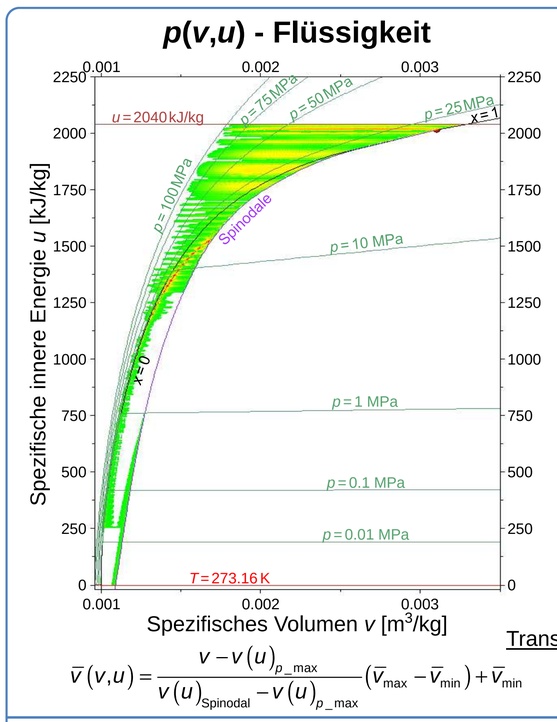
SBTL Funktionen von (*v*,*u*):		Berechnung inverser Funktionen: (*p*,*v*):	(*u*,*s*):
Druck	$p^{\mathrm{SPL}}(v,u)$	$u^{\mathrm{INV}}(p,v)$	
Temperatur	$T^{\mathrm{SPL}}(v,u)$	$T^{\mathrm{SPL}}, s^{\mathrm{SPL}}, w^{\mathrm{SPL}}, \eta^{\mathrm{SPL}}(v, u^{\mathrm{INV}})$	
Spez. Entropie	$s^{\mathrm{SPL}}(v,u)$		$v^{\mathrm{INV}}(u,s)$
Schallgeschw.	$w^{\mathrm{SPL}}(v,u)$		$p^{\mathrm{SPL}}, T^{\mathrm{SPL}}, w^{\mathrm{SPL}}, \eta^{\mathrm{SPL}}(v^{\mathrm{INV}},u)$
Dyn. Viskosität	$\eta^{\mathrm{SPL}}(v,u)$		

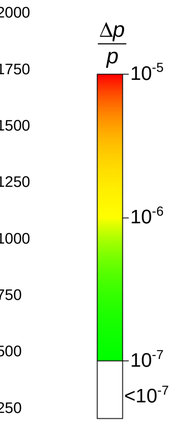
Software FluidSplines (Anwendung für beliebige Fluide)**:**

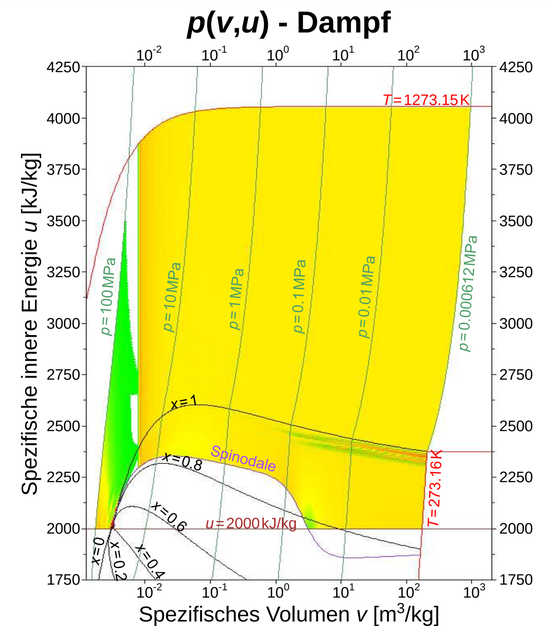


- Generierung von SBTL Funktionen, optimiert für:
  - gewünschten Gültigkeitsbereich
  - benötigte Genauigkeit
  - minimale Rechenzeit
- Zugrundeliegende Stoffeigenschaften berechnet mit: • REFPROP
  • SW-Bibliotheken der HSZG









Transformationen:

$$\bar{v}(v,u) = \frac{v - v(u)_{p_\max}}{v(u)_{\mathrm{Spinodal}} - v(u)_{p_\max}}\left(\bar{v}_{\max} - \bar{v}_{\min}\right) + \bar{v}_{\min}$$

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

Genauigkeit und Rechenzeit:

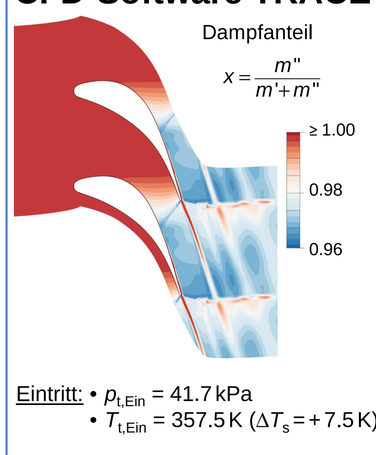
		Max. Abweichung von IAPWS-IF97			
Funktion		**Flüssigkeit**		**Dampf**	
$p(v,u)$	≤ 2.5 MPa	$\lvert\Delta p/p\rvert$	< 0.12 %	$\lvert\Delta p/p\rvert$	< 0.001 %
	> 2.5 MPa	$\lvert\Delta p\rvert$	< 0.6 kPa		
$T(v,u)$		$\lvert\Delta T\rvert$	< 1 mK	$\lvert\Delta T\rvert$	< 1 mK
$s(v,u)$		$\lvert\Delta s\rvert$	< 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 %

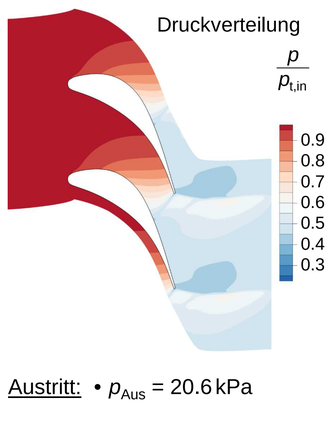
$$CTR = \frac{\text{Rechenzeit der IAPWS-IF97}}{\text{Rechenzeit der SBTL Funktion}}$$

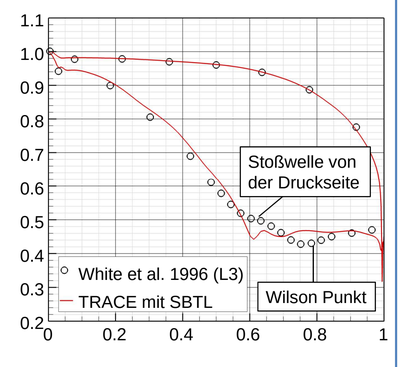
	IAPWS-IF97 Bereich		
Funk.	**1 (Flüss.)**	**2 (Dampf)**	**4 (Nassdampf)**
$p(v,u)$	130	271	19.6
$T(v,u)$	161	250	20.6
$\eta(v,u)$	197	309	-
$u(p,v)$	2.0	6.4	5.6
$v(u,s)$	43.5	66.4	16.2

Anwendung des SBTL Verfahrens

Simulation kondensierenden Dampfes in einer Leitschaufelreihe mit der CFD-Software TRACE [3], entwickelt am DLR:







Eintritt: • $p_{t,Ein}$ = 41.7 kPa
• $T_{t,Ein}$ = 357.5 K (ΔT_s = + 7.5 K)

Austritt: • p_{Aus} = 20.6 kPa

Annahmen: • Gleichgewichtskondensation (keine Unterkühlung)
• homogene Zweiphasenströmung

Ergebnisse:

- Die Ergebnisse von Prozesssimulationen mit dem SBTL Verfahren sind praktisch identisch zur direkten Anwendung des IAPWS-IF97 Standards.
- CFD-Simulationen unter Berücksichtigung des Realstoffverhaltens sind mit dem SBTL Verfahren im Vergleich zur Anwendung des IAPWS-IF97 Standards 10-mal schneller.
- Im Vergleich zur Anwendung des Ideal-Gas Modells steigen die Rechenzeiten lediglich auf das 1.4 fache.

Weitere Anwendungen (Auswahl):

- **RELAP-7 (Sicherheitsanalyse von Kernenergiesystemen, entwickelt am Idaho National Laboratory (INL)):**
  → vereinfachte Zustandsgleichungen wurden durch schnelle und genaue SBTL Funktionen ersetzt; angewendet in einem neuen Modell für die Zweiphasenströmung
- **KRAWAL (Wärmeschaltbild-Berechnungsprogramm zur Kraftwerksauslegung, entwickelt bei SIEMENS PG):**
  → Halbierung der Gesamtrechenzeiten in Bezug auf Berechnungen mit direkter Anwendung des IAPWS-IF97 Standards

Schlussfolgerungen und Ausblick

Das neu entwickelte SBTL Verfahren [4,5,6]:

- ermöglicht die Berücksichtigung des Realstoffverhaltens in CFD- und anderen rechnerisch aufwändigen Prozesssimulationen mit hoher Genauigkeit und geringen Rechenzeiten.
- kann auf beliebige Stoffe angewendet werden (z.B. mit der Software FluidSplines).
- wird bereits erfolgreich in der numerischen Prozesssimulation eingesetzt.
- wird derzeit auf Gemische erweitert, z.B. für feuchte Luft und feuchte Verbrennungsgase.

Ein Kondensationsmodell wird zur Berücksichtigung der Unterkühlung in TRACE integriert.

Literatur/Veröffentlichungen

[1] IAPWS, *Revised Release on the IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use* (2014), verfügbar unter http://www.iapws.org.

[2] IAPWS, *Revised Release on the IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam* (2007), verfügbar unter http://www.iapws.org.

[3] Kunick, M., Kretzschmar, H.-J., di Mare, F., and Gampe, U., CFD Analysis of Steam Turbines with the IAPWS Standard on the Spline-Based Table Look-Up Method (SBTL) for the Fast Calculation of Real Fluid Properties, *ASME Turbo Expo 2015: Turbine Technical Conference and Exposition, Vol. **8**: Microturbines, Turbochargers and Small Turbomachines; Steam Turbines*, ISBN: 978-0-7918-5679-6 (2015).

[4] IAPWS, *Guideline on the Fast Calculation of Steam and Water Properties with the Spline-Based Table Look-Up Method* (SBTL), verfügbar unter http://www.iapws.org

[5] Kunick, M., Kretzschmar, H.-J., Gampe, U., di Mare, F., Hrubý, J., Duška, M., Vinš, V., Singh, A., Miyagawa, K., Weber, I., Pawellek, R., Novi, A., Blangetti, F., Friend, D.G., and Harvey, A.H., Fast Calculation of Steam and Water Properties with the Spline-Based Table Look-Up Method (SBTL), *J. Eng. Gas Turbines & Power*, in Vorbereitung.

[6] Kunick, M., Fast Calculation of Thermophysical Properties in Extensive Process Simulations with the Spline-Based Table Look-Up Method (STBL), *VDI Fortschritt-Berichte*, in Vorbereitung.