



M. Kunick, H.-J. Kretschmar

Zittau/Goerlitz University of Applied Sciences, Department of Technical Thermodynamics,  
Zittau, Germany



U. Gampe

Technical University of Dresden, Institute for Power Engineering, Chair of Thermal Power Machinery and Plants,  
Dresden, Germany

## Schnelle und flexible Stoffwertberechnung mit Spline-Interpolation für die Modellierung und Optimierung fortschrittlicher Energieumwandlungsprozesse

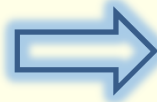
### **Inhalt:**

- **Motivation und Ziele des Projekts**
- **Grundlagen der Stoffwert-Berechnung mit Spline-Interpolation**
- **Stoffwertberechnung für Wasser und Wasserdampf in CFD-Simulationen**
- **Spline-basierte Stoffwertfunktionen für CO<sub>2</sub>**
- **FluidSplines – ein Tool zur Erstellung von Spline-basierten Stoffwertfunktionen**
- **Zusammenfassung und Ausblick**

# Motivation und Ziele des Projekts

## Motivation:

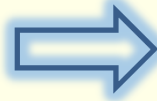
- **Neue Technologien zur Stromerzeugung erfordern aufwändigere Prozess-Simulationen**
  - zeitliche Schwankungen bei der Stromerzeugung aus Wind- u. Solarenergie, instationäre Prozessführung konventioneller Kraftwerke wird häufiger notwendig



### Simulation instationärer Prozesse

- sehr viele Aufrufe von Stoffwertfunktionen

- **Auslegung und Optimierung von energietechn. Komponenten und Anlagen**



### Strömungssimulationen (CFD) für energietechn. Anlagen

- extrem viele Aufrufe von Stoffwertfunktionen
- hohe numerische Konsistenz von Vorwärts- u. Rückwärtsfkt.

- **Einsatz von Stoffgemischen als Arbeitsfluide in ORC- o. Kalina-Prozessen und weiteren**

- Geothermie
- Solarenergie
- Abwärme-Nutzung

### Berechnung der thermodyn. Eigenschaften von Stoffgemischen



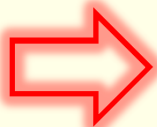
## Anforderungen an die Stoffwertberechnung:

- **Hohe Genauigkeit (vergleichbar mit der Berechnung aus Fundamentalgleichungen)**
- **Minimale Rechenzeit (>100 mal schneller als die Berechnung aus Fundamentalgl.)**
- **Stetige Abbildung der thermodyn. Zustandsgrößen und deren Ableitungen**
- **Vollständige numerische Konsistenz zwischen Vorwärts- u. Rückwärtsfunktionen**

# Motivation und Ziele des Projekts

## Vergleich verfügbarer Berechnungsansätze:

Anforderung	Wissenschaftliche Fundamentalgleichungen	Rückwärtsgleichungen	Table look-up Verfahren
<b>Genauigkeit</b>	hoch	ausreichend für industriellen Gebrauch	wird mit der Datendichte der Interpolationstabellen gesteuert
<b>Rechenzeit</b>	hoch: <ul style="list-style-type: none"> <li>• viele transzendente Terme enthalten</li> <li>• Rückwärtsfunktionen werden iterativ berechnet</li> </ul>	gering: <ul style="list-style-type: none"> <li>• nur ganzzahlige Exponenten (Horner-Schema anwendbar)</li> <li>• Rückwärtsfunktionen werden ohne Iterationen berechnet</li> </ul>	sehr gering: <ul style="list-style-type: none"> <li>• vergleichsweise kleiner mathematischer Berechnungsaufwand</li> <li>• backward functions calculated without iterations</li> </ul>
<b>Numerische Konsistenz</b>	von der Anzahl der Iterationen abhängig	begrenzt	vollständige numerische Konsistenz ist möglich
<b>Verfügbarkeit</b>	für die meisten Arbeitsfluide der Energietechnik verfügbar	nur für Wasser und Wasserdampf verfügbar (sehr aufwendig zu erstellen)	Interpolationstabellen müssen im Voraus erstellt werden



**Ein Spline-basiertes table look-up Verfahren kann die Anforderungen hinsichtlich Genauigkeit, Stetigkeit, Rechenzeit und numerischer Konsistenz erfüllen!**

# Motivation und Ziele des Projekts

## Ziele:

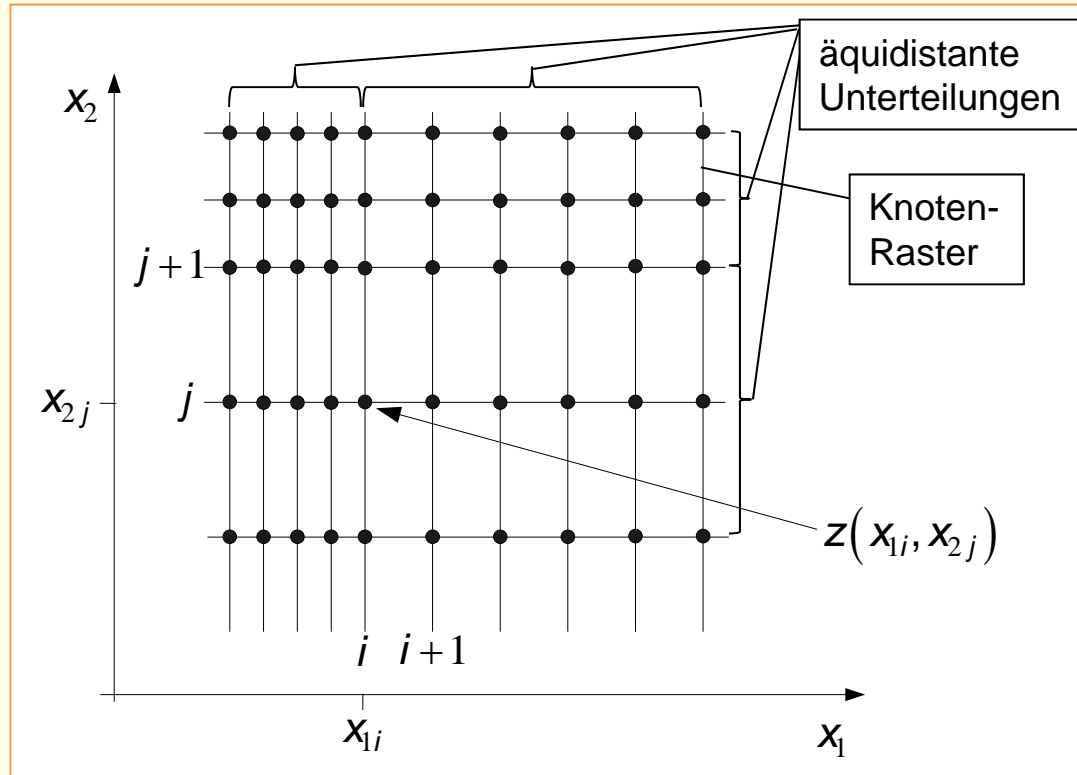
- Entwicklung eines table look-up Verfahrens mit Spline-Interpolation
  - flexibel einsetzbar für die Arbeitsfluide der Energietechnik
  - möglichst geringe Rechenzeiten
  - stetige Abbildung der thermodyn. Zustandsgrößen
  - steuerbare Genauigkeit
  - steuerbarer Gültigkeitsbereich
  - vollständige Konsistenz zwischen Vorwärts- und Rückwärtsfunktionen
- Entwicklung eines Softwarewerkzeugs zur Erstellung von Spline-basierten Stoffwertfunktionen
- Erarbeitung einer IAPWS-Guideline als internationaler Standard zur Berechnung der Eigenschaften von Wasser und Wasserdampf

## Projektpartner:

- International Association for the Properties of Water and Steam (IAPWS)
- Siemens Energy
- STEAG Energy Services
- Vattenfall Europe PowerConsult GmbH (VPC)
- TU Dresden
- **Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V.**

# 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

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

- Optimierung des Stützdatenrasters

Bereitstellung der Spline-Funktion für die Stoffwertberechnung:

- Speichern des Knotenrasters und der zugehörigen Spline-Koeffizienten
- Generierung rechenzeitoptimierter Quelltexte für die Stoffwertfunktion  $z^{\text{SPL}}(x_1, x_2)$

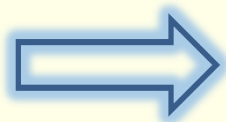


Anwendung in CFD und anderen aufwändigen numerischen Simulationen

# Grundlagen der Stoffwert-Berechnung mit Spline-Interpolation

Berechnung von inversen Spline-Funktionen (Beispiel: bi-quad. Polynom):

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



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

wobei  $A = a_{ij31} + \Delta x_{2j} (a_{ij32} + a_{ij33} \Delta x_{2j})$

$$B = a_{ij21} + \Delta x_{2j} (a_{ij22} + a_{ij23} \Delta x_{2j})$$

$$C = a_{ij11} + \Delta x_{2j} (a_{ij12} + a_{ij13} \Delta x_{2j}) - z$$

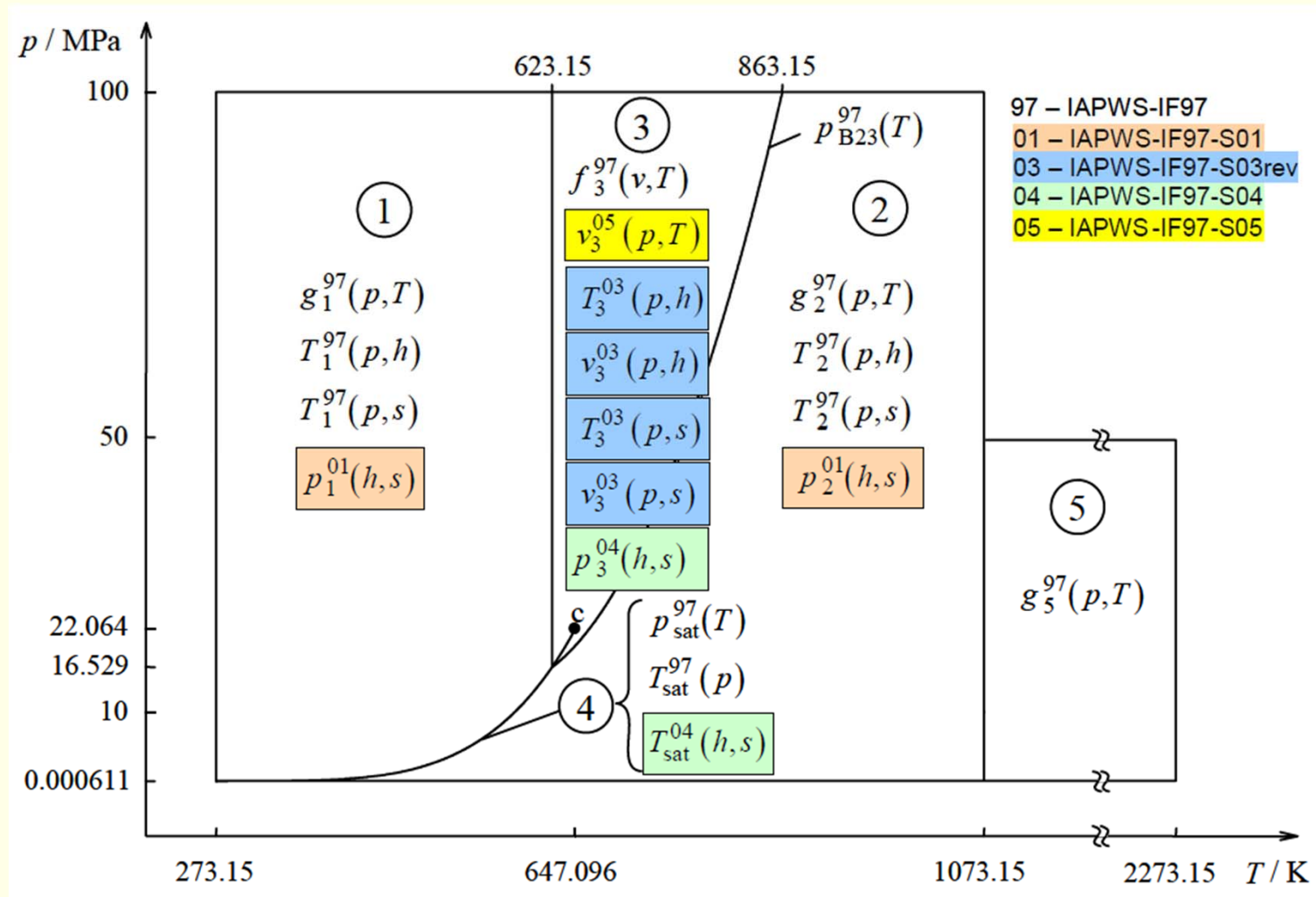
und  $\Delta x_{2j} = (x_2 - x_{2j})$



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

# Stoffwertberechnung für Wasser und Wasserdampf in CFD-Simulationen

## Struktur der IAPWS-IF97:



# Stoffwertberechnung für Wasser und Wasserdampf in CFD-Simulationen

## Problem:

- Berechnung ausgehend von innerer Energie  $u$  und spezifischen Volumen  $v$
- IAPWS-IF97:
  - keine Rückwärtsgleichungen in expliziter Form  $z = f(u,v)$  verfügbar
  - im Einphasengebiet erfolgt die Berechnung ausgehend von  $(p,T)$



zweidimensionale Iteration für  $z = f(u,v)$  notwendig

## Lösungsmöglichkeiten:

- Bereitstellung einer Fundamentalgleichung  $s(u,v)$ 
  - hoher Aufwand
  - Rechenzeiten mit Gleichungen der IF97 vergleichbar
- Entwicklung von Rückwärtsgleichungen für  $z = f(u,v)$ 
  - hoher Aufwand
  - Rechenzeiten mit Rückwärtsgleichungen der IF97 vergleichbar
  - beschränkte numerische Konsistenz zwischen Vor- u. Rückwärtsgl.
  - Unstetigkeiten an Unterbereichsgrenzen
- Anwendung der Stoffwertberechnung mit Spline-Interpolation
  - kürzeste Rechenzeiten
  - vollständige numerische Konsistenz zwischen Vor- u. Rückwärtsgl.



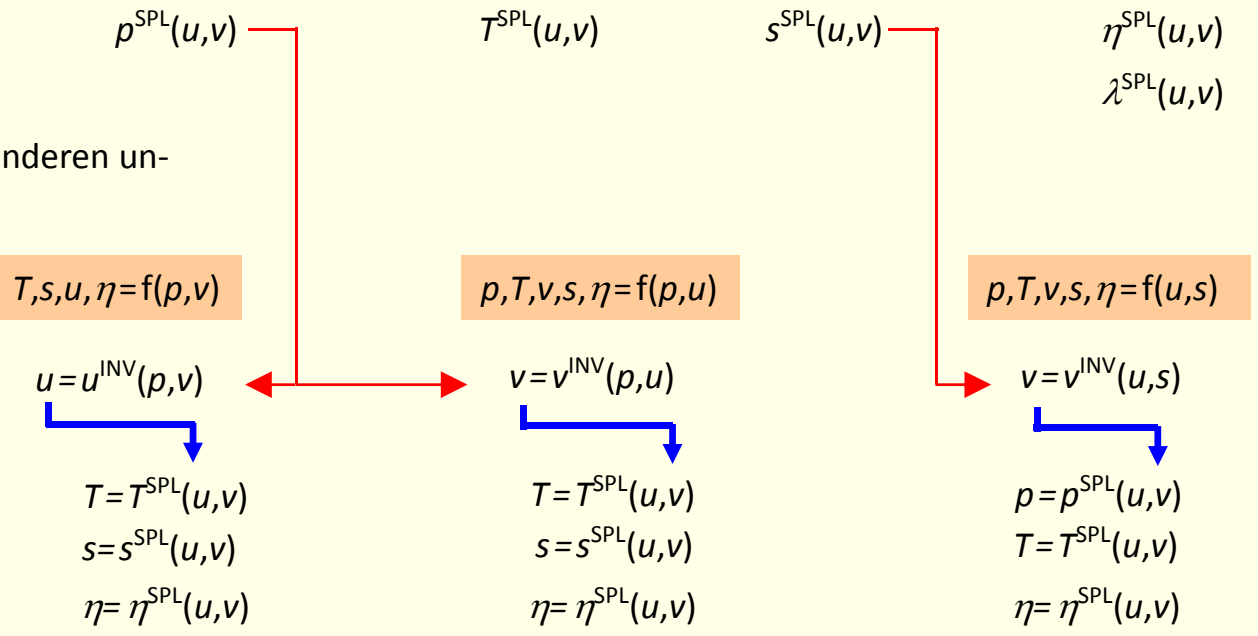
# Stoffwertberechnung für Wasser und Wasserdampf in CFD-Simulationen

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

→ Spline Funktionen ausgehend von  $u$  und  $v$ :

→ Berechnung ausgehend von anderen unabhängigen Variablen:

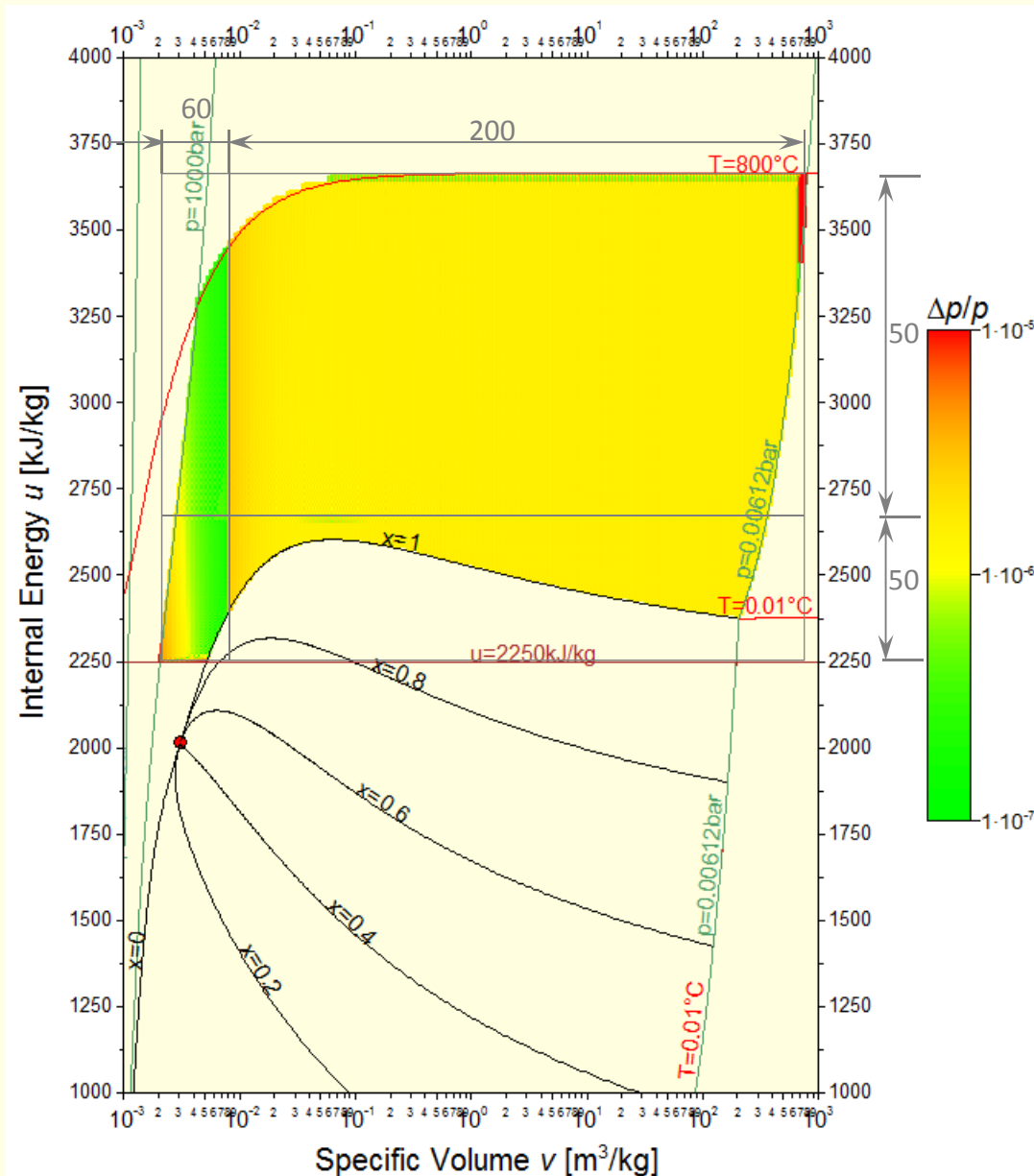
→ Inverse Spline Funktionen:



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

# Stoffwertberechnung für Wasser und Wasserdampf in CFD-Simulationen

→ Spline-Funktion  $p^{\text{SPL}}(u, v)$  basierend auf IAPWS-IF97:

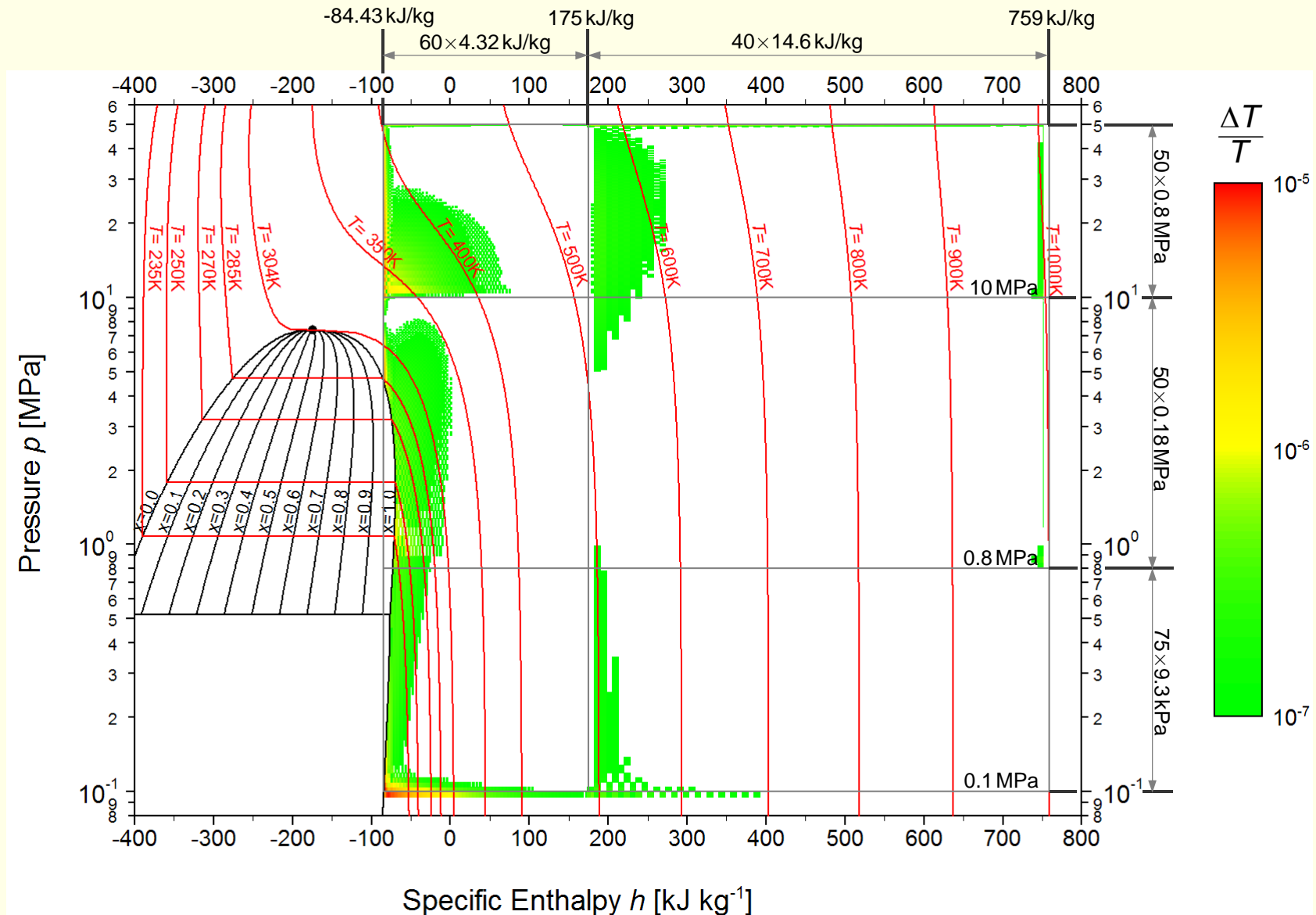


## Vorteile der Spline-Funktion:

- hohe Genauigkeit:  
 $\Delta p/p < 10^{-5}$
- 25 mal schneller als Iteration aus  $u(p, T)$  und  $v(p, T)$  der IAPWS-IF97
- stetige Abbildung der Funktion und deren ersten Ableitungen
- vollständige numerische Konsistenz zu Umkehrfunktionen kann erreicht werden

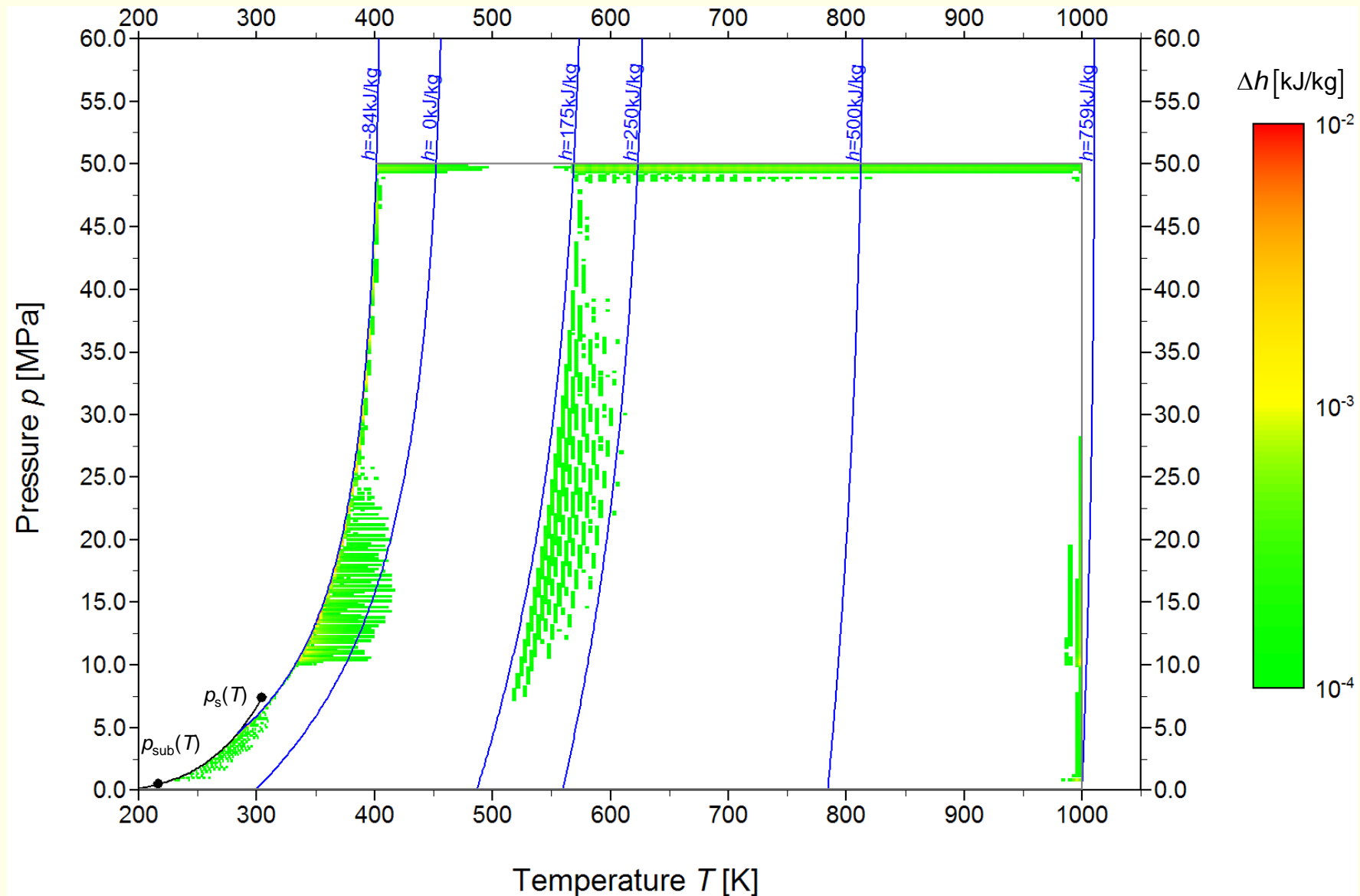
# Spline-basierte Stoffwertfunktionen für CO<sub>2</sub>

→ Relative Abweichung von  $T^{\text{SPL}}(p,h)$  im Vergleich zur wiss. Fundamentalgl. von Span, R. and Wagner, W. (1996)):



# Spline-basierte Stoffwertfunktionen für CO<sub>2</sub>

→ Absolute Abweichung von  $h^{\text{NV}}(p, T)$  im Vergleich zur wiss. Fundamentalgl. von Span, R. and Wagner, W. (1996):



# Spline-basierte Stoffwertfunktionen für CO<sub>2</sub>

## Rechenzeiten im Vergleich:

→ Vergleichsalgorithmen:

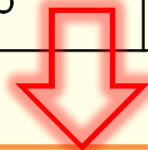
- Wissenschaftliche Fundamentalgl. von Span, R. and Wagner, W. (1996)
  - Fundamentalgl. für ind. Anwendung von Span, R. and Wagner, W. (2003)
- } REFPROP®

→ Test-Umgebung: Pentium Xeon 3.2 GHz PC with Microsoft Windows XP®

## Computing Time Ratio (CTR)

$$CTR = \frac{\text{Computing time of EOS}}{\text{Computing time of spline function}}$$

	Spline Function		
	$T^{\text{SPL}}(p, h)$	$h^{\text{INV}}(p, T)$	$p^{\text{INV}}(h, s)$
$CTR^{1996}$	820	286	1250
$CTR^{2003}$	225	77	312

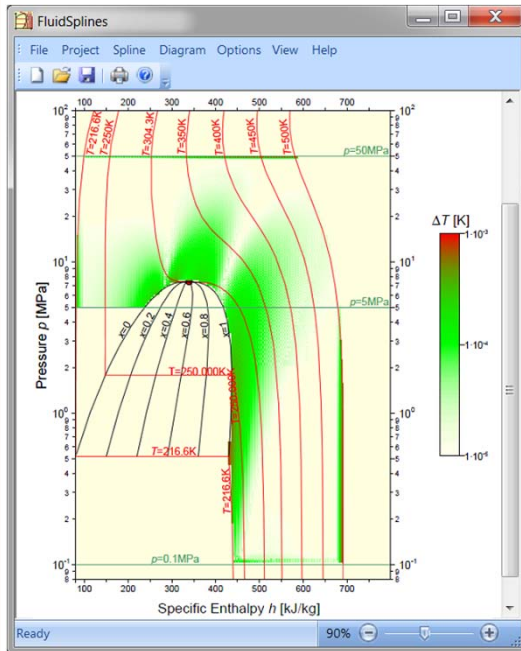


Spline-basierte Table look-up Methoden können zur genauen Berechnung von Zustandsgrößen bei gleichzeitig sehr geringen Rechenzeiten eingesetzt werden.

# FluidSplines – ein Tool zur Erstellung von Spline-basierten Stoffwertfunktionen

## FluidSplines

Software zur Erzeugung von Stoffwert-Bibliotheken mit Spline-Interpolation



### Erzeugung von Spline-Funktionen ausgehend von:

- Beschreibung des Gültigkeitsbereichs
- geforderte Genauigkeit

### Weitere Funktionen:

- Erzeugung inverser Spline-Funktionen
- Genauigkeitsanalyse
- Bestimmung d.Rechenzeit

Thermodynamische Stoffdaten:  
(Datenbasis)

REFPROP<sup>®</sup>

Stoffwertbibliotheken  
der HS Zittau/Görlitz

### Ausgabe:

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

### Einsatz der Stoffwertberechnung mit Spline-Interpolation:

- Simulation kraftwerkstechnischer Prozesse in Wärmeschaltbild-Berechnungsprogrammen
- Numerische Strömungssimulation (CFD)
- Berechnung instationärer Prozesse
- weitere Anwendungen

## Zusammenfassung und Ausblick

### Zusammenfassung:

- Spline-basierte Table Look-up Methoden sind zur Berechnung thermodyn. Zustandsgrößen geeignet
- Hohe Genauigkeit bei gleichzeitig geringer Rechenzeit (CRT=100...>1000)
- Vollständig numerisch konsistente Vorwärts- u. Rückwärtsfunktionen möglich
- FluidSplines als flexibles Softwarewerkzeug zur Spline-Interpolation in der Entwicklung
- Extreme Anforderungen der Berechnung instationärer Prozesse und der numerische Strömungssimulation können erfüllt werden

### Ausblick:

- Weiterentwicklung der Spline-Algorithmen
- Weiterentwicklung von FluidSplines
- Testrechnungen in WSB-Programmen (EBSILON)
- Testrechnungen in CFD-Programmen (TRACE, entwickelt vom DLR)
- Erarbeitung einer IAPWS-Guideline (internationaler Standard)

**Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!**