



M. Kunick, H.-J. Kretzschmar, U. Gampe

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

Projektpartner:

- Deutsches Zentrum für Luft- u. Raumfahrt e.V.
- International Association for the Properties of Water and Steam (IAWPS)
- STEAG Energy Services, Siemens Energy, Vattenfall VPC

Inhalt:

- Motivation, Problemstellung und Lösungsansatz
- Grundlagen der Stoffwert-Berechnung mit Spline-Interpolation
- Stoffwertberechnung für Wasser und Wasserdampf in CFD-Simulationen
- FluidSplines – ein Tool zur Erstellung von Spline-basierten Stoffwertfunktionen
- Zusammenfassung und Ausblick

Görlitz, 19. April 2012

Motivation

Die Entwicklung neuer Technologien zur Stromerzeugung erfordert aufwändigere Prozess-Berechnungen:

- Integration von Wind- u. Solaranlagen erfordert flexiblere Regelung konventioneller Kraftwerke

Simulation instationärer Prozesse

- Auslegung und Optimierung von energietechnischen Komponenten und Anlagen

Numerischen Strömungssimulation (CFD)



Besondere Anforderungen an die Berechnung der thermodynamischen Zustandsgrößen:

- extrem viele Aufrufe von Stoffwertfunktionen – hohe Rechenzeiten
- hohe numerische Konsistenz von Vorwärts- u. Rückwärtsfunktionen – Konvergenz

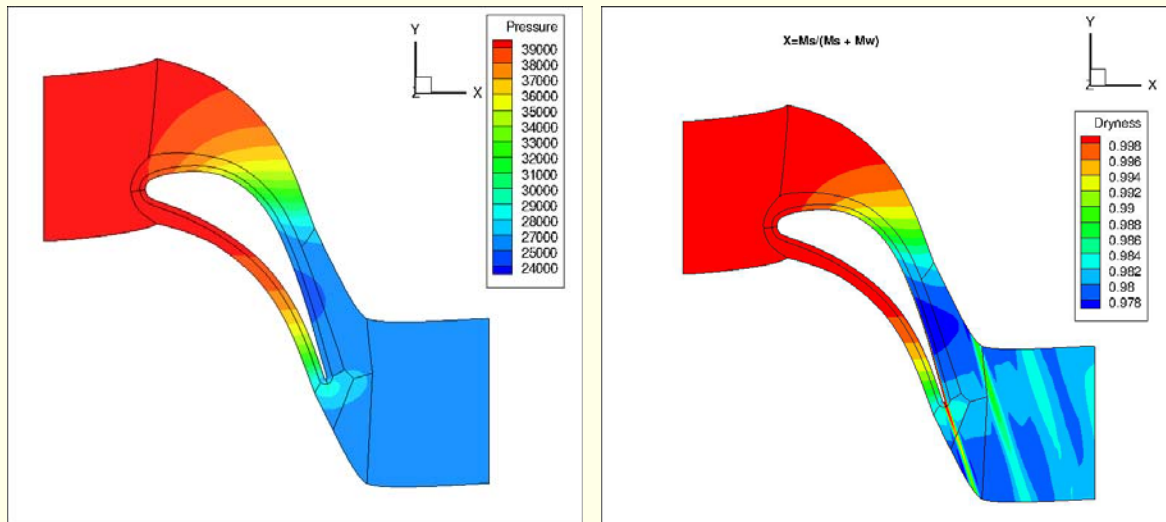
$$\rho_{\text{ber}} = f(p_{\text{geg}}, T_{\text{geg}}) \quad p_{\text{ber}} = f(\rho_{\text{ber}}, T_{\text{geg}}) = p_{\text{geg}}$$

Vereinfachung mit Modell des idealen Gases: Berechnungsfehler je nach Zustandsbereich

Für genauere Simulationen muss das reale Stoffverhalten berücksichtigt werden, allerdings ist die Berechnung mit den gegenwärtig verfügbaren Algorithmen zu aufwändig.

Motivation

Einfaches Beispiel einer CFD-Berechnung an einer Leitschaufel in einer Dampfturbine:



- Berücksichtigung des realen Stoffverhaltens nach IAPWS-IF97 (Industriestandard)
- Kondensation des Wasserdampfes wird berechnet
- 14040 Zellen
- 8 CPUs – Rechenzeit: 25min/ 2200 Schritte
- Rechenzeitbedarf: 19 mal höher als Berechnung mit Idealgas-Modell

**Praktische Berechnungen, z. B. Stufengruppen (3D),
benötigen selbst mit dem Idealgasmodell mehrere Tage.**

Problemstellung und Lösungsansatz

Problemstellung:

- CFD-Berechnung ausgehend von innerer Energie u und spezifischem Volumen v
- Reales Stoffverhalten wird mit Fundamentalgleichungen in Abhängigkeit von (p, T) oder (T, v) beschrieben – Iterationen notwendig
- Fundamentalgleichungen mathematisch aufwändig (viele transzendente Terme)
- Anforderungen an neue Stoffwert-Berechnungsalgorithmen:
 - 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
 - Höchstmögliche numerische Konsistenz zwischen Vorwärts- u. Rückwärtsfunktionen



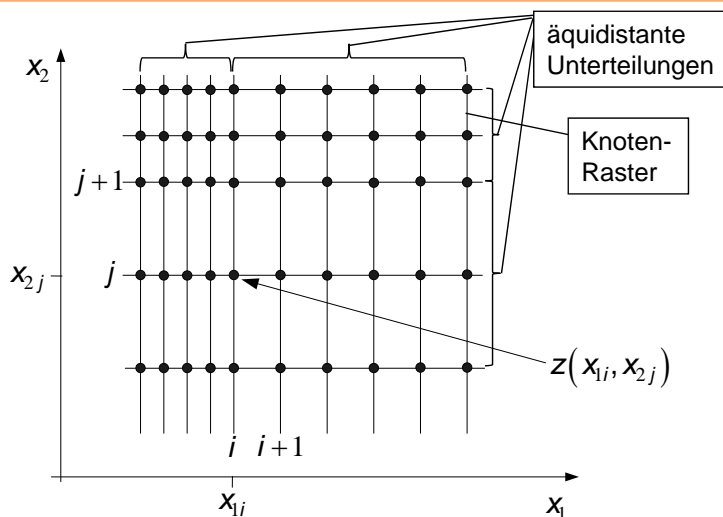
Lösungsansatz: **Stoffwertberechnung mit Spline-Interpolation**

Vorteile:

- hohe Genauigkeit
- kürzeste Rechenzeiten
- vollständige numerische Konsistenz zwischen Vor- u. Rückwärtsfunktionen

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 $z^{\text{SPL}}(x_1, x_2)$

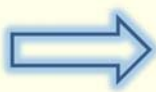


Anwendung in CFD und anderen aufwändigen numerischen Simulationen

Grundlagen der Stoffwert-Berechnung mit Spline-Interpolation

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

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



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

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

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

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

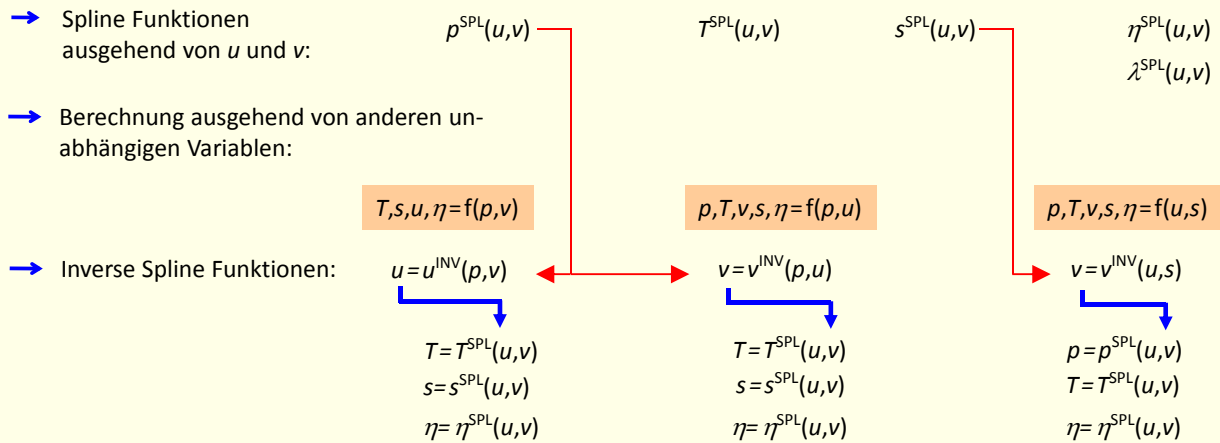
$$\text{und } \Delta x_{2j} = (x_2 - x_{2j})$$



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

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



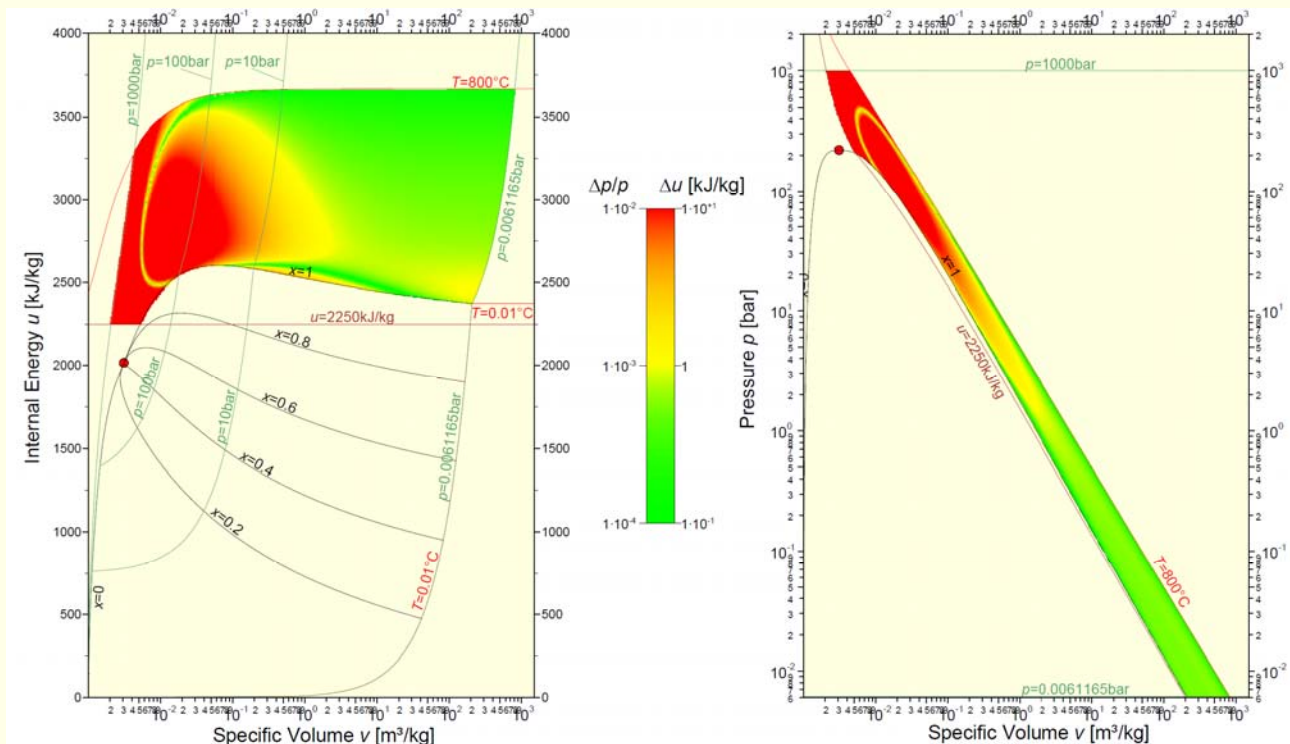
- Alle thermodynamischen Zustandsgrößen, einschließlich Rückwärtsfunktionen, können ohne Iterationen berechnet werden.
- Die Spline-Funktionen sind zueinander vollständig numerisch konsistent.

Stoffwertberechnung für Wasser und Wasserdampf in CFD-Simulationen

Vergleich: ideales und reales Stoffverhalten von Wasserdampf

→ Funktion $p(u, v)$:

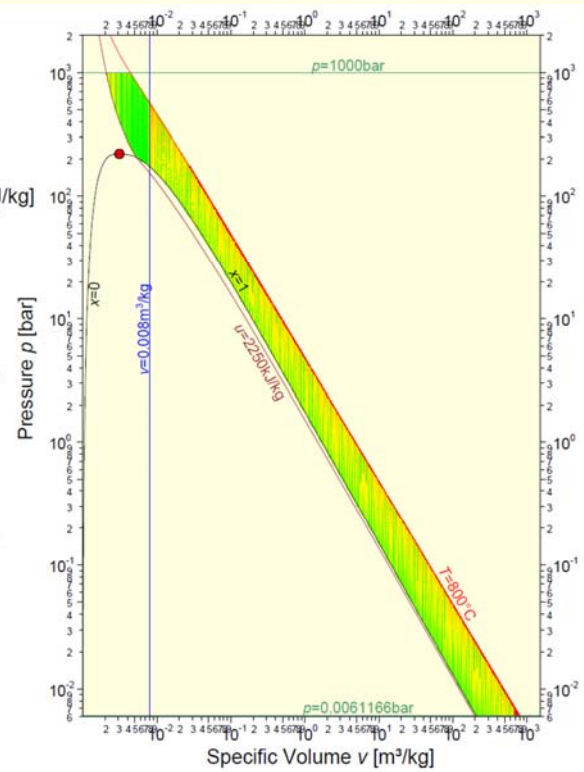
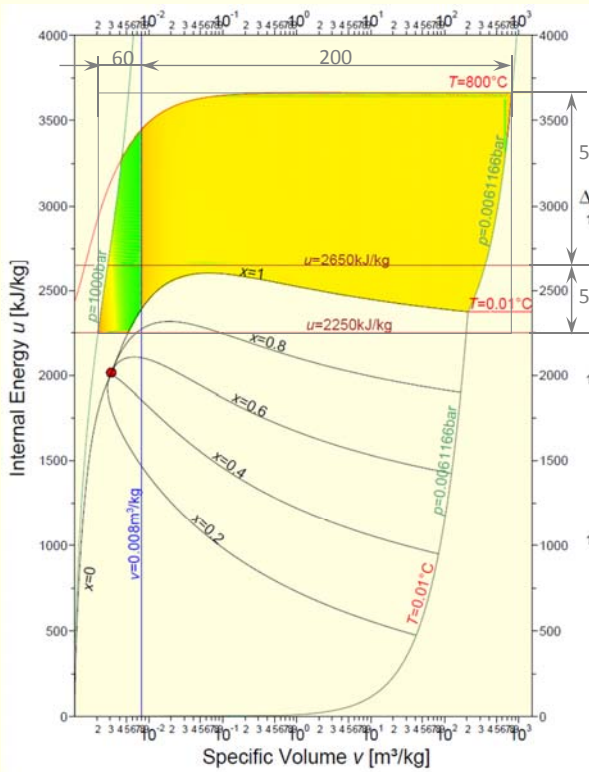
→ Inverse Funktion $u(p, v)$:



Stoffwertberechnung für Wasser und Wasserdampf in CFD-Simulationen

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

→ Inverse Spline-Funktion $u^{INV}(p,v)$:



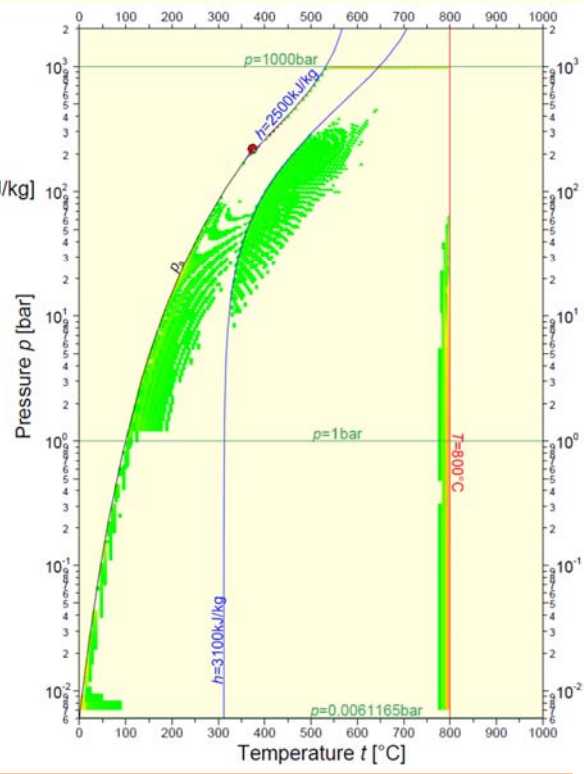
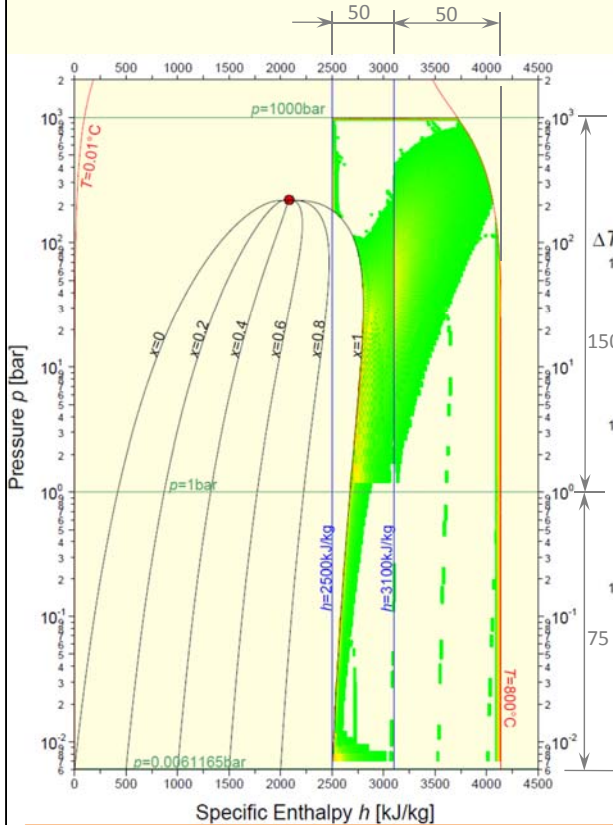
Rechenzeiten im Vergleich zur IAPWS-IF97:
CTR ≈ 260

CTR ≈ 19

Stoffwertberechnung für Wasser und Wasserdampf für instationäre Prozesse

→ Spline-Funktion $T^{SPL}(p,h)$ basierend auf IAPWS-IF97:

→ Inverse Spline-Funktion $h^{INV}(p,T)$:



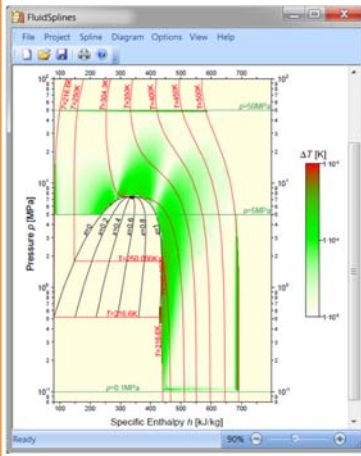
Rechenzeiten im Vergleich zur IAPWS-IF97:
CTR ≈ 2 (zur Rückwärts Gleichung $T(p,h)$)

CTR ≈ 1,2

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 der Rechenzeit

Thermodynamische Stoffdaten:
(Datenbasis)

REFPROP[©]

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:

- Mit Spline-basierten Stoffwert-Berechnungsalgorithmen kann eine hohe Genauigkeit bei gleichzeitig geringer Rechenzeit gewährleistet werden (CTR=100...>1000 gegenüber wissenschaftlichen Fundamentalgleichungen)
- Vollständig numerisch konsistente Vorwärts- u. Rückwärtsfunktionen möglich
- Extreme Anforderungen der Berechnung instationärer Prozesse und der numerischen Strömungssimulation können erfüllt werden (num. Konsistenz, Stetigkeit)

Ausblick:

- Weiterentwicklung der Spline-Algorithmen und Tools
- Testrechnungen in CFD-Programmen (TRACE, entwickelt am DLR)
- Testrechnungen in WSB-Programmen (EBSILON, entwickelt bei STEAG Energy Services)
- Erarbeitung einer IAPWS-Guideline

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!