

# Simulation instationärer Kraftwerksprozesse auf Grundlage der neuen IAPWS-Guideline zum Spline-Basierten Table Look-up Verfahren (SBTL)

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

## Motivation und Zielstellungen

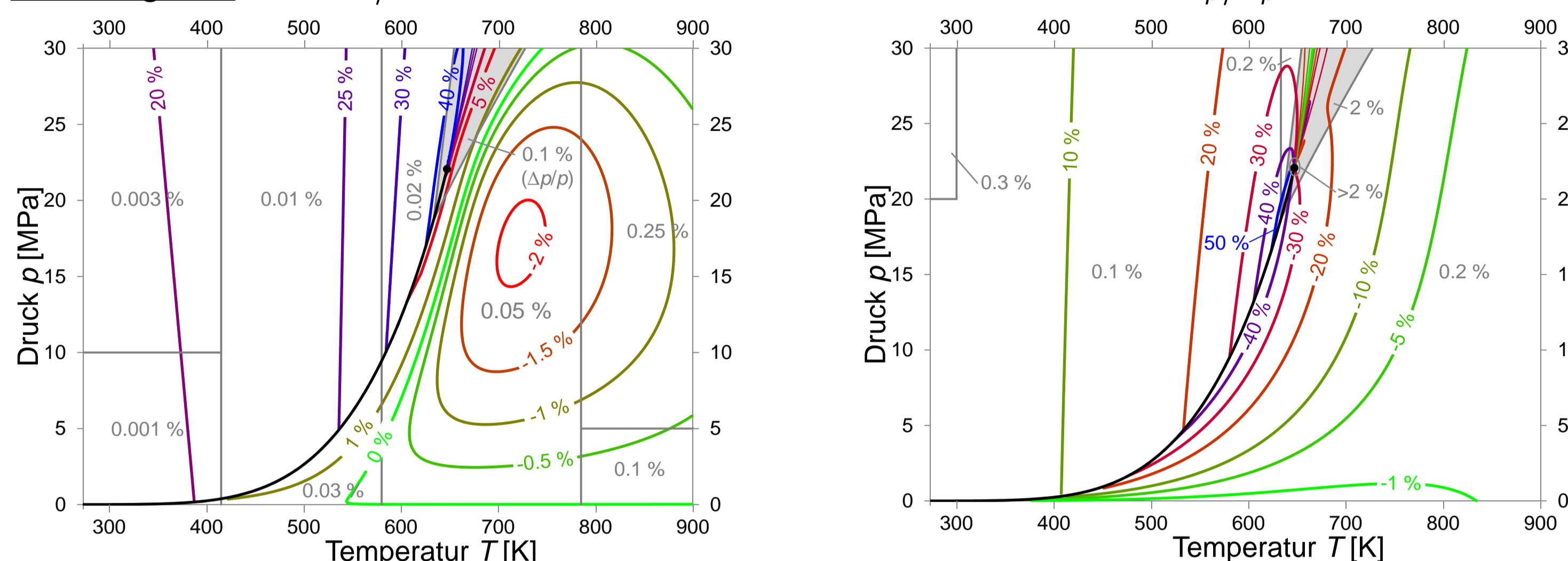
### Problemstellung:

- 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 Gesamtrechnenzeit. → Stoffwertfunktionen 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:



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):

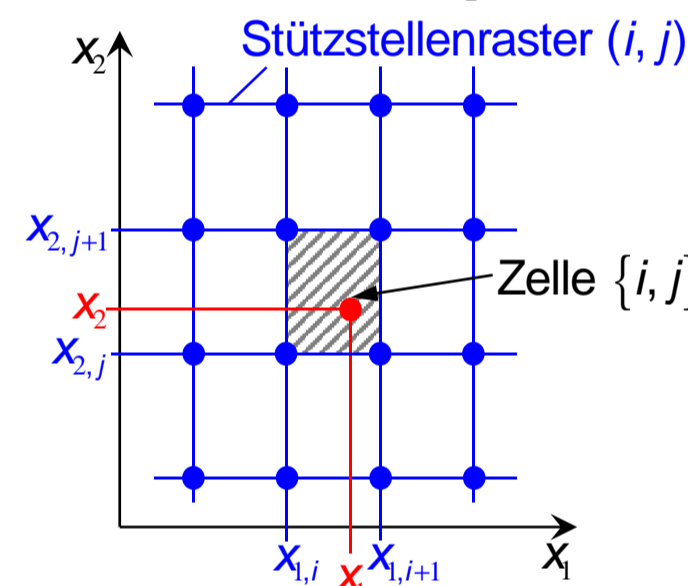
$$CTR = \frac{\text{Rechenzeit der IAPWS-IF97 (-95)}}{\text{Rechenzeit der PR-ZGL}}$$

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

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

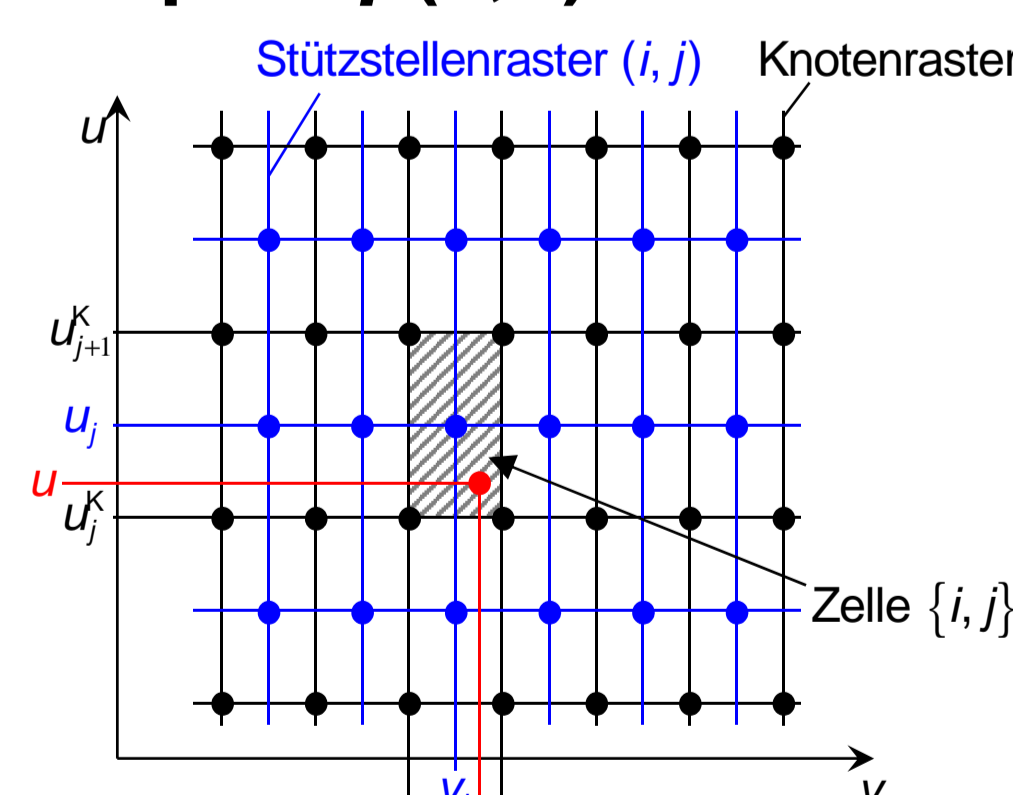
- Um das nichtlineare Verhalten der Stoffwertfunktion zu berücksichtigen, werden die Stützstellen meist lokal verdichtet, was zu aufwändigeren Algorithmen zur Zellsuche führt.
- Oft werden die am häufigsten verwendeten Stoffwertfunktionen als inverse Funktionen und nicht aus expliziten Vorwärtsfunktionen 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, das 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: $\rho(v,u)$



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

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

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

$$u_{(i,j)}^{NV}(\rho, \bar{v}) = \frac{-B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A} + u_j$$

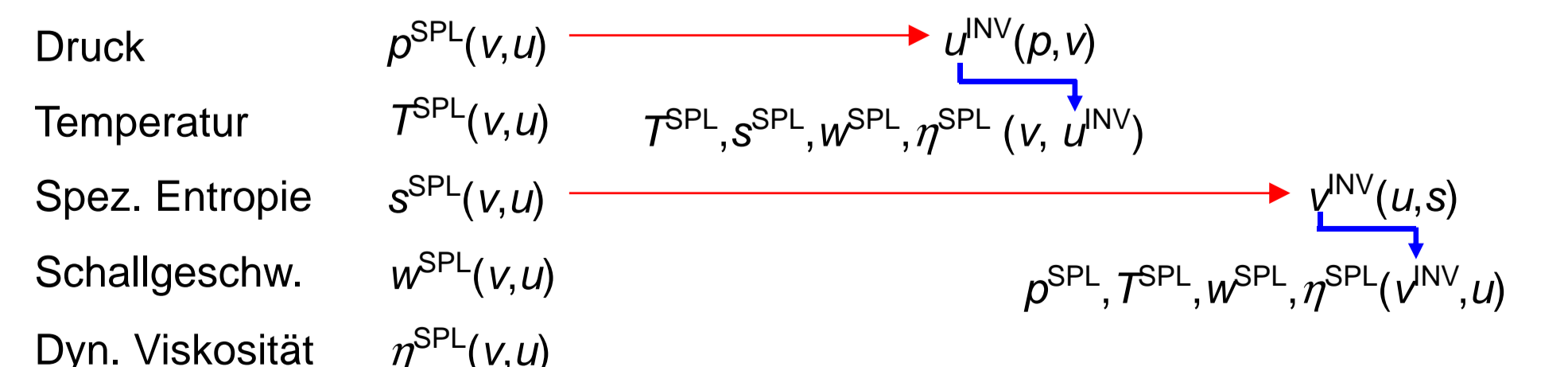
$$A = a_{j13} + \Delta \bar{v}_i (a_{j23} + a_{j33} \Delta \bar{v}_i)$$

$$B = a_{j12} + \Delta \bar{v}_i (a_{j22} + a_{j32} \Delta \bar{v}_i)$$

$$C = a_{j11} + \Delta \bar{v}_i (a_{j21} + a_{j31} \Delta \bar{v}_i) - \rho$$

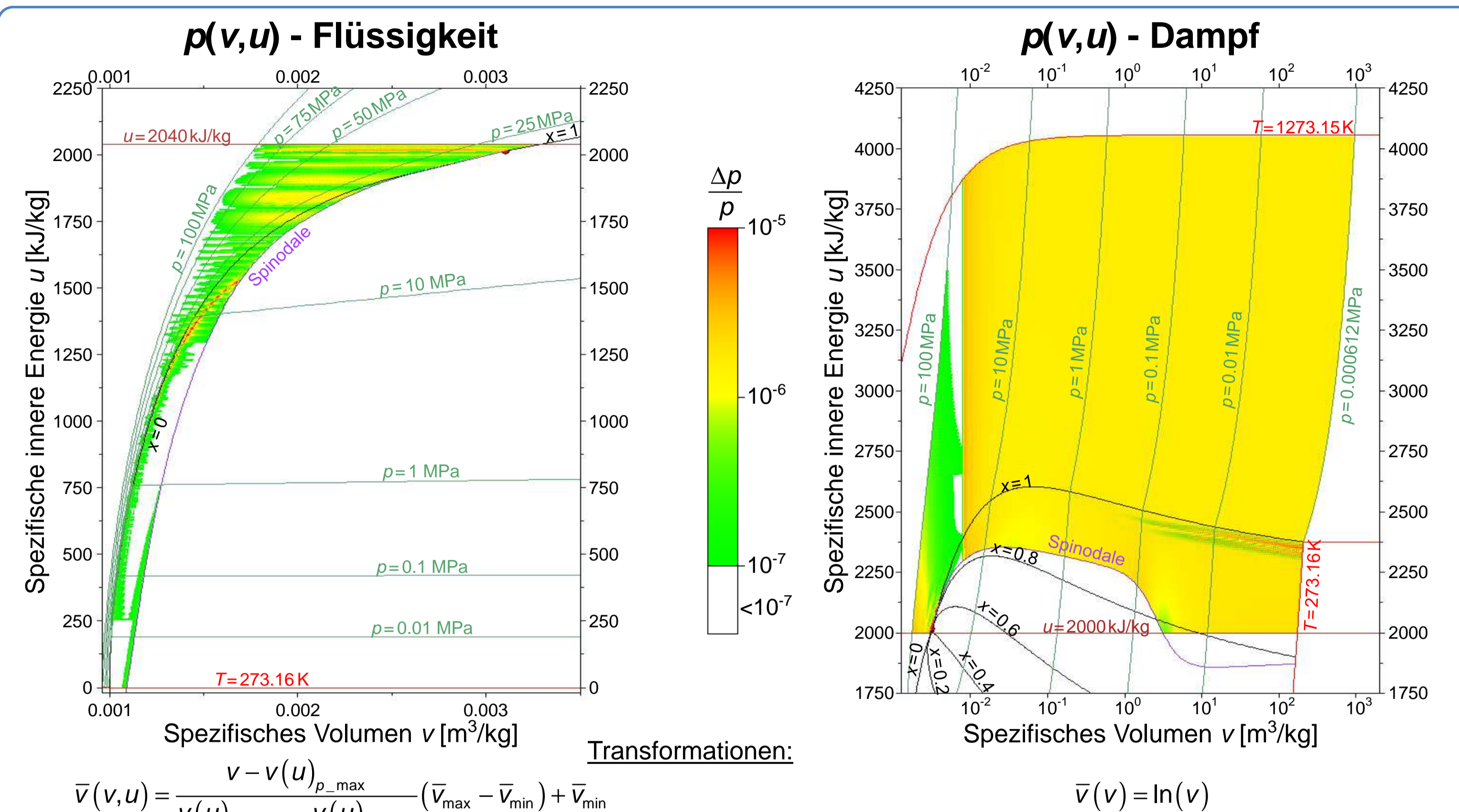
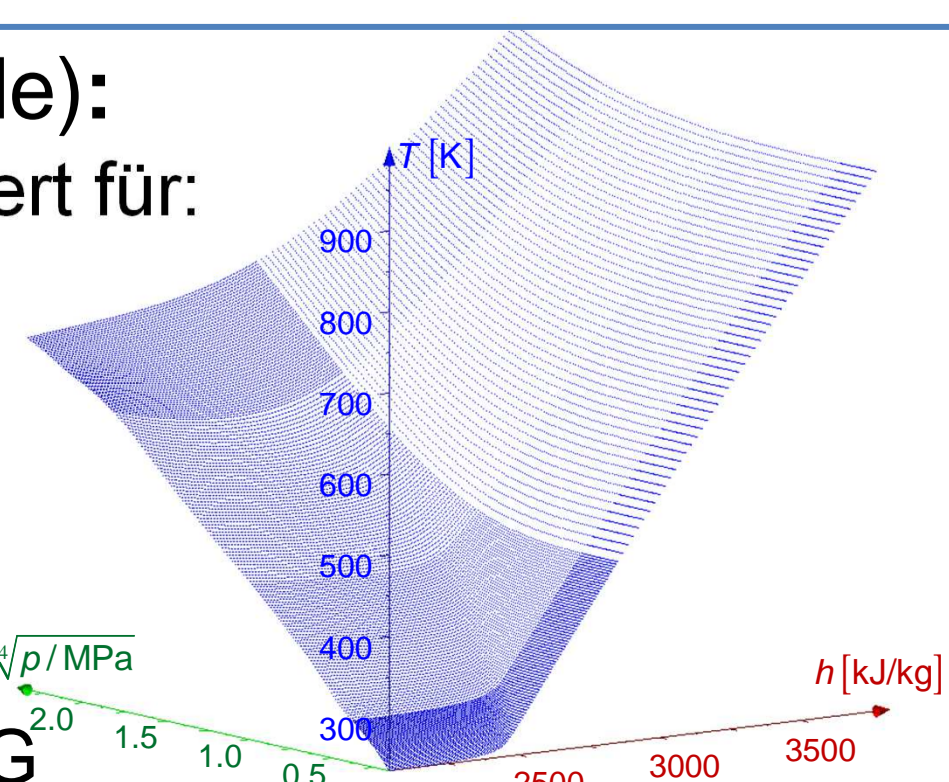
$$\Delta \bar{v}_i = \bar{v}_i - \bar{v}_i \quad (\pm) = \text{sign}(B)$$

Berechnung inverser Funktionen:  $(p,v) \rightarrow (u,s)$



### 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



### Genauigkeit und Rechenzeit:

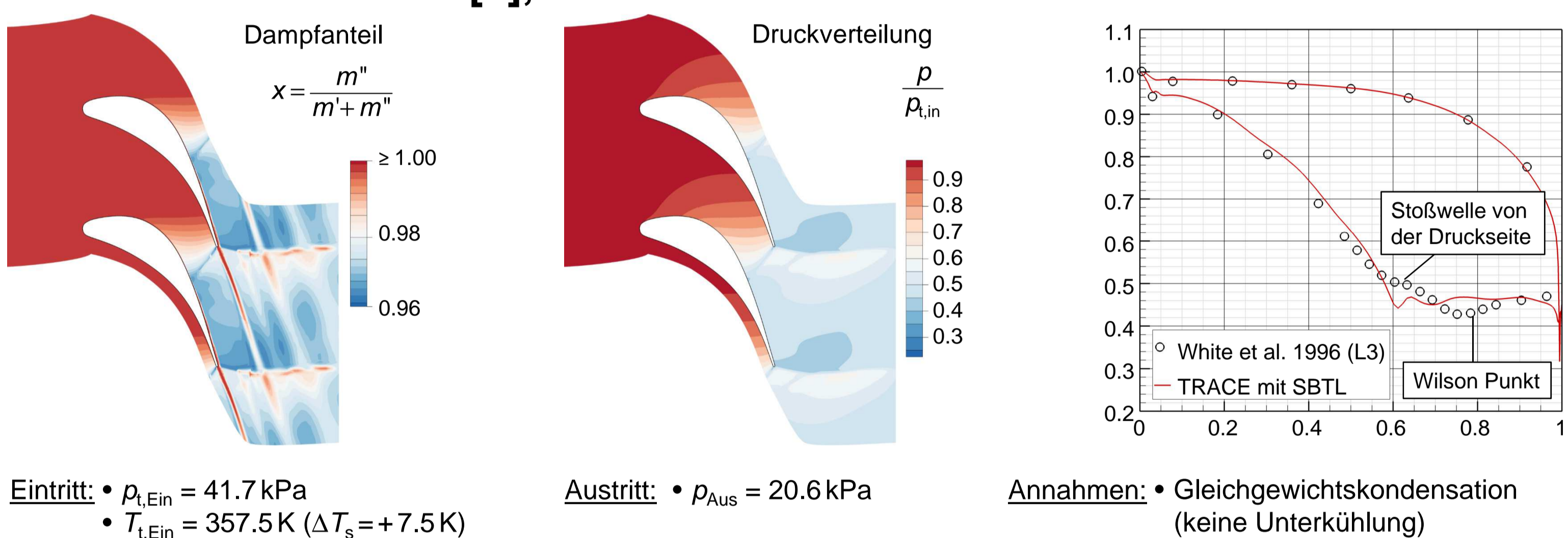
Funktion	Max. Abweichung von IAPWS-IF97	
	Flüssigkeit	Dampf
$\rho(v,u)$	$ \Delta\rho/\rho  < 0.12\%$ $ \Delta\rho  < 0.6 \text{ kPa}$	$ \Delta\rho/\rho  < 0.001\%$
$T(v,u)$	$ \Delta T  < 1 \text{ mK}$	$ \Delta T  < 1 \text{ mK}$
$s(v,u)$	$ \Delta s  < 10^{-6} \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$	$ \Delta s  < 10^{-6} \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
$w(v,u)$	$ \Delta w/w  < 0.001\%$	$ \Delta w/w  < 0.001\%$
$\eta(v,u)$	$ \Delta\eta/\eta  < 0.001\%$	$ \Delta\eta/\eta  < 0.001\%$

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

Funk.	IAPWS-IF97 Bereich		
	1 (Flüss.)	2 (Dampf)	4 (Nassdampf)
$\rho(v,u)$	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: •  $p_{t, \text{Ein}} = 41.7 \text{ kPa}$   
•  $T_{t, \text{Ein}} = 357.5 \text{ K}$  ( $\Delta T_s = +7.5 \text{ K}$ )

Austritt: •  $p_{\text{Aus}} = 20.6 \text{ kPa}$

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 Gesamtrechnenzeiten 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

- 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>.
- IAPWS, Revised Release on the IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam (2007), verfügbar unter <http://www.iapws.org>.
- Kunick, M., Kretschmar, 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).
- 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>.
- Kunick, M., Kretschmar, 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.
- Kunick, M., Fast Calculation of Thermophysical Properties in Extensive Process Simulations with the Spline-Based Table Look-Up Method (SBTL), VDI Fortschritt-Berichte, in Vorbereitung.