Objektorientierte Modellierung von thermohydraulischen Prozessen

Hubertus Tummescheit, Lund Institute of Technology

1 Einleitung

Thermohydraulik umfaßt Prozesse, in denen strömungsmechanische und thermodynamische Phänomene zur Systembeschreibung benötigt werden: z. B. Dampfkraftwerke, Kälteanlagen, Klimaanlagen und Wärmeaustauscher. Die Modellierung solcher Prozesse zur Systemsimulation in Modelica™ wird in den Grundzügen dargestellt.

Software zur dynamischen Simulation thermohydraulischer Prozesse, wie z. B. SINDA/FLUINT [3], weisen als umfassende Werkzeuge zur Modellierung und Simulation über den gesamten Entwicklungszyklus eines Produktes entscheidende Nachteile auf: sie sind eng auf das Fachgebiet beschränkt, nicht mit anderen Werkzeugen kombinierbar und kaum für den Regelungsentwurf zu gebrauchen. Modelle auf der Basis von Modelica™ bieten diesen herkömmlichen Systemen gegenüber eine Reihe von Vorteilen: Durch die objektorientierte Methode werden Modelle schneller entwickelt, die Wartung und Anpassung von Modellbibliotheken vereinfacht sich und—immer wichtiger bei der Entwicklung komplexer, heterogener Systeme—Modelle verschiedener Anwendungsgebiete lassen sich leicht miteinander kombinieren.

2 Grundlagen

Modelle von thermohydraulischen Anlagen bestehen aus 3 Basiselementen, die entsprechend der objektorientierten Vorgehensweise auch separat voneinander modelliert werden sollten:

- Kontrollvolumen bestehend aus
  - Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie und Impuls,
  - Beschreibungen der fundamentalen thermodynamischen Eigenschaften von Fluiden,
  - Schnittstellen zu angrenzenden Volumina,
  - empirische Gleichungen zur Beschreibung von Wärmeübergang und Druckverlusten.
- Wärmespeicherung und Wärmeleitung in Festkörpern und
- Beschreibungen der Apparategeometrie.

Eines der speziellen Probleme bei der thermodynamischen Modellierung von Fluiden ist die Auswahl möglicher Zustandsvariablen, in denen das Problem formuliert werden kann: je zwei der Variablen Druck p, Dichte ρ oder spezifisches Volumen $v = 1/\rho$, Temperatur T, Enthalpie h, innere Energie u oder Entropie s beschreiben den thermodynamischen Zustand eines Fluides eindeutig, mit Ausnahme von p und T, die im Zweiphasen-Gebiet voneinander abhängig sind. Zwei dieser Größen werden als Zustände gewählt, alle anderen, sofern sie gebraucht werden, aus einem thermodynamischen Modell der Stoffeigenschaften berechnet. Aufgrund numerischer Eigenschaften der Erhaltungsgleichungen ist nur die Kombination des Drucks p mit h, u oder s im gesamten Zustandsbereich möglich, im Einphasengebiet auch mit T. Hier werden Modelle mit Druck und Enthalpie als Zuständen vorgestellt, die in der Literatur am häufigsten zitierte Kombination (siehe Übersicht in [8]). Die Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie und Impuls werden in einer sehr allgemeinen Form formuliert, die anwendungsorientierte Vereinfachungen in abgeleitete Klassen verlagert. Robuste Modelle erfordern, daß an allen Stellen eines Netzwerkes Strömungen in beide Richtungen korrekt abgebildet werden, weil die Strömungsrichtung entweder zu Beginn nicht bekannt ist oder während der Simulation wechseln kann. Dies gilt auch für Verbindungsstücke und Abzweigungen[1].

Die thermodynamischen Stoffmodelle bilden eine wichtige Grundlage für die Simulation thermohydraulischer Prozesse, Genauigkeit und Berechnungsgeschwindigkeit sind meistens bestimmend für die Gesamtsimulation.

Empirische Wärmeübergangs- und Druckverlustbeziehungen müssen oft speziellen Gegebenheiten angepaßt werden, daher sind nur die wichtigsten in der Modelica-Bibliothek vorhanden.

Voraussetzung für eine Bibliothek, in der sich Modelle in verteilten und in konzentrierten Parametern nach Belieben mischen lassen, ist ein Diskretisierungsschema, das in beiden Fällen gültig ist. Die „Finite Volume“ Methode mit versetzten Gittern, im Detail beschrieben in [11], erfüllt diese Anforderung. Die Grundidee der finiten Volumenmethode besteht darin, eine Strömung in endliche Volumenelemente aufzuteilen und die Erhaltungssätze (Massen-, Impuls- Energiebilanz) auf jedes Kontrollvolumen anzuwenden. Hierbei werden die Elemente diskretisiert, in dem an einem „inneren“ Punkt eines Volumens die „resultierenden“ intensiven Größen (T, p, h, s) des Elements und an der Oberflä-

[1] Um beliebige Strömungsrichtungen auch dynamisch korrekt zu handhaben, dürfen diese nicht masselos modelliert sein, sondern bestehen ebenfalls aus einem Kontrollvolumen mit drei Schnittstellen

Modelle für Reinstoffe	
Eine Strömungsrichtung	Zwei Strömungsrichtungen
$\dot{m}, p, \rho, h$	$\dot{m}, p, \Delta G_l, \Delta G_r, \rho_l, \rho_r, h_l, h_r$
Modelle für n-Stoff Gemische variabler Zusammensetzung	
$\dot{m}, p, C[n], \rho, h$	$\dot{m}, p, C[n]_l, C[n]_r, \Delta G_l, \Delta G_r, \rho_l, \rho_r, h_l, h_r$

Tabelle 1: Schnittstellen zwischen Volumenelementen

che die extensiven Größen (Massenstrom, Impulsstrom) definiert sind. Zwischenwerte werden über vorgegebene Interpolationsformeln ermittelt, meist durch lineare Interpolation. Da zum Aufstellen der Erhaltungsgleichungen für ein Kontrollvolumen die intensiven Größen des stromaufwärts- gelegenen Kontrollvolumens h, ρ und auch der konvektive Anteil am Impulstransportstrom ΔG (siehe Gl.6) – benötigt werden, müssen diese in der Schnittstelle eines das Kontrollvolumen repräsentierenden Modellobjektes mit aufgeführt werden (siehe Bild 1).

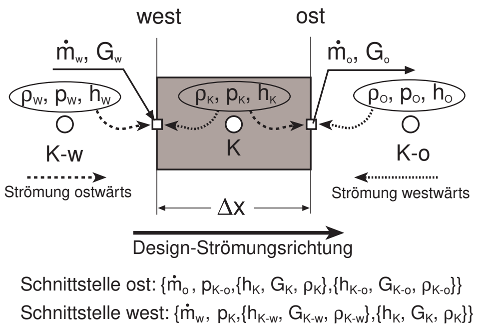


Bild 1: Diskretisierung der Kontrollvolumen.

3 Schnittstellen

Die Standardisierung der Schnittstellen ist eine wichtige Voraussetzung für die Wiederverwendbarkeit und für einen Modellaustausch zwischen verschiedenen Bibliotheken. Die Schnittstellen zwischen den Volumenelementen sind in zwei Gruppen unterteilt: eine für Strömungen, in denen überall eine Strömungsrichtung sichergestellt werden kann, die andere für beliebige Strömungsrichtungen. Alle Schnittstellen enthalten den Massenstrom, den Druck stromauf der Schnittstelle und alle mit der Strömung transportierten Größen, siehe Tabelle 1. Für Mischungen von Fluiden beschreibt der Vektor $C[n]$ die dimensionslose Gemischzusammensetzung in kg/kg.

Für konvektiven und Strahlungswärmeaustausch existiert eine Schnittstelle mit der Temperatur T und dem Wärmestrom $\dot{Q}$. Die mechanische Schnittstelle zu Pumpen, Turbinen und Verdichtern ist identisch mit der aus der Modelica™ Bibliothek für rotatorische Antriebe (siehe auch Teil 3 und Teil 9 dieser Serie).

Standardisierte Schnittstellen existieren ebenfalls zwischen den Stoffmodellen und den Modellen mit den Erhaltungsgleichungen. Dabei sind die gewählten Zustandsvariablen z. B. $[p,h]$ oder $[p,s]$, immer Eingangsgröße für das Stoffdatenmodell. Im Fall von Druck und Enthalpie als Zuständen, $[p,h]$, sind die benötigten Ausgangsgrößen $[T, \rho, \partial\rho/\partial h|_p, \partial\rho/\partial p|_h]$ sowie eine Variable für die Phase (Gas-, Zweiphasen- oder Flüssigkeitsgebiet).

4 Erhaltungsgleichungen

Die Wahl der Variablen, in denen die Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie und Impuls formuliert werden, ist für die schnelle Simulation thermohydraulischer Anlagen sehr wichtig, aber leider deckt eine Wahl nicht alle in der Praxis nötigen Fälle ab. Kriterien sind u. a. die numerische Steifigkeit und die Verfügbarkeit eines zu diesen Erhaltungsgleichungen passenden Fluidmodells. Fast alle Stoffmodelle (siehe 5) bauen auf je zwei der Größen p, v oder T auf, so daß sich diese als Zustandsvariablen anbieten. Die Massenbilanz kann im flüssigen Zustand jedoch nicht in v bzw. ρ formuliert werden, das resultierende System ist bei Drucktransienten zu steif und damit ineffizient zu simulieren. Außerhalb des Zweiphasengebietes bilden T und p ein geeignetes und oft verwendetes Paar, innerhalb sind T und p voneinander abhängig, also muß eine der Variablen z. B. durch die Enthalpie h oder den Dampfgehalt x ersetzt werden.

Eine häufig verwendete Wahl für die Zustandsvariablen sind Druck und Enthalpie. Im Fall der oben motivierten Methode der versetzten Gitter können die Massen- Energiebilanz folgendermaßen in zwei DGL'n für p und h umgeformt werden (vgl. [6],S. 185 ff):

$$\frac{dp}{dt} = \left(\frac{\partial p}{\partial m}\right)_{e,V} \Delta\dot{m} + \left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)_{m,V} \Delta\dot{e} + \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_{m,e} \frac{dV}{dt} \quad (1)$$

$$\frac{dh}{dt} = \left(\frac{\partial h}{\partial m}\right)_{e,V} \Delta\dot{m} + \left(\frac{\partial h}{\partial e}\right)_{m,V} \Delta\dot{e} + \left(\frac{\partial h}{\partial V}\right)_{m,e} \frac{dV}{dt} \quad (2)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial m}\right)_{e,V} = \frac{\rho + \left(\frac{\partial \rho}{\partial h}\right)_p h}{\left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_h \rho + \left(\frac{\partial \rho}{\partial h}\right)_p} \qquad \text{etc.} \quad (3)$$

Alle in den Formeln 1 und 2 verwendeten Größen beziehen sich nur auf das betrachtete Volumen, mit Ausnahme der Energie- und Massebilanzen $\Delta\dot{m}$ und $\Delta\dot{e}$:

$$\Delta\dot{m}_K = \sum_i \dot{m}_i \quad (4)$$

$$\Delta\dot{e}_K = (\forall(\dot{m}_i < 0) \sum_i \dot{m}_i h_K) + (\forall(\dot{m}_j > 0) \sum_j \dot{m}_j h_{j,\uparrow}) + \sum_k \dot{q}_k \quad (5)$$

Die Massenströme werden auf den Grenzen des Kontrollvolumens berechnet und direkt summiert. Die Energieströme transportieren bei Umkehr der Strömungsrichtung jeweils die stromaufwärtige Enthalpie über die Bilanzgrenze; $h_{j,\uparrow}$ steht für die an der Schnittstelle stromaufwärts liegende Enthalpie. Die Gleichungen 4 und 5 sind in einer eigenen Klasse gekapselt, damit nur eine Version der Erhaltungsgleichungen für Kontrollvolumina mit einer unterschiedlichen Zahl von Schnittstellen programmiert zu werden braucht.

Diese Form der Bilanzgleichungen ist im gesamten Zustandsgebiet eines Fluids gültig und ist darüber hinaus auch im Flüssigkeitsgebiet numerisch nicht steif. Der letzte Term in 1 und 2 wird nur für Kontrollvolumen variabler Größe benötigt,

Eine der wichtigen und bisher früh im Modellierungsprozeß zu treffenden Entscheidungen ist, ob die Impulsbilanz stationär oder dynamisch gerechnet werden soll. Die symbolische Gleichungsumformung in Modelica erlaubt es, die dynamische und die stationäre Form der Impulsbilanz in einem Modell zu kombinieren, ein zur Übersetzungszeit festzulegender Parameter bestimmt, welche Form verwendet wird. Die Impulsbilanz für einphasige oder homogen modellierte zweiphasige Strömungen lautet:

$$\frac{dG}{dt} = \underbrace{-w\left(\frac{\partial G}{\partial z} + \rho\frac{\partial w}{\partial z}\right)}_{\Delta G\ konvektiv} - \frac{\partial p}{\partial z} + \rho g cos(\phi) + \underbrace{\left(\frac{\partial p}{\partial z}\right)_R}_{\Delta p\ Reibung} \tag{6}$$

mit ϕ als Winkel zur Gravitationsrichtung. Die Geschwindigkeit w wird auf der Grenze des Kontrollvolumens mit der stromaufwärtigen Dichte aus der Kontinuitätsgleichung $\dot{m} = \rho w A$ mit der Querschnittsfläche A des Volumens berechnet. Zwei nur zur Übersetzungszeit veränderbare Parameter **dy** und **gr** entscheiden über die Annahmen in der Impulsbilanz:

$$\mathbf{dy}\left[\frac{dG}{dt}\right] = \mathbf{dy}\Delta G - \frac{\partial p}{\partial z} + \mathbf{gr}[\rho g cos(\phi)] + \left(\frac{\partial p}{\partial z}\right)_R \tag{7}$$

Wenn sowohl $\mathbf{dy} = 0$ und auch $\mathbf{gr} = 0$, reduziert sich die dynamische Impulsbilanz auf eine stationäre Druckverlustbeziehung. Nach dem Gleichungsortieren ergibt sich:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \left(\frac{\partial p}{\partial z}\right)_R \tag{8}$$

Durch diese Parametrisierung kann eine Version der Bibliothekmodelle sowohl für langsame, von thermischen Vorgängen bestimmte Prozesse eingesetzt werden als auch für schnelle, von den hydraulischen Effekten dominierte mit Zeitkonstanten im Millisekundenbereich.

Die Modelica Bibliothek zur Thermohydraulik enthält außerdem ein sog. inhomogenes Modell für Zweiphasenströmung, in dem die Geschwindigkeiten der Phasen verschieden sind und über zwei gekoppelte Impulsbilanzen berechnet werden. Dieses Modell liefert bei schnellen Vorgängen in Verdampfern deutlich bessere Ergebnisse, weil dort die Reibung zwischen den Phasen einen wichtigen Einfluß auf die Gesamtdynamik hat.

5 Thermodynamische Stoffeigenschaften

Die Verfügbarkeit schneller und genauer Modelle für die thermodynamischen Eigenschaften von Fluiden ist ein notorisches Problem bei der dynamischen Simulation thermohydraulischer Anlagen, sobald Modelle mit höheren Anforderungen als ideales Gas oder inkompressible Flüssigkeit benötigt werden. In vielen Gebieten existieren standardisierte Formulationen (IAPWS-IF97 für Wasser nach [13]) oder de Facto Standards (die Routinen von NIST[2]), deren Genauigkeit auch für die dynamische Modellbildung erwartet wird. Einige dieser Routinen können direkt in Modelica programmiert werden (z. B. für die Dampftafeln der IAPWS-IF97), andere, wie die Kältemittelroutinen von NIST können über die Schnittstelle zum Aufruf externer Funktionen in Modelica verwendet werden. Die erhältlichen Routinen und fast alle in der Literatur beschriebenen Modelle (siehe z. B. [12]) sind auf den Aufruf aus stationären Berechnungen zugeschnitten. In dynamischen Berechnungen werden zusätzliche Richtungsableitungen der Stoffeigenschaften benötigt, so daß die vorhandenen Formulationen erweitert werden müssen. In der Modelica Bibliothek „Thermohydraulik“ wird dies für Wasser nach [13], für Kältemittel nach der NIST REFPROP Datenbank [7], ideale Gase nach [2] und für kubische Zustandsgleichungen der Form $F(p,v,T) = 0$ wie die Redlich-Kwong-Soave Gleichung enthalten sein.

Zwei Arten von Berechnungen innerhalb der Stoffwertaufrufe, sind iterativ, müssen in jedem Kontrollvolumen zu jedem Zeitschritt ausgeführt werden und sind daher sehr zeitraubend:

- die Berechnung von Phasengleichgewichten und
- Iterationen, um mit Hilfe der dynamischen Zustände den zugehörigen Punkt auf der in anderen thermodynamischen Größen beschriebenen Zustandsfläche zu finden.

Beide Arten von Iterationen müssen für dynamische Simulation unbedingt vermieden werden., wobei i. a. einige geringe Einbuße an Genauigkeit zulässig ist.

Die Berechnung der Phasengrenzkurven zwischen dem 1- und 2-Phasengebiet bei gegebener Grundformulierung erfolgt iterativ anhand thermodynamischer Kriterien, z. B. dem Maxwell-Kriterium. Durch den numerischen Abbruchfehler der Iteration kommt es an der Siede- und Taulinie (siehe Bild 2) zu häufigem Schalten[3] oder u. U. sogar zu einem „sliding mode“ Verhalten der Simulation. Um dies zu vermeiden, müssen für dynamische Simulationen die mit numerischen Rundungsfehlern behafteten Phasengrenzen durch eindeutige Schaltfunktionen ersetzt werden. Hierfür eignen sich kubische Splines oder rationale Approximationsfunktionen, die mit den iterativen Originalroutinen *vor* der Simulation berechnet werden und die Originalfunktion mit hoher Genauigkeit approximieren. Mit den Werten auf beiden Phasengrenzkurven werden alle Zu-

[2] National Institute of Standards and Technology der USA.

[3] auf Englisch „discontinuity sticking“.

stände innerhalb des Zweiphasengebietes nicht-iterativ berechnet. Diese Approximationen sind sehr genau und um 1 – 2 Größenordnungen schneller als die iterativen Funktionen. In der Dampftafeln der IAPWS-IF97 ist eine solche Approximation der Dampfdruckkurve bereits vorhanden. Im Einphasengebiet ist es aufwendi-

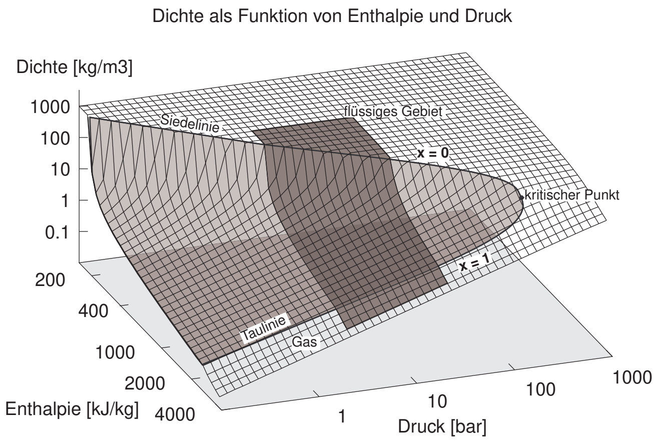


Bild 2: Zustandsfläche von Wasser, Dichte über Enthalpie und Druck. Nach [8].

ger, die iterativen Formulierungen durch explizite zu ersetzen, weil hier alle Größen als Funktion beider Zustände berechnet werden müssen. In der Nähe der Phasengrenzen, siehe z. B. das dunkel unterlegte Gebiet in Bild 2, können die Stoffwerte in sehr hoher Genauigkeit durch Taylorapproximationen 1. oder 2. Ordnung angenähert werden. Die darin verwendeten partiellen Ableitungen auf den Phasengrenzkurven wurden unter Anwendung thermodynamischer Zusammenhänge mit Hilfe eines Computeralgebra-Programmes berechnet. Für Kühlmittelkreisläufe, die immer nahe dem Zweiphasengebiet betrieben werden, liegen die Fehler solcher Näherungen immer unter 0.5 %

Eine Formulierung, die auf den Zustandsvariablen beruht – hier p und h, hat somit erhebliche Vorteile in der Rechengeschwindigkeit. Von den technisch interessanten Stoffen existiert eine solche nur für Wasser mit der IAPWS-IF97. Dies ist über eine explizite Umkehrfunktion $T(p,h)$ realisiert, die dann in der zugrundeliegenden Gibbsfunktion $g(p,T)$ verwendet wird.

Zur Berechnung der thermodynamischen Eigenschaften reiner Fluide existieren mehrere Möglichkeiten, auf die hier nur oberflächlich eingegangen werden kann. Die thermische Zustandsgleichung ist eine Funktion für das spezifische Volumen $v(T,p)$. Zur Berechnung von Enthalpie und Entropie wird zusätzlich eine Funktion der spezifischen Wärmekapazität $c_p = c_p(T)$ im idealen Gaszustand benötigt.

Weitere Formulierungen sind die kanonischen Zustandsgleichungen für die *Helmholtz-Funktion* $f = f(T,v)$, auf der z. B. die REFPROP Datenbank beruht und die *Gibbs-Funktion* $g = g(T,p)$, die in der IAPWS-IF97 verwendet wurde. Die IAPWS-IF97 verwendet Umkehrfunktionen $T = T(h,p)$ und $T = T(s,p)$, mit denen auch diese Kombinationen explizit berechnet werden. Kanonischen Zustandsgleichungen enthalten alle Informationen zur Berechnung aller thermodynamischen Zusammenhänge. Diese können aus den Ableitungen der Helmholtz- bzw. Gibbs-Funktion berechnet werden, Einzelheiten siehe [1].

Eine weitere Methode, die Stoffwerte auch im 1-Phasengebiet explizit zu berechnen, ist die 2-dimensionale Splineinterpolation auf der Basis der Originalfunktionen.

Wie aus Abbildung 2 zu erkennen ist, sind die verwendeten Ableitungen $(\partial\rho/\partial h)_p$ und $(\partial\rho/\partial p)_h$ an den Phasengrenzen unstetig: diese Unstetigkeiten müssen zur effizienten Simulation als diskrete Schaltfunktionen modelliert werden. Unabhängig davon, ob die Stoffwerte als externe Funktionen oder in Modelica modelliert werden, ob sie iterativ oder explizit berechnet werden, bestehen alle Stoffdatenmodelle aus folgenden Komponenten:

- Einer implizit definierten Schnittstelle (kein `connector`, nur über die Attribute `input`und `output`) mit den dynamische Zuständen p,h als Eingangsgrößen und allen anderen benötigten Größen als Ausgänge.
- Einer diskreten Schaltfunktion für die Phasen.
- 2–3 Modellen, die jeweils ein Phase modellieren.

Alle Stoffdatenmodelle, die diesem Schema folgen, lassen sich dann beliebig gegeneinander austauschen, ohne die anderen Modellteile zu beeinflussen. Durch die symbolische Behandlung der Gleichungen vor der Simulation enstehen auch bei sehr einfachen Stoffmodellen wie idealen Gasen oder inkompressiblen Flüssigkeiten keine überflüssigen Berechnungen.

5.1 Struktur der Thermohydraulik-Bibliothek

In fachspezifischen Simulationsprogrammen wie z. B. APROS [5] ist das spezielle Wissen um die Simulation dieses Fachgebietes fest im Programmcode verankert. In Modelica wird dieses Wissen in die Modellbibliotheken programmiert und ist damit auch für den Anwender zugänglich. Die wichtigen abstrakten Konzepte eines Fachgebietes eignen sich zum Entwurf einer Grundstruktur der Modellbibliothek:

- abstrakte Teilmodelle (`partial model`), die einzeln nicht simuliert werden können, kapseln die Gleichungen und Zusammenhänge, die man unabhängig voneinander im fertigen Modell parametrisieren möchte.
- Typische Komponenten thermohydraulicher Anlagen werden aus den Teilmodellen zusammengesetzt. Sie können direkt zu Anlagen verschaltet werden.

In der Informatik haben sich zur Strukturierung objektorientierter Software sogenannte „Design Patterns“ (vgl. für Software in [4]) bewährt: *Design Patterns* sind informell beschriebene, häufig wiederkehrende Strukturmerkmale, die in bestimmten Anwendungen die Wiederverwendbarkeit von Software-Komponenten erhöhen. Auch bei der Modellierung physikalischer Systeme können *Design Patterns* gefunden und erfolgreich eingesetzt werden. Das bekannteste Beispiel für ein solches Muster aus der Verfahrenstechnik ist die Trennung von Apparat und Medium, z. B. beschrieben in [9]. In Modelica ist diese Trennung mit Hilfe von Klassenparametern noch konsequenter durchzuführen als in [9] für OMOLAbeschrieben.

In der Modelica™ Bibliothek Thermohydraulik werden die folgenden „Design Patterns“ verwendet:

Thermodynamischer Bilanzraum: Grundlegende physikalische Annahmen des Modells werden auf der Ebene eines Kontrollvolumens parametrisiert, z. B. kompressible/inkompressible Fluide. Die Austauschbarkeit zwischen Reinstoff- und Gemischmodellen wird auch auf dieser Ebene realisiert.

Fluid-Maschine Trennung: Konsequente Trennung der Stoffdaten von der restlichen Beschreibung.

Kennlinien-Modul: Empirische Daten und Apparatekennlinien, die über Tabellen oder Näherungsfunktionen beschrieben werden, kommen in den verschiedensten Anwendungsgebieten vor, z. B. Pumpenkennlinien.

Apparate-Parametersatz: Auf dieser Ebene werden alle benötigten Parameter für einen Apparatetyp in einem **`record`** zusammengefaßt und an die Teilmodelle propagiert, z. B. Geometriedaten.

Das wichtigste Konzept zur Parametrisierung thermodynamischer Modelle ist das Kontrollvolumen, daß auch die Schnittstellen zwischen den Elementen enthält. In einem Kontrollvolumen werden eine Reihe physikalischer Eigenschaften gebündelt:

- Ein konsistenter Satz von Erhaltungsgleichungen für einen thermodynamischen Bilanzraum wird aufgestellt. Grundlegende Annahmen, wie z. B. Inkompressibilität, gelten für einen Typ von Bilanzraum.
- Eine austauschbare, mit diesen Annahmen kompatible Stoffdaten-Komponente.
- Die eindimensionale Diskretisierung des Bilanzraumes in Strömungsrichtung, wobei 1 Element einen Bilanzraum in konzentrierten Parametern modelliert.

Die in Teil 12 dieser Serie vorgestellte Diskretisierung nach der „Finite Volumen“ Methode und die Forderung nach konsistent lösbaren Gleichungssystemen bei beliebiger graphischer Verschaltung der Bibliothekselemente führt zwangsläufig auf ein Schema, in dem sich die „versetzten Gitter“ der finiten Volumen wiederfinden: Elemente, in denen Masse und Energie gespeichert werden „Speicher“ (Berechnung der intensiven Größen), wechseln sich mit Elementen ab, in denen der Massenstrom aus Druckdifferenzen berechnet wird „Drossel“[4] (extensive Größen). Damit auch Verzweigungen bzw. Zusammenführungen mit beliebiger Strömungsrichtung simuliert werden können, wird auch das Zentrum einer Verzweigung als Speicherelement modelliert. Zur Vereinfachung der graphischen Verkopplung wird eine Vorzugsrichtung eingeführt, in der das Drosselelement per Definition immer stromab angeordnet ist. Wenn alle Elemente mit einheitlicher Richtung in der Vorzugs-Strömungsrichtung verbunden werden, ergeben sich beim Verschalten beliebiger thermohydraulischer Netze immer eine gleiche Anzahl von Gleichungen und Unbekannten, vorausgesetzt die Randbedingungen – Massenstrom und Fluidzustand an offenen Eintritten, Druck und Fluidzustand an offenen Austritten – werden gesetzt.

Ähnliche *Design Patterns* wie der thermodyamische Bilanzraum in der Thermohydraulik lassen sich auch in anderen Gebieten der physikalischen Modellierung finden und zur flexiblen Parametrisierung nutzen: Kennlinien und Parametersätze für komplexe Apparate sind in allen Anwendungen einsetzbar.

5.2 Klassenparameter und Mehrfachvererbung

Modelica bietet verschiedene Möglichkeiten, einmal geschriebenen Programmcode wiederzuverwenden bzw. Modelle so zu gestalten, daß sie sich zur Wiederverwendung anbieten.

1. Vererbung, auch Mehrfachvererbung mit dem Schlüsselwort **`extends`**.
2. Klassenparameter, deklariert mit **`replaceable`** und später austauschbar mit **`redeclare`**.

Ein Klassenparameter ist ein mit einem Vorgabe-Modell (engl. default model) besetzter Platzhalter für Modelle, deren als **`public`** deklarierte Variablen und Komponenten mit denen des Vorgabe-Modells übereinstimmen. Darüber hinaus darf das Vorgabe-Modell keine **`private`** Variablen enthalten, ist also eine Deklaration des Minimums an Schnittstellen und sichtbaren Teilen, die alle an Stelle des Klassenparameters eingesetzten Modelle enthalten müssen. Klassenparameter können auf verschiedene Art mit Modelica’s anderen Sprachelementen kombiniert werden:

1. Zu einem Klassenparameter wird eine Komponente deklariert, deren Klasse damit veränderbar ist.
2. Ein Klassenparameter dient als Basisklasse für die Vererbung, so daß die Elternklasse eine in innerhalb gewisser Vorgaben austauschbare Klasse hat. Die Mindestanforderungen an diese Klasse werden von der Standardklasse festgelegt (im Beispiel unten BaseFluid_ph).

Beide Möglichkeiten werden anhand desselben Vorgabe-Modells – ein Stoffmodel mit Druck p und Enthalpie h als dynamischen Zuständen – demonstriert:

```
model BaseFluid_ph    // minimales
  input Pressure p;   // Vorgabe-Modell
  input Enthalpy h;
  output Temperature T;
  output Density d;
end BaseFluid_ph;
```

Mit diesem Stoffmodell werden beide Arten der Verwendung in einem Kontrollvolumen demonstriert:

[4] Mit Drossel wird in diesem Fall ein beliebiges Element bezeichnet, in dem Druckabfall oder -erhöhung berechnet werden

Stoff als Komponente	Stoff als eine der Elternklassen

partial model CVolume1
  replaceable class
    Medium=Fluid_ph;
 	
    Medium fluid;
  equation
  der(fluid.p) = ...;
  der(fluid.h) = ...;
end CVolume1;
	partial model CVolume2
	  replaceable class
	    Medium=Fluid_ph;
	  replaceable class
	    States=States_ph;
	  extends Medium;
	  extends States;
	  // States hat Gleichungen
	  // für die Zustände
	end CVolume2;

Abgeleitete Modelle für Wasser/Dampf	

model WaterVolume1
  extends CVolume1(
    redeclare model
    Medium = IF97_ph);
    connect(fluid.T,T);
    connect(fluid.d,d);
end WaterVolume1;
	model WaterVolume2
	  extends CVolume2(
	    redeclare model
	    Medium = IF97_ph);
	
	end WaterVolume2;

Beide Modelle können nicht direkt instantiiert werden, weil die Vorgabeklasse keine Gleichungen für T und d enthält. Der wesentliche Unterschied in der Anwendung ist, daß auf die Variablen der Komponente per Punktnotation zugegriffen werden muß. Die Methode der Kombination von Klassenparametern und Mehrfachvererbung bietet dazu höhere Flexibilität, weil das einen Stoffmodell hier mit verschiedenen Zustandsmodellen verknüpft werden kann, z. B. für Volumina fester oder veränderlicher Größe. Um diese Klassen zu vervollständigen, werden die abstrakten Basisklassen für ein beliebiges Medium durch die für Wasser nach der IAPWS/IF97 (siehe [13] und Teil 12 dieser Serie) ersetzt.

5.3 Grundelemente und Komponenten

In Tabelle 2 sind die wichtigsten Grundelemente für thermohydraulische Systeme abgebildet. Diese Grundelemente sind über Mehrfachvererbung und Klassenparameter aus primitiven Komponenten zusammengesetzt, die einzeln kein simulierbares Modell darstellen, z. B. Stoffdatenfunktionen oder Druckverlustbeziehungen. Damit sind diese Grundelemente sehr flexibel. Für technisch wichtige Stoffe wie Wasser/Dampf sind abgeleitete Bibliotheken mit festgelegtem Fluid vorhanden.

Die folgenden primitiven Komponenten werden verwendet:

Schnittstellen: Schnittstellen für konvektiven Transport von Reinstoffen und Gemischen sowie Wärmeübergang.

Bilanzgleichungen: Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie und Impuls in den Variablen Druck p, Enthalpie h und Massenstromdichte G.

Stoffdaten: Berechnung aller von den Zuständen abgeleiteten Fluideigenschaften: Temperatur T, Dichte ρ und partielle Ableitungen der Dichte.

Druckänderung: Empirische Gleichungen für den Druckverlust, Pumpen- und Ventilkennlinien.

Wärmeübergang: Empirische Gleichungen für den Wärmeübergang.

Wärmespeicher: Wärmespeicher beschreiben feste Strukturen und Wände, die mit den Strömungselementen in Kontakt sind.

Bis auf die Wärmespeicher enthalten alle Elemente die Strömungsschnittstellen und werden in mehreren Stufen über Mehrfachvererbung zu umfassenderen Modellen zusammengesetzt: Schnittstellen, Bilanzgleichungen und Stoffdaten bilden ein adiabates Kontrollvolumen (Bilanzraum), zusammen mit einem Druckänderungs - und Wärmeübergangselement entsteht ein Strömungskanal eines Wärmeaustauschers.

Jedes thermohydraulische Element der Bibliothek besteht damit mindestens aus folgenden Komponenten:

- 2 oder 3 Strömungsschnittstellen,
- einem Kontrollvolumenelement mit den Erhaltungsgleichungen („Speicher“),
- Gleichungen für Druckänderung („Drossel“).

Dazu kommen thermische Festkörperspeicher und Wärmeübergangsbeziehungen. Die Parametrisierung der Modelle erfolgt über die in Abschnitt 5.1 vorgestellten *Design Patterns*: Bilanzraum, separate Stoffbeschreibung, Kennlinie und Apparate-Parametersatz.

Die Realisierung der *Design Patterns* in Modelica wird am Beispiel der austauschbaren Schnittstellen für Kontrollvolumina und deren Verwendung in einem universell einsetzbaren Pumpenmodell gezeigt.

```
record ThermalProps
  Density d;
  Enthalpy h;
end ThermalProps;

connector FlowPort2Dir_ph
```

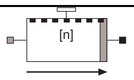
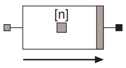
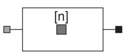
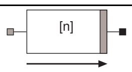
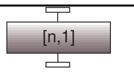
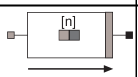
Schnittstellen		
Reinstoffe (Gemische)		Variable — berechnet in Klasse $\dot{m}$ — *States* p — *States* ρ_l, ρ_r — *Medium* h_l, h_r — *States* $(C[:]_l, C[:]_r)$ — *States*
Wärme-übergang		Variable — berechnet in Klasse $\dot{q}$ — *HeatTransfer* T — *HeatStore*
Grundelemente		
Erhaltungs-gleichungen		$\frac{dp}{dt} = \left(\frac{\partial p}{\partial m}\right)_{e,V} \Delta\dot{m} + \left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)_{m,V} \Delta\dot{e}$ $\frac{dh}{dt} = \left(\frac{\partial h}{\partial m}\right)_{e,V} \Delta\dot{m} + \left(\frac{\partial h}{\partial e}\right)_{m,V} \Delta\dot{e}$ $\frac{dm}{dt} = \frac{1}{\Delta z}\left(\dot{I}_1 - \dot{I}_2 + \mathbf{F}_g + \mathbf{F}_p + \mathbf{F}_s\right)$
Stoffeigen-schaften		$\rho = f(p,h)$ $\left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_h = f(p,h)$ $T = f(p,h)$ $\left(\frac{\partial \rho}{\partial h}\right)_p = f(p,h)$
Druck-verlust		$\Delta p_{Reibung} = f(\dot{m}, \xi, \rho)$
Wärme-speicher		$mc_p \frac{dT}{dt} = \dot{q}_1 + \dot{q}_2$
adiabates Kontroll-volumen		Zusammengesetzt aus: Erhaltungsgleichungen Stoffeigenschaften

Tabelle 2: Auswahl aus der Bibliothek von Thermohydraulik-Basiselementen.

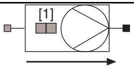
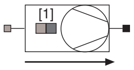
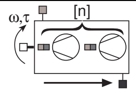
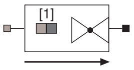
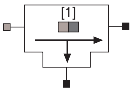
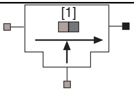
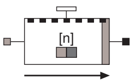
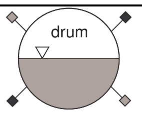
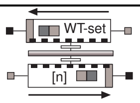
Komponenten		
Pumpe		$\Delta p = f(n, \dot{V})$
Kompressor		$\Delta p = f(n, \dot{V})$
mehrstufige Turbine		$\Delta p[i] = f(n, \dot{m}[i])$
Ventil		$\Delta p = f(A, \Delta p, \dot{V})$
T-Ventil 1		$\Delta p = f(\Delta p_0, \dot{V}_1^0, \dot{V}_2^0)$
T-Ventil 2		$\Delta p = f(\Delta p_0, \dot{V}_0)$
Rohr		Zusammengesetzt aus: n-diskres Kontrollvolumen Druckverlust Wärmeübergang
Dampf-trommel		Zusammengesetzt aus: 2-Phasen Stoffeigenschaften Trommelmodell 4 Schnittstellen
Gegenstrom Wärme-austauscher		Zusammengesetzt aus: 2-Rohren Wärmespeicher WT-Parametersatz

Tabelle 3: Auswahl aus der Bibliothek von Thermohydraulik-Komponenten.

```
  flow MassFlow mdot;
  Pressure p;
  ThermalProps up,down;
end NFlowPort2Dir_ph;

connector NFlowPort2Dir_ph
  extends FlowPort2Dir_ph;
  parameter Integer n;
  ChemicalProps Cup(n), Cdown(n);
end NFlowPort2Dir_ph;

partial model FlowTwoPort
  replaceable connec-
tor Ports=FlowPort2Dir_ph;
  Ports in,out;
end FlowTwoPort;

model BaseCV_ph
  extends  FlowTwoPort;
  ... // Massen-, Enerie-, Impulserhaltung
end BaseCV_ph;

model NFlowCV_ph
  extends BaseCV_ph;
  redeclare connector Ports=NFlowPort2Dir_ph;
  ... //Gleichungen für chemi-
sche Zusammensetzung
end  NFlowCV_ph;
```

Wird das einfachste Modell eines Kontrollvolumens in den Zustandsvariablen p und h als Basisklasse für Pumpen benutzt, hier BaseCV_ph, kann in abgeleiteten Klassen ein komplexeres, abgeleitetes Kontrollvolumen benutzt werden, daß z. B. auch für Gemische veränderlicher Zusammensetzung gültig ist. Die Schnittstellen, *FlowPort2Dir_ph* für Reinstoffe und *NFlowPort2Dir_ph* für Gemische sind Bestandteil des Kontrollvolumens und werden automatisch mit ausgetauscht.

```
model GenericPump
  replaceable model CV=BaseCV_ph;
  extends CV;
  replaceable model PumpEq=PumpEq1;
  extends Pumpeq;
end GenericPump;

model PumpEqMix
  extends PumpEq1;
  redeclare model Ports=NFlowPort2Dir_ph;
end PumpEqMix;

model MixPump
  extends GenericPump;
  redeclare CV=NFlowCV_ph;
  redeclare PumpEq=PumpEqMix;
end MixPump;
```

Die Gleichungen, die die Pumpenkennlinien implementieren, sind ebenfalls austauschbar. Sie enthalten die gleichen Schnittstellen wie die Kontrollvolumenklassen. Durch die Mehrfachvererbung „verschmelzen“ diese zwei Sätze von Schnittstellen zu einem, d. h. daß die Schnittstellen der Teilmodelle PumpEqMix und NFlowCV_ph identisch sein müssen[5].

Diese Art der Anwendung von Mehrfachvererbung bietet hohe Flexibilität, denn die Art des transportierten Mediums und die Pumpenkennlinie sind unabhängig voneinander wählbar, sie kann aber auch zu schwer erklärbaren Fehlermeldungen führen. Wird z. B. in der Klasse *MixPump* vergessen, *PumpEq* zu redeklarieren, kollidieren die unterschiedlichen Schnittstellen für die Elternklassen *CV* und *PumpEq*. Für normale Anwender läßt sich dieses Problem durch fertige, in sich konsistente Teilbibliotheken umgehen. Die starke gegenseitige Abhängigkeit der Modelle wird jedoch in klar gegliederten und gut dokumentierten Bibliotheken mehr als aufgewogen durch sehr kompakten, nirgends redundanten Programmcode. Die Thermohydraulik-Bibliothek ist ab Frühjahr 2000 von der Homepage der Modelica Gruppe [10] kostenlos verfügbar.

5.4 Beispiel: ein Kältemittel Kreislaufprozess

Als Beispiel für die Anwendungsmöglichkeiten der Bibliothek wird ein Rankine-Kreislauf eines Kühlschranks vorgestellt. Die Schaltung des Modells und die Zustandsänderungen im $log(p) - h$ Diagramm zeigt das Bild 3 . Teilmodelle für Verdampfer und Kondensator können auf der Kühlmittelseite je nach Bedarf als konzentriert oder verteilt gewählt werden, auf der Raum-, bzw. Kühllastseite sind konzentrierte Parameter immer ausreichend. Bis auf das Kapillarrohr, das vereinfacht auch über ein Drosselventil beschrieben werden kann und, falls die Simulation deutlich beschleunigt werden soll, die Stoffwerte des Kältemittels, sind alle anderen

5 das Modell PumpEq1 implementiert die Pumpenkennlinie und ist hier nicht gezeigt.

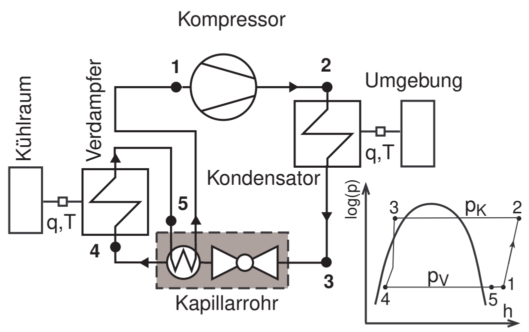


Bild 3: Einfaches Modell eines Kühlschranks

Modellteile Bestandteile der Standardbibliothek: Wärmeaustauscher, thermische Speicher (Umgebung, Kühlraum) und Kompressor. Für Verdampfer und Kondensator muß ein angepaßter Apparate-Parametersatz modelliert werden, der die Materialien, Flächen und Volumina dieser Komponenten auf die Parameter des Standard-Einrohrmodells eines Wärmeaustauschers der Bibliothek projiziert. Für die Stoffdaten von Kältemitteln wird über die Möglichkeit, in Modelica externe Funktionen in FORTRAN77 oder C zu benutzen, eine Schnittstelle zu den REFPROP-Routinen von NIST [7] verwendet. Dies ist meist die einzige Anpassungsarbeit an eine nicht vorhandene Variante eines Apparates. Dies demonstriert das wesentliche Ziel der Modelica Bibliotheken: Modelle so zu strukturieren, daß Anpassungs- und Wartungsarbeiten minimiert werden und daß dabei nicht in bestehenden, getesteten Programmcode eingegriffen werden muß.

Literatur

[1] BAEHR, HANS DIETER: *Thermodynamik*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 9. Auflage, 1996.

[2] BAEHR, H. D. und CH. DIEDERICHSEN: *Berechnungsgleichungen für Enthalpie und Entropie der Komponenten von Luft und Verbrennungsgasen*. BWK, 40(1/2):30–33, 1988.

[3] CULLIMORE, B., S. G. RING, R. G. GOBLE und C. L. JENSEN: *Sinda/Fluint Users Manual for Version 3.2*. Cullimore and Ring Technologies, Inc., Littleton, Colorado, 1996.

[4] GAMMA, ERICH, RICHARD HELM, RALPH JOHNSON und JOHN VLISSIDES: *Design Patterns*. Addison-Wesley, 1995.

[5] JUSLIN, K.: *Experience on mechanistic modelling of industrial processes with APROS*. Mathametics and Computers in Simulation, 39:505–511, 1995.

[6] KOLEV, NIKOLAY I.: *Transiente Zweiphasen-Strömung*. Springer-Verlag, Berlin, 1986.

[7] MCLINDEN, MARK O., SANFORD A. KLEIN, ERIC W. LEMMON und ADELE P. PESKIN: *NIST Thermodynamic and Transport Properties of Refrigerants and Refrigerant Mixtures—REFPROP, Version 6.0*. U. S. Department of Commerce, January 1998.

[8] MÜHLTHALER, GEORG: *Anwendung objektorientierter Simulationssprachen zur Modellierung von Kraftwerkskomponenten*. Doktorarbeit, Technische Universität Hamburg Harburg, 1999.

[9] NILSSON, BERNT: *Object-Oriented Modeling of Chemical Processes*. Doktorarbeit, August 1993.

[10] PACKAGE, MODELICA: *Homepage: http://www.modelica.org/*.

[11] PATANKAR, SUHAS V.: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corporation, 1980.

[12] REID, ROBERT C., JOHN M. PRAUSNITZ und BRUCE E. POLING: *The Properties of Gases and Liquids*. Mc Graw Hill, Boston, Massachusetts, 1987.

[13] WAGNER, W. und A. KRUSE: *Properties of water and steam; the industrial standard IAPWS-IF97 for the thermodynamic properties and supplementary equations for other properties*. Springer, Berlin, 1998.