Die approbierte Originalversion dieser Diplom-/ Masterarbeit ist in der Hauptbibliothek der Technischen Universität Wien aufgestellt und zugänglich.

http://www.ub.tuwien.ac.at

The approved original version of this diploma or master thesis is available at the main library of the Vienna University of Technology.

http://www.ub.tuwien.ac.at/eng

DIPLOMARBEIT

Approximation der Zustandsgleichungen von Wasser und Wasserdampf

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades
eines Diplom-Ingenieurs

unter der Leitung von
Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. René Hofmann
E302 Institut für Energietechnik und Thermodynamik

eingereicht an der Technischen Universität Wien
Fakultät für Maschinenwesen und Betriebswissenschaften

von

Paul Linzner, BSc BSc (WU)

Edelweißstraße 15
4072 Alkoven

Wien, im Jänner 2017

Paul Linzner

Vorwort

Das vorliegende Werk ist im Zuge meines Masterstudiums Maschinenbau an der Technischen Universität Wien entstanden. Dieses soll nicht nur als Dokumentation der von mir erarbeiteten Ansätze zur Approximation der Zustandsgrößen von Wasser und Wasserdampf dienen, sondern soll vielmehr auch allgemeine Einblicke in die Thematik der relevanten Größen liefern und einfache Beispiele zur Verwendung dieser aufzeigen.

Die eigentliche Idee zu dieser Arbeit stammt von Herrn Dipl.-Math. Thomas Will, Head of Steam Generation bei Steinmüller Engineering GmbH, welcher grundlegende Überlegungen zu den Approximationen an mich weitergab, um diese in Folge genauer zu untersuchen. Für das von ihm entgegengebrachte Vertrauen und seine Unterstützung möchte ich mich herzlichst bedanken.

Ausgangspunkt für die im Zuge meiner Arbeit ausgeführten Berechnungen ist die von der International Association for the Porperties of Water and Steam (IAPWS) veröffentlichte Formulierung IAPWS-IF97, welche in Industriekreisen als Standard für die Berechnung der Zustandsgrößen von Wasser und Wasserdampf gilt. Die Übersichtlichkeit und Nachvollziehbarkeit der IAPWS-IF97 lieferten das notwendige Fundament meiner Diplomarbeit. Dafür gilt allen an zugehörigen Veröffentlichungen beteiligten Personen mein größtes Lob.

Das im letzten Abschnitt des Werkes präsentierte Beispiel baut auf einer Veröffentlichung des FDBR - Fachverband Dampfkessel-, Behälter- und Rohrleitungsbau e.V. auf, die mir zur Verfügung gestellt wurde. Dafür äußere ich meinen Dank.

Im Entstehungsprozess einer solchen Arbeit ist man natürlich auch auf entsprechende Betreuung angewiesen. Meinem Betreuer, Herrn Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. René Hofmann, möchte ich auf diesem Wege meinen aufrichtigsten Dank für seine Begleitung aussprechen. Sowohl sein fachliches Wissen als auch sein freundschaftliches, ehrliches Zugehen auf mich waren entscheidende Elemente für das Gelingen dieser Arbeit. Darüber hinaus möchte ich mich auch bei meinem Zweitprüfer, Herrn Ao.Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Heimo Walter, für all seine Hilfestellungen während des Erstellens der Diplomarbeit bedanken.

Weiters bedanke ich mich bei meinen Eltern, deren lobende Worte in Erfolgsmomenten und Aufmunterungen in schwierigen Phasen in den vergangenen Jahren meiner Studienzeit in Wien von unschätzbarem Wert waren. Zu guter Letzt richte ich an meine beiden Schwestern und meinen Firmpaten Dankesworte für deren Unterstützung.

Kurzfassung

Hauptaspekt dieser Arbeit ist die Definition von Approximationsansätzen zur Ermittlung von Zustandsgrößen von Wasser und Wasserdampf. Bevor diese formuliert und genau untersucht werden, liefert der erste Teil das eigentliche Fundament zur Thematik der Zustandsgrößen. Ausgehend von einem völlig alltäglichen Verständnis zur Thermodynamik werden anhand des ersten und zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik wichtige, später in den Näherungsfunktionen zu verwendende Zustandsgrößen erarbeitet. Darauf aufbauend wird das Konzept typischer Fundamentalgleichungen unter besonderer Berücksichtigung der von der International Association for the Properties of Water and Steam (IAPWS) veröffentlichten Formulierung IAPWS-IF97 erläutert. Unter Verwendung dieses Industrie-Standards behandelt der zweite Teil dieses Werks mögliche Ansätze zur Approximation der Zustandsgrößen von Wasser und Wasserdampf sowohl für das Einphasengebiet als auch für das Zweiphasengebiet. Nach der Definition dieser entweder linearen oder quadratischen Näherungsfunktionen folgen Untersuchungen hinsichtlich auftretender Fehler bei Variation der für die jeweilige Approximation charakteristischen Parameter. Zum Abschluss wird ein einfaches Beispiel zur Verwendung der erarbeiteten Ansätze präsentiert.

Abstract

Main aspect of this thesis is the definition of approximation algorithms for the determination of state functions of water and steam. Before formulating and scrutinizing these algorithms, the first part provides the basic foundations of the field of thermodynamic state functions. Based on a common understanding of thermodynamics, important state functions, which are carried out by applying the first and the second law of thermodynamics, are used later on, in the approximations. Furthermore, the concept of fundamental thermodynamic relations is explained, especially considering the formulation IAPWS-IF97 published by the International Association for the Properties of Water and Steam (IAPWS). By using this industrial standard, the second part of the thesis deals with possible formulations for the approximation of the state functions of water and steam not only for the single-phase region, but also for the two-phase region. After defining these either linear or quadratic approximation functions the errors which occur when the respective characteristic parameters of each algorithm vary are investigated. Finally, a basic example for the use of the developed approaches is presented.

Inhaltsverzeichnis

1 Grundlegendes aus der Thermodynamik 1
1.1 Der 1. Hauptsatz der Thermodynamik . . . 1
1.1.1 Der Energiebegriff aus der Mechanik . . . 1
1.1.2 Die innere Energie zur Berechnung der Gesamtenergie . . . 2
1.1.3 Die Energiebilanz bei geschlossenen Systemen . . . 4
1.1.4 Die Energiebilanz eines Kontrollraumes - Enthalpie . . . 5
1.1.5 Die Energiebilanz für stationäre Fließprozesse . . . 7
1.2 Der 2. Hauptsatz der Thermodynamik . . . 8
1.2.1 Zur Reversibiltät von Prozessen . . . 8
1.2.2 Die Entropie und die thermodynamische Temperatur . . . 8
1.2.3 Die Entropiebilanz bei geschlossenen Systemen . . . 9
1.2.4 Die Entropiebilanz eines Kontrollraumes . . . 11
1.2.5 Die Entropiebilanz für stationäre Fließprozesse . . . 11
1.3 Fundamentalgleichungen . . . 12
1.3.1 Die vollständige Beschreibung einer Phase . . . 12
1.3.2 Spezielle Fundamentalgleichungen . . . 15
1.3.3 Fundamentalgleichungen der IAPWS-IF97 . . . 20

2 Approximation von Zustandsgleichungen 23
2.1 Problemstellung . . . 24
2.2 Literatur zur effizienten Berechnung der Zustandsgrößen . . . 25
2.3 Lokale Approximation der Zustandsgleichungen . . . 26
2.4 Lineare Approximation im Zweiphasengebiet . . . 26
2.4.1 Mathematischer Ansatz . . . 26
2.4.2 Einfache Auswertungen . . . 30
2.5 Quadratische Approximation im Zweiphasengebiet . . . 34
2.5.1 Mathematischer Ansatz . . . 34
2.5.2 Einfache Auswertungen . . . 39
2.6 Fehleranalyse im Zweiphasengebiet . . . 43
2.6.1 Sensitivitätsanalyse . . . 43
2.6.2 Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung . . . 48
2.7 Lineare Approximation im Einphasengebiet . . . 56
2.7.1 Mathematischer Ansatz . . . 56
2.7.2 Einfache Auswertungen . . . 60
2.8 Fehleranalyse im Einphasengebiet - 'Fehlerlandkarten' . . . 66
2.9 Anwendungsbeispiel Dampftrommel . . . 77

2.9.1 Einleitung 77
2.9.2 Erhaltungsgleichungen 78
2.9.3 Problemstellung 80
2.9.4 Ergebnisse 82

Anhang - Beispiele zu Kapitel 1 **87**
Beispiel 1 87
Beispiel 2 88
Beispiel 3 89
Beispiel 4 91
Beispiel 5 92

Anhang - Programmcode **93**

Abbildungsverzeichnis **100**

Tabellenverzeichnis **104**

Literaturverzeichnis **105**

In den folgenden Tabellen bedeutet das Symbol '∼' im Feld für die Einheit, dass diese von der zu nähernden Zustandsgröße abhängig ist. In Abschnitt 2.9 vorkommende Formelzeichen werden innerhalb des Abschnittes gesondert erläutert.

Formelzeichen

Symbol	Einheit	Bedeutung
	Lateinische Formelzeichen (I/II)	
a	$\sim$	diverse Konstanten von Näherungsfunktionen
A	$-$	Konstante einer Näherungsfunktion
b	$\sim$	diverse Konstanten von Näherungsfunktionen
B	m^3/kg	Konstante einer Näherungsfunktion
c	$\sim$	diverse Konstanten von Näherungsfunktionen
c_p	$J/(kg\,K)$	spezifische isobare Wärmekapazität
c_v	$J/(kg\,K)$	spezifische isochore Wärmekapazität
C	J/kg	Konstante einer Näherungsfunktion
D	$J/(kg\,K)$	Konstante einer Näherungsfunktion
E	J	Energie
E	m^3/kg	Konstante einer Näherungsfunktion
f	J/kg	spezifische freie Energie
f	$\sim$	Funktion/ Funktionswert
F	J/kg	Konstante einer Näherungsfunktion
g	m/s^2	Erdbeschleunigung
g	J/kg	spezifische freie Enthalpie
G	$\sim$	diverse Konstanten von Näherungsfunktionen
h	J/kg	spezifische Enthalpie
H	$\sim$	diverse Konstanten von Näherungsfunktionen
i	$-$	(Summations-)Index
m	kg	Masse
$\dot{m}$	kg/s	Massenstrom
n	$-$	Endwert Summationsindex
p	Pa	Druck
P	W	Leistung
q	J/kg	spezifische Wärme
Q	J	Wärme
$\dot{Q}$	W	Wärmestrom
$\boldsymbol{r}$	m	Lagevektor
$\dot{\boldsymbol{r}}$	m/s	Geschwindigkeitsvektor
R	$J/(kg\,K)$	spezifische Gaskonstante
s	$J/(kg\,K)$	spezifische Entropie
S	J/K	Entropie
$\dot{S}$	$J/(K\,s)$	Entropiestrom

Symbol	Einheit	Bedeutung
		Lateinische Formelzeichen (II/II)
t	s	Zeit
T	K	Absoluttemperatur
u	J/kg	spezifische innere Energie
u	J	innere Energie
v	m^3/kg	spezifisches Volumen
V	m^3	Volumen
W	J	Arbeit
x	$-$	Dampfziffer
x	$\sim$	unabhängige Variable
$\boldsymbol{X}$	$\sim$	Wertematrix
		Griechische Formelzeichen
β	$-$	Füllgrad
γ	$-$	dimensionslose freie Enthalpie
δ	$-$	reduzierte Dichte
Δ	$-/\sim$	Präfix für Abweichung bzw. Abweichung, Differenz
ϵ	$-$	Wert für Abbruchkriterium
λ	$\sim$	diverse Konstanten von Näherungsfunktionen
$\boldsymbol{\lambda}$	$\sim$	diverse Vektoren mit Konstanten von Näherungsfunktionen
ϑ	°C	Celsius-Temperatur
τ	$-$	inverse reduzierte Temperatur
Φ	$-$	dimensionslose freie Energie

Indizes

Index	Bedeutung
	Hochgestellte Indizes
el	Anteil zufolge Transport elektrischer Ladung
nk	nicht konservative Anteile
o	Idealgasanteil
el	Residualanteil
V	Anteil zufolge Volumenänderung
W	Anteil zufolge drehender Welle
$'$	gesättigte Flüssigphase
$''$	gesättigte Dampfphase

Index	Bedeutung
	Tiefgestellte Indizes
0	Größe im Zustand 0
1	Größe im Ausgangszeitpunkt/ Zustand 1
1, 2, 3	1., 2. o. 3. Komponente einer vektoriellen Größe
1, 2, 3, 4	Indizes zur Konstantenunterscheidung
1/2	Größe im Zustand 1/2
2	Größe im Endzeitpunkt/ Zustand 2
12	Übergang Zustand 1 auf Zustand 2
aus	ausströmend
crit	Wert im kritischen Punkt
ein	einströmend
ges	Gesamtwert aller Anteile
*IF*97	Berechnung nach IF97
irr	irreversible Anteile
kin	kinetischer Anteil
Kr	Kontrollraum
max	Maximalwert
n	Näherungswert
pot	potentieller Anteil
Q	Anteil zufolge Wärmestrom
rel	relativer Wert
S	Siedezustand
zul	zulässiger Wert

Kapitel 1

Grundlegendes aus der Thermodynamik

Ziel dieses einleitenden Kapitels ist es, die wichtigsten thermodynamischen Grundlagen für die vorliegende Arbeit aufzubereiten. Dabei wird insbesondere auf eine Hinführung der in der Arbeit relevanten Zustandsgrößen wert gelegt.

Der erste Hauptsatz der Thermodynamik wird dabei helfen, über die Grenzen der Mechanik hinauszudenken und zu einer sehr allgemeinen Formulierung der Energieerhaltung führen. In Abhängigkeit des betrachteten Systems werden mit der inneren Energie und der Enthalpie zwei Zustandsgrößen eingeführt. Mit dem zweiten Hauptsatz werden Aussagen über die Reversibiltät bzw. Irreversibilität von Prozessen möglich gemacht. Dabei wird die Zustandsgröße Entropie von fundamentaler Bedeutung sein.

Als Abschluss dieses Kapitels werden Grundüberlegungen zu Fundamentalgleichungen angestellt. Solche Gleichungen werden herangezogen, um thermodynamische Eigenschaften reiner Stoffe zu beschreiben.

1.1 Der 1. Hauptsatz der Thermodynamik

1.1.1 Der Energiebegriff aus der Mechanik

Bei Energiebetrachtungen von Massepunkten im Sinne der Mechanik sind in konservativen Kraftfeldern zwei Energiebegriffe von essentieller Bedeutung. Einerseits die lageabhängige potentielle Energie $E_{pot}(\boldsymbol{r})$, wobei $\boldsymbol{r}$ den zur Lagebeschreibung der Punktmasse notwendigen Ortsvektor bezeichnet, andererseits die kinetische Energie $E_{kin}(\dot{\boldsymbol{r}})$, die Energie der Bewegung, worin $\dot{\boldsymbol{r}}$ der Geschwindigkeit und somit der zeitlichen Ableitung des Ortsvektors $\boldsymbol{r}$ entspricht [3, S. 46] [14, S. 48]. Die mechanische Gesamtenergie eines Massenpunktes ergibt sich somit zu

$$E_{ges}(\boldsymbol{r}, \dot{\boldsymbol{r}}) = E_{kin}(\dot{\boldsymbol{r}}) + E_{pot}(\boldsymbol{r}), \tag{1.1}$$

wobei insbesondere in konservativen Kraftfeldern $E_{ges}(\boldsymbol{r}, \dot{\boldsymbol{r}}) = const$ gilt [3, S. 46]. Beispiele für Kräfte mit Potenzial sind die Gewichtskraft im Schwerefeld der Erde

oder an Körpern angreifende Kräfte linearer Federn. Die Form der Energieerhaltung aus (1.1) ist aus Sicht der Mechanik nicht von herausragender Bedeutung, da die Formulierung ohne Zusatzannahmen aus dem zweiten Newtonschen Axiom hergeleitet werden kann. Besonders spannend wird das Konzept der Energieerhaltung jedoch bei thermodynamischen Betrachtungen, wie es in folgenden Abschnitten gezeigt wird.
Beim Auftreten von Kräften, die sich nicht durch ein Potenzial herleiten lassen, wie z.B. Reibungskräfte oder Kräfte geschwindigkeitsproportionaler Dämpfungselemente, wird die mechanische Energieerhaltung bei Betrachtung zwischen zwei Zeitpunkten t_1 und t_2 zu

$$\underbrace{E_{kin}(\dot{\boldsymbol{r}}(t_2)) + E_{pot}(\boldsymbol{r}(t_2))}_{E_{ges}(t_2)} = \underbrace{E_{kin}(\dot{\boldsymbol{r}}(t_1)) + E_{pot}(\boldsymbol{r}(t_1))}_{E_{ges}(t_1)} + W_{12}^{nk}, \tag{1.2}$$

mit

$$W_{12}^{nk} = \int_{t_1}^{t_2} \boldsymbol{F}^{nk}(\boldsymbol{r}(t)) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}(t), \tag{1.3}$$

als Arbeit der an der betrachteten Masse angreifenden Kräfte ohne Potenzial [3, S. 46].
Das auf S. 87 präsentierte Beispiel 1 zum freien Fall einer Punktmasse[1] soll die soeben präsentierten Zusammenhänge der mechanischen Energien untermauern und orientiert sich stark an Beispiel 2.1. aus [3].

1.1.2 Die innere Energie zur Berechnung der Gesamtenergie

Will man über den Bewegungszustand eines Körpers hinausgehende Energiebetrachtungen anstellen, so erscheint es einleuchtend, dass die im vorigen Abschnitt behandelten mechanischen Energiebegriffe, kinetische und potentielle Energie, für einen möglichst allumfassenden Gesamtenergiebegriff nicht ausreichend sind.

Eine sich in einem Kochtopf befindliche Wassermasse mit einer Temperatur von $\vartheta_1 = 20°\mathrm{C}$ wird mit einer gleich großen Wassermenge, die sich durch ein höheres Temperaturniveau von $\vartheta_2 = 60°\mathrm{C}$ auszeichnet, verglichen. Ohne der Physik oder im Speziellen der Thermodynamik besonders zugeneigt zu sein, wird man in diesem Fall bei der Bewertung der Gesamtenergien beider Wassermassen nicht um den Begriff der 'Wärme' herumkommen.

Um einem umfassenderen, der Thermodynamik entsprechenden Energieerhaltungsbegriff näher zu kommen, folgt nun die Definition des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik anhand folgender Postulate [3, S. 48]:

[1] Bei Betrachtung der Bewegung einer Punktemasse und nicht verschwindender Winkelgeschwindigkeit, $\boldsymbol{\omega} \neq \boldsymbol{0}$, gilt für den rotatorischen Anteil der kinetischen Energie, $E_{kin,rot} = 0.5\boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{I}\boldsymbol{\omega} = 0$, da alle im Trägheitstensor $\boldsymbol{I}$ auftretenden Trägheits- und Deviationsmomente verschwinden. Infolgedessen muss bei diesem Beispiel nur der translatorische Anteil der kinetischen Energie berücksichtigt werden.

1. Jedem System[2] kann eine Zustandsgröße[3] Energie E_{ges} zugeordnet werden. Kinetische und potentielle Energie, wie wir sie bereits aus Abschnitt 1.1.1 kennen, sind mögliche Bestandteile von E_{ges}.
2. Für Energien gilt ein Erhaltungssatz, sodass die Gesamtenergie E_{ges} eines Systems nur zufolge Energietransport über die Systemgrenzen variiert werden kann.
3. Mögliche Formen dieses Energietransportes sind:
   (a) Verrichten von Arbeit,
   (b) Übergang von Wärme,
   (c) Materietransport.

Wendet man sich der ersten Aussage obiger Postulate zu, so wird zur Beschreibung eines thermodynamischen Systems ein neuer, zusätzlicher Energiebegriff eingeführt. Die Zustandsgröße innere Energie U ist nach den Postulaten des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik definiert als

$$U := E_{ges} - E_{kin} - E_{pot}. \tag{1.4}$$

Bei Betrachtung eines homogenen Bereichs eines Systems mit der Masse m, einer Phase, und einer inneren Energie U wird durch

$$u := U/m \tag{1.5}$$

die spezifische[4] innere Energie definiert.

Neben der thermischen Zustandsgleichung[5] $p = p(v, T)$ erhalten wir für die kalorische Zustandsgleichung mit

$$u = u(T, v) \tag{1.6}$$

ein weiteres Materialgesetz [3, S. 49] [18, S. 39]. Schreibt man für das Materialgesetz aus (1.6) das vollständige Differential

$$\mathrm{d}u = \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_v \mathrm{d}T + \left(\frac{\partial u}{\partial v}\right)_T \mathrm{d}v \tag{1.7}$$

an, so definiert man

$$c_v(T, v) := \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_v \tag{1.8}$$

[2] Als System wird ein zu untersuchender, gegenüber seiner Umgebung klar abgegrenzter Bereich verstanden [9, S. 14].

[3] Zustandsgrößen dienen der Beschreibung des Zustandes eines Systems. Geläufige Bespiele hierfür sind: Druck, Temperatur, Lage und Geschwindigkeit [6, S. 12].

[4] Bei der Summation der entsprechenden Zustandsgrößen aller Teilsysteme eines diese umfassenden Systems erhält man eine extensive Zustandsgröße, welche nach Division durch die Gesamtmasse des Systems als spezifische Zustandsgröße angeschrieben werden kann [9, S. 38].

[5] Diese ist ein Materialgesetz, das einen eindeutigen Zusammenhang zwischen Druck p, spezifischem Volumen v und Absoluttemperatur T eines Fluids beschreibt.

als spezifische isochore Wärmekapazität [3, S. 53] [18, S. 53].

1.1.3 Die Energiebilanz bei geschlossenen Systemen

Mit den bisher erarbeiteten Grundlagen kann bereits die Gesamtenergiebilanzierung für ein geschlossenes System[6] durchgeführt werden. Bei Betrachtung eines geschlossenen Systems zu zwei unterschiedlichen Zeitpunkten t_1 (Anfangszustand 1) und $t_2 = t_1 + \Delta t$ (Endzustand 2) liefert der erste Hauptsatz der Thermodynamik

$$Q_{12} + W_{12} = E_{ges}(t_2) - E_{ges}(t_1), \tag{1.9}$$

worin Q_{12} die in Form von Wärme und W_{12} die als Arbeit dem betrachteten System zugeführten Energien bei einer Prozessführung vom Anfangszustand zum Zeitpunkt t_1 in den Endzustand zur Zeit t_2 bezeichnen [3, S. 55] [6, S. 103]. Für den Sonderfall eines ruhenden geschlossenen Systems vereinfacht sich (1.9) zu

$$Q_{12} + W_{12} = U(t_2) - U(t_1), \tag{1.10}$$

da unter Beachtung von (1.4),

$$E_{pot}(t_1) = E_{pot}(t_2) \quad \text{und} \quad E_{kin}(t_1) = E_{kin}(t_2) = 0$$

$$U(t_2) - U(t_1) = E_{ges}(t_2) - E_{ges}(t_1)$$

gilt.
Der in den beiden Gleichungen (1.9) und (1.10) auftretende Ausdruck W_{12} lässt sich über

$$W_{12} = W_{12}^V + W_{12}^W + W_{12}^{el} \tag{1.11}$$

ermitteln. Darin beschreibt

$$W_{12}^V = -\int_{t_1}^{t_2} p(t)\mathrm{d}V(t) \tag{1.12}$$

die Volumenänderungsarbeit, während W_{12}^W der Wellenarbeit und W_{12}^{el} elektrischer Arbeit entsprechen [3, S. 59ff].
Weiters sei erwähnt, dass (1.10) oftmals auch in spezifischer Form, also massebezogen, angegeben wird und somit zu

$$q_{12} + q_{12} = u(t_2) - u(t_1) \tag{1.13}$$

wird.

In Beispiel 2, S. 88f, wird der erste Hauptsatz der Thermodynamik für ein ruhendes geschlossenes System unter Verwendung expliziter Zahlenwerte angewendet.

[6] Ein geschlossenes System zeichnet sich durch eine für Masse undurchlässige Systemgrenze aus [18, S. 4].

1.1.4 Die Energiebilanz eines Kontrollraumes - Enthalpie

Bisher wurden nur geschlossene Systeme betrachtet. Bei diesen konnte der aus der Mechanik bekannte Energiebegriff um die Anteile Wärme und innere Energie erweitert werden, um zu allgemeineren Energiebilanzen zu gelangen. Diese konnten im Vergleich zur potentiellen Energie im Schwerefeld der Erde und zur kinetischen Energie, welche über grundlegende Axiome der Mechanik begründet sind, nur durch Postulate des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik gewonnen werden. Die nun zu erarbeitende Zustandsgröße Enthalpie gewinnt man durch Bilanzierung bei offenen Systemen[7]. Dies ist gleichbedeutend damit, dass erstmalig der Energietransport auch durch Stoffströme erfolgen kann.

Bei Betrachtung eines ortsfesten Kontrollraumes konstanten Volumens sei dem Ausgangszustand zum Zeitpunkt t_1 eine sich darin befindliche Masse $m(t_1)$ zugeordnet. Nach Verstreichen des Zeitintervalls der Länge Δt bis zum Endzustand zur Zeit t_2 kann dem betreffenden Kontrollraum eine Masse $m(t_2)$ zugeordnet werden. Für diese gilt

$$m(t_2) = m(t_1 + \Delta t) = m(t_1) + \Delta m_{ein}, \tag{1.14}$$

worin Δm_{ein} dem zugeführten Stoffstrom entspricht. Die Anwendung des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik zur energetischen Bewertung bei Übergang vom Ausgangszustand zur Zeit t_1 zum Endzustand, t_2,

$$Q_{12} + W_{12} = E_{ges}(t_2) - E_{ges}(t_1), \tag{1.15}$$

in aus (1.9) bekannter Form, wird insbesondere bei der Berechnung der Ausdrücke für W_{12} und $E_{ges}(t_1)$ große Aufmerksamkeit erfordern. Weiters sei angemerkt, dass bei der Anwendung von (1.15) ein geschlossenes System vorausgesetzt wird. Um diesem Anspruch gerecht zu werden, muss bei der Bilanzierung der Energie im Ausgangszustand

$$E_{ges}(t_1) = E_{Kr}(t_1) + e_{ein}(t_1)\Delta m_{ein} \tag{1.16}$$

gelten. Darin beschreibt $E_{Kr}(t_1)$ die dem Kontrollraum zugeordnete Gesamtenergie zu t_1, während $e_{ein}(t_1)\Delta m_{ein}$ der über einen spezifischen Wert errechneten Gesamtenergie des zuzuführenden Massenstroms entspricht. Dies bedeutet viel mehr, dass sowohl im Ausgangszustand als auch im Endzustand die gleiche Masse bei der Berechnung der Gesamtenergie herangezogen wird. Die spezifische Energie der zuzuführenden Masse Δm_{ein} wird nach (1.4) zu

$$e_{ein}(t_1) = u_{ein}(t_1) + 0.5\dot{\boldsymbol{r}}_{ein}(t_1) \cdot \dot{\boldsymbol{r}}_{ein}(t_1) + g\, r_{3,ein}(t_1). \tag{1.17}$$

Für den Endzustand kann schlicht $E_{ges}(t_2) = E_{Kr}(t_2)$ angeschrieben werden. Die in (1.15) auftretende an der Systemgrenze übertragene Wärme wird bei Einführung des Wärmestromes $\dot{Q}(t)$ zu

$$Q_{12} = \int_{t_1}^{t_2} \dot{Q}(t)\mathrm{d}t. \tag{1.18}$$

[7] Ein offenes System zeichnet sich dadurch aus, dass sowohl Massen als auch Energien über die Systemgrenze transportiert werden können [18, S. 4].

Für den ebenfalls zu bestimmenden Term für die Arbeiten erhält man unter Berücksichtigung der bereits bekannten Anteile in Form von Leistungen

$$W_{12} = \int_{t_1}^{t_2} P^W(t) + P^{el}(t)\mathrm{d}t - \int_{V(t_1)}^{V(t_2)} p_{ein}(t)\mathrm{d}V(t), \tag{1.19}$$

mit $V(t_1) = V_{Kr} + \Delta V_{ein}$ als das um das Volumen der zuzuführenden Masse ergänzte Volumen des Kontrollraumes und $V(t_2) = V_{Kr}$. Unter Verwendung des Zusammenhangs $\Delta V_{ein} = v_{ein}(t_1)\Delta m_{ein}$ liefert die Energiebilanz aus (1.15) bei Beachtung der Zusammenhänge aus (1.16) bis (1.19)

$$\begin{aligned} E_{Kr}(t_2) - E_{Kr}(t_1) = &\int_{t_1}^{t_2} \dot{Q}(t) + P^W(t) + P^{el}(t)\mathrm{d}t \\ &+ \Delta m_{ein}\left(u_{ein} + p_{ein}v_{ein} + \frac{\dot{\boldsymbol{r}}_{ein}^2}{2} + g\, r_{3,ein}\right)(t_1). \end{aligned} \tag{1.20}$$

Ersetzt man nun die dem Ausgangszustand zugeordnete Zeit t_1 durch einen allgemeinen Zeitpunkt $t_1 = t$, wodurch gleichzeitig $t_2 = t + \Delta t$ gilt, und bildet den Differenzialquotienten von (1.20) so entsteht

$$\frac{\mathrm{d}E_{Kr}}{\mathrm{d}t} = \dot{Q}(t) + P^W(t) + P^{el}(t) + \dot{m}_{ein}(t)\left(\underbrace{u_{ein} + p_{ein}v_{ein}}_{h_{ein}} + \frac{\dot{\boldsymbol{r}}_{ein}^2}{2} + g\, r_{3,ein}\right)(t). \tag{1.21}$$

als Gleichung zur Leistungsbilanzierung [3, S. 80]. In völlig nachvollziehbarer Art und Weise, der strikten Anwendung des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik erhält man als neu zu definierende Zustandsgröße

$$h := u + pv, \tag{1.22}$$

die Enthalpie, hier in spezifischer Form.

Wie bereits von der inneren Energie bekannt kann wiederum ein Materialgesetz

$$h = h(T, p) \tag{1.23}$$

angeschrieben werden, welches als kalorische Zustandsgleichung bezeichnet wird [3, S. 88] [6, S. 87]. Die Bildung des vollständigen Differentials der kalorischen Zustandsgleichung liefert

$$\mathrm{d}h = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p \mathrm{d}T + \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_T \mathrm{d}p, \tag{1.24}$$

worin

$$c_p(T, p) := \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p \tag{1.25}$$

die spezifische isobare Wärmekapazität ist [3, S. 88] [18, S. 54]. Zu Gleichung (1.21) für die Leistungsbilanz eines Kontrollraumes sei noch angemerkt, dass diese beim Ein- bzw. Ausströmen mehrerer Massenströme zu

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}E_{Kr}}{\mathrm{d}t} = \dot{Q}(t) + P(t) &+ \sum_{i=1}^{n_{ein}} \dot{m}_{i,ein}(t) \left(h_{i,ein} + \frac{\dot{\boldsymbol{r}}_{i,ein}^2}{2} + g\, r_{i3,ein} \right)(t) \\ &- \sum_{i=1}^{n_{aus}} \dot{m}_{i,aus}(t) \left(h_{i,aus} + \frac{\dot{\boldsymbol{r}}_{i,aus}^2}{2} + g\, r_{i3,aus} \right)(t) \end{aligned} \tag{1.26}$$

mit $P(t) = P^W(t) + P^{el}(t)$ wird.

Als Abschluss dieser Hinführung zum Begriff der Enthalpie kann Beispiel 3, S. 89f, herangezogen werden, welches sich stark an [7] orientiert. Dabei werden die bisher präsentierten Zusammenhänge zur Verwendung des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik bei ein- bzw. ausströmenden Massenströmen anhand eines Dampfspeichers diskutiert. Ein Dampfspeicher wird oftmals eingesetzt, um einen Ausgleich zwischen prozessbedingter Lieferung und tatsächlichem Bedarf an Dampf zu erreichen.

1.1.5 Die Energiebilanz für stationäre Fließprozesse

Die bisher betrachteten Systemkonfigurationen dienten vor allem der Einführung der beiden Zustandsgrößen innere Energie und Enthalpie. Dabei wurde stets der erste Hauptsatz der Thermodynamik zur Bilanzierung von Energien angewendet. Bei der Einführung des Kontrollraumes wurde erkannt, dass bei der Bilanzierung von zu- oder abgeführten Materieströmen die Enthalpie eine Erweiterung der inneren Energie darstellt. In weiterer Folge wird nun der Begriff eines stationären Fließprozesses anhand der Erkenntnisse aus Abschnitt 1.1.4 erläutert.

Setzt man die Gleichheit von zu- und abfließenden Massenströmen, d.h.

$$\sum_{i=1}^{n_{ein}} \dot{m}_{ein}(t) = \sum_{i=1}^{n_{aus}} \dot{m}_{aus}(t) \tag{1.27}$$

voraus, so wird (1.26) mit $\frac{\mathrm{d}E_{Kr}}{\mathrm{d}t} = 0$ zu

$$\begin{aligned}\dot{Q}(t) + P(t) = &\sum_{i=1}^{n_{aus}} \dot{m}_{aus}(t) \left(h_{i,aus} + \frac{\dot{\boldsymbol{r}}_{i,aus}^2}{2} + g\, r_{i3,aus} \right)(t) \\ &- \sum_{i=1}^{n_{ein}} \dot{m}_{ein}(t) \left(h_{i,ein} + \frac{\dot{\boldsymbol{r}}_{i,ein}^2}{2} + g\, r_{i3,ein} \right)(t). \end{aligned} \tag{1.28}$$

Um eine stationäre Betrachtung zu ermöglichen, müssen nicht nur der Energieinhalt des Kontrollraumes zeitlich unabhängig sein sondern auch alle in (1.28) auftretenden Größen. Somit wird im stationären Fall Gleichung (1.28) zu

$$\begin{aligned}\dot{Q} + P = &\sum_{i=1}^{n_{aus}} \dot{m}_{aus} \left(h_{i,aus} + \frac{\dot{\boldsymbol{r}}_{i,aus}^2}{2} + g\, r_{i3,aus} \right) \\ &- \sum_{i=1}^{n_{ein}} \dot{m}_{ein} \left(h_{i,ein} + \frac{\dot{\boldsymbol{r}}_{i,ein}^2}{2} + g\, r_{i3,ein} \right). \end{aligned} \tag{1.29}$$

Durchwandert nur ein stationärer Stoffstrom den betrachteten Kontrollraum, so liefert der Zusammenhang aus (1.27) mit $n_{ein} = n_{aus} = 1$ für diesen Sonderfall

$$\dot{m} = \dot{m}_{ein} = \dot{m}_{aus}. \tag{1.30}$$

Die Leistungsbilanzierung für die stationäre Betrachtung bei Vorhandensein eines einzigen Stoffstromes ergibt sich somit nach Gleichung (1.29) zu

$$\dot{Q} + P = \dot{m} \left[\left(h_{aus} + \frac{\dot{\boldsymbol{r}}_{aus}^2}{2} + g\, r_{3,aus} \right) - \left(h_{ein} + \frac{\dot{\boldsymbol{r}}_{ein}^2}{2} + g\, r_{3,ein} \right) \right]. \tag{1.31}$$

Die soeben gewonnene Gleichung ist in der Energietechnik von besonders großer Bedeutung bei der Berechnung von Leistungsbilanzen einzelner Prozessabschnitte. Als Beispiel kann hierfür ein Dampfkraftprozess herangezogen werden. Die Druckerhöhung in der Speisepumpe, die Wärmezufuhr im Verdampfer, der Entspannungsvorgang in der Dampfturbine und die nachfolgende Kondensation werden jeweils als Prozessabschnitte betrachtet[8]. Für jeden einzelnen Prozessabschnitt kann eine entsprechende Leistungsbilanz angeschrieben werden. Diese Anwendungsbeispiele verdeutlichen die herausragende Bedeutung der über den ersten Hauptsatz der Thermodynamik gewonnenen Zustandsgröße Enthalpie.

1.2 Der 2. Hauptsatz der Thermodynamik

1.2.1 Zur Reversibiltät von Prozessen

Beim Durchlaufen unterschiedlicher Zustandsänderungen einzelner Prozessschritte, spielt die Frage der Umkehrbarkeit eine entscheidende Rolle. Kann die Zustandsänderung von einem Ausgangszustand zum Zeitpunkt t_1 zum Endzustand mit zugehöriger Zeit t_2 auch in umgekehrter Weise erreicht werden?

Der auf den folgenden Seiten erläuterte zweite Hauptsatz der Thermodynamik wird sich diesen Überlegungen widmen. Hauptziel dieser Überlegungen ist es, etwaig durch den ersten Hauptsatz der Thermodynamik begründbare Prozesse hinsichtlich deren Ausführbarkeit einzuschränken, d.h. Irreversibilitäten aufzuzeigen. Im Zuge dessen wird auch eine weitere Zustandsgröße, die Entropie, eingeführt. Die Absoluttemperatur ist dabei von entscheidender Bedeutung.

Vorweg sei erwähnt, dass eine vollständige Umwandlung von mechanischer und elektrischer Energie in Wärme und innere Energie möglich ist. Im Gegensatz dazu ist aufgrund der im zweiten Hauptsatz der Thermodynamik aufgezeigten Unsymmetrie die Energieumwandlung von Wärme und innerer Energie in mechanische und elektrische Energie nur eingeschränkt möglich.

1.2.2 Die Entropie und die thermodynamische Temperatur

Um die Aussagen zur Reversibilität von Prozessen in Zahlen fassen zu können, wird im Folgenden der zweite Hauptsatz der Thermodynamik formuliert und damit ein-

[8] Für eine einfache Erklärung des Dampfkraftprozesses wird auf Kapitel 23.2.3 in [6] verwiesen.

hergehend werden die Zustandsgrößen Entropie und thermodynamische Temperatur eingeführt. Die Postulate des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik lauten wie folgt [3, S. 97]:

1. Jedes System zeichnet sich durch eine extensive Zustandsgröße Entropie S aus.
2. Eine Änderung der Entropie S eines Systems kann durch folgende Phänomene bedingt sein:
   (a) Transport von Wärme über die Systemgrenze
   (b) Transport von Materie über die Systemgrenze
   (c) Erzeugung von Entropie im Systeminneren, welche auf Irreversibilitäten von Prozessen beruht
3. Mit einem Wärmestrom $\dot{Q}$ wandert ein Entropiestrom
$$\dot{S}_Q = \frac{\dot{Q}}{T} \tag{1.32}$$
über die Systemgrenze. Als neu einzuführende Zustandsgröße beschreibt T darin die thermodynamische Temperatur an jener Stelle der Systemgrenze, bei der $\dot{Q}$ diese passiert.
4. Bei reversiblen Prozessen gilt für die im Systeminneren erzeugte Entropie $\Delta S_{irr12} = 0$. Bei allen anderen Prozessen gilt $\Delta S_{irr12} > 0$.

Bei Betrachtung eines homogenen Bereichs eines Systems mit der Masse m, einer Phase, und einer Entropie S aus den Postulaten des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik wird durch

$$s := S/m \tag{1.33}$$

die spezifische Entropie definiert. Als kanonische Zustandsgleichung wird der Zusammenhang

$$s = s(u, v) \tag{1.34}$$

bezeichnet[9] [3, S. 126] [18, S. 39]. Die Zustandsgröße Entropie ist zugegebenermaßen schwer 'greifbar'. Die Grundüberlegungen zur Reversibilität von Prozessen sollte jedoch stets im Hinterkopf behalten werden und dabei mit dem Konzept zur Entropieproduktion im Systeminneren verknüpft bleiben.

1.2.3 Die Entropiebilanz bei geschlossenen Systemen

Bei der Behandlung von geschlossenen Systemen ist kein durch Materietransport bedingter Entropiestrom zu berücksichtigen. Einem System wird im Anfangszustand zum Zeitpunkt t_1 eine Entropie $S(t_1)$ zugeordnet. Zur Zeit t_2, dem Endzustand, besitzt dasselbe System eine Entropie $S(t_2)$. Die zeitliche Dauer des Überganges

[9] Jeder Zusammenhang zwischen den Zustandsgrößen s, u und v wird nach Gibbs als Fundamentalgleichung bezeichnet. Nähere Erläuterungen dazu folgen in Abschnitt 1.3

vom Anfangs- in den Endzustand sei durch Δt gegeben, d.h. $t_2 = t_1 + \Delta t$. Wendet man sich den Punkten 2.(a) und 2.(c) aus den Postulaten aus Abschnitt 1.2.2 zu, so wird von t_1 ausgehend im Zeitintervall Δt eine durch einen Wärmestrom bedingte Entropie ΔS_{Q12} über die Systemgrenze transportiert und im Systeminneren eine Entropie ΔS_{irr12} zufolge Irreversibilitäten produziert. Eine Bilanz dieser Entropien liefert

$$S(t_2) - S(t_1) = \Delta S_{Q12} + \Delta S_{12irr}. \tag{1.35}$$

Bei Bildung des Differenzialquotienten und Ersetzen des Anfangszustandes durch einen zeitlich beliebig zu wählenden Zustand, $t_1 = t$, erhält man für die in Gleichung (1.35) angeschriebene Entropiebilanz

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{S(t + \Delta t) - S(t)}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta S_{Q12} + \Delta S_{12irr}}{\Delta t}. \tag{1.36}$$

Für die rechte Seite des Zusammenhanges aus (1.36) definiert man einen Entropietransportstrom

$$\dot{S}_Q(t) := \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta S_{Q12}}{\Delta t} \tag{1.37}$$

und einen Entropieproduktionsstrom

$$\dot{S}_{irr}(t) := \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta S_{irr12}}{\Delta t}. \tag{1.38}$$

Für ein geschlossenes System ergibt dies die Entropiebilanzgleichung

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = \dot{S}_Q(t) + \dot{S}_{irr}(t), \tag{1.39}$$

welche mit der Beziehung aus (1.32) bei Vorhandensein eines einzigen Wärmestromes $\dot{Q}(t)$ zu

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = \frac{\dot{Q}(t)}{T(t)} + \dot{S}_{irr}(t). \tag{1.40}$$

wird. Bei einem System mit n_Q unterschiedlichen Wärmeströmen, die die Systemgrenze überschreiten, erhält man für die Entropiebilanz

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = \sum_{i=1}^{n_Q} \frac{\dot{Q}_i(t)}{T_i(t)} + \dot{S}_{irr}(t). \tag{1.41}$$

Für den Entropieproduktionsstrom aus (1.38) gilt nach den Postulaten des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik stets die Beziehung

$$\dot{S}_{irr}(t) \geq 0, \tag{1.42}$$

wobei sich der Grenzfall $\dot{S}_{irr}(t) = 0$ im bei reversiblen Prozessen ergibt.

Auf S. 91 kommt es zur Erläuterung eines einfachen Beispiels, bei dem ein Entropiebilanz aufgestellt werden muss. Weiters werden Überlegungen zur Reversibilität des betrachteten Prozesses angestellt.

1.2.4 Die Entropiebilanz eines Kontrollraumes

Im letzten Abschnitt wurden nur Entropiebilanzen geschlossener Systeme betrachtet. Liegt jedoch ein System vor, dem im Zuge eines Prozesses Masse zu- oder abgeführt wird, so ist die Entropiebilanz nach dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik um den Entropietransport der Stoffströme zu erweitern.

Bei Betrachtung eines ortsfesten Kontrollraumes konstanten Volumens sei dem Ausgangszustand zum Zeitpunkt t_1 eine Entropie $S_{Kr}(t_1)$ zugeordnet. Während des Verstreichens des Zeitintervalls mit einer zeitlichen Dauer Δt strömt in den Kontrollraum eine Masse Δm_{ein} ein. Um eine Entropiebilanz für ein geschlossen gedachtes System, eines mit unveränderlichem Masseinhalt aufzustellen, errechnet sich im Ausgangszustand die Gesamtentropie mit

$$S_{ges}(t_1) = S_{Kr}(t_1) + s_{ein}(t_1)\Delta m_{ein}. \tag{1.43}$$

Für den Endzustand zum Zeitpunkt $t_2 = t_1 + \Delta t$ gilt für die Gesamtentropie $S_{ges}(t_2) = S_{Kr}(t_2)$, da der Kontrollraum genauso gewählt wird, dass dieser im Endzustand die relevante Masse des geschlossen gedachten Systems inkludiert. Ersetzt man nun die dem Ausgangszustand zugeordnete Zeit t_1 durch einen allgemeinen Zeitpunkt $t_1 = t$, wodurch gleichzeitig $t_2 = t + \Delta t$ gilt, und bildet den Differenzialquotieten, wie auf der rechten Seite von Gleichung (1.36) gefordert, so entsteht

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}S_{ges}}{\mathrm{d}t} &= \lim_{\Delta t\to 0}\frac{S_{ges}(t+\Delta t) - S_{ges}(t)}{\Delta t} \\ &= \lim_{\Delta t\to 0}\frac{S_{Kr}(t+\Delta t) - S_{Kr}(t)}{\Delta t} - s_{ein}\lim_{\Delta t\to 0}\frac{\Delta m_{ein}}{\Delta t}\end{aligned} \tag{1.44}$$

als eine Gleichung zur Entropiebilanzierung. Nach Gleichung (1.39) erhält man für die Entropiebilanz eines Kontrollraumes

$$\frac{\mathrm{d}S_{kr}}{\mathrm{d}t} = s_{ein}(t)\dot{m}_{ein}(t) + \dot{S}_Q(t) + \dot{S}_{irr}(t), \tag{1.45}$$

wobei der Term $s_{ein}(t)\dot{m}_{ein}(t)$ den Entropietransport in das Kontrollvolumen zufolge eines zugeführten Massenstromes beschreibt. Beim Ein- bzw. Ausströmen mehrerer Massenströme wird Gleichung (1.45) zu

$$\frac{\mathrm{d}S_{Kr}}{\mathrm{d}t} = \sum_{i=1}^{n_{ein}} \dot{m}_{ein}(t)s_{i,ein}(t) - \sum_{i=1}^{n_{aus}} \dot{m}_{aus}(t)s_{i,aus}(t) + \dot{S}_Q(t) + \dot{S}_{irr}(t). \tag{1.46}$$

1.2.5 Die Entropiebilanz für stationäre Fließprozesse

Im letzten Abschnitt zur Bilanzierung der Entropie wurden instationäre Prozesse behandelt. Die Entropiebilanz aus (1.46) beinhaltet natürlich auch den Sonderfall eines stationären Prozess für den $\frac{\mathrm{d}S_{Kr}}{\mathrm{d}t} = 0$ gilt. Das stationäre Verhalten zeichnet sich auch dadurch aus, dass die unabhängige Variable Zeit, t, auch zu vernachlässigen ist, da der Zeitpunkt der Betrachtung keine Rolle spielt. Die Berücksichtigung der

soeben erwähnten Begebenheiten bei Vorliegen eines stationären Prozesses lässt die Entropiebilanz aus Gleichung (1.46) zu

$$\sum_{i=1}^{n_{ein}} \dot{m}_{ein} s_{i,ein} - \sum_{i=1}^{n_{aus}} \dot{m}_{aus} s_{i,aus} + \dot{S}_Q + \dot{S}_{irr} = 0 \tag{1.47}$$

werden. Durchfließt nur ein einziger Stoffstrom den Kontrollraum, d.h. $n_{ein} = n_{aus} = 1$, so vereinfacht sich mit

$$\dot{m} = \dot{m}_{ein} = \dot{m}_{aus}. \tag{1.48}$$

die Entropiebilanz aus Gleichung (1.47) zu

$$\dot{m}(s_{aus} - s_{ein}) = \dot{S}_Q + \dot{S}_{irr}. \tag{1.49}$$

Beispiel 5 auf S. 92 liefert einen Einblick in die Entropiebilanzierung von stationären Fließprozessen.

1.3 Fundamentalgleichungen

Bisher bediente man sich den Postulaten des ersten und des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik, um an die Definitionen der Zustandsgrößen innere Energie u, Enthalpie h und Entropie s zu gelangen. Die genaueren Zusammenhänge zwischen der thermodynamischen Temperatur T, dem Druck p, dem spezifischen Volumen v und den eben genannten Zustandsgrößen werden in den folgenden Abschnitten präsentiert.

1.3.1 Die vollständige Beschreibung einer Phase

Um eine Phase aus thermodynamischer Sicht vollständig beschreiben zu können, werden drei Gleichungen benötigt. Diese drei Gleichungen sind durch

1. die thermische Zustandsgleichung $p = p(T, v)$,
2. die kalorische Zustandsgleichung aus (1.6), $u = u(T, v)$, und
3. die Entropie-Zustandsgleichung $s = s(T, v)$

gegeben. [3, S. 137]

Die aus dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik gewonnene kanonische Zustandsgleichung (1.34), $s = s(u, v)$, liefert als Fundamentalgleichung einer Phase eine Vereinigung der oben genannten Zustandsgleichungen [14, S. 176]. Dies bedeutet, dass die kanonische Zustandsgleichung, sofern aus dieser die drei materialbeschreibenden Zustandsgleichungen abgeleitet werden können, ebenfalls alle zur vollständigen Beschreibung einer Phase notwendigen Informationen enthält. Die soeben erwähnte Äquivalenz soll nun bewiesen werden. Die Beweisführung orientiert sich weitestgehend an [3, S. 137ff].

Entspricht das betrachtete System der Phase eines reinen Stoffes, so können keine

Entropieproduktionsströme $\dot{S}_{irr}$ auftreten [3, S. 25]. Weiters kann der Phase Arbeit in der Form von Volumenänderungsarbeit zu- oder abgeführt werden. Unter diesen Annahmen liefert der erste Hauptsatz der Thermodynamik für ein geschlossenes System in differentieller Form

$$\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t} - p(t)\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}. \tag{1.50}$$

Bestimmt man das Differenzial der Gesamtentropie der Phase nach Gleichung (1.40), wobei wie bereits erläutert $\dot{S}_{irr}(t) = 0$ gilt, so erhält man

$$\mathrm{d}S = \left(\frac{\dot{Q}(t)}{T(t)}\right)\mathrm{d}t. \tag{1.51}$$

Mit dem aus Gleichung (1.50) gewonnenen Ausdruck

$$\dot{Q}(t) = \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} + p(t)\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} \tag{1.52}$$

wird die Entropiebilanz aus Gleichung (1.51) zu

$$\mathrm{d}S = \left(\frac{\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} + p(t)\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t}}{T(t)}\right)\mathrm{d}t. \tag{1.53}$$

Da (1.53) zu jedem beliebigen Zeitpunkt gelten muss und in Folge dessen die Zeit t als unabhängige Variable vernachlässigt werden kann, erhält man für das Differenzial der Entropie

$$\mathrm{d}S = \frac{\mathrm{d}U}{T} + p\frac{\mathrm{d}V}{T}. \tag{1.54}$$

Bezogen auf die Fluidmasse m der Phase im betrachteten System wird Gleichung (1.54) zu

$$\mathrm{d}s = \frac{\mathrm{d}u}{T} + p\frac{\mathrm{d}v}{T}. \tag{1.55}$$

Für das totale Differenzial der spezifischen Enthalpie folgt aus Gleichung (1.22)

$$\mathrm{d}h = \mathrm{d}u + p\mathrm{d}v + v\mathrm{d}p. \tag{1.56}$$

Die Beziehung für das Differenzial der Entropie aus Gleichung (1.55) kann mit dem Zusammenhang (1.56) zu

$$\mathrm{d}s = \frac{\mathrm{d}h}{T} - v\frac{\mathrm{d}p}{T} \tag{1.57}$$

umgeformt werden. Die Existenz der Umkehrfunktion

$$u = u(s, v) \tag{1.58}$$

der kanonischen Zustandsgleichung aus Gleichung (1.34) sei vorausgesetzt[10]. Nun sollen aus Gleichung (1.58) die drei bereits in der Einleitung dieses Abschnittes

[10]Mit $\left(\frac{\partial s}{\partial u}\right)_v = \frac{1}{T}$ aus (1.55) und $1/T > 0$ aus der Definition des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik ist die Bedingung zur Umkehrbarkeit von (1.34) ohnehin erfüllt.

erwähnten Zustandsgleichungen abgeleitet werden. Aus Gleichung (1.55) wird mit (1.58)

$$T = T(s, v) = \left(\frac{\partial u}{\partial s}\right)_v \tag{1.59}$$

für die thermodynamische Temperatur gewonnen. Die Ableitung von (1.58) nach dem spezifischen Volumen v liefert unter Beachtung von (1.55)

$$p = p(s, v) = \left(\frac{\partial u}{\partial v}\right)_s \tag{1.60}$$

für den Druck. Die Entropie-Zustandsgleichung $s = s(T, v)$ erhält man durch Bildung der Umkehrfunktion von (1.59). Eine Erweiterung des Ausdruckes aus (1.59) für die thermodynamische Temperatur liefert

$$T = \underbrace{\left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_v}_{c_v} \left(\frac{\partial T}{\partial s}\right)_v, \tag{1.61}$$

womit man

$$\left(\frac{\partial T}{\partial s}\right)_v = \frac{T}{c_v} \tag{1.62}$$

erhält. Beziehungen zum Phasengleichgewicht liefern die Stabilitätsbedingung $c_v > 0$ [3, S. 145]. Damit gilt mit der aus dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik gewonnenen Aussage zur thermodynamischen Temperatur $T > 0$ die Beziehung $\frac{T}{c_v} > 0$ in (1.62). Somit wächst die thermodynamische Temperatur T bei festgehaltenem spezifischen Volumen v und steigender spezifischer Entropie s monoton, was die eindeutige Umkehrbarkeit von $T(s, v)$ aus (1.59) zur Entropie-Zustandsgleichung $s = s(T, v)$ gewährleistet.

Zusammenfassung des Beweises:

1. Durch Einsetzen der Entropie-Zustandsgleichung $s = s(T, v)$ in (1.60) für den Druck erhält man mit

   $$p = p(s(v, T), v) = p(T, v) \tag{1.63}$$

   die thermische Zustandsgleichung.

2. Durch Einsetzen der Entropie-Zustandsgleichung $s = s(T, v)$ in (1.58) für die Umkehrfunktion der kanonischen Zustandsgleichung erhält man mit

   $$u = u(s(v, T), v) = u(T, v) \tag{1.64}$$

   die kalorische Zustandsgleichung.

3. Durch Bildung der Umkehrfunktion von (1.59) für die thermodynamische Temperatur erhält man mit

   $$s = s(v, T) \tag{1.65}$$

   die Entropie-Zustandsgleichung.

1.3.2 Spezielle Fundamentalgleichungen

Weite Teile dieses Abschnittes orientieren sich stark an [3, S. 137ff]. Die im vorigen Abschnitt genauer beleuchtete kanonische Fundamentalgleichung zeichnet sich durch Variablenpaarung innere Energie u und spezifisches Volumen v als unabhängige Variablen aus. Für die Praxis von viel größerer Bedeutung sind jedoch die Variablenpaare thermodynamische Temperatur T und das spezifische Volumen v bzw. die thermodynamische Temperatur T und der Druck p. Ohne darauf näher einzugehen, liefert eine Legendre-Transformation[11] zwei Zustandsgleichungen für die soeben erwähnten unabhängigen Variablen. Die spezifische Helmholtz-Funktion oder spezifische freie Energie

$$f := f(T, v) = u - Ts \tag{1.66}$$

repräsentiert eine Fundamentalgleichung mit den unabhängigen Variablen T und v und die spezifische Gibbs-Funktion oder spezifische freie Enthalpie

$$g := g(T, p) = h - Ts \tag{1.67}$$

beschreibt eine Fundamentalgleichung mit den unabhängigen Variablen T und p [3, S. 139] [15, S. 522f]. Um zahlreiche Zustandsgrößen aus (1.66) und (1.67) auf recht einfache Weise gewinnen zu können, werden davor noch deren Differenziale benötigt. Das Differenzial der Helmholtz-Funktion aus (1.66) wird mit (1.55) zu

$$\mathrm{d}f = \mathrm{d}u - T\mathrm{d}s - s\mathrm{d}T = \underbrace{T\mathrm{d}s - p\mathrm{d}v}_{\mathrm{d}u \text{ aus } (1.55)} - T\mathrm{d}s - s\mathrm{d}T = -p\mathrm{d}v - s\mathrm{d}T. \tag{1.68}$$

Das Differenzial der Gibbs-Funktion aus (1.67) wird mit (1.57) zu

$$\mathrm{d}g = \mathrm{d}h - T\mathrm{d}s - s\mathrm{d}T = \underbrace{T\mathrm{d}s + v\mathrm{d}p}_{\mathrm{d}h \text{ aus } (1.57)} - T\mathrm{d}s - s\mathrm{d}T = v\mathrm{d}p - s\mathrm{d}T. \tag{1.69}$$

Aus (1.66) werden mit (1.68) die Ausdrücke

$$s(T, v) = -\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_v, \tag{1.70}$$

$$p(T, v) = -\left(\frac{\partial f}{\partial v}\right)_T \text{ und} \tag{1.71}$$

$$u(T, v) = f + Ts = f - T\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_v \tag{1.72}$$

gewonnen. Für die spezifische Enthalpie erhält man bei Anwendung der Helmholtz-Funktion unter Beachtung der Definition dieser Zustandsgröße gemäß (1.22) mit (1.71) und (1.72)

$$h(T, v) = f - T\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_v - v\left(\frac{\partial f}{\partial v}\right)_T. \tag{1.73}$$

[11] Die Legendre-Transformation ist eine Variablentransformation bei der keine Information verloren geht und dabei eindeutig und umkehrbar ist [8, S. 87]. Einen sehr weitreichenden Einblick in die mathematische Struktur der Thermodynamik liefert Kapitel 9 in [8].

Aus (1.67) werden mit (1.69) die Ausdrücke

$$s(T,p) = -\left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_p , \tag{1.74}$$

$$v(T,p) = \left(\frac{\partial g}{\partial p}\right)_T \text{ und} \tag{1.75}$$

$$h(T,p) = g + Ts = g - T\left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_p \tag{1.76}$$

gewonnen. Für die spezifische innere Energie erhält man bei Anwendung der Gibbs-Funktion unter Beachtung von $u = h - pv$ gemäß (1.22) mit (1.75) und (1.76)

$$u(T,p) = g - T\left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_p - p\left(\frac{\partial g}{\partial p}\right)_T . \tag{1.77}$$

Mit der Definition aus (1.8) erhält man unter Beachtung von (1.72)

$$c_v(T,v) = \left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_v \underbrace{-\left(\frac{\partial T}{\partial T}\right)_v \left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_v - T\left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2}\right)_v}_{\frac{\partial}{\partial T}\left(-T\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_v\right)_v} = -T\left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2}\right)_v . \tag{1.78}$$

Mit der Definition aus (1.25) erhält man unter Beachtung von (1.76)

$$c_p(T,p) = \left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_p \underbrace{-\left(\frac{\partial T}{\partial T}\right)_p \left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_p - T\left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2}\right)_p}_{\frac{\partial}{\partial T}\left(-T\left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_p\right)_p} = -T\left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2}\right)_p . \tag{1.79}$$

Nun gilt es noch Ausdrücke für die spezifische isobare Wärmekapazität auf Basis der Helmholtz-Funktion und für die spezifische isochore Wärmekapazität auf Basis der Gibbs-Funktion zu ermitteln. Die Ermittlung dieser Ausdrücke wird sich etwas schwieriger gestalten. Die Beziehung aus (1.79) liefert mit (1.74)

$$\frac{c_p}{T} = \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p \tag{1.80}$$

für die spezifische isobare Wärmekapazität. Die rechte Seite von (1.80) lässt sich unter Beachtung der thermischen Zustandsgleichung $p = p(T,v)$ umschreiben zu

$$\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p = \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_v \left(\frac{\partial T}{\partial T}\right)_p + \left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p = \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_v + \left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p . \tag{1.81}$$

Unter Beachtung von (1.70) und (1.71) und dem Schwarzschen Vertauschbarkeitssatz liefert die Bildung der zweiten Ableitungen

$$\frac{\partial}{\partial v}\left(\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_v\right)_T = \frac{\partial}{\partial T}\left(\left(\frac{\partial f}{\partial v}\right)_T\right)_v \tag{1.82}$$

den Zusammenhang

$$\left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v . \tag{1.83}$$

Die Beziehung aus (1.78) liefert mit (1.70)

$$\frac{c_v}{T} = \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_v \tag{1.84}$$

für die spezifische isochore Wärmekapazität. Ersetzt man die Ausdrücke aus (1.83) und (1.84) in (1.81), so führt dies zu

$$\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p = \frac{c_v}{T} + \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p . \tag{1.85}$$

Mit der Beziehung aus (1.83) gilt auf jeden Fall

$$-\left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T = -\left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T \left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_T = -\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v . \tag{1.86}$$

Unter Beachtung von (1.74) und (1.75) und dem Schwarzschen Vertauschbarkeitssatz liefert die Bildung der zweiten Ableitungen

$$\frac{\partial}{\partial p}\left(\left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_p\right)_T = \frac{\partial}{\partial T}\left(\left(\frac{\partial g}{\partial p}\right)_T\right)_p \tag{1.87}$$

die Gleichung

$$\left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T = -\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p . \tag{1.88}$$

Ein Einsetzen der Beziehung aus (1.88) in (1.86) liefert nach einfachem Umformen

$$\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p = -\frac{\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v}{\left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_T}, \tag{1.89}$$

was (1.80) unter Beachtung von (1.85) zu

$$c_p(T,v) = c_v(T,v) - T\frac{\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v^2}{\left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_T} \tag{1.90}$$

werden lässt. Selbiges wird auch in Beispiel 3.10. in [3] gezeigt. Diese soeben hergeleitete Gleichung für die spezifische isobare Wärmekapazität wird mit (1.71) und (1.78) zu

$$c_p(T,v) = -T\left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2}\right)_v + T\frac{\frac{\partial}{\partial T}\left(\left(\frac{\partial f}{\partial v}\right)_T\right)_v^2}{\left(\frac{\partial^2 f}{\partial v^2}\right)_T}, \tag{1.91}$$

was einer Gleichung zur Bestimmung der spezifischen isobaren Wärmekapazität bei Vorliegen einer Helmholtz-Funktion entspricht. Die rechte Seite von (1.84) lässt sich unter Beachtung der thermischen Zustandsgleichung $p = p(T, v)$ umschreiben zu

$$\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_v = \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p \left(\frac{\partial T}{\partial T}\right)_v + \left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v = \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p + \left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v . \quad (1.92)$$

Ersetzt man die Ausdrücke aus (1.80) und (1.88) in (1.92), so liefert dies

$$\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_v = \frac{c_p}{T} - \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v . \quad (1.93)$$

Mit der Beziehung aus (1.88) gilt auf jeden Fall

$$\left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T = \left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T \left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_T = - \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p . \quad (1.94)$$

Ein Einsetzen der Beziehung aus (1.83) in (1.94) liefert nach einfachem Umformen

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v = - \frac{\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p}{\left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_T}, \quad (1.95)$$

was (1.84) unter Beachtung von (1.93) zu

$$c_v(T, p) = c_p(T, p) + T \frac{\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p^2}{\left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_T} \quad (1.96)$$

werden lässt. Diese Gleichung für die spezifische isochore Wärmekapazität wird mit (1.75) und (1.79) zu

$$c_v(T, p) = -T \left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2}\right)_p + T \frac{\frac{\partial}{\partial T}\left(\left(\frac{\partial g}{\partial p}\right)_T\right)_p^2}{\left(\frac{\partial^2 g}{\partial p^2}\right)_T}, \quad (1.97)$$

was einer Gleichung zur Bestimmung der spezifischen isochoren Wärmekapazität bei Vorliegen einer Gibbs-Funktion entspricht.

Die in den bisherigen Ausführungen dieses Abschnittes erarbeiteten Zusammenhänge zur Ermittlung der Zustandsgrößen bei Verwendung der Helmholtz-Funktion bzw. Gibbs-Funktion als Fundamentalgleichung werden in den beiden folgenden Tabellen 1.1 und 1.2 kompakt zusammengefasst. Diese entsprechen einer erweiterten Form von Tabelle 3.2. in [3]. Darüber hinaus ist in [13] eine ähnliche Übersicht in tabellarischer Form zu finden.

Zustandsgröße	**Gleichung**
Druck	$p(T,v) = -\left(\frac{\partial f}{\partial v}\right)_T$
spezifische innere Energie	$u(T,v) = f - T\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_v$
spezifische Entropie	$s(T,v) = -\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_v$
spezifische Enthalpie	$h(T,v) = f - T\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_v - v\left(\frac{\partial f}{\partial v}\right)_T$
spezifische isochore Wärmekapazität	$c_v(T,v) = -T\left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2}\right)_v$
spezifische isobare Wärmekapazität	$c_p(T,v) = -T\left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2}\right)_v + T\frac{\frac{\partial}{\partial T}\left(\left(\frac{\partial f}{\partial v}\right)_T\right)_v^2}{\left(\frac{\partial^2 f}{\partial v^2}\right)_T}$

Tabelle 1.1: Ermittlung der Zustandsgrößen aus der Helmholtz-Funktion.

Zustandsgröße	**Gleichung**
spezifisches Volumen	$v(T,p) = \left(\frac{\partial g}{\partial p}\right)_T$
spezifische innere Energie	$u(T,p) = g - T\left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_p - p\left(\frac{\partial g}{\partial p}\right)_T$
spezifische Entropie	$s(T,p) = -\left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_p$
spezifische Enthalpie	$h(T,p) = g - T\left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_p$
spezifische isochore Wärmekapazität	$c_v(T,p) = -T\left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2}\right)_p + T\frac{\frac{\partial}{\partial T}\left(\left(\frac{\partial g}{\partial p}\right)_T\right)_p^2}{\left(\frac{\partial^2 g}{\partial p^2}\right)_T}$
spezifische isobare Wärmekapazität	$c_p(T,p) = -T\left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2}\right)_p$

Tabelle 1.2: Ermittlung der Zustandsgrößen aus der Gibbs-Funktion.

1.3.3 Fundamentalgleichungen der IAPWS-IF97

Es ist nicht unüblich bei der Formulierung von Fundamentalgleichungen dimensionslose Größen als unabhängige Variablen zu verwenden. Dieser Weg wird auch in den Fundamentalgleichungen der IAPWS-IF97[12] beschritten. Einen sehr guten Überblick über diesen Standard samt all den zugehörigen aktuelleren Veröffentlichungen liefert [5].

Die dimensionslose Form der Helmholtz-Funktion aus (1.66) lautet

$$\frac{f(T,v)}{RT} = \Phi(\tau,\delta), \tag{1.98}$$

worin $\tau = \tau(T) = T_{crit}/T$ dem Kehrwert der auf den kritischen Zustand reduzierten Temperatur und $\delta = \delta(v) = v_{crit}/v$ dem Kehrwert des auf den kritischen Zustand reduzierten spezifischen Volumens entspricht. Die dimensionslose Form der Gibbs-Funktion aus (1.67) lautet

$$\frac{g(T,p)}{RT} = \gamma(\tau,\pi), \tag{1.99}$$

worin $\tau = \tau(T) = T_{crit}/T$ wiederum dem Kehrwert der auf den kritischen Zustand reduzierte Temperatur und $\pi = \pi(p) = p/p_{crit}$ dem auf den kritischen Zustand reduzierten Druck entspricht.

Unter Beachtung von $\frac{\partial\tau}{\partial T} = -\frac{T_{crit}}{T^2}$ und $\frac{\partial\delta}{\partial v} = -\frac{v_{crit}}{v^2}$ können die in Tabelle 1.1 aufgelisteten Beziehungen zur Bestimmung der Zustandsgrößen aus der Helmholtz-Funktion für die in (1.98) angeschriebene Version ausgewertet werden. Die Ergebnisse dieser Auswertungen sind in Tabelle 1.3 zusammengefasst.

Unter Beachtung von $\frac{\partial\tau}{\partial T} = -\frac{T_{crit}}{T^2}$ und $\frac{\partial\pi}{\partial p} = \frac{1}{p_{crit}}$ können die in Tabelle 1.2 aufgelisteten Beziehungen zur Bestimmung der Zustandsgrößen aus der Gibbs-Funktion für die in (1.99) angeschriebene Version ausgewertet werden. Die Ergebnisse dieser Auswertungen sind in Tabelle 1.4 zusammengefasst.

Weiters sei darauf hingewiesen, dass in [17] die Gibbs-Funktion in einen Anteil eines idealen Gases und einen residuellen Anteil aufgeteilt wird, so dass (1.99) zu

$$\frac{g(T,p)}{RT} = \gamma(\tau,\pi) = \gamma^o(\tau,\pi) + \gamma^r(\tau,\pi) \tag{1.100}$$

wird. In (1.100) bezeichnet $\gamma^o(\tau,\pi)$ den Anteil des idealen Gases der dimensionslosen Gibbs-Funktion und $\gamma^r(\tau,\pi)$ den residuellen Anteil der dimensionslosen Gibbs-Funktion. Abbildung 1.1 liefert eine Übersicht über die Bereiche der IAPWS-IF97 in der p,T-Ebene. Vielmehr ist daraus auch ersichtlich, dass das Zweiphasengebiet in weiten Druckgebieten durch eine Paarung von Werten aus zwei unterschiedlichen Regionen abgedeckt wird.

[12] The International Association for the Properties of Water and Steam - Industrial Formulation 1997 ist ein Werk, welches umfangreiche empirische Gleichungen zur Berechnung der Zustandsgrößen von Wasser und Wasserdampf liefert. Bis auf die soeben angesprochene Modifikation im Hinblick auf die unabhängigen Variablen entsprechen die nachfolgend präsentierten Fundamentalgleichungen der IAPWS-IF97 genau jenen, wie sie soeben in Abschnitt 1.3.2 diskutiert wurden.

Zustandsgröße	**Gleichung**
Druck	$p(T,v) = \frac{RT}{v}\delta\Phi_\delta$
spezifische innere Energie	$u(T,v) = RT\tau\Phi_\tau$
spezifische Entropie	$s(T,v) = R(\tau\Phi_\tau - \Phi)$
spezifische Enthalpie	$h(T,v) = RT(\tau\Phi_\tau + \delta\Phi_\delta)$
spezifische isochore Wärmekapazität	$c_v(T,v) = -R\tau^2\Phi_{\tau\tau}$
spezifische isobare Wärmekapazität	$c_p(T,v) = R\left(-\tau^2\Phi_{\tau\tau} + \frac{(\delta\Phi_\delta - \delta\tau\Phi_{\delta\tau})^2}{2\delta\Phi_\delta + \delta^2\Phi_{\delta\delta}}\right)$
mit $\Phi_\tau = \left(\frac{\partial\Phi}{\partial\tau}\right)_\delta$, $\Phi_{\tau\tau} = \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial\tau^2}\right)_\delta$, $\Phi_\delta = \left(\frac{\partial\Phi}{\partial\delta}\right)_\tau$, $\Phi_{\delta\delta} = \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial\delta^2}\right)_\tau$, $\Phi_{\delta\tau} = \frac{\partial}{\partial\tau}\left(\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\delta}\right)_\tau\right)_\delta$	

Tabelle 1.3: Ermittlung der Zustandsgrößen aus der dimensionslosen Form der Helmholtz-Funktion in Anlehnung an Tabelle 3.31. aus [17].

Zustandsgröße	**Gleichung**
spezifisches Volumen	$v(T,p) = \frac{RT}{p}\pi\gamma_\pi$
spezifische innere Energie	$u(T,p) = RT\left(\tau\gamma_\tau - \pi\gamma_\pi\right)$
spezifische Entropie	$s(T,p) = R(\tau\gamma_\tau - \gamma)$
spezifische Enthalpie	$h(T,p) = RT\tau\gamma_\tau$
spezifische isochore Wärmekapazität	$c_v(T,p) = R\left(-\tau^2\gamma_{\tau\tau} + \frac{(\gamma_\pi - \tau\gamma_{\pi\tau})^2}{\gamma_{\pi\pi}}\right)$
spezifische isobare Wärmekapazität	$c_p(T,p) = -R\tau^2\gamma_{\tau\tau}$
mit $\gamma_\tau = \left(\frac{\partial\gamma}{\partial\tau}\right)_\pi$, $\gamma_{\tau\tau} = \left(\frac{\partial^2\gamma}{\partial\tau^2}\right)_\pi$, $\gamma_\pi = \left(\frac{\partial\gamma}{\partial\pi}\right)_\tau$, $\gamma_{\pi\pi} = \left(\frac{\partial^2\gamma}{\partial\pi^2}\right)_\tau$, $\gamma_{\pi\tau} = \frac{\partial}{\partial\tau}\left(\left(\frac{\partial\gamma}{\partial\pi}\right)_\tau\right)_\pi$	

Tabelle 1.4: Ermittlung der Zustandsgrößen aus der dimensionslosen Form der Gibbs-Funktion in Anlehnung an Tabelle 3.2. aus [17].

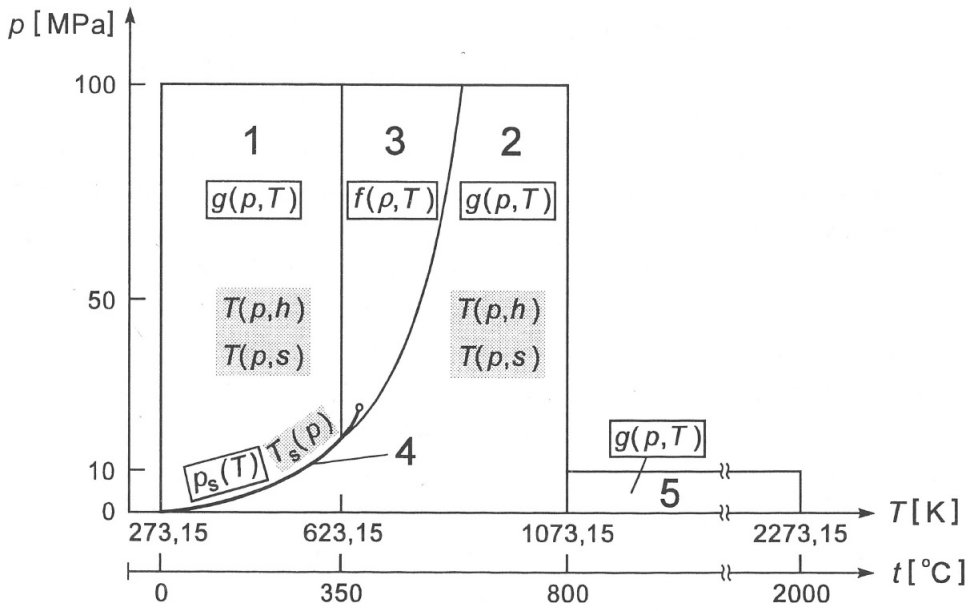

Abbildung 1.1: Übersicht über die Bereiche/ Regionen der IAPWS-IF97 [17, Abb.3.1.].

Kapitel 2

Approximation von Zustandsgleichungen

Die thermische Zustandsgleichung, welche bereits aus Abschnitt 1.3.1 bekannt ist, kann als Ausgangspunkt für die Überlegungen zur Approximation herangezogen werden. Diese beschreibt eine Zusammenhang zwischen Druck p, spezifischen Volumen v und der Temperatur T. Die graphische Aufbereitung dieses Zusammenhanges liefert ein dreidimensionales Diagramm, das sogenannte p, v, T-Diagramm. Abbildung

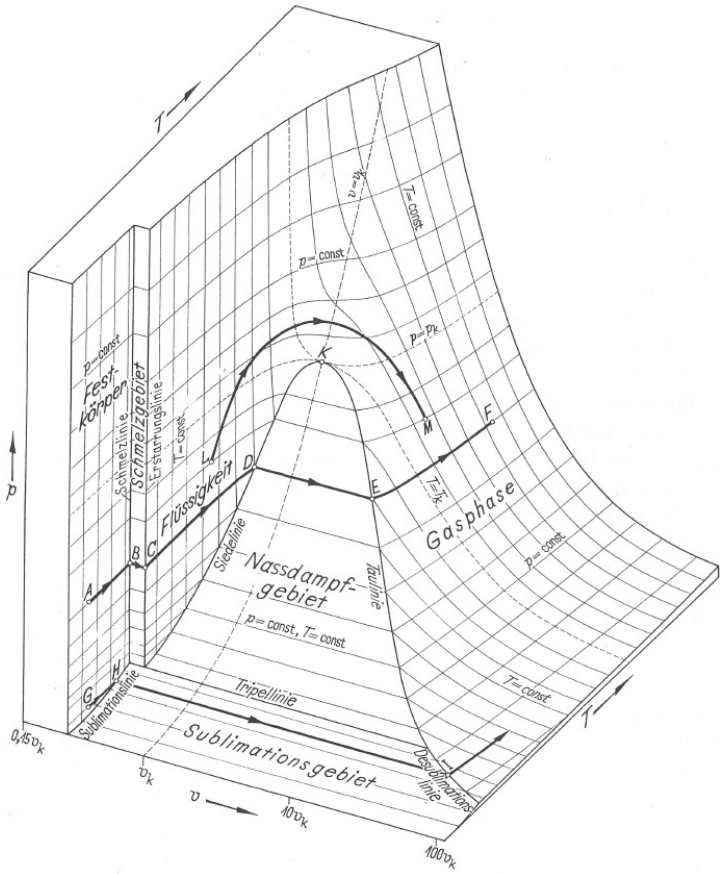

Abbildung 2.1: p, v, T-Diagramm eines reinen Stoffes [3, Abb.4.1.].

2.1 zeigt ein p, v, T-Diagramm für einen reinen Stoff, wie es auch Wasser ist. Er-

läuterungen zu eingezeichneten Zustandsänderungen (fette schwarze Linien) sind in [3, S. 178f] zu finden. Die Projektion der p, v, T-Fläche aus Abbildung 2.1 in die p, T-Ebene liefert das in Abbildung 2.2 gezeigte Diagramm. Ein solches wurde bereits mit Abbildung 1.1 gezeigt.

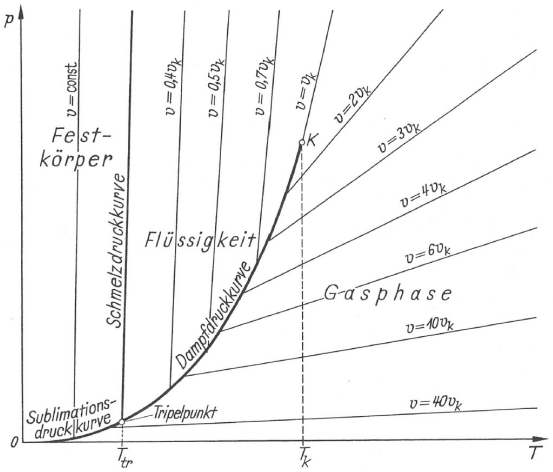

Abbildung 2.2: p, T-Diagramm eines reinen Stoffes [3, Abb.4.3.].

Wählt man nun das spezifische Volumen v als abhängige Variable und den Druck p und die Temperatur T als unabhängige Variablen, so können zwei charakteristische Gebiete aus dem p, v, T-Diagramm aus Abbildung 2.1 gewonnen werden[1]. Einerseits erhält man den einphasigen Bereich, der aus der Kombination von Gebieten der Flüssigkeit und der Gasphase entsteht, andererseits der zweite charakteristische Bereich ist das zweiphasige Nassdampfgebiet. Diese zwei unterschiedlichen Bereiche werden in den folgenden Ausführungen zwei unterschiedliche Approximationen erfordern, nicht nur für das spezifischen Volumen v, welches hier zu Erklärungszwecken exemplarisch herangezogen wurde, sondern auch für alle anderen zu approximierenden Zustandsgrößen. Verwendet man als Basis für die Approximationen aus der IAPWS-IF97 gewonnene Werte, so zeigt Abbildung 1.1 die relevanten Bereiche dieser Formulierung in der p, T-Ebene.

2.1 Problemstellung

Die abschließenden Abschnitte des vorigen Kapitels beschäftigen sich insbesondere mit einer sauberen Aufbereitung zu Fundamentalgleichungen. Solche Gleichungen zeichnen sich dadurch aus, dass durch strikte Anwendung grundlegender Zusammenhänge und Definitionen aus der Thermodynamik alle Zustandsgrößen - abgesehen von den beiden Eingangsgrößen - ermittelt werden können. Bei Anwendung der Helmholtz-Funktion werden die thermodynamische Temperatur und das spezifische Volumen als Eingangsgrößen verwendet. Alle anderen Zustandsgrößen, wie beispielsweise die spezifische Enthalpie, die spezifische Entropie oder auch die spezifischen Wärmekapazitäten, können durch Bildung von Ableitungen der Fundamentalgleichung und entsprechende Kombination der gewonnenen Ausdrücke gewonnen

[1] Der Bereich des Festkörpers als auch das Schmelzgebiet werden dabei außer Acht gelassen.

werden. Auch die von der International Association for the Porperties of Water and Steam (IAPWS) veröffentlichte Formulierung IAPWS-IF97, welche in Industriekreisen als Standard für die Berechnung der Zustandsgrößen von Wasser und Wasserdampf gilt, basiert auf Fundamentalgleichungen. In der Praxis müssen folgenden Punkten besondere Beachtung zugesprochen werden:

- Die Berechnung der Zustandsgrößen erfordert eine Vielzahl an Rechenoperationen und Fallunterscheidungen.
- Einige Beziehungen liegen nicht als direkte Zustandsgleichung vor, sondern können nur durch iterative Berechnungen abgehandelt werden. Dies bedeutet dann ebenfalls hohen Rechenaufwand.
- Die Zustandsgleichungen liegen in einer Form vor, bei der das Einsetzen in andere Beziehungen und algebraische Umformungen nur schwer möglich sind.

In diesem Kapitel werden nun Ansätze zur Vermeidung dieser Nachteile untersucht. Dabei ist jedoch insbesondere zu beachten, dass solche Gleichungen immer nur in einem Teilbereich gelten, um Genauigkeitsanforderungen an die Berechnung gerecht werden zu können.

Die Bestimmung der lokalen Approximationsfunktionen erfordert zwar zunächst einen gewissen Aufwand. Werden aber dann im Folgenden sehr viele Auswertungen auf Basis dieser Approximationsfunktion durchgeführt, so lohnt sich das Aufstellen des funktionalen Zusammenhangs. Dabei ist natürlich vorauszusetzen, dass die Approximation im relevanten Gebiet ausreichende Genauigkeit aufweist.

2.2 Literatur zur effizienten Berechnung der Zustandsgrößen

Bevor eigene Ansätze präsentiert werden, folgen kurze Ausführungen mit relevanter Literatur für eine vorteilhafte Berechnung der Zustandsgrößen von Wasser und Wasserdampf. Weiters sei angemerkt, dass die Grundideen zu den präsentierten linearen Approximationsansätzen [19] entnommen wurden. Ausführliche Erläuterungen zu zahlreichen Darstellungsformen der Zustandsgrößen von Wasser und Wasserdampf und den dazu benötigten partiellen Ableitungen liefert [12].

Eine spezielle Methode zur Berechnung der Zustandsgrößen unter Verwendung der Taylorreihen-Entwicklung ist in [10] zu finden. In dieser Veröffentlichung wird insbesondere auf die Berechnungsgeschwindigkeit und eine Genauigkeitsanalyse im Vergleich zu einem Industriestandard eingegangen. Einige Aspekte zur linearen Interpolation bei Verwendung von Dampftafeln liefert [2]. Für die dynamische Modellbildung von Dampfkraftprozessen sind [16] Ausführungen zur linearen Interpolation bei tabellarischer Wahl fester Stützstellen zu entnehmen. Weiters werden explizite Aussagen hinsichtlich Schrittweite und daraus resultierender Genauigkeit geliefert. Auch [11] widmet sich der Interpolation zur Verkürzung der Rechenzeit unter beson-

derer Berücksichtigung der Wahl des Rasters in der p, T-Ebene für unterschiedliche Zustandsgrößen.

2.3 Lokale Approximation der Zustandsgleichungen

Im Folgenden werden Beziehungen, die Zusammenhänge zwischen den sechs Zustandsgrößen

- Druck p,
- thermodynamischer Temperatur T,
- spezifischem Volumen v,
- spezifischer innerer Energie u,
- spezifischer Enthalpie h und
- Dampfgehalt x

liefern, diskutiert. Da die infrage kommenden Zustandsgleichungen sich durch lokale Gültigkeit auszeichnen, können deren Grenzen als Grenzen für den Anwendungsbereich der jeweiligen Approximationsfunktionen betrachtet werden.

2.4 Lineare Approximation im Zweiphasengebiet

2.4.1 Mathematischer Ansatz

Ausgangspunkt der Berechnungen zur Approximation im Zweiphasengebiet ist ein beliebiger Druck p_0[2]. Diesem Zustand 0 ist eine Sättigungstemperatur $T_{S0} = T_S(p_0)$, welche über IAPWS-IF97 errechnet werden kann, zuordenbar. Weiters sind diesem Zustand 0

- eine spezifische Enthalpie des siedenden Wassers $h'_0 = h'(p_0)$,
- eine spezifische Enthalpie des gesättigten Dampfes $h''_0 = h''(p_0)$,
- ein spezifische Volumen des siedenden Wassers $v'_0 = v'(p_0)$ und
- ein spezifische Volumen des gesättigten Dampfes $v''_0 = v''(p_0)$

als Sättigungszustände für die Enthalpie und das spezifische Volumen zugewiesen. Im nächsten Schritt definiert man einen Zustand 1, welcher sich durch einen Druck $p_1 = p_0 + \Delta p$ mit $\Delta p < 22.064MPa - p_0$ und eine entsprechende Siedetemperatur $T_{S1} = T_S(p_1)$ auszeichnet. Zustand 1 sind

- eine spezifische Enthalpie des siedenden Wassers $h'_1 = h'(p_1)$,

[2]Als Bedingung gilt natürlich $p_0 < p_{krit} = 22.064MPa$.

- eine spezifische Enthalpie des gesättigten Dampfes $h_1'' = h''(p_1)$,
- ein spezifische Volumen des siedenden Wassers $v_1' = v'(p_1)$ und
- ein spezifische Volumen des gesättigten Dampfes $v_1'' = v''(p_1)$

als Sättigungszustände für die Enthalpie und das spezifische Volumen zugewiesen. Alle bisherigen Ausführungen zur linearen Approximation können auch Abbildung 2.3 entnommen werden. Dabei wird in der p,T-Ebene dargestellt welche Punkte des Zweiphasengebietes - dargestellt durch die rote Linie - für die Approximation von Relevanz sind.

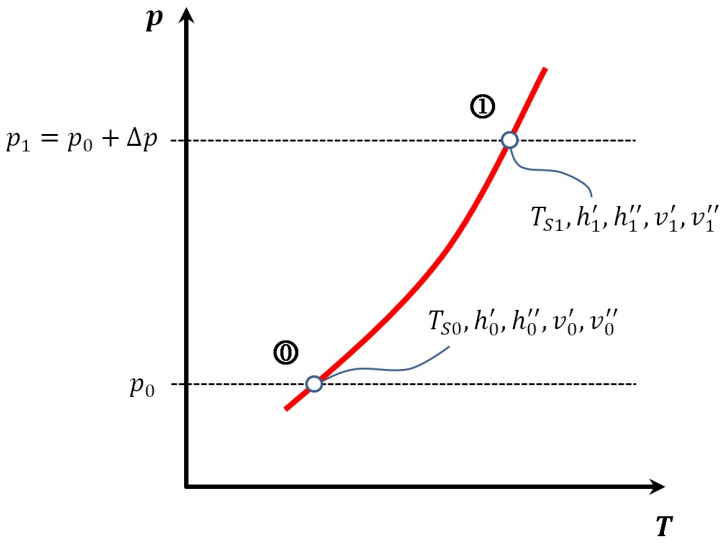

Abbildung 2.3: Zustandspunkte bei linearer Approximation im Zweiphasengebiet.

Wird für eine beliebige Funktion $f(x)$ im Intervall $[x_0, x_1]$ durch eine lineare Interpolation angenähert, so beschreibt

$$f_n(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0) \tag{2.1}$$

die mathematische Formulierung der Näherung. Will man in weiterer Folge für die Näherung aus (2.1) einen Ausdruck der Form

$$f_n(x) = Gx + H, \tag{2.2}$$

so ist G mit

$$G = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \tag{2.3}$$

und H mit

$$H = f(x_0) - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}x_0 = f(x_0) - Gx_0 \tag{2.4}$$

zu bestimmen. Im Folgenden kommt es zur genauen Erläuterung der einzelnen Ausdrücke für die lineare Approximation im Zweiphasengebiet, wobei die mathematischen Formulierungen analog zu den Gleichungen (2.2), (2.3) und (2.4) angeschrieben werden und für die unabhängige Variable der Druck p herangezogen wird. Eine

Approximation der Siede- und Sättigungszustände im Druckintervall $[p_0, p_1]$ erfolgt über

$$T_{S,n}(p) = G_0 p + H_0, \tag{2.5}$$

$$h'_n(p) = G_1 p + H_1, \tag{2.6}$$

$$h''_n(p) = G_2 p + H_2, \tag{2.7}$$

$$v'_n(p) = G_3 p + H_3, \tag{2.8}$$

$$v''_n(p) = G_4 p + H_4, \tag{2.9}$$

wobei die auftretenden Konstanten G_0 bis G_4 bzw. H_0 bis H_4 noch zu bestimmen sind. Die Bestimmung erfolgt ausgehend von den einem Druck p_0 zugehörigen Siede- und Sättigungszuständen T_{S0}, h'_0, h''_0, v'_0, v''_0 sowie den dem Druck $p_1 = p_0 + \Delta p$ zugehörigen Siede- und Sättigungszuständen T_{S1}, h'_1, h''_1, v'_1, v''_1, jeweils bestimmt unter Verwendung der IAPWS-IF97, mit

$$G_0 = \frac{T_{S1} - T_{S0}}{p_1 - p_0}, \tag{2.10}$$

$$H_0 = T_{S0} - G_0 p_0, \tag{2.11}$$

$$G_1 = \frac{h'_1 - h'_0}{p_1 - p_0}, \tag{2.12}$$

$$H_1 = h'_0 - G_1 p_0, \tag{2.13}$$

$$G_2 = \frac{h''_1 - h''_0}{p_1 - p_0}, \tag{2.14}$$

$$H_2 = h''_0 - G_2 p_0, \tag{2.15}$$

$$G_3 = \frac{v'_1 - v'_0}{p_1 - p_0}, \tag{2.16}$$

$$H_3 = v'_0 - G_3 p_0, \tag{2.17}$$

$$G_4 = \frac{v''_1 - v''_0}{p_1 - p_0}, \tag{2.18}$$

$$H_4 = v''_0 - G_4 p_0. \tag{2.19}$$

Ein beliebiger Zustandspunkt im Zweiphasengebiet ist durch die Vorgabe des Druckes p und der Dampfziffer x bereits eindeutig festgelegt.
Das Interpolationsgebiet zur Anwendung der bisher aufgelisteten Gleichungen zu

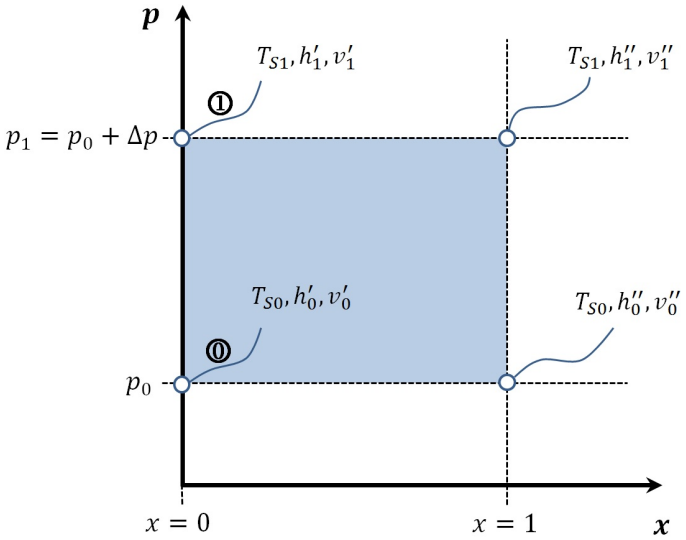

Abbildung 2.4: Interpolationsgebiet bei linearer Approximation im Zweiphasengebiet.

linearen Approximation wird somit aus durch $x \in [0, 1]$ und $p \in [p_0, p_1]$ beschrieben. Eine grafische Veranschaulichung des Interpolationsgebietes liefert Abbildung 2.4. Für eine beliebige Dampfziffer x gelten bekanntermaßen

$$h = xh'' + (1 - x)h' \tag{2.20}$$

und

$$v = xv'' + (1 - x)v' \tag{2.21}$$

als Zusammenhänge für die Berechnung von Enthalpie und spezifischem Volumen. Die innere Energie wird über den bereits aus Gleichung (1.22) bekannten Zusammenhang für die spezifische Enthalpie gewonnen. Ein Einsetzen der aus (2.6) und (2.7) bekannten Ausdrücke liefert für die spezifische Enthalpie aus (2.20) einen Interpolationswert

$$\begin{aligned} h_n(x, p) &= x(G_2 p + H_2) + (1 - x)(G_1 p + H_1) \\ &= p(G_1 + x(G_2 - G_1)) + H_1 + x(H_2 - H_1). \end{aligned} \tag{2.22}$$

Ein Einsetzen der aus (2.8) und (2.9) bekannten Ausdrücke liefert für das spezifische Volumen aus (2.21)

$$\begin{aligned} v_n(x, p) &= x(G_4 p + H_4) + (1 - x)(G_3 p + H_3) \\ &= p(G_3 + x(G_4 - G_3)) + H_3 + x(H_4 - H_3). \end{aligned} \tag{2.23}$$

Die approximierte innere Energie wird nach (1.22) durch

$$u_n(x, p) = h_n(x, p) - pv_n(x, p) \tag{2.24}$$

berechnet, was durch Einsetzen von (2.22) und (2.23) zu

$$\begin{aligned} u_n(x, p) &= x(G_2 p + H_2) + (1 - x)(G_1 p + H_1) - p\left(x(G_4 p + H_4) + (1 - x)(G_3 p + H_3)\right) \\ &= x\left((G_2 p + H_2) - p(G_4 p + H_4)\right) + (1 - x)\left((G_1 p + H_1) - p(G_3 p + H_3)\right) \end{aligned} \tag{2.25}$$

wird. Einen Näherungswert für die Siedetemperatur innerhalb des Interpolationsgebietes erhält man unter Verwendung der Ausdrücke aus (2.10) und (2.11) mit

$$T_{S,n}(x,p) = T_{S,n}(p) = G_0 p + H_0, \tag{2.26}$$

was zufolge Unabhängigkeit vom Dampfgehalt, schlicht der bereits bekannten Gleichung (2.5) entspricht.

2.4.2 Einfache Auswertungen

Nachfolgend wird ein einführendes Beispiel zur linearen Approximation im Zweiphasengebiet diskutiert. Für die beispielhaften Auswertungen gelte $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0$, d.h. $\Delta p = 1.45p_0$. Für die Berechnung wird das aus Abbildung 2.4 bekannte zweidimensionale Interpolationsgebiet in beiden Dimensionen in 51 Punkte gleichen Abstands unterteilt. In jedem Punkt des entstehenden Rasters werden sowohl die expliziten Zustandsgrößen nach IAPWS-IF97 als auch die interpolierten Werte errechnet. Im Anschluss können die relativen Abweichungen der jeweiligen Zustandsgrößen bei Vergleich von Interpolation und Werten gemäß IAPWS-IF97 untersucht werden. Dabei werden die Ausdrücke

$$\Delta h_{rel}(x,p) = \frac{h_n(x,p) - h_{IF97}(x,p)}{h_{IF97}(x,p)}, \tag{2.27}$$

$$\Delta v_{rel}(x,p) = \frac{v_n(x,p) - v_{IF97}(x,p)}{v_{IF97}(x,p)}, \tag{2.28}$$

$$\Delta u_{rel}(x,p) = \frac{u_n(x,p) - h_{IF97}(x,p)}{u_{IF97}(x,p)} \tag{2.29}$$

zur Berechnung der relativen Abweichung herangezogen. Abbildungen 2.5, 2.6 und 2.7 zeigen die Ergebnisse der Abweichungsanalysen für die Enthalpie, das spezifische Volumen und die innere Energie, wobei die Ergebnisse auf den Gleichungen (2.27), (2.28) und (2.29) basieren. Die Ergebnisse aus den beiden Abbildungen 2.5 und 2.7 zeigen, dass die Werte im Druckgebiet (p_0, p_1) niedriger sind als jene, welche nach IF97 errechnet wurden. Beim spezifischen Volumen ergibt sich nach Abbildung 2.6 eine positive Abweichung, die darüber hinaus auch mit Werten von bis zu 25% auch wesentlich größer ausfällt. Diese große Abweichung ist dem großen Druckbereich, über den es zu interpolieren gilt, und dem stark nichtlinearen Verhalten des spezifischen Volumens der siedenden Flüssigkeit und des Sattdampfes geschuldet. Weiters ist Abbildung 2.8 die Lage der für die Approximation relevanten Zustandspunkte sowie das daraus entstehende Interpolationsgebiet in der p, T-Ebene zu entnehmen.

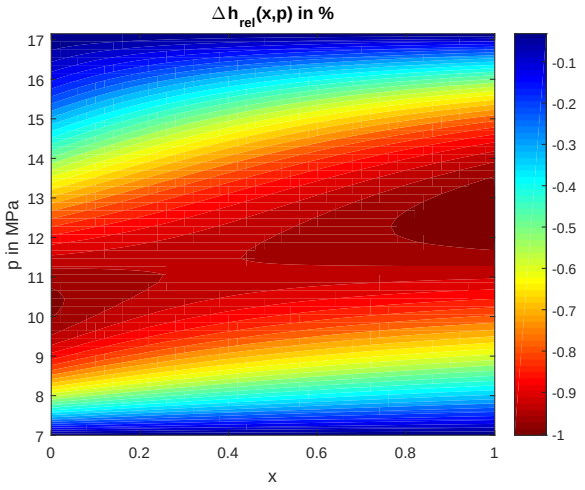

Abbildung 2.5: Relative Abweichung der approximierten Enthalpie im Zweiphasengebiet für $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$.

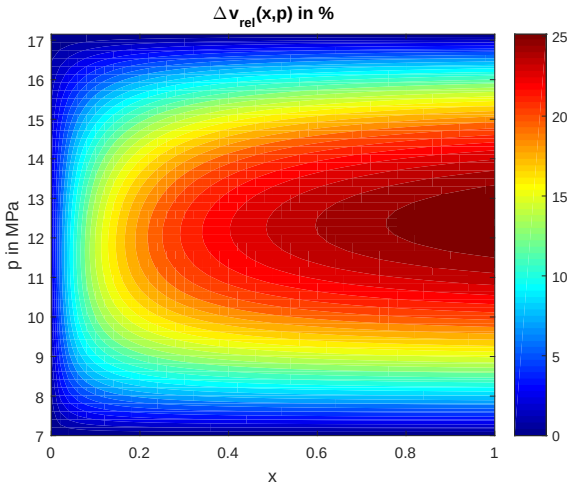

Abbildung 2.6: Relative Abweichung des approximierten spezifischen Volumens im Zweiphasengebiet für $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$.

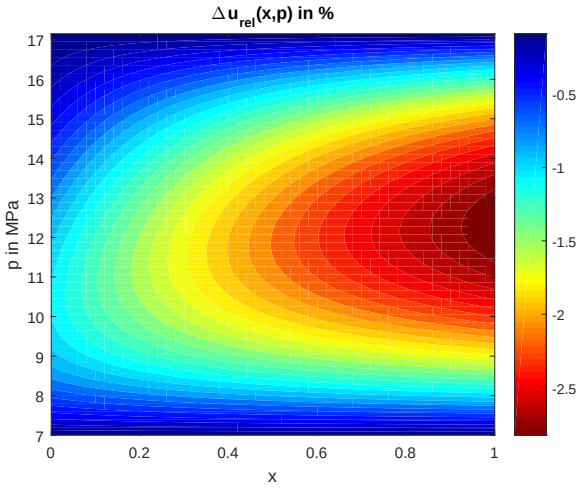

Abbildung 2.7: Relative Abweichung der approximierten inneren Energie im Zweiphasengebiet für $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$.

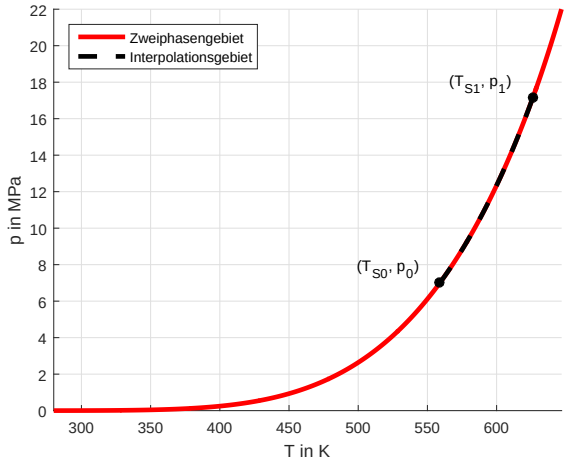

Abbildung 2.8: Lage des Interpolationsgebietes in der p, T-Ebene für $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$.

Abbildungen 2.9, 2.10 und 2.11 zeigen die Unterschiede von approximierten zu wahren Werten an der Siede- bzw. Taulinie für die Enthalpie, das spezifische Volumen und die innere Energie. Aus den Verläufen lassen sich erneut die jeweiligen Vorzeichen der Abweichungen erklären. Weiters ist in den beiden Abbildungen 2.9 und 2.10 die geforderte Linearität der Interpolation sehr deutlich zu erkennen, während insbesondere im rechten Diagramm von Abbildung 2.11 nichtlineares Verhalten der Interpolationsfunktion erkennbar ist, was mit dem Auftreten von quadratischen Termen der unabhängigen Variablen in Gleichung (2.25) erklärt werden kann.

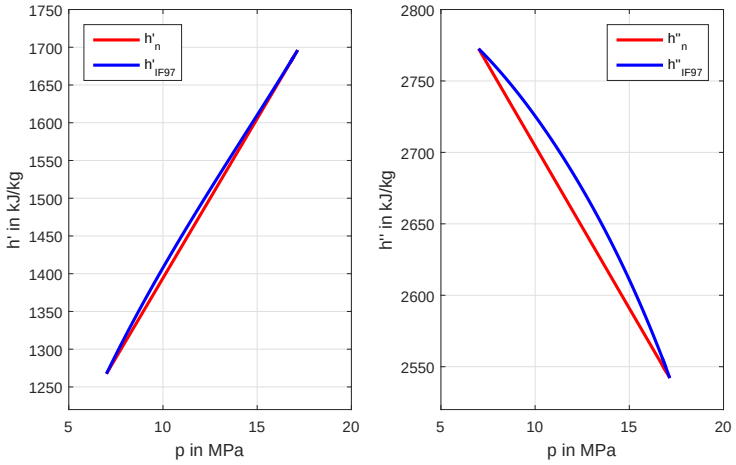

Abbildung 2.9: Vergleich von approximierten und IF97-Werten für die Enthalpie von siedender Flüssigkeit und Sattdampf, $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$.

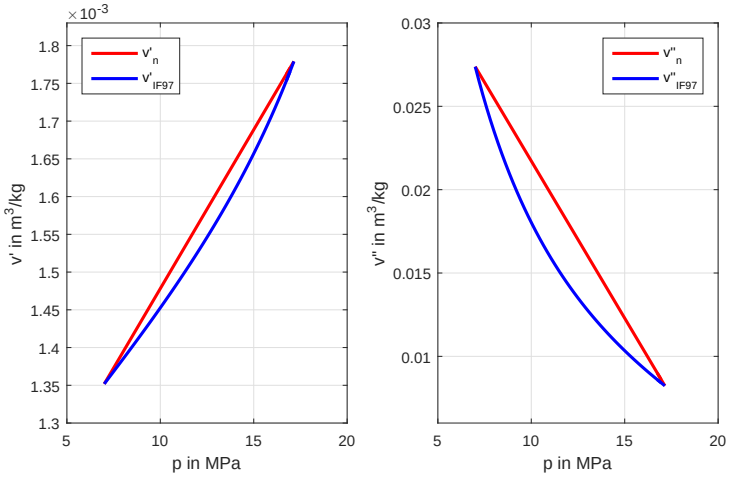

Abbildung 2.10: Vergleich von approximierten und IF97-Werten für das spezifische Volumen von siedender Flüssigkeit und Sattdampf, $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$.

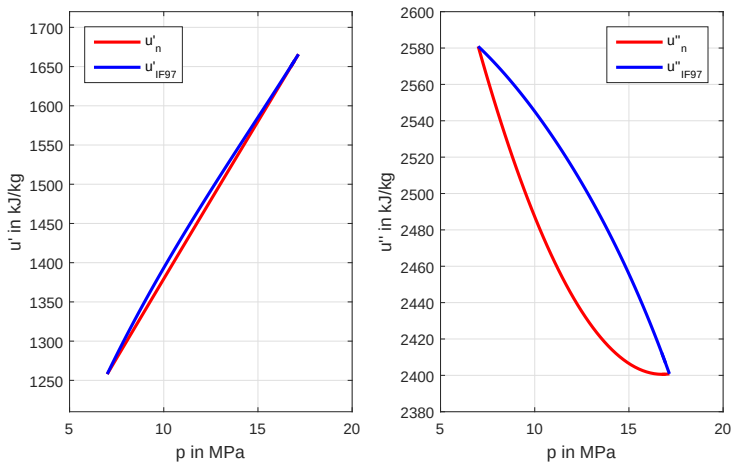

Abbildung 2.11: Vergleich von approximierten und IF97-Werten für die innere Energie von siedender Flüssigkeit und Sattdampf, $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$.

2.5 Quadratische Approximation im Zweiphasengebiet

2.5.1 Mathematischer Ansatz

Ausgangspunkt der Berechnungen zur quadratischen Approximation im Zweiphasengebiet ist wiederum ein beliebiges, unterkritisches Druckniveau $p_0 < 22.064MPa$. Diesem Zustand 0 wird eine Sättigungstemperatur $T_{S0} = T_S(p_0)$, welche über IAPWS-IF97 errechnet werden kann, zugeordnet. Weiters sind Zustand 0

- eine spezifische Enthalpie des siedenden Wassers $h'_0 = h'(p_0)$,
- eine spezifische Enthalpie des gesättigten Dampfes $h''_0 = h''(p_0)$,
- ein spezifische Volumen des siedenden Wassers $v'_0 = v'(p_0)$ und
- ein spezifische Volumen des gesättigten Dampfes $v''_0 = v''(p_0)$

als Sättigungszustände für die Enthalpie und das spezifische Volumen zugewiesen. Im nächsten Schritt definiert man - wie bereits von der linearen Näherung bekannt - einen Zustand 1, welcher sich durch einen Druck $p_1 = p_0 + \Delta p$ mit $\Delta p < 22.064MPa - p_0$ und eine entsprechende Siedetemperatur $T_{S1} = T_S(p_1)$ auszeichnet. Zustand 1 sind

- eine spezifische Enthalpie des siedenden Wassers $h'_1 = h'(p_1)$,
- eine spezifische Enthalpie des gesättigten Dampfes $h''_1 = h''(p_1)$,
- ein spezifische Volumen des siedenden Wassers $v'_1 = v'(p_1)$ und
- ein spezifische Volumen des gesättigten Dampfes $v''_1 = v''(p_1)$

als Sättigungszustände für die Enthalpie und das spezifische Volumen zuordenbar. Als Neuerung bei der quadratischen Näherung wird nun ein Druckniveau

$$p_{1/2} = p_0 + \frac{1}{2}\Delta p \tag{2.30}$$

eingeführt, für welches sich eine Siedetemperatur von $T_{S1/2} = T_S(p_{1/2})$ ergibt. Letztgenanntem Druckniveau, $p_{1/2}$, sind

- eine spezifische Enthalpie des siedenden Wassers $h'_{1/2} = h'(p_{1/2})$,
- eine spezifische Enthalpie des gesättigten Dampfes $h''_{1/2} = h''(p_{1/2})$,
- ein spezifische Volumen des siedenden Wassers $v'_{1/2} = v'(p_{1/2})$ und
- ein spezifische Volumen des gesättigten Dampfes $v''_{1/2} = v''(p_{1/2})$

als Sättigungszustände für die Enthalpie und das spezifische Volumen zuzuordnen. Diese Werte werden unter Verwendung der IAPWS-IF97 gewonnen.
Alle bisherigen Ausführungen zu den einzelnen Druckniveaus zur quadratischen Approximation können auch Abbildung 2.12 entnommen werden. Dabei wird in der p,T-Ebene dargestellt, welche Punkte des Zweiphasengebietes - dargestellt durch die rote Linie - für die Approximation von Relevanz sind.

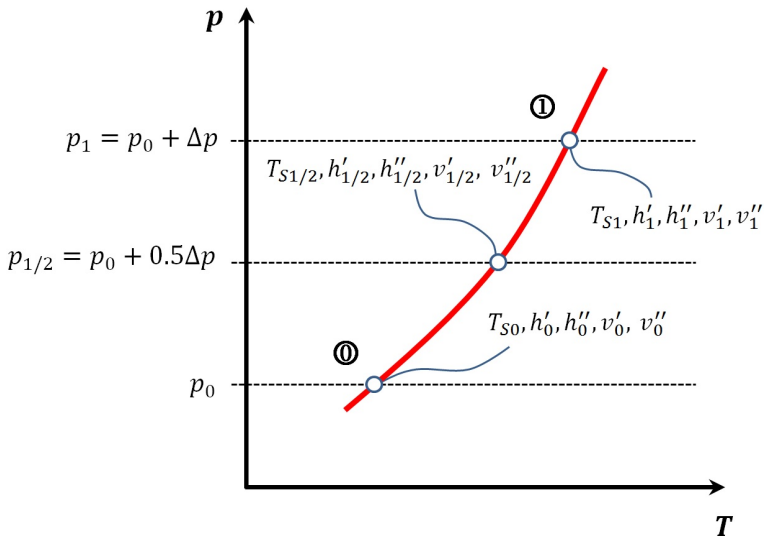

Abbildung 2.12: Zustandspunkte bei quadratischer Approximation im Zweiphasengebiet.

Um einen beliebigen Funktionsverlauf $f(x)$ im Intervall $[x_0, x_1]$, bei Vorgabe der drei Stützstellen x_0, $x_{1/2}$, x_1, mit $x_0 < x_{1/2} < x_1$ quadratisch zu approximieren, ergibt sich

$$\underbrace{\begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_{1/2}) \\ f(x_1) \end{bmatrix}}_{\mathbf{f}} = \underbrace{\begin{bmatrix} x_0^2 & x_0 & 1 \\ x_{1/2}^2 & x_{1/2} & 1 \\ x_1^2 & x_1 & 1 \end{bmatrix}}_{\mathbf{X}} \underbrace{\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\lambda}} \tag{2.31}$$

als zu lösendes Gleichungssystem. Dabei gilt es das Gleichungssystem nach dem Parametervektor $\boldsymbol{\lambda}$ aufzulösen, d.h.

$$\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{X}^{-1}\mathbf{f} \tag{2.32}$$

zu ermitteln[3]. Für die Inverse der Wertematrix $\mathbf{X}$ erhält man

$$\mathbf{X}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{(x_0-x_{1/2})(x_0-x_1)} & -\frac{1}{(x_0-x_{1/2})(x_{1/2}-x_1)} & \frac{1}{(x_0-x_1)(x_{1/2}-x_1)} \\ -\frac{x_{1/2}+x_1}{(x_0-x_{1/2})(x_0-x_1)} & \frac{x_0+x_1}{(x_0-x_{1/2})(x_{1/2}-x_1)} & -\frac{x_0+x_{1/2}}{(x_0-x_1)(x_{1/2}-x_1)} \\ \frac{x_{1/2}x_1}{(x_0-x_{1/2})(x_0-x_1)} & -\frac{x_0x_1}{(x_0-x_{1/2})(x_{1/2}-x_1)} & \frac{x_0x_{1/2}}{(x_0-x_1)(x_{1/2}-x_1)} \end{bmatrix}. \tag{2.33}$$

Für die einzelnen Komponenten des Parametervektors $\boldsymbol{\lambda}$ erhält man mit (2.32) und dem Ergebnis aus (2.33)

$$\boldsymbol{\lambda}_1 = a = \frac{f(x_0)}{(x_0 - x_{1/2})(x_0 - x_1)} - \frac{f(x_{1/2})}{(x_0 - x_{1/2})(x_{1/2} - x_1)} + \frac{f(x_1)}{(x_0 - x_1)(x_{1/2} - x_1)}, \tag{2.34}$$

$$\boldsymbol{\lambda}_2 = b = -\frac{(x_{1/2} + x_1)f(x_0)}{(x_0 - x_{1/2})(x_0 - x_1)} + \frac{(x_0 + x_1)f(x_{1/2})}{(x_0 - x_{1/2})(x_{1/2} - x_1)} - \frac{(x_0 + x_{1/2})f(x_1)}{(x_0 - x_1)(x_{1/2} - x_1)}, \tag{2.35}$$

$$\boldsymbol{\lambda}_3 = c = \frac{x_{1/2}x_1 f(x_0)}{(x_0 - x_{1/2})(x_0 - x_1)} - \frac{x_0x_1 f(x_{1/2})}{(x_0 - x_{1/2})(x_{1/2} - x_1)} + \frac{x_0x_{1/2} f(x_1)}{(x_0 - x_1)(x_{1/2} - x_1)}. \tag{2.36}$$

Die Auswertung der quadratischen Interpolation an einer beliebigen Stelle x im Intervall $[x_0, x_1]$ errechnet man unter Verwendung der Ausdrücke aus (2.34), (2.35) und (2.36) mit

$$f_n(x) = ax^2 + bx + c. \tag{2.37}$$

Im Folgenden kommt es zur genauen Erläuterung der einzelnen Ausdrücke für die quadratische Approximation im Zweiphasengebiet, wobei die mathematischen Formulierungen analog zu den Gleichungen (2.34), (2.35), (2.36) und (2.37) angeschrieben werden und für die unabhängige Variable der Druck p herangezogen wird. Eine Approximation der Sättigungszustände im Druckintervall $[p_0, p_1]$ erfolgt über

$$T_{S,n}(p) = a_0p^2 + b_0p + c_0, \tag{2.38}$$

$$h'_n(p) = a_1p^2 + b_1p + c_1, \tag{2.39}$$

$$h''_n(p) = a_2p^2 + b_2p + c_2, \tag{2.40}$$

$$v'_n(p) = a_3p^2 + b_3p + c_3, \tag{2.41}$$

[3]Dabei sei $det(\mathbf{X}) \neq 0$ vorausgesetzt.

$$v_n''(p) = a_4 p^2 + b_4 p + c_4, \tag{2.42}$$

wobei die auftretenden Konstanten a_0 bis a_4, b_0 bis b_4 und c_0 bis c_4 noch zu bestimmen sind. Die Bestimmung erfolgt ausgehend von den einem Druck p_0 zugehörigen Sättigungszuständen T_{S0}, h_0', h_0'', v_0', v_0'', den zum Druck $p_{1/2} = p_0 + 0.5\Delta p$ zugehörigen Sättigungszuständen $T_{S1/2}$, $h_{1/2}'$, $h_{1/2}''$, $v_{1/2}'$, $v_{1/2}''$ sowie den zum Druck $p_1 = p_0 + \Delta p$ zugehörigen Sättigungszuständen T_{S1}, h_1', h_1'', v_1', v_1'', jeweils bestimmt unter Verwendung der IAPWS-IF97, mit

$$a_0 = \frac{T_{S0}}{(x_0 - x_{1/2})(x_0 - x_1)} - \frac{T_{S1/2}}{(p_0 - p_{1/2})(p_{1/2} - p_1)} + \frac{T_{S1}}{(p_0 - p_1)(p_{1/2} - p_1)}, \tag{2.43}$$

$$b_0 = -\frac{(p_{1/2} + p_1)T_{S0}}{(p_0 - p_{1/2})(p_0 - p_1)} + \frac{(p_0 + p_1)T_{S1/2}}{(p_0 - p_{1/2})(p_{1/2} - p_1)} - \frac{(p_0 + p_{1/2})T_{S1}}{(p_0 - p_1)(p_{1/2} - p_1)}, \tag{2.44}$$

$$c_0 = \frac{p_{1/2}p_1 T_{S0}}{(p_0 - p_{1/2})(p_0 - p_1)} - \frac{p_0 p_1 T_{S1/2}}{(p_0 - p_{1/2})(p_{1/2} - p_1)} + \frac{p_0 p_{1/2} T_{S1}}{(p_0 - p_1)(p_{1/2} - p_1)}, \tag{2.45}$$

$$a_1 = \frac{h_0'}{(x_0 - x_{1/2})(x_0 - x_1)} - \frac{h_{1/2}'}{(p_0 - p_{1/2})(p_{1/2} - p_1)} + \frac{h_1'}{(p_0 - p_1)(p_{1/2} - p_1)}, \tag{2.46}$$

$$b_1 = -\frac{(p_{1/2} + p_1)h_0'}{(p_0 - p_{1/2})(p_0 - p_1)} + \frac{(p_0 + p_1)h_{1/2}'}{(p_0 - p_{1/2})(p_{1/2} - p_1)} - \frac{(p_0 + p_{1/2})h_1'}{(p_0 - p_1)(p_{1/2} - p_1)}, \tag{2.47}$$

$$c_1 = \frac{p_{1/2}p_1 h_0'}{(p_0 - p_{1/2})(p_0 - p_1)} - \frac{p_0 p_1 h_{1/2}'}{(p_0 - p_{1/2})(p_{1/2} - p_1)} + \frac{p_0 p_{1/2} h_1'}{(p_0 - p_1)(p_{1/2} - p_1)}, \tag{2.48}$$

$$a_2 = \frac{h_0''}{(x_0 - x_{1/2})(x_0 - x_1)} - \frac{h_{1/2}''}{(p_0 - p_{1/2})(p_{1/2} - p_1)} + \frac{h_1''}{(p_0 - p_1)(p_{1/2} - p_1)}, \tag{2.49}$$

$$b_2 = -\frac{(p_{1/2} + p_1)h_0''}{(p_0 - p_{1/2})(p_0 - p_1)} + \frac{(p_0 + p_1)h_{1/2}''}{(p_0 - p_{1/2})(p_{1/2} - p_1)} - \frac{(p_0 + p_{1/2})h_1''}{(p_0 - p_1)(p_{1/2} - p_1)}, \tag{2.50}$$

$$c_2 = \frac{p_{1/2}p_1 h_0''}{(p_0 - p_{1/2})(p_0 - p_1)} - \frac{p_0 p_1 h_{1/2}''}{(p_0 - p_{1/2})(p_{1/2} - p_1)} + \frac{p_0 p_{1/2} h_1''}{(p_0 - p_1)(p_{1/2} - p_1)}, \tag{2.51}$$

$$a_3 = \frac{v_0'}{(x_0 - x_{1/2})(x_0 - x_1)} - \frac{v_{1/2}'}{(p_0 - p_{1/2})(p_{1/2} - p_1)} + \frac{v_1'}{(p_0 - p_1)(p_{1/2} - p_1)}, \tag{2.52}$$

$$b_3 = -\frac{(p_{1/2}+p_1)v'_0}{(p_0-p_{1/2})(p_0-p_1)} + \frac{(p_0+p_1)v'_{1/2}}{(p_0-p_{1/2})(p_{1/2}-p_1)} - \frac{(p_0+p_{1/2})v'_1}{(p_0-p_1)(p_{1/2}-p_1)}, \quad (2.53)$$

$$c_3 = \frac{p_{1/2}p_1v'_0}{(p_0-p_{1/2})(p_0-p_1)} - \frac{p_0p_1v'_{1/2}}{(p_0-p_{1/2})(p_{1/2}-p_1)} + \frac{p_0p_{1/2}v'_1}{(p_0-p_1)(p_{1/2}-p_1)}, \quad (2.54)$$

$$a_4 = \frac{v''_0}{(x_0-x_{1/2})(x_0-x_1)} - \frac{v''_{1/2}}{(p_0-p_{1/2})(p_{1/2}-p_1)} + \frac{v''_1}{(p_0-p_1)(p_{1/2}-p_1)}, \quad (2.55)$$

$$b_4 = -\frac{(p_{1/2}+p_1)v''_0}{(p_0-p_{1/2})(p_0-p_1)} + \frac{(p_0+p_1)v''_{1/2}}{(p_0-p_{1/2})(p_{1/2}-p_1)} - \frac{(p_0+p_{1/2})v''_1}{(p_0-p_1)(p_{1/2}-p_1)}, \quad (2.56)$$

$$c_4 = \frac{p_{1/2}p_1v''_0}{(p_0-p_{1/2})(p_0-p_1)} - \frac{p_0p_1v''_{1/2}}{(p_0-p_{1/2})(p_{1/2}-p_1)} + \frac{p_0p_{1/2}v''_1}{(p_0-p_1)(p_{1/2}-p_1)}. \quad (2.57)$$

Ein beliebiger Zustandspunkt im Zweiphasengebiet ist durch die Vorgabe des Druckes p und der Dampfziffer x bereits eindeutig festgelegt. Das Interpolationsgebiet zur Anwendung der bisher aufgelisteten Gleichungen zu linearen Approximation wird somit aus durch $x \in [0,1]$ und $p \in [p_0, p_1]$ beschrieben. Eine grafische Veranschaulichung des Interpolationsgebietes liefert Abbildung 2.13.

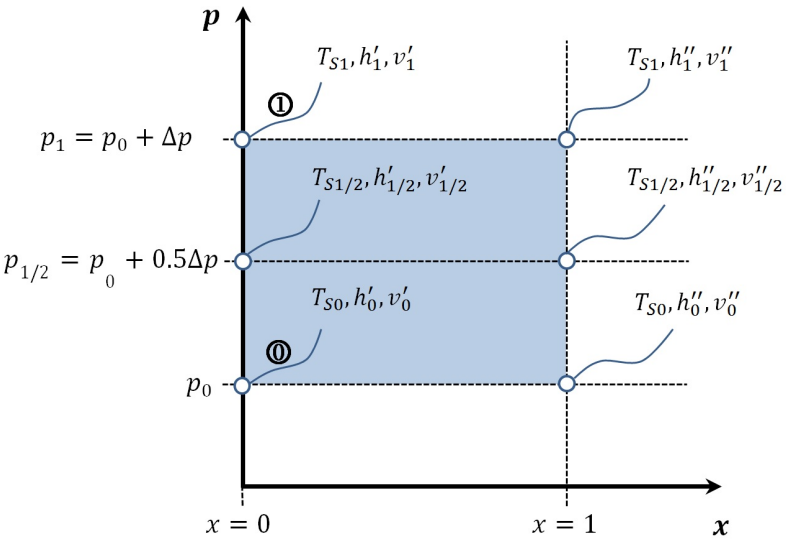

Abbildung 2.13: Interpolationsgebiet bei quadratischer Approximation im Zweiphasengebiet.

Für eine beliebige Dampfziffer x gelten bekanntermaßen

$$h = xh'' + (1-x)h' \quad (2.58)$$

und

$$v = xv'' + (1-x)v', \tag{2.59}$$

als Zusammenhänge für die Berechnung von Enthalpie und spezifischen Volumen. Die innere Energie wird über den Zusammenhang $u = h - pv$, welchen man durch Umformung von Gleichung (1.22) erhält, gewonnen. Diese Beziehungen (2.58), (2.59) und (2.59) sind identisch mit den Beziehungen (2.20), (2.21) und (2.21), die bereits bei der linearen Approximation verwendet wurden. Ein Einsetzen der aus (2.39) und (2.40) bekannten Ausdrücke liefert für die spezifische Enthalpie aus (2.58) einen Interpolationswert

$$\begin{aligned} h_n(x,p) &= x(a_2p^2 + b_2p + c_2) + (1-x)(a_1p^2 + b_1p + c_1) \\ &= p^2(a_1 + x(a_2 - a_1)) + p(b_1 + x(b_2 - b_1)) + c_1 + x(H_c - c_1). \end{aligned} \tag{2.60}$$

Ein Einsetzen der aus (2.41) und (2.42) bekannten Ausdrücke liefert für das spezifische Volumen aus (2.59) die Approximation

$$\begin{aligned} v_n(x,p) &= x(a_4p^2 + b_4p + c_4) + (1-x)(a_3p^2 + b_3p + c_3) \\ &= p^2(a_3 + x(a_4 - a_3)) + p(b_3 + x(b_4 - b_3)) + c_3 + x(c_4 - c_3). \end{aligned} \tag{2.61}$$

Die approximierte innere Energie wird nach Umformung von (1.22) durch

$$u_n(x,p) = h_n(x,p) - pv_n(x,p) \tag{2.62}$$

berechnet, was durch Einsetzen von (2.60) und (2.61) zu

$$\begin{aligned} u_n(x,p) = x(a_2p^2 + b_2p + c_2) + (1-x)(a_1p^2 + b_1p + c_1) \\ - px(a_4p^2 + b_4p + c_4) + (1-x)(a_3p^2 + b_3p + c_3) \end{aligned} \tag{2.63}$$

wird. Für einen Näherungswert der Siedetemperatur innerhalb des Interpolationsgebietes gilt unter Verwendung der Ausdrücke aus (2.43), (2.44) und (2.45)

$$T_{S,n}(x,p) = T_{S,n}(p) = a_0p^2 + b_0p + c_0, \tag{2.64}$$

was bei festgehaltenem Druck zufolge Unabhängigkeit vom Dampfgehalt, schlicht der bereits bekannten Gleichung (2.38) entspricht.

2.5.2 Einfache Auswertungen

Nachfolgend wird wiederum ein einführendes Beispiel diskutiert, wobei es zur Anwendung der quadratischen Approximation kommt. Für die beispielhaften Auswertungen gelte erneut, wie bereits in Abschnitt 2.4.2, $p_0 = 7MPa$ und für $p_1 = 2.45p_0$, d.h. $\Delta p = 1.45p_0$. Für die Berechnung wird das aus Abbildung 2.13 bekannte zweidimensionale Interpolationsgebiet in beiden Dimensionen in 51 Punkte gleichen Abstands unterteilt. In jedem Punkt des entstehenden Rasters werden sowohl die expliziten Zustandsgrößen nach IAPWS-IF97 als auch die interpolierten Werte errechnet. Im Anschluss können die Abweichungen der jeweiligen Zustandsgrößen bei Vergleich von Interpolation und Werten gemäß IAPWS-IF97 untersucht werden. Dabei werden die bereits aus Gleichungen (2.27), (2.28) und (2.29) bekannten Ausdrücke zur

Berechnung der relativen Abweichung herangezogen. Abbildungen 2.14, 2.15 und 2.16 zeigen die Ergebnisse der Abweichungsanalysen für die Enthalpie, das spezifische Volumen und die innere Energie. Die Ergebnisse aus Abbildungen 2.5, 2.15 und 2.16 zeigen, dass bei quadratischer Näherung sowohl betragsmäßig positive als auch negative Werte auftreten. Wandert man in einer kleinen Umgebung der mittleren Stückstelle bei $p_{1/2}$ zu Druckwerten mit $p < p_{1/2}$ weist die Abweichung ein bestimmtes Vorzeichen (plus oder minus) auf, welches auf der anderen Seite ($p > p_{1/2}$) innerhalb der Umgebung entsprechend umgekehrt (minus oder plus) vorliegt. Dies ist eine logische Konsequenz bei einem nicht perfekten Fit der jeweiligen quadratischen Näherungsfunktion. Beim spezifischen Volumen ergeben sich nach Abbildung 2.15 betragsmäßig die größten Abweichungen. Diese großen Abweichungen sind darauf zurückzuführen, dass der tatsächliche Verlauf nur eingeschränkt durch eine quadratische Näherung nachgebildet werden kann. Weiters ist Abbildung 2.8 die Lage der für die Approximation relevanten Zustandspunkte sowie das daraus entstehende Interpolationsgebiet in der p, T-Ebene zu entnehmen.

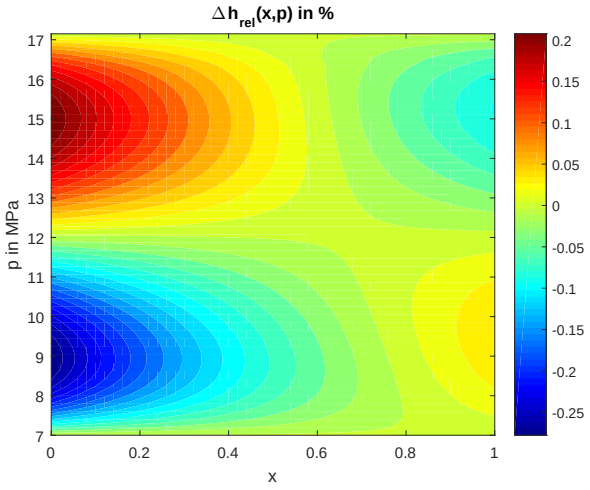

Abbildung 2.14: Relative Abweichung der approximierten Enthalpie im Zweiphasengebiet für $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$.

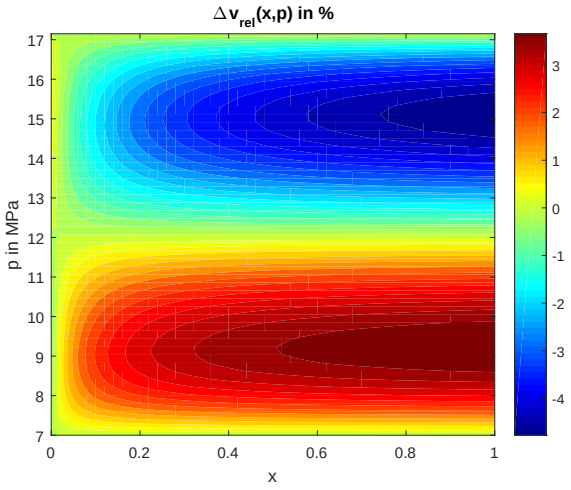

Abbildung 2.15: Relative Abweichung des approximierten spezifischen Volumens im Zweiphasengebiet für $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$.

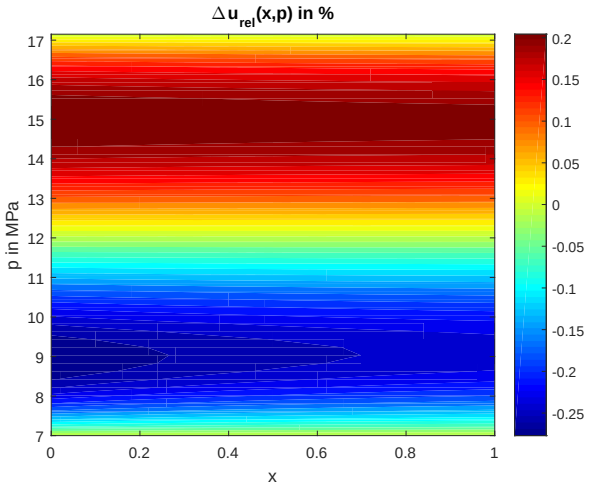

Abbildung 2.16: Relative Abweichung der approximierten inneren Energie im Zweiphasengebiet für $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$.

Abbildungen 2.17, 2.18 und 2.19 zeigen die Unterschiede von approximierten zu tatsächlichen Werten an der Siede- bzw. Taulinie für die Enthalpie, das spezifische Volumen und die innere Energie. Aus den Verläufen lassen sich erneut die Vorzeichen der Abweichungen erklären. Weiters ist in Abbildungen 2.17 bis 2.18 der geforderte parabolische Verlauf der Interpolation zu erkennen.

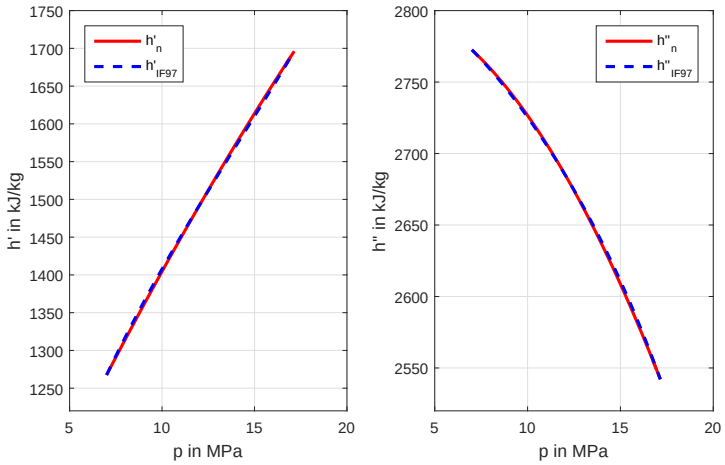

Abbildung 2.17: Vergleich von approximierten und IF97-Werten für die Enthalpie von siedender Flüssigkeit und Sattdampf, $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$.

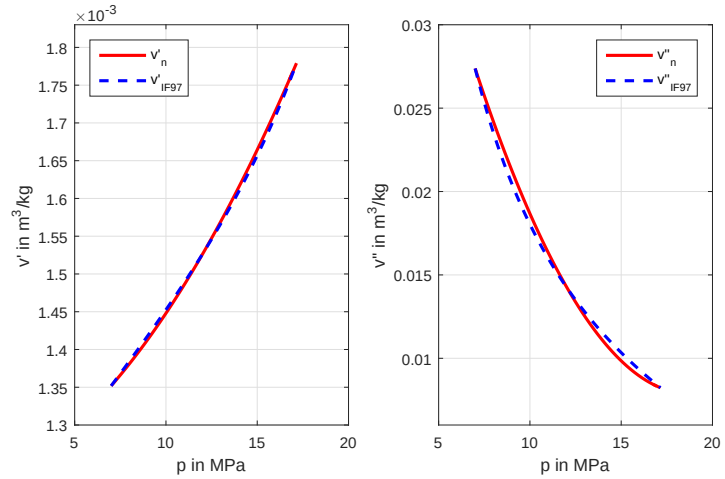

Abbildung 2.18: Vergleich von approximierten und IF97-Werten für das spezifische Volumen von siedender Flüssigkeit und Sattdampf, $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$.

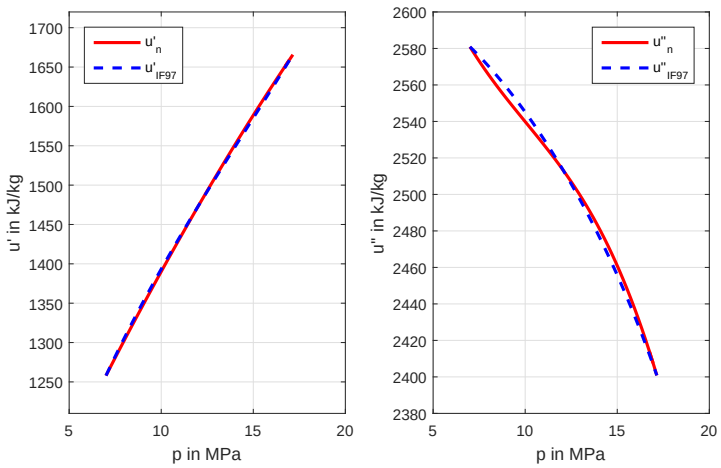

Abbildung 2.19: Vergleich von approximierten und IF97-Werten für die innere Energie von siedender Flüssigkeit und Sattdampf, $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$.

2.6 Fehleranalyse im Zweiphasengebiet

Nachfolgend kommt es zum Vergleich der bisher erarbeiteten Ansätze zur Approximation im Zweiphasengebiet. Dabei werden über das gesamte relevante Druckgebiet des Zweiphasengebietes charakteristische Abweichungsverläufe der in Abschnitten 2.4 und 2.5 genäherten Zustandsgrößen ermittelt.

2.6.1 Sensitivitätsanalyse

Bei der Sensitivitätsanalyse werden die maximalen Abweichungen Δh_{max}, Δv_{max} und Δu_{max} bei fest vorgegebener relativer Druckdifferenz $\Delta p/p_0$ und gegebenem Ausgangsdruckniveau p_0 ermittelt. Im Folgenden wird die Vorgangsweise zur Sensitivitätsanalyse erläutert.

Zuerst kommt es zur Berechnung der Verläufe von $h'_{IF97}(p)$, $v'_{IF97}(p)$, $u'_{IF97}(p)$, $h''_{IF97}(p)$, $v''_{IF97}(p)$ und $u''_{IF97}(p)$ im Druck-Intervall $[p_0, p_0 + \Delta p]$. Im nächsten Schritt berechnet man die linear oder quadratisch genäherten Verläufe, $h'_n(p)$, $v'_n(p)$, $u'_n(p)$, $h''_n(p)$, $v''_n(p)$ und $u''_n(p)$ im Druck-Intervall $[p_0, p_0 + \Delta p]$. Zur Bestimmung einer charakteristischen Maximalabweichung müssen vorerst die Verläufe

$$\Delta h'_{rel}(p) = \frac{h'_n(p) - h'_{IF97}(p)}{h'_{IF97}(p)}, \quad \Delta h''_{rel}(p) = \frac{h''_n(p) - h''_{IF97}(p)}{h''_{IF97}(p)}, \tag{2.65}$$

$$\Delta v'_{rel}(p) = \frac{v'_n(p) - v'_{IF97}(p)}{v'_{IF97}(p)}, \quad \Delta v''_{rel}(p) = \frac{v''_n(p) - v''_{IF97}(p)}{v''_{IF97}(p)}, \tag{2.66}$$

$$\Delta u'_{rel}(p) = \frac{u'_n(p) - u'_{IF97}(p)}{u'_{IF97}(p)}, \quad \Delta u''_{rel}(p) = \frac{u''_n(p) - u''_{IF97}(p)}{u''_{IF97}(p)} \tag{2.67}$$

wiederum in einem Druck-Intervall $[p_0, p_0 + \Delta p]$ bestimmt werden. Aus Gleichungen (2.65), (2.66) und (2.67) ist ersichtlich, dass die Abweichungen nur für sieden-

des Wasser bzw. gesättigten Dampf zu bestimmen sind. Diese Wahl beruht darauf, dass im gesamten zu analysierenden Druck-Intervall $[p_0, p_0 + \Delta p]$ bei einer beliebigen Dampfziffer mit $x \in]0, 1[$ auftretenden Abweichungen stets kleiner sind, als Maximalwerte bei $x = 0$ oder $x = 1$. Somit ist die für die Sensitivitätsanalyse charakteristische Maximalabweichung mit den Werten aus (2.65), (2.66) und (2.67) über

$$\Delta h_{max}(p_0) = max(|\Delta h'_{rel}(p)|, |\Delta h''_{rel}(p)|), \tag{2.68}$$

$$\Delta v_{max}(p_0) = max(|\Delta v'_{rel}(p)|, |\Delta v''_{rel}(p)|), \tag{2.69}$$

$$\Delta u_{max}(p_0) = max(|\Delta u'_{rel}(p)|, |\Delta u''_{rel}(p)|) \tag{2.70}$$

mit $p \in [p_0, p_0 + \Delta p]$ zu bestimmen. Die beiden folgenden Abbildungen 2.20 und 2.21 zeigen die sich gemäß Gleichungen (2.68), (2.69) und (2.70) ergebenden maximalen Abweichungen sowohl für eine lineare als auch für eine quadratische Näherung. In beiden Fällen werden jeweils zwei Grafiken verwendet, um die Entwicklung der Verläufe in niedrigen Druckbereichen darstellen zu können. Das spezifische Volumen kann jeweils als kritische Größe hinsichtlich maximal auftretender Abweichungen angesehen werden. Weiters kann den Grafiken entnommen werden, dass nicht nur im Falle einer quadratischen Näherung sondern auch bei Anwendung einer linearen Näherung die Verläufe der Maximalabweichungen von Enthalpie und innerer Energie in weiten Druckbereichen des Zweiphasengebietes beinahe deckungsgleich sind. Darüber hinaus ist auch deutlich ersichtlich, dass sich bei Anwendung eines gleich großen Druckintervalls der Fehler der quadratischen Approximation rund eine Dekade unter jenem der linearen Näherung befindet.

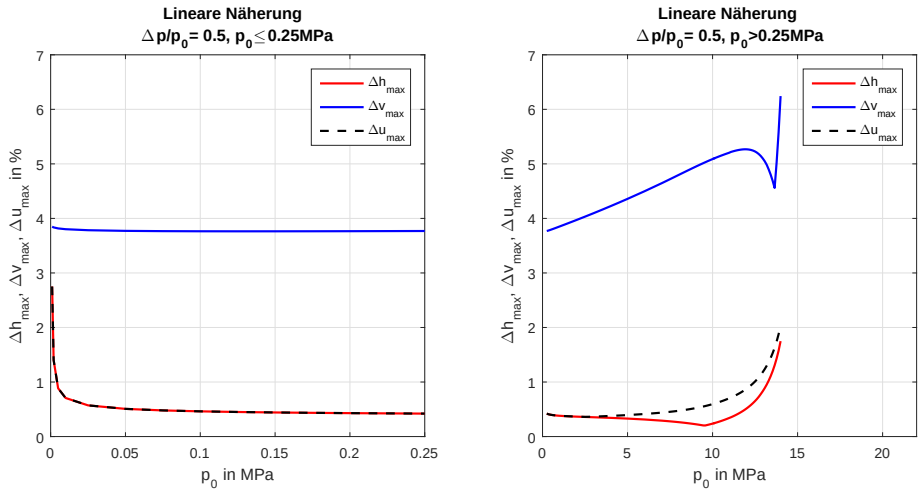

Abbildung 2.20: Sensitivitätsanalyse bei linearer Näherung und $\Delta p/p_0 = 0.5$.

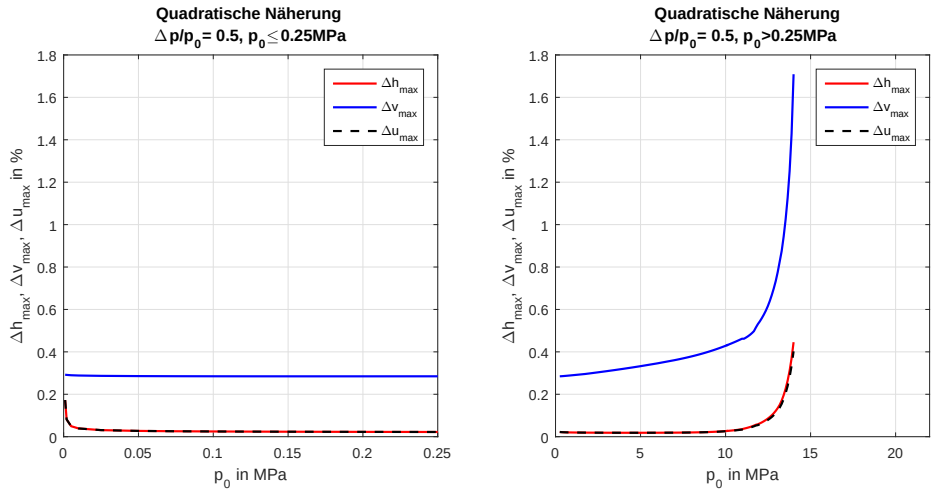

Abbildung 2.21: Sensitivitätsanalyse bei quadratischer Näherung und $\Delta p/p_0 = 0.5$.

In den beiden Abbildungen 2.20 und 2.21 wird jeweils eine lineare Skalierung der Ordinate verwendet. In den drei folgenden Abbildungen 2.22, 2.23 und 2.24 kommt es zum Vergleich von linearer und quadratischer Approximation jeweils über den gesamten relevanten Druckbereich im Zweiphasengebiet bei logarithmischer Skalierung der Ordinate. In allen der letztgenannten Abbildungen ist wiederum die deutliche Überlegenheit der quadratischen Approximation hinsichtlich der auftretenden Maximalabweichung ersichtlich. Der diskontinuierliche Verlauf bei quadratischer Näherung im oberen Druckbereich (13-17MPa) wird später untersucht.

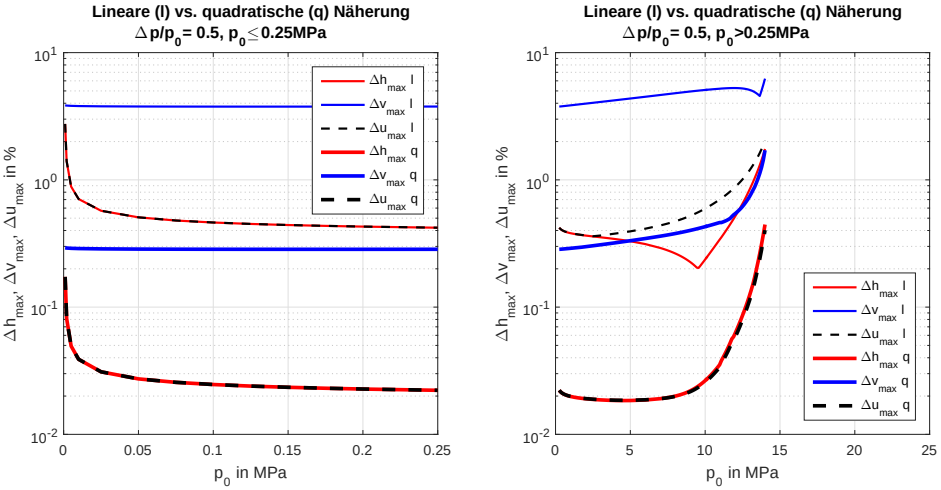

Abbildung 2.22: Sensitivitätsanalyse bei linearer und quadratischer Näherung, $\Delta p/p_0 = 0.5$, logarithmische Darstellung.

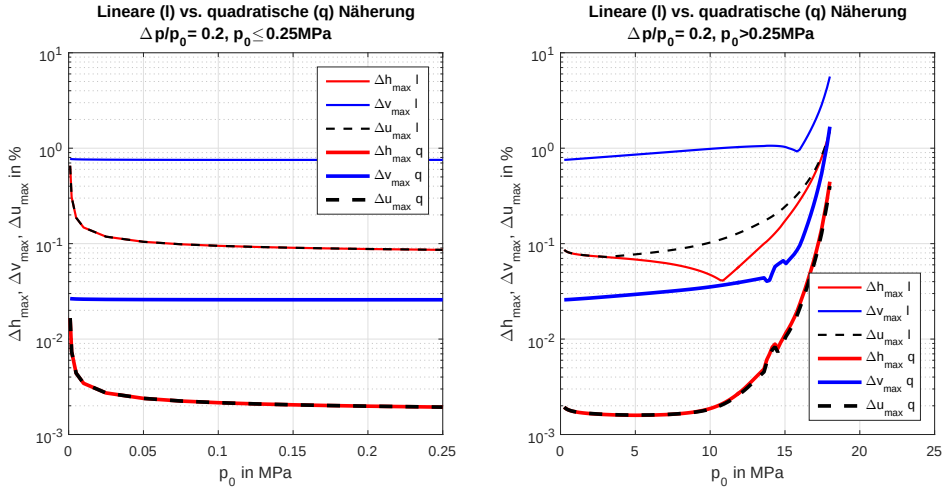

Abbildung 2.23: Sensitivitätsanalyse bei linearer und quadratischer Näherung, $\Delta p/p_0 = 0.2$, logarithmische Darstellung.

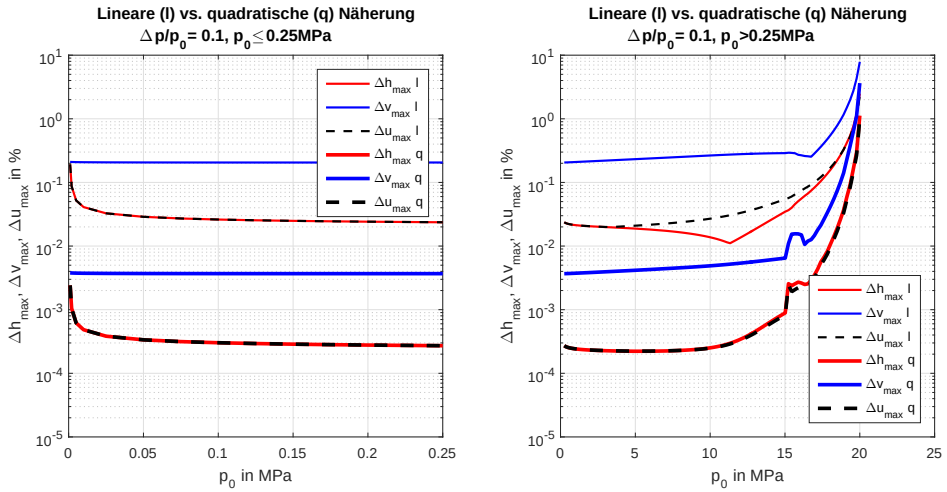

Abbildung 2.24: Sensitivitätsanalyse bei linearer und quadratischer Näherung, $\Delta p/p_0 = 0.1$, logarithmische Darstellung.

Die abschließenden Ausführungen zur Sensitivitätsanalyse werden sich mit den bei linearer Näherung auftretenden Spitzen bzw. Unregelmäßigkeiten in den Verläufen von Enthalpie und spezifischem Volumen beschäftigen. Einerseits werden wieder die bereits bekannten sich aus Gleichungen (2.68) und (2.69) ergebenden Verläufe ermittelt. Zusätzlich kommt es noch zur Auswertung der Verläufe von

$$\Delta h'_{max}(p_0) = max(|\Delta h'_{rel}(p)|), \tag{2.71}$$

$$\Delta h''_{max}(p_0) = max(|\Delta h''_{rel}(p)|), \tag{2.72}$$

$$\Delta v'_{max}(p_0) = max(|\Delta v'_{rel}(p)|), \tag{2.73}$$

$$\Delta v''_{max}(p_0) = max(|\Delta v''_{rel}(p)|) \tag{2.74}$$

mit $p \in [p_0, p_0 + \Delta p]$. Die nachfolgende Abbildung 2.25 zeigt die Verläufe aus (2.68) und (2.69) und (2.71) bis (2.74) und liefert somit den Nachweis für das Auftreten der Spitzen in den Verläufen von Enthalpie und spezifischem Volumen bei linearer Näherung.

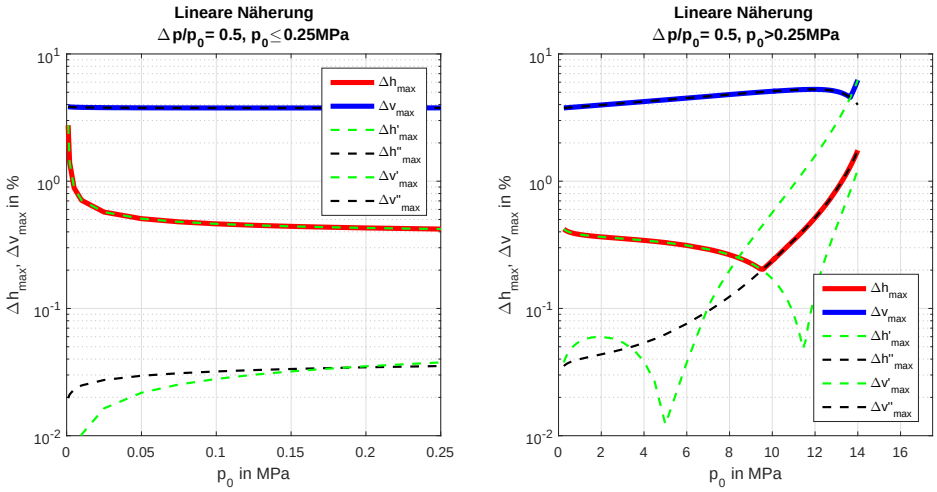

Abbildung 2.25: Nachweis der auftretenden Spitzen in den Verläufen von Enthalpie und spezifischem Volumen bei linearer Näherung, $\Delta p/p_0 = 0.5$, logarithmische Darstellung.

Die nachfolgende Abbildung 2.26 zeigt die Verläufe aus (2.68) und (2.69) und (2.71) bis (2.74) und liefert somit einen anschaulichen Nachweis für das Auftreten der Unregelmäßigkeiten in den Verläufen von Enthalpie und spezifischem Volumen bei quadratischer Näherung und Vergleich von Werten an der Siede- und Taulinie. Die diskontinuierlichen Stellen in den Verläufen bei quadratischer Näherung im oberen Druckbereich könnten auf verschiedenen Tatsachen zurückgeführt werden. Einerseits werden die Sättigungsgrößen nicht über ein Phasengleichgewicht, sondern in einer endlich kleinen Umgebung der betreffenden Grenzregionen am Zweiphasengebiet ermittelt.

Andererseits zeichnet sich die IAPWS-IF97 in verschiedenen Regionen durch unterschiedliche Genauigkeiten aus. Dies ist insbesondere dann von Relevanz, wenn regionsübergreifende Auswertungen durchgeführt werden.

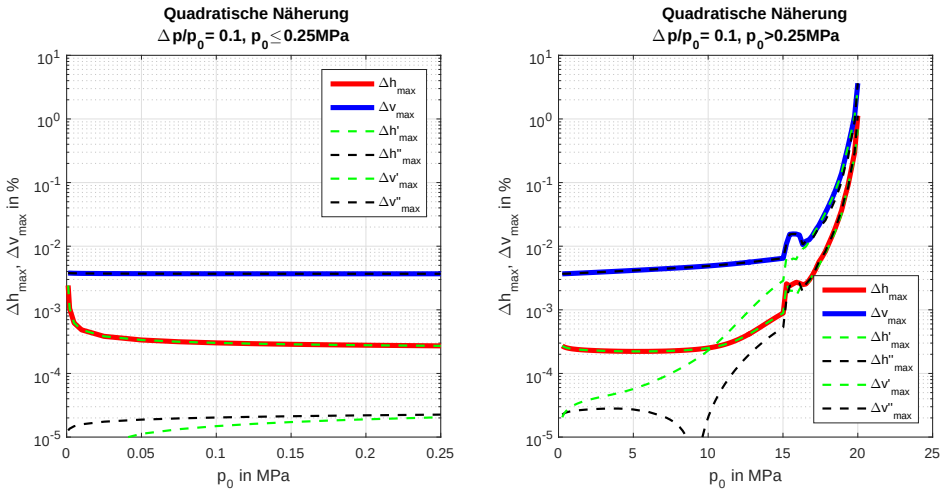

Abbildung 2.26: Nachweis der Unregelmäßigkeiten in den Verläufen von Enthalpie und spezifischem Volumen bei quadratischer Näherung, $\Delta p/p_0 = 0.1$, logarithmische Darstellung.

2.6.2 Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung

Aufbauend auf den vorigen Abschnitt 2.6.1 zur Sensitivitätsanalyse im Zweiphasengebiet bei linearer oder quadratischer Approximation kommt es nun zur Ermittlung von Gültigkeitsbereichen zur Fehlereinhaltung. Ziel dabei ist es, bei gegebenem Ausgangsdruckniveau p_0 und einer zulässigen Fehlertoleranz Δ_{zul} die zugehörige relative Druckdifferenz $\Delta p_{zul}/p_0$ zu ermitteln. Im Folgenden wird die Vorgangsweise dafür erläutert.

1. Zuerst kommt es zur Berechnung der Verläufe von $h'_{IF97}(p)$, $v'_{IF97}(p)$, $u'_{IF97}(p)$, $h''_{IF97}(p)$, $v''_{IF97}(p)$ und $u''_{IF97}(p)$ im Druck-Intervall $[p_0, p_0 + \Delta p]$.

2. Im nächsten Schritt berechnet man die linear oder quadratisch genäherten Verläufe, entweder $h'_n(p)$ und $h''_n(p)$, $v'_n(p)$ und $v''_n(p)$ oder $u'_n(p)$ und $u''_n(p)$ im Druck-Intervall $[p_0, p_0 + \Delta p]$.

3. Im dritten Schritt wird

$$\Delta h_{max}(p_0) = max(|\Delta h'_{rel}(p)|, |\Delta h''_{rel}(p)|), \tag{2.75}$$

$$\Delta v_{max}(p_0) = max(|\Delta v'_{rel}(p)|, |\Delta v''_{rel}(p)|) \tag{2.76}$$

oder

$$\Delta u_{max}(p_0) = max(|\Delta u'_{rel}(p)|, |\Delta u''_{rel}(p)|) \tag{2.77}$$

unter Verwendung von

$$\Delta h'_{rel}(p) = \frac{h'_n(p) - h'_{IF97}(p)}{h'_{IF97}(p)}, \quad \Delta h''_{rel}(p) = \frac{h''_n(p) - h''_{IF97}(p)}{h''_{IF97}(p)}, \tag{2.78}$$

$$\Delta v'_{rel}(p) = \frac{v'_n(p) - v'_{IF97}(p)}{v'_{IF97}(p)}, \quad \Delta v''_{rel}(p) = \frac{v''_n(p) - v''_{IF97}(p)}{v''_{IF97}(p)} \tag{2.79}$$

oder

$$\Delta u'_{rel}(p) = \frac{u'_n(p) - u'_{IF97}(p)}{u'_{IF97}(p)}, \quad \Delta u''_{rel}(p) = \frac{u''_n(p) - u''_{IF97}(p)}{u''_{IF97}(p)} \tag{2.80}$$

wiederum in einem Druck-Intervall $[p_0, p_0 + \Delta p]$ ermittelt.

4. Nun kommt es zum Vergleich von vorgegebener Fehlertoleranz Δ_{zul} mit den Werten aus (2.75), (2.76) oder (2.77).

   (a) Liefert der Vergleich

   $$\frac{|\Delta h_{max}(p_0) - \Delta_{zul}|}{\Delta_{zul}} > \epsilon, \tag{2.81}$$

   $$\frac{|\Delta v_{max}(p_0) - \Delta_{zul}|}{\Delta_{zul}} > \epsilon \tag{2.82}$$

   oder

   $$\frac{|\Delta u_{max}(p_0) - \Delta_{zul}|}{\Delta_{zul}} > \epsilon, \tag{2.83}$$

   wobei ϵ einem endlich kleinen Wert für das Abbruchkriterium entspricht, so muss erneut zu Punkt 1. zurückgekehrt werden und entsprechend einer Iteration (z.B. Bisektion) eine neue Druckdifferenz Δp für eine erneute Berechnung herangezogen werden.

   (b) Erhält man jedoch

   $$\frac{|\Delta h_{max}(p_0) - \Delta_{zul}|}{\Delta_{zul}} \leq \epsilon, \tag{2.84}$$

   $$\frac{|\Delta v_{max}(p_0) - \Delta_{zul}|}{\Delta_{zul}} \leq \epsilon \tag{2.85}$$

   oder

   $$\frac{|\Delta u_{max}(p_0) - \Delta_{zul}|}{\Delta_{zul}} \leq \epsilon, \tag{2.86}$$

   so kann zu einem neuen Ausgangsdruck p_0 übergegangen und $\Delta p_{zul} = \Delta p$ gesetzt werden.

Die soeben diskutierte Vorgangsweise zur Bestimmung der gesuchten Gültigkeitsbereiche kann erneut sowohl für die lineare Approximation als auch für den quadratischen Fall verwendet werden. In Anlehnung an die Erkenntnisse aus Abschnitt 2.6.1 kann bereits davon ausgegangen werden, dass die zulässigen Druckdifferenzen Δp_{zul} bei gleichem Ausgangsdruck p_0 und gleicher vorgegebener Fehlertoleranz

Δ_{zul} bei quadratischer Näherung entsprechend größere Werte annehmen. Die beiden nachfolgenden Abbildungen 2.27 und 2.28 zeigen erste Auswertungen zur Definition von Gültigkeitsbereichen bei einer vorgegebenen Fehlertoleranz $\Delta_{zul} = 1\%$ sowohl für die lineare als auch für die quadratische Näherung. Gemäß der bereits diskutierten Erwartung, ergeben sich bei Anwendung einer quadratischen Approximation entsprechend größere $\Delta p_{zul}/p_0$-Werte, genauer gesagt liegt mehr als ein Faktor 2 zwischen den Werten von linearer und quadratischer Approximation.

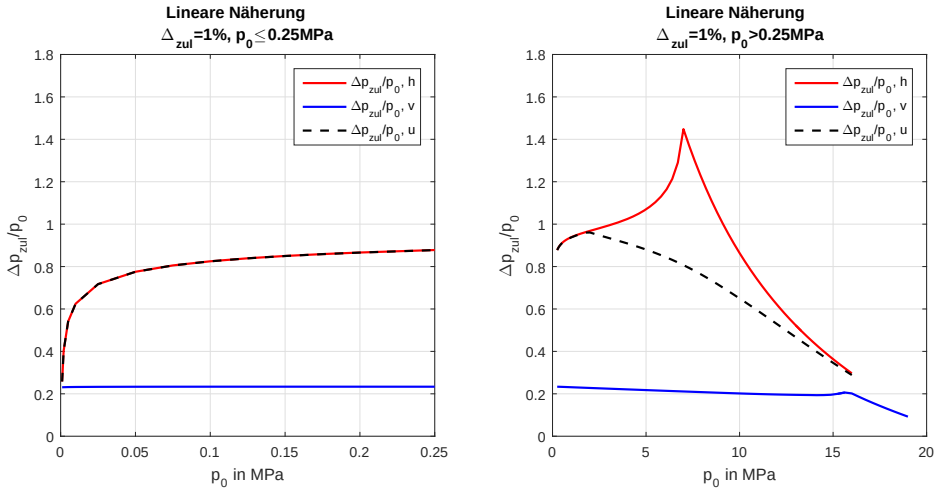

Abbildung 2.27: Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung bei linearer Näherung und $\Delta_{zul} = 1\%$.

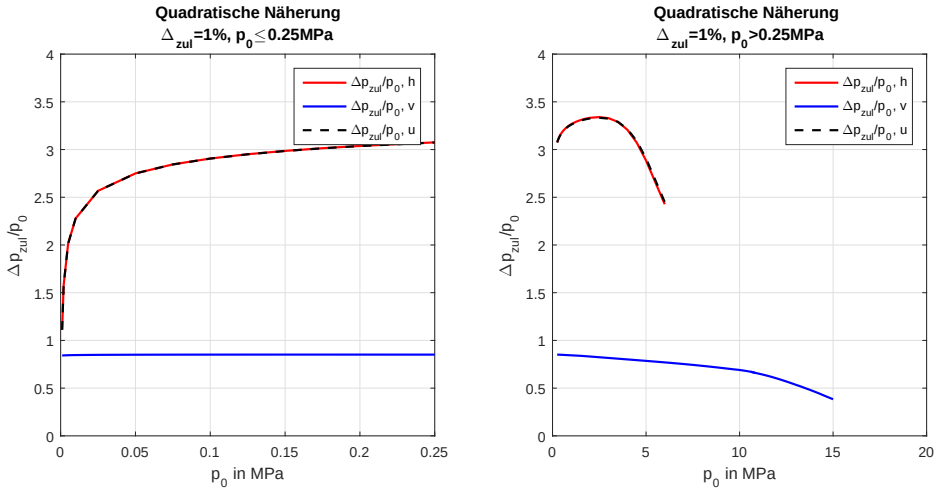

Abbildung 2.28: Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung bei quadratischer Näherung und $\Delta_{zul} = 1\%$.

Die vier folgenden Abbildungen 2.29, 2.30, 2.31 und 2.32 zeigen jeweils eine Gegenüberstellung der zulässigen Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung bei unterschiedlichen zulässigen Fehlertoleranzen und Anwendung von linearer und quadratischer Approximation.

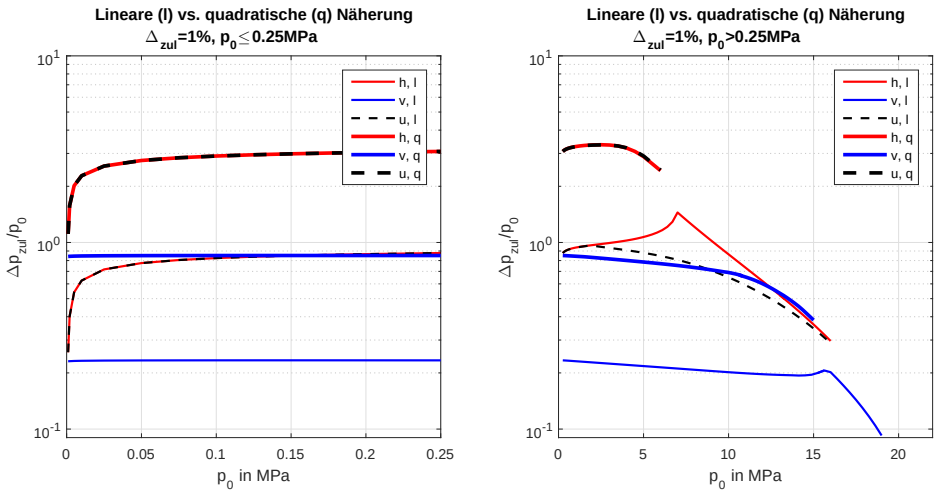

Abbildung 2.29: Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung bei linearer und quadratischer Näherung, $\Delta_{zul} = 1\%$, logarithmische Darstellung.

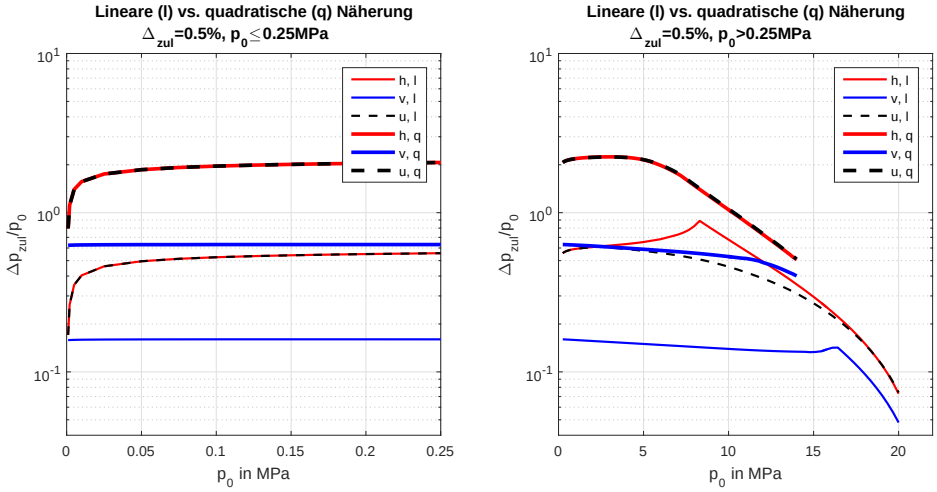

Abbildung 2.30: Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung bei linearer und quadratischer Näherung, $\Delta_{zul} = 0.5\%$, logarithmische Darstellung.

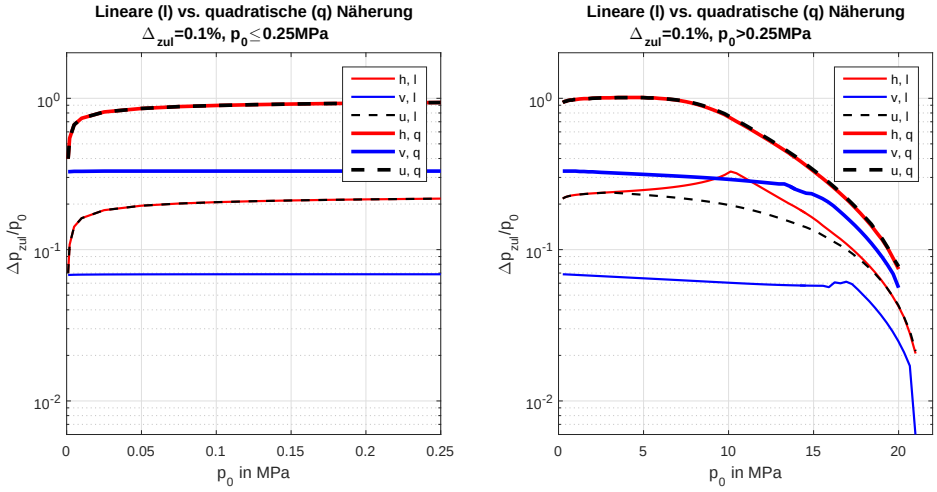

Abbildung 2.31: Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung bei linearer und quadratischer Näherung, $\Delta_{zul} = 0.1\%$, logarithmische Darstellung.

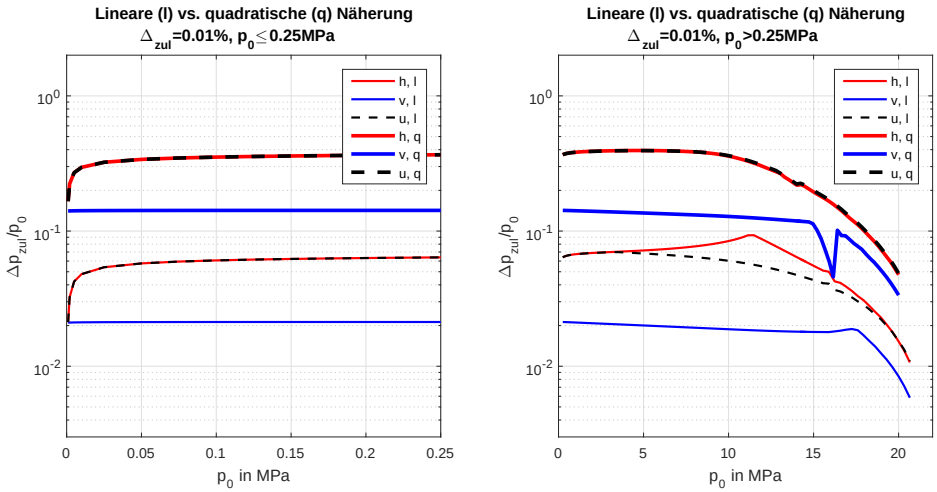

Abbildung 2.32: Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung bei linearer und quadratischer Näherung, $\Delta_{zul} = 0.01\%$, logarithmische Darstellung.

Abbildungen 2.33, 2.34 und 2.35 zeigen jeweils gesondert für Enthalpie, spezifisches Volumen und innere Energie die Verläufe der Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung bei Variation der zulässigen Fehlertoleranz Δ_{zul} und linearer Näherung.

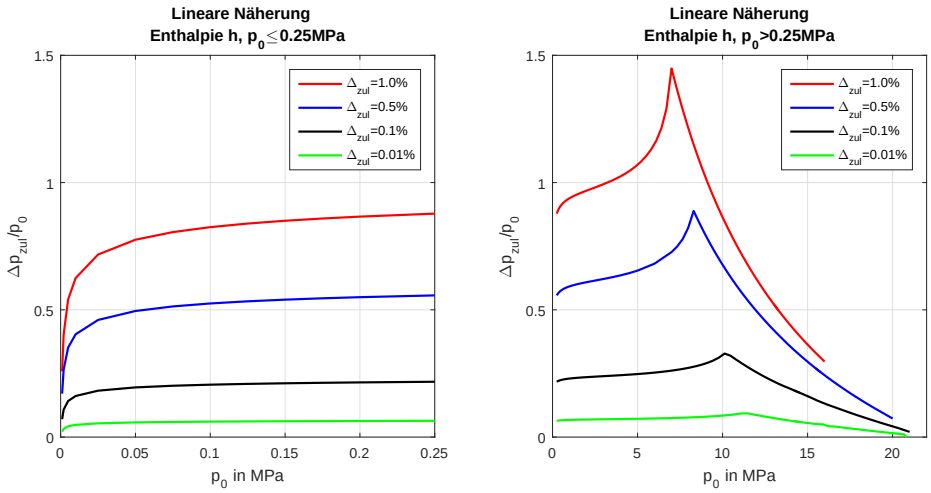

Abbildung 2.33: Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung für die Enthalpie bei linearer Näherung und Variation von Δ_{zul}, lineare Darstellung.

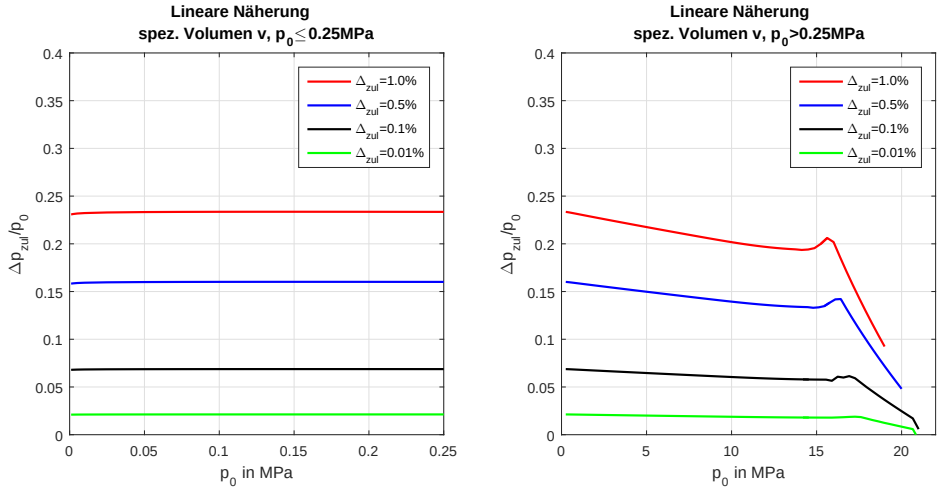

Abbildung 2.34: Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung für das spezifische Volumen bei linearer Näherung und Variation von Δ_{zul}, lineare Darstellung.

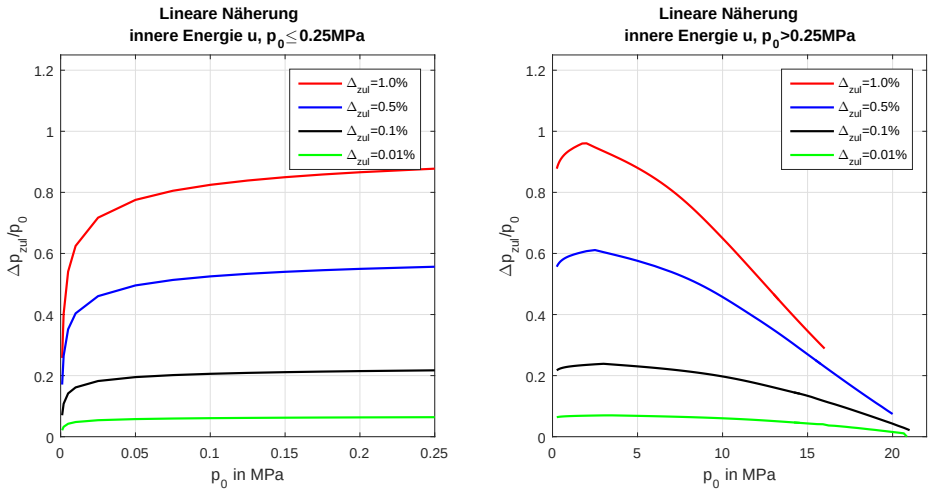

Abbildung 2.35: Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung für die innere Energie bei linearer Näherung und Variation von Δ_{zul}, lineare Darstellung.

Abbildungen 2.36, 2.37 und 2.38 zeigen jeweils gesondert für Enthalpie, spezifisches Volumen und innere Energie die Verläufe der Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung bei Variation der zulässigen Fehlertoleranz Δ_{zul} und quadratischer Näherung.

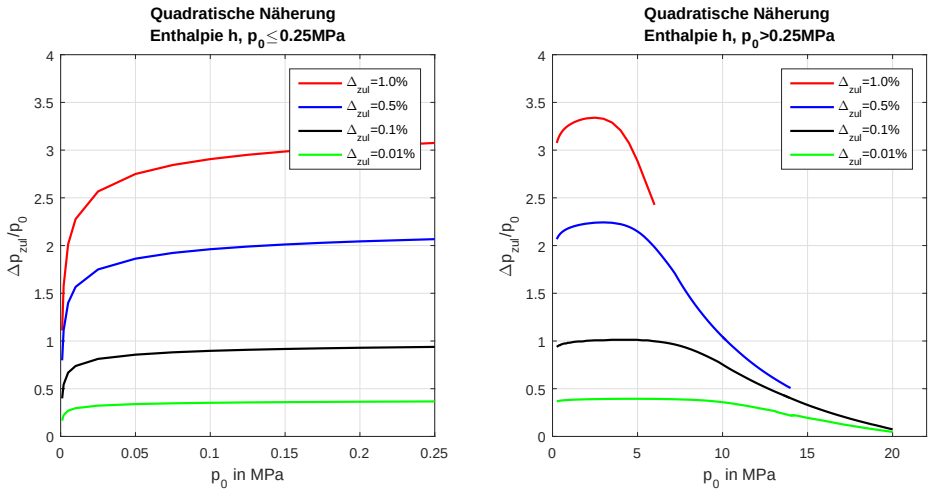

Abbildung 2.36: Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung für die Enthalpie bei quadratischer Näherung und Variation von Δ_{zul}, lineare Darstellung.

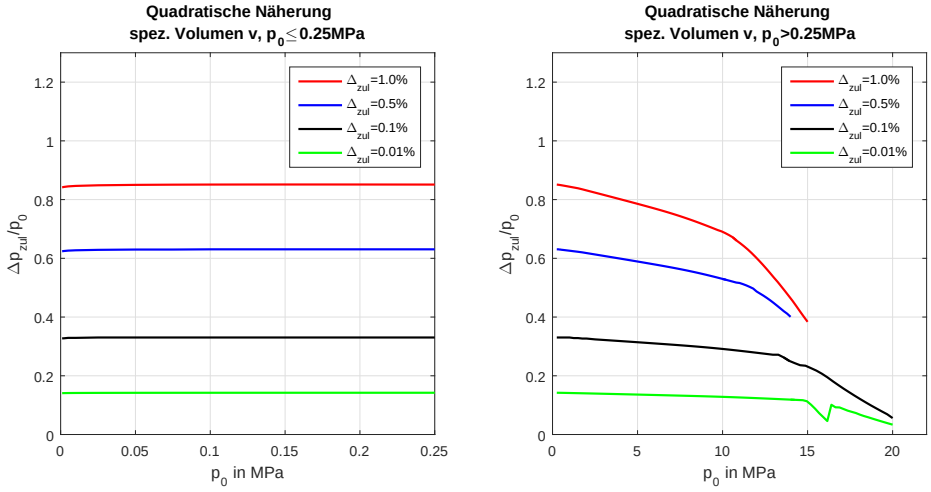

Abbildung 2.37: Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung für das spezifische Volumen bei quadratischer Näherung und Variation von Δ_{zul}, lineare Darstellung.

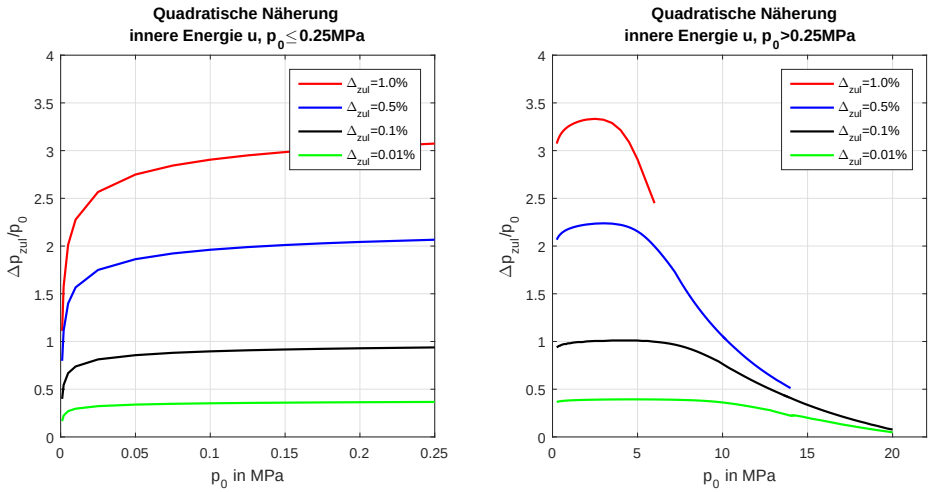

Abbildung 2.38: Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung für die innere Energie bei quadratischer Näherung und Variation von Δ_{zul}, lineare Darstellung.

Abschließend wird erneut der Effekt der 'Spitzenbildung' in den Verläufen von Enthalpie bei linearer Näherung diskutiert. In der zu Beginn dieses Abschnittes erläuterten Vorgehensweise zur Ermittlung von Δp_{zul} wird nun Gleichung (2.75) durch

$$\Delta h'_{max}(p_0) = max(|\Delta h'_{rel}(p)|) \tag{2.87}$$

bzw.

$$\Delta h''_{max}(p_0) = max(|\Delta h''_{rel}(p)|), \tag{2.88}$$

mit $p \in [p_0, p_0 + \Delta p]$ ersetzt. Somit erhält man sowohl für siedendes Wasser als auch für gesättigten Dampf eigene Grenzkurven zur Einhaltung der geforderten Fehlertoleranz. Dieses Vorgehen wird exemplarisch für $\Delta_{zul} = 0.5\%$ und $\Delta_{zul} = 0.1\%$ angewendet, was schlussendlich die in Abbildung 2.39 gezeigten Ergebnisse liefert und die Bildung der Spitzen anschaulich untermauert.

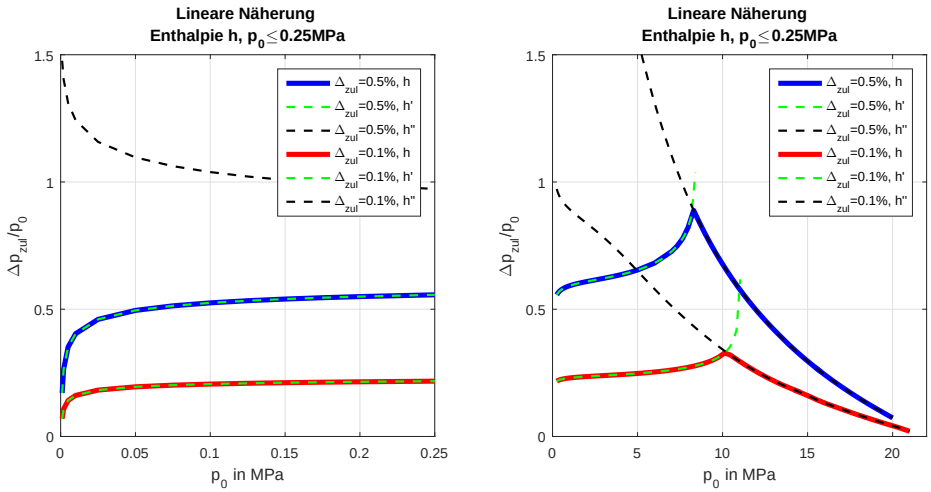

Abbildung 2.39: Nachweis der auftretenden Spitzen in den Verläufen von Enthalpie, $\Delta_{zul} = 0.5\%$ bzw. $\Delta_{zul} = 0.1\%$, lineare Darstellung.

Für Erläuterungen zu den bei quadratischer Näherung auftretenden diskontinuierlichen Stellen wird auf Abschnitt 2.6.1 verwiesen.

2.7 Lineare Approximation im Einphasengebiet

2.7.1 Mathematischer Ansatz

Folgende Ableitung beruht auf den Überlegungen aus [19], welche in weiten Teilen übernommen wurden. Zusätzlich sei erwähnt, dass im Einphasengebiet ausschließlich ein linearer Ansatz präsentiert wird, da ein quadratischer bereits erheblich komplizierte Strukturen aufweisen würde, was dem Ziel einer schnellen Berechnung entgegen steht.

Im Einphasengebiet kann der Dampfgehalt x vernachlässigt werden. Somit verbleiben fünf relevante Zustandsgrößen. Diese sind p, T, v, u und h. Ausgangspunkt der Berechnungen zur Approximation im Einphasengebiet ist ein beliebiger Punkt in

der pT-Ebene, der sich durch einen Druck p_0 und eine Temperatur T_0 auszeichnet, kurz genannt Zustand 0. Diesem Zustand 0 sind

- eine spezifische Enthalpie $h_0 = h(p_0, T_0)$,
- ein spezifisches Volumen $v_0 = v(p_0, T_0)$ und
- eine spezifische innere Energie $u_0 = h_0 - p_0 v_0 = u(p_0, T_0)$

zugeordnet, welche über IAPWS-IF97 gewonnen werden. Im nächsten Schritt definiert man einen Zustand 1, welcher sich durch selbigen Druck $p_1 = p_0$ und eine spezifische Enthalpie $h_1 = h_0 + \Delta h$ auszeichnet. Darüber hinaus sind Zustand 1

- eine Temperatur T_1,
- eine spezifisches Volumen $v_1 = v(p_1, T_1) = v(p_0, T_1)$ und
- eine spezifische innere Energie $u_1 = h_1 - p_1 v_1 = h_1 - p_0 v_1 = u(p_0, T_1)$

zuordenbar, wiederum durch entsprechende Auswertungen nach IF97. Als weitere zur Approximation benötigte Stützstelle führt man einen Zustand 2 mit $p_2 = p_0 + \Delta p$ und $h_2 = h_0$ ein. Für diesen Zustand 2 ermittelt man nach IF97

- eine Temperatur T_2,
- eine spezifisches Volumen $v_2 = v(p_2, T_2)$ und
- eine spezifische innere Energie $u_2 = h_2 - p_2 v_2 = h_0 - p_2 v_2 = u(p_2, T_2)$

als zugehörige Zustandsgrößen. Die bisherigen Ausführungen zur linearen Approximation im Einphasengebiet können auch Abbildung 2.40 entnommen werden. Darin wird in der p,h-Ebene dargestellt, welche Zustandspunkte des Einphasengebietes für die Approximation von Relevanz sind.

Als Ausgangspunkt für die zweidimensionale Approximation der spezifischen Enthalpie wählt man den Ausdruck

$$h_n(p, T) = h_0 + \lambda_1 (T - T_0) + \lambda_2 (p - p_0). \tag{2.89}$$

Die Näherungsfunktion aus (2.89) muss folgende drei Randbedingungen erfüllen:

1. Randbedingung für Zustandspunkt 0: $h_n(p_0, T_0) = h_0$,
2. Randbedingung für Zustandspunkt 1: $h_n(p_0, T_1) = h_1$ und
3. Randbedingung für Zustandspunkt 2: $h_n(p_2, T_2) = h_2 = h_0$.

Die 1. Randbedingungen ist für beliebige λ_1 und λ_2 stets erfüllt. Setzt man nun für die 2. Randbedingung im Zustandspunkt 1 in (2.89) ein, so liefert dies

$$h_1 = h_0 + \lambda_1 (T_1 - T_0) + \underbrace{\lambda_2 (p_0 - p_0)}_{=0} \Rightarrow \lambda_1 = \frac{h_1 - h_0}{T_1 - T_0}. \tag{2.90}$$

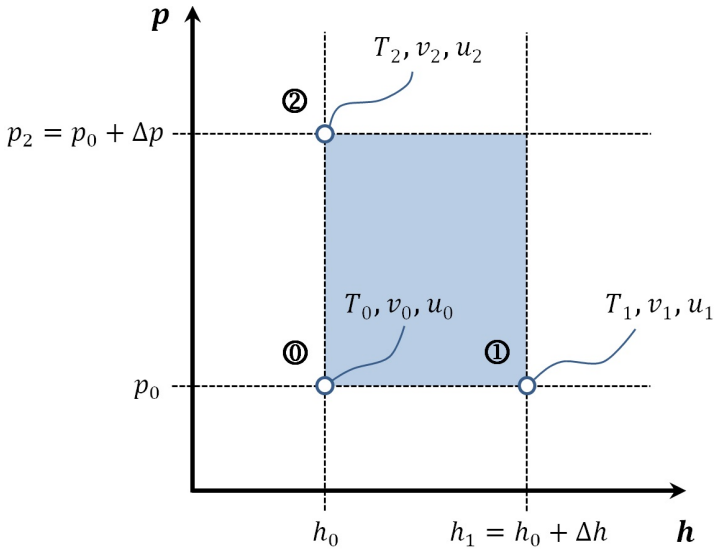

Abbildung 2.40: Zustandspunkte bei linearer Approximation im Einphasengebiet.

Ein Einsetzen für die 3. Randbedingung im Zustandspunkt 2 in (2.89) unter Berücksichtigung des Ausdruckes für λ_1 aus (2.90) liefert

$$h_0 = h_0 + \frac{h_1 - h_0}{T_1 - T_0}(T_2 - T_0) + \lambda_2(p_2 - p_0) \Rightarrow \lambda_2 = -\frac{h_1 - h_0}{T_1 - T_0}\frac{T_2 - T_0}{p_2 - p_0}. \tag{2.91}$$

Als Ausgangspunkt für die zweidimensionale Approximation der spezifischen inneren Energie wählt man den Ausdruck

$$u_n(pv, p) = u_0 + \lambda_3(pv - p_0v_0) + \lambda_4(p - p_0). \tag{2.92}$$

Die Näherungsfunktion aus (2.92) muss folgende drei Randbedingungen erfüllen:

1. Randbedingung für Zustandspunkt 0: $u_n(p_0v_0, p_0) = u_0$,
2. Randbedingung für Zustandspunkt 1: $u_n(p_0v_1, p_0) = u_1$ und
3. Randbedingung für Zustandspunkt 2: $u_n(p_2v_2, p_2) = u_2$.

Die 1. Randbedingungen ist für beliebige λ_3 und λ_4 stets erfüllt. Setzt man nun für die 2. Randbedingung im Zustandspunkt 1 in (2.92) ein, so liefert dies

$$u_1 = u_0 + \lambda_3(p_0v_1 - p_0v_0) + \underbrace{\lambda_4(p_0 - p_0)}_{=0} \Rightarrow \lambda_3 = \frac{u_1 - u_0}{p_0v_1 - p_0v_0} = \frac{1}{p_0}\frac{u_1 - u_0}{v_1 - v_0}. \tag{2.93}$$

Ein Einsetzen für die 3. Randbedingung im Zustandspunkt 2 in (2.92) unter Berücksichtigung des Ausdruckes für λ_3 aus (2.93) liefert

$$\begin{aligned} u_2 &= u_0 + \frac{1}{p_0}\frac{u_1 - u_0}{v_1 - v_0}(p_2v_2 - p_0v_0) + \lambda_4(p_2 - p_0) \Rightarrow \\ \lambda_4 &= \frac{u_2 - u_0}{p_2 - p_0} - \frac{1}{p_0}\frac{u_1 - u_0}{v_1 - v_0}\frac{p_2v_2 - p_0v_0}{p_2 - p_0} = \frac{(u_2 - \frac{1}{p_0}\frac{u_1 - u_0}{v_1 - v_0}p_2v_2) - (u_0 - \frac{1}{p_0}\frac{u_1 - u_0}{v_1 - v_0}p_0v_0)}{p_2 - p_0}. \end{aligned} \tag{2.94}$$

Die Beziehung aus (2.89) wird mit (2.90) und (2.91) zu

$$h_n = h_0 + \frac{h_1 - h_0}{T_1 - T_0}(T - T_0) - \frac{h_1 - h_0}{T_1 - T_0}\frac{T_2 - T_0}{p_2 - p_0}(p - p_0). \tag{2.95}$$

Die Beziehung aus (2.92) wird mit (2.93) und (2.94) zu

$$u_n = u_0 + \frac{1}{p_0}\frac{u_1 - u_0}{v_1 - v_0}(pv - p_0v_0) + \frac{(u_2 - \frac{1}{p_0}\frac{u_1-u_0}{v_1-v_0}p_2v_2) - (u_0 - \frac{1}{p_0}\frac{u_1-u_0}{v_1-v_0}p_0v_0)}{p_2 - p_0}(p - p_0). \tag{2.96}$$

Schreibt man die beiden Approximationsansätze aus (2.89) und (2.92) in der Form

$$u_n = Apv + Bp + C \tag{2.97}$$

und

$$h_n = DT + Ep + F \tag{2.98}$$

an und berücksichtigt weiters die Beziehung die bereits aus (1.22) bekannte Beziehung für die spezifische Enthalpie, so ist sofort ersichtlich, dass drei Gleichungen als Beziehungen zwischen den fünf relevanten Zustandsgrößen zur Verfügung stehen. Sind zwei Größen bekannt, so lassen sich die restlichen drei Zustandsgrößen aus den Gleichungen (2.97), (2.98) und (1.22) berechnen. Diese Schreibweise ist auch für die Programmierung vorteilhaft. Die in (2.97) und (2.98) auftretenden Konstanten erhält man mit

$$A = \frac{1}{p_0}\frac{u_1 - u_0}{v_1 - v_0}, \tag{2.99}$$

$$B = \frac{(u_2 - Ap_2v_2) - (u_0 - Ap_0v_0)}{p_2 - p_0}, \tag{2.100}$$

$$C = u_0 - Ap_0v_0 - Bp_0, \tag{2.101}$$

$$D = \frac{h_1 - h_0}{T_1 - T_0}, \tag{2.102}$$

$$E = -D\frac{T_2 - T_0}{p_2 - p_0}, \tag{2.103}$$

$$F = h_0 - DT_0 - Ep_0. \tag{2.104}$$

Zur Überprüfung des Phasenzustandes wird außerdem eine approximierte Funktion für die Sättigungstemperatur in Abhängigkeit vom Druck

$$T_{S,n}(p) = Gp + H \tag{2.105}$$

eingeführt bei der sich die Konstanten durch

$$G = \frac{T_{S1} - T_{S0}}{p_1 - p_0}, \tag{2.106}$$

$$H = T_{S0} - Gp_0 \tag{2.107}$$

ermitteln lassen. Die Sättigungstemperaturen T_{S0} und T_{S1} zu den Drücken p_0 und $p_1 = p_0 + \Delta p$ werden unter Verwendung der IAPWS-IF97 bestimmt. Die Beziehung aus (2.105) wird mit (2.106) und (2.107) zu

$$T_{S,n}(p) = T_{s0} + \frac{T_{S1} - T_{S0}}{p_1 - p_0}(p - p_0). \tag{2.108}$$

2.7.2 Einfache Auswertungen

Nachfolgend werden beispielhafte Auswertungen zur linearen Approximation im Einphasengebiet diskutiert. Für ein zu untersuchendes Gebiet im flüssigen Bereich gelte $h_0 = 750kJ/kg$ und $h_1 = 1150kJ/kg$, d.h. $\Delta h = \frac{8}{15}h_0$ bzw. $p_0 = 10MPa$ und $p_2 = 20MPa$ d.h. $\Delta p = 1p_0$. Für die Berechnung wird ein zweidimensionales Interpolationsgebiet, welches durch $[p_0, p_2] \times [T_0, \max(T_1, T_2)]$ definiert ist, in beiden Dimensionen in 51 Punkte gleichen Abstands unterteilt. Die beiden Abbildungen 2.41 und 2.42 zeigen die zwei möglichen Fälle bei der Anordnung der Zustandspunkte 0, 1 und 2 zum Aufspannen des Interpolationsgebietes.

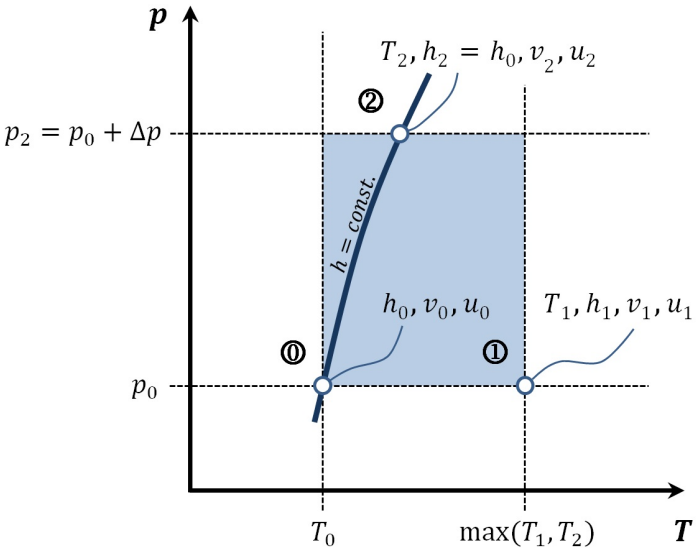

Abbildung 2.41: Interpolationsgebiet $[p_0, p_2] \times [T_0, \max(T_1, T_2)]$ bei linearer Approximation im Einphasengebiet, $T_1 > T_2$, wobei sogar eine Konstellation mit $T_2 < T_0$ möglich ist.

Innerhalb dieses p, T-Gebietes werden entsprechend der im vorigen Abschnitt erläuterten Approximation Näherungswerte der Enthalpie $h_n(p, T)$, Näherungswerte des spezifischen Volumens $v_n(p, T)$ und Näherungswerte die innere Energie $u_n(p, T)$ an allen Punkten des Rasters berechnet. Dabei können gemäß Gleichungen (2.97), (2.98) und der Beziehung (1.22) folgende Vorgangsweisen gewählt werden:

1. Variante
   (a) $h_n(p, T) = DT + Ep + F$,
   (b) $u_n(p, T) = \frac{1}{1+A}(Ah_n(p, T) + Bp + C)$ und
   (c) $v_n(p, T) = \frac{1}{p}(h_n(p, T) - u_n(p, T))$ bzw.
2. Variante
   (a) $h_n(p, T) = DT + Ep + F$,
   (b) $v_n(p, T) = \frac{1}{1+A}(D\frac{T}{p} + (F - C)\frac{1}{p} + (E - B))$ und
   (c) $u_n(p, T) = h_n(p, T) - pv_n(p, T)$.

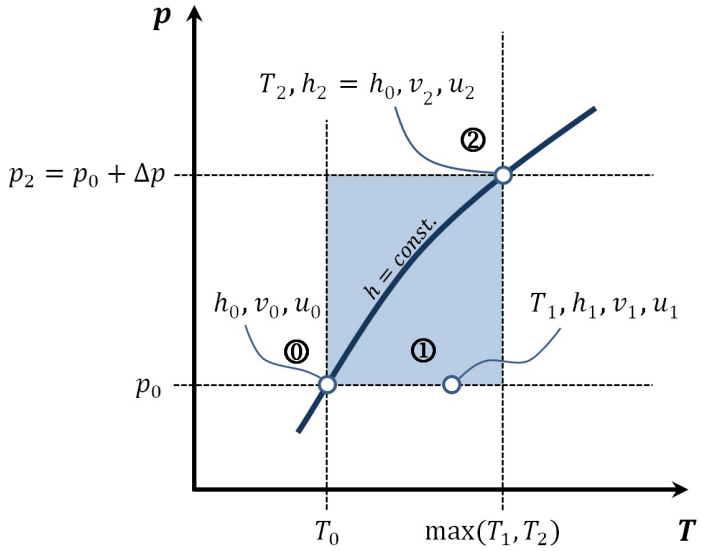

Abbildung 2.42: Interpolationsgebiet $[p_0, p_2] \times [T_0, \max(T_1, T_2)]$ bei linearer Approximation im Einphasengebiet, $T_2 > T_1$.

Beide Varianten führen natürlich zu denselben Ergebnissen. In jedem Punkt des Rasters werden zusätzlich die expliziten Werte für die Zustandsgrößen nach IAPWS-IF97 errechnet. Im Anschluss können die relativen Abweichungen der jeweiligen Zustandsgrößen bei Vergleich von Interpolation und Werten gemäß IAPWS-IF97 untersucht werden. Dabei werden die Ausdrücke

$$\Delta h_{rel}(p,T) = \frac{h_n(p,T) - h_{IF97}(p,T)}{h_{IF97}(p,T)}, \tag{2.109}$$

$$\Delta v_{rel}(p,T) = \frac{v_n(p,T) - v_{IF97}(p,T)}{v_{IF97}(p,T)}, \tag{2.110}$$

$$\Delta u_{rel}(p,T) = \frac{u_n(p,T) - h_{IF97}(p,T)}{u_{IF97}(p,T)} \tag{2.111}$$

zur Berechnung der relativen Abweichung herangezogen. Abbildungen 2.43, 2.44 und 2.45 zeigen die Ergebnisse der Abweichungsanalysen für die Enthalpie, das spezifische Volumen und die innere Energie, wobei die Ergebnisse auf den Gleichungen (2.109), (2.110) und (2.111) basieren. Die sich ergebenden Fehler für die Enthalpie und die innere Energie weisen ähnliche Verläufe bei selber Größenordnung der relativen Abweichung auf. Die Werte für die Abweichung des spezifischen Volumens sind wesentlich größer. Weiters ist Abbildung 2.46 die Lage der für die Approximation relevanten Zustandspunkte sowie das daraus entstehende Interpolationsgebiet in der p, T-Ebene zu entnehmen.

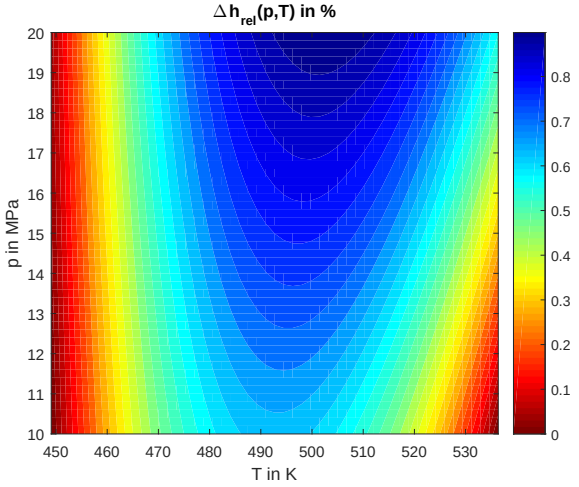

Abbildung 2.43: Relative Abweichung der approximierten Enthalpie im Einphasengebiet für $h_0 = 750kJ/kg$, $h_1 = \frac{23}{15}h_0 = 1150kJ/kg$, $p_0 = 10MPa$ und $p_2 = 2p_0 = 20MPa$, flüssiges Wasser.

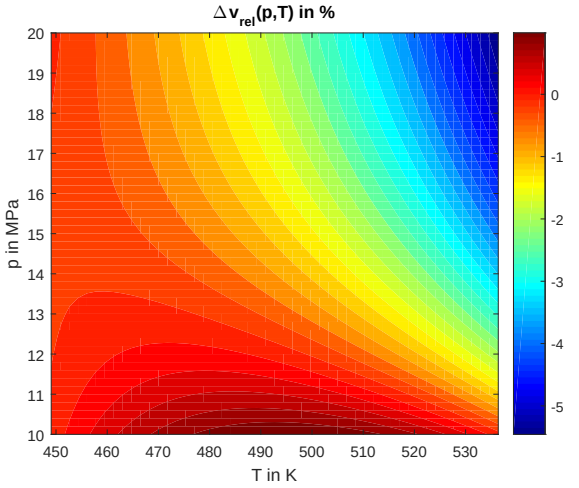

Abbildung 2.44: Relative Abweichung des approximierten spezifischen Volumens im Einphasengebiet für $h_0 = 750kJ/kg$, $h_1 = \frac{23}{15}h_0 = 1150kJ/kg$, $p_0 = 10MPa$ und $p_2 = 2p_0 = 20MPa$, flüssiges Wasser.

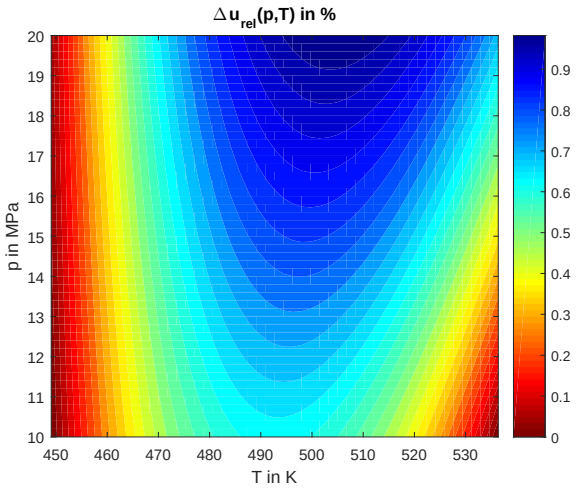

Abbildung 2.45: Relative Abweichung der approximierten inneren Energie im Einphasengebiet für $h_0 = 750kJ/kg$, $h_1 = \frac{23}{15}h_0 = 1150kJ/kg$, $p_0 = 10MPa$ und $p_2 = 2p_0 = 20MPa$, flüssiges Wasser.

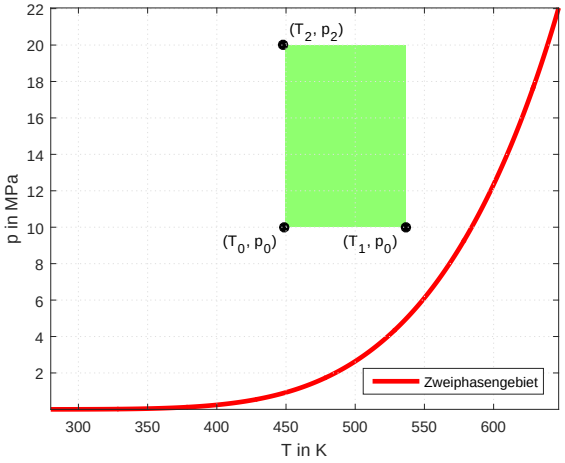

Abbildung 2.46: Lage des Interpolationsgebietes in der p,T-Ebene für $h_0 = 750kJ/kg$, $h_1 = \frac{23}{15}h_0 = 1150kJ/kg$, $p_0 = 10MPa$ und $p_2 = 2p_0 = 20MPa$, flüssiges Wasser.

Ein weiteres Beispiel zur Fehleranlyse bei linearer Approximation im Einphasengebiet ist durch $h_0 = 3000kJ/kg$ und $h_1 = 3500kJ/kg$, d.h. $\Delta h = \frac{1}{6}h_0$ bzw. $p_0 = 8MPa$ und $p_2 = 14MPa$ d.h. $\Delta p = \frac{3}{4}p_0$ gegeben. Bei dieser Wahl der Stützstellen für die Approximation befindet man sich in Bereichen des überhitzten Dampfes. Abbildungen 2.47, 2.48 und 2.49 zeigen wiederum die Ergebnisse der Abweichungsanalysen für die Enthalpie, das spezifische Volumen und die innere Energie, wobei die Ergebnisse erneut auf den Gleichungen (2.109), (2.110) und (2.111) basieren. Bei diesen Auswertungen zeigt sich, dass die Abweichungen im relevanten p,T-Gebiet für alle drei untersuchten Zustandsgrößen ähnliche Verläufe annehmen. Die größten Abweichungen stellen sich jeweils im Punkt (p_2, T_0) ein, welche auf starke Gradienten in Richtung des Zweiphasengebietes hinweisen. Beim spezifischen Volumen treten erneut die größten Abweichungen auf. Abbildung 2.50 zeigt die Lage der für die Approximation relevanten Zustandspunkte sowie das daraus entstehende Interpolationsgebiet in der p,T-Ebene.

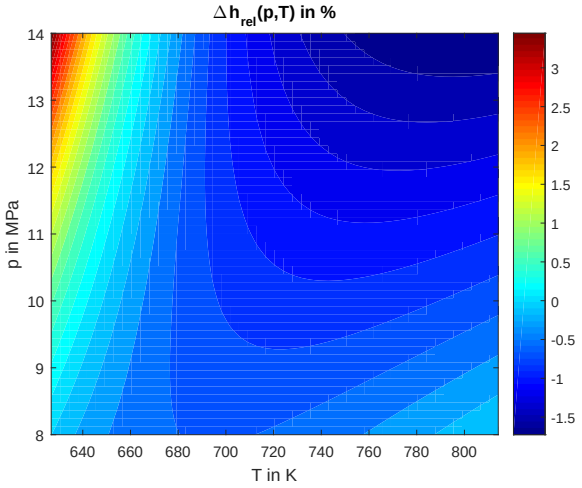

Abbildung 2.47: Relative Abweichung der approximierten Enthalpie im Einphasengebiet für $h_0 = 3000kJ/kg$, $h_1 = \frac{7}{6}h_0 = 3500kJ/kg$, $p_0 = 8MPa$ und $p_2 = 1.75p_0 = 14MPa$, überhitzter Dampf.

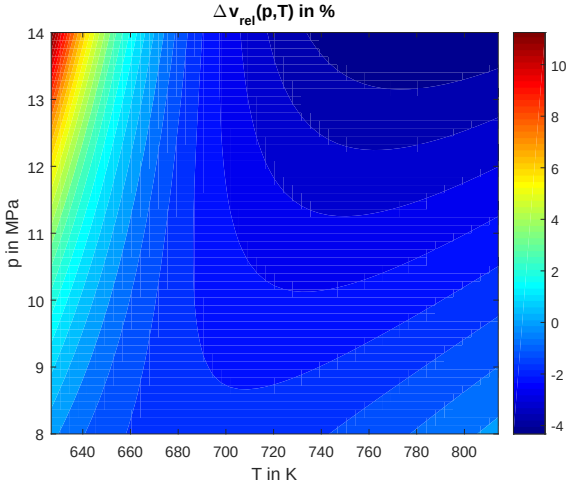

Abbildung 2.48: Relative Abweichung des approximierten spezifischen Volumens im Einphasengebiet für $h_0 = 3000kJ/kg$, $h_1 = \frac{7}{6}h_0 = 3500kJ/kg$, $p_0 = 8MPa$ und $p_2 = 1.75p_0 = 14MPa$, überhitzter Dampf.

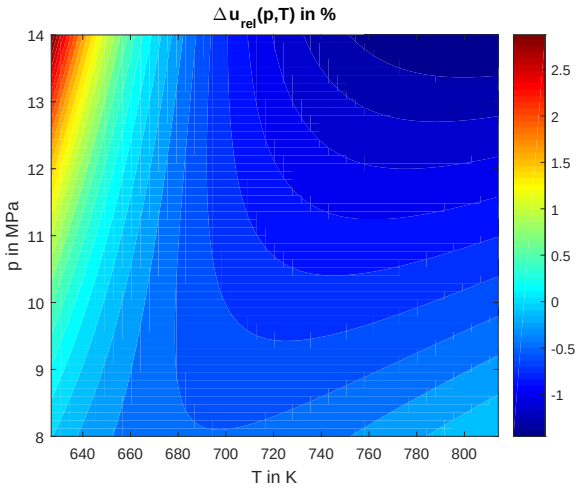

Abbildung 2.49: Relative Abweichung der approximierten inneren Energie im Einphasengebiet für $h_0 = 3000kJ/kg$, $h_1 = \frac{7}{6}h_0 = 3500kJ/kg$, $p_0 = 8MPa$ und $p_2 = 1.75p_0 = 14MPa$, überhitzter Dampf.

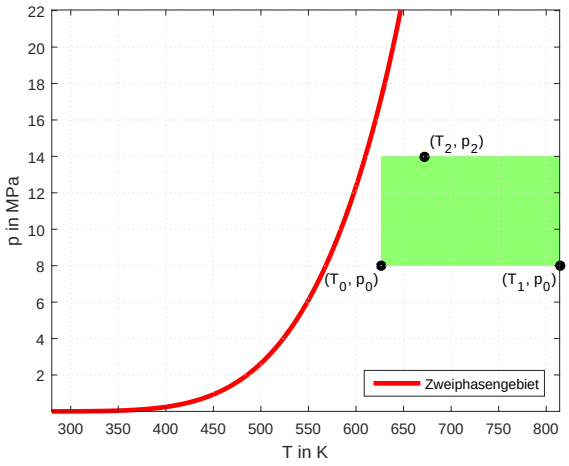

Abbildung 2.50: Lage des Interpolationsgebietes in der p,T-Ebene für $h_0 = 3000kJ/kg$, $h_1 = \frac{7}{6}h_0 = 3500kJ/kg$, $p_0 = 8MPa$ und $p_2 = 1.75p_0 = 14MPa$, überhitzter Dampf.

2.8 Fehleranalyse im Einphasengebiet - 'Fehlerlandkarten'

In diesem Abschnitt kommt es zur Analyse des im vorigen Abschnitt präsentierten, linearen Approximationsansatzes im Einphasengebiet. Als Ergebnis werden hierfür die maximal auftretenden Abweichungen Δ_{max} der approximierten Zustandsgrößen (h_n, u_n, v_n) in weiten Bereichen des Einphasengebiets graphisch anhand von 'Fehler-Landkarten' aufbereitet.

Dabei wird wie folgt vorgegangen:

1. Festlegung eines aus Rechtecken bestehenden Rasters in der p,T-Ebene zur Definition von n Stützstellen $(p_0(i), T_0(i)$ mit $i = 1, 2 \ldots n)$ für die Fehleranalyse, d.h. Rasterung des Einphasengebietes
$[273.15K, 1073.15K] \times [0.01MPa, 100MPa]$[4].

2. An jeder der n Stützstellen in der p,T-Ebene wird ein Approximationsgebiet, definiert durch $p_0(i), T_0(i)$ und $\Delta p(i), \Delta h(i)$ bzw. in weiter Folge durch $T_1(i)$, $T_2(i)$, aufgespannt.

3. Bestimmung der Verläufe von $h_{IF97}(p,T)$, $v_{IF97}(p,T)$, $u_{IF97}(p,T)$ in der Region $[p_0(i), p_0(i) + \Delta p(i)] \times [T_0(i), \max(T_1(i), T_2(i))]$, Auswertung an m Stützstellen.

4. Bestimmung der Verläufe von $h_n(p,T)$, $v_n(p,T)$, $u_n(p,T)$ mittels linearer Näherung in der Region $[p_0(i), p_0(i) + \Delta p(i)] \times [T_0(i), \max(T_1(i), T_2(i))]$, Auswertung an m Stützstellen.

[4]Dieser Bereich entsteht unter Beachtung von Abbildung 1.1 bei Berücksichtigung der Bereiche 1 bis 4.

5. Bestimmung der Abweichungen der approximierten Werte zu jenen nach IF97 mit

$$\Delta h_{rel}(p,T) = \frac{h_n(p,T) - h_{IF97}(p,T)}{h_{IF97}(p,T)}, \tag{2.112}$$

$$\Delta v_{rel}(p,T) = \frac{v_n(p,T) - v_{IF97}(p,T)}{v_{IF97}(p,T)}, \tag{2.113}$$

$$\Delta u_{rel}(p,T) = \frac{u_n(p,T) - u_{IF97}(p,T)}{u_{IF97}(p,T)}, \tag{2.114}$$

   wobei stets $(p,T) \in [p_0(i), p_0(i) + \Delta p(i)] \times [T_0(i), \max(T_1(i), T_2(i))]$ gilt.

6. Bestimmung der Maximalabweichungen von approximierten Werten zu jenen nach IF97 innerhalb der jeweiligen Region i zur 'Landkartenerstellung' mit

$$\Delta h_{max}(p(i),T(i)) = max(|\Delta h_{rel}(p,T)|), \tag{2.115}$$

$$\Delta v_{max}(p(i),T(i)) = max(|\Delta v_{rel}(p,T)|), \tag{2.116}$$

$$\Delta u_{max}(p(i),T(i)) = max(|\Delta u_{rel}(p,T)|), \tag{2.117}$$

   wobei stets $(p,T) \in [T_0(i), [p_0(i), p_0(i) + \Delta p(i)] \times \max(T_1(i), T_2(i))]$ gilt.

7. Punkte 3. bis 6. sind zur Erstellung der 'Fehlerlandkarte' n-mal zu durchlaufen.

Nachfolgende Seiten zeigen 'Fehlerlandkarten' mit jeweils unterschiedlich großen Approximationsgebieten, $\Delta p = 0.05 p_0$ und $\Delta h = 0.05 h_0$, $\Delta p = 0.1 p_0$ und $\Delta h = 0.1 h_0$ bzw. $\Delta p = 0.2 p_0$ und $\Delta h = 0.2 h_0$, für die Enthalpie, das spezifische Volumen und die innere Energie. Zum Zwecke der Darstellbarkeit, wird das Einphasengebiet jeweils auf vier Subplots mit unterschiedlichen p,T-Bereichen aufgeteilt.
Bei jeder Abbildung ist zusätzlich angegeben, welches Fehlerniveau Δ_{max} jeweils maximal abgebildet wird. Zusätzlich wird für jede Zustandsgröße das Ergebnis einer feiner aufgelösten Berechnung rund um den kritischen Punkt gesondert dargestellt. 'Leere' Gebiete entstehen sowohl in der Nähe des Zweiphasengebietes, da Approximationsstützstellen nicht über dieses hinweg berechnet werden können als auch in Gebieten in denen $h_{max}(p(i),T(i)) \geq \Delta_{max}$, $v_{max}(p(i),T(i)) \geq \Delta_{max}$ bzw. $u_{max}(p(i),T(i)) \geq \Delta_{max}$ gilt. Der Approximationsansatz an sich hat natürlich auch Grenzen bis zu denen alle für die Interpolation notwendigen Zustandspunkte noch innerhalb der Definitionsgebietes der IF97 liegen.

Die auf den folgenden neun Seiten ersichtlichen Ergebnisse zur Genauigkeitsuntersuchung der linearen Interpolation im Einphasengebiet zeigen wiederum ähnliches Verhalten für die Enthalpie und die innere Energie. Das Fehlerniveau bei gleichen Interpolationsparametern ist für das spezifische Volumen beträchtlich höher als jenes der beiden anderen betrachteten Zustandsgrößen.

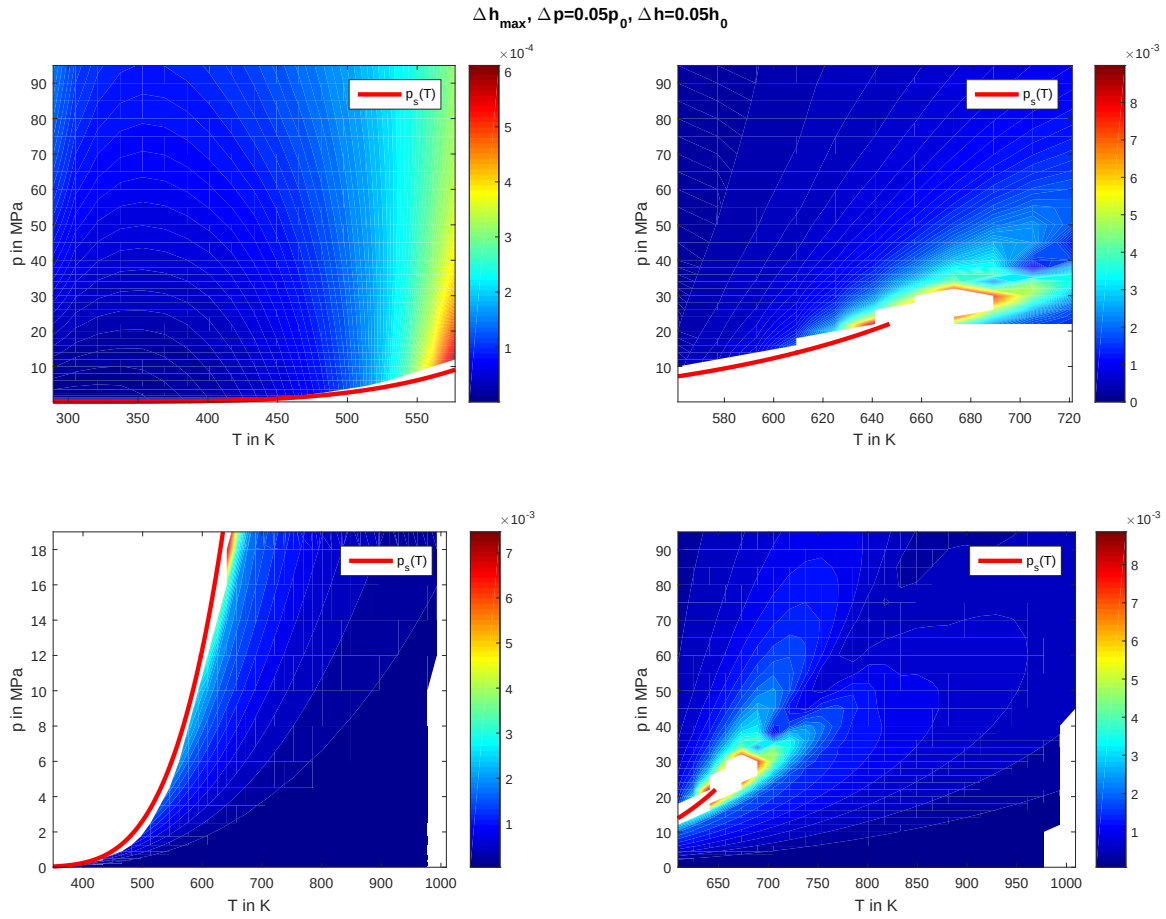

Abbildung 2.51: 'Fehlerlandkarte' für die Enthalpie, $\Delta h_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.05 p_0$, $\Delta h = 0.05 h_0$ und $\Delta_{max} = 0.01$.

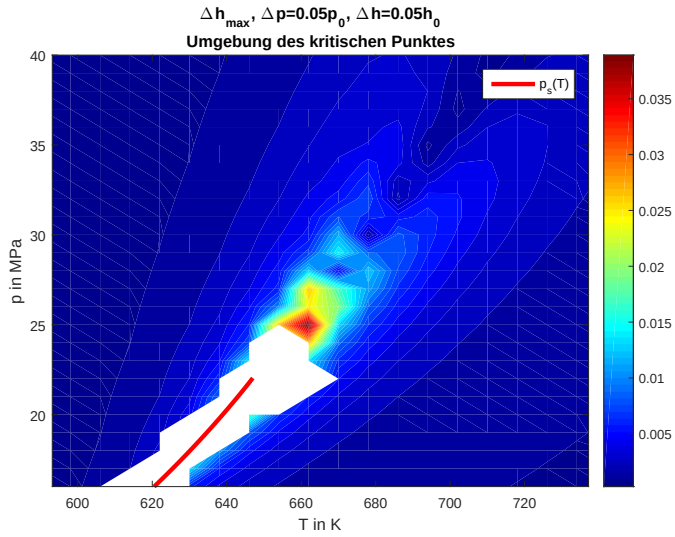

Abbildung 2.52: 'Fehlerlandkarte' für die Enthalpie, $\Delta h_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.05 p_0$, $\Delta h = 0.05 h_0$ und $\Delta_{max} = 0.04$ in der Umgebung des kritischen Punktes.

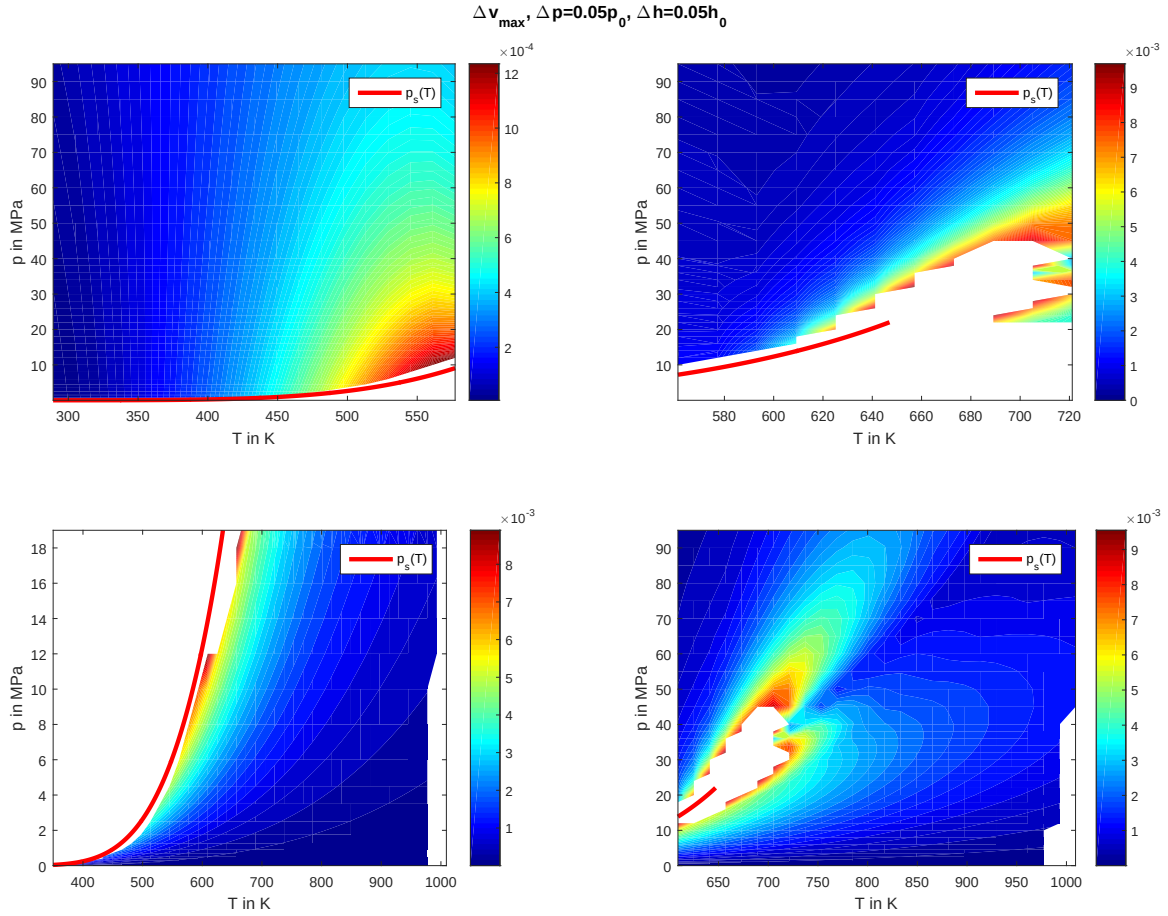

Abbildung 2.53: 'Fehlerlandkarte' für das spezifische Volumen, $\Delta v_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.05 p_0$, $\Delta h = 0.05 h_0$ und $\Delta_{max} = 0.01$.

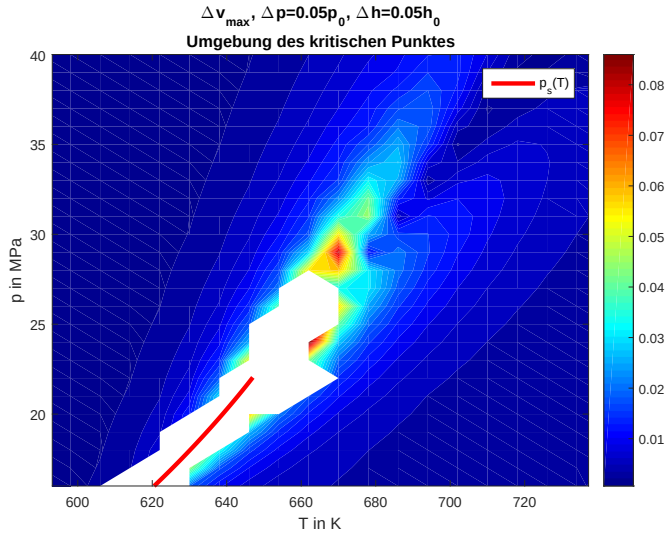

Abbildung 2.54: 'Fehlerlandkarte' für das spezifische Volumen, $\Delta v_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.05 p_0$, $\Delta h = 0.05 h_0$ und $\Delta_{max} = 0.1$ in der Umgebung des kritischen Punktes.

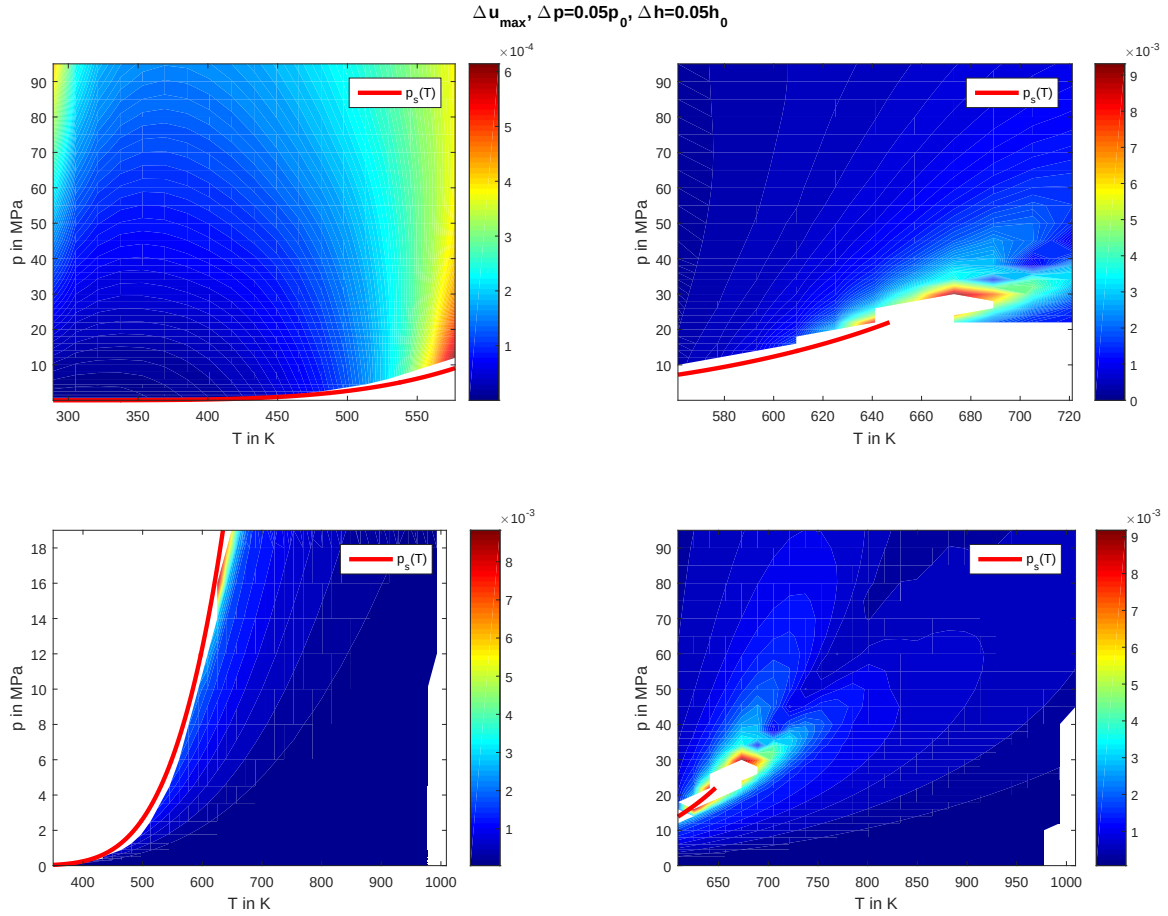

Abbildung 2.55: 'Fehlerlandkarte' für die innere Energie $\Delta u_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.05p_0$, $\Delta h = 0.05h_0$ und $\Delta_{max} = 0.01$.

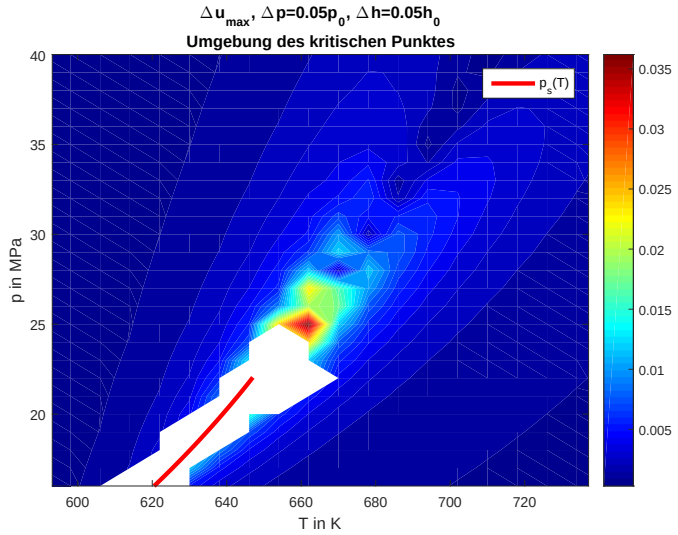

Abbildung 2.56: 'Fehlerlandkarte' für die innere Energie, $\Delta u_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.05p_0$, $\Delta h = 0.05h_0$ und $\Delta_{max} = 0.04$ in der Umgebung des kritischen Punktes.

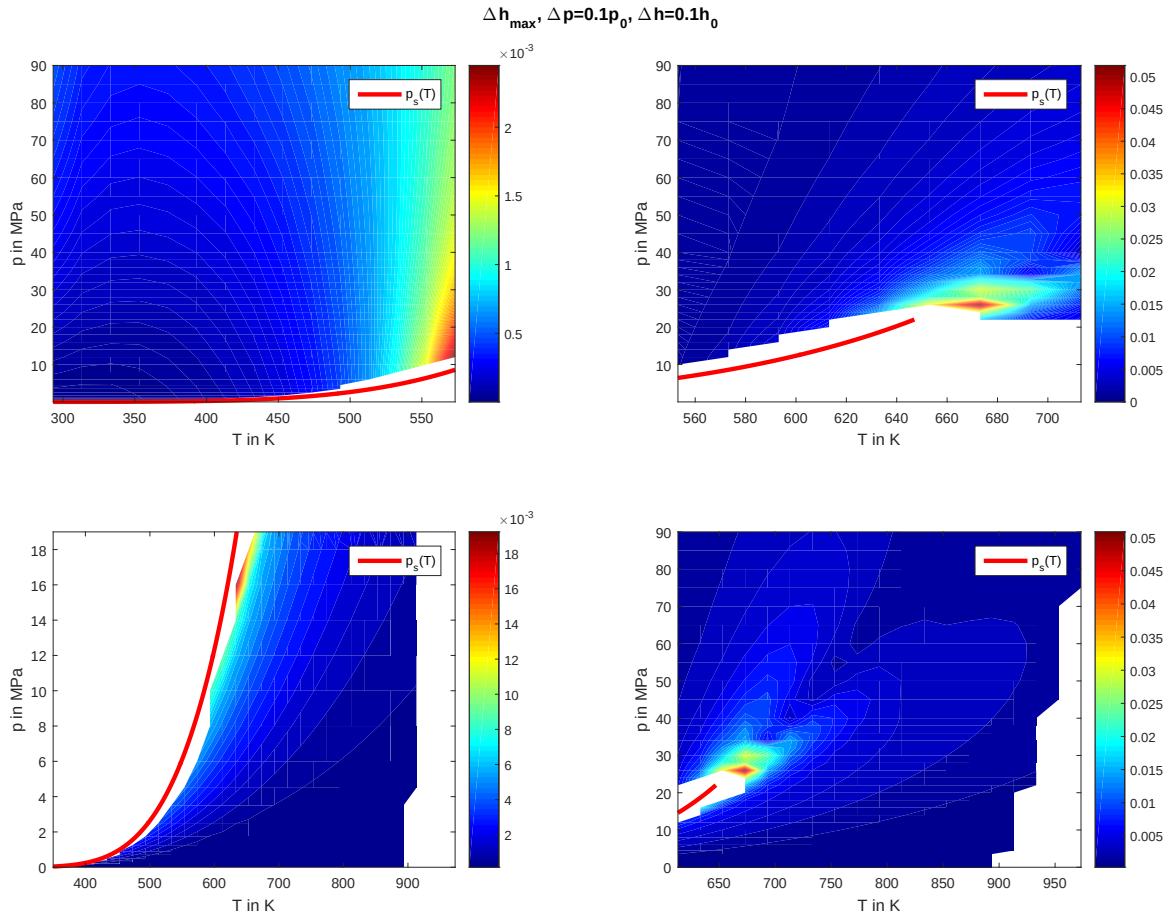

Abbildung 2.57: 'Fehlerlandkarte' für die Enthalpie, $\Delta h_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.1p_0$, $\Delta h = 0.1h_0$ und $\Delta_{max} = 0.075$.

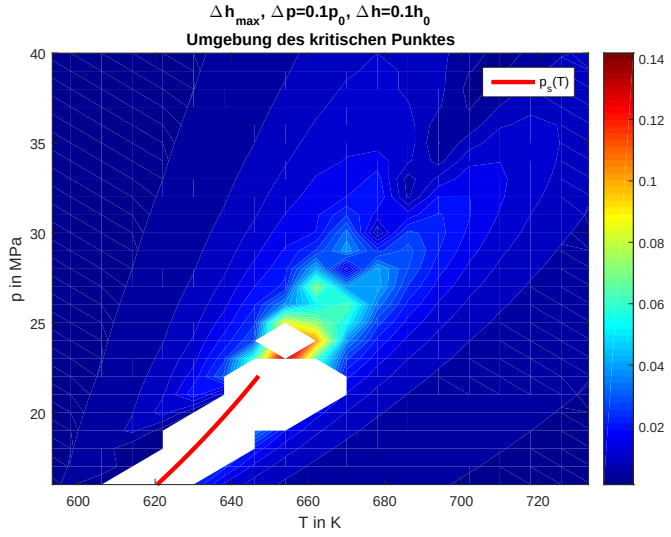

Abbildung 2.58: 'Fehlerlandkarte' für die Enthalpie, $\Delta h_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.1p_0$, $\Delta h = 0.1h_0$ und $\Delta_{max} = 0.15$ in der Umgebung des kritischen Punktes.

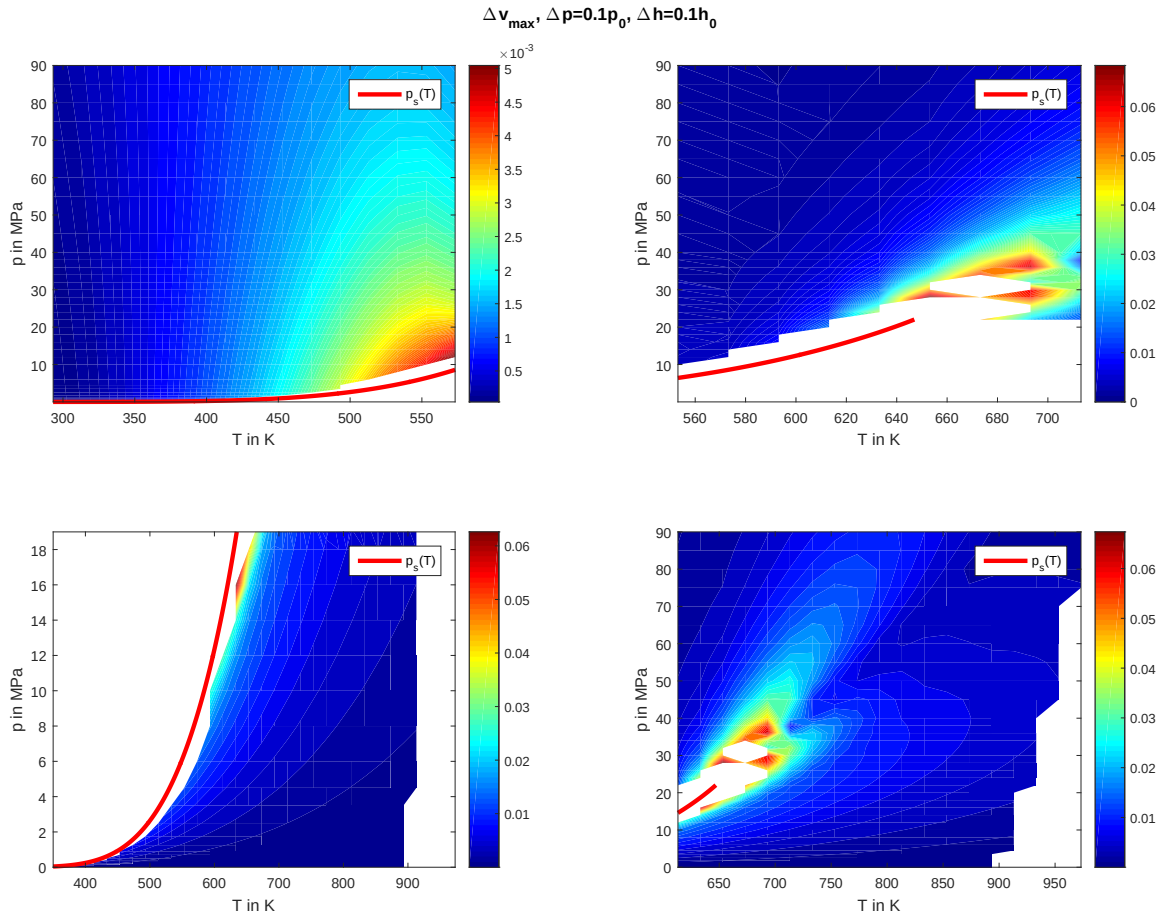

Abbildung 2.59: 'Fehlerlandkarte' für das spezifische Volumen, $\Delta v_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.1p_0$, $\Delta h = 0.1h_0$ und $\Delta_{max} = 0.075$.

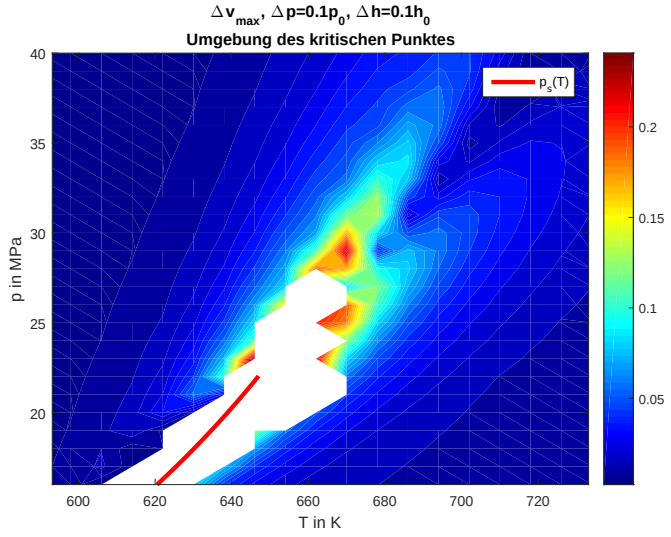

Abbildung 2.60: 'Fehlerlandkarte' für das spezifische Volumen, $\Delta v_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.1p_0$, $\Delta h = 0.1h_0$ und $\Delta_{max} = 0.25$ in der Umgebung des kritischen Punktes.

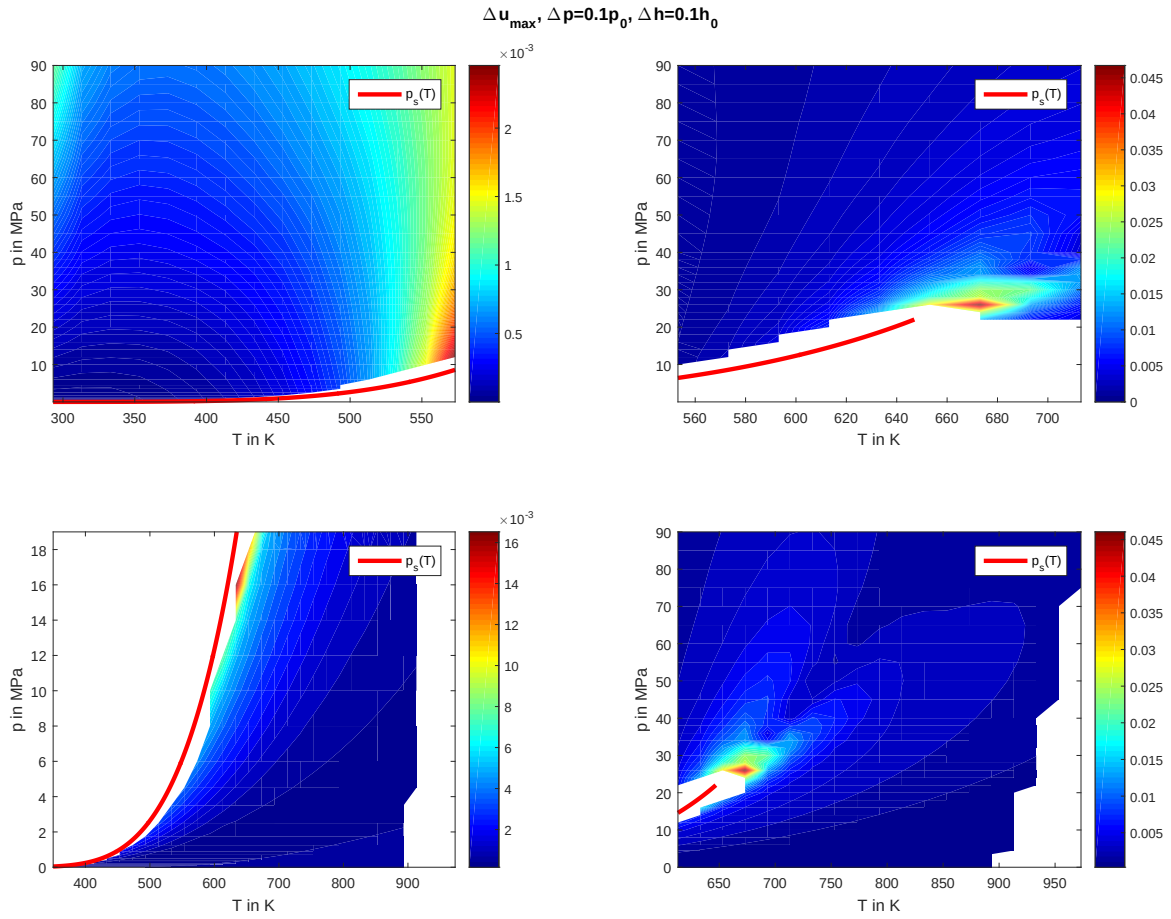

Abbildung 2.61: 'Fehlerlandkarte' für die innere Energie, $\Delta u_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.1p_0$, $\Delta h = 0.1h_0$ und $\Delta_{max} = 0.075$.

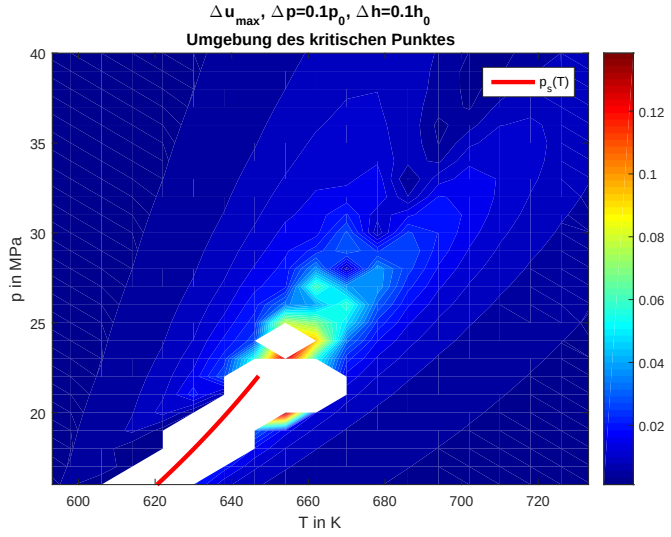

Abbildung 2.62: 'Fehlerlandkarte' für die innere Energie, $\Delta u_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.1p_0$, $\Delta h = 0.1h_0$ und $\Delta_{max} = 0.15$ in der Umgebung des kritischen Punktes.

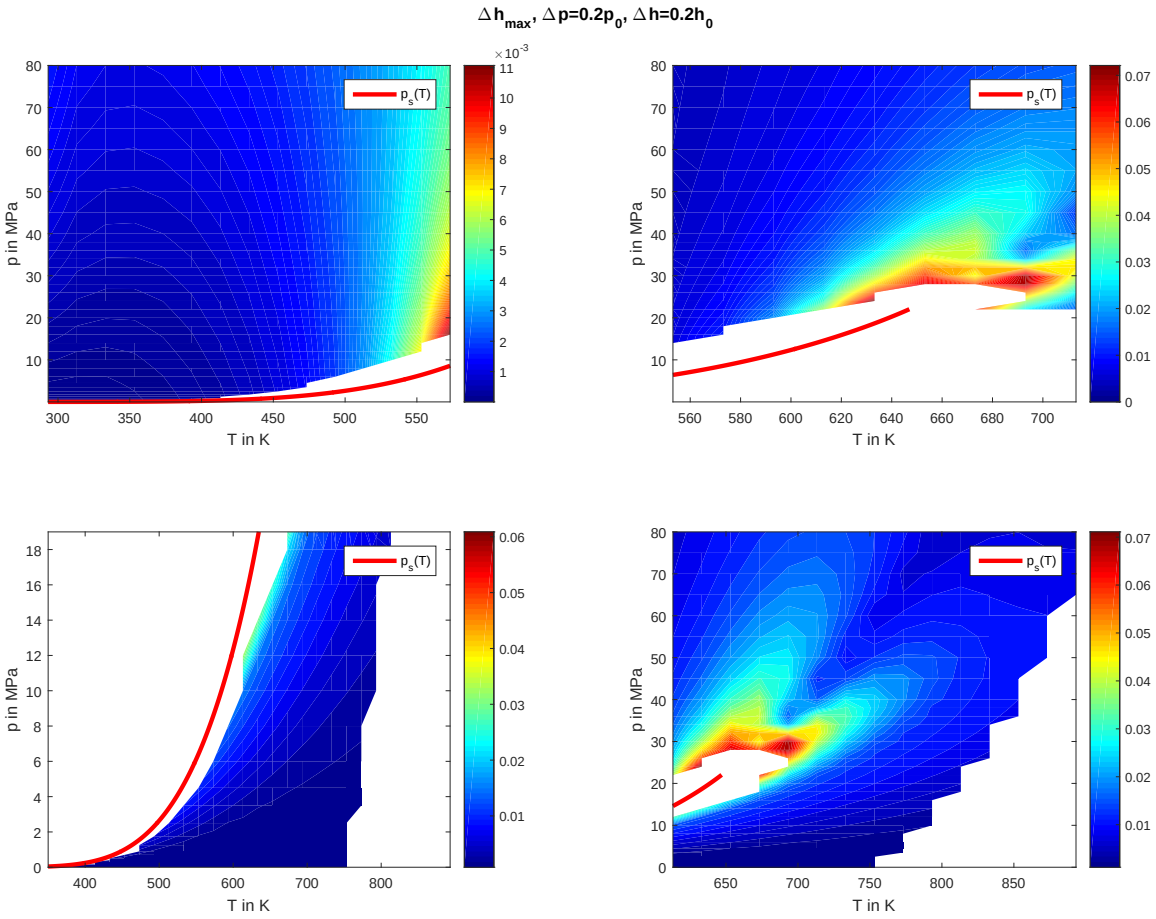

Abbildung 2.63: 'Fehlerlandkarte' für die Enthalpie, $\Delta h_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.2p_0$, $\Delta h = 0.2h_0$ und $\Delta_{max} = 0.075$.

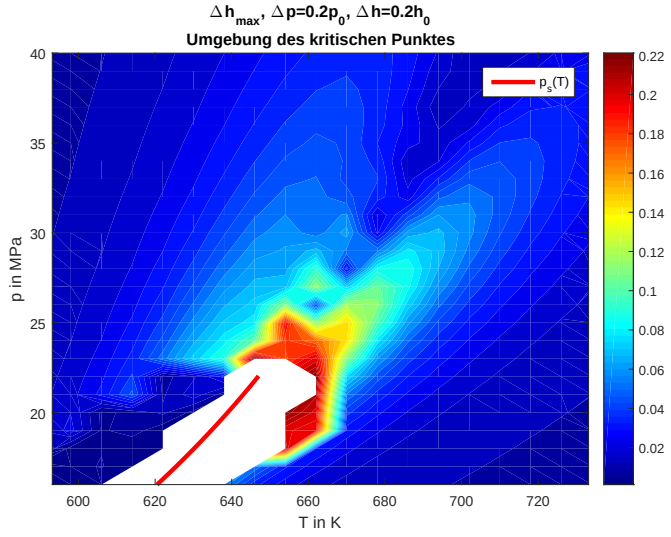

Abbildung 2.64: 'Fehlerlandkarte' für die Enthalpie, $\Delta h_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.2p_0$, $\Delta h = 0.2h_0$ und $\Delta_{max} = 0.25$ in der Umgebung des kritischen Punktes.

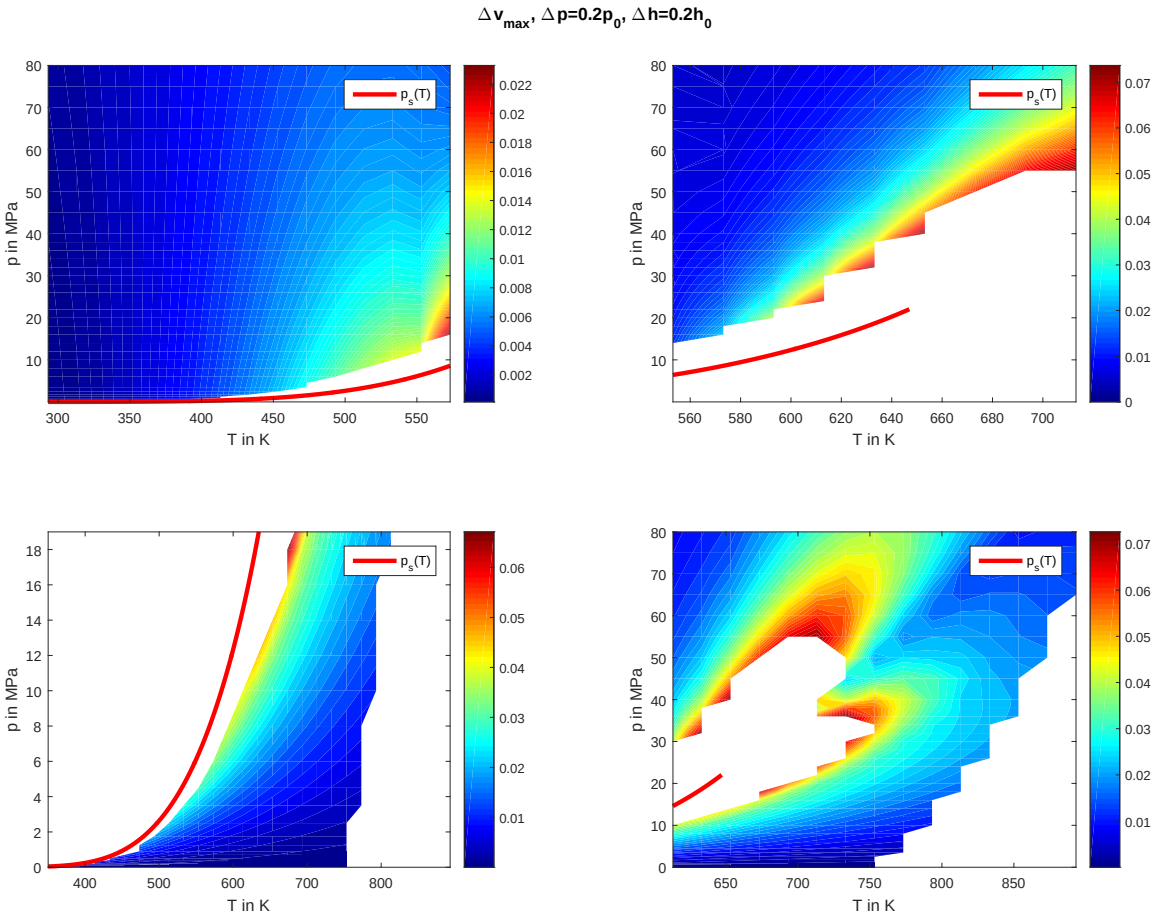

Abbildung 2.65: 'Fehlerlandkarte' für das spezifische Volumen, $\Delta v_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.2p_0$, $\Delta h = 0.2h_0$ und $\Delta_{max} = 0.075$.

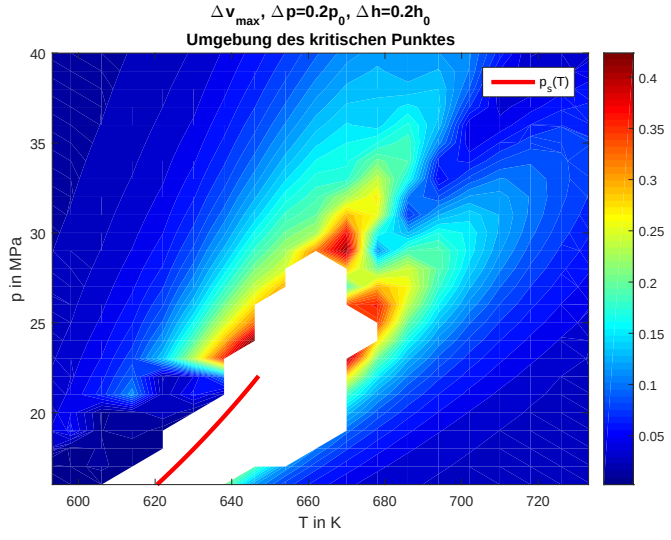

Abbildung 2.66: 'Fehlerlandkarte' für das spezifische Volumen, $\Delta v_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.2p_0$, $\Delta h = 0.2h_0$ und $\Delta_{max} = 0.45$ in der Umgebung des kritischen Punktes.

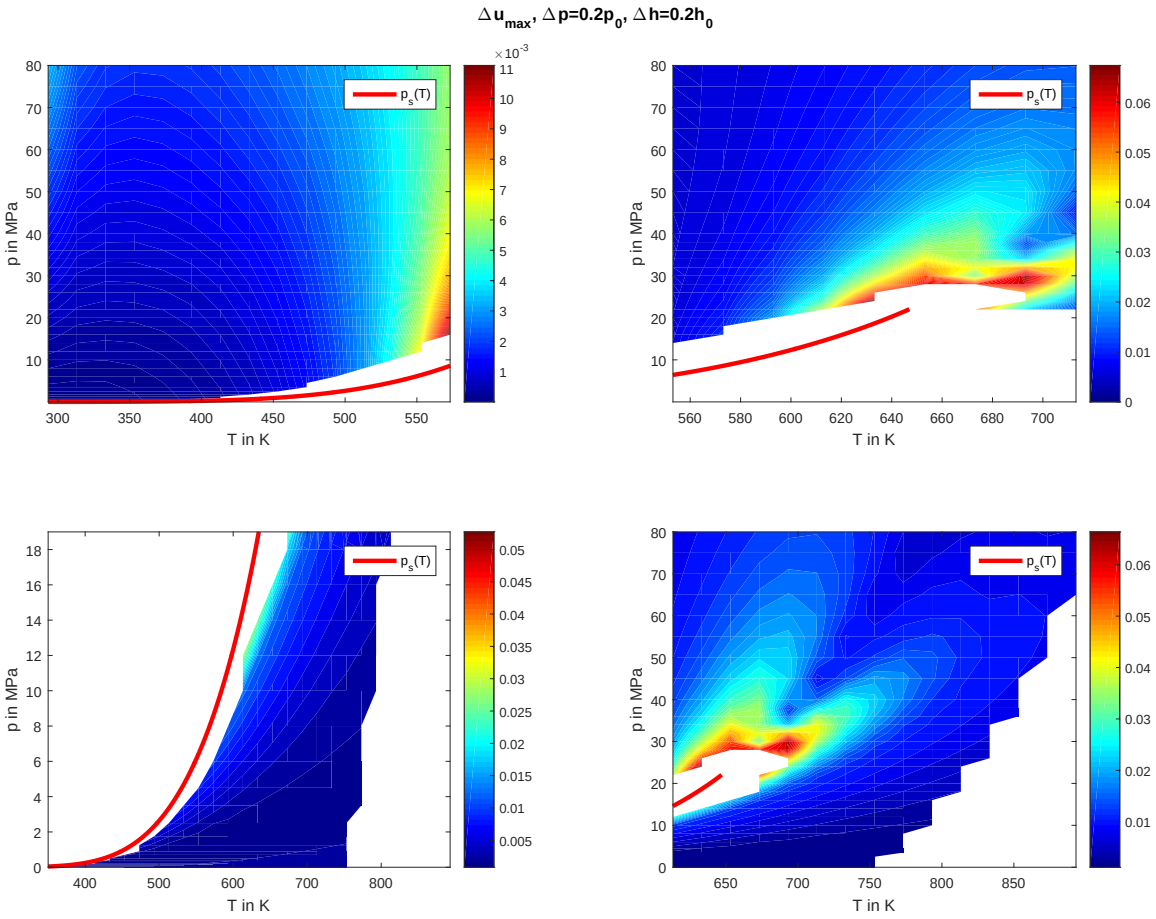

Abbildung 2.67: 'Fehlerlandkarte' für die innere Energie, $\Delta u_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.2p_0$, $\Delta h = 0.2h_0$ und $\Delta_{max} = 0.075$.

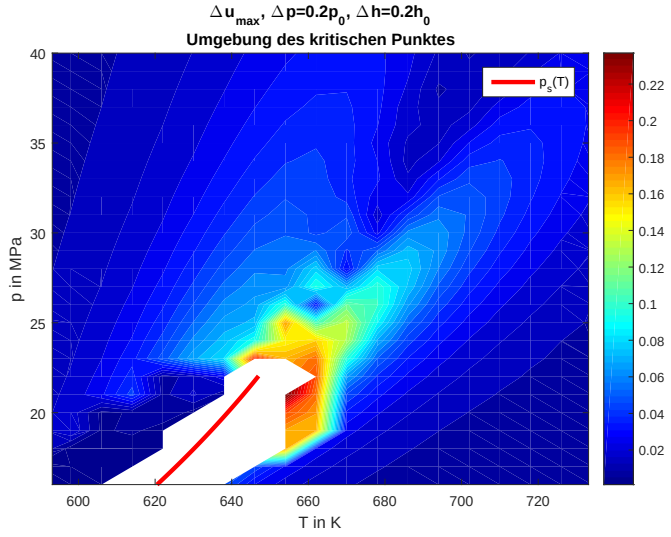

Abbildung 2.68: 'Fehlerlandkarte' für die innere Energie, $\Delta u_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.2p_0$, $\Delta h = 0.2h_0$ und $\Delta_{max} = 0.25$in der Umgebung des kritischen Punktes.

2.9 Anwendungsbeispiel Dampftrommel

In diesem Abschnitt wird ein einfaches Beispiel zu einer Dampftrommel eines Dampferzeugers unter Verwendung der erarbeiteten Approximationen im Zweiphasengebiet diskutiert. Wesentlicher Aspekt dabei ist eine Gegenüberstellung der Ergebnisse bei strikter Verwendung von IF97-Werten bzw. jenen Stoffwerten die sich unter Anwendung der Näherungen ergeben. Ausführliche Beschreibungen zur Systematik, Funktionsweise und Berechnung von Dampferzeugern sind beispielsweise in [4] zu finden. Weiters sei angemerkt, dass bei diesem Beispiel eine stark vereinfachter Berechnungsansatz gewählt wird, da es nicht darauf abzielt einen Ausschnitt eines Dampfkraftprozesses möglichst realitätsnah wiederzugeben, sondern viel mehr ein Augenmerk auf die Anwendung der erarbeiteten Approximationen im Zweiphasengebiet gelegt wird.

2.9.1 Einleitung

Abbildung 2.69 zeigt eine vereinfachte Darstellung eines Verdampfers bei einem Naturumlaufsystem.

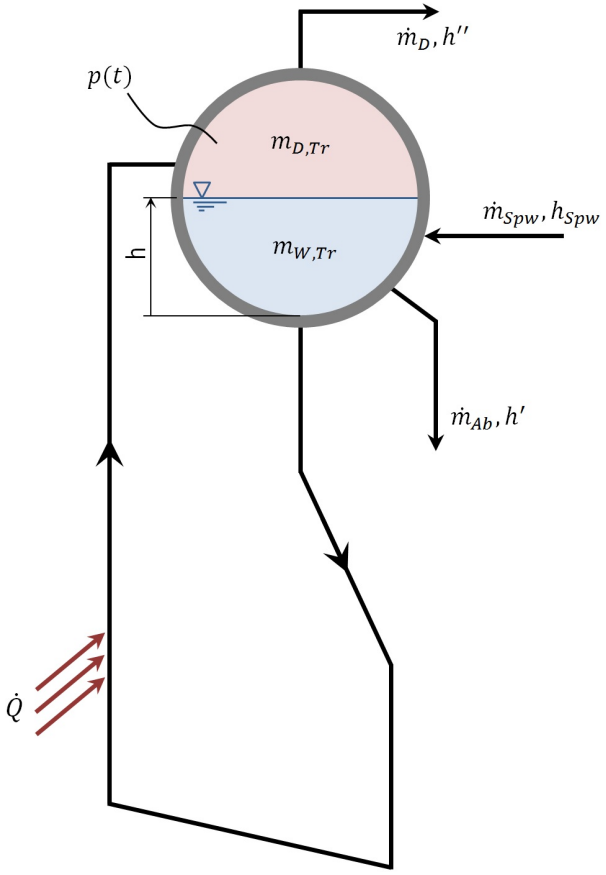

Abbildung 2.69: Prinzipdarstellung einer Dampftrommel bei einem Naturumlaufsystem.

Der Dampftrommel wird ein Speisewassermassenstrom $\dot{m}_{Spw}$ zugeführt, während Abschlämmwasser $\dot{m}_{Ab}$ abgezogen und ein Dampfmassenstrom $\dot{m}_D$ entnommen wird.

Die Beheizung erfolgt über das Aufprägen eines Wärmestromes $\dot{Q}$ an den Heizflächen. Das Medium im Trommelinneren befindet sich im zu einem Druck $p(t)$ zugehörigen Siedezustand, wobei das Trommelniveau h die Aufteilung in siedendes Wasser $m_{W,Tr}$ und gesättigten Wasserdampf $m_{D,Tr}$ bestimmt. Der entnommene Sattdampf $\dot{m}_D$ zeichnet sich durch eine Enthalpie h'' aus und das Abschlämmwasser $\dot{m}_{Ab}$ durch eine Enthalpie h'. Das Speisewasser $\dot{m}_{Spw}$ besitzt einen Enthalpiewert h_{Spw}.

2.9.2 Erhaltungsgleichungen

Nachfolgende Ausführungen basieren in weiten Teilen auf den in [1] erläuterten Gleichungen. Zuerst wird die Massenbilanz eines instationären Prozesses für ein Verdampfersystem erläutert. Dazu wird Abbildung 2.70 herangezogen.

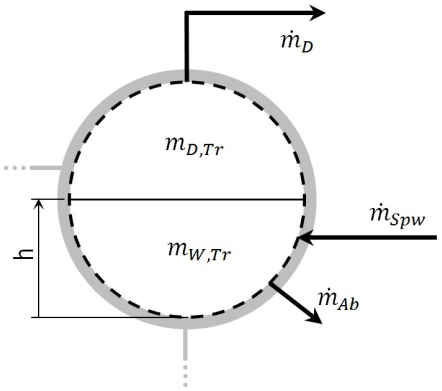

Abbildung 2.70: Prinzipdarstellung zur Massenbilanzierung um den Innenraum einer Dampftrommel.

Vereinfachenderweise wird angenommen, dass der zu einem Zeitpunkt t durch die Fallrohre ausströmende Massenstrom $\dot{m}_F$ gleich jenem Massenstrom $\dot{m}_S$, der über die Steigrohre der Dampftrommel zugeführt wird, ist. Im Innenraum der Dampftrommel befindet sich zum Zeitpunkt t eine Wassermasse $m_{W,Tr}(t)$ bzw. eine Dampfmasse $m_{W,Tr}(t)$, deren Aufteilung sich über das Trommelniveau h und die Sättigungsgrößen $v'(p(t))$ und $v''(p(t))$ ergibt. Aus der Trommel werden - wie bereits in Abschnitt 2.9.1 erläutert - ein Speisewassermassenstrom $\dot{m}_{Spw}$ zugeführt und sowohl ein Dampfmassenstrom $\dot{m}_D$ als auch ein Abschlämmmassenstrom $\dot{m}_{Ab}$ abgeführt. Auf das explizite Anführen der Zeit t als unabhängige Variable wird in den folgenden Ausführungen aus Gründen der Übersichtlichkeit verzichtet. Eine Massenbilanz mit einer an der Innenseite der Dampftrommel gewählten Systemgrenze wird somit zu

$$\frac{\mathrm{d}m_{W,Tr}}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}m_{D,Tr}}{\mathrm{d}t} = \dot{m}_{Spw} - \dot{m}_D - \dot{m}_{Ab}. \tag{2.118}$$

Bezeichnet V_{Tr} das Volumen des Innenraumes der Dampftrommel, so wird dieses näherungsweise durch

$$V_{Tr} = \frac{d^2\pi}{4} l \tag{2.119}$$

bestimmt, worin d dem Innendurchmesser der Trommel und l der Trommelinnenlänge entsprechen. Aus der Bedingung $V_{Tr} = const.$ folgt, dass stets

$$\frac{\mathrm{d}V_{W,Tr}}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}V_{D,Tr}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}(m_{W,Tr}v')}{dt} + \frac{\mathrm{d}(m_{D,Tr}v'')}{\mathrm{d}t} = 0 \tag{2.120}$$

gelten muss.

Im nächsten Schritt wird eine Leistungsbilanz gemäß erstem Hauptsatz der Thermodynamik - wie in Gleichung (1.26) angeführt - für die Dampftrommel aufgestellt. Energieanteile zufolge geodätischer Höhe und jene der kinetischen Energie werden vernachlässigt, womit Gleichung (1.26) zu

$$\frac{\mathrm{d}E_{Kr}}{\mathrm{d}t} = \dot{Q} + P + \sum_{i=1}^{n_{ein}} \dot{m}_{i,ein}h_{i,ein} - \sum_{i=1}^{n_{aus}} \dot{m}_{i,aus}h_{i,aus} \tag{2.121}$$

wird. Im nächsten Schritt gilt es die einzelnen Terme der Leistungsbilanz bei Wahl des Kontrollraumes um die Dampftrommel anzuschreiben. Hierzu ist Abbildung 2.71 heranzuziehen. Für die Bilanzierung wird zusätzlich angenommen, dass der wasser-

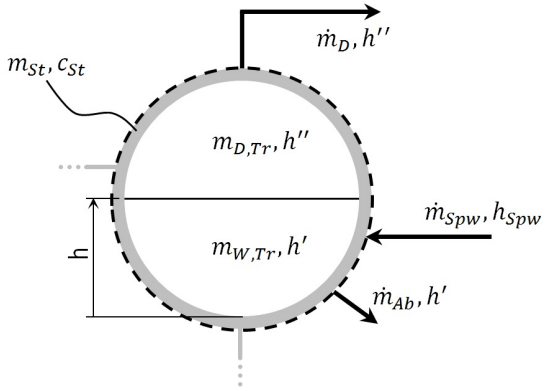

Abbildung 2.71: Prinzipdarstellung zur Leistungsbilanzierung um eine Dampftrommel.

und dampfseitige Wärmeübergang in der Trommel so groß ist, dass die Stahlmasse der Trommel m_{St} zu jedem Zeitpunkt die Siedetemperatur T_S annimmt. Unter Berücksichtigung letztgenannter Annahme erhält man für die linke Seite der Leistungsbilanz aus (2.121)

$$\frac{\mathrm{d}E_{Kr}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}(m_{W,Tr}h')}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}(m_{D,Tr}h'')}{\mathrm{d}t} + m_{St}c_{St}\frac{\mathrm{d}T_s}{\mathrm{d}t}. \tag{2.122}$$

Die in den Kontrollraum ein- und ausströmenden Massenströme ergeben als Terme für die Leistungsbilanz aus (2.121)

$$\sum_{i=1}^{n_{ein}} \dot{m}_{i,ein}h_{i,ein} = \dot{m}_{Spw}h_{Spw} \tag{2.123}$$

und

$$\sum_{i=1}^{n_{aus}} \dot{m}_{i,aus}h_{i,aus} = \dot{m}_D h'' + \dot{m}_{Ab}h'. \tag{2.124}$$

Unter Berücksichtigung des in Abbildung 2.69 ersichtlichen Wärmestromes und der geforderten Konstanz des Volumens können die beiden letzten noch zu bestimmenden Terme in der Bilanzgleichung (2.121) mit

$$\dot{Q} + P = \dot{Q} + V_{Tr}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} \tag{2.125}$$

angeschrieben werden. Das Zusammenführen aller Ausdrücke aus (2.122), (2.123), (2.124) und (2.125) liefert schlussendlich

$$\frac{\mathrm{d}(m_{W,Tr}h')}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}(m_{D,Tr}h'')}{\mathrm{d}t} + m_{St}c_{St}\frac{\mathrm{d}T_s}{\mathrm{d}t} = \dot{Q} + V_{Tr}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} + \dot{m}_{Spw}h_{Spw} - \dot{m}_D h'' - \dot{m}_{Ab}h' \tag{2.126}$$

als für die Dampftrommel relevante Gleichung zur Leistungsbilanzierung. Für die im Zuge dieser Arbeit durchgeführten Berechnungen wird die Stahlmasse der Trommel unter Verwendung der trivialen Näherung

$$m_{St} = \left(\frac{(d+2s)^2\pi}{4}(l+2s) - \frac{d^2\pi}{4}l\right)\rho_{St} \tag{2.127}$$

berechnet, wobei d dem Trommelinnendurchmesser, l der Trommelinnenlänge, s der Trommelwandstärke und ρ_{St} der Dichte des Trommelmaterials entsprechen.

2.9.3 Problemstellung

Ausgangspunkt der Berechnung ist die Vorgabe eines zeitabhängigen Druckverlaufes. Dieser ist durch

$$p(t) = p = \begin{bmatrix} t^4 & t^3 & t^2 & t & 1 \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \\ \lambda_4 \\ \lambda_5 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\lambda}} \tag{2.128}$$

mit $\boldsymbol{\lambda} = \begin{bmatrix} -1.5001 \times 10^{-11}\frac{bar}{s^4} \\ 2.1698 \times 10^{-8}\frac{bar}{s^3} \\ 2.0464 \times 10^{-5}\frac{bar}{s^2} \\ 9.4697 \times 10^{-3}\frac{bar}{s} \\ 2.9056 bar \end{bmatrix}$ und $t \in [0s, 1500s]$ gegeben. Aus (2.128) erhält man folglich den Ausdruck

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = \begin{bmatrix} t^3 & t^2 & t & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4\lambda_1 \\ 3\lambda_2 \\ 2\lambda_3 \\ \lambda_4 \end{bmatrix} \tag{2.129}$$

zur Berechnung des Druckgradienten. Die sich daraus ergebenden Verläufe sind in Abbildung 2.72 dargestellt.

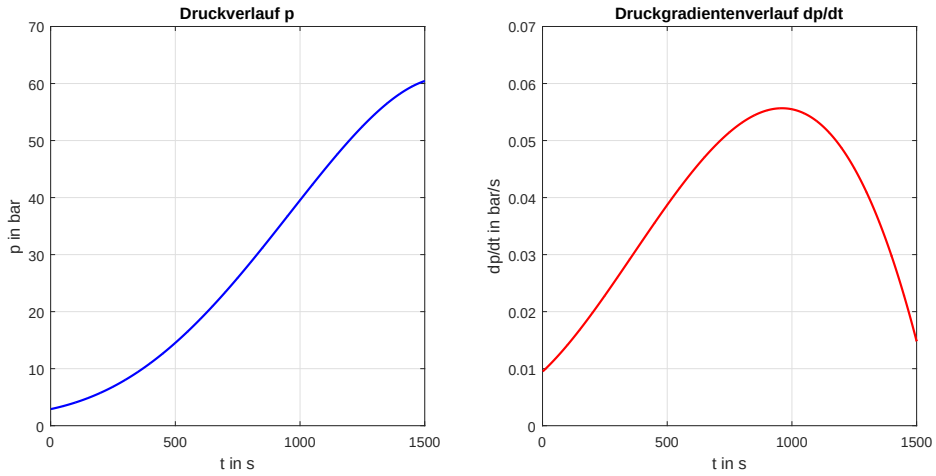

Abbildung 2.72: Druckverlauf p und Druckgradientenverlauf $\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}$.

Der Speisewassermassenstrom sei durch

$$\dot{m}_{Spw} = \frac{19}{5400}\frac{kg}{s^2}t + \frac{10}{36}\frac{kg}{s} \tag{2.130}$$

im Intervall $t \in [0s, 1500s]$ definiert, was einer linearen Rampe zwischen $1\frac{t}{h}$ zum Zeitpunkt $t = 0s$ und $20\frac{t}{h}$ zum Endzeitpunkt $t = 1500s$ entspricht. Weitere zur Berechnung benötigte Werte sind in Tabelle 2.1 aufgelistet.

Bezeichnung	**Formelzeichen**	**Wert**
Abschlämmmassenstrom	$\dot{m}_{Ab}$	$0.5\frac{t}{h}$
Trommelinnendurchmesser	d	$2.8m$
Trommelinnenlänge	l	$5m$
Trommelwandstärke	s	$85mm$
Dichte Trommelmaterial	ρ_{St}	$7800\frac{kg}{m^3}$
Wärmekapazität Trommel	c_{St}	$500\frac{J}{kgK}$

Tabelle 2.1: Übersicht über die zur Berechnung benötigten zeitunabhängigen Größen.

Unter Verwendung der in Tabelle 2.1 angeführten Werte können mit Gleichungen (2.119) und (2.127) bereits die Näherungen für das Volumen des Trommelinnenraums und der Trommelmasse bestimmt werden. Dies liefert

$$V_{Tr} = 30.788m^3 \tag{2.131}$$

und

$$m_{St} = 39\,232kg. \tag{2.132}$$

Für das in den beiden Abbildungen 2.70 und 2.71 angeführte Trommelniveau h wird für die gesamte Berechnungsdauer

$$h = \frac{d}{2} = 1.4m = const. \tag{2.133}$$

angenommen. Somit ist die Bedingung aus (2.120) mit $\frac{\mathrm{d}V_{W,Tr}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}V_{D,Tr}}{\mathrm{d}t} = 0$ stets erfüllt. Aus letztgenannter Forderung (2.133) folgt, dass man zu jedem beliebigen Zeitpunkt innerhalb des Berechnungsintervalles die Masse des Wasseranteils im Trommelinnenraum mit

$$m_{W,Tr} = \frac{V_{Tr}}{2\,v'} \tag{2.134}$$

und die Masse des Dampfanteils im Trommelinnenraum mit

$$m_{D,Tr} = \frac{V_{Tr}}{2\,v''} \tag{2.135}$$

erhält. Aus den Verläufen von $m_{W,Tr}$ und $m_{D,Tr}$ nach (2.134) und (2.135) können natürlich die für die Berechnung erforderlichen Werte für $\frac{\mathrm{d}m_{W,Tr}}{\mathrm{d}t}$ bzw. $\frac{\mathrm{d}m_{D,Tr}}{\mathrm{d}t}$ gewonnen werden.

Das Befüllen der Massenbilanz aus (2.118) und der Leistungsbilanz aus (2.126) mit allen bisher angeführten Informationen zeigt sofort, dass zur Lösung einzig die Verläufe des Dampfmassenstromes $\dot{m}_D$ und der erforderlichen Heizleistung $\dot{Q}$ noch zu bestimmen sind. Ein Umformen von (2.118) liefert für den Dampfmassenstrom

$$\dot{m}_D = \dot{m}_{Spw} - \dot{m}_{Ab} - \left(\frac{\mathrm{d}m_{W,Tr}}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}m_{D,Tr}}{\mathrm{d}t}\right). \tag{2.136}$$

Für die Berechnung des zuzuführenden Wärmestromes liefert Gleichung (2.126) unter Verwendung des soeben gewonnen Ausdruckes aus (2.136)

$$\dot{Q} = \dot{m}_D h'' + \dot{m}_{Ab} h' - \dot{m}_{Spw} h_{Spw} - V_{Tr}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}(m_{W,Tr}h')}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}(m_{D,Tr}h'')}{\mathrm{d}t} + m_{St}c_{St}\frac{\mathrm{d}T_s}{\mathrm{d}t}. \tag{2.137}$$

2.9.4 Ergebnisse

Jegliche in diesem Abschnitt präsentierte Auswertungen zu den gesuchten Verläufen wurden mit einem Zeitschritt von $1s$ durchgeführt. Berechnet man nun die Verläufe des aus der Dampftrommel ausströmenden Massenstroms $\dot{m}_D$ nach Gleichung (2.136) und den zuzuführenden Wärmestrom $\dot{Q}$ nach Gleichung (2.137) und verwendet dabei stets Stoffwerte die auf IF97 basieren, so erhält man die in den beiden Abbildungen 2.73 und 2.74 dargestellten Ergebnisse.

Im nächsten Schritt wird für die Berechnung die aus Abschnitt 2.4 bekannte lineare Approximation zur Berechnung der Zustandsgrößen im Zweiphasengebiet herangezogen. Für die zur Anwendung dieser Näherung benötigte charakteristische Druckdifferenz wird ein Wert von $\Delta p/p_0 = 0.1$ verwendet. Wesentlicher Vorteil der Verwendung der Approximation ist, dass die Sättigungsgrößen nach IF97 nur mehr an

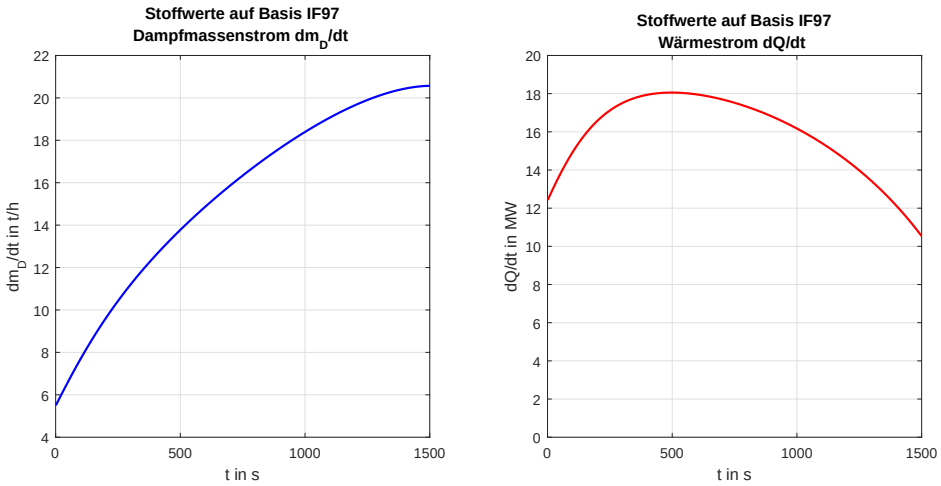

Abbildung 2.73: Dampfmassenstrom $\dot{m}_D$ und Wärmestrom $\dot{Q}$ bei Verwendung von Stoffwerten auf Basis IF97, exakte Berechnung.

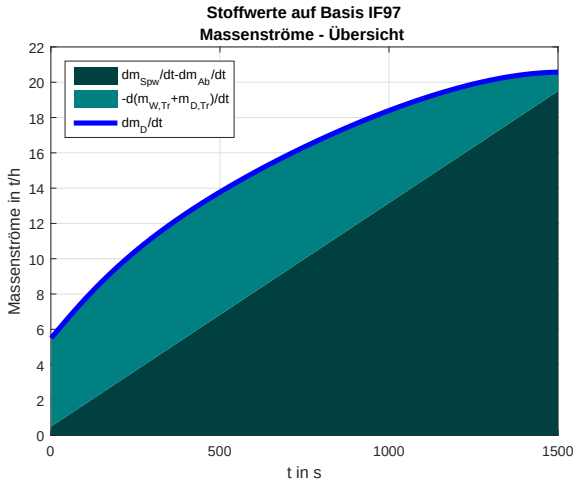

Abbildung 2.74: Dampfmassenstrom $\dot{m}_D$ als Ergebnis der Massenbilanz aus Gleichung (2.136) bei Verwendung von Stoffwerten auf Basis IF97, exakte Berechnung.

32 Stellen - für $\Delta p/p_0 = 0.1$ - explizit ausgerechnet werden müssen. Dies bedeutet, dass an Punkten, welche keine Stützstellen für die Approximation sind, die Näherung zum Einsatz kommt, welche im Vergleich zu IF97-Auswertungen wesentlich weniger Rechenzeit erfordert. Abbildung (2.75) zeigt die zugehörigen Ergebnisse für die zu bestimmenden Größen. Daraus ist sehr deutlich ersichtlich, dass sich innerhalb eines Druckintervalls $[p_0, p_0 + \Delta p]$ jeweils ein integraler Fehler ergibt.

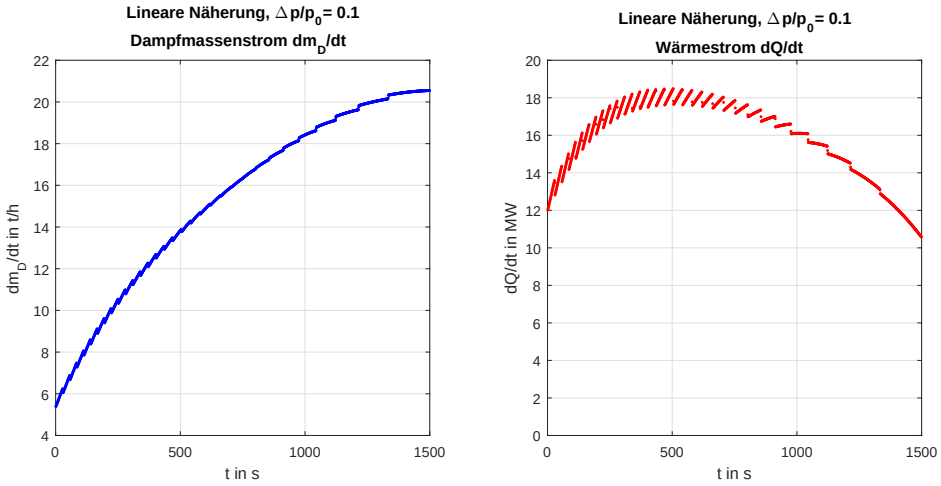

Abbildung 2.75: Dampfmassenstrom $\dot{m}_D$ und Wärmestrom $\dot{Q}$ bei linearer Näherung der Stoffwerte, $\Delta p/p_0 = 0.1$.

Wählt man hingegen die quadratische Approximation aus Abschnitt 2.5 zur Berechnung des Dampfmassenstromes $\dot{m}_D$ und des Wärmestromes $\dot{Q}$ bei gleicher charakteristischer Druckdifferenz $\Delta p/p_0 = 0.1$, so zeigen Abbildungen 2.76 die zugehörigen Ergebnisse. Aus den Diagrammen ist die Überlegenheit der quadratischen Approximation deutlich erkennbar. Bei der quadratischen Approximation ist jedoch in jedem Druckintervall eine zusätzliche Stützstelle erforderlich, an der die rechenintensiven Auswertungen nach IF97 durchgeführt werden müssen.

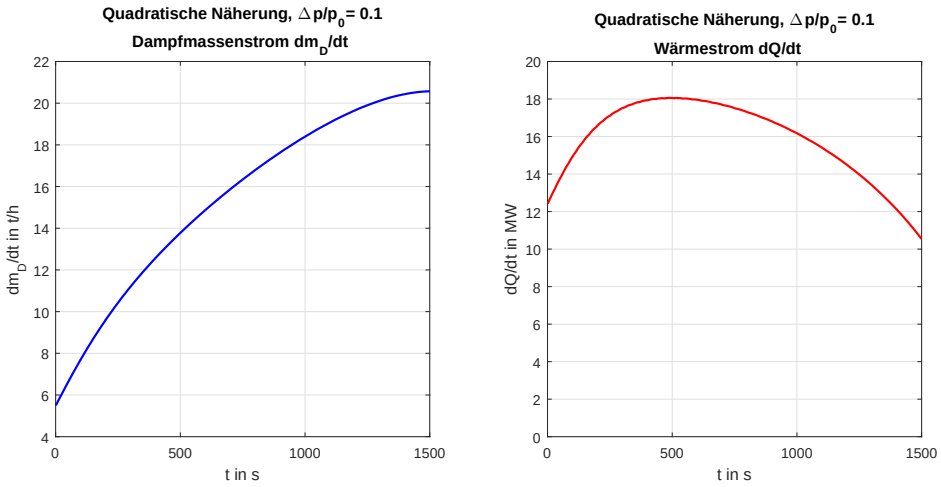

Abbildung 2.76: Dampfmassenstrom $\dot{m}_D$ und Wärmestrom $\dot{Q}$ bei quadratischer Näherung der Stoffwerte, $\Delta p/p_0 = 0.1$.

Nachfolgend kommt es noch zu einem expliziten Vergleich der auf Näherungen basierenden Verläufe und jenen die auf Basis IF97 ermittelt wurden. Zur Bestimmung einer charakteristischen Abweichung werden die beiden Ausdrücke

$$\Delta\dot{m}_{D,rel} = \frac{\dot{m}_{D,n} - \dot{m}_{D,IF97}}{\dot{m}_{D,IF97}}, \quad \Delta\dot{Q}_{rel} = \frac{\dot{Q}_n - \dot{Q}_{IF97}}{\dot{Q}_{IF97}} \tag{2.138}$$

herangezogen, wobei der Index 'n' eine lineare oder quadratische Näherung bedeutet und Größen mit dem Index 'IF97' die tatsächlichen Verläufe beschreiben. Die beiden Abbildung 2.77 und 2.78 zeigen entsprechende Ergebnisse der Fehleranalysen. Ein Vergleich der sich ergebenden relativen Abweichung zeigt eine deutliche Überlegenheit der quadratischen Näherung.

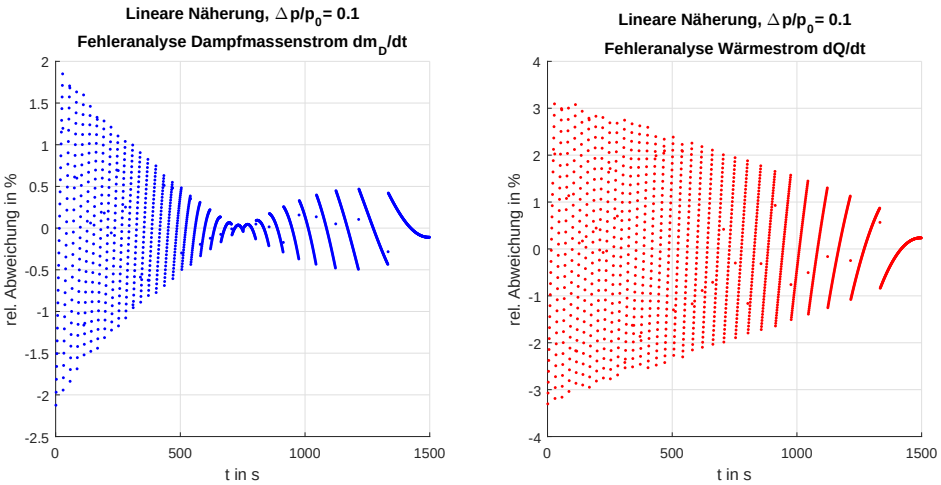

Abbildung 2.77: Fehleranalyse für den Dampfmassenstrom $\dot{m}_D$ und den Wärmestrom $\dot{Q}$ bei linearer Näherung der Stoffwerte, $\Delta p/p_0 = 0.1$.

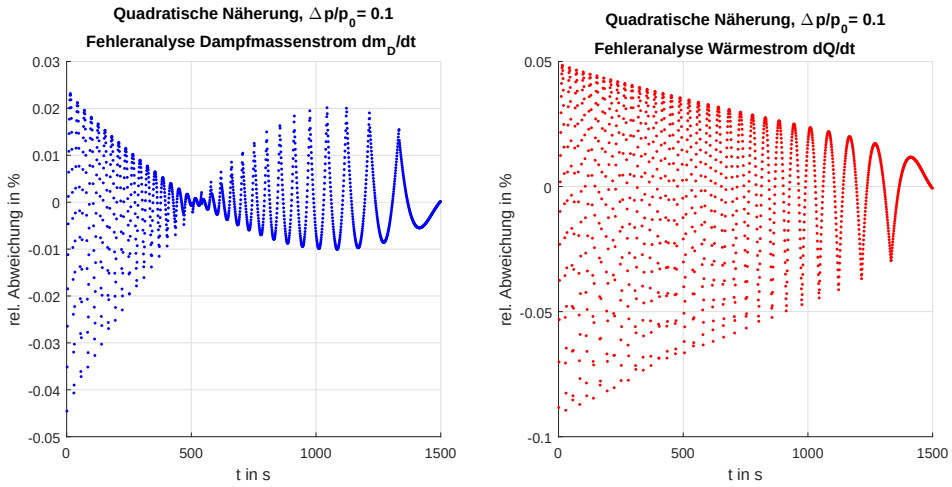

Abbildung 2.78: Fehleranalyse für den Dampfmassenstrom $\dot{m}_D$ und den Wärmestrom $\dot{Q}$ bei quadratischer Näherung der Stoffwerte, $\Delta p/p_0 = 0.1$.

Abschließend werden die Rechenzeiten[5] der drei verschiedenen Varianten verglichen. Tabelle 2.2 zeigt die Berechnungszeiten der unterschiedlichen Varianten und die sich daraus ergebende Zeitersparnis bei Anwendung der Approximationen im Einphasengebiet im Vergleich zur exakten Berechnung nach IF97. Unabhängig davon welche Approximation man verwendet, wird die Rechenzeit jeweils mehr als halbiert.

Variante	**Rechenzeit**	**Zeitersparnis**
Exakte Berechnung, IF97	$25.24s$	–
Lineare Approximation	$9.77s$	61.3%
Quadratische Approximation	$11.03s$	56.3%

Tabelle 2.2: Vergleich der Rechenzeiten beim Anwendungsbeispiel Dampftrommel.

[5]Die Berechnungen wurden auf einem Notebook ausgestattet mit einem Intel Core i5-2540M 2.6GHz Dual-Core Prozessor und einem Arbeitsspeicher mit 4GB unter Verwendung von MATLAB® R2015b durchgeführt.

Anhang - Beispiele zu Kapitel 1

Beispiel 1

Eine sich im Schwerefeld der Erde ($g = 9.81 m/s^2$) bewegende Punktmasse mit $m = 1kg$ zeichnet sich im Zustand 1 durch einen Lagevektor

$$\boldsymbol{r}^T(t_1) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 200 \end{bmatrix} m$$

und einen Geschwindigkeitsvektor

$$\dot{\boldsymbol{r}}^T(t_1) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -20 \end{bmatrix} m/s$$

aus. Zum Zeitpunkt $t_2 = t_1 + \Delta t$ gilt:

$$\boldsymbol{r}^T(t_2) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 100 \end{bmatrix} m \quad \text{und} \quad \dot{\boldsymbol{r}}^T(t_2) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -40 \end{bmatrix} m/s.$$

Die Gesamtenergie des betrachteten Systems im Ausgangszustand erhält man nach (1.2) mit

$$E_{ges}(t_1) = E_{kin}(\dot{\boldsymbol{r}}(t_1)) + E_{pot}(\boldsymbol{r}(t_1)) = 0.5 m \dot{\boldsymbol{r}}(t_1) \cdot \dot{\boldsymbol{r}}(t_1) + m\, g\, r_3(t_1) = 2162J.$$

Für den zweiten Zustand erhält man dementsprechend für die Gesamtenergie der Punktmasse

$$E_{ges}(t_2) = E_{kin}(\dot{\boldsymbol{r}}(t_2)) + E_{pot}(\boldsymbol{r}(t_2)) = 0.5 m \dot{\boldsymbol{r}}(t_2) \cdot \dot{\boldsymbol{r}}(t_2) + m\, g\, r_3(t_2) = 1781J.$$

Vergleicht man nun die soeben berechneten Werte für die Gesamtenergien der beiden Zustände, so erhält man unter Verwendung von (1.2) für die Arbeit der nicht konservativen Kräfte

$$W_{12}^{nk} = E_{ges}(t_2) - E_{ges}(t_1) = -381J.$$

Das negative Vorzeichen von W_{12}^{nk} bedeutet, dass bei der Bewegung der Punktmasse von Zustand 1 zu Zustand 2 gegen die Bewegungsrichtung wirkende Kräfte an der Punktmasse angreifen. Dies könnten beispielsweise der Bewegung entgegen wirkende Widerstandskräfte sein.

Beispiel 2

Ein zylindrisches Gefäß ist mit einem beweglichen Deckel abgeschlossen, um stets mechanisches Gleichgewicht mit der Umgebung gewährleisten zu können. Im Ausgangszustand zum Zeitpunkt t_1 befindet sich im Behälter gesättigter Wasserdampf mit einer Temperatur von $\vartheta_1 = 100°\text{C}$. Durch gezielte Wärmeabfuhr verringert sich zufolge der Gleitbewegung des Deckels das Volumen des eingeschlossenen Fluid von $V(t_1) = 500l$ im Ausgangszustand auf $V(t_2) = 50l$ im Endzustand.
Zur Berechnung der Energiebilanz aus (1.10) werden Werte für die inneren Energien $U(t_1)$, $U(t_2)$ und die Volumenänderungsarbeit W_{12}^V benötigt, um schlussendlich die abgeführte Wärme Q_{12} berechnen zu können. Unter Beachtung der Beschreibung des Ausgangszustandes erhält man für die zugeordnete spezifische innere Energie

$$u(t_1) = u''(100°\text{C}) = 2506.01kJ/kg,$$

was somit dem Wert für Sattdampf bei $\vartheta_1 = 100°\text{C}$ entspricht. Mit $v(t_1) = v''(100°\text{C}) = 1.6719m^3/kg$ erhält man für die sich im Behälter befindliche Wassermasse

$$m = \frac{V(t_1)}{v(t_1)} = 0.299kg$$

und in weiterer Folge für die innere Energie im Ausgangszustand

$$U(t_1) = m\, u(t_1) = 749.45kJ.$$

Bei Durchlaufen der isobaren Zustandsänderung ($p(t) = const$) im Nassdampfgebiet, welches ein Gleichgewicht zwischen Flüssigkeit und Gas, d.h. in diesem speziellen Fall von Wasser und Wasserdampf beschreibt, ist für den Endzustand der Dampfgehalt $x(t_2)$ über die Relation

$$x(t_2) = \frac{m''(t_2)}{m}$$

zu bestimmen. Dieser beschreibt somit den Massenanteil des gesättigten Dampfes im Endzustand an der Gesamtmasse im betrachteten Behälter. Unter Verwendung der Beziehungen

$$m = m'(t_2) + m''(t_2), \quad V(t_2) = m'(t_2)v'(100°\text{C}) + m''(t_2)v''(100°\text{C})$$

und $v(t_2) = V(t_2)/m$ erhält man schlussendlich

$$x(t_2) = \frac{\frac{V(t_2)}{m} - v'(100°\text{C})}{v''(100°\text{C}) - v'(100°\text{C})} = 0.099438.$$

Für die innere Energie im Endzustand erhält man

$$U(t_2) = m(u'(100°\text{C}) + x(t_2)(u''(100°\text{C}) - u''(100°\text{C}))) = 187.37kJ.$$

Die Volumenänderungsarbeit wird unter Beachtung von $p(t) = p_S(\vartheta_1) = const$ nach Gleichung (1.12) zu

$$W_{12}^V = -\int_{t_1}^{t_2} p(t)\mathrm{d}V(t) = -p(V(t_2) - V(t_1)) = 45.64kJ.$$

Ein Umformen der Energiebilanz für ein ruhendes geschlossenes System aus (1.10) liefert mit $W_{12}^{el} = 0$ und $W_{12}^W = 0$ für die gesuchte abzuführende Wärme

$$Q_{12} = U(t_2) - U(t_1) - W_{12}^V = -607.72kJ.$$

Beispiel 3

Der Dampfspeicher zeichne sich durch ein Volumen V aus. Aus dem Apparat sollen für einen speziellen Prozess in bestimmten Abständen jeweils $\Delta m_{12} = 16000kg$ Sattdampf entnommen werden. Weiters sei angenommen, dass die Temperatur des zu entnehmenden Sattdampfes zwischen 150°C und 200°C schwanken darf. Derartige Temperaturschwankungen können vom Dampferzeuger nicht ausgeglichen werden, weshalb es zum Einsatz eines Dampfspeichers kommt. Nachfolgend wird das Volumen V des Dampfspeichers zu bestimmen sein, um einen maximalen Wasserfüllstand (siedendes Wasser) von $\beta = 90\%$ einzuhalten.

Bei dieser Problemstellung kann das Behältervolumen als Kontrollraum herangezogen werden. Vor Entnahme der Dampfmasse, zum Zeitpunkt t_1 kann dem darin befindlichen Fluid eine Gesamtenergie

$$E_{Kr}(t_1) = U(t_1)$$

zugewiesen werden. Kinetische und potentielle Energieanteile seien zu vernachlässigen. Nach der Entnahme des Dampfes ergibt sich für die Gesamtenergie im Speicher unter Berücksichtigung selbiger Voraussetzungen

$$E_{Kr}(t_2) = U(t_2).$$

Für die Gegenüberstellung der Gesamtenergien bei der Entladung liefert (1.21) unter Beachtung der soeben erläuterten Ausführungen zur Gesamtenergie

$$E_{Kr}(t_2) - E_{Kr}(t_1) = U(t_2) - U(t_1) = -\int_{t_1}^{t_2} \dot{m}_{aus}(t)h_{aus}(t)\mathrm{d}t.$$

Darin wurden Q_{12} und W_{12} zu null gesetzt, da weder Wärme noch Arbeiten zu- oder abgeführt werden. Setzt man nun überschlägigerweise $u'(t) \approx h'(t)$ und $u''(t) \approx h''(t)$ und weiters $m''(t_1)h''(t_1) - m''(t_2)h''(t_2) \approx 0$ in der Energiebilanz ein, so folgt

$$U(t_1) - U(t_2) = m'(t_1)h'(t_1) - m'(t_2)h'(t_2).$$

Für die Energie der aus dem Dampfspeicher entnommenen Sattdampfmenge wird als Näherung

$$\int_{t_1}^{t_2} \dot{m}_{aus}(t) h_{aus}(t) \mathrm{d}t \approx \Delta m_{12} \frac{h''(t_1) + h''(t_2)}{2}$$

angenommen. Für die Gesamtenergiebilanz nach dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik liegt nun bei Beachtung aller soeben erläuterten Annahmen folgender Ausdruck

$$\Delta m_{12} \frac{h''(t_1) + h''(t_2)}{2} = m'(t_1) h'(t_1) - m'(t_2) h'(t_2).$$

vor. Bei Annahme von $m'(t_2) = m'(t_1) - \Delta m_{12}$ liefert dies für die Bilanzierung der Energien die Gleichung

$$\Delta m_{12} \left(\frac{h''(t_1) + h''(t_2)}{2} - h'(t_2) \right) = m'(t_1) \left(h'(t_1) - h'(t_2) \right).$$

Den Füllgrad β bestimmt man mit

$$\beta = \frac{m'(t_1) v'(t_1)}{V}.$$

Dies bringt viel mehr zum Ausdruck, dass vor Entnahme der Dampfes ein Anteil β bezogen auf das Gesamtvolumen V des Dampfspeichers von der siedenden Flüssigkeit eingenommen werden. Setzt man nun die zuletzt angeschrieben Gleichung in die Energiebilanz ein, so liefert dies den Ausdruck

$$V = \Delta m_{12} \frac{v'(t_1)}{\beta} \frac{h''(t_1) + h''(t_2) - 2h'(t_2)}{2(h'(t_1) - h'(t_2))}$$

für das gesuchte Volumen des Dampfspeichers. Im Ausgangszustand t_1, dem Siedezustand bei 200°C gilt

$$v'(t_1) = 0.001157 kg/m^3, \quad h'(t_1) = 852.39 kJ/kg \quad \text{und} \quad h''(t_1) = 2792.06 kJ/kg.$$

Nach Entnahme des Dampfes gilt für die relevanten Stoffwerte im Endzustand t_2, was dem Siedezustand bei 150°C entspricht,

$$h'(t_2) = 632.25 kJ/kg \quad \text{und} \quad h''(t_2) = 2745.92 kJ/kg.$$

Das gesuchte Volumen V des zu dimensionierenden Dampfspeichers ergibt sich zu

$$V = 199.65 m^3.$$

Beispiel 4

In einem Großrechner ist ein elektronischer Bauteil verbaut, welcher mit Wasser gekühlt wird, um im Betrieb eine Überhitzung zu vermeiden. Während eines lange andauernden Rechenprozesses ergibt sich am betrachteten Bauteil ein zeitlich konstanter Leistungsabfall von $P^{el}(t) = 1.5W = const.$ Im betrachteten Zeitraum wird die Oberfläche des elektronisches Bauteils auf einem Temperaturniveau von $\vartheta(t) = 40°\mathrm{C} = const$ gehalten. Das System ist nun mithilfe einer Entropiebilanz zu untersuchen.

Die Bildung der zeitlichen Ableitung des Ausdruckes aus (1.9) für ein geschlossenes System unter Beachtung von (1.11) liefert für die Energiebilanz

$$\frac{\mathrm{d}E_{ges}}{\mathrm{d}t} = \dot{Q}(t) + P^{el}(t) = 0W = const.$$

Ab sofort wird aufgrund des stationären Charakters die unabhängige Variable Zeit, t, weggelassen. Die Wasserkühlung muss gemäß erstem Hauptsatz der Thermodynamik eine permanente Kühlleistung von $\dot{Q} = -P^{el} = -1.5W$ bereitstellen. Nun kann man sich dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik zuwenden. Da es sich um einen als stationär zu betrachtenden Prozess handelt, zeichnet sich der elektronische Bauteil durch eine konstante Gesamtentropie, d.h. $S = const$, aus. Mit $\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = 0$ liefert Gleichung (1.39) für die Entropiebilanz

$$\dot{S}_Q + \dot{S}_{irr} = 0.$$

Setzt man für die Temperatur an der Systemgrenze zur Wasserkühlung eine thermodynamische Temperatur von $T = (273.15 + 40)K$ ein, so ergibt sich für den Entropietransportstrom nach (1.32)

$$\dot{S}_Q = \frac{\dot{Q}}{T} = -4.79 \cdot 10^{-3}\frac{W}{K}.$$

Die Entropiebilanz liefert für den Entropieproduktionsstrom

$$\dot{S}_{irr} = -\dot{S}_Q = 4.79 \cdot 10^{-3}\frac{W}{K}.$$

Dieser Wert $\dot{S}_{irr} > 0$ ist das Maß für die im Systeminneren auftretenden Irreversibilitäten. Dass zum Betrieb von Großrechner entsprechend Kühlung erforderlich ist, um ein Überhitzen des Systems zu verhindern, ist als alltäglich zu werten. Dass ein auf ein elektronisches Bauteil aufgeprägter Wärmestrom in elektrische Leistung umgewandelt werden kann, erscheint zurecht absurd. Genau diese Betrachtungsweise liefert einen guten Einblick in das Phänomen irreversibler Prozesse und wird durch die Berechnung mit einem Ergebnis von $\dot{S}_{irr} > 0$ bestätigt.

Beispiel 5

Im Kondensator einer Großkraftwerksanlage tritt Wasserdampf mit einem Dampfgehalt von $x = 0.9$ ein. Der Kondensator arbeitet bei einem Betriebsdruck von $p = 0.1bar$. Am Austritt aus dem Kondensator ist das Arbeitsmedium vollständig kondensiert. Der Massenstrom beträgt $\dot{m} = 50kg/s$. Der Kondensationsvorgang ist sowohl anhand einer Energiebilanz bzw. Leistungsbilanz als auch einer Entropiebilanz zu bewerten.

Am Kondensatoreintritt erhält man mit $h'(0.1bar) = 191.812kJ/kg$ und $h''(0.1bar) = 2583.89kJ/kg$ einen Wert von

$$h_{ein} = h'(0.1bar) + x(h''(0.1bar) - h'(0.1bar)) = 2344.68kJ/kg$$

für die spezifische Enthalpie. Am Kondensatoraustritt gilt in einfacher Weise $h_{aus} = h'(0.1bar)$. Die sich aus dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik ergebende Leistungsbilanz für einen stationären Fließprozess liefert bei Vernachlässigung der kinetischen Energieanteile nach (1.31)

$$\dot{Q} = \dot{m}(h_{aus} - h_{ein}) = -107.64MW$$

für den im Kondensator abzuführenden Wärmestrom. Für die Werte der spezifischen Entropie am Ein- bzw. Austritt erhält man mit $s'(0.1bar) = 0.6492kJ/(kg\ K)$ und $s''(0.1bar) = 8.1489kJ/(kg\ K)$ völlig analog zu den Berechnungen für die Enthalpie

$$s_{ein} = s'(0.1bar) + x(s''(0.1bar) - s'(0.1bar)) = 7.399kJ/(kg\ K)$$

und $s_{aus} = s'(0.1bar)$. Die Entropiebilanz für einen stationären Fließprozess aus (1.49) liefert

$$\dot{m}(s_{aus} - s_{ein}) = \dot{S}_Q + \dot{S}_{irr} = -337.49kW/K.$$

Setzt man bei der Betrachtung den Grenzfall einer reversiblen Zustandsänderung mit $\dot{S}_{irr} = 0$ voraus, so wird der Entropietransportstrom zufolge Wärmeabfuhr zu $\dot{S}_Q = -337.49kW/K$. Der Zusammenhang aus (1.32) liefert dann für die dem Entropietransportstrom zugeordnete thermodynamische Temperatur einen Wert von

$$T = \frac{\dot{Q}}{\dot{S}_Q} = 318.96K.$$

Dieser Wert entspricht genau der Siedetemperatur von $\vartheta_S(0.1bar) = 45.81°C$.

Anhang - Programmcode

Die folgenden Programmzeilen zeigen einen im Zuge der Arbeit erstellten MATLAB-Code. Dabei handelt es sich um jenes Programm das zur Abweichungsanalyse bei linearer Approximation im Einphasengebiet verwendet wird. Die Ergebnisse dieser Berechnungen sind Abbildungen 2.43, 2.44 und 2.45 zu entnehmen. Weiters sei angemerkt, dass im Zuge der Diplomarbeit die Berechnungsformeln der IAPWS-IF97 und zugehöriger Veröffentlichungen nur in jener Form programmiert wurden, sodass stets der Druck p und die Temperatur T als Eingangsgrößen für den Funktionsaufruf im Einphasengebiet herangezogen werden müssen. Dies führt zu diversen Iterationen im abgebildeten Code. Im Zweiphasengebiet genügt eine Eingangsgröße, entweder der Druck p oder die Temperatur T.

```
close all
clear all
clc

p_0 = 10;                   % Druck im Zustand '0' in MPa
dp = 20-p_0;                % charateristische Druckdifferenz in MPa

h_0 = 750;                  % Enthalpie im Zustand '0' in kJ/(kgK)
dh = 1150-h_0;              % charateristische Enthalpiedifferenz in kJ/(kgK)
T_0_start = 180+273.15;  % Startwert fuer Tempartur im Zustand '0' in K

% 1. Startwert fuer Bisektion zur Bestimmung der Tempartur im Zustand '0'
x(1)=T_0_start;
result=R_pT(p_0,x(1));
f(1)=(result.h-h_0);

% 2. Startwert fuer Bisektion zur Bestimmung der Tempartur im Zustand '0'
x(2) = T_0_start-5;
result = R_pT(p_0,x(2));
f(2) = (result.h-h_0);

j_max = 1000;

% Bestimmung der Tempartur im Zustand '0'
for j = 1:j_max

    % Abbruchkriterium
    if abs(f(j+1))/h_0 >= 10^(-8)

        % Bisektionsverfahren
        x(j+2) = x(j+1)-f(j+1)*(x(j+1)-x(j))/(f(j+1)-f(j));
        result = R_pT(p_0,x(j+2));
        f(j+2) = result.h-h_0;
        T_0 = x(j+2);
    else
        break
    end
end

% Ermittlung von spez. Volumen/ innerer Energie im Zustand '0'
v_0 = result.v;
```

```
42 u_0 = result.u;
43
44 % Enthalpie im Zustand '1'
45 h_1 = h_0+dh;
46
47 clear x
48
49 % 1. Startwert fr Bisektion zur Bestimmung der Tempartur im Zustand '1'
50 x(1) = T_0_start;
51 result = R_pT(p_0,x(1));
52 f(1) = result.h-h_0;
53
54 % 2. Startwert fr Bisektion zur Bestimmung der Tempartur im Zustand '1'
55 x(2) = T_0_start-5;
56 result = R_pT(p_0,x(2));
57 f(2) = result.h-h_0;
58
59 % Bestimmung der Tempartur im Zustand '1'
60 for j = 1:j_max
61
62     % Abbruchkriterium
63     if abs(f(j+1))/h_1 >= 10^(-8)
64
65         % Bisektionsverfahren
66         x(j+2) = x(j+1)-f(j+1)*(x(j+1)-x(j))/(f(j+1)-f(j));
67         result = R_pT(p_0,x(j+2));
68         f(j+2) = result.h-h_1;
69         T_1 = x(j+2);
70     else
71         break
72     end
73 end
74
75 % Ermittlung von spez. Volumen/ innerer Energie im Zustand '1'
76 v_1 = result.v;
77 u_1 = result.u;
78
79 % Druck im Zustand '2'
80 p_2 = p_0+dp;
81
82 clear x
83
84 % 2. Startwert fuer Bisektion zur Bestimmung der Tempartur im Zustand '2'
85 x(1) = T_0_start;
86 result = R_pT(p_2,x(1));
87 f(1) = result.h-h_0;
88
89 % 2. Startwert fuer Bisektion zur Bestimmung der Tempartur im Zustand '2'
90 x(2) = T_0_start-5;
91 result = R_pT(p_2,x(2));
92 f(2) = result.h-h_0;
93
94 % Bestimmung der Tempartur im Zustand '2'
95 for j = 1:j_max
96
97     % Abbruchkriterium
98     if abs(f(j+1))/h_0 >= 10^(-8)
99
100        % Bisektionsverfahren
101        x(j+2) = x(j+1)-f(j+1)*(x(j+1)-x(j))/(f(j+1)-f(j));
102        result = R_pT(p_2,x(j+2));
103        f(j+2) = (result.h-h_0);
104        T_2 = x(j+2);
105    else
106        break
107    end
108 end
109
110 % Ermittlung von spez. Volumen/ innerer Energie im Zustand '2'
111 v_2 = result.v;
```

```
u_2 = result.u;

% Berechnung der Parameter fr die lineare Interpolation im Einphasengebiet
A = 1/p_0/10^6*(u_1-u_0)*10^3/(v_1-v_0);
B = ((u_2*10^3-A*p_2*10^6*v_2)-(u_0*10^3-A*p_0*10^6*v_0))/(p_2-p_0)/10^6;
C = u_0*10^3-A*p_0*10^6*v_0-B*p_0*10^6;
D = (h_1-h_0)*10^3/(T_1-T_0);
E = -D*(T_2-T_0)/(p_2-p_0)/10^6;
F = h_0*10^3-D*T_0-E*p_0*10^6;

n=50;

% Ermittlung von IF97-Werten und genaeherten Werten im gesamten
% Interpolationsgebiet an (n+1)*(n+1) Stuetzstellen
for i = 1:n+1
    p(i) = p_0+dp/n*(i-1);
    for j = 1:n+1
        T(j) = T_0+(max(T_1,T_2)-T_0)/n*(j-1);
        result = R_pT(p(i),T(j));

        % Werte nach IF97
        v_ref(i,j) = result.v;
        u_ref(i,j) = result.u;
        h_ref(i,j) = result.h;

        % approximierte Werte
        h_n(i,j) = D*T(j)+E*p(i)*10^6+F;
        u_n(i,j) = (A*h_n(i,j)+B*p(i)*10^6+C)/(1+A);
        v_n(i,j) = (h_n(i,j)-u_n(i,j))./(10^6*p(i));
    end
end

% Berechnung der relativen Abweichung
dh_rel = (h_n/10^3-h_ref)./h_ref;
du_rel = (u_n/10^3-u_ref)./u_ref;
dv_rel = (v_n-v_ref)./v_ref;
```

Approx_lokal_publish.m

Der zweite beispielhaft gezeigte Code bezieht sich auf Abschnitt 2.9. In den Programmzeilen zum Anwendungsbeispiel Dampftrommel können sowohl die exakte Bestimmung der Zustandsgrößen nach IF97 als auch die lineare Approximation oder die quadratische Approximation zur Berechnung der Zustandsgrößen im Zweiphasengebiet gewählt werden.

```
close all
clear all
clc
tic

% Zeit- u. Druckdaten fuer Druckverlauf
t_1 = [-580, -450, 5, 460, 720, 954, 1175, 1370, 1500];
p_1 = [-1.5, 0, 3, 13, 25, 36, 49, 58, 60];

% Polynominterpolation fuer den Druckverlauf
poly = polyfit(t_1,p_1,4);

% Berechnungszeit t=1...1500s
dt = 1;
t = dt:dt:1500;

% Druckverlauf fuer t=1...1500s
p_verl = polyval(poly,t);

% Druckgradientenverlauf
poly_strich = [4*poly(1), 3*poly(2), 2*poly(3), poly(4)];
dpdt_verl = polyval(poly_strich,t);

```

```
% Trommelgeometrie (Laenge, Durchmesser, Wandstaerke)
L = 5;
D = 2.8;
s = 0.085;

% Stoffwerte Trommelmaterial (Dichte, spez. Waermekapazitaet)
rho = 7800;
c_St = 500;

% Trommelvolumen und Stahlmasse
V = D^2*pi/4*L;
m_St = (((D+2*s)^2-D^2)*pi/4*L+2*(D+2*s)^2*pi/4*s)*rho;

% Volumen von siedender Fluessigkeit und Sattdampf in der Trommel
V_W = 0.5*V;
V_D = 0.5*V;

% Speisewassermassenstrom
m_dot_Spw = linspace(1000/3600,20000/3600,1500);

% Abschlmmmassenstrom
m_dot_Ab = 500/3600;

% 1...exakte Berechnung (IF97), 2...lineare Approximation, 3...quadratische
    Approximation
var = 1;

% spezifische Druckdifferenz fuer Approximation
lambda = 0.1;

% Berechung fuer jeden Zeitschritt
for i = 1:length(t)

    % aktueller Druck in Pa
    p = p_verl(i)*10^5;

    % aktuelle Siedetemperatur und Speisewassertemperatur
    T_s(i) = R4_Ts_p(p*10^-6);
    T_spw(i) = T_s(i)-5;

    % Berechnung der Speisewasserenthalpie
    result = R_pT(p*10^-6,T_spw(i));
    h_spw(i) = result.h*10^3;
    clear result

    % exakte Berechnung (IF97)
    if var == 1

        % Bestimmung der relevanten Saettigungsgroessen
        result = Saettigungsgroessen_p(p*10^-6);
        h_strich(i) = result.h_strich*10^3;
        h_2strich(i) = result.h_2strich*10^3;
        v_strich(i) = result.v_strich;
        v_2strich(i) = result.v_2strich;
        clear result

    % lineare Approximation
    elseif var == 2

        % Druecke fuer Zustand '0' u. '1' bei lin. Approximation
        if i == 1
            j = 1;
            p_0(j) = p;
            dp(j) = lambda*p_0(j);
            p_1(j) = p_0(j)+dp(j);
        end
        if p > p_1(j) || i == 1
            if i > 1
                j = j+1;
                p_0(j) = p_1(j-1);
```

```
93                  dp(j) = lambda*p_0(j);
94                  p_1(j) = p_0(j)+dp(j);
95              end
96
97              % Auswertungen fuer Zustand '0' bei lin. Approximation
98              T_s0 = R4_Ts_p(p_0(j)*10^-6);
99              result = Saettingungsgroessen_p(p_0(j)*10^-6);
100             h_strich_0  =result.h_strich;
101             h_2strich_0 = result.h_2strich;
102             v_strich_0 = result.v_strich;
103             v_2strich_0 = result.v_2strich;
104             clear result
105
106             % Auswertungen fuer Zustand '1' bei lin. Approximation
107             T_s1 = R4_Ts_p(p_1(j)*10^-6);
108             result = Saettingungsgroessen_p(p_1(j)*10^-6);
109             h_strich_1  =result.h_strich;
110             h_2strich_1 = result.h_2strich;
111             v_strich_1 = result.v_strich;
112             v_2strich_1 = result.v_2strich;
113             clear result;
114
115             % Koeffizientenermittlung
116             G_0 = (T_s1-T_s0)/(dp(j));
117             H_0 = T_s0-G_0*p_0(j);
118
119             G_1 = (h_strich_1-h_strich_0)/(dp(j));
120             H_1 = h_strich_0-G_1*p_0(j);
121
122             G_2 = (h_2strich_1-h_2strich_0)/(dp(j));
123             H_2 = h_2strich_0-G_2*p_0(j);
124
125             G_3 = (v_strich_1-v_strich_0)/(dp(j));
126             H_3 = v_strich_0-G_3*p_0(j);
127
128             G_4 = (v_2strich_1-v_2strich_0)/(dp(j));
129             H_4 = v_2strich_0-G_4*p_0(j);
130         end
131
132         % Bestimmung der relevanten Saettigungsgroessen
133         T_s(i) = (G_0*p+H_0);
134         h_strich(i) = (G_1*p+H_1)*10^3;
135         h_2strich(i) = (G_2*p+H_2)*10^3;
136         v_strich(i) = (G_3*p+H_3);
137         v_2strich(i) = (G_4*p)+H_4;
138
139     % quadratische Approximation
140     elseif var==3
141
142         % Druecke fuer Zustaende '0', '1' u. '1/2' bei qu. Approximation
143         if i == 1
144             j = 1;
145             p_0(j) = p;
146             dp(j) = lambda*p_0(j);
147             p_1(j) = p_0(j)+dp(j);
148             p_1_2(j) = p_0(j)+0.5*dp(j);
149         end
150         if p > p_1(j) || i == 1
151             if i > 1
152                 j = j+1;
153                 p_0(j) = p_1(j-1);
154                 dp(j) = lambda*p_0(j);
155                 p_1(j) = p_0(j)+dp(j);
156                 p_1_2(j) = p_0(j)+0.5*dp(j);
157             end
158             % Auswertungen fuer Zustand '0' bei qu. Approximation
159             T_s0 = R4_Ts_p(p_0(j)*10^-6);
160             result = Saettingungsgroessen_p(p_0(j)*10^-6);
161             h_strich_0  =result.h_strich;
162             h_2strich_0 = result.h_2strich;
```

```
163             v_strich_0 = result.v_strich;
164             v_2strich_0 = result.v_2strich;
165             clear result
166 
167             % Auswertungen fuer Zustand '1' bei qu. Approximation
168             T_s1 = R4_Ts_p(p_1(j)*10^-6);
169             result = Saettingungsgroessen_p(p_1(j)*10^-6);
170             h_strich_1  =result.h_strich;
171             h_2strich_1 = result.h_2strich;
172             v_strich_1 = result.v_strich;
173             v_2strich_1 = result.v_2strich;
174             clear result
175 
176             % Auswertungen fuer Zustand '1/2' bei qu. Approximation
177             T_s1_2 = R4_Ts_p(p_1_2(j)*10^-6);
178             result = Saettingungsgroessen_p(p_1_2(j)*10^-6);
179             h_strich_1_2  =result.h_strich;
180             h_2strich_1_2 = result.h_2strich;
181             v_strich_1_2 = result.v_strich;
182             v_2strich_1_2 = result.v_2strich;
183             clear result;
184 
185             % Bestimmung der quadratischen Approximaitionsfunktionen
186             xx = [p_0(j), p_1_2(j), p_1(j)];
187 
188             y_strich_1 = [h_strich_0, h_strich_1_2, h_strich_1];
189             y_strich_2 = [v_strich_0, v_strich_1_2, v_strich_1];
190 
191             y_2strich_1 = [h_2strich_0, h_2strich_1_2, h_2strich_1];
192             y_2strich_2 = [v_2strich_0, v_2strich_1_2, v_2strich_1];
193 
194             y_3 = [T_s0,T_s1_2, T_s1];
195 
196             p_strich_1 = polyfit(xx,y_strich_1,2);
197             p_strich_2 = polyfit(xx,y_strich_2,2);
198 
199             p_2strich_1 = polyfit(xx,y_2strich_1,2);
200             p_2strich_2 = polyfit(xx,y_2strich_2,2);
201 
202             p_3 = polyfit(xx,y_3,2);
203         end
204 
205         % Bestimmung der relevanten Saettigungsgroessen
206         h_strich(i) = polyval(p_strich_1,p)*10^3;
207         v_strich(i) = polyval(p_strich_2,p);
208         h_2strich(i) = polyval(p_2strich_1,p)*10^3;
209         v_2strich(i) = polyval(p_2strich_2,p);
210         T_s(i) = polyval(p_3,p);
211     end
212     if i > 1
213         if i == 2
214             dpdt = dpdt_verl(i-1)*10^5;
215 
216             % Wasser- und Dampfmasse in der Trommel
217             m_W(i-1) = V_W/v_strich(i);
218             m_D(i-1) = V_D/v_2strich(i);
219 
220             m_W_h_strich(i-1) = m_W(i-1)*h_strich(i-1);
221             m_D_h_2strich(i-1) = m_D(i-1)*h_2strich(i-1);
222         end
223 
224         % Wasser- und Dampfmasse in der Trommel
225         m_W(i) = V_W/v_strich(i);
226         m_D(i) = V_D/v_2strich(i);
227 
228         m_W_h_strich(i) = m_W(i)*h_strich(i);
229         m_D_h_2strich(i) = m_D(i)*h_2strich(i);
230 
231         % Bestimmung der Differenzenquotienten (num. Ableitungen)
232         dm_W(i-1) = (m_W(i)-m_W(i-1))/dt;
```

```
233         dm_D(i-1) = (m_D(i)-m_D(i-1))/dt;
234
235         dm_W_h_strich(i-1) = (m_W_h_strich(i)-m_W_h_strich(i-1))/dt;
236         dm_D_h_2strich(i-1) = (m_D_h_2strich(i)-m_D_h_2strich(i-1))/dt;
237
238         dT_s(i-1) = (T_s(i)-T_s(i-1))/dt;
239
240         % Dampfmassenstrom und zuzufuehrender Waermestrom
241         m_dot_D(i-1) = m_dot_Spw(i-1) - m_dot_Ab - (dm_W(i-1)+dm_D(i-1));
242         Q_dot(i-1) = (dm_W_h_strich(i-1)+dm_D_h_2strich(i-1)) + m_St*c_St*dT_s(i-1)
                - V*dpdt - m_dot_Spw(i-1)*h_spw(i-1) + m_dot_D(i-1)*h_2strich(i-1) +
              m_dot_Ab*h_strich(i-1);
243     end
244 end
245 toc
```

DTrommel_publish.m

Abbildungsverzeichnis

1.1 Übersicht über die Bereiche/ Regionen der IAPWS-IF97 [17, Abb.3.1.]. 22

2.1 p, v, T-Diagramm eines reinen Stoffes [3, Abb.4.1.]. 23
2.2 p, T-Diagramm eines reinen Stoffes [3, Abb.4.3.]. 24
2.3 Zustandspunkte bei linearer Approximation im Zweiphasengebiet. . . 27
2.4 Interpolationsgebiet bei linearer Approximation im Zweiphasengebiet. 29
2.5 Relative Abweichung der approximierten Enthalpie im Zweiphasengebiet für $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$. 31
2.6 Relative Abweichung des approximierten spezifischen Volumens im Zweiphasengebiet für $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$. . . . 31
2.7 Relative Abweichung der approximierten inneren Energie im Zweiphasengebiet für $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$. 32
2.8 Lage des Interpolationsgebietes in der p, T-Ebene für $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$. 32
2.9 Vergleich von approximierten und IF97-Werten für die Enthalpie von siedender Flüssigkeit und Sattdampf, $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$. 33
2.10 Vergleich von approximierten und IF97-Werten für das spezifische Volumen von siedender Flüssigkeit und Sattdampf, $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$. 33
2.11 Vergleich von approximierten und IF97-Werten für die innere Energie von siedender Flüssigkeit und Sattdampf, $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$. 34
2.12 Zustandspunkte bei quadratischer Approximation im Zweiphasengebiet. 35
2.13 Interpolationsgebiet bei quadratischer Approximation im Zweiphasengebiet. 38
2.14 Relative Abweichung der approximierten Enthalpie im Zweiphasengebiet für $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$. 40
2.15 Relative Abweichung des approximierten spezifischen Volumens im Zweiphasengebiet für $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$. . . . 41
2.16 Relative Abweichung der approximierten inneren Energie im Zweiphasengebiet für $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$. 41
2.17 Vergleich von approximierten und IF97-Werten für die Enthalpie von siedender Flüssigkeit und Sattdampf, $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$. 42

2.18 Vergleich von approximierten und IF97-Werten für das spezifische Volumen von siedender Flüssigkeit und Sattdampf, $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$. 42
2.19 Vergleich von approximierten und IF97-Werten für die innere Energie von siedender Flüssigkeit und Sattdampf, $p_0 = 7MPa$ und $p_1 = 2.45p_0 = 17.15MPa$. 43
2.20 Sensitivitätsanalyse bei linearer Näherung und $\Delta p/p_0 = 0.5$. 44
2.21 Sensitivitätsanalyse bei quadratischer Näherung und $\Delta p/p_0 = 0.5$. . . 45
2.22 Sensitivitätsanalyse bei linearer und quadratischer Näherung, $\Delta p/p_0 = 0.5$, logarithmische Darstellung. 45
2.23 Sensitivitätsanalyse bei linearer und quadratischer Näherung, $\Delta p/p_0 = 0.2$, logarithmische Darstellung. 46
2.24 Sensitivitätsanalyse bei linearer und quadratischer Näherung, $\Delta p/p_0 = 0.1$, logarithmische Darstellung. 46
2.25 Nachweis der auftretenden Spitzen in den Verläufen von Enthalpie und spezifischem Volumen bei linearer Näherung, $\Delta p/p_0 = 0.5$, logarithmische Darstellung. 47
2.26 Nachweis der Unregelmäßigkeiten in den Verläufen von Enthalpie und spezifischem Volumen bei quadratischer Näherung, $\Delta p/p_0 = 0.1$, logarithmische Darstellung. 48
2.27 Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung bei linearer Näherung und $\Delta_{zul} = 1\%$. 50
2.28 Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung bei quadratischer Näherung und $\Delta_{zul} = 1\%$. 50
2.29 Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung bei linearer und quadratischer Näherung, $\Delta_{zul} = 1\%$, logarithmische Darstellung. 51
2.30 Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung bei linearer und quadratischer Näherung, $\Delta_{zul} = 0.5\%$, logarithmische Darstellung. 51
2.31 Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung bei linearer und quadratischer Näherung, $\Delta_{zul} = 0.1\%$, logarithmische Darstellung. 52
2.32 Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung bei linearer und quadratischer Näherung, $\Delta_{zul} = 0.01\%$, logarithmische Darstellung. 52
2.33 Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung für die Enthalpie bei linearer Näherung und Variation von Δ_{zul}, lineare Darstellung. 53
2.34 Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung für das spezifische Volumen bei linearer Näherung und Variation von Δ_{zul}, lineare Darstellung. . . 53
2.35 Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung für die innere Energie bei linearer Näherung und Variation von Δ_{zul}, lineare Darstellung. 54
2.36 Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung für die Enthalpie bei quadratischer Näherung und Variation von Δ_{zul}, lineare Darstellung. . . 54
2.37 Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung für das spezifische Volumen bei quadratischer Näherung und Variation von Δ_{zul}, lineare Darstellung. 55
2.38 Gültigkeitsbereiche zur Fehlereinhaltung für die innere Energie bei quadratischer Näherung und Variation von Δ_{zul}, lineare Darstellung. 55
2.39 Nachweis der auftretenden Spitzen in den Verläufen von Enthalpie, $\Delta_{zul} = 0.5\%$ bzw. $\Delta_{zul} = 0.1\%$, lineare Darstellung. 56

2.40 Zustandspunkte bei linearer Approximation im Einphasengebiet. . . . 58
2.41 Interpolationsgebiet $[p_0, p_2] \times [T_0, \max(T_1, T_2)]$ bei linearer Approximation im Einphasengebiet, $T_1 > T_2$, wobei sogar eine Konstellation mit $T_2 < T_0$ möglich ist. 60
2.42 Interpolationsgebiet $[p_0, p_2] \times [T_0, \max(T_1, T_2)]$ bei linearer Approximation im Einphasengebiet, $T_2 > T_1$. 61
2.43 Relative Abweichung der approximierten Enthalpie im Einphasengebiet für $h_0 = 750kJ/kg$, $h_1 = \frac{23}{15}h_0 = 1150kJ/kg$, $p_0 = 10MPa$ und $p_2 = 2p_0 = 20MPa$, flüssiges Wasser. 62
2.44 Relative Abweichung des approximierten spezifischen Volumens im Einphasengebiet für $h_0 = 750kJ/kg$, $h_1 = \frac{23}{15}h_0 = 1150kJ/kg$, $p_0 = 10MPa$ und $p_2 = 2p_0 = 20MPa$, flüssiges Wasser. 62
2.45 Relative Abweichung der approximierten inneren Energie im Einphasengebiet für $h_0 = 750kJ/kg$, $h_1 = \frac{23}{15}h_0 = 1150kJ/kg$, $p_0 = 10MPa$ und $p_2 = 2p_0 = 20MPa$, flüssiges Wasser. 63
2.46 Lage des Interpolationsgebietes in der p, T-Ebene für $h_0 = 750kJ/kg$, $h_1 = \frac{23}{15}h_0 = 1150kJ/kg$, $p_0 = 10MPa$ und $p_2 = 2p_0 = 20MPa$, flüssiges Wasser. 63
2.47 Relative Abweichung der approximierten Enthalpie im Einphasengebiet für $h_0 = 3000kJ/kg$, $h_1 = \frac{7}{6}h_0 = 3500kJ/kg$, $p_0 = 8MPa$ und $p_2 = 1.75p_0 = 14MPa$, überhitzter Dampf. 64
2.48 Relative Abweichung des approximierten spezifischen Volumens im Einphasengebiet für $h_0 = 3000kJ/kg$, $h_1 = \frac{7}{6}h_0 = 3500kJ/kg$, $p_0 = 8MPa$ und $p_2 = 1.75p_0 = 14MPa$, überhitzter Dampf. 65
2.49 Relative Abweichung der approximierten inneren Energie im Einphasengebiet für $h_0 = 3000kJ/kg$, $h_1 = \frac{7}{6}h_0 = 3500kJ/kg$, $p_0 = 8MPa$ und $p_2 = 1.75p_0 = 14MPa$, überhitzter Dampf. 65
2.50 Lage des Interpolationsgebietes in der p, T-Ebene für $h_0 = 3000kJ/kg$, $h_1 = \frac{7}{6}h_0 = 3500kJ/kg$, $p_0 = 8MPa$ und $p_2 = 1.75p_0 = 14MPa$, überhitzter Dampf. 66
2.51 'Fehlerlandkarte' für die Enthalpie, $\Delta h_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.05p_0$, $\Delta h = 0.05h_0$ und $\Delta_{max} = 0.01$. 68
2.52 'Fehlerlandkarte' für die Enthalpie, $\Delta h_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.05p_0$, $\Delta h = 0.05h_0$ und $\Delta_{max} = 0.04$ in der Umgebung des kritischen Punktes. 68
2.53 'Fehlerlandkarte' für das spezifische Volumen, $\Delta v_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.05p_0$, $\Delta h = 0.05h_0$ und $\Delta_{max} = 0.01$. 69
2.54 'Fehlerlandkarte' für das spezifische Volumen, $\Delta v_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.05p_0$, $\Delta h = 0.05h_0$ und $\Delta_{max} = 0.1$ in der Umgebung des kritischen Punktes. 69
2.55 'Fehlerlandkarte' für die innere Energie $\Delta u_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.05p_0$, $\Delta h = 0.05h_0$ und $\Delta_{max} = 0.01$. 70
2.56 'Fehlerlandkarte' für die innere Energie, $\Delta u_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.05p_0$, $\Delta h = 0.05h_0$ und $\Delta_{max} = 0.04$ in der Umgebung des kritischen Punktes. 70
2.57 'Fehlerlandkarte' für die Enthalpie, $\Delta h_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.1p_0$, $\Delta h = 0.1h_0$ und $\Delta_{max} = 0.075$. 71

2.58 'Fehlerlandkarte' für die Enthalpie, $\Delta h_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.1p_0$, $\Delta h = 0.1h_0$ und $\Delta_{max} = 0.15$ in der Umgebung des kritischen Punktes. 71
2.59 'Fehlerlandkarte' für das spezifische Volumen, $\Delta v_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.1p_0$, $\Delta h = 0.1h_0$ und $\Delta_{max} = 0.075$. 72
2.60 'Fehlerlandkarte' für das spezifische Volumen, $\Delta v_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.1p_0$, $\Delta h = 0.1h_0$ und $\Delta_{max} = 0.25$ in der Umgebung des kritischen Punktes. 72
2.61 'Fehlerlandkarte' für die innere Energie, $\Delta u_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.1p_0$, $\Delta h = 0.1h_0$ und $\Delta_{max} = 0.075$. 73
2.62 'Fehlerlandkarte' für die innere Energie, $\Delta u_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.1p_0$, $\Delta h = 0.1h_0$ und $\Delta_{max} = 0.15$ in der Umgebung des kritischen Punktes. 73
2.63 'Fehlerlandkarte' für die Enthalpie, $\Delta h_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.2p_0$, $\Delta h = 0.2h_0$ und $\Delta_{max} = 0.075$. 74
2.64 'Fehlerlandkarte' für die Enthalpie, $\Delta h_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.2p_0$, $\Delta h = 0.2h_0$ und $\Delta_{max} = 0.25$ in der Umgebung des kritischen Punktes. 74
2.65 'Fehlerlandkarte' für das spezifische Volumen, $\Delta v_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.2p_0$, $\Delta h = 0.2h_0$ und $\Delta_{max} = 0.075$. 75
2.66 'Fehlerlandkarte' für das spezifische Volumen, $\Delta v_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.2p_0$, $\Delta h = 0.2h_0$ und $\Delta_{max} = 0.45$ in der Umgebung des kritischen Punktes. 75
2.67 'Fehlerlandkarte' für die innere Energie, $\Delta u_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.2p_0$, $\Delta h = 0.2h_0$ und $\Delta_{max} = 0.075$. 76
2.68 'Fehlerlandkarte' für die innere Energie, $\Delta u_{max}(p(i), T(i))$, bei $\Delta p = 0.2p_0$, $\Delta h = 0.2h_0$ und $\Delta_{max} = 0.25$in der Umgebung des kritischen Punktes. 76
2.69 Prinzipdarstellung einer Dampftrommel bei einem Naturumlaufsystem. 77
2.70 Prinzipdarstellung zur Massenbilanzierung um den Innenraum einer Dampftrommel. 78
2.71 Prinzipdarstellung zur Leistungsbilanzierung um eine Dampftrommel. 79
2.72 Druckverlauf p und Druckgradientenverlauf $\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}$. 81
2.73 Dampfmassenstrom $\dot{m}_D$ und Wärmestrom $\dot{Q}$ bei Verwendung von Stoffwerten auf Basis IF97, exakte Berechnung. 83
2.74 Dampfmassenstrom $\dot{m}_D$ als Ergebnis der Massenbilanz aus Gleichung (2.136) bei Verwendung von Stoffwerten auf Basis IF97, exakte Berechnung. 83
2.75 Dampfmassenstrom $\dot{m}_D$ und Wärmestrom $\dot{Q}$ bei linearer Näherung der Stoffwerte, $\Delta p/p_0 = 0.1$. 84
2.76 Dampfmassenstrom $\dot{m}_D$ und Wärmestrom $\dot{Q}$ bei quadratischer Näherung der Stoffwerte, $\Delta p/p_0 = 0.1$. 85
2.77 Fehleranalyse für den Dampfmassenstrom $\dot{m}_D$ und den Wärmestrom $\dot{Q}$ bei linearer Näherung der Stoffwerte, $\Delta p/p_0 = 0.1$. 85
2.78 Fehleranalyse für den Dampfmassenstrom $\dot{m}_D$ und den Wärmestrom $\dot{Q}$ bei quadratischer Näherung der Stoffwerte, $\Delta p/p_0 = 0.1$. 86

Tabellenverzeichnis

1.1 Ermittlung der Zustandsgrößen aus der Helmholtz-Funktion. 19
1.2 Ermittlung der Zustandsgrößen aus der Gibbs-Funktion. 19
1.3 Ermittlung der Zustandsgrößen aus der dimensionslosen Form der Helmholtz-Funktion in Anlehnung an Tabelle 3.31. aus [17]. 21
1.4 Ermittlung der Zustandsgrößen aus der dimensionslosen Form der Gibbs-Funktion in Anlehnung an Tabelle 3.2. aus [17]. 21

2.1 Übersicht über die zur Berechnung benötigten zeitunabhängigen Größen. 81
2.2 Vergleich der Rechenzeiten beim Anwendungsbeispiel Dampftrommel. 86

Literaturverzeichnis

[1] *FDBR Handbuch Wärme- und Strömungstechnik.* Fachverband Dampfkessel-, Behälter- und Rohrleitungsbau e.V. (Hrsg.), Kapitel 10.3, 2016

[2] Baehr, H. D.: Zur Interpolation in Dampftafeln. In: *Brennst.-Wärme-Kraft* 26 (1974), Nr. 5, S. 211–212

[3] Baehr, H. D. ; Kabelac, S. : *Thermodynamik: Grundlagen und technische Anwendungen.* 15., [überarb.] Aufl. Berlin : Springer Vieweg, 2012 (Springer-Lehrbuch)

[4] Epple, B. ; Leithner, R. ; Linzer, W. ; Walter, H. : *Simulation von Kraftwerken und Feuerungen.* 2., erw. und korr. Auflage. Wien : Springer, 2012

[5] Freiler, P. : *Programmierung der Zustands- und Transportgrößen von Wasser und Wasserdampf.* Wien, Technische Universität Wien, Diplomarbeit, 2015

[6] Geller, W. : *Thermodynamik für Maschinenbauer.* 4., erw. Aufl. Berlin : Springer, 2006 (Springer-Lehrbuch)

[7] Glück, B. : *Gefälle-Dampfspeicher.* 2012 (ebook)

[8] Lauth, G. J. ; Kowalczyk, J. : *Thermodynamik: Eine Einführung.* Berlin : Springer Spektrum, 2015 (Lehrbuch)

[9] Lucas, K. : *Thermodynamik: Die Grundgesetze der Energie- und Stoffumwandlungen.* 7., korr. Aufl. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2008 (Springer-Lehrbuch)

[10] Miyagawa, K. ; Hill P. G.: Rapid and Accurate Calculation of Water and Steam Properties Using the Tabular Taylor Series Expansion Method. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 123 (2001), Nr. 3, S. 707–712

[11] Pfleger, E. : Optimale Stoffwertberechnung von Wasser und Wasserdampf. In: *BWK* 40 (1988), Nr. 10, S. 405–408

[12] Ponweiser, K. ; Walter, H. : Die thermodynamischen Zustandsgrößen von Wasser und Wasserdampf und deren partielle Ableitungen in unterschiedlichen Darstellungsformen. In: *Brennst.-Wärme-Kraft* 46 (1994), Nr. 1/2, S. 53–55

[13] Reimann, M. ; Meyer-Pitroff, R. ; Grigull, U. : Berechnung der Zustandsgrößen aus thermodynamisch konsistenten Zustandsgleichungen und Vergleich der Ergebnisse verschiedener Gleichungssysteme für Wasser und Wasserdampf. In: *Brennst.-Wärme-Kraft* 22 (1970), Nr. 8, S. 373–377

[14] Stephan, P. ; Schaber, K. ; Stephan, K. ; Mayinger, F. : *Thermodynamik: Grundlagen und technische Anwendungen Band 1: Einstoffsysteme*. 19., ergänzte Aufl. 2013. Berlin, Heidelberg and s.l. : Springer Berlin Heidelberg, 2013 (Springer-Lehrbuch)

[15] Stierstadt, K. : *Thermodynamik: Von der Mikrophysik zur Makrophysik*. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010 (Springer-Lehrbuch)

[16] van der Looij, J. : Zweckmässige Formulierung der Eigenschaften von Wasser und Wasserdampf für die dynamische Modellbildung von Dampfkraftprozessen. In: *BWK* 38 (1986), Nr. 12, S. 545–546

[17] Wagner, W. ; Kruse, A. ; Kretzschmar, H.-J. : *Properties of water and steam: The industrial standard IAPWS-IF97 for the thermodynamic properties and supplementary equations for other properties ; tables based on these equations*. Berlin : Springer, 1998

[18] Weigand, B. ; Köhler, J. ; Wolfersdorf, J. v.: *Thermodynamik kompakt*. Berlin, Heidelberg : Springer, 2008 (Springer-Lehrbuch)

[19] Will, T. : *Approximation der Zustandsgleichungen für Wasser/Dampf nach IAPWS-IF97 durch Näherungsfunktionen*. Steinmüller Engineering GmbH, IHI Group Company, Fabrikstraße 5, D-51643 Gummersbach, 2009 (Internes Dokument)