

БЛОК РАСЧЕТА ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВОДЫ И ВОДЯНОГО ПАРА В ПАКЕТЕ ПРОГРАММ ЛОГОС

*Близнюк Оксана Геннадьевна, Гичук Александр Владимирович,
Козлов Анатолий Викторович (AnVKozlov@vniief.ru)*

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

В рамках пакета программ ЛОГОС авторами реализован блок для вычисления теплофизических свойств воды и водяного пара на базе уравнений, принятых международной ассоциацией по свойствам воды и водяного пара (IAPWS-IF97), проведено тестирование и проверена работоспособность на ряде прикладных задач. Для снижения вычислительной нагрузки и ускорения счета авторами реализована возможность использования таблиц дискретных значений.

Ключевые слова: пакет программ ЛОГОС, вода, водяной пар, термодинамические параметры, IAPWS-IF97.

A COMPUTATIONAL MODULE FOR THE THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF WATER AND STEAM IN THE LOGOS SOFTWARE PACKAGE

*Bliznyuk Oksana Gennadevna, Gichuk Aleksandr Vladimirovich,
Kozlov Anatoliy Viktorovich (AnVKozlov@vniief.ru)*

FSUE «RFNC-VNIIEF», Sarov Nizhny Novgorod region

The authors have implemented a computational module within the LOGOS software package to calculate the thermophysical properties of water and steam using the equations accepted by the International Association for the Properties of Water and Steam (IAPWS-IF97). The module was verified and tested on a number of application problems. To reduce the computational load and speed up the computation process, a feasibility of using tables of discrete quantity values has been implemented.

Key words: LOGOS software package, water, steam vapor, thermodynamic parameters, IAPWS-IF97.

Введение

Среди широкого круга проблем вычислительной гидродинамики традиционно центральные позиции отводятся численным исследованиям течений воды, как наиболее распространенной, и потому вовлеченной во многие технологические процессы жидкости. Точность моделирования зависит от полноты используемой математической модели, в которую помимо основных законов сохранения входят соотношения, описывающие теплофизические свойства воды: вязкость, теплопроводность, плотность и др. Часто при решении таких задач свойства воды или водяного пара могут быть определены по упрощенным моделям, но при значительных изменениях давления и температуры этого недостаточно. Пример

задач, особо требовательных к точности описания свойств воды и водяного пара – моделирование штатных и аварийных режимов работы ядерных энергетических установок (подавляющее большинство таких установок содержат контуры с пароводяным теплоносителем).

В рамках работ по развитию пакета программ «Логос» [1] авторами реализован программный блок расчета термодинамических свойств воды и/или водяного пара для моделирования трехмерных задач однофазной и многофазной гидродинамики. Реализация блока расчета теплофизических свойств воды и водяного пара в соответствии со стандартом IAPWS-IF97 является обязательным требованием для аттестации кода в Ростехнадзоре, а также его использованием при расчетах экспортных энергоблоков (требование МАГАТЭ).

Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики (направление «Математическое моделирование на супер-ЭВМ экс- и зеттафлопсной производительности»).

Термодинамические величины

Плотность	$\rho(p,T), \rho(p,h)$
Удельная энтальпия	$h(p,T)$
Удельные теплоемкости	$C_p(p,T), C_v(p,T)$
Динамическая вязкость	$\mu(p,T)$
Теплопроводность	$\lambda(p,T)$
Поверхностное натяжение	$\sigma(T)$
Давление и температура насыщения	$p_s(T), T_s(p)$
Температура	$T(p,h)$
Производные	$\frac{\partial \rho(p,T)}{\partial p}, \frac{\partial \rho(p,T)}{\partial T}, \frac{\partial h(p,T)}{\partial p}, \frac{\partial h(p,T)}{\partial T},$ $\frac{\partial \rho(p,h)}{\partial p}, \frac{\partial \rho(p,h)}{\partial h}, \frac{\partial T(p,h)}{\partial p}, \frac{\partial T(p,h)}{\partial h}$

Международный стандарт IAPWS-IF97

Международная ассоциация по свойствам воды и водяного пара (IAPWS) является некоммерческой организацией, координирующей исследования по описанию теплофизических свойств воды и пара. Результатом ее деятельности являются периодически обновляемые международные стандарты и руководства по расчету этих свойств. Последним стандартом является подготовленный в 1997 году выпуск, названный IAPWS-IF97 [2]. Несмотря на относительно давнюю дату разработки, стандарт постоянно обновляется.

Данные о теплофизических свойствах воды и водяного пара, вычисляемые по принятым IAPWS уравнениям, являются международным промышленным стандартом для всех видов технических расчетов. Использование стандарта IAPWS поддерживается в известных коммерческих программных кодах для моделирования гидродинамических течений, а также принято в отраслевых теплогидравлических кодах для расчетов в интересах атомной энергетики.

Стандарт включает набор уравнений, позволяющих рассчитывать значения термодинамических величин для воды и водяного пара (см. табл. 1).

В качестве независимых переменных выступают давление и температура (далее p - T) или давление и энтальпия (далее p - h). Стандарт позволяет охватить следующие диапазоны температур и давлений [3]:

$$273,15\text{K} \leq T \leq 1073,15\text{K}, 0 < p \leq 100 \text{ МПа};$$

$$1073,15\text{K} \leq T \leq 2273,15\text{K}, 0 < p \leq 50 \text{ МПа}.$$

Общая область определения уравнений стандарта IAPWS-IF97 разбивается на пять областей 1–5, как это показано на рис. 1, отличающихся используемыми для вычисления термодинамических величин уравнениями. Описание областей 1–5 приведено в табл. 2.

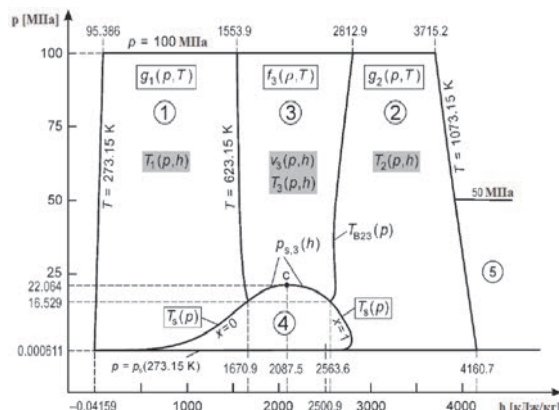
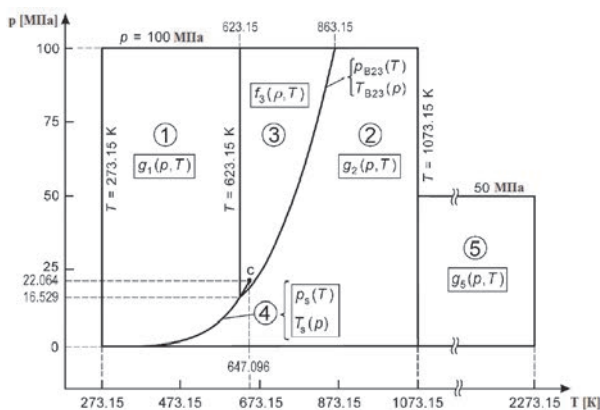


Рис. 1. Область определения основных и обратных уравнений

Области и уравнения для вычисления термодинамических величин

Область, рис. 1	Описание
1	Область воды – описывается фундаментальным уравнением для энергии Гиббса. Область делится на подобласти: стабильная однофазная область воды и метастабильная область перегретой воды около линии насыщения.
2	Область перегретого пара – описывается фундаментальным уравнением для энергии Гиббса. Область делится на подобласти: стабильная однофазная область водяного пара и метастабильная область водяного пара около линии насыщения.
3	Двухфазная окологкритическая область – описывается фундаментальным уравнением для энергии Гельмгольца.
4	Область насыщения – линия насыщения (двухфазная область).
5	Область высоких температур – описывается фундаментальным уравнением для энергии Гиббса.

Уравнения состояния воды определяются в областях 1, 1_2 и 3 p - T диаграммы. Область 1_2 это часть области 2, примыкающая к области 1, где вода может находиться в метастабильном, перегретом состоянии.

Уравнения состояния водяного пара определяются в областях 2, 2_1, 3 и 5 p - T диаграммы. Область 2_1 представляет собой часть области 1, примыкающей к области 2, в которой пар находится в метастабильном, переохлажденном состоянии.

Для большинства промышленных расчетов в однофазных областях воды и водяного пара свойства термодинамических функций зависят от входных параметров давления и температуры. Для областей 1 и 2 более чем 30 % всех термодинамических параметров вычисляется в зависимости от давления и температуры. Но для некоторых математических моделей лучше использовать обратные функции в этих областях, например, в зависимости от давления и энтальпии. Использование таких функций значительно сокращает время вычисления по сравнению с использованием итерационных методов.

Программная реализация

Программная реализация выполнена на основе структуры с привязкой к конкретному веществу (вода и/или водяной пар). Входными параметрами являются (p , T) или (p , h) и номер идентификатора для вычисления требуемой величины. В качестве выходного параметра является рассчитанное значение требуемой величины и ее производных. Часть функций требует вычисление вспомогательных величин. Например, входными параметрами являются (p , h), а требуемая величина определена от (p , T), поэтому сначала вычисляется T (p , h), а затем уже рассчитывается значение требуемой величины. Так же в программном блоке основные счетные области делятся на подобласти, в каждой из которых расчет происходит по уникальным полиномам. Для правильного определения счетной области определения необходимо постоянно определять границы областей и подобластей. Полиномы представляют собой многочлены до 50 слагаемых, показатели степени у слага-

емых изменяются от -17 до 58 , что требует значительных вычислительных затрат и приводит к серьезному увеличению календарного времени счета задач.

Верификация

Верификация реализованного программного блока проводилась в несколько этапов:

1. Контрольные точки для каждой области определения основных и обратных функций (полное совпадение, девять значащих цифр).

2. Табличные данные.

3. Качественное сравнение изобар при значении давления (0,05; 0,5; 5; 22,064; 50 МПа).

4. Задача с аналитическим решением. Турбулентное течение водяного теплоносителя в тройниковом соединении труб (однофазная модель).

5. Сравнение с экспериментальными данными. Задача о конденсации пара в недогретой воде (многофазная модель).

6. Демонстрационная задача о кипении в участке кольцевого канала (многофазная модель).

Тестирование реализованного авторами программного блока расчета свойств воды и водяного пара стандарта IAPWS-IF97 проведено на основе табличных данных, взятых из [3], [4]. По результатам тестирования достигнуто полное совпадение в контрольных точках из [3] для каждой из областей основных и обратных функций, при этом контрольные значения содержали 9 значащих цифр. Таблицы теплофизических свойств воды и водяного пара из [3], [4] содержат величины с точностью 4–5 значащих цифр, что при полном совпадении с рассчитанными величинами обеспечивает относительную точность не хуже 0,09 %.

Сравнение с табличными данными проведено в различных диапазонах давлений и температур [3]: область насыщения (линия насыщения) воды и водяного пара, где $p \in [0,1 \text{ МПа}; 22,064 \text{ МПа}]$ и $T = T_s(p)$; стабильная область недогретой воды, где $p \in [0,01 \text{ МПа}; 22 \text{ МПа}]$ и $T \in [T_s(p) - 10 \text{ К}; T_s(p) \text{ К}]$; стабильная область перегретого пара, где $p \in [0,01 \text{ МПа}; 22 \text{ МПа}]$ и $T \in [T_s(p) \text{ К}; T_s(p) + 10 \text{ К}]$.

Максимальная относительная погрешность термодинамических величин от табличных данных представлена в табл. 3.

Таблица 3

Максимальная относительная погрешность термодинамических величин

	f_{AVER_ERROR} вода	f_{AVER_ERROR} пар
T_S	9,00679E-04	9,00679E-04
ρ	1,77217E-02	2,25292E-03
h	3,00617E-03	1,17569E-02
c_P	1,47594E-03	1,37209E-03
k_P	6,00824E-03	1,06425E-02
μ	1,28582E-02	9,77879E-03
σ	6,70415E-04	–

Качественное сравнение изобар. На рис. 2 представлены изобары удельной энтальпии, на рис. 3 – изо-

бары динамической вязкости [3]. На рис. 2, а и рис. 3, а изображены изобары, построенные по результатам реализованной формуляции IAPWS-IF97, на рис. 2, б и рис. 3, б – изобары из источника [3].

Из рис. 2 и рис. 3 видно, что рассмотренные термодинамические величины в области насыщения имеют форму в виде колокола. Для того, чтобы показать переход через кривую насыщения были рассмотрены несколько изобар при различном давлении: три изобары 1, 2, 3 при значении давления до критического (0,05; 0,5; 5 МПа), одну изобару при критическом давлении 22,064 МПа и одну изобару выше критического давления 50 МПа. Как видно из рис. 2 и рис. 3, в результате фазового перехода вода–пар или пар–вода значения термодинамических величин скачкообразно изменяются, так как существует точная граница раздела фаз в области докритических значений давления и температуры. В области надкритических значений давления и температуры профиль значений термодинамических величин имеет пологий характер, так как точной границы раздела фаз не существует.

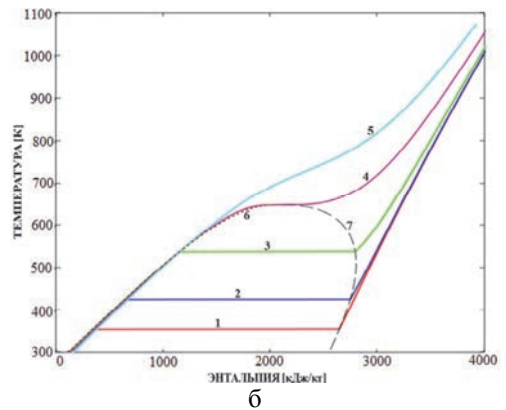
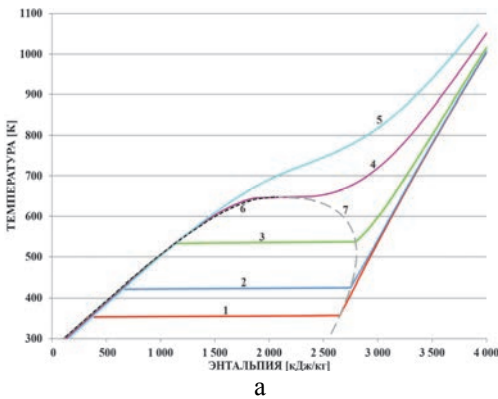


Рис. 2. Качественное сравнение изобар удельной энтальпии: а – IAPWS-IF97; б – из источника [3]: 1 – 0,05Мпа; 2 – 0,5 Мпа; 3 – 5 Мпа; 4 – 22,064 Мпа; 5 – 50 Мпа; 6 – вода насыщенная; 7 – пар насыщенный

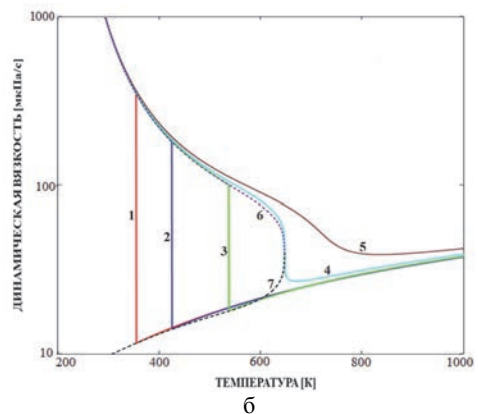
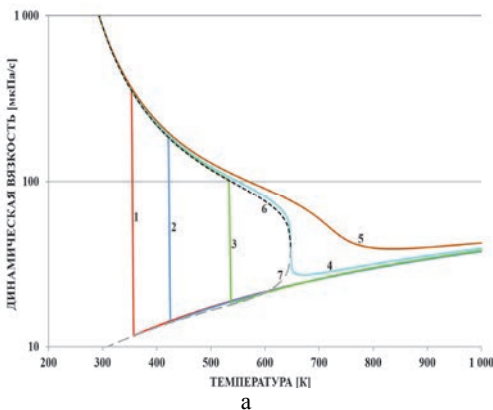


Рис. 3. Качественное сравнение изобар динамической вязкости: а – IAPWS-IF97; б – из источника [3]: 1 – 0,05Мпа; 2 – 0,5 Мпа; 3 – 5 Мпа; 4 – 22,064 Мпа; 5 – 50 Мпа; 6 – вода насыщенная; 7 – пар насыщенный

Задача с аналитическим решением. Турбулентное течение водяного теплоносителя в тройниковом соединении труб (однофазная модель). Рассматривается модельная задача по расчету турбулентного течения водяного теплоносителя в тройниковом соединении труб.

Моделируемое тройниковое соединение представляет собой квадратный канал со стороной 0,1 м с врезанным патрубком аналогичного сечения. Длины входных участков – по 0,2 м, длина выходного участка – 6 м. Геометрия представлена на рис. 4.

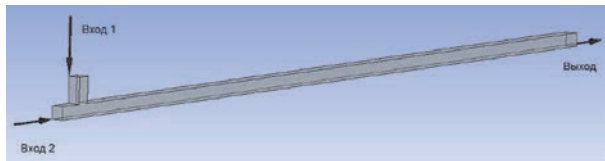


Рис. 4. Геометрия тройникового соединения

Система находится под давлением 16 МПа. На вход в канал и патрубок подаются два потока водяного теплоносителя с одинаковым массовым расходом 1,0 кг/с и различными температурами: температура потока на входе в канал составляет $T_1=603$ К, на входе в патрубок – $T_2=573$ К (граничные условия MASS FLOW). На выходе задается нулевое избыточное давление (граничное условие PRESSURE). Внешние стенки моделируются как адиабатические жесткие стенки без проскальзывания (граничное условие WALL NO SLIP).

Расчет выполнен на блочно-структурированной сетке 24500 ячеек в однофазной постановке в стационарном режиме с моделью турбулентности SST с автоматическим определением зоны пограничного слоя. Было задано значение турбулентного числа Прандтля $Pr_t=0,05$. Уравнение энергии решается относительно температуры. Теплофизические свойства воды вычислялись по формуляции IAPWS-IF97.

В силу равенства потоков на обоих входах температуру смешанного потока на выходе можно определить из закона сохранения энергии по среднему значению энергий входных потоков. Согласно [3], энтальпии входных потоков, соответствующие заданным температурам и давлению, равны 1514,705 кДж/кг и 1336,384 кДж/кг соответственно. Среднее значение энтальпии составляет 1425,545 кДж/кг. Температура воды при такой энтальпии и давлении 16 МПа составляет 588,774 К.

В расчете достигнута сходимость по невязкам до 10^{-6} за 438 итераций. Получаемая в результате расчета температура потока на выходе составляет 588,449 К, что отличается от полученного выше точного значения на 0,049 %. В процессе моделирования вода находилась в области недогретой воды.

На рис. 5 приведено поле температуры на момент завершения расчета.



Рис. 5. Распределение поля температуры воды, К

Сравнение с экспериментальными данными. Задача о конденсации пара в недогретой воде (многофазная модель). В следующей задаче моделируется конденсация пузырьков пара в воде [5]. Система представляет собой вертикальный кольцевой канал высотой 0,5 м, рис. 6.

Для расчетов была построена пространственная сетка, содержащая 70400 ячеек. На рис. 6, а приведена геометрия задачи, на рис. 6, б – пространственная сетка.

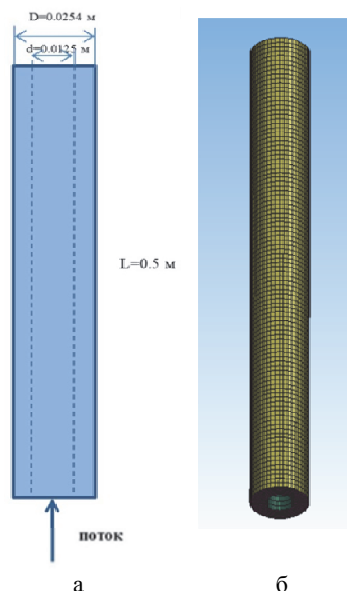


Рис. 6. Вертикальный кольцевой канал: а – геометрия задачи, б – пространственная сетка

Моделировалась стационарная задача до 1000 итераций. Учитывалось влияние гравитации, $k-\omega$ SST модель турбулентности для многофазных течений в приближении несущей фазы, пристеночная функция high $y+$, интенсивность турбулентного перемешивания 5 %, длина турбулентного перемешивания $6,45 \cdot 10^{-3}$ м, модель межфазного трения Шиллера-Наумана, модель межфазного теплообмена Ранца-Маршалла, модель межфазного массообмена Ли. Моделируемые пузырьки пара имеют постоянный диаметр $d = 10^{-4}$ м. Теплофизические свойства воды и водяного пара вычислялись по формуляции IAPWS-IF97. Входные параметры задачи приведены ниже в табл. 4.

Таблица 4

Входные параметры задачи

Массовый поток на входе, кг/м ² ·с	Температура фаз на входе, К	Температура насыщения, К	Объемная концентрация пара на входе	Давление на выходе, МПа
205,5	371,7600	376,5554	0,3	0,1096

На рис. 7 приведен график распределения объемной концентрации пара вдоль вертикальной линии, прилегающей к внутренней стенке канала. Следует отметить, что для данной постановки результат моделирования хорошо согласуется с экспериментальными данными. Также в результате расчета выяснилось, что водяной пар находился в двух областях: метастабильная область водяного пара и область перегретого водяного пара; вода – в области недогретой воды.

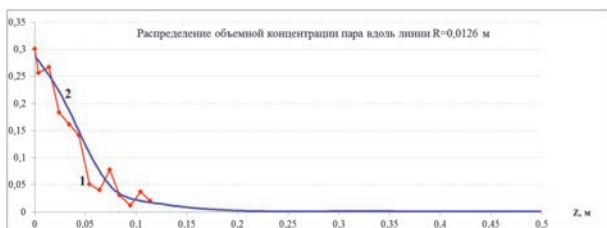


Рис. 7. Объемная концентрация пара около внутренней стенки: 1 – эксперимент, 2 – ЛОГОС

Демонстрационная задача о кипении в участке кольцевого канала (многофазная модель). Рассматривается задача о течении воды в кольцевом канале с подогреваемой внутренней стенкой. В кольцевой цилиндрический канал входит поток воды со скоростью 0,474 м/с и температурой 372 К. Внутренняя стенка канала имеет температуру 400 К, следовательно, вода при прохождении сквозь канал подогревается и частично переходит в пар.

Геометрия и входные параметры задачи представлена на рис. 8.

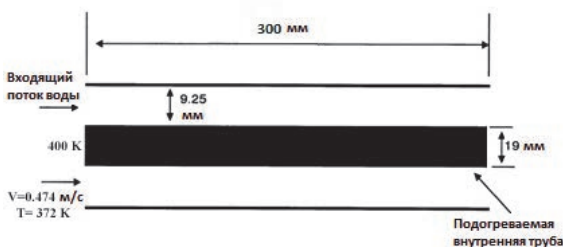


Рис. 8. Геометрия задачи

Для определения свойств воды и водяного пара использовалась модель формуляции IAPWS-IF97. Моделировалась стационарная задача до 1000 итераций. Использовалась k- ω SST модель турбулентности для многофазных течений в приближении несущей фазы, пристеночная функция all y+, интенсивность турбулентного перемешивания 5 %, длина турбулентного перемешивания 0,001 м, модель межфазного трения Шиллера-Наумана, модель межфазного теплообмена Ранца-Маршалла, модель межфазного массообмена Ли. Моделируемые пузырьки пара имеют постоянный диаметр $d = 10^{-5}$ м.

В виду симметричности геометрии расчет проводится на секторе в 3 градуса. Расчет выполнен на блочной-структурированной сетке, состоящей из 1218 ячеек.

Пространственное распределение объемной доли водяного пара, полученного в результате процесса кипения, представлено на рис. 9 в момент завершения расчета.



Рис. 9. Пространственное распределение объемной доли водяного пара

Максимальное значение объемной доли водяного пара, образовавшегося в результате процесса кипения, на выходе из участка кольцевого канала составило 0,6736.

В процессе расчета вода находилась в области недогретой воды, водяной пар – в области перегретого пара.

Производительность. Использование формуляции IAPWS-IF97 значительно повышает точность вычисления значений термодинамических функций воды и водяного пара по сравнению с результатами упрощенных моделей (идеальный газ, несжимаемая жидкость), но в тот же момент доля времени вычисления термодинамических значений возрастает до 90% от общего времени расчетного моделирования. Это связано, прежде всего с большой вычислительной нагрузкой, продиктованной сложностью расчетных формул и алгоритмов, используемых в данной формуляции.

Для снижения вычислительной нагрузки и ускорения счета авторами реализована возможность использования таблиц предвычисленных значений термодинамических функций. Перед началом расчета задачи формируются таблицы термодинамических величин с использованием функций реализованного блока в заданном диапазоне и шаге дискретизации. В дальнейшем до момента окончания расчета значения термодинамических функций интерполируются (билинейная интерполяция) по предвычисленным зна-

чениям. Точность вычислений при использовании сгенерированных таблиц зависит прежде всего от степени дискретизации по пространству. Сравнение временных характеристик моделирования задач (по вышеописанным постановкам) с задачами, в которых значения термодинамических функций воды и водяного пара интерполировались по предвычисленным значениям, представлено ниже в табл. 5.

Таблица 5

Временные характеристики использования сгенерированных таблиц

Возможность вычисления термодинамических свойств воды и водяного пара с использованием стандарта IAPWS-IF97			
	Функция в точке, сек	Интерполяция по табличным значениям, сек	Ускорение, раз
Смешение потоков в тройнике	798	132	6,1
Конденсация пара в недогретой воде	12004	2224	5,4
Кипение в кольцевом канале	361	45	8

В результате использования таблиц предвычисленных значений термодинамических функций с интерполированием, значение температуры потока воды на выходе из тройника составляет 588,449 К, что совпадает с результатом счета с использованием функции в точке. Относительная погрешность от точного решения составляет 0,049 %.

Для задачи кипения в кольцевом канале с использованием таблиц предвычисленных значений термодинамических функций с интерполированием максимальное значение объемной доли водяного пара, образовавшегося в результате процесса кипения, на выходе из участка кольцевого канала составило 0,6787. Относительная погрешность составляет 0,7 %.

Ускорение от использования в процессе моделирования таблиц предвычисленных значений термодинамических функций с интерполяцией относительно обращения в программный блок, как в функцию в точке, составило от 5 до 8 раз.

Заключение

В результате выполнения работ в рамках пакета программ ЛОГОС реализован блок расчета теплофизических свойств воды и водяного пара, проведено его тестирование и проверена работоспособность для расчета прикладных задач.

Реализованный блок предназначен для расчета теплофизических свойств воды и водяного пара и

позволяет определять требуемые величины по известным давлению и температуре или давлению и энтальпии, а также производные этих величин по своим аргументам. Библиотека реализована на базе уравнений состояний, принятых Международной Ассоциацией по Свойствам Воды и Водяного Пара (IAPWS-IF97). Это обусловлено одним из требований моделирования ОИАЭ и в первую очередь это касается проектов экспортных энергоблоков АЭС. Применение разработанной библиотеки позволит придерживаться принятых стандартов для численного моделирования как однофазных, так и двухфазных течений. Обеспечено задание параметров расчетной модели, необходимых для функционирования библиотеки, в графическом интерфейсе препроцессора ЛОГОС ПРЕПОСТ.

Тестирование библиотеки проведено на базе сравнения с табличными значениями, взятыми из открытых источников. Проверка работоспособности библиотеки выполнена на основе решения ряда прикладных задач: со смешением потоков в тройнике, задаче о конденсации водяного пара в недогретой воде и задаче о кипении в кольцевом канале.

Работа выполнена в рамках научной программы Национального центра физики и математики по направлению «Математическое моделирование на супер-ЭВМ экса- и зеттафлопсной производительности».

Список литературы

1. Козелков А. С., Дерюгин Ю. Н., Зеленский Д. К., Полищук С. Н., Лашкин С. В., Жучков Р. Н., Глазнов В. А., Яцевич С. В., Курулин В. В. Многофункциональный пакет программ «Логос»: Физико-математические модели расчета задач аэро-, гидродинамики и теплопереноса. Препринт № 111. Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2013.
2. IAPWS, R7-97 (2012), Revised Release on the IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam (The revision only relates to the extension of region 5 to 50 MPa) (August 2007). (This is a revision of the 1997 release, which replaced the corresponding release of 1967). – URL: <http://www.iapws.org>.
3. Wagner Wolfgang, Kretschmar Hans-Joachim. International Steam Tables. Properties of Water and Steam Based on the Industrial Formulation IAPWS-IF97, Third Edition. Springer, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2019.
4. Александров А. А., Григорьев Б. А. Таблицы теплофизических свойств воды и водяного пара. М.: Издательство МЭИ, 1999.
5. Zeitoun O., Shoukri M., Chatoorgonn V. Measurement of interfacial area concentration in subcooled liquid-vapor flow // Nuclear Engineering and Design. 1994. N 152. P. 243–255.