TECHNISCHE UNIVERSITÄT

TUHH

HAMBURG — HARBURG

Arbeitsbereich Energietechnik

Prof. Dr.-Ing. J. Buxmann

Kleine Studienarbeit

Untersuchung des Programmsystems ASPEN auf seine Einsatzfähigkeit zur Berechnung energietechnischer Prozesse

Autor: cand. ing. Oliver Czygan

Betreuer: Dipl.-Ing. Georg Mühlthaler

Technische Universität Hamburg - Harburg
Arbeitsbereich Energietechnik
Prof. Dr.-Ing. J. Buxmann

Herrn cand.-ing. Oliver Czygan

Matrikelnummer: 2492

Aufgabenstellung für eine kleine Studienarbeit

Thema:
Untersuchung des Programmsystems ASPEN auf seine Einsatzfähigkeit zur Berechnung energietechnischer Prozesse

Das Programmsystem ASPEN findet im allgemeinen Einsatz bei der statischen Simulation verfahrenstechnischer Prozesse. Es ist modular aufgebaut und löst das Gleichungssystem, das die einzelnen Komponenten und ihre Verschaltung beschreibt, nach einem sequentiellen Algorithmus. Es verfügt neben einer großen Anzahl verfahrenstechnischer Komponenten (z. B. Rektifizierer) auch über die Beschreibung einiger in der Energietechnik eingesetzter Bauteile wie Pumpe und Wärmeübertrager.
Im Rahmen der Arbeit soll überprüft werden, ob ASPEN auch zur Berechnung energietechnischer Kreisprozesse geeignet ist. Es gilt insbesondere zu untersuchen,

a) wie gut zusätzliche Komponenten, die in ASPEN nicht vorhanden sind (z.B. Gasturbine, Abhitzedampferzeuger), über Fortran-Routinen angebunden werden können,

b) inwieweit die vorhandene graphische Oberfläche auch zur Programmierung und Modellierung dieser hinzuzufügenden Komponenten verwendbar und geeignet ist.

Bei Kombikraftwerken sind die einzelnen Komponenten zu einem stark vermaschten Netz verknüpft. Deshalb ist ASPEN zusätzlich daraufhin zu analysieren, ob sein sequentieller Berechnungsalgorithmus in der Lage ist, stabile Lösungen zu finden. Hierzu ist der Beispielfall einer einfachen Wärmekreislaufschaltung näher zu betrachten.

Hamburg, den

Prof. Dr.-Ing. J. Buxmann Dipl.-Ing. G. Mühlthaler

Ich versichere, diese Arbeit im Rahmen der am Arbeitsbereich üblichen Betreuung selbständig angefertigt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt zu haben. Diese Arbeit ist nach bestem Wissen erstellt worden; für den Inhalt kann jedoch keine Gewähr übernommen werden.

Hamburg, im August 1995

Inhaltsverzeichnis

0 Formelzeichen und Indizes 2
- 0.1 Formelzeichen . . . 2
- 0.2 Indizes . . . 3
- 0.3 Notationskonventionen . . . 3

1 Einleitung 4

2 Einführung in ASPEN PLUS 5

3 Ein- und Ausgabe unter ASPEN PLUS 7
- 3.1 Beispiel für eine ASPEN-Eingabedatei . . . 7
- 3.2 Beispiel für eine ASPEN-Ausgabedatei . . . 9

4 Berechnungsgang und Konvergenzverhalten 17
- 4.1 Beeinflussung von Berechnungsreihenfolge und -algorithmus . . . 17
- 4.2 Startwertvorgabe . . . 21
- 4.3 Vorgabe von Ausgangsgrößen . . . 23
- 4.4 Geschlossener Kreislauf . . . 24
- 4.5 Vermaschtes System . . . 28
  - 4.5.1 Verzweigung . . . 28
  - 4.5.2 Vereinigung . . . 29
  - 4.5.3 Vermaschtes System einfachster Art . . . 29

5 Fortran-Implikation 34
- 5.1 Fortran-Unterprogramme . . . 34
- 5.2 Fortran-Blocks . . . 44

6 Weitere ASPEN-Funktionen 47
- 6.1 Case-Study . . . 47
- 6.2 Sensitivity . . . 50
- 6.3 Optimization . . . 54
- 6.4 Interaktive Simulation . . . 58
- 6.5 Stoffwerte und Table Generation System . . . 59

7 ModelManager 63

8 Zusammenfassung und Ausblick 66

A Anhang 67
- A.1 Literaturverzeichnis . . . 67
- A.2 Abbildungsverzeichnis . . . 68
- A.3 Tabellenverzeichnis . . . 69

0 Formelzeichen und Indizes

0.1 Formelzeichen

Symbol	Einheit	Bedeutung
AVG MW	kg/kmol	Molekulargewicht
c_p	kJ/kg K	massenspezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
c_v	kJ/kg K	massenspezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen
h	kJ/kg	massenspezifische Enthalpie
k	W/m^2 K	Wärmedurchgangskoeffizient
LFRAC	–	molarer Flüssigkeitsgehalt
$\dot{m}$	kg/s	Massenstrom
n	–	Polytropenexponent
p	bar; Pa	Druck
PRES	bar; Pa	Druck
$\dot{Q}$	kW	Wärmestrom
R	kJ/kg K	(individuelle) Gaskonstante
s	kJ/kg K	massenspezifische Entropie
T	°C; K	Temperatur
TEMP	°C; K	Temperatur
VFRAC	–	molarer Dampfgehalt
w	kJ/kg	massenspezifische Arbeit
Δ	–	Differenz
η	–	Wirkungsgrad
κ	–	Adiabatenexponent
$\Pi = \frac{p_\mathrm{A}}{p_\mathrm{E}}$	–	Druckverhältnis
ϱ	kg/m^3	Dichte

0.2 Indizes

Symbol	Bedeutung
A	Austritt
E	Eintritt
extr	extremal
Kond	Kondensator
t	technisch
T	Turbine
U	Umgebungszustand
0	Bezugszustand

0.3 Notationskonventionen

Um die Ausarbeitungen möglichst übersichtlich zu gestalten, sind hervorzuhebende Textpassagen gemäß folgenden Konventionen dargestellt:

- Vom Anwender auf Betriebssystemebene durchzuführende Eingaben werden herausgestellt durch Verwendung von Schreibmaschinenschrift in halben Anführungsstrichen: ‚`aspen name1 name2`‘.
- Programmlistings werden (in etwas kleinerer Schriftgröße als der Normaltext) durch Schreibmaschinenschrift und meist auch vorangestellte Zeilennummern gekennzeichnet:
  `8 OUT-UNITS SI PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C`.
- Dateinamen werden durch Umschalten auf Schreibmaschinenschrift dargestellt:
  `aspen.help`.
- ASPEN-Befehle werden im normalen Text — ebenso wie in der Eingabedatei selbst — in Großbuchstaben geschrieben: PROPERTIES.
  ASPEN-Code wird, wenn die Eingabe selbst beschrieben wird, zusätzlich in halbe Anführungszeichen eingeschlossen: ‚NPHASE=2‘.
- Englische ASPEN-Fachbegriffe, die aus dem Handbuch [3] bzw. [11] übernommen wurden, werden durch Kursivschrift hervorgehoben: *Tear Stream Convergence*.
- ModelManager-Menü-Bezeichnungen werden ebenfalls durch Kursivstellung hervorgehoben: *Place* Menü

1 Einleitung

Zur optimalen Auslegung oder auch genaueren Analyse einer energietechnischen Anlage ist der Einsatz von EDV-Programmen unerläßlich.
Es stehen zwei grundsätzlich verschiedene Programmtypen zur Verfügung:

- Programme rechnen simultan, sie lösen komplexe Gleichungssysteme für das zu simulierende System in seiner Gesamtheit, oder

- Programme gehen sequentiell vor, sie durchlaufen also nach bestimmter Reihenfolge für jeden zu simulierenden Block ein Unterprogramm.

In den folgenden Ausführungen soll das sequentiell rechnende, üblicherweise in der Verfahrenstechnik verwendete Simulationsprogramm ASPEN PLUS in der Version 8.5-4 hinsichtlich seiner Anwendbarkeit für energietechnische Systeme untersucht werden.

Nach einer kurzen Einführung wird anhand eines Beispiels die allgemeine Struktur einer ASPEN-Eingabedatei und der dazugehörigen Ausgabedatei dargestellt.
Nach einer Analyse, inwiefern die Konvergenz für die in der Energietechnik häufig in sich geschlossenen bzw. vermaschten Systeme gewährleistet ist, wird erläutert, wie zusätzliche Komponenten in das auf verfahrenstechnische Systeme abgestimmte Programm über Fortran-Routinen eingebunden werden können.
Nach Darstellung weiterer nützlicher Funktionen unter ASPEN PLUS soll zuletzt die Benutzeroberfläche ModelManager 3.3-4 und die damit verbundene grafische Ausgabemöglichkeit von Systemen vorgestellt werden.

Das Simulationsprogramm ASPEN PLUS kann grundsätzlich auch von dem nicht so versierten Anwender benutzt werden, da es für ein zu simulierendes System beispielsweise die Startwerte und auch eine Berechnungsreihenfolge generiert (diese aber grundsätzlich auch beeinflußt werden können), und auch sonst viele zweckmäßig voreingestellte Vorgabewerte zur Verfügung stellt.

2 Einführung in ASPEN PLUS

ASPEN PLUS ist ein im wesentlichen für die Beschreibung stationärer chemischer und petrochemischer Prozesse verwendetes Simulationsprogramm. Es beinhaltet Modelle für

- Mischer und Trenner,
- Wärmeaustauscher und Gas-Flüssigkeits-Trenner,
- Destillation und Destillierkolonnen,
- Fraktionierer,
- chemische Reaktoren,
- Pumpen, Verdichter, Turbinen und
- Strommanipulatoren.

Hiervon sind sicherlich auch einige Modelle für zu simulierende Systeme der Energietechnik relevant. Beispielsweise ist der durch das ASPEN-Modell HEATX simulierte Wärmeaustauscher ein auch in Energieanlagen häufig eingesetztes Bauelement. Unter ASPEN können hierfür Vorgaben über Temperaturen, Temperaturdifferenzen, zu übertragende Wärmeleistungen, Wärmedurchgangskoeffizienten für die verschiedenen Phasenzustände, Wärmeübertragungsflächen, Dampfgehalte, Druckverluste etc. gemacht werden. Neben Angaben über die Strömungsrichtungen der Stoffströme zueinander (Gegenstrom ↔ Gleichstrom) können für die heiße und die kalte Seite Temperaturverläufe über den Weg tabellarisch und grafisch dargestellt werden.

Zusätzliche, den eigenen Ansprüchen genügende Modelle können, wie in Kapitel 5.1 näher erläutert, mit Hilfe von Fortran-Unterprogrammen eingebunden werden.

Desweiteren bietet ASPEN PLUS einige Besonderheiten:

- Behandlung von Feststoffen,
- Durchführung von Kostenrechnungen und Wirtschaftlichkeitsbetrachtungen,
- Vorgabe von Stoffeigenschaften und
- Simulation mit elektrolytischen Systemen.

Hierauf soll im Rahmen dieser Arbeit aber nicht näher eingegangen werden.

Simulationen können grundsätzlich auf zwei Arten durchgeführt werden:

- Es wird mit einem Editor eine Eingabedatei `name1.inp` geschrieben, wobei unter **ASPEN** der Befehl ‚`aspen name1 name2`‘[1] eine Ausgabedatei `name2.out` bzw. `name2.his` und `name2.rep` erzeugt, oder
- die ASPEN-Eingabedatei wird mit der Benutzeroberfläche **ModelManager** erzeugt, und von dort aus wird mit dem Menüpunkt *Run* die Ausgabedatei generiert.

[1] Optionen können der Datei `aspen.help` bzw. [6] entnommen werden

Als etwas problematisch erwies sich, daß ASPEN bei Berechnungen mit Stoffströmen, die Wasser enthalten, bezogen auf unsere üblichen Konventionen, nämlich den Enthalpie- und den Entropienullpunkt auf den Wassertripelpunkt zu setzen, eine Enthalpie- und Entropieverschiebung durchführt.

Unter ASPEN besitzt Wasser im Tripelpunkt etwa die Enthalpie $h = -15982 \, \frac{\mathrm{kJ}}{\mathrm{kg}}$ und die Entropie $s = -9,425 \, \frac{\mathrm{kJ}}{\mathrm{kgK}}$ [2]. Diese Definition hat aber keinen Einfluß auf Enthalpie- bzw. Entropiedifferenzen, die ja im allgemeinen von größerem Interesse sind als Absolutangaben.

[2] gemittelt aus einem Vergleich der entsprechenden Werte von mehreren verschiedenen Wasser/Dampf-Zuständen

3 Ein- und Ausgabe unter ASPEN PLUS

Bei einer ASPEN-Simulation wird aus einer Eingabedatei eine Ausgabedatei erzeugt. An je einem Beispiel für solche Dateien sollen im folgenden deren grundlegende Strukturen erläutert werden.

3.1 Beispiel für eine ASPEN-Eingabedatei

Am Beispiel eines in Kombikraftwerken verwendeten Abhitzekessels (Schaltschema siehe Abb. 1) sei das allgemeine Aussehen einer ASPEN-Eingabedatei dargestellt:

```
TITLE "ABHITZEKESSEL"

DESCRIPTION "Abhitzekessel zur Darstellung der allgemeinen
        Struktur von ASPEN-Eingabedateien"

IN-UNITS SI

OUT-UNITS SI PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C


DEF-STREAMS CONVEN ALL

DIAGNOSTICS
    HISTORY CONV-LEVEL=8

DATABANKS ASPENPCD

PROP-SOURCES ASPENPCD

COMPONENTS
    WASSER H2O WASSER /
    SAUER O2 SAUER /
    STICK N2 STICK

PROPERTIES SYSOP12

FLOWSHEET
    BLOCK ECO IN=S3015 S2005 OUT=S3020 S2010
    BLOCK UEBERHIT IN=S3005 S2025 OUT=S3010 S2030
    BLOCK TROMMEL1 IN=S2010 S2020 OUT=S1
    BLOCK TROMMEL2 IN=S1 OUT=S2025 S2015
    BLOCK VERDAMPF IN=S3010 S2015 OUT=S3015 S2020

STREAM S2005
    SUBSTREAM MIXED TEMP=104.99 <C> PRES=80 <BAR>  &
        MASS-FLOW=7.358
    MASS-FRAC WASSER 1

STREAM S3005
```

```
40      SUBSTREAM MIXED TEMP=550 <C> PRES=1 <BAR> MASS-FLOW=60  &
41          NPHASE=1
42      MASS-FRAC WASSER 0.0060 / SAUER 0.2300 / STICK 0.7640
43
44 BLOCK TROMMEL1 MIXER
45      PARAM PRES=80 <BAR>
46      PROPERTIES SYSOP12
47
48  BLOCK TROMMEL2 FLASH2
49      PARAM PRES=80 <BAR> DUTY=0 <KW>
50      PROPERTIES SYSOP12
51
52  BLOCK ECO HEATX
53      PARAM AREA=138.59
54      FEEDS HOT=S3015 COLD=S2005
55      PRODUCTS HOT=S3020 COLD=S2010
56      PROPERTIES SYSOP0 / SYSOP12
57      FLASH-SPECS S3020 NPHASE=1
58
59  BLOCK UEBERHIT HEATX
60      PARAM AREA=61.41
61      FEEDS HOT=S3005 COLD=S2025
62      PRODUCTS HOT=S3010 COLD=S2030
63      PROPERTIES SYSOP0 / SYSOP12
64      FLASH-SPECS S3010 NPHASE=1
65
66  BLOCK VERDAMPF HEATX
67      PARAM VFRAC-COLD=0.218
68      FEEDS HOT=S3010 COLD=S2015
69      PRODUCTS HOT=S3015 COLD=S2020
70      PROPERTIES SYSOP0 / SYSOP12
71      FLASH-SPECS S3015 NPHASE=1 MAXIT=100
72      FLASH-SPECS S2020 NPHASE=2 MAXIT=100
73
74  CONVERGENCE CONV1 WEGSTEIN
75      BLOCK-OPTION CONV-LEVEL=3 TERM-LEVEL=3
76      TEAR S1 0.000001
77      PARAM MAXIT=500
```

Nach Titelangabe und näheren Beschreibungen (Zeile 1 bis 4) des zu simulierenden Prozesses können Vorgaben über die zu gebrauchenden Maßeinheiten gemacht werden (Zeile 6 bis 8)[3].
Unter DEF-STREAMS wird angegeben, ob im zu simulierenden System zur Verbindung der einzelnen Blöcke nur „konventionelle“ Stoffströme zu verwenden sind (Zeile 11)[4], oder ob diese beispielsweise auch Feststoffe enthalten sollen.
In dieser Beispieldatei wird mit einem (optionalen) DIAGNOSTICS-Absatz eine Vorgabe darüber gemacht, wie ausführlich in der ASPEN-Ausgabedatei Themengebiete wie z. B. Konvergenz behandelt werden sollen (Zeile 13 und 14)[5].

[3] Syntax: [3], Kapitel 3
[4] Syntax: [3], Kapitel 8
[5] Syntax: [3], Seite 25-5f.

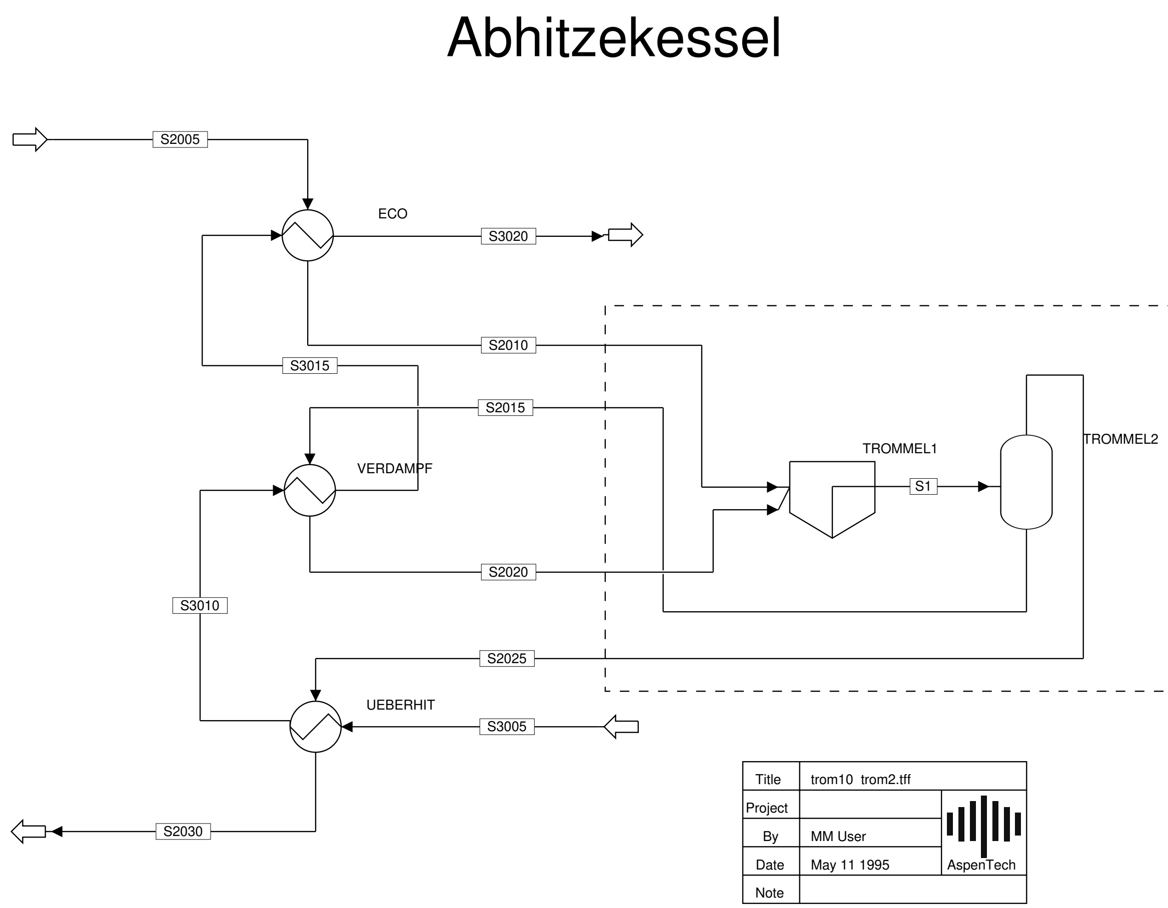
Nach Angabe zu benutzender Datenbanken (Zeile 16 bis 18)[6] sind im COMPONENTS-Abschnitt die chemischen Einzelkomponenten zu bezeichnen, die in der Simulation verwendet werden (Zeile 20 bis 23)[7].
Unter PROPERTIES wird festgelegt, nach welchen Methoden und Modellen die einzelnen Stoffwerte berechnet werden sollen (Zeile 25)[8]. Man ist hierbei nicht auf die bei ASPEN standardmäßig vorhandenen kompletten „Berechnungssätze" angewiesen, sondern es ist auch möglich, wie in [4] und [1] näher beschrieben, die einzelnen *Option Sets* zu modifizieren oder ganz neu zusammenzustellen und somit den eigenen Bedürfnissen anzupassen.
Der Zusammenhang der Einzelblöcke über die Ströme zu einem Gesamtflußbild, also die Prozeßstruktur, wird durch den FLOWSHEET-Absatz beschrieben (Zeile 27 bis 32)[9].
Im Anschluß daran werden als Vorgabegrößen die Eingangsströme (Zeile 34 bis 42)[10] und über Parameter die einzelnen Blöcke (Zeile 44 bis 72)[11] näher definiert.
In diesem Beispiel werden noch Vorgaben für den verwendeten Iterationsalgorithmus gemacht (Zeile 74 bis 77)[12], was aber nicht obligatorisch ist. Da das Schaltschema einen inneren Kreis beinhaltet, ist iterative Rechnung erforderlich.
Weitere optionale Vorgaben wären beispielsweise Absätze zur Vorgabe von Ausgangsgrößen (siehe Kapitel 4.3), zur Anfertigung von Fallstudien (siehe Kapitel 6.1) bzw. Darstellung von Abhängigkeiten einzelner Größen voneinander (siehe Kapitel 6.2) oder zur Lösung von Optimierungsproblemen (siehe Kapitel 6.3).

Um einen Vergleich mit Referenzdaten[13] durchführen zu können, wurden für einige Blockkenngrößen relativ ungewöhnlich erscheinende Werte vorgegeben. Der Einfachheit halber wurden als Wärmedurchgangskoeffizienten die von ASPEN vorgegebenen Standardwerte übernommen ($k = 850 \frac{\mathrm{W}}{\mathrm{m^2K}}$, unabhängig von Zusammensetzung, Phasenzustand, Geschwindigkeit, etc. der Stoffströme; es könnten aber auch einzelne Wärmedurchgangskoeffizienten für die verschiedenen Phasen vorgegeben werden).

3.2 Beispiel für eine ASPEN-Ausgabedatei

Eine von ASPEN erzeugte Ausgabedatei `name.out` besitzt folgenden grundsätzlichen Aufbau:
Sie setzt sich zusammen aus den beiden Dateien `name.his` (enthält Eingabewerte, Zusammensetzung des Flußdiagramms, Berechnungsgang, Fehler und Diagnosehinweise) und `name.rep` (eigentliche Ergebnisdatei).
Der Umfang der in die Datei zu schreibenden Meldungen kann vom Anwender für die einzelnen Teilgebiete System, Simulation, Stoffeigenschaften, Ströme und Konvergenz durch entsprechende Zahlenwerte festgelegt werden (siehe z. B. Beispieldatei Kapitel 3.1,

[6] Syntax: [3], Seite 5-26 bis 5-29. Parameter, auf die aus der Standarddatenbank ASPENPCD (ASPEN PLUS *P*ure *C*omponent *D*ata Bank) zugegriffen werden kann, sind in [1], Tabelle B.1 aufgelistet.
[7] Syntax: [3], Kapitel 4
[8] Syntax: [3], Kapitel 5.
[9] Syntax: [3], Kapitel 6
[10] Syntax: [3], Kapitel 7
[11] MIXER: siehe [3], S. 10-2ff; FLASH2: siehe [3], S. 11-6ff; HEATX: siehe [3], S. 11-13ff
[12] Syntax: [3], S. 20-11f
[13] Die Werte wurden freundlicherweise von Dipl.-Ing. Martin Reymann, AB Wärmekraftanlagen und Schiffsmaschinen der TU Hamburg-Harburg zur Verfügung gestellt.



Trommel													
Strom		S0	S1	S2005	S2010	S2015	S2020	S2025	S2030	S3005	S3010	S3015	S3020
Substream: MIXED													
Massenstrom	kg/s	34.541	41.899	7.358	7.358	34.541	34.541	7.358	7.358	60.000	60.000	60.000	60.000
Temperatur	C	295.00	295.00	104.99	288.72	295.00	295.00	295.00	510.16	550.00	476.77	309.26	211.56
Druck	bar	80.00	80.00	80.00	80.00	80.00	80.00	80.00	80.00	1.00	1.00	1.00	1.00
Dampfgehalt		0.000	0.175	0.000	0.000	0.000	0.218	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Enthalpie	kJ/kg	-14663.77	-14410.62	-15534.94	-14698.48	-14663.77	-14349.30	-13221.22	-12557.88	475.93	394.58	213.54	110.96
Entropie	kJ/kgK	-6.2170	-5.7714	-8.0681	-6.2784	-6.2170	-5.6635	-3.6780	-2.6676	1.2191	1.1156	0.8427	0.6499
Dichte	kg/m^3	722.35	189.72	958.27	735.83	722.35	160.97	42.50	23.58	0.42	0.46	0.59	0.71

Abbildung 1: Schaltschema Abhitzekessel

Zeile 13 und 14)[14].

Die Datei `name.rep` enthält nach erfolgreich abgeschlossener Simulation die Punkte nachstehender Gliederung:

```
                           TABLE OF CONTENTS


            RUN CONTROL SECTION...........................  1
                 RUN CONTROL INFORMATION..................  1
                 DESCRIPTION..............................  1
                 BLOCK STATUS.............................  1
            FLOWSHEET SECTION.............................  2
                 FLOWSHEET CONNECTIVITY BY STREAMS.........  2
                 FLOWSHEET CONNECTIVITY BY BLOCKS..........  2
                 CONVERGENCE STATUS SUMMARY................  2
                 CONVERGENCE BLOCK:  CONV1.................  2
                 COMPUTATIONAL SEQUENCE....................  5
                 OVERALL FLOWSHEET BALANCE.................  5
            PHYSICAL PROPERTIES SECTION....................  6
                 COMPONENTS...............................  6
            U-O-S BLOCK SECTION...........................  7
                 BLOCK:  ECO      MODEL: HEATX.............  7
                 BLOCK:  TROMMEL1 MODEL: MIXER.............  9
                 BLOCK:  TROMMEL2 MODEL: FLASH2............  9
                 BLOCK:  UEBERHIT MODEL: HEATX............. 10
                 BLOCK:  VERDAMPF MODEL: HEATX............. 12
            STREAM SECTION................................ 14
                 S1 S2005 S2010 S2015 S2020................ 14
                 S2025 S2030 S3005 S3010 S3015............. 15
                 S3020.................................... 16
```

Wegen des großen Dateiumfangs seien hier nur einige Auszüge (der Blockbericht *(Block Section)* des Verdampfers und der Strombericht *(Stream Section)*) aus der Ergebnisdatei des Beispiels aus Kapitel 3.1 wiedergegeben:

```
BLOCK:  VERDAMPF MODEL: HEATX
-----------------------------
  HOT SIDE:
  ---------
  INLET STREAM:          S3010
  OUTLET STREAM:         S3015
  PROPERTY OPTION SET:   SYSOP0    IDEAL LIQUID / IDEAL GAS

  COLD SIDE:
  ----------
  INLET STREAM:          S2015
  OUTLET STREAM:         S2020
```

[14] Syntax: [3], S. 25-5f

```
PROPERTY OPTION SET:   SYSOP12   ASME STEAM TABLE EQUATION OF STATE

                   ***  MASS AND ENERGY BALANCE  ***
                                IN              OUT        RELATIVE DIFF.
 TOTAL BALANCE
    MOLE(KMOL/SEC)           4.00770        4.00770         .000000E+00
    MASS(KG/SEC  )           94.5900        94.5900         .000000E+00
    ENTHALPY(WATT    )      -.483545E+09    -.483545E+09     .269445E-09

                       ***  INPUT DATA  ***

FLASH SPECS FOR HOT SIDE:
ONE    PHASE      FLASH   SPECIFIED PHASE IS  VAPOR
MAXIMUM NO. ITERATIONS                                  100
CONVERGENCE TOLERANCE                                     0.00010000

FLASH SPECS FOR COLD SIDE:
TWO    PHASE      FLASH
MAXIMUM NO. ITERATIONS                                  100
CONVERGENCE TOLERANCE                                     0.00010000


 COUNTERCURRENT  HEAT EXCHANGER WITH SPECIFIED VAPOR FRACTION OF COLD STRM
 VAPOR FRACTION OF COLD OUTLET STREAM                            0.21800
 HOT STREAM PRESSURE DROP (BAR     )                             0.0
 COLD STREAM PRESSURE DROP (BAR     )                            0.0

 HEAT TRANSFER COEFFICIENTS  (WATT/SQM-K      ):
 HOT STREAM PHASE     COLD STREAM PHASE
 LIQUID               LIQUID                                   850.000
 BOILING LIQUID       LIQUID                                   850.000
 VAPOR                LIQUID                                   850.000
 LIQUID               BOILING LIQUID                           850.000
 BOILING LIQUID       BOILING LIQUID                           850.000
 VAPOR                BOILING LIQUID                           850.000
 LIQUID               VAPOR                                    850.000
 BOILING LIQUID       VAPOR                                    850.000
 VAPOR                VAPOR                                    850.000

                         ***  RESULTS  ***
 HOT STREAM INLET TEMPERATURE (C   )                           476.768
 HOT STREAM OUTLET TEMPERATURE (C   )                          309.017
 COLD STREAM INLET TEMPERATURE (C   )                          295.000
 COLD STREAM OUTLET TEMPERATURE (C   )                         295.000
 EXCHANGER HEAT DUTY (WATT    )                                  0.108778+08
 HEAT TRANSFER AREA (SQM     )                                 195.484


 AREA CALCULATION RESULTS:

 SECTION  CONDITIONS    AREA                HEAT DUTY
          (HOT-COLD)    (SQM     )          (WATT    )
```

```
     1       V-B         195.484                0.108778+08

   SECTION   TEMPERATURE LEAVING SECTION
             HOT STREAM           COLD STREAM
             (C       )           (C       )
     1          309.017              295.000



        ------------------------------------------------------------
        |                                                          |
S3010   |      VAP                                                 | S3015
------> |                                                          |------>
 476.8  |                                                          | 309.0
        |                                                          |
S2020   |     BOIL                                                 | S2015
<------ |                                                          |<------
 295.0  |                                                          | 295.0
        |                                                          |
        ------------------------------------------------------------




S1 S2005 S2010 S2015 S2020
--------------------------

STREAM ID               S1         S2005      S2010      S2015      S2020
FROM :                  TROMMEL1   ----       ECO        TROMMEL2   VERDAMPF
TO   :                  TROMMEL2   ECO        TROMMEL1   VERDAMPF   TROMMEL1

SUBSTREAM: MIXED
PHASE:                  MIXED      LIQUID     LIQUID     LIQUID     MIXED
COMPONENTS: KMOL/SEC
  WASSER                 2.3285     0.4084     0.4084     1.9200     1.9200
  SAUER                  0.0        0.0        0.0        0.0        0.0
  STICK                  0.0        0.0        0.0        0.0        0.0
TOTAL FLOW:
  KMOL/SEC               2.3285     0.4084     0.4084     1.9200     1.9200
  KG/SEC                41.9480     7.3580     7.3580    34.5900    34.5900
  CUM/SEC                0.2210  7.6784-03  9.9939-03  4.7886-02     0.2148
STATE VARIABLES:
  TEMP   C             294.9996   104.9900   288.5182   294.9996   294.9996
  PRES   BAR            80.0000    80.0000    80.0000    80.0000    80.0000
  VFRAC                  0.1754     0.0        0.0        0.0        0.2180
  LFRAC                  0.8245     1.0000     1.0000     1.0000     0.7820
  SFRAC                  0.0        0.0        0.0        0.0        0.0
ENTHALPY:
  J/KMOL              -2.5961+08 -2.7986+08 -2.6481+08 -2.6417+08 -2.5850+08
  J/KG                -1.4411+07 -1.5535+07 -1.4700+07 -1.4664+07 -1.4349+07
  WATT                -6.0450+08 -1.1431+08 -1.0816+08 -5.0722+08 -4.9634+08
ENTROPY:
```

```
  J/KMOL-K           -1.0398+05 -1.4535+05 -1.1314+05 -1.1200+05 -1.0203+05
  J/KG-K             -5771.6387 -8068.0779 -6280.3960 -6217.0029 -5663.4904
DENSITY:
  KMOL/CUM              10.5352    53.1931    40.8688    40.0969     8.9355
  KG/CUM               189.7925   958.2740   736.2523   722.3461   160.9736
AVG MW                  18.0150    18.0150    18.0150    18.0150    18.0150


S2025 S2030 S3005 S3010 S3015
-----------------------------

STREAM ID               S2025      S2030      S3005      S3010      S3015
FROM :                  TROMMEL2   UEBERHIT   ----       UEBERHIT   VERDAMPF
TO   :                  UEBERHIT   ----       UEBERHIT   VERDAMPF   ECO

SUBSTREAM: MIXED
PHASE:                  VAPOR      VAPOR      VAPOR      VAPOR      VAPOR
COMPONENTS: KMOL/SEC
  WASSER                 0.4084     0.4084  1.9983-02  1.9983-02  1.9983-02
  SAUER                  0.0        0.0        0.4312     0.4312     0.4312
  STICK                  0.0        0.0        1.6363     1.6363     1.6363
TOTAL FLOW:
  KMOL/SEC               0.4084     0.4084     2.0876     2.0876     2.0876
  KG/SEC                 7.3580     7.3580    60.0000    60.0000    60.0000
  CUM/SEC                0.1731     0.3120   142.8761   130.1650   101.0481
STATE VARIABLES:
  TEMP   C             294.9996   510.1595   550.0000   476.7676   309.0167
  PRES   BAR            80.0000    80.0000     1.0000     1.0000     1.0000
  VFRAC                  1.0000     1.0000     1.0000     1.0000     1.0000
  LFRAC                  0.0        0.0        0.0        0.0        0.0
  SFRAC                  0.0        0.0        0.0        0.0        0.0
ENTHALPY:
  J/KMOL             -2.3818+08 -2.2623+08  1.3678+07  1.1340+07  6.1299+06
  J/KG               -1.3221+07 -1.2558+07  4.7593+05  3.9458+05  2.1328+05
  WATT               -9.7282+07 -9.2401+07  2.8556+07  2.3675+07  1.2797+07
ENTROPY:
  J/KMOL-K           -6.6258+04 -4.8056+04  3.5039+04  3.2065+04  2.4206+04
  J/KG-K             -3677.9548 -2667.5594  1219.1373  1115.6500   842.2193
DENSITY:
  KMOL/CUM               2.3590     1.3090  1.4611-02  1.6038-02  2.0660-02
  KG/CUM                42.4983    23.5818     0.4199     0.4609     0.5937
AVG MW                  18.0150    18.0150    28.7407    28.7407    28.7407


S3020
-----

STREAM ID               S3020
FROM :                  ECO
TO   :                  ----

SUBSTREAM: MIXED
```

```
168  PHASE:                  VAPOR
169  COMPONENTS: KMOL/SEC
170    WASSER              1.9983-02
171    SAUER                  0.4312
172    STICK                  1.6363
173  TOTAL FLOW:
174    KMOL/SEC               2.0876
175    KG/SEC                60.0000
176    CUM/SEC               84.1119
177  STATE VARIABLES:
178    TEMP   C             211.4426
179    PRES   BAR             1.0000
180    VFRAC                  1.0000
181    LFRAC                  0.0
182    SFRAC                  0.0
183  ENTHALPY:
184    J/KMOL              3.1856+06
185    J/KG                1.1084+05
186    WATT                6.6504+06
187  ENTROPY:
188    J/KMOL-K            1.8672+04
189    J/KG-K               649.6749
190  DENSITY:
191    KMOL/CUM            2.4820-02
192    KG/CUM                 0.7133
193  AVG MW                  28.7407
```

Zunächst werden für den Verdampfer die Einbindung in den Gesamtprozeß über die Stoffströme und die zu verwendenen Stoffwertberechnungsalgorithmen beschrieben (Zeile 1 bis 13). Eine Massen- und Energiebilanz um den Verdampfer nach Abschluß der Simulationsberechnungen zeigt, daß diesbezüglich für diese Systemkomponente ausreichend genaue Toleranzen eingehalten wurden (Zeile 15 bis 20). Der Rest des *Block Reports* unterteilt sich in Eingabedaten (Zeile 22 bis 50) und Ergebnisse (Zeile 52 bis 84): Im Eingabedatenteil finden sich im wesentlichen die in der ASPEN-Eingabedatei vorgegebenen Parameter des Verdampferblockes wieder.
Im Ergebnisteil werden neben den Eintritts- und Austrittstemperaturen (Zeile 53 bis 56) auch noch übertragene Wärmeleistung und die Wärmeübertragungsfläche (Zeile 57 und 58) quantifiziert. Die Gesamtfläche wird anschließend mit entsprechenden Flächen-, Wärme- und Temperaturangaben in Teilflächen unterteilt — je nach Phasenzustand der Stoffströme (Zeile 61 bis 70; hier nur ein Flächenbereich, da weder der warme noch der kalte Stoffstrom einer Phasenänderung unterliegen).
Zuletzt wird, unter Angabe der ein- und austretenden Stoffströme mit ihren zugehörigen Celsius-Temperaturen, der Wärmeaustauscher grafisch dargestellt (Zeile 74 bis 84).
Im *Stream Report* werden nun die Massenströme und Zustände aller im System auftretenden Stoffströme aufgelistet (Zeile 88 bis 193).

In diesem Beispiel wurden Daten so vorgegeben, daß sich zur Einhaltung der Bilanzen ein bestimmter Umwälzmassenstrom (S2015 bzw. S2020) einstellen muß. Hier wurde der Massenstrom $\dot{m}_{\mathrm{S2015}} = \dot{m}_{\mathrm{S2020}} = 34,59\ \frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s}}$ iterativ berechnet, der in guter Näherung mit dem Massenstrom $\dot{m}_{\mathrm{S2015}} = \dot{m}_{\mathrm{S2020}} = 35,00\ \frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s}}$ aus den vorliegenden

Referenzdaten übereinstimmt.
Eine grafische Darstellung des Massenstroms $\dot{m}_{\mathrm{S2015}}$ in Abhängigkeit von der Anzahl der durchgeführten Iterationen macht das Konvergenzverhalten erkennbar (Abb. 2).

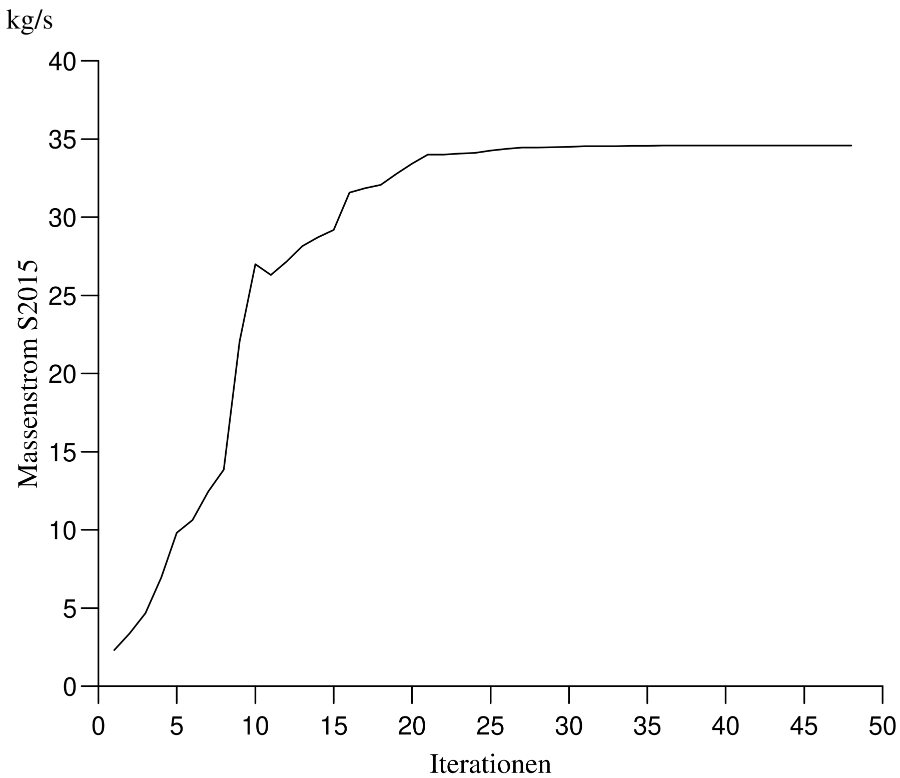


Abbildung 2: Konvergenz Umwälzmassenstrom (S2015) für Abhitzekessel

4 Berechnungsgang und Konvergenzverhalten

Unter ASPEN können verschiedene Situationen iterative Berechnungen notwendig machen:

- Innerhalb der durch Unterprogramme beschriebenen Blöcke kann bereits iterative Rechnung erforderlich sein *(Block Convergence)*,
- die Gesamtstruktur des Prozesses kann Kreise (siehe Kapitel 4.4) oder Maschen mit Vereinigungen und Verzweigungen (siehe Kapitel 4.5) enthalten, die einem einfachen Rechengang im Weg stehen *(Tear Stream Convergence)*, oder
- die in Kapitel 4.3 und 6.3 beschriebenen Optionen der Vorgabe von Ausgangsgrößen *(Design Specification Convergence)* bzw. der Lösung von Optimierungsproblemen *(Optimization Convergence)* können Iterationsrechnungen erzwingen.

Bei der Simulation iterativ zu berechnender Prozesse kann der Anwender grundsätzlich auf die von ASPEN als Standardwerte vorgegebenen Berechnungsreihenfolgen, Iterationsalgorithmen, zu konvergierenden Stoffströme und — je nach Algorithmus — weitere Konvergenzparameter[15] zurückgreifen. Grundsätzlich besteht jedoch auch die Möglichkeit, die genannten Spezifikationen vorzugeben.
„Konvergenz“ bedeutet bei ASPEN, daß für alle zu konvergierenden Variablen x (Standardvorgabe: alle Komponentenmolströme, Druck, Enthalpie) die zugelassene Toleranz tol für zwei aufeinanderfolgende Iterationswerte eingehalten wurde[16]:

$$\left|\frac{x_{n+1} - x_n}{x_n}\right| \leq tol.$$

4.1 Beeinflussung von Berechnungsreihenfolge und -algorithmus

Je nach Situation *(Block, Tear Stream, Design Specification* oder *Optimization Convergence)* hat der Anwender Möglichkeiten, auf den iterativen Rechengang Einfluß zu nehmen.
Auf die Konvergenz innerhalb eines Standardmodelles kann vom Anwender am wenigsten eingewirkt werden: Hier besteht für ihn, je nach Blockmodell, im allgemeinen nur die Möglichkeit, die maximale Iterationszahl (MAXIT) und die erforderliche Genauigkeit (TOL) vorzugeben.
Anders sieht es dagegen aus, wenn es um die Konvergenz des Gesamtprozesses geht *(Tear Stream Convergence)*. Hier hat der ASPEN-Nutzer mehr Optionen:

- Er legt Parameter für einen von ASPEN generierten Konvergenzblock fest (CONV-OPTIONS[17]). Das heißt, er bestimmt, daß, immer wenn nach einem bestimmten (von ASPEN standardmäßig verwendeten) Algorithmus iteriert wird, dies unter Vorgabe der angegebenen Parameter (z. B. Schrittweite, Abbruchkriterien o. ä., je nach

[15] Siehe hierzu: [3], Seite 20-11 bis 20-26.
[16] siehe [3], S. 20-27
[17] Syntax: [3], S. 20-3ff

Berechnungsmethode) durchzuführen ist. Hier kann auch der zu verwendende Berechnungsalgorithmus, die zulässige Fehlertoleranz, etc. vorgegeben werden.
In dem folgenden Beispiel soll für den Wegstein-Algorithmus (genaueres hierzu: siehe S. 19) die Maximalzahl der Iterationsschritte festgelegt werden:

```
CONV-OPTIONS
    WEGSTEIN MAXIT=100
```

- Er gibt den bzw. die zu konvergierenden Stoffstrom bzw. -ströme vor (TEAR[18]). In einem entsprechenden Absatz kann auch festgelegt werden, welche Zustandsgrößen (Druck und/oder Enthalpie) neben allen Komponentenmolströmen konvergiert werden sollen.
  Ist z. B. für ein System S1 die Bezeichnung für den zu konvergierenden Stoffstrom, und soll neben den Komponentenmolströmen auch die Enthalpie (nicht aber der Druck, da in diesem System bekanntermaßen nur isobare Zustandsänderungen vorliegen) konvergiert werden, so sieht der ASPEN-Code dazu folgendermaßen aus:

```
TEAR S1 STATE=H
```

- Er definiert selber einen Konvergenzblock (CONVERGENCE[19]). Hierbei können alle vorstehend beschriebenen Vorgaben gemacht werden, also sowohl Vorgabe von zu konvergierenden Stoffströmen als auch des zu verwendenden Konvergenzalgorithmus mit entsprechenden Parametern.
  Werden mehrere solcher Konvergenzblöcke definiert, so muß zusätzlich eine Reihenfolge angegeben werden, in der die einzelnen Blöcke auszuwerten sind (CONV-ORDER[20]).
  Ein Beispiel für einen Konvergenzblock ist z. B. der bekannten Datei zur Simulation des Abhitzekessels zu entnehmen (siehe Kapitel 3.1):

```
74  CONVERGENCE CONV1 WEGSTEIN
75      BLOCK-OPTION CONV-LEVEL=3 TERM-LEVEL=3
76      TEAR S1 0.000001
77      PARAM MAXIT=500
```

  Nach einer Bezeichnungsvergabe für den anwendergenerierten Konvergenzblock und der Vorschrift eines Berechnungsalgorithmus (Zeile 74) können Vorgaben für die Ausführlichkeit der Stromdiagnose in der Ausgabedatei (CONV-LEVEL) und auf dem Terminal (TERM-LEVEL) gemacht werden (Zeile 75). In Zeile 76 werden der zu konvergierende Stoffstrom *(Tear Stream Convergence)* und die einzuhaltende Toleranz vorgegeben. Anschließend wird die maximale Anzahl der Iterationsschritte vom Standardwert 30 auf 500 erhöht (Zeile 77).

Ähnliche Möglichkeiten bestehen für die genauere Beschreibung der Konvergenzsituation bei *Design-Specification*- bzw. *Optimization*-Blöcken.

Je nach Berechnungssituation stehen eine oder mehrere der folgenden Berechnungsmethoden zur Verfügung[21]:

---

[18] Syntax: [3], S. 20-6ff

[19] Syntax: [3], S. 20-9ff

[20] Syntax: [3], S. 20-26

[21] Für Verwendungsmöglichkeit der Iterationsalgorithmen siehe [3], Tabelle S. 20-9; Kurzbeschreibung der Konvergenzalgorithmen: [3], S. 20-9f

- *„Bounded Wegstein“* (Wegstein-Verfahren; Berechnungsalgorithmus siehe [3], S. 20-26),
- *„Direct Substitution“*,
- *„Secant“* (Sekantenverfahren; Berechnungsalgorithmus siehe z. B. [13], S. 288ff),
- *„Broyden Quasi-Newton“* (Broyden-Verfahren; Berechnungsalgorithmus siehe z. B. [14], S. 232ff),
- *„Newton“* (modifiziertes Newton-Verfahren; Berechnungsalgorithmus siehe z. B. [13], S. 253ff),
- *„Complex“* oder
- *„Sequential Quadratic Programming“*.

Eine zusätzliche Option besteht in der grafischen Darstellung von Konvergenzverläufen mit PLOT[22].
Fügt man beispielsweise dem in Kapitel 3.1 in der ASPEN-Datei zur Beschreibung eines Abhitzekessels angeführten CONVERGENCE-Block die nachstehende Zeile hinzu, so liefert die ASPEN-Ausgabedatei bereits solch ein Konvergenzdiagramm:

```
78      PLOT 1 MAXERR:TOL TEAR=S1
```

führt zu:

[22] Syntax: [3], S. 20-30f

```
                    ************************************************
                    *   ITERATION HISTORY OF MAX ERROR/TOLERANCE   *
                    ************************************************
     1.00+06+M--------+---------+---------+---------+---------+---------+
            !M        !         !         !         !         !         !
            !M        !         !         !         !         !         !
            !M        !         !         !         !         !         !
            !M        !         !         !         !         !         !
            !M        !         !         !         !         !         !
            !M        !         !         !         !         !         !
     8.00+05+M--------+---------+---------+---------+---------+---------+
            !M        !         !         !         !         !         !
            !M        !         !         !         !         !         !
            !M        !         !         !         !         !         !
M           !M        !         !         !         !         !         !
A           !M        !         !         !         !         !         !
X           !M        !         !         !         !         !         !
     6.00+05+M--------+---------+---------+---------+---------+---------+
E           !M        !         !         !         !         !         !
R           !M        !         !         !         !         !         !
R           !M        !         !         !         !         !         !
O           !M        !         !         !         !         !         !
R           !M        !         !         !         !         !         !
            !M  M     !         !         !         !         !         !
/    4.00+05+M-MM-----+---------+---------+---------+---------+---------+
            !M MM     !         !         !         !         !         !
T           !M MM     !         !         !         !         !         !
O           !M MM     !         !         !         !         !         !
L           !MM M     !         !         !         !         !         !
E           !MM M     !         !         !         !         !         !
R           !MM M     !         !         !         !         !         !
A    2.00+05+MM-M--M--+---------+---------+---------+---------+---------+
N           !MM M MM  !         !         !         !         !         !
C           !MM M MM  !         !         !         !         !         !
E           !MM  MMM  !         !         !         !         !         !
            !MM    M M!         !         !         !         !         !
            !MM     M M         !         !         !         !         !
            !MM       !M M MM   !         !         !         !         !
        0.00+MM-------+MM-M--MMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMM--------+
            ! M       ! M       !         !         !         !         !
            !         !         !         !         !         !         !
            !         !         !         !         !         !         !
            !         !         !         !         !         !         !
            !         !         !         !         !         !         !
            !         !         !         !         !         !         !
    -2.00+05+---------+---------+---------+---------+---------+---------+
            0         10        20        30        40        50        60
                                    ITERATION NUMBER
```

Dargestellt ist hier der Quotient maximaler Fehler durch zulässige Toleranz über der Anzahl der durchgeführten Iterationsschritte.

Mehr Spielraum und „schönere“ Diagramme erhält man, wenn man sich, wie in Kapitel 5.1 beschrieben, selber eine Datei mit den während der Iterationen berechneten Daten erzeugt. Anschließend kann man diese Zahlenwerte dann mit Hilfe externer Programme auswerten. In der Arbeit wurden beispielsweise die Diagramme der Abbildungen 2, 3 und 5 auf diese beschriebene Weise generiert. Zur Visualisierung diente das Programm UNIGRAPH des Grafikpaketes UNIRAS.

Konvergieren die Berechnungen für ein System so langsam, daß auch die maximal zulässige Iterationszahl bzw. Rechenzeit noch nicht zur Einhaltung der zugelassenen Fehlerschranken führt, so ist, wie in Kapitel 4.2 beschrieben, ein Neustart mit vorgegebenen Startwerten erforderlich.

4.2 Startwertvorgabe

ASPEN besitzt einen Startwertgenerator für iterative Berechnungen, so daß im allgemeinen vom Anwender wenig Verständnis für den genaueren Berechnungsgang gefordert wird und es auch keiner Handrechnungen für die Ermittlung günstiger Startwerte bedarf. Das Überschreiten von Zeitlimits bzw. der unter ModelManager maximal möglichen Iterationszahl von 9999 oder auch die Existenz mehrerer Lösungen können es jedoch erforderlich machen, einen Simulationsdurchlauf mit selbst vorgegebenen Anfangswerten durchzuführen. Möglichkeiten hierzu sollen im folgenden dargestellt werden.

Für den in Kapitel 3.1 beschriebenen Abhitzekessel soll jetzt für den (zu konvergierenden) Strom S1 ein Anfangszustand vorgegeben werden. Der die Zustandsgrößen von S1 enthaltende Startvektor (hier: S) ergab sich aus der in Kapitel 3.1 durchgeführten Simulation nach 15 Iterationsschritten.
Für die Startwertvorgabe wird zusätzlich zur üblichen Eingabedatei ein Fortran-Block eingefügt (Zeile 60 bis 75). Nach Blockbetitelung (Zeile 60) und Angabe der zu verwendenden Variablen (Zeile 61) werden über S(1) bis S(12) die Startwerte für den Stoffstrom S1 vorgegeben (Zeile 62 bis 73)[23]. Der Fortran-Block soll nur einmal, nämlich am Anfang der Simulation, ausgeführt werden (Zeile 74).

```
 1  TITLE "ABHITZEKESSEL MIT ANFANGSWERTVORGABE"
 2
 3  IN-UNITS SI
 4
 5  OUT-UNITS SI PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C
 6
 7
 8  DEF-STREAMS CONVEN ALL
 9
10  DATABANKS ASPENPCD
11
12  PROP-SOURCES ASPENPCD
13
14  COMPONENTS
15      WASSER H2O WASSER /
16      SAUER O2 SAUER /
17      STICK N2 STICK
18
19  FLOWSHEET
20      BLOCK ECO IN=S3015 S2005 OUT=S3020 S2010
21      BLOCK UEBERHIT IN=S3005 S2025 OUT=S3010 S2030
22      BLOCK TROMMEL1 IN=S2010 S2020 OUT=S1
23      BLOCK TROMMEL2 IN=S1 OUT=S2025 S2015
24      BLOCK VERDAMPF IN=S3010 S2015 OUT=S3015 S2020
25
26  PROPERTIES SYSOP3
27
28  STREAM S2005
```

[23] Zur Variablenbelegung und zu den Maßeinheiten der Komponenten des Startvektors siehe [3], Seite 17-10.

```
    SUBSTREAM MIXED TEMP=104.99 <C> PRES=80 <BAR>  &
        MASS-FLOW=7.358
    MASS-FRAC WASSER 1

STREAM S3005
    SUBSTREAM MIXED TEMP=550 <C> PRES=1 <BAR> MASS-FLOW=60
    MASS-FRAC WASSER 0.0060 / SAUER 0.2300 / STICK 0.7640

BLOCK TROMMEL1 MIXER
    PARAM PRES=80 <BAR>
    PROPERTIES SYSOP12

BLOCK TROMMEL2 FLASH2
    PARAM PRES=80 <BAR> DUTY=0 <KW>
    PROPERTIES SYSOP12

BLOCK ECO HEATX
    PARAM DUTY=6006 <KW>
    FEEDS HOT=S3015 COLD=S2005
    PRODUCTS HOT=S3020 COLD=S2010

BLOCK UEBERHIT HEATX
    PARAM T-COLD=510 <C>
    FEEDS HOT=S3005 COLD=S2025
    PRODUCTS HOT=S3010 COLD=S2030

BLOCK VERDAMPF HEATX
    PARAM DUTY=11019 <KW>
    FEEDS HOT=S3010 COLD=S2015
    PRODUCTS HOT=S3015 COLD=S2020

FORTRAN USR1
    VECTOR-DEF S STREAM S1
F     S(1)=1.9714
F     S(2)=0
F     S(3)=0
F     S(4)=1.9714
F     S(5)=568.1496
F     S(6)=8000000
F     S(7)=-14386000
F     S(8)=0.1925
F     S(9)=0.8074
F     S(10)=-5728.0054
F     S(11)=177.0072
F     S(12)=18.0150
    EXECUTE FIRST
    FLASH-SPECS S1 NOFLASH NPHASE=3

CONVERGENCE CONV1 WEGSTEIN
    BLOCK-OPTION CONV-LEVEL=3 TERM-LEVEL=3
    TEAR S1 0.000001
    PARAM MAXIT=500
```

Eine weitere Möglichkeit, eine Simulation durchzuführen, ohne daß ASPEN neue Startwerte generiert, besteht darin, mit einem *Edit-Run* auf bereits bestehende Simulationsergebnisse zurückzugreifen und diese als neue Anfangswerte zu verwenden:

Nach dem ersten durchgeführten, noch nicht ausreichend konvergierten Simulationsrechengang liegt[24] eine Datei `name.pdf` vor. Mit ihr kann jetzt auf Betriebssystemebene mittels ‚`aspen editprg namealt /newrunid nameneu`‘ die Simulation mit den alten Ergebnissen als Startwert fortgeführt werden, wobei die Datei `editprg.inp` lediglich die Zeilen

```
EDIT
SIM-OPTIONS=YES
```

enthält.

4.3 Vorgabe von Ausgangsgrößen

Grundsätzlich müssen in einer ASPEN-Eingabedatei alle Eingangsstromvariablen und Blockparameter vorgegeben werden, aus denen ASPEN dann die Ausgangsgrößen ermittelt.
Viele denkbare Anwendungsfälle machen es jedoch erforderlich, Ausgangsgrößen vorzugeben, aus denen ASPEN dann entsprechende erforderliche Eingangswerte bestimmen soll. Während ASPEN sonst gemäß seinem sequentiellen Berechnungsalgorithmus eindeutig Ausgangs- aus Eingangsgrößen berechnen kann, ist bei dieser Aufgabenstellung offensichtlich iteratives Vorgehen erforderlich.

Veranschaulicht werden soll die unter ASPEN mögliche Ausgangsgrößenvorgabe an folgendem einfachen Beispiel:
Für den Kessel (modelliert durch einen einfachen Wärmeaustauscher unter Vorgabe der zu übertragenden Wärmeleistung) aus dem später (Kapitel 4.4) behandelten Dampfturbinenprozeß (siehe Abb. 4) soll nicht die Eintrittstemperatur des Wassers in den Kessel vorgegeben werden. Hier kann z. B. vielmehr von Interesse sein, den Frischdampfzustand, also die Eintrittstemperatur des Wasserdampfes in die Turbine, auf einem bestimmten Niveau zu halten (Der Druck nehme hier den konstanten Wert $p = 125$ bar an.).
Die ASPEN-Eingabedatei dazu sieht folgendermaßen aus:

```
TITLE "DAMPFERZEUGER - DESIGN-SPEC"

IN-UNITS SI

OUT-UNITS SI PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C

DEF-STREAMS CONVEN ALL

DATABANKS ASPENPCD

PROP-SOURCES ASPENPCD

COMPONENTS
```

[24](sofern im *Run* Menü der Schalter „getridof“ auf „no“ gestellt wurde)

```
14      WASSER H2O WASSER
15
16  FLOWSHEET
17      BLOCK KESSEL IN=S2 OUT=S4
18
19  PROPERTIES SYSOP12
20
21  STREAM S2
22      SUBSTREAM MIXED TEMP=323.150 PRES=1.250E+07 MASS-FLOW=10.0
23      MASS-FRAC WASSER 1.0
24
25  BLOCK KESSEL HEATER
26      PARAM PRES=.0 DUTY=3.327E+07
27
28  DESIGN-SPEC DES1
29      DEFINE TEM STREAM-VAR STREAM=S4 SUBSTREAM=MIXED  &
30          VARIABLE=TEMP
31      SPEC "TEM" TO "550+273.15"
32      TOL-SPEC "0.01"
33      VARY STREAM-VAR STREAM=S2 SUBSTREAM=MIXED VARIABLE=TEMP
34      LIMITS "0" "1000"
35
36  STREAM-REPOR MOLEFLOW MASSFLOW MASSFRAC
```

Der in sich vollständigen ASPEN-Datei (Zeile 1 bis 26) folgt der Block für die Vorgabe von Ausgangsgrößen (Zeile 28 bis 34). Hier muß spezifiziert werden, welche Variable vorgegeben werden soll (Zeile 29 und 30) und welchen Wert (Zeile 31) sie mit welcher Genauigkeit (Zeile 32) anzunehmen hat. Da das System in sich konsistent sein muß und nicht überbestimmt sein darf, kann dies nur „auf Kosten" einer anderen (Eingangs-!) Größe geschehen. Hierzu wird angegeben, welches diese zu verändernde Variable ist (Zeile 33) und in welchem Rahmen sie variiert werden darf (Zeile 34).
Die im STREAM-Absatz vorgegebene Temperatur (Zeile 22) verliert durch den nachfolgenden DESIGN-SPEC-Absatz ihre Bedeutung.

Ein Blick auf das Diagramm Abb. 3 läßt erkennen, daß die Speisewassertemperatur mit zunehmender Iterationszahl sehr schnell den konstanten Wert von $32,4°C$ annimmt, damit unter Vorgabe dieser auf das Arbeitsmittel zu übertragenden Wärmeleistung ein Frischdampfzustand von 125 bar/550°C erreicht wird.

4.4 Geschlossener Kreislauf

Im folgenden soll untersucht werden, wie ASPEN sich bei der Simulation von Systemen verhält, die keinen Eingangs- und/oder keinen Ausgangsstrom enthalten.

Simuliert werden soll ein Dampfturbinenkreisprozeß gemäß Abb. 4. Hierzu wird der Kreislauf zunächst zwischen Kondensator und Speisepumpe „aufgeschnitten", und für diese offene Kette werden die Blockkenngrößen so vorgegeben, daß sich ein Ausgangsstrom S5 ergibt, der dem Eingangsstrom S1 entspricht.

```
TITLE "DAMPFTURBINENPROZESS, OFFENE KETTE"
```

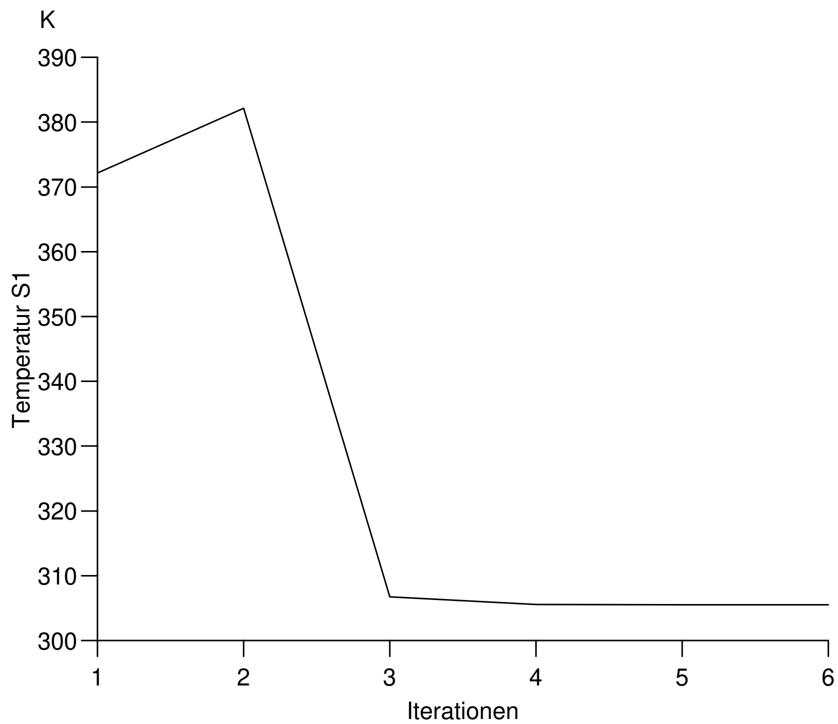
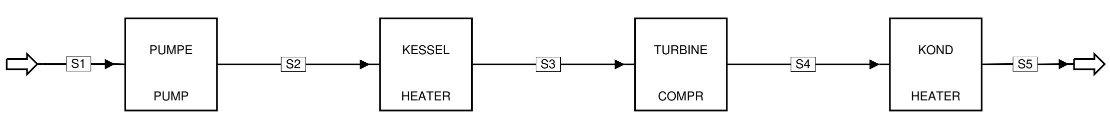


Abbildung 3: Konvergenz Speisewassertemperatur (S1) bei Vorgabe der Frischdampftemperatur



Dampfturbinenprozess, offene Kette						
Strom		S1	S2	S3	S4	S5
Massenstrom	kg/s	10.000	10.000	10.000	10.000	10.000
Temperatur	C	30.00	32.37	549.98	32.90	30.02
Druck	bar	0.05	125.00	125.00	0.05	0.05
Dampfgehalt		0.000	0.000	1.000	0.900	0.000
Enthalpie	kJ/kg	-15855.18	-15834.02	-12507.06	-13662.25	-15855.10
Entropie	kJ/kgK	-8.9873	-8.9596	-2.7958	-1.8218	-8.9870
Dichte	kg/m^3	995.70	1000.41	35.73	0.04	995.70

Abbildung 4: Schaltschema Dampfturbinenprozeß, offene Kette

```
 2
 3  IN-UNITS SI
 4
 5  OUT-UNITS SI TEMPERATURE=C PRESSURE=BAR
 6
 7
 8  DEF-STREAMS CONVEN ALL
 9
10  DATABANKS ASPENPCD
11
12  PROP-SOURCES ASPENPCD
13
14  COMPONENTS
15      WASSER H2O WASSER
16
17  FLOWSHEET
18      BLOCK B1 IN=S1 OUT=S2
19      BLOCK B2 IN=S2 OUT=S3
20      BLOCK B3 IN=S3 OUT=S4
21      BLOCK B4 IN=S4 OUT=S5
22
23  PROPERTIES SYSOP12
24
25  STREAM S1
26      SUBSTREAM MIXED TEMP=30 <C> PRES=0.05 <BAR> MASS-FLOW=10
27      MASS-FLOW WASSER 10
28
29  BLOCK B2 HEATER
30      PARAM PRES=0 <BAR> DUTY=33270 <KW>
31
32  BLOCK B4 HEATER
33      PARAM PRES=0.05 <BAR> DUTY=-21929 <KW>
34
35  BLOCK B1 PUMP
36      PARAM POWER=211.558 <KW>
37
38  BLOCK B3 COMPR
39      PARAM TYPE=ISENTROPIC PRES=0.05 <BAR> SEFF=0.7948806  &
40          NPHASE=2
```

Als Problem erwies sich hier, daß vom Anwender selbst erkannt werden muß, daß sich der Zustand des Stoffstroms nach der Turbine (S4) im Naßdampfgebiet befindet. Wird nicht explizit die Anzahl der Phasen durch ‚NPHASE=2‘ vorgegeben (Zeile 40), so ergibt der voreingestellte Wert von NPHASE=1 völlig unsinnige Ergebnisströme. Gibt man die Anzahl der Aggregatzustände mit NPHASE=2 vor — selbst wenn der Stoffstromzustand hinter der Turbine noch im Gebiet des überhitzten Dampfes liegen sollte — so ergibt der Simulationsrechenlauf nahezu die gleichen Ergebnisse wie beim Standardwert NPHASE=1. Es empfiehlt sich also bei Nichtkenntnis des Endzustandes, NPHASE auf zwei zu setzen.

Der Kreis wird nun unter Vorgabe anderer Eingangsstromwerte (z. B. wie bereits in Kapitel 5.2 beschrieben durch einen Fortranblock) gemäß folgendem Listing wieder geschlossen[25]:

```
TITLE "DAMPFTURBINENPROZESS, GESCHLOSSENER KREIS"

IN-UNITS SI

OUT-UNITS SI TEMPERATURE=C PRESSURE=BAR


DEF-STREAMS CONVEN ALL

DATABANKS ASPENPCD

PROP-SOURCES ASPENPCD

COMPONENTS
    WASSER H2O WASSER

FLOWSHEET
    BLOCK B1 IN=S1 OUT=S2
    BLOCK B2 IN=S2 OUT=S3
    BLOCK B3 IN=S3 OUT=S4
    BLOCK B4 IN=S4 OUT=S1

PROPERTIES SYSOP12

STREAM S1
    SUBSTREAM MIXED TEMP=30 <C> PRES=0.05 <BAR> MASS-FLOW=10
    MASS-FLOW WASSER 10

BLOCK B2 HEATER
    PARAM PRES=0 <BAR> DUTY=33270 <KW>

BLOCK B4 HEATER
    PARAM PRES=0.05 <BAR> DUTY=-21929 <KW>

BLOCK B1 PUMP
    PARAM POWER=211.558 <KW>

BLOCK B3 COMPR
    PARAM TYPE=ISENTROPIC PRES=0.05 <BAR> SEFF=0.7948806  &
        NPHASE=2

FORTRAN FOR1
    VECTOR-DEF S STREAM S1
F      S(3)=400
    EXECUTE FIRST
```

[25] Der ModelManager bzw. ASPEN melden sich zwar mit der Warnung „There are no inlet (outlet) streams to (from) the flowsheet. Flowsheet convergence problems may result.“, die Simulation kann aber trotzdem durchgeführt werden.

```
46      FLASH-SPECS S1 NOFLASH NPHASE=2
```

Obwohl die offene Kette für einen Eingangsstrom S1 mit einer Temperatur von 30°C so ausgelegt wurde, daß der Eingangs- dem Ausgangsstrom entspricht, wurde hier der geschlossene Kreis mit der höheren Temperatur 400 K (Zeile 44) gestartet[26]. Daß in diesem Fall relativ schnell wieder die Stromkenngrößen der offenen Kette erreicht werden, wird hier an der Temperatur des Stromes S1 gezeigt (siehe Abb. 5).

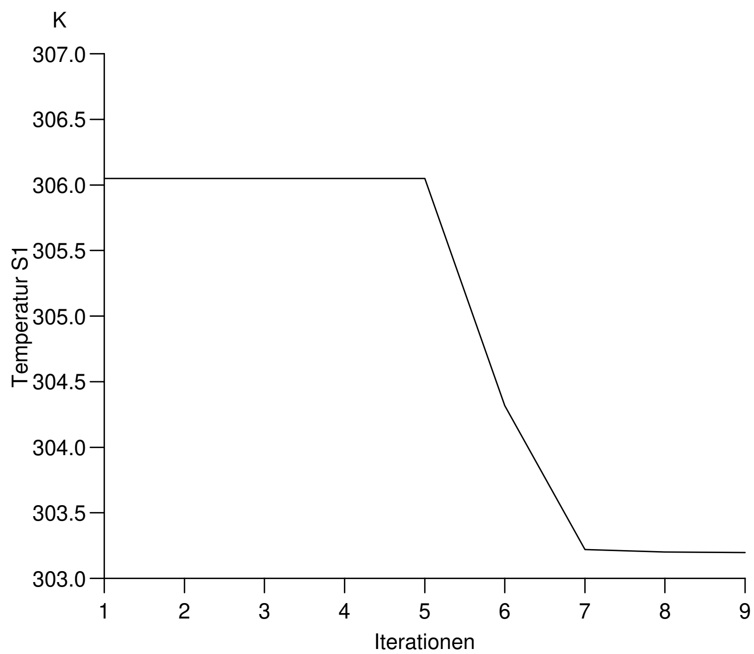


Abbildung 5: Konvergenz Speisewassertemperatur (S1) nach Schließen des Kreises

4.5 Vermaschtes System

Ein vermaschtes System liegt beispielsweise vor, wenn ein Kreisprozeß eine Dampfturbine mit Anzapfung bzw. Entnahme beinhaltet: Das System enthält einen oder mehrere Blöcke, die nicht aus genau einem Eingangsstrom einen eindeutigen Ausgangsstrom bestimmen.

Zunächst sollen zur genaueren Analyse von ASPENs Fähigkeit, mit solchen Systemen umzugehen, die Grundelemente Verzweigung und Vereinigung untersucht werden.

4.5.1 Verzweigung

Die Verzweigung eines Stoffstromes in eine beliebige Anzahl von Strömen wird durch das ASPEN-Modell FSPLIT beschrieben.
Hierfür müssen für alle bis auf einen Ausgangsstrom die Massenströme bzw. die jeweiligen

[26] Die Temperaturvorgabe des Stoffstroms S1 durch den STREAM-Absatz (Zeile 26) hat jetzt keinen Einfluß auf die Simulationsstartwerte!

Anteile am Gesamtmassenstrom angegeben werden. Alle Ausgangsströme sind vom gleichen Zustand wie der Eingangsstrom. Hierdurch wird garantiert, daß die Massen- und Enthalpiebilanzen an diesem Modell auch tatsächlich eingehalten werden: Die Massenbilanz dadurch, daß ASPEN den letzten Massenstrom selber berechnet, und die Enthalpiebilanz insofern, als die spezifische Enthalpie aller Stoffströme ja gleich ist, die Enthalpieströme sich also genau wie die Massenströme aufteilen.

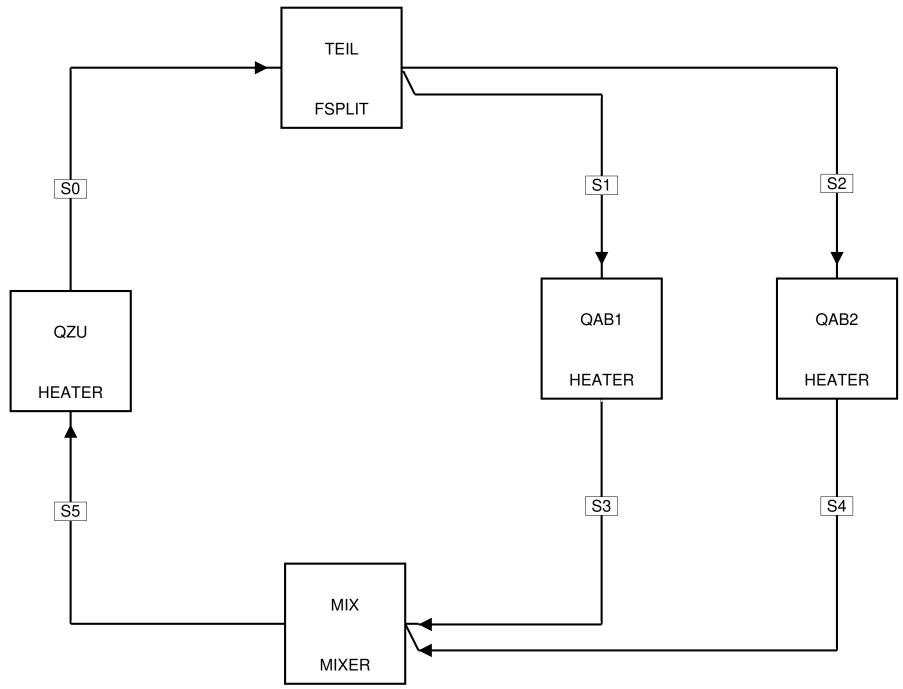
4.5.2 Vereinigung

Die Vereinigung einer beliebigen Anzahl von Stoffströmen zu einem Gesamtmassenstrom wird unter ASPEN durch den Standardblock MIXER modelliert.
Hier ermittelt ASPEN den Ausgangsstrom unter Berücksichtigung von Massen- und Enthalpiebilanz. Es besteht sogar die Möglichkeit, Stoffströme verschiedenen Druckes zu vereinigen. Ist dies der Fall, so geht ASPEN standardmäßig davon aus, daß alle eingehenden Stoffströme höheren Druckes auf den niedrigst auftretenden Druck isenthalp gedrosselt werden.

4.5.3 Vermaschtes System einfachster Art

Als ein vermaschtes System einfachster Art soll hier ein geschlossener Wärmekreis untersucht werden, in dem ein Fluid erhitzt, in zwei Teilmassenströme zerlegt, als solche wieder abgekühlt, und nach Vereinigung wieder dem Block der Wärmeaufnahme zugeführt wird (siehe Abb. 6).

Üblicherweise muß unter ASPEN vorgegeben werden, in welchem Verhältnis sich in dem Stromteiler die beiden Massenströme aufteilen, bzw. ein absoluter Massenstrom der beiden Teilstoffströme muß angegeben werden, damit das zu simulierende System vollständig beschrieben ist.
ASPEN soll in der folgenden Simulation aber die Massenstromaufteilung selbst ermitteln, die erforderlich ist, damit ein vorgegebenes Verhältnis von abzuführenden Wärmeleistungen in den Kühlern eingehalten wird. Eine Vorgabe der Wärmeleistungen reicht offenbar nicht aus, daß sich rechnerisch eindeutige die Kühler durchfließende Massenströme ergeben.
Eine Aufteilung der abzuführenden Wärmeleistungen von beispielsweise $\frac{\dot{Q}_{\mathrm{ab1}}}{\dot{Q}_{\mathrm{ab2}}} = \frac{70\ \mathrm{kW}}{30\ \mathrm{kW}}$ bedeutet noch nicht, daß sich die Massenströme auch in dem gleichen Verhältnis $\frac{\dot{m}_1}{\dot{m}_2} = \frac{0{,}7\ \frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s}}}{0{,}3\ \frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s}}}$ aufteilen müssen: Werden die Berechnungen beispielsweise mit einer anderen Aufteilung gestartet, so ergeben sich hinter den beiden Kühlern zwar unterschiedliche Ausgangstemperaturen. Der Zustand des Stoffstroms S5 hinter der Mischungsstelle ist aber unabhängig davon, wie das Verhältnis der beiden Teilmassenströme war. Das bedeutet, daß (vorausgesetzt, der Anwender hat die Wärmeleistungen an den Wärmeaustauschern so vorgegeben, daß für das Gesamtsystem der erste Hauptsatz der Thermodynamik eingehalten wird) in jedem Fall das System schon nach einer „Iteration" konvergiert: Der Rechenstartwert für das Stromaufteilungsverhältnis ist in jedem Fall eine Lösung des Problems.
Um aber doch eine eindeutige Stromaufteilung zu erzwingen, muß eine zusätzliche Forderung, z. B. für eine der beiden Kühleraustrittstemperaturen, aufgestellt werden. Wird beispielsweise die gleiche Austrittstemperatur für beide Kühler verlangt, so gilt



Title	kreis3	
Project		AspenTech
By	MM User	
Date	Mar 7 1995	
Note		

Waermekreis							
Strom		S0	S1	S2	S3	S4	S5
Massenstrom	kg/s	1.000	0.400	0.600	0.400	0.600	1.000
Temperatur	C	50.00	50.00	50.00	20.07	30.05	26.05
Druck	bar	10.00	10.00	10.00	10.00	10.00	10.00
Dampfgehalt		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Enthalpie	kJ/kg	-15770.75	-15770.75	-15770.75	-15895.75	-15854.08	-15870.75
Entropie	kJ/kgK	-8.7213	-8.7213	-8.7213	-9.1272	-8.9874	-9.0428
Dichte	kg/m^3	988.46	988.46	988.46	998.71	996.13	997.28

Abbildung 6: Schaltschema verzweigter Wärmekreislauf

jetzt doch: $\frac{\dot{Q}_{\mathrm{ab1}}}{\dot{Q}_{\mathrm{ab2}}} = \frac{\dot{m}_1}{\dot{m}_2}$.

Eine ASPEN-Eingabedatei für die Lösung des Problems sei im folgenden beschrieben:

```
TITLE "Waermekreis"

IN-UNITS SI PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C

OUT-UNITS SI PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C

DEF-STREAMS CONVEN ALL

DATABANKS ASPENPCD

PROP-SOURCES ASPENPCD

COMPONENTS
    WASSER H2O WASSER

FLOWSHEET
    BLOCK QZU IN=S5 OUT=S0
    BLOCK QAB1 IN=S1 OUT=S3
    BLOCK QAB2 IN=S2 OUT=S4
    BLOCK TEIL IN=S0 OUT=S1 S2
    BLOCK MIX IN=S3 S4 OUT=S5

PROPERTIES SYSOP12

STREAM S0
    SUBSTREAM MIXED TEMP=50 PRES=10 MASS-FLOW=1 NPHASE=1
    MASS-FRAC WASSER 1

BLOCK MIX MIXER
    PARAM PRES=0

BLOCK TEIL FSPLIT
    FRAC S1 0.6

BLOCK QAB1 HEATER
    PARAM PRES=0 DUTY=-70 <KW>

BLOCK QAB2 HEATER
    PARAM PRES=0 DUTY=-30 <KW>

BLOCK QZU HEATER
    PARAM PRES=0 DUTY=100 <KW>

DESIGN-SPEC D1
```

```
45      DEFINE T4 STREAM-VAR STREAM=S4 SUBSTREAM=MIXED  &
46          VARIABLE=TEMP
47      SPEC "T4" TO "26.05"
48      TOL-SPEC "0.01"
49      VARY BLOCK-VAR BLOCK=TEIL SENTENCE=FRAC VARIABLE=FRAC  &
50          ID1=S1
51      LIMITS "0" "1"
52
53  CONVERGENCE $OLVER01 WEGSTEIN
54      TEAR S0
```

Das System wird komplett vorgegeben (Zeile 1 bis 42), wobei zunächst auch eine Angabe über das Stromteilungsverhältnis gemacht werden muß (Zeile 32 und 33). Dieser in sich konsistenten Systembeschreibung folgt der Absatz über die Vorgabe von Ausgangsgrößen[27] (Zeile 44 bis 51). Die gemeinsame Kühleraustrittstemperatur $T_3 = T_4 = 26,05°\mathrm{C}$[28] soll unter Variation der Massenstromaufteilung erreicht werden.

Der *Stream Report* der zugehörigen ASPEN-Ausgabedatei wird in folgendem Listing gezeigt:

```
                                   WAERMEKREIS
                                   STREAM SECTION

 S0 S1 S2 S3 S4
 --------------

 STREAM ID               S0         S1         S2         S3         S4
 FROM :                  QZU        TEIL       TEIL       QAB1       QAB2
 TO   :                  TEIL       QAB1       QAB2       MIX        MIX

 SUBSTREAM: MIXED
 PHASE:                  LIQUID     LIQUID     LIQUID     LIQUID     LIQUID
 COMPONENTS: KMOL/SEC
   WASSER              5.5509-02  3.8856-02  1.6653-02  3.8856-02  1.6653-02
 TOTAL FLOW:
   KMOL/SEC            5.5509-02  3.8856-02  1.6653-02  3.8856-02  1.6653-02
   KG/SEC                 1.0000     0.6999     0.3000     0.6999     0.3000
   CUM/SEC             1.0117-03  7.0817-04  3.0351-04  7.0190-04  3.0083-04
 STATE VARIABLES:
   TEMP   C              50.0000    50.0000    50.0000    26.0531    26.0539
   PRES   BAR            10.0000    10.0000    10.0000    10.0000    10.0000
   VFRAC                  0.0        0.0        0.0        0.0        0.0
   LFRAC                  1.0000     1.0000     1.0000     1.0000     1.0000
   SFRAC                  0.0        0.0        0.0        0.0        0.0
 ENTHALPY:
   J/KMOL             -2.8411+08 -2.8411+08 -2.8411+08 -2.8591+08 -2.8591+08
```

[27] siehe Kapitel 4.3

[28] (ermittelt aus einem Simulationsdurchlauf mit einem dem Wärmeleistungsverhältnis entsprechenden Massenstromverhältnis)

```
  J/KG              -1.5771+07 -1.5771+07 -1.5771+07 -1.5871+07 -1.5871+07
  WATT              -1.5771+07 -1.1039+07 -4.7313+06 -1.1109+07 -4.7613+06
ENTROPY:
  J/KMOL-K          -1.5711+05 -1.5711+05 -1.5711+05 -1.6291+05 -1.6291+05
  J/KG-K            -8721.2524 -8721.2524 -8721.2524 -9042.7738 -9042.7634
DENSITY:
  KMOL/CUM             54.8684    54.8684    54.8684    55.3581    55.3581
  KG/CUM              988.4558   988.4558   988.4558   997.2771   997.2769
AVG MW                 18.0150    18.0150    18.0150    18.0150    18.0150

                                WAERMEKREIS
                                STREAM SECTION

S5
--

STREAM ID              S5
FROM :                 MIX
TO   :                 QZU

SUBSTREAM: MIXED
PHASE:                 LIQUID
COMPONENTS: KMOL/SEC
  WASSER             5.5509-02
TOTAL FLOW:
  KMOL/SEC           5.5509-02
  KG/SEC                1.0000
  CUM/SEC            1.0027-03
STATE VARIABLES:
  TEMP   C             26.0533
  PRES   BAR           10.0000
  VFRAC                 0.0
  LFRAC                 1.0000
  SFRAC                 0.0
ENTHALPY:
  J/KMOL            -2.8591+08
  J/KG              -1.5871+07
  WATT              -1.5871+07
ENTROPY:
  J/KMOL-K          -1.6291+05
  J/KG-K            -9042.7707
DENSITY:
  KMOL/CUM             55.3581
  KG/CUM              997.2770
AVG MW                 18.0150
```

Neben der Tatsache, daß die beiden Stoffströme S3 und S4 in guter Näherung die gleiche Temperatur besitzen, ist hier tatsächlich die erwartete Massenstromaufteilung von $\frac{0{,}7}{0{,}3}$ erreicht worden.

5 Fortran-Implikation

Eine Anwenderschnittstelle stellt die Möglichkeit der Einbindung von Fortranzeilen in den ASPEN-Code dar.
Hierbei stehen zwei prinzipiell verschiedene Optionen zur Wahl:

- Eine Möglichkeit ist der Einschluß von vollständigen Fortran-Unterprogrammen, die genauso wie die in ASPEN enthaltenen Standard-Blocks die Aufgabe haben, aus Eingangsgrößen durch Vorgabe von Rechenalgorithmen Ausgangsgrößen zu erzeugen,
- die andere Möglichkeit besteht darin, mit Hilfe von „Fortran-Blocks" Einfluß auf beliebige in der Simulation verwendete Variablen zu nehmen.

5.1 Fortran-Unterprogramme

Die Möglichkeit der Einbindung von eigenen Fortran-Unterprogrammen in den ASPEN-Text stellt ein mächtiges Interface dar, in dem der Anwender seine ganz speziellen Ansprüche und Erfordernisse an ein ASPEN-Modell verwirklichen kann.
Einerseits können hiermit Simulationsblöcke entwickelt werden, die ähnlich den von ASPEN vorgegebenen Standardblöcken aus Eingangsgrößen Ausgangsgrößen berechnen.
Ebenso erlaubt die Subroutine-Programmierung aber beispielsweise auch, durch ‚read'- und ‚write'-Anweisungen während der Simulationsberechnungen Einfluß auf die Ein- und Ausgabe zu nehmen, oder es können Zustandsgrößen einzelner Stoffströme während der Berechnungen in eine Datei geschrieben werden, um nach Abschluß der Simulation eine Konvergenzanalyse durchführen zu können.

ASPEN ermöglicht den Zugriff auf vorhandene Stoffwert-Datenbanken, so daß auch bei der Programmierung benutzerdefinierter Modelle nicht auf ASPENs reichhaltiges Angebot verzichtet zu werden braucht.
Zur Berechnung weiterer Zustandsgrößen unter Verwendung der ASPEN-Stoffwertroutinen dienen folgende Größen grundsätzlich als Input-Variablen: Stoffstromzusammensetzung, Temperatur, Druck und Dampf- bzw. Flüssigkeitsgehalt[29]. Für eine Anwendung, die beispielsweise statt Temperatur und Druck Enthalpie und Druck vorgibt, um daraus alle übrigen Zustandsgrößen zu ermitteln, ist bereits iteratives Vorgehen erforderlich.

Der grundsätzliche Aufbau der ASPEN-Datei und des implizierten Fortran-Unterprogramms soll an folgendem Beispiel erläutert werden: Aus den Vorgabegrößen für die Rohrgeometrie soll für durchströmende Flüssigkeiten der Druckverlust unter Annahme laminarer Strömungsverhältnisse bestimmt werden, was sich dann auf die Stromzustandsgröße Druck als Ausgabegröße auszuwirken hat.

```
TITLE "USER-MODELL"

IN-UNITS SI

DEF-STREAMS CONVEN ALL
```

[29] Näheres hierzu siehe [2], S. 2-1 bis 2-16.

```

DESCRIPTION "DRUCKVERLUST IM ROHR"

DATABANKS ASPENPCD

PROP-SOURCES ASPENPCD

COMPONENTS
    WASSER H2O WASSER

FLOWSHEET
    BLOCK DRV IN=FEED OUT=PROD

PROPERTIES SYSOP12

STREAM FEED
    SUBSTREAM MIXED TEMP=323.150 PRES=1.000E+07 MASS-FLOW=100
    MASS-FRAC WASSER 1.0

BLOCK DRV USER
    SUBROUTINE USRDRV
    PARAM NREAL=2
    REAL VALUE-LIST=.20 50.0
```

Das zugehörige Fortran-Unterprogramm sieht folgendermaßen aus:

```
      SUBROUTINE USRDRV (NSIN, NINFI, SIN1, SIN2, SIN3, SIN4,
     1                   SINFI, NSOUT, NINFO, SOUT1, SOUT2,
     2                   SOUT3, SOUT4, SINFO, NSUBS, IDXSUB,
     3                   ITYPE, NINT, INT, NREAL, REAL, IDS,
     4                   NPO, NBOPST, NIWORK, IWORK, NWORK,
     5                   WORK, NSIZE, SIZE, INTSIZ)
C
       IMPLICIT NONE
C
C
      INTEGER IMISS, NGBAL, IPASS, IRESTR,
     1        ICONVG, LMSG, LPMSG, KFLAG,
     2        NHSTRY, NRPT, NTRMNL, ISIZE
      REAL*8 RMISS
      COMMON /USER/ RMISS, IMISS, NGBAL, IPASS, IRESTR, ICONVG,
     1          LMSG, LPMSG, KFLAG, NHSTRY, NRPT, NTRMNL, ISIZE
C
C
      REAL XMW(1)
      COMMON /MW/ XMW(1)
C
C
      INTEGER NCC, NNCC, NC, NAC,
     1        NACC, NVCP, NVNCP, NVACC,
     2        NVANCC, NASSAY, NCCASS, IDXWAT, NG
```

```
      COMMON /NCOMP/ NCC, NNCC, NC, NAC, NACC, NVCP, NVNCP,
     1               NVACC, NVANCC, NASSAY, NCCASS, IDXWAT,
     2               NG
C
C
      INTEGER NCPM, NCPCS, NCPNC, NTRIAL, IDUM3(2)
      REAL*8 TCALC, PCALC, VCALC, QCALC, BETCAL, RDUM(21),
     1       RESLTS(1)
      COMMON /STWKWK/ NCPM, NCPCS, NCPNC, NTRIAL, IDUM3(2), TCALC,
     1                PCALC, VCALC, QCALC, BETCAL, RDUM(21),
     2                RESLTS(1)
C
C
      INTEGER NRETN, NIRETN, NHXF, NHYF, NWYF, NSTW,
     1        KK1, KK2, KZ1, KZ2, KA1, KA2,
     2        KRET, KRSC, MF, MX, MX1, MX2,
     3        MY, MCS, MNC, MHXF, MHYF, MWY,
     4        MRETN, MIM, MIC, MIN, MPH, MIRETN,
     5        NDUM, NBLM, NCOVAR, NWR, NIWR, KEXT,
     6        KLNK, KFOUT, KFOUT1, KPHV, KPHL, KLNGM,
     7        MF1, MFST, MSTOIL, MSTOIS, MSTOI, MLNKL,
     8        MLNKS, MLNKIN, MZWK, MST, MIEXST, MIZWK
C
      INTEGER INDEX(1)
      REAL*8 HV, HL, HL1, HL2, SV, SL, SL1, SL2, VV, VL,
     1       VL1, VL2, XMWV, XMWL, XMWL1, XMWL2, HCS,
     2       HCNS, SSALT, VSALT, HSALT, FSALT, RATIO
      EQUIVALENCE (INDEX(1), RESLTS(1))
      COMMON /STWORK/ NRETN, NIRETN, NHXF, NHYF, NWYF, NSTW,
     1                KK1, KK2, KZ1, KZ2, KA1,
     2                KA2, KRET, KRSC, MF, MX, MX1,
     3                MX2, MY, MCS, MNC, MHXF, MHYF,
     4                MWY, MRETN, MIM, MIC, MIN,
     5                MPH, MIRETN, NDUM, NBLM, NCOVAR,
     6                NWR, NIWR, KEXT, KLNK, KFOUT,
     7                KFOUT1, KPHV, KPHL, KLNGM, MF1,
     8                MFST, MSTOIL, MSTOIS, HV, HL,
     9                HL1, HL2, SV, SL, SL1,
     a                SL2, VV, VL, VL1, VL2, XMWV,
     b                XMWL, XMWL1, XMWL2, HCS, HCNS, SSALT,
     c                VSALT, MSTOI, MLNKL, MLNKS, MLNKIN, MZWK,
     d                MST, MIEXST, MIZWK, HSALT, FSALT, RATIO
C
C
      REAL*8 SIN1(1:NC+9), SOUT1(NC+9)
      INTEGER NSIN, NINFI, NSOUT, NINFO, NSUBS, IDXSUB(1:NSUBS),
     1        ITYPE(1:NSUBS), NINT, INT(1:NINT), NREAL,
     2        IDS(1:2,1:13), NPO, NBOPST(1:6,1:NPO), NIWORK,
     3        IWORK(1:NIWORK), NWORK, NSIZE, INTSIZ (1:NSIZE)
      REAL*8 SIN1(1:NC+9), SIN2(1:NC+9), SIN3(1:NC+9), SIN4(1:NC+9),
     1       SINFI, SOUT1(1:NC+9), SOUT2(1:NC+9), SOUT3(1:NC+9),
     2       SOUT4(1:NC+9), SINFO, REAL(1:NREAL), WORK(1:NIWORK),
```

```
     3       SIZE(1:NSIZE)
C
C
C
C
      REAL*8 T, P, X(1:NC), Y(1:NC), PHI, HMX, SMX, GMX, VMX,
     1       DPHI, DHMX, DSMX, DGMX, DVMX, VISC
      INTEGER N, IDX(1:NC), KDIAG, KBASE, KPHI, KH, KS, KG, KV, KER
C
C
C
      REAL*8 PI, VISC, V, RE, DP
C
C
C     REAL(1):     Rohrdurchmesser  [m]
C     REAL(2):     Rohrlaenge       [m]
C     VISC:        Viskositaet      [Pa*s]
C     V:           Geschwindigkeit  [m/s]
C     RE:          Reynoldszahl     [-]
C     DP:          Druckverlust     [Pa]
C
C
      T=SIN1(3)
      P=SIN1(4)
      X(1)=1.
      N=1
      IDX(1)=1
      KDIAG=3
C
      CALL VISCL (T, P, X, N, IDX, NBOPST, KDIAG, VISC, KER)
C
C     T(I), P(I), X(I), N(I), IDX(I), NBOPST(I), KDIAG(I)
C     VISC(O), KER(O)
C
C   VISCL: Berechnung Viskositaet VISC fuer Fluessigkeitsgemisch
C
      PI=3.1416
C
 10   FORMAT (1X,'Durchmesser: ',f7.2,' m')
 20   FORMAT (1X,'Rohrlaenge: ',f7.2,' m')
 30   FORMAT (1X,'Viskositaet: ',f9.6,' Pa*s')
 40   FORMAT (1X,'Geschwindigkeit: ',f6.2,' m/s')
 50   FORMAT (1X,'Re-Zahl: ',f10.2,' -')
 60   FORMAT (1X,'Druckverlust: ',f10.2,' Pa')
C
      WRITE (NHSTRY,10) REAL(1)
      WRITE (NHSTRY,20) REAL(2)
      WRITE (NHSTRY,30) VISC
C
      V=4.*SIN1(2)*SIN1(10)/(SIN1(9)*PI*REAL(1)*REAL(1))
      RE=V*REAL(1)/VISC*SIN1(9)
      DP=64./RE*REAL(2)/REAL(1)*SIN1(9)*0.5*V*V
```

```
C
      WRITE (NHSTRY,40) V
      WRITE (NHSTRY,50) RE
      WRITE (NHSTRY,60) DP
C
      T=SIN1(3)
      P=SIN1(4)-DP
      X(1)=1.
      Y(1)=0.
      N=1
      IDX(1)=1
      KDIAG=3
      KBASE=1
      KPHI=0
      KH=1
      KS=1
      KG=0
      KV=1
C
      CALL LMTHMY (T, P, X, Y, N, IDX, NBOPST, KDIAG, KBASE, KPHI,
     1             KH, KS, KG, KV, PHI, HMX,
     2             SMX, GMX, VMX, DPHI, DHMX, DSMX, DGMX, DVMX, KER)
C
C   T(I), P(I), X(I), Y(I), N(I), IDX(I), NBOPST(I), KDIAG(I),
C   KBASE(I), KPHI(I), KH(I), KS(I), KG(I), KV(I)                (INPUT)
C   PHI(O), HMX(O), SMX(O), GMX(O), VMX(O), DPHI(O), DHMX(O),
C   DSMX(O), DGMX(O), DVMX(O), KER(O)                           (OUTPUT)
C
C   LMTHMY: Berechnung von Stoffgroessen (HMX, SMX und VMX) fuer
C           Fluessigkeitsgemisch
C
      SOUT1(1)=SIN1(1)
      SOUT1(2)=SIN1(2)
      SOUT1(3)=T
      SOUT1(4)=P
      SOUT1(5)=HMX/SIN1(10)
      SOUT1(6)=SIN1(6)
      SOUT1(7)=SIN1(7)
      SOUT1(8)=SMX/SIN1(10)
      SOUT1(9)=SIN1(10)/VMX
      SOUT1(10)=SIN1(10)
C
      RETURN
      END
C
C  Das Fortranunterprogramm usrdrv.f muss, bevor es in den
C  ASPEN-Simulationsprozess eingebunden werden kann, mit
C  'aspcomp.sh usrdrv.f' kompiliert werden!
C
```

Der benutzerdefinierte Block (hier: DRV), der auf das Fortran-Unterprogramm (hier: USRDRV) verweist, wird ähnlich wie die vorgegebenen Standardmodelle in den ASPEN-

Code eingebettet. Bei der Modellbezeichnung ist jetzt der Code ‚USER'[30] anzuführen (Zeile 25). (Soll der Block mehr als vier Eingangs- bzw. Ausgangsströme enthalten, so ist das Modell USER2[31] zu verwenden.)
Nach einer Namensvergabe für das Fortran-Unterprogramm (Zeile 26) wird festgelegt, wieviele Parameter vom Hauptprogramm an das Unterprogramm übergeben werden sollen. Sie werden in den Variablen INT, REAL, IWORK, WORK und SIZE abgespeichert[32].
In unserem Beispiel werden die reellen Parameter Rohrdurchmesser (0,20 m) und Rohrlänge (50,0 m) an das Unterprogramm übergeben (Zeile 28) und stehen dort dann als REAL(1) und REAL(2) zur Verfügung.

Die Struktur des Fortran-Unterprogramms sieht wie folgt aus:
Nach (mit der im ASPEN-Code übereinstimmenden) Bezeichnung der Subroutine und Angabe der aus dem Hauptprogramm zu übernehmenden Variablen (Zeile 1 bis 6) werden — nach jeweiliger Typzuordnung — über COMMON-Blöcke weitere ASPEN-systemspezifische Variablen aus dem Hauptprogramm übernommen[33] (Zeile 11 bis 67). Neben den Geometrieparametern REAL(1) und REAL(2) können auch die Stromzustandsgrößen mittels SIN1(1) bis SIN1(10)[34] in dem Unterprogramm weiterverwendet werden. Die Viskosität der Flüssigkeit muß nicht explizit aus dem Hauptprogramm übergeben werden, sondern kann unter Nutzung von ASPEN-Datenbanken durch einen Unterprogrammaufruf abgefragt werden (Zeile 107). Nach Berechnung von Strömungsgeschwindigkeit, Reynoldszahl und Druckverlust (Zeile 131 bis 133) kann dann der Ausgangsdruck bestimmt werden (Zeile 136). Damit jetzt die neuen Stromzustandsgrößen komplett als Ausgangsgrößen SOUT1(1) bis SOUT1(10)[35] an das Hauptprogramm zurückgegeben werden können, ist ein weiterer Aufruf einer ASPEN-Stoffwertroutine erforderlich (Zeile 149): Er übernimmt im wesentlichen die Ermittlung der neuen Werte für Enthalpie, Entropie und spezifisches Volumen, die aber, da sich der Zustand des Stoffstroms im Flüssigkeitsbereich befindet, im allgemeinen keine starke Veränderung erfahren.

Ein weiteres Anwendungsbeispiel für die Entwicklung eigener Fortranmodelle stellt das folgende Beispielprogramm dar: Unter Vorgabe von Austrittsdruck ($p_A = 1,0$ bar) und polytropem Turbinenwirkungsgrad ($\eta_T = 0,720$) werden für eine Gasturbine aus den Eingangsgrößen nach Berechnungsmethoden für ideale Gase alle weiteren Ausgangsgrößen ermittelt.
Wenn der Index E Eingangsgrößen und der Index A Ausgangsgrößen bezeichnet, so ergibt sich das entsprechende Temperaturverhältnis zu

$$\frac{T_A}{T_E} = \left(\frac{p_A}{p_E}\right)^{\eta_T(1-\frac{1}{\kappa})} = \left(\frac{1}{\Pi}\right)^{\frac{R\cdot\eta_T}{c_p}}, \tag{1}$$

wobei für den polytropen Wirkungsgrad gilt: $\frac{n-1}{n} = \eta_T \cdot \frac{\kappa-1}{\kappa}$.

```
 1  TITLE "GASTURBINE"
```

[30] Syntax: [2], S. 3-2ff.
[31] Syntax: [2], S. 3-13ff
[32] Erläuterungen hierzu: Siehe [2]
[33] Zur näheren Beschreibung der COMMON-Blöcke siehe [2], Seite A-1 bis A-25
[34] Für die Bedeutung der Variable SIN1 siehe [3], S. 17-10
[35] Für die Bedeutung der Variable SOUT1 siehe [3], S. 17-10

```

IN-UNITS SI

OUT-UNITS SI PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C


DEF-STREAMS CONVEN ALL

DESCRIPTION "Beschreibung einer Gasturbine durch ein
        Fortran-Unterprogramm"

DATABANKS ASPENPCD

PROP-SOURCES ASPENPCD

COMPONENTS
    WASSER H2O WASSER /
    SAUER O2 SAUER /
    STICK N2 STICK

FLOWSHEET
    BLOCK GASTURB IN=S1 OUT=S2

PROPERTIES SYSOP3

STREAM S1
    IN-UNITS SI
    SUBSTREAM MIXED TEMP=1300.0 PRES=1.000E+06 MASS-FLOW=1.0
    MASS-FRAC WASSER 6.000E-03 / SAUER .230 / STICK .7640

BLOCK GASTURB USER
    IN-UNITS SI
    SUBROUTINE USRGT
    PARAM NREAL=2
    REAL VALUE-LIST=1.0 .720
```

Die dazugehörige Fortran-Routine lautet:

```
      SUBROUTINE USRGT  (NSIN, NINFI, SIN1, SIN2, SIN3, SIN4,
     1                   SINFI, NSOUT, NINFO, SOUT1, SOUT2,
     2                   SOUT3, SOUT4, SINFO, NSUBS, IDXSUB,
     3                   ITYPE, NINT, INT, NREAL, REAL, IDS,
     4                   NPO, NBOPST, NIWORK, IWORK, NWORK,
     5                   WORK, NSIZE, SIZE, INTSIZ )
C
C   Simulation einer Gasturbine:
C   Das Unterprogramm USRGT geht davon aus, dass alle in Aspen unter
C   COMPONENTS angegebenen Komponenten am die GT durchfliessenden
C   Strom beteiligt sind. (Stoffwerte fuer Eingangszustand)
C
C
```

```
C     REAL(1):       Austrittsdruck          [bar]
C     REAL(2):       polytroper Wirkungsgrad [-]
C
C
C
```

⋮

Der Vereinbarungsteil entspricht dem des bereits beschriebenen Fortran-Unterprogramms USRDRV (dort: Zeilen 8 bis 78).

⋮

```
C
C
C
C
      REAL*8 T, P, Y(1:NC), PHI, HMX, SMX, GMX, VMX,
     1       DPHI, DHMX, DSMX, DGMX, DVMX
      INTEGER N, IDX(1:NC), KDIAG, KBASE, KPHI, KH, KS, KG, KV, KER
C
C
C
      REAL*8 RM, R, M, CP, KAPPA, PI, PAUS
      INTEGER I
C
C
C
10    FORMAT (1X,'Austrittsdruck:          ',f10.2,'   bar')
20    FORMAT (1X,'Polytroper Wirkungsgrad: ',f10.2)
30    FORMAT (1X,'Druckverhaeltnis:        ',f12.4)
40    FORMAT (1X,'Gaskonstante:            ',f12.4,' kJ/kg-K')
50    FORMAT (1X,'DHMX:                    ',f10.2,'   J/kmol-K')
60    FORMAT (1X,'cp-Wert:                 ',f12.4,' kJ/kg-K')
70    FORMAT (1X,'Kappa:                   ',f12.4)
80    FORMAT (1X)
C
      DO 100 I=1,NC+9
      SOUT1(I)=SIN1(I)
100   CONTINUE
C
C   komplette Uebergabe der Eingangsgroessen an den Ausgang
C
      WRITE (NHSTRY,80)
      WRITE (NHSTRY,80)
      WRITE (NHSTRY,10) REAL(1)
      WRITE (NHSTRY,20) REAL(2)
      WRITE (NHSTRY,80)
C
      T=SIN1(NC+2)
      P=SIN1(NC+3)
      DO 110 I=1,NC
```

```
      Y(I)=SIN1(I)/SIN1(NC+1)
110   CONTINUE
      N=NC
      DO 120 I=1,NC
      IDX(I)=I
120   CONTINUE
      KDIAG=3
      KBASE=1
      KPHI=0
      KH=3
      KS=1
      KG=0
      KV=1
C
      CALL VMTHRM (T, P, Y, N, IDX, NBOPST, KDIAG, KBASE, KPHI,
     1             KH, KS, KG, KV, PHI, HMX,
     2             SMX, GMX, VMX, DPHI, DHMX, DSMX, DGMX, DVMX, KER)
C
C   T(I), P(I), Y(I), N(I), IDX(I), NBOPST(I), KDIAG(I), KBASE(I),
C   KPHI(I), KH(I), KS(I), KG(I), KV(I)
C   PHI(O), HMX(O), SMX(O), GMX(O), VMX(O), DPHI(O), DHMX(O),
C   DSMX(O), DGMX(O), DVMX(O), KER(O)
C
C   VMTHRM: Berechnung Stoffwerte (DHMX) fuer Gasgemisch
C
      PAUS=REAL(1)*1.E+5
C
C   REAL(1): Austrittsdruck in bar
C   PAUS:    Austrittsdruck in N/m*m
C
      PI=SIN1(NC+3)/PAUS
      RM=8.3143
      M=SIN1(NC+9)
      R=RM/M
      CP=DHMX/(1000.*M)
      KAPPA=1/(1-R/CP)
C
      WRITE (NHSTRY,30) PI
      WRITE (NHSTRY,40) R
      WRITE (NHSTRY,50) DHMX
      WRITE (NHSTRY,60) CP
      WRITE (NHSTRY,70) KAPPA
      WRITE (NHSTRY,80)
C
      T=SIN1(NC+2)*((1/PI)**(R*REAL(2)/CP))
      P=PAUS
      DO 130 I=1,NC
      Y(I)=SIN1(I)/SIN1(NC+1)
130   CONTINUE
      N=NC
      DO 140 I=1,NC
      IDX(I)=I
```

```
181 140   CONTINUE
182       KDIAG=3
183       KBASE=1
184       KPHI=0
185       KH=1
186       KS=1
187       KG=0
188       KV=1
189 C
190       CALL VMTHRM (T, P, Y, N, IDX, NBOPST, KDIAG, KBASE, KPHI,
191      1             KH, KS, KG, KV, PHI, HMX,
192      2             SMX, GMX, VMX, DPHI, DHMX, DSMX, DGMX, DVMX, KER)
193 C
194 C  VMTHRM: Berechnung Enthalpie (HMX), Entropie (SMX) und mol.
195 C          Volumen (VMX) fuer Gasgemisch
196 C
197       SOUT1(NC+2)=T
198       SOUT1(NC+3)=P
199       SOUT1(NC+4)=HMX/SIN1(NC+9)
200       SOUT1(NC+7)=SMX/SIN1(NC+9)
201       SOUT1(NC+8)=SIN1(NC+9)/VMX
202 C
203       RETURN
240       END
```

Nach den üblichen Unterprogrammdeklarationen (Zeile 1 bis 101) beginnt der eigentliche Berechnungsteil:
Nach der vorläufig kompletten Übergabe der Eingangsgrößen SIN1 an die Ausgangsgrößen SOUT1 (Zeile 114 bis 116), werden über einen Unterprogrammaufruf Stoffwerte aus der ASPEN-Datenbank eingelesen. Hiermit kann jetzt die Ausgangstemperatur nach Gleichung (1) berechnet werden (Zeile 173). Mit der neuen Temperatur können nun nach einer erneuten Nutzung der ASPEN-Datenbank (Zeile 190 bis 192) die zugehörigen Stoffwerte Enthalpie, Entropie und Dichte neben der Temperatur und dem vorzugebenden Turbinenaustrittsdruck (Zeile 197 und 198) an den Ausgang übergeben werden (Zeile 199 bis 201).

Eine weitere Anwendung, die sich z. B. für die in dieser Arbeit durchgeführten Konvergenzanalysen als sehr nützlich erwiesen hat, ist in folgendem Listing beschrieben. Aufgabe der Subroutine ist es, Stromzustandsgrößen in eine Datei zu schreiben (Zeile 87), so daß nach vollständig durchgeführten Simulationsberechnungen diese Datei bestimmte, beliebig wählbare Zustandsgrößen des jeweiligen Stromes für jeden durchgeführten Iterationsschritt enthält. Sie kann dann beispielsweise für die Auswertung der Konvergenzverhältnisse mittels externer Grafikprogramme weiterverwendet werden.
Das Unterprogramm beeinflußt die Stromzustandsgrößen nicht, sondern übergibt die Eingangsgrößen unverändert an den Ausgang (Zeile 90 bis 92).

```
  1       SUBROUTINE USRPRN (NSIN, NINFI, SIN1, SIN2, SIN3, SIN4,
  2      1                  SINFI, NSOUT, NINFO, SOUT1, SOUT2,
  3      2                  SOUT3, SOUT4, SINFO, NSUBS, IDXSUB,
  4      3                  ITYPE, NINT, INT, NREAL, REAL, IDS,
  5      4                  NPO, NBOPST, NIWORK, IWORK, NWORK,
```

```
 6     5                  WORK, NSIZE, SIZE, INTSIZ )
 7 C
```

⋮

Der Vereinbarungsteil entspricht dem des bereits beschriebenen Fortran-Unterprogramms USRDRV (dort ebenfalls: Zeilen 8 bis 78).

⋮

```
79 C
80 C
81 C
82       INTEGER I
83 C
84 C
85 10    FORMAT (1X,f10.6)
86       OPEN (UNIT=100,FILE='templist',STATUS='UNKNOWN',ACCESS='APPEND')
87       WRITE (UNIT=100,FMT=10) SIN1(NC+2)
88       CLOSE (UNIT=100,STATUS='KEEP')
89 C
90       DO 100 I=1,NC+9
91       SOUT1(I)=SIN1(I)
92 100   CONTINUE
93 C
94 C  komplette Uebergabe der Eingangsgroessen an den Ausgang
95 C
96       RETURN
97       END
```

5.2 Fortran-Blocks

Neben der Programmierung von kompletten einzubindenden Fortran-Unterprogrammen besteht auch die Möglichkeit, durch Einfügen von Fortran-Blocks in den ASPEN-Code Einfluß auf die Stromzustandsgrößen (oder beliebige andere Systemvariablen) zu nehmen. Um die Einhaltung von Massen- und Energiebilanzen hat sich der Anwender hier allerdings grundsätzlich selbst zu kümmern.

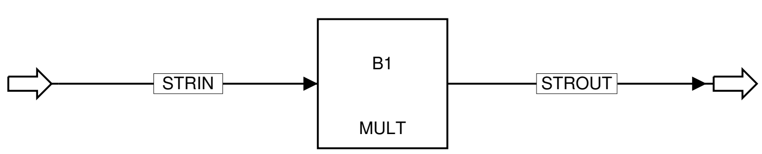


Abbildung 7: Schaltschema Druckverlustsimulation durch Fortranblock

Simulation mit Fortran-Blocks soll an einem Beispiel (siehe Abb. 7) gezeigt werden, in dem der Druckverlust eines Stromes (hier: Strom nach einem Block, der die Stoffstromgrößen unverändert durchreicht (Zeile 26 und 27)) durch seinen absoluten Betrag

($\Delta p = 10^4$ Pa) vorgegeben wird (Zeile 34).
Nach der den üblichen Konventionen genügenden Strukturbeschreibung (Zeile 1 bis 27) folgt der Fortranblock:
Nach Angaben, auf welche Variablen zugegriffen werden soll (Zeile 30 bis 33), können beliebige mit ‚F' gekennzeichnete Fortranzeilen eingefügt werden (hier: Vorgabe des Differenzdruckes und Berechnung des neuen Druckes (Zeile 34 und 35)). Anschließend sind Aussagen zu treffen, welche Variablen für diesen Fortran-Block als Eingangs- bzw. Ausgangsgrößen dienen (Zeile 36 und 37) bzw. wann die Fortranzeilen auszuwerten sind.

```
 1  TITLE "FORTRANBLOCK (BENUTZERDEFINIERT)"
 2
 3  IN-UNITS SI
 4
 5  OUT-UNITS SI PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C
 6
 7  DEF-STREAMS CONVEN ALL
 8
 9  DATABANKS ASPENPCD
10
11  PROP-SOURCES ASPENPCD
12
13  COMPONENTS
14      WASSER H2O WASSER
15
16  FLOWSHEET
17      BLOCK B1 IN=STRIN OUT=STROUT
18
19  PROPERTIES SYSOP12
20
21  STREAM STRIN
22      SUBSTREAM MIXED TEMP=100 <C> PRES=10 <BAR> MASS-FLOW=1  &
23          NPHASE=1
24      MASS-FRAC WASSER 1
25
26  BLOCK B1 MULT
27      PARAM FACTOR=1
28
29  FORTRAN USR1
30      DEFINE PVOR STREAM-VAR STREAM=STROUT SUBSTREAM=MIXED  &
31          VARIABLE=PRES
32      DEFINE PNACH STREAM-VAR STREAM=STROUT SUBSTREAM=MIXED  &
33          VARIABLE=PRES
34  F     PDIFF=10000
35  F     PNACH=PVOR-PDIFF
36      READ-VARS PVOR
37      WRITE-VARS PNACH
```

ASPEN erzeugt eine Ausgabedatei, die nachfolgenden *Stream Report* enthält:

```
STRIN STROUT
------------

STREAM ID               STRIN      STROUT
FROM :                  ----       B1
TO   :                  B1         ----

SUBSTREAM: MIXED
PHASE:                  VAPOR      VAPOR
COMPONENTS: KMOL/SEC
  WASSER              5.5509-02  5.5509-02
TOTAL FLOW:
  KMOL/SEC            5.5509-02  5.5509-02
  KG/SEC                 1.0000     1.0000
  CUM/SEC                1.6730     1.6730
STATE VARIABLES:
  TEMP   C             100.0000   100.0000
  PRES   BAR            10.0000     9.9000
  VFRAC                  1.0000     1.0000
  LFRAC                  0.0        0.0
  SFRAC                  0.0        0.0
ENTHALPY:
  J/KMOL             -2.3969+08 -2.3969+08
  J/KG               -1.3305+07 -1.3305+07
  WATT               -1.3305+07 -1.3305+07
ENTROPY:
  J/KMOL-K           -3.7288+04 -3.7288+04
  J/KG-K             -2069.8574 -2069.8574
DENSITY:
  KMOL/CUM            3.3179-02  3.3179-02
  KG/CUM                 0.5977     0.5977
AVG MW                  18.0150    18.0150
```

Der durch den Fortran-Block USR1 reduzierte Druck nimmt hinter dem Block B1 (MULT) den Wert 9,9 bar an. Alle anderen Zustandsgrößen bleiben unbeeinflußt.

6 Weitere ASPEN-Funktionen

Zusätzliche hilfreiche ASPEN-Funktionen, die für das Aufstellen einer vollständigen, in sich konsistenten Eingabedatei aber grundsätzlich nicht notwendig sind, sollen im folgenden Kapitel erörtert werden.

6.1 Case-Study

Die Durchführung von Fallstudien erlaubt die ASPEN-Funktion CASE-STUDY.
Erläutert werden soll dies an folgendem Beispiel einer Dampfturbine (siehe Abb. 8):

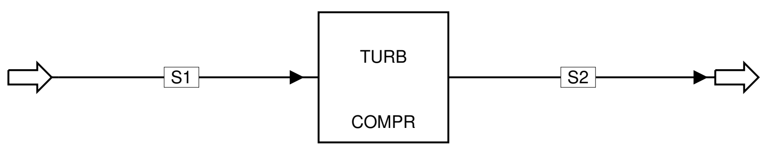


Abbildung 8: Schaltschema Dampfturbine

```
IN-UNITS SI

OUT-UNITS SI PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C

DEF-STREAMS CONVEN ALL

DATABANKS ASPENPCD

PROP-SOURCES ASPENPCD

COMPONENTS
    WASSERD H2O WASSERD

FLOWSHEET
    BLOCK TURB IN=S1 OUT=S2

PROPERTIES SYSOP12

STREAM S1
    SUBSTREAM MIXED TEMP=550 <C> PRES=125 <BAR> MASS-FLOW=10
    MASS-FRAC WASSERD 1

BLOCK TURB COMPR
    PARAM TYPE=ISENTROPIC PRES=0.05 <BAR> SEFF=0.7948806  &
        NPHASE=2

```

```
27  CASE-STUDY
28      VARY BLOCK-VAR BLOCK=TURB VARIABLE=PRES SENTENCE=PARAM
29      CASE 1 5000
30      CASE 2 10000
31      CASE 3 15000
```

Die ASPEN-Eingabedatei besitzt die bekannte Struktur, wobei zusätzlich der Absatz CASE-STUDY (Zeile 27 bis 31) eingefügt wurde. Nach Definition der Variable, die verändert werden soll (Zeile 28), werden die konkreten Zahlenwerte für die einzelnen Fälle, die zusätzlich zum eigentlichen Listingwert betrachtet werden sollen, vorgegeben (Zeile 29 bis 31) (Eine Vorgabe von Anfangs- und Endwert mit zugehöriger Schrittweite für die Zwischenwerte ist nicht möglich — die Zahlenwerte für die verschiedenen Fälle sind explizit anzugeben.). Zu beachten ist hierbei, daß nur Blockparameter oder Größen der Eingangsströme, also Daten, die nicht iterativ berechnet werden müssen, vorgegeben werden können[36].
In unserem Beispiel nimmt der Blockparameter Turbinenaustrittsdruck neben dem Wert $0,05$ bar nacheinander die Werte $0,10$ bar und $0,15$ bar an. ASPEN erzeugt hieraus in seiner Ausgabedatei für jeden durch CASE vorgegebenen Fall einen eigenen Bericht.

Den von ASPEN erzeugten *Stream Report* zeigt folgendes Listing:

```
S1 S2
-----

STREAM ID               S1         S2
FROM :                  ----       TURB
TO   :                  TURB       ----

SUBSTREAM: MIXED
PHASE:                  VAPOR      MIXED
COMPONENTS: KMOL/SEC
  WASSERD                 0.5550     0.5550
TOTAL FLOW:
  KMOL/SEC                0.5550     0.5550
  KG/SEC                 10.0000    10.0000
  CUM/SEC                 0.2798   253.7297
STATE VARIABLES:
  TEMP   C              550.0000    32.8991
  PRES   BAR            125.0000  5.0000-02
  VFRAC                   1.0000     0.8999
  LFRAC                   0.0        0.1000
  SFRAC                   0.0        0.0
ENTHALPY:
  J/KMOL              -2.2531+08 -2.4612+08
  J/KG                -1.2507+07 -1.3662+07
  WATT                -1.2507+08 -1.3662+08
```

[36] Es ist in unserem Kreislauf beispielsweise im Rahmen der Fallstudie nicht möglich, den Dampfgehalt des aus der Turbine austretenden Stromes S2 vorzugeben. (Der Kondensatordruck ist keine Ausgangsgröße im eigentlichen Sinne. Dadurch daß er als Blockparameter vorgegeben werden kann (Zeile 24), wird er zur „Eingangsgröße“.)

```
ENTROPY:
  J/KMOL-K           -5.0365+04 -3.2817+04
  J/KG-K             -2795.7051 -1821.6665
DENSITY:
  KMOL/CUM               1.9833  2.1877-03
  KG/CUM                35.7300  3.9412-02
AVG MW                  18.0150    18.0150


S1 S2
-----

STREAM ID               S1         S2
FROM :                  ----       TURB
TO   :                  TURB       ----

SUBSTREAM: MIXED
PHASE:                  VAPOR      MIXED
COMPONENTS: KMOL/SEC
  WASSERD                0.5550     0.5550
TOTAL FLOW:
  KMOL/SEC               0.5550     0.5550
  KG/SEC                10.0000    10.0000
  CUM/SEC                0.2798   134.2822
STATE VARIABLES:
  TEMP   C             550.0000    45.8316
  PRES   BAR           125.0000     0.1000
  VFRAC                  1.0000     0.9150
  LFRAC                  0.0     8.4999-02
  SFRAC                  0.0        0.0
ENTHALPY:
  J/KMOL             -2.2531+08 -2.4500+08
  J/KG               -1.2507+07 -1.3600+07
  WATT               -1.2507+08 -1.3600+08
ENTROPY:
  J/KMOL-K           -5.0365+04 -3.4437+04
  J/KG-K             -2795.7051 -1911.6013
DENSITY:
  KMOL/CUM               1.9833  4.1338-03
  KG/CUM                35.7300  7.4470-02
AVG MW                  18.0150    18.0150


S1 S2
-----

STREAM ID               S1         S2
FROM :                  ----       TURB
TO   :                  TURB       ----

SUBSTREAM: MIXED
PHASE:                  VAPOR      MIXED
```

```
COMPONENTS: KMOL/SEC
  WASSERD                0.5550     0.5550
TOTAL FLOW:
  KMOL/SEC               0.5550     0.5550
  KG/SEC                10.0000    10.0000
  CUM/SEC                0.2798    92.6655
STATE VARIABLES:
  TEMP   C             550.0000    53.9945
  PRES   BAR           125.0000     0.1500
  VFRAC                  1.0000     0.9244
  LFRAC                  0.0      7.5580-02
  SFRAC                  0.0        0.0
ENTHALPY:
  J/KMOL             -2.2531+08 -2.4431+08
  J/KG               -1.2507+07 -1.3561+07
  WATT               -1.2507+08 -1.3561+08
ENTROPY:
  J/KMOL-K           -5.0365+04 -3.5381+04
  J/KG-K             -2795.7051 -1963.9927
DENSITY:
  KMOL/CUM               1.9833  5.9903-03
  KG/CUM                35.7300     0.1079
AVG MW                  18.0150    18.0150
```

Für die verschiedenen Kondensatordrücke werden in der Ausgabedatei alle Zustandsgrößen von Eingangsstrom S1 und Ausgangsstrom S2 tabelliert.
Man erkennt hier beispielsweise, wie mit steigendem Kondensatordruck (0,05 bar $\rightarrow$ 0,15 bar) die Temperatur von S2 steigt ($32,9°\mathrm{C} \rightarrow 54,0°\mathrm{C}$), die Enthalpie größer wird ($-1,366 \cdot 10^7 \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{kg}} \rightarrow -1,356 \cdot 10^7 \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{kg}}$) und auch der Dampfgehalt zunimmt (0,900 $\rightarrow$ 0,924).

6.2 Sensitivity

Im Gegensatz zur Fallstudie mittels CASE-STUDY, bei der nach Modifikation einer Unabhängigen für jeden Wert ein eigener Bericht erzeugt wird, gibt es auch die Möglichkeit, die Abhängigkeit einer oder mehrerer beliebiger Variablen (oder auch deren formelmäßige Verknüpfung) von einer Vorgabegröße tabellarisch oder grafisch darzustellen. Während in der Fallstudie für die vorgegebenen Werte der einzelnen Fälle eigene Simulationsläufe durchgeführt werden, ist bei der SENSITIVITY-Analyse die Darstellung der Variablenabhängigkeiten unabhängig vom eigentlichen Simulationsrechengang — die Endergebnisse bleiben vom SENSITIVITY-Absatz unbeeinflußt.
Veranschaulicht werden soll das an derselben Dampfturbine (Abb. 8) wie in der Fallstudie (Kapitel 6.1): Es sollen die Abhängigkeiten sowohl des Enthalpiegefälles als auch der Abdampfnässe vom Kondensatordruck aufgezeigt werden.

Der Sensitivity-Block ist wie folgt aufgebaut:
Nach Angabe der zu verwendenden Variablen (Zeile 27 bis 32) wird bestimmt, daß die Enthalpiedifferenz und die Abdampfnässe aufzutragen sind (Zeile 33 und 34). (Hier sind auch kompliziertere Terme als Ordinatenwerte möglich.) Als unabhängige Variable dient der Kondensatordruck (Zeile 35). Er soll in 0,005 bar-Schritten Werte zwischen 0,05 bar und 0,15 bar annehmen (Zeile 36).

```
IN-UNITS SI

DEF-STREAMS CONVEN ALL

DATABANKS ASPENPCD

PROP-SOURCES ASPENPCD

COMPONENTS
    WASSERD H2O WASSERD

FLOWSHEET
    BLOCK TURB IN=S1 OUT=S2

PROPERTIES SYSOP12

STREAM S1
    SUBSTREAM MIXED TEMP=550 <C> PRES=125 <BAR> MASS-FLOW=10
    MASS-FRAC WASSERD 1

BLOCK TURB COMPR
    PARAM TYPE=ISENTROPIC PRES=0.05 <BAR> SEFF=0.7948806  &
        NPHASE=2

SENSITIVITY SENS1
    PARAM BASE-CASE=NO
    DEFINE H2 STREAM-VAR STREAM=S2 SUBSTREAM=MIXED  &
        VARIABLE=MASS-ENTHALP
    DEFINE H1 STREAM-VAR STREAM=S1 SUBSTREAM=MIXED  &
        VARIABLE=MASS-ENTHALP
    DEFINE X2 STREAM-VAR STREAM=S2 SUBSTREAM=MIXED  &
        VARIABLE=VFRAC
    TABULATE 1 "H1-H2"
    TABULATE 2 "X2"
    VARY BLOCK-VAR BLOCK=TURB VARIABLE=PRES SENTENCE=PARAM
    RANGE LOWER="5000" UPPER="15000" INCR="500"
```

Nachfolgend ein Auszug aus der Ausgabedatei:

```
----------------------------------------
!  VARY 1    !  H1-H2     !  X2        !
!  TURB      !            !            !
!  PARAM     !            !            !
!  PRES      !            !            !
!            !            !            !
!  N/SQM     !            !            !
!            !            !            !
!============!============!============!
!* 5000.0000 !  1.1552+06 !     0.8999 !
!* 5500.0000 !  1.1469+06 !     0.9019 !
!* 6000.0000 !  1.1392+06 !     0.9037 !
```

```
!* 6500.0000 !  1.1321+06 !     0.9054 !
!* 7000.0000 !  1.1255+06 !     0.9070 !
!------------+------------+------------!
!* 7500.0000 !  1.1192+06 !     0.9085 !
!* 8000.0000 !  1.1134+06 !     0.9100 !
!* 8500.0000 !  1.1078+06 !     0.9113 !
!* 9000.0000 !  1.1026+06 !     0.9126 !
!* 9500.0000 !  1.0976+06 !     0.9138 !
!------------+------------+------------!
!* 1.0000+04 !  1.0929+06 !     0.9150 !
!* 1.0500+04 !  1.0883+06 !     0.9161 !
!* 1.1000+04 !  1.0839+06 !     0.9171 !
!* 1.1500+04 !  1.0798+06 !     0.9181 !
!* 1.2000+04 !  1.0757+06 !     0.9191 !
----------------------------------------
```

```
----------------------------------------
!  VARY 1    !  H1-H2     !  X2        !
!  TURB      !            !            !
!  PARAM     !            !            !
!  PRES      !            !            !
!            !            !            !
!  N/SQM     !            !            !
!            !            !            !
!============!============!============!
!* 1.2500+04 !  1.0719+06 !     0.9201 !
!* 1.3000+04 !  1.0681+06 !     0.9210 !
!* 1.3500+04 !  1.0645+06 !     0.9219 !
!* 1.4000+04 !  1.0610+06 !     0.9227 !
!* 1.4500+04 !  1.0577+06 !     0.9236 !
!------------+------------+------------!
!* 1.5000+04 !  1.0544+06 !     0.9244 !
----------------------------------------


S1 S2
-----

STREAM ID                S1         S2
FROM :                   ----       TURB
TO   :                   TURB       ----

SUBSTREAM: MIXED
PHASE:                   VAPOR      MIXED
COMPONENTS: KMOL/SEC
  WASSERD                  0.5550     0.5550
TOTAL FLOW:
  KMOL/SEC                 0.5550     0.5550
  KG/SEC                  10.0000    10.0000
  CUM/SEC                  0.2798    92.6655
STATE VARIABLES:
  TEMP   K               823.1500   327.1445
  PRES   N/SQM         1.2500+07  1.5000+04
  VFRAC                    1.0000     0.9244
  LFRAC                    0.0     7.5580-02
  SFRAC                    0.0        0.0
ENTHALPY:
  J/KMOL              -2.2531+08 -2.4431+08
  J/KG                -1.2507+07 -1.3561+07
  WATT                -1.2507+08 -1.3561+08
ENTROPY:
  J/KMOL-K            -5.0365+04 -3.5381+04
  J/KG-K              -2795.7051 -1963.9943
DENSITY:
  KMOL/CUM                 1.9833  5.9903-03
  KG/CUM                  35.7300     0.1079
AVG MW                    18.0150    18.0150
```

Die Sterne in der Tabelle vor den Druckangaben bringen die Warnung von ASPEN zum Ausdruck, daß sich der Zustand des Turbinenaustrittstroms im Naßdampfgebiet befindet.

Die tabellarisch angegebene Abhängigkeit kann auch, wie in Abb. 9 am Beispiel des Enthalpiegefälles gezeigt, grafisch dargestellt werden. Hier wurde das Diagramm mit einem ModelManager-Tool[37] erzeugt.

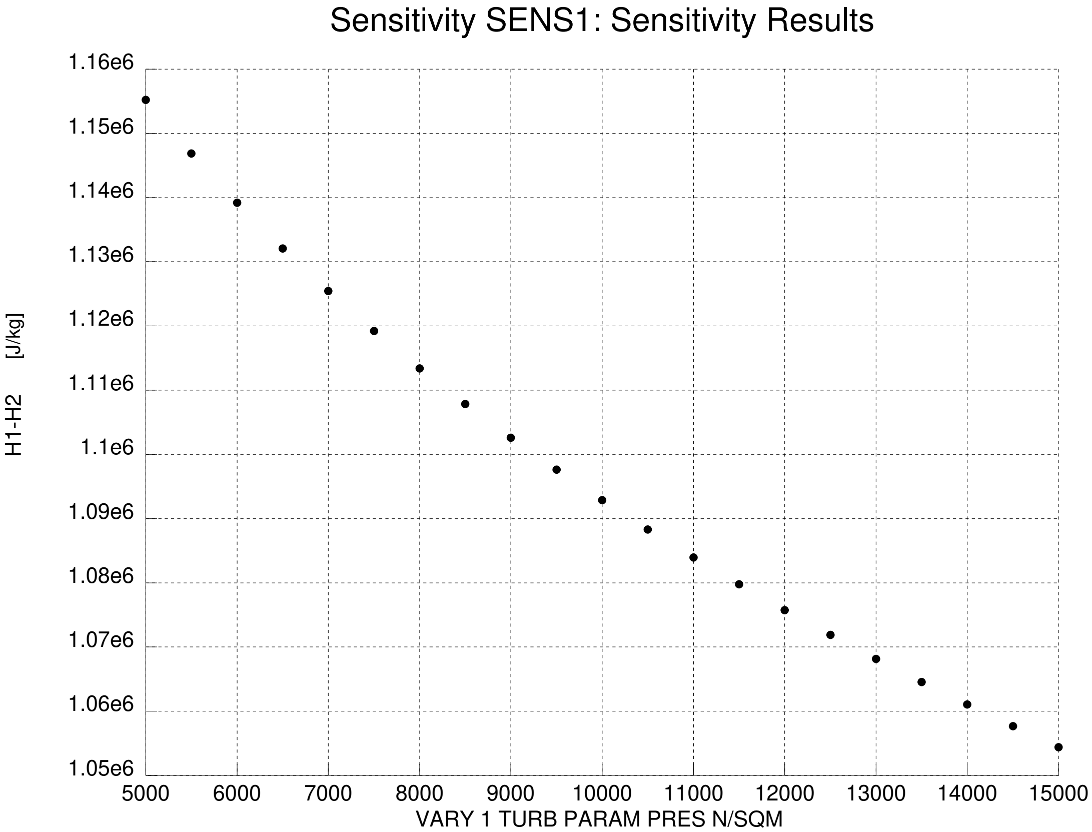


Abbildung 9: $\Delta h_T, p_{\mathrm{Kond}}$-Diagramm aus Sensitivity-Analyse

6.3 Optimization

Am Beispiel eines einfachen nach dem Joule-Prozeß ablaufenden Gasturbinenkreislaufes (h,s- bzw. T,s-Diagramm siehe Abb. 10) soll die ASPEN-Funktion OPTIMIZATION erläutert werden.

Für einen auf den beiden Druckniveaus p_1 und p_2 ablaufenden Joule-Prozeß mit dem Druckverhältnis $\Pi = \frac{p_2}{p_1}$ soll bei vorgegebener unterer und oberer Temperatur (T_1 und T_3) sowie festem Druck p_1 dasjenige Druckverhältnis Π_{extr} gefunden werden, für das maximale spezifische Nutzarbeit w_t erzeugt wird. Vorausgesetzt werden sollen hierbei perfektes Gas (ideales Gas mit c_p = const) und isentrope Zustandsänderungen in Verdichter und Turbine. Analytisch ergibt sich die spezifische Nutzarbeit zu

[37] Funktion *Plot* aus dem *Forms.Edit.Services*-Menü; siehe [11], S. 2-47f

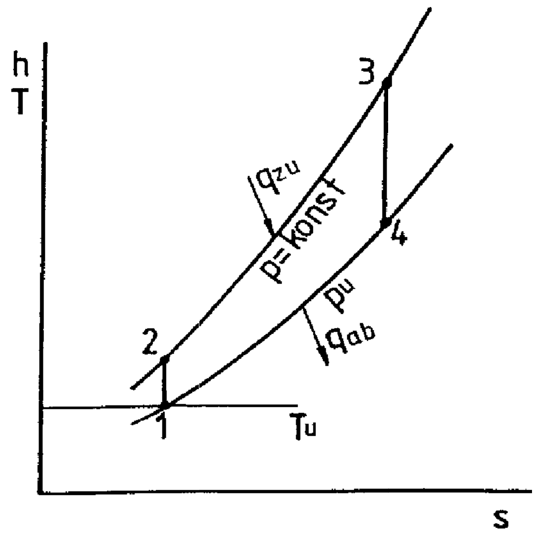


Abbildung 10: h,s-Diagramm Joule-Prozeß

$$w_t = (h_3 - h_4) - (h_2 - h_1) = c_p \cdot (T_1 - T_2 + T_3 - T_4). \tag{2}$$

Mit den Isentropengleichungen

$$T_2 = T_1 \cdot (\frac{p_2}{p_1})^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} \tag{3}$$

und

$$T_4 = T_3 \cdot (\frac{p_4}{p_3})^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} = T_3 \cdot (\frac{p_1}{p_2})^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} \tag{4}$$

folgt die spezifische Nutzarbeit zu

$$w_t = c_p \cdot (T_1(1 - \Pi^{\frac{\kappa-1}{\kappa}}) + T_3(1 - \frac{1}{\Pi^{\frac{\kappa-1}{\kappa}}})). \tag{5}$$

Ein Extremwert ergibt sich dann aus der notwendigen Bedingung

$$\frac{\partial w_t}{\partial \Pi}\Big|_{\Pi_{\text{extr}}} \stackrel{!}{=} 0 \tag{6}$$

zu

$$\Pi_{\text{extr}} = (\frac{T_3}{T_1})^{\frac{\kappa}{2(\kappa-1)}}. \tag{7}$$

Unter Annahme isentroper Zustandsänderungen $1 \rightarrow 2$ und $3 \rightarrow 4$ ergibt sich damit nach Einsetzen von Gleichung (7) in Gleichung (3) bzw. (4), daß die Temperaturen T_2 und T_4 für den Extremfall auf gleichem Niveau liegen, nämlich $T_2 = T_4 = \sqrt{T_1 \cdot T_3}$, für unseren Fall also mit $T_1 = 300$ K und $T_3 = 1300$ K:

$$T_2 = T_4 = \sqrt{300 \cdot 1300}\ \text{K} = 624,5\ \text{K}.$$

Eine ASPEN-Routine zur (numerischen) Lösung dieses Problems zeigt folgendes Listing:

```
TITLE "Gasturbinen-Anlage mit maximaler Nutzleistung"

IN-UNITS SI

DEF-STREAMS CONVEN ALL

DATABANKS ASPENPCD

PROP-SOURCES ASPENPCD

COMPONENTS
    WASSER H2O WASSER /
    SAUER O2 SAUER /
    STICK N2 STICK

FLOWSHEET
    BLOCK VERD IN=S1 OUT=S2
    BLOCK BRENNK IN=S2 OUT=S3
    BLOCK TURB IN=S3 OUT=S4
    BLOCK KUEHL IN=S4 OUT=S5

PROPERTIES SYSOP0

STREAM S1
    SUBSTREAM MIXED TEMP=300 PRES=1 <BAR> MASS-FLOW=1
    MASS-FRAC WASSER 0.0060 / SAUER 0.2300 / STICK 0.7640

BLOCK BRENNK HEATER
    PARAM TEMP=1300 PRES=0 NPHASE=1

BLOCK KUEHL HEATER
    PARAM TEMP=300 PRES=1 <BAR> NPHASE=1

BLOCK TURB COMPR
    PARAM TYPE=ISENTROPIC PRES=1 <BAR> SEFF=1

BLOCK VERD COMPR
    PARAM TYPE=ISENTROPIC PRES=1.5 <BAR> SEFF=1

OPTIMIZATION OP1
    DEFINE H1 STREAM-VAR STREAM=S1 SUBSTREAM=MIXED  &
        VARIABLE=MASS-ENTHALP
    DEFINE H2 STREAM-VAR STREAM=S2 SUBSTREAM=MIXED  &
        VARIABLE=MASS-ENTHALP
    DEFINE H3 STREAM-VAR STREAM=S3 SUBSTREAM=MIXED  &
        VARIABLE=MASS-ENTHALP
    DEFINE H4 STREAM-VAR STREAM=S4 SUBSTREAM=MIXED  &
        VARIABLE=MASS-ENTHALP
    MAXIMIZE "H3-H2-H4+H1"
```

```
50      VARY BLOCK-VAR BLOCK=VERD VARIABLE=PRES SENTENCE=PARAM
51      LIMITS "1E+5" "100E+5"
52
53  CONVERGENCE $OLVER01 SQP
54      OPTIMIZE OPTID=OP1
55      PARAM TOL=0.0001
```

Nach den üblichen Deklarationen (Zeile 1 bis 38) wird in Zeile 40 bis 51 die Optimierungsaufgabe gestellt: Nach Definition der Variablen, auf die zugegriffen werden soll (H1 bis H4 entsprechend den Enthalpien an den vier Orten) in Zeile 41 bis 48, wird die Minimierungs- bzw. Maximierungsaufgabe gestellt (Zeile 49), wobei auch hier angegeben werden muß, welche Größe variiert werden soll (Zeile 50) und welche Grenzen für die zu variierende Größe einzuhalten sind (Zeile 51).

In unserem Beispiel soll der Unterschied zwischen gewonnener und aufgewendeter Enthalpiedifferenz möglichst groß werden, wobei der Verdichteraustrittsdruck innerhalb der Grenzen 10^5 Pa $\leq p_2 \leq 10^7$ Pa verändert wird. (Gleichungs- bzw. Ungleichungsnebenbedingungen (CONSTRAINTs) werden in diesem Beispiel nicht verwendet.)

ASPEN liefert in der Ausgabedatei tatsächlich nahezu gleiche Temperaturen $T_2 = 647,1$ K und $T_4 = 644,1$ K:

```
                                STREAM SECTION

S1 S2 S3 S4 S5
--------------

STREAM ID               S1         S2         S3         S4         S5
FROM :                  ----       VERD       BRENNK     TURB       KUEHL
TO   :                  VERD       BRENNK     TURB       KUEHL      ----

SUBSTREAM: MIXED
PHASE:                  VAPOR      VAPOR      VAPOR      VAPOR      VAPOR
COMPONENTS: KMOL/SEC
  WASSER              3.3306-04  3.3306-04  3.3306-04  3.3306-04  3.3306-04
  SAUER               7.1877-03  7.1877-03  7.1877-03  7.1877-03  7.1877-03
  STICK               2.7273-02  2.7273-02  2.7273-02  2.7273-02  2.7273-02
TOTAL FLOW:
  KMOL/SEC            3.4794-02  3.4794-02  3.4794-02  3.4794-02  3.4794-02
  KG/SEC                 1.0000     1.0000     1.0000     1.0000     1.0000
  CUM/SEC                0.8678     0.1188     0.2388     1.8632     0.8678
STATE VARIABLES:
  TEMP   K             300.0000   647.0810  1300.0000   644.0896   300.0000
  PRES   N/SQM        1.0000+05  1.5746+06  1.5746+06  1.0000+05  1.0000+05
  VFRAC                  1.0000     1.0000     1.0000     1.0000     1.0000
  LFRAC                  0.0        0.0        0.0        0.0        0.0
  SFRAC                  0.0        0.0        0.0        0.0        0.0
ENTHALPY:
  J/KMOL             -2.2623+06  8.1226+06  2.9556+07  8.0301+06 -2.2623+06
  J/KG               -7.8715+04  2.8262+05  1.0284+06  2.7940+05 -7.8715+04
  WATT               -7.8715+04  2.8262+05  1.0284+06  2.7940+05 -7.8715+04
ENTROPY:
  J/KMOL-K            4531.6028  4531.6028  2.7307+04  2.7307+04  4531.6028
  J/KG-K               157.6718   157.6718   950.1325   950.1325   157.6718
DENSITY:
  KMOL/CUM            4.0091-02     0.2926     0.1456  1.8674-02  4.0091-02
  KG/CUM                 1.1522     8.4116     4.1869     0.5366     1.1522
AVG MW                  28.7407    28.7407    28.7407    28.7407    28.7407
```

Die ASPEN-Temperaturen nehmen etwa Werte um 20 K über den analytisch errechneten an. Dies ist sicherlich zurückzuführen auf die nicht zutreffende Annahme idealen Gases. Ein tabellarischer Vergleich zwischen den von ASPEN ermittelten Stoffwerten und denen idealen Gases in Kapitel 6.5 für eine nur unwesentlich andere Gaszusammensetzung zeigt, daß die Annahme nicht sehr genau ist.

6.4 Interaktive Simulation

Eine für die Programmierung von ASPEN sehr hilfreiche Funktion ist die der „Interaktiven Simulation". Sie wird eingeschaltet, indem in der ersten Befehlszeile einer ASPEN-Eingabedatei der Ausdruck ‚SIMULATE INTERACTIVE=YES' eingefügt wird.
Die interaktive Simulation übernimmt im wesentlichen die Funktion eines Debuggers. So können beispielsweise die Berechnungen angehalten, Breakpoints gesetzt, Variablen ange-

zeigt und verändert, die Eingabedatei selbst während der Simulation verändert, Sprünge durchgeführt oder Blöcke reinitialisiert werden[38].

6.5 Stoffwerte und Table Generation System

Zunächst soll in den Tabellen 1 bis 4 ein Vergleich zwischen Stoffwerten von Luft (Zusammensetzung: 79% N_2, 21% O_2), die von ASPEN, aus Tabellen des VDI-Wärmeatlas [15] und aus den Gleichungen für ideale Gase ermittelt wurden, angestellt werden. Unter ASPEN wurden willkürlich die *Option Sets* SYSOP1 (Chao-Seader) und SYSOP3 (Redlich-Kwong-Soave) zur Berechnung der Stoffwerte gewählt.

Tabelle 1: Stoffwerte für Luft

15°C; 1 bar	h $[\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}]$	s $[\frac{\text{kJ}}{\text{kg K}}]$	ρ $[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}]$	c_p $[\frac{\text{kJ}}{\text{kg K}}]$	Δh $[\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}]$ [39]	Δs $[\frac{\text{kJ}}{\text{kg K}}]$ [40]
ASPEN (SYSOP1)	-10,40	0,1084	1,2013	1,0168	0	0
ASPEN (SYSOP3)	-10,40	0,1083	1,2007	1,0173	0	0
VDI-Wärmeatlas	288,52	6,8308	1,2108	1,0066	0	0
Ideales Gas[41]	289,97	0,0538	1,2083	1,0063	0	0

Erkennbar ist hier eine relativ gute Übereinstimmung der ASPEN-Stoffwerte mit den im VDI-Wärmeatlas angegebenen (Von Bedeutung sind bei Enthalpie und Entropie nur die Differenzen, da nur dort die in Kapitel 2 beschriebene Nullpunktverschiebung kompensiert wird.).
Die ASPEN-Stoffwerte für die unterschiedlichen *Option Sets* unterscheiden sich nur unwesentlich voneinander.
Deutlich wird jedoch, daß für reale Gase die Annahme idealen Gases zu nicht mehr vernachlässigbaren Fehlern führen kann.

Für umfangreichere Stoffwertausgaben bietet ASPEN die Funktion TGS (*T*able

[38] Näheres hierzu in [5] bzw. in der Datei `iap.hlp`.

[39] $\Delta h = h - h(15°\text{C}; 1\text{ bar})$

[40] $\Delta s = s - s(15°\text{C}; 1\text{ bar})$

[41] $R = 287,22\ \frac{\text{J}}{\text{kg K}}$; $h_0 = h(T_0 = 273,15\text{ K})=0$; $s_0 = s(T_0 = 273,15\text{ K})=0$ und $p_0 = 1$ bar; $c_p = \overline{c_p} = \frac{1}{2}(c_p(0°\text{C}) + c_p(T)) = \text{const}$

Tabelle 2: Stoffwerte für Luft

15°C; 20 bar	h $[\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}]$	s $[\frac{\text{kJ}}{\text{kg K}}]$	ρ $[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}]$	c_p $[\frac{\text{kJ}}{\text{kg K}}]$	Δh $[\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}]$	Δs $[\frac{\text{kJ}}{\text{kg K}}]$
ASPEN (SYSOP1)	-15,06	-0,7706	24,2553	1,0507	-4,66	-0,8790
ASPEN (SYSOP3)	-14,92	-0,7729	24,0274	1,0599	-4,52	-0,8812
VDI-Wärmeatlas	283,96	5,9562	24,3960	1,0416	-4,56	-0,8746
Ideales Gas	300,92	-0,8066	24,1660	1,0443	10,95	-0,8604

Tabelle 3: Stoffwerte für Luft

1000°C; 1 bar	h [$\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}$]	s [$\frac{\text{kJ}}{\text{kg K}}$]	ρ [$\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$]	c_p [$\frac{\text{kJ}}{\text{kg K}}$]	Δh [$\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}$]	Δs [$\frac{\text{kJ}}{\text{kg K}}$]
ASPEN (SYSOP1)	1073,06	1,7094	0,2716	1,1684	1083,46	1,6010
ASPEN (SYSOP3)	1073,09	1,7094	0,2716	1,1683	1083,49	1,6011
VDI-Wärmeatlas	1365,00	8,4200	0,2734	1,1850	1076,48	1,5892
Ideales Gas	1394,74	1,5489	0,2735	1,0955	1104,77	1,4951

Tabelle 4: Stoffwerte für Luft

1000°C; 20 bar	h [$\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}$]	s [$\frac{\text{kJ}}{\text{kg K}}$]	ρ [$\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$]	c_p [$\frac{\text{kJ}}{\text{kg K}}$]	Δh [$\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}$]	Δs [$\frac{\text{kJ}}{\text{kg K}}$]
ASPEN (SYSOP1)	1074,08	0,8432	5,4127	1,1692	1084,48	0,7348
ASPEN (SYSOP3)	1074,79	0,8435	5,4084	1,1684	1085,19	0,7352
VDI-Wärmeatlas	1367,00	7,5590	5,4380	1,1870	1078,48	0,7282
Ideales Gas	1422,11	0,6885	5,4690	1,1170	1132,14	0,6347

*G*eneration *S*ystem) an. Sie erlaubt es (auch unabhängig von zu simulierenden Systemen), Stoffwerte für (nahezu) beliebige Stromzusammensetzungen und thermodynamische Zustände ausgeben zu lassen.
Dies sei an folgendem Beispiel erläutert: Für ein Rauchgas mit vorgegebener Zusammensetzung (Zeile 22) sollen die Zustandsgrößen Enthalpie h (HMX), Entropie s (SMX), Dichte ϱ (RHOMX) sowie spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck c_p (CPMX) und bei konstantem Volumen c_v (CVMX) ausgegeben werden (Zeile 17 und 18).
Hierfür soll die Temperatur von 300 K auf 1300 K mit einer Schrittweite von 50 K erhöht werden (Zeile 24 und 25).

```
1  TGS
2
3
4  IN-UNITS SI
5
6  DATABANKS ASPENPCD
7
8  PROP-SOURCES ASPENPCD
9
10 COMPONENTS
11     WASSER H2O WASSER /
12     SAUER O2 SAUER /
13     STICK N2 STICK
14
15 PROPERTIES SYSOP0
16
17 PROP-SET L1 HMX SMX RHOMX CPMX CVMX UNITS='KJ/KG' 'KJ/KG-K'  &
```

```
        'KG/CUM' SUBSTREAM=MIXED PHASE=V

PROP-TABLE T1 PROPS
    DESCRIPTION "STOFFWERTAUSGABE"
    MASS-FLOW WASSER 0 / SAUER 0.236 / STICK 0.7640
    STATE PRES=1 <BAR>
    VARY TEMP
    RANGE LOWER=300 UPPER=1300.0 INCR=50.0
    TABULATE "STOFFWERTE RAUCHGAS" PROPERTIES=L1
```

Die Ergebnisdatei enthält folgende Tabelle:

```
                              ++++++++++++++++++++++++
                              + STOFFWERTE RAUCHGAS +
                              ++++++++++++++++++++++++
```

TEMP K	HMX VAPOR KJ/KG	SMX VAPOR KJ/KG-K	RHOMX VAPOR KG/CUM	CPMX VAPOR KJ/KG-K	CVMX VAPOR KJ/KG-K
300.0000	1.8729	0.1592	1.1571	1.0124	0.7241
350.0000	52.5653	0.3154	0.9918	1.0156	0.7272
400.0000	103.4708	0.4514	0.8678	1.0209	0.7325
450.0000	154.6926	0.5720	0.7714	1.0282	0.7398
500.0000	206.3190	0.6808	0.6942	1.0370	0.7487
550.0000	258.4235	0.7801	0.6311	1.0472	0.7589
600.0000	311.0646	0.8717	0.5785	1.0585	0.7701
650.0000	364.2859	0.9569	0.5340	1.0704	0.7820
700.0000	418.1160	1.0367	0.4959	1.0828	0.7944
750.0000	472.5689	1.1118	0.4628	1.0953	0.8069
800.0000	527.6436	1.1829	0.4339	1.1076	0.8192
850.0000	583.3240	1.2504	0.4083	1.1194	0.8311
900.0000	639.5793	1.3147	0.3857	1.1305	0.8422
950.0000	696.3638	1.3761	0.3654	1.1406	0.8522
1000.0000	753.6169	1.4349	0.3471	1.1492	0.8609
1050.0000	811.2630	1.4911	0.3306	1.1562	0.8679
1100.0000	869.2118	1.5450	0.3155	1.1613	0.8729
1150.0000	927.3662	1.5967	0.3018	1.1645	0.8761
1200.0000	985.6368	1.6463	0.2892	1.1659	0.8775
1250.0000	1043.9354	1.6939	0.2777	1.1659	0.8776
1300.0000	1102.2339	1.7396	0.2670	1.1659	0.8776

Die unterschiedlichen Zustandsgrößen des Rauchgases werden zeilenweise für die verschiedenen Temperaturen ausgegeben. Neben konkreten Zahlenwerten[42] lassen sich hier auch schnell die Temperaturabhängigkeiten der einzelnen Stoffdaten tendenziell überblicken.

[42] Mit Hilfe von TGS-Durchläufen wurden beispielsweise auch die ASPEN-Stoffdaten der Tabellen 1 bis 4 ermittelt.

7 ModelManager

Der ModelManager leitet den ASPEN-Programmierer anhand eines Expertensystems und stellt ihm eine interaktive grafische Benutzeroberfläche bereit.
Er erleichtert dem Anwender die Arbeit mit ASPEN, indem er einerseits eine korrekte, vollständige und schnelle schrittweise Führung für die Entwicklung eines Simulationsflußbildes anbietet und andererseits wertvolle Hilfsmittel für die Ergebnisanalyse und die Erzeugung von Berichten, Plots (Beispiel: siehe Abb. 9) und Zeichnungen von Simulationsflußbildern (Beispiel: siehe Abb. 1) zur Verfügung stellt.
Simulationskommandos, die im ASPEN-Code noch als Befehle eingegeben werden müssen, können mit dem ModelManager jetzt komfortabel per Mausbedienung über Pull-Down-Menüs abgerufen werden. Zusätzlich wird eine Online-Hilfefunktion angeboten, die im wesentlichen Auszüge aus dem ASPEN-Handbuch [3] enthält.
Beispiele für das Hauptfenster und ein Eingabeformular unter der ModelManager-Oberfläche sind in den Abb. 11 und 12 zu sehen.

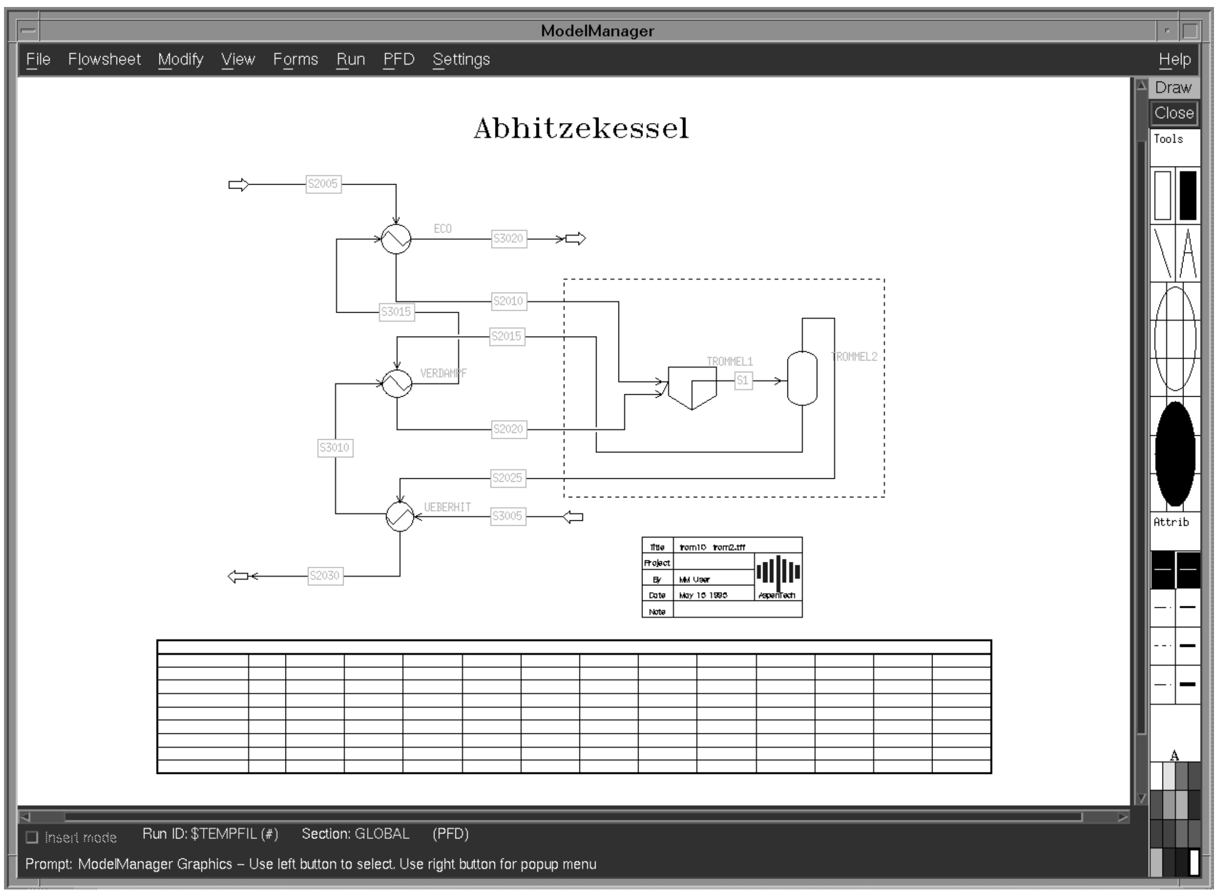


Abbildung 11: ModelManager-Oberfläche

Während der ModelManager automatisch die für die Simulation erforderliche für ASPEN verständliche Eingabedatei erzeugt, ist es grundsätzlich auch möglich, eine Eingabedatei per Editor im ASPEN-Format zu entwickeln und dann in den ModelManager zu

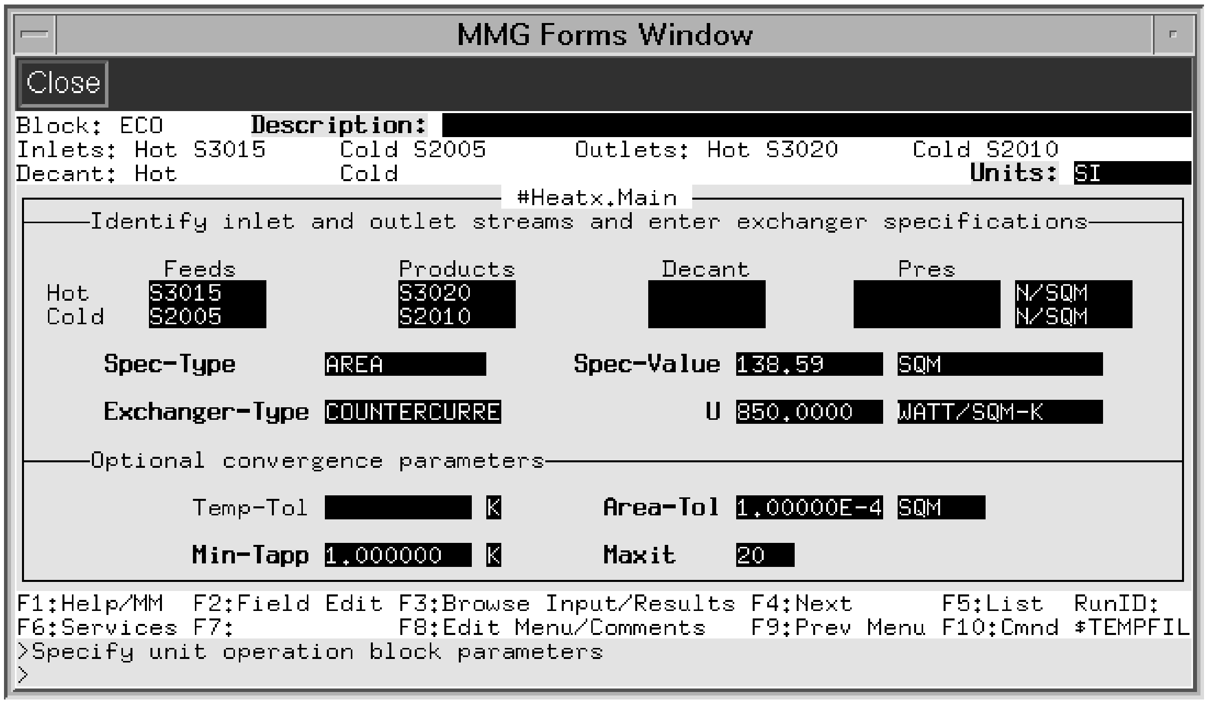


Abbildung 12: ModelManager-Eingabeformular

importieren[43].
Der ModelManager bietet zwei verschiedene Vorgehensweisen für die Erstellung einer ASPEN-Simulationsdatei und des zugehörigen Flußbildes:

- Es wird mit der Eingabe der Systemeinzelkomponenten auf grafischer Ebene begonnen. Der ModelManager fragt automatisch die für die Simulation erforderlichen Daten ab, oder

- die Zusammensetzung des Systems aus Einzelkomponenten wird in entsprechenden Formularen im ASPEN-Stil vorgegeben, woraufhin der ModelManager automatisch das zugehörige grafische Flußbild erzeugt[44].

Einzelne benutzerdefinierte, durch Fortranunterprogramme beschriebene Modelle (siehe Kapitel 5.1) können mit Hilfe des *Icon-Editors* (siehe [11], S. 2-45) grafisch dargestellt werden.

Ein weiteres Instrument zur Gestaltung grafischer Ausgabe liefert der sog. „PFD-Mode“. Einmal umgeschaltet in diesen Modus kann die grafische Ausgabe unabhängig von allen zukünftig vorgenommenen Formulareinträgen weiterbearbeitet werden. Hierzu stellt der ModelManager ein Grafikprogramm mit Funktionen wie z. B. Titelsymbol, Zeichnen von Rechtecken, Kreisen und Linien sowie Einfügen von Text zur Verfügung.

Es können sogar Tabellen in die Grafik integriert werden, die beispielsweise die

[43] Der Befehl auf Betriebssystemebene dazu lautet:
‚`aspenit name1 name2 /mmbackup`‘.
Er erzeugt aus der Eingabedatei `name1.inp` eine Backupdatei `name2.bkp`, die im ModelManager über Aufruf des *File.Import* Formulars eingeladen werden kann.

[44] Es muß nur noch durch Anklicken von ‚ALL‘ im *Place* Menü zur Anzeige gebracht werden.

Ergebnisdaten der einzelnen Ströme enthalten. Um das Tabellenformat den eigenen Bedürfnissen anpassen zu können, stellt der ModelManager eine eigene kleine „Programmiersprache“ zur Verfügung (siehe [11], Kapitel 5).

Ein Beispiel für eine solche TFF-Datei (*T*able *F*ormat *F*ile) stellt das folgende Listing dar, das neben der Ausgabe von deutschen Größenbezeichnungen auch auf die uns vertrauten Einheiten °C und bar für Temperatur und Druck umstellt[45]:

```
title=yes
stream-id-label="Strom"
display only format="%10.2f" substream-header=no
prop massfrac     prop-header="Massenanteil" format="%7.4f" &
                  comps-header="  @comps" mw=no &
                  normalize=yes ppm=1e-3 trace=1e-7 &
                  trace-label="---"
prop massflmx     prop-label="Massenstrom"   format="%8.3f" units="KG/SEC" &
                   units-label="kg/s"
prop temp         prop-label="Temperatur"    units="C"      units-label="C"
prop pres         prop-label="Druck"         units="BAR"    units-label="bar"
prop vfrac        prop-label="Dampfgehalt"   format="%9.3f" units-label="-"
prop hmx          prop-label="Enthalpie"     format="%10.2f" &
                   units="KJ/KG"  units-label="kJ/kg"
prop smx          prop-label="Entropie" format="%8.4f" units="KJ/KG-K" &
                   units-label="kJ/kgK"
prop rhomx        prop-label="Dichte"        units="KG/CUM" units-label="kg/m^3"
;
;
;   Arbeiten mit eigenen Tabellenformaten (z. B. fuer Tabellenerzeugung
;   im PFD-Mode):
;
;   - PFD-Mode einstellen
;   - TFF-File im Forms.Stream Summary Menu anwaehlen (Fuer Ergebnista-
;     belle muessen Ergebnisse (in name.sum-Datei) vorliegen und bereits
;     eingelesen worden sein!)
;   - Bei Tabellierung von Massenstroemen und Massenzusammensetzung von
;     Stroemen:
;     Aendern der standardmaessigen Einstellungen NOMASSFLOW und NOMASS-
;     FRAC in MASSFLOW und MASSFRAC im Forms.Edit Menu -> REPORT -> STREAM-
;     REPOR -> STANDARD
;   - GEN-TABL im Forms.Edit Menu -> Services
```

[45] Dieses Format wurde beispielsweise verwendet in den Tabellen der Abbildungen 1, 4 und 6.

8 Zusammenfassung und Ausblick

Das Simulationsprogramm ASPEN PLUS bietet dem Anwender neben vielen Blöcken zur Beschreibung verfahrenstechnischer Komponenten auch einige Modelle an, die für den Maschinenbau relevant sind. Dieser Vorrat kann durch Programmierung und Einbindung von Fortran-Unterprogrammen um Modelle erweitert werden, die den Bedürfnissen des Anwenders gerecht werden. Somit stellt ASPEN ein Programm dar, das auch für den energietechnischen Bereich attraktiv und dabei noch äußerst flexibel und ausbaufähig ist.
Die Tatsache, daß ASPEN bereits über sehr umfangreiche Stoffwertdatenbanken verfügt, macht es, wie am Abhitzekessel gezeigt, möglich, auch Systeme mit Strömen von verschiedener Stoffzusammensetzung zu simulieren, also z. B. Behandlung von Wasser- und Rauchgasseite in einem System.
ASPEN rechnet sequentiell, so daß gerade die Beschreibung der in der Energietechnik vorkommenden vermaschten Systeme kompliziert wird. In dieser Arbeit wurde am Beispiel einer einfachen vermaschten Anlage, die eine Verzweigung und eine Vereinigung enthält, gezeigt, daß ASPEN grundsätzlich den Umgang mit solchen Systemen bewältigt. Der Nachweis, daß ASPEN auch in der Lage ist, komplexere Systeme, also beispielsweise ein Dampfkraftwerk mit mehreren inneren Kreisen, erfolgreich zu behandeln, ist allerdings noch zu erbringen.
Die Systembeschreibung, die zunächst nur Eingangsgrößen als Vorgabewerte zuläßt, dann aber auch vorgegebene Ausgangsgrößen auf Kosten von Eingangsdaten erreichen kann, erschien zunächst kompliziert. Sie erwies sich dennoch als sinnvoll: Zum einen wird auf diese Weise eine eindeutige, also weder unter- noch überbestimmte, Systembeschreibung garantiert. Zum anderen kann der Anwender somit das Iterationsverhalten durch Konvergenzblöcke — die dem Benutzer übrigens auch in den anderen Konvergenzsituationen große Einflußnahme ermöglichen — steuern.
Viele zusätzliche ASPEN-Optionen, wie z. B. Fallstudien, Lösung von Optimierungsproblemen oder Ausgabe von Stoffwerttabellen machen das Programm sehr vielseitig.
Die Oberfläche ModelManager erwies sich als sehr hilfreich in der Benutzerführung. Gerade der mit dem Programm ASPEN unerfahrene Anwender wird hierdurch schrittweise durch die Systembeschreibung geführt, ohne daß er befürchten muß, obligatorische Angaben auszulassen. Die Möglichkeit der grafischen Bearbeitung und Ausgabe von zu simulierenden Systemen ist ein weiterer bedeutender Aspekt der Benutzeroberfläche. Gerade die automatische grafische Systemdarstellung erweist sich als sinnvoller Zusatz für den Anwender, der sich bisher nur mit reinem Programmcode auseinandergesetzt hat.

A Anhang

A.1 Literaturverzeichnis

Literatur

[1] ASPEN PLUS: *Appendices.* Cambridge : Aspen Technology, 1988.

[2] ASPEN PLUS: *Notes on Interfaces and User Models.* 2. Aufl. Cambridge : Aspen Technology, 1988.

[3] ASPEN PLUS: *User Guide.* Cambridge : Aspen Technology, 1988.

[4] ASPEN PLUS: *Physical Properties.* Cambridge : Aspen Technology, 1989.

[5] ASPEN PLUS: *Interactive Simulation.* Cambridge : Aspen Technology, 1990.

[6] ASPEN PLUS: *System Maintenance Guide.* Cambridge : Aspen Technology, 1991.

[7] BAEHR, Hans Dieter: *Thermodynamik.* 7. Aufl. Berlin : Springer-Verlag, 1989. – ISBN 3-540-50773-6.

[8] BUXMANN, Joachim: Vorlesungsskript Wärmekraftwerke / TU Hamburg-Harburg. 1989.

[9] JUNGINGER, Werner: *FORTRAN 77 — strukturiert.* 1. Aufl. Berlin : Springer-Verlag, 1988.

[10] KRANE, Rolf: *Ein simultanes Berechnungsprogramm zur Untersuchung beliebiger Anlagenschaltungen und seine Anwendung bei der Auslegungs- und Teillastrechnung von Dampfkraftwerken.* Universität Essen, 1987.

[11] MODELMANAGER: *Reference Manual For Motif.* Cambridge : Aspen Technology, 1991.

[12] SCHÜTT, Ehrenfried ; NIETSCH, Thomas ; ROGOWSKI, Andreas: *Prozeßmodelle: Bilanzgleichungen in der Verfahrenstechnik und Energietechnik.* Düsseldorf : VDI-Verlag GmbH, 1990.

[13] STOER, Josef: *Numerische Mathematik 1.* 5. Aufl. Berlin : Springer-Verlag, 1989.

[14] TÖRNIG, Willi ; SPELLUCCI, Peter: *Numerische Mathematik für Ingenieure und Physiker, Band 1.* 2. Aufl. Berlin : Springer-Verlag, 1988.

[15] VEREIN DEUTSCHER INGENIEURE, VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen (GVC) (Hrsg.): *VDI-Wärmeatlas — Berechnungsblätter für den Wärmeübergang.* 7. Aufl. Düsseldorf : VDI-Verlag GmbH, 1994. – ISBN 3-18-401362-6.

A.2 Abbildungsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

1 Schaltschema Abhitzekessel 10
2 Konvergenz Umwälzmassenstrom (S2015) für Abhitzekessel 16
3 Konvergenz Speisewassertemperatur (S1) bei Vorgabe der Frischdampftemperatur 25
4 Schaltschema Dampfturbinenprozeß, offene Kette 25
5 Konvergenz Speisewassertemperatur (S1) nach Schließen des Kreises 28
6 Schaltschema verzweigter Wärmekreislauf 30
7 Schaltschema Druckverlustsimulation durch Fortranblock 44
8 Schaltschema Dampfturbine 47
9 $\Delta h_T, p_{\mathrm{Kond}}$-Diagramm aus Sensitivity-Analyse 54
10 h,s-Diagramm Joule-Prozeß 55
11 ModelManager-Oberfläche 63
12 ModelManager-Eingabeformular 64

A.3 Tabellenverzeichnis

Tabellenverzeichnis

1 Stoffwerte für Luft (15°C; 1 bar) 59
2 Stoffwerte für Luft (15°C; 20 bar) 59
3 Stoffwerte für Luft (1000°C; 1 bar) 60
4 Stoffwerte für Luft (1000°C; 20 bar) 60