

# 1 Einleitung

Die Validierung ist die Nachrechnung einer Messkampagne. Der Begriff Validierung bezeichnet in diesem Zusammenhang die Messdatenvalidierung. Bei der Messdatenvalidierung wird aus einem widersprüchlichen Satz von Messwerten ein widerspruchsfreier Satz berechnet. Die Messdatenvalidierung ist mathematisch eine Ausgleichsrechnung. Für diese Berechnung werden Kreislaufsimulationsprogramme genutzt, die bei der Validierung ein Hilfsmittel sind. Die Validierung findet bei der Auswertung von Messdaten (Monitoring) und bei Abnahmeversuchen in energie- und verfahrenstechnischen Anlagen Anwendung. Durch die Messdatenvalidierung ergibt sich der Vorteil, dass das Ergebnis der Messdatenvalidierung die Bilanzgleichungen widerspruchsfrei erfüllt. Durch die Messdatenvalidierung können Anlagenzustände somit besser erfasst und die kraftwerkstechnischen Anlagen näher am Optimalpunkt betrieben werden. Zusätzlich wird die Methode der Messdatenvalidierung bei Abnahmeversuchen eingesetzt.

Durch die stetige Weiterentwicklung leistungsfähiger Computer ist es heutzutage sehr einfach, viel Rechenkapazität bereitzustellen. Diese Rechenkapazität beschleunigt auch die Entwicklung im Bereich der Software. Die Programme müssen sich an die neue Hardwarestruktur anpassen und werden ebenso immer leistungsfähiger, da neue Funktionen hinzugefügt werden. So hat sich ebenfalls die Anzahl an Kreislaufsimulationsprogrammen weiter erhöht. In dieser Dissertation werden Eigenschaften von Kreislaufsimulationsprogrammen vorgestellt und eine Tabelle an Kreislaufsimulationsprogrammen aufbauend auf [EPPEL et al. 2012], [WITKOWSKI 2006] und [GIGLMAYR et al. 2001] erstellt.

In dieser Dissertation wird das Programmsystem ENBIPRO (ENergie-BILanz-PROgramm) zur Messdatenvalidierung genutzt. Ziel von ENBIPRO ist es, alle im energie- und verfahrenstechnischen Bereich anfallenden Berechnungsaufgaben mit einem Programmsystem zu lösen. Der Vorteil ist, dass die vorhandenen Modelle für die unterschiedlichen Aufgabenstellungen und verschiedenen Kreisläufe genutzt werden können. Es gibt keine Fehler oder Abweichungen und Zeitverluste aufgrund von Datenübertragungen oder der Verwendung verschiedener Stoffwertefunktionen etc.

Das Programmsystem ENBIPRO kann stationäre und dynamische Simulationen sowie die Validierungs- und Auslegungsrechnung durchführen (ab hier wird statt Messdatenvalidierung die Kurzform Validerung verwendet). Die einzelnen Aufgaben grenzen sich durch die Anpassung des Gleichungssystems (Abb. 2.1) und durch die Auswahl der freien Variablen und der Messgrößen

voneinander ab. Anders als bei [ZINDLER 2008] ist es möglich diese vier Aufgaben in einem Programmkerne zu vereinen.

Im Zuge dieser Arbeit wurde der allgemeingültige Validierungsalgorithmus, der Z-Algorithmus, in das Kreislaufsimulationsprogramm ENBIPRO implementiert.

In [WITKOWSKI 2006] und [APASCARITEI 2008] wird die Anpassung eines Programmsystems an einen allgemeingültigen Validierungsalgorithmus ohne Topologieparser beschrieben. In [ZANDER et al. 2013] und der vorliegenden Arbeit wird die Verbesserung der Berechnungsmethode vorgestellt. In einem allgemeingültigen Simulationsprogramm sind in der Regel freie Variablen in dem erstellten Gleichungssystem enthalten. Dies ist darin begründet, dass in Simulationsprogrammen sämtliche implementierte Bilanzgleichungen erfüllt sind, aber nicht alle Bilanzen zur Validierung des Prozesses benötigt werden. Zum anderen werden in Modellen Zwischengrößen zur Berechnung oder zur Information benötigt. Diese Zwischengrößen sind ebenfalls freie Variablen. Ziel ist es, einen Algorithmus zu entwickeln, der das Gleichungssystem, welches zur stationären Simulation verwendet wird, für die Validierung zu verwenden, ohne dass der Nutzer im Speziellen Kenntnis von einzelnen Modellgleichungen oder Komponentengleichungen haben muss. Es soll allgemeingültig sein. Die Erstellung des Gleichungssystems soll automatisch, basierend auf den allgemeinen Bilanz- und Modellgleichungen, geschehen. Dadurch wird die Modellerstellung verallgemeinert. Dieser Ansatz der Modellierung wird theoretische Modellbildung genannt und bietet eine höchstmögliche Transparenz und führt zu einem besseren Verständnis des Gesamtsystems [KRYSTECK 2012]. Die Modellierung soll für den Anwender so einfach wie möglich sein und gleichzeitig alle notwendigen Aspekte des Systems berücksichtigen. Die Modellgleichungen der stationären Simulation werden unverändert bei der Validierung genutzt. Als Beispiel zur Leistungsfähigkeit des Algorithmus wurden die Ergebnisse des Beispielkreislaufs der [VDI2048-1 2000] mit den Ergebnissen des Z-Algorithmus verglichen und anschließend die erweiterte Fehleranalyse mit dem Z-Algorithmus durchgeführt. Die erweiterte Fehleranalyse umfasst die Untersuchung auf systematische Mess- und Modellierungsfehler.

## 2 Stand der Technik

Im Stand der Technik wird eine kurze Übersicht über bestehende Kreislaufsimulationsprogramme in der Energie- und Verfahrenstechnik gegeben. Das Simulationsprogramm ENBIPRO (ENergie-BILanz-PROgramm), ein Programmsystem zur thermodynamischen Kreislaufsimulation mit dem Schwerpunkt der Kraftwerkstechnik wird detailliert vorgestellt. Weiterhin wird auf die mathematischen Grundlagen der stationären Berechnung und der Validierungsrechnung eingegangen und eine Übersicht über bestehende Richtlinien und Regelwerke zur Validierung gegeben.

### 2.1 Kreislaufsimulationsprogramme

Die Programme zur thermodynamischen Kreislaufsimulation entwickeln sich stetig weiter. Eine Untersuchung zu den Kreislaufsimulationsprogrammen ist in [GIGLMAYR et al. 2001] zu finden. Weitere Auflistungen zu Programmen im Fokus der Energie- und Verfahrenstechnik und der chemischen Industrie sind in [EPPLER et al. 2012], [LAM et al. 2011], [KLEMEŠ et al. 2010], [CONNOLLY et al. 2010], [GROSSKOPF 2010], [RIZZOLI 2009], [WITKOWSKI 2006], [ROTH et al. 2005], [ELMEGAARD und HOUBAK 2002b], [LONCAR und DOUKELIS 2002] zu finden.

Von der Vielzahl der vorhandenen Kreislaufsimulationsprogrammen, werden in der nachfolgenden Tabelle 2.1 die Simulationsprogramme genannt, die einen Schwerpunkt im Bereich der Kraftwerkssimulation haben. Die Tab. 2.1 ist angelehnt an eine Tabelle in [WITKOWSKI 2006], in der nur Simulationsprogramme aufgenommen wurden, die mindestens eine der vier Hauptaufgaben stationäre oder dynamische Simulation, Validierungs- oder Auslegungsrechnung beherrschen. Die Hauptaufgaben werden in Kap. 2.2.1 detailliert beschrieben.

Die Simulationsprogramme sind durch die vorhandenen Komponenten und Funktionen auf ein Anwendungsgebiet fokussiert. Einige Simulationsprogramme haben ihren Hauptschwerpunkt auf z.B. der Netzsimulation, der Ausbaustrategie, der Wirtschaftlichkeitsbetrachtung oder den regenerativen Energien und als Nebenfokus die thermodynamische Kreislaufsimulation. Meistens können diese Anwendungsgebiete durch Hinzufügen weiterer Komponenten erweitert werden.

Name	Stationäre Simulation	Dynamische Simulation	Validierungsrechnung	Auslegungsrechnung	Hersteller und Literaturquellen
ALPRO/ Alpvat	Ja	Nein	Ja	Ja	Alstom Power [BARTLEY et al. 2007, ALSTOM 2000, BRINKMEIER 2010]
Apros	Ja	Ja	Nein	Nein	VVT and Fortum [VVT und FORTUM]
Aspen Hy-sys/MASSBAL	Ja	Ja	Nein	Ja	Aspen Tech [LAM et al. 2011, HYPROTECH 2002]
Chemcad/ CC-DYNAMICS/ CC-THERM	Ja	Ja	Nein	Ja	Chemstations [CHEMSTATIONS 2011]
Cycle Tempo	Ja	Nein	Nein	Nein	TU-Delft [TUDELFTa] [TUDELFTb]
DBS	Ja	Ja	Nein	Nein	TU-Wien [WALTER und LINZER 2005]
DNA	Ja	Ja	Nein	Nein	University of Denmark [ELMEGAARD und HOUBAK 2005]
Dora	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	Alstom Power Boiler GmbH [LONCAR und DOKE-LIS 2002]
Dymola/Modelica	Ja	Ja	Nein	Ja	Dassault Systèmes/Claytex Services Limited [DYMOLA 2011]
Dynsim/SIM4ME	Ja	Ja	Nein	Nein	Invensys Systems [DYN SIM 2010]
DynStar	Ja	Ja	Nein	Nein	[GÖRLITZ 2008]
E600	Nein	Nein	Nein	Ja	Alstom [EPPLE et al. 2012]
EBSILON/EbsBoiler/ EbsValidate	Ja	Nein	Ja	Ja	STEAG [STEAG 2011a] [STEAG 2011b]
ENBIPRO	Ja	Ja	Ja	Ja	TU-Braunschweig [APASCARITEI et al. 2009]
FlowTran	Ja	Ja	Nein	Nein	William J Turner Pty Ltd [FLOWTRAN 2013]
Gate Cycle gPROMS	Ja	Nein	Nein	Nein	GE [GE 2009]
	Ja	Ja	Nein	Nein	[GPROMS 2012]

TAB. 2.1: Kreislaufsimulationsprogramme unterteilt nach Anwendungsbereichen I

Name	Stationäre Simulation	Dynamische Simulation	Validierungsrechnung	Auslegungsrechnung	Hersteller und Literaturquellen
GT PRO/GT Master/Thermoflex/PDE	Ja	Nein	Nein	Ja	Thermoflows, Inc [THERMOFLOW 2002]
ICAS	Ja	Ja	Nein	Ja	Technical University of Denmark [LAM et al. 2011]
Intelligon Complete	Ja	Ja	Nein	Ja	IFE-Systems [IFE-SYSTEMS]
IPSEpro	Ja	Nein	Ja	Ja	SimTech Simulations [IPSEPRO 2013]
DAMPFKESSEL-SIMULATOR/Basic/Dynamic	Ja	Ja	Nein	Ja	KED [DAUBLEBSKY und MAETZ]
KPRO	Ja	Nein	Nein	Ja	Fichtner [FICHTNER]
KRAWAL / Modular	Ja	Nein	Ja	Nein	Siemens Power [HORKEBY 2012], [VDI2048 2013]
KWAS	k.A.	k.A.	Ja	k.A.	S. Streit, Wien, Österreich [VDI2048 2013]
MISTRAL	Ja	Ja	Nein	Ja	TU-Darmstadt [EST 2013]
MMS7	Ja	Ja	Nein	Nein	Enhance Technologies [NHANCE 2013]
PEPSE	Ja	Nein	Nein	Nein	SCIENTECH, Inc. [SCIENTECH 2008]
Proates	Ja	Nein	Nein	Nein	POWERGEN, Power Technology [LONCAR und DOUKELIS 2002]
ProTRAX	Ja	Ja	Nein	Nein	TRAXLLC Energy Solutions [TRAX 2013]
ProSimPlus	Ja	Ja	Nein	Nein	EnDat Finnland [PROSIM 2010]
Sinda/Fluid	Ja	Ja	Nein	Ja	CRTech [CRTECH 2009]
Solvo	Ja	Nein	Nein	Ja	Fortum [FORTUM]
Steam PRO /Steam Master /Thermoflex/ Remaster	Ja	Nein	Nein	Ja	Thermoflows, Inc. [THERMOFLOW 2002]

**TAB. 2.2: Fortsetzung: Kreislaufsimulationsprogramme unterteilt nach Anwendungsgebieten II**

Name	Stationäre Simulation	Dynamische Simulation	Validierungsrechnung	Auslegungs-Rechnung	Hersteller und Literaturquellen
Thermolib/Matlab	Ja	Ja	Nein	Nein	EUtech Scientific Engineering [EUtech 2011]
Unisim	Ja	Ja	Nein	Ja	Honeywell [HONEYWELL 2013]
Vali 4/Process Plus	Nein	Nein	Ja	Nein	BTB-Jansky GmbH [JANSKY 2013]
WÄSCHERE	Ja	Nein	Nein	Nein	Techn. Software Entwicklung Prof.Rabek [GIGLMEYR et al. 2001]
ZiVal	Nein	Nein	Ja	Nein	Hochschule Zittau Görlitz / IPM [GOCHT et al. 2011]

**TAB. 2.3:** Fortsetzung: Kreislaufsimulationsprogramme unterteilt nach Anwendungsbereichen III

Diese nachfolgenden Programme sind nicht in der Tabelle 2.1 enthalten, da diese mit vereinfachten Modellen die thermodynamische Kreislaufsimulation bedienen. Die Komponenten, welche in der Software verfügbar sind, sind nur für spezielle Anwendungen im Kraftwerksbereich ausreichend. So ist EnergyPro [EMD] ein Programm zur Netzsimulation und zur Wirtschaftlichkeitsbetrachtung. Greenius [QUASCHNING et al. 2001] kann ebenfalls Wirtschaftlichkeitsbetrachtungen im Bereich der regenerativen Energien durchführen. Die Softwaren HOMER [HOMER 2011], WinDali [GROSSKOPF 2010] und AEOLIUS [ROSEN et al. 2004], [CONNOLLY et al. 2010] haben ihr Anwendungsgebiet in der Netzsimulation. ANSWER-TIMES ist ein Programm zur Berechnung möglicher Ausbaustrategien und zur Wirtschaftlichkeitsbetrachtung [SYSTEMS 2009].

In [ELMEGAARD und HOUBAK 2002a] [ELMEGAARD und HOUBAK 2002b] werden robuste, mathematische Algorithmen für Kreislaufsimulationsprogramme vorgestellt. Die Kreislaufsimulationsprogramme in der chemischen Industrie werden in [LAM et al. 2011], [KLEMEŠ et al. 2010] untersucht. Diese haben einen Fokus auf den Optimierungstools und den verfügbaren Methoden, wie wirtschaftliche Bewertungsmethoden und den Untersuchungen (siehe Abb. 2.1). Die meisten aufgeführten Programme sind stationär. Ein Überblick über dynamische Kreislaufsimulationsprogramme ist in [ROTH et al. 2005] enthalten.

## **2.1.1 Benutzer-Anforderungen an Kreislaufsimulationsprogramme**

Die wichtigsten Anforderungen an ein Kreislaufsimulationsprogramm sind in Abb. 2.1 dargestellt. Das zu lösende Gleichungssystem wird durch die vier Hauptaufgaben stationäre Simulation, dynamische Simulation, Validierungs- und Auslegungsrechnung festgelegt. Die Hauptaufgaben sind im Programmkernel angelegt z.B. durch die Gleichungslöser. Im Programmsystem ENBIPRO können alle vier Hauptaufgaben berechnet werden. In anderen Programmen ist der Programmkernel für weniger Hauptaufgaben ausgelegt.

Das Datenmanagement ist entsprechend der Hauptaufgaben angelegt und muss benötigte Daten zum Lösen des Gleichungssystems zur Verfügung stellen. So muss z.B. für die Auslegungsrechnung als Ausgabe ein Satz von Geometriedaten ausgegeben und für die Messdatenvalidierung die Eingabe von Konfidenzintervallen ermöglicht werden.

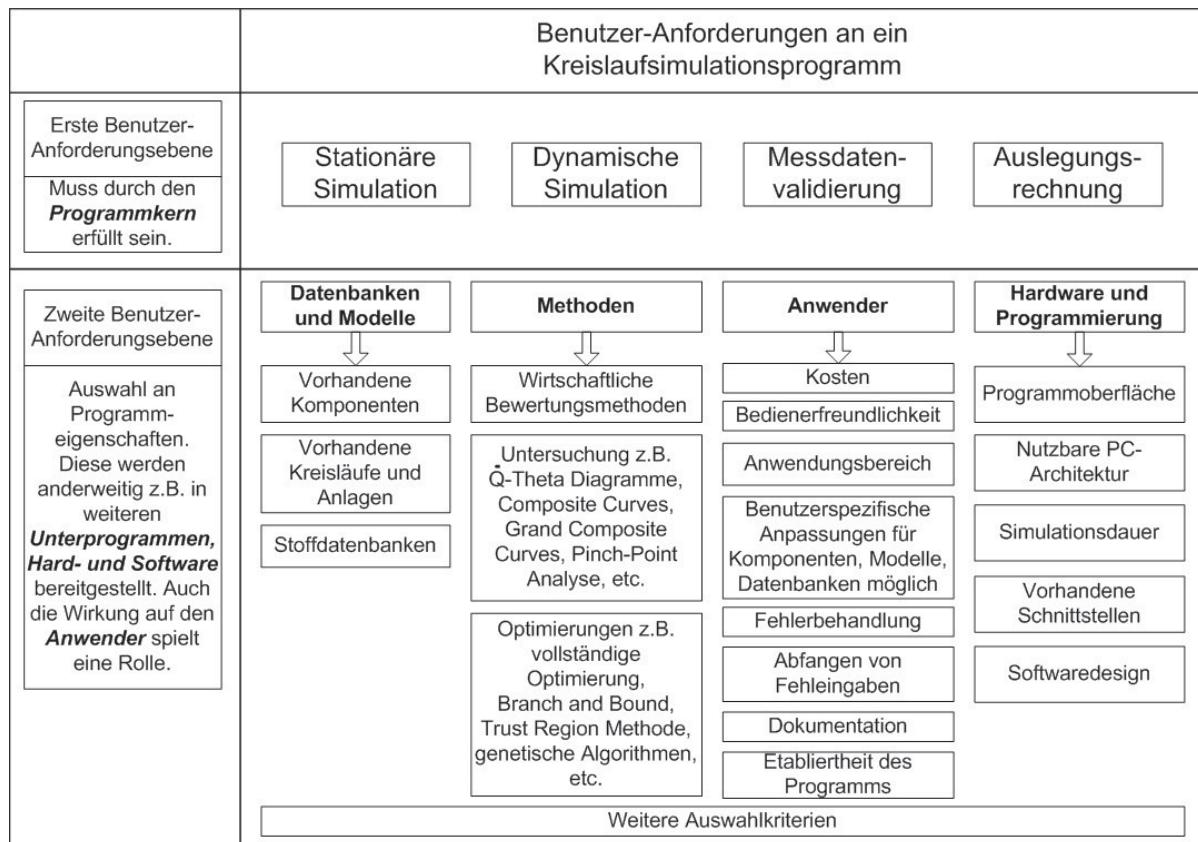


ABB. 2.1: Anforderungen an ein Kreislaufsimulationsprogramm

Die Modelle müssen ebenfalls für die Hauptaufgaben ausgelegt sein. Es wird unterschieden zwischen stationären (statisch und zeitunabhängig), quasi-dynamischen (stationäre Modelle, dynamisch angewendet, Modelle enthalten keine Speicherterme) und dynamischen Modellen (zeitabhängig, Lösen von Differentialgleichungen).

Neben den Hauptaufgaben können weitere Benutzer-Anforderungen an das Kreislaufsimulationsprogramm von Interesse sein. Diese können in der zweiten Anforderungsebene nach den Programmeigenschaften differenziert werden. Einige Programmeigenschaften aus Abb. 2.1 sind schlecht objektiv messbar, wie z.B. Bedienerfreundlichkeit gegenüber den Anschaffungskosten des Programms.

So kann neben den gewünschten Hauptaufgaben für einen Benutzer weiterhin von Interesse sein, ob gewünschte Datenbanken für Stoffe, Komponenten und Modelle vorhanden sind. Oder sind Methoden zur Bewertung der Wirtschaftlichkeit oder der Thermodynamik vorhanden, sowie schon implementierte Optimierungsverfahren zur Kreislaufberechnung.

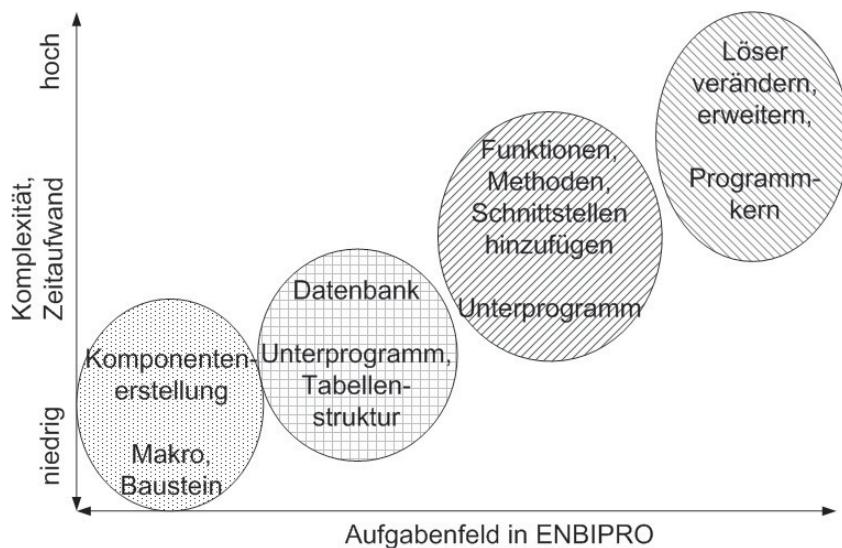
Aus der Sicht des Benutzer ist das Erlernen und der Umgang mit einer Software wichtig. Dabei ist die vorhandene Dokumentation und die Bedienerfreundlichkeit wichtig und die möglichst

einfache Erweiterbarkeit des Programms um gewünschte Komponenten und Stoffe. Der Kostenfaktor des Programms ist ein weiteres Kriterium, ebenso wie die Etabliertheit des Programms beim Kunden. Das Erlernen eines neuen Programms kostet Schulungsstunden.

Für den Benutzer ist die Dauer einer Simulation und das Erweitern von einzelnen Komponenten wichtig. Ebenso, ob die Berechnungen mehrere Prozesse parallel beanspruchen können. Wenn das Programm verändert werden kann, ist es für den Benutzer von Interesse, wie weit die graphische Benutzeroberfläche - GUI (Graphical User Interface) erweitert werden kann. Von Interesse sind auch die vorhandenen Hard- und Softwareschnittstellen und ob das Programm nachträglich um diese erweitert werden kann. Für die Erweiterbarkeit eines Programmes um Komponenten, Schnittstellen oder Datenbanken, ist das Softwaredesign wichtig.

Die Erweiterbarkeit von Programmen durch den Anwender ist eine wichtige Eigenschaft, da z.B. Standardkomponenten angepasst, bei neuen Konzepten neue Komponenten erstellt werden müssen oder die bestehenden Stoffdatenbanken nicht ausreichend sind. Erfüllt ein Kreislaufsimulationsprogramm gewünschte Anforderungen aus Abb. 2.1 nicht, so können diese eventuell nachträglich hinzugefügt werden. In vielen Programmen besteht die Möglichkeit z.B. neue Komponenten mittels Makros einzupflegen .

In ENBIPRO besteht die Möglichkeit das Programm um Komponenten, Datenbanken, Funktionen und Hauptaufgaben zu erweitern. In ENBIPRO ist das Einpflegen neuer Komponenten einfach möglich, da diese als Bausteine implementiert sind. Das Einpflegen einer neuen Methode, z.B. eines Optimierers, ist als Unterprogramm zu implementieren. Das Einpflegen einer weiteren Hauptaufgabe ist im Programmkerne zu implementieren. Die nachfolgende Abbildung 2.2 veranschaulicht die Erweiterbarkeit am Beispiel von ENBIPRO.



**ABB. 2.2:** Faktoren zur Erweiterbarkeit am Beispiel ENBIPRO

Die Erweiterbarkeit hängt von der Quellcodestruktur, dem gewählten Softwaredesign und den verwendeten Schnittstellen zu den Solvern und Algorithmen ab und variiert mit den unterschiedlichen Simulationsprogrammen.

In den in Tab. 2.1 angeführten Programmen ist mindestens eine Hauptaufgabe verfügbar. Soll eine weitere Hauptaufgabe einem Programm hinzugefügt werden, kann das viel Zeit in Anspruch nehmen. Es hängt maßgeblich von der internen Struktur des Programmes ab und ob bereits Schnittstellen vorgesehen sind, da anderenfalls das gesamte Datenmanagement angepasst werden muss. Weiterhin muss der Quellcode des Programms zugänglich und veränderbar sein. Zum besseren Verständnis der Berechnung ist es sinnvoll, wenn der Anwender diese im Programm detailliert durch Debuggen nachvollziehen und ggf. anpassen kann.

Einen anderen Ansatz haben die Entwicklungsumgebungen, die aus mehreren Bibliotheken zusammengesetzt werden. Solche Entwicklungsumgebungen wie Vissim [VISUAL SOLUTIONS 2010], Modellica [FRITZSON 2011] mit Dymola [DYMOLA 2011], Matlab mit der Thermo-lib [ANGERMANN et al. 2007] [EUTECH 2011], gPROMS [gPROMS 2012], EES [KLEIN 2013] und ProMoT/Diana [KRASNYK et al. 2006] sind stark abhängig von den verfügbaren Komponenten-Bibliotheken, den Stoffdatenbanken und den Lösern. Meistens haben die Entwicklungsumgebungen eine Mathematik-Bibliothek für DGL- (Differentialgleichung) und AGL-Löser (Algebraische Gleichungen) und Algorithmen zum effizienten Lösen von Gleichungssystemen. Sie sind auf der Modellebene anpassbar und haben standardisierte Schnittstellen zu anderen Programmen. [RICHERT et al. 2003] der einen Vergleich zwischen Matlab und Modellica erstellt hat, hält eine Kombination der Programme über vorhandene Schnittstellen sinnvoll, um die Stärken der einzelnen Software zu nutzen.

## 2.2 ENBIPRO

ENBIPRO (ENergie-BILanz-PROgramm) ist ein Programmsystem zur thermodynamischen Kreislaufsimulation mit dem Schwerpunkt der Kraftwerkstechnik. Dies zeichnet sich zum einen durch die Komponentenbibliothek aus, die für den Kraftwerksbereich alle relevanten Komponenten enthält. Ein weiterer wichtiger Bestandteil sind die verfügbaren Funktionen. Weiterführende Literatur zu diesem Kapitel ist enthalten in [SCHLITZBERGER 2012], [HAUSCHKE und LEITHNER 2012], [BRINKMEIER et al. 2011], [HAUSCHKE et al. 2010], [APASCARITEI et al. 2009], [EPPEL et al. 2012].