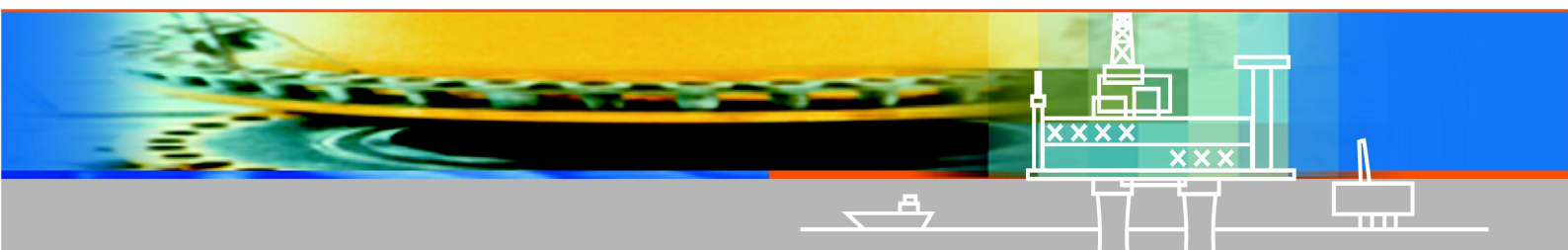




LIWACOM
Informationstechnik GmbH
Postfach 102415
D-45024 Essen
Phone +49 2 01 17 03 8 - 0
Fax +49 2 01 17 03 8 - 30
E-mail postmaster@liwacom.de

SIMONE SOFTWARE



Gleichungen und Methoden

Inhalt

1	EINFÜHRUNG	5
2	EINHEITEN	6
2.1	ÜBERDRUCK IN NIEDERDRUCK-NETZEN	6
3	FLUSSGLEICHUNGEN	7
3.1	KONTINUITÄTSGLEICHUNG	7
3.2	IMPULSGLEICHUNG	7
3.3	REIBUNGSFAKTOR	8
3.3.1	<i>Hofer Formel</i>	8
3.3.2	<i>Nikuradze Formel</i>	8
3.3.3	<i>PMT-1025 Formel</i>	8
3.3.4	<i>Hydraulischer Wirkungsgrad</i>	9
3.3.5	<i>Vergleich zwischen Hofer und Nikuradze Formel</i>	9
4	ZUSTANDSGLEICHUNG FÜR REALES GAS	11
4.1	AGA (AMERICAN GAS ASSOCIATION)	12
4.2	PAPAY FORMEL	12
4.3	REDLICH-KWONG GLEICHUNG	12
4.4	BWR GLEICHUNG	13
4.4.1	<i>Vereinfachter Ansatz</i>	13
4.4.2	<i>Vollständige Mischregeln</i>	15
4.5	AGA8 DC92 GLEICHUNG	15
4.6	THERMODYNAMISCHE EIGENSCHAFTEN DES REALEN GASES	16
4.6.1	<i>Wärmekapazität</i>	16
4.6.2	<i>Isentropenexponent</i>	17
4.6.3	<i>Joule-Thomson Koeffizient</i>	17
4.7	BERECHNUNG DER GASEIGENSCHAFTEN UNTER NUTZUNG DER GASZUSAMMENSETZUNG	18
4.7.1	<i>Die Berechnung von relativer Dichte und volumetrischer Brennwert bei Gaszusammensetzungen</i>	19
4.7.2	<i>Die Umrechnung von molaren zu volumetrischen Anteilen und umgekehrt</i>	20
5	QUALITÄTSVERFOLGUNG	21
5.1	LÖSUNGSVERFAHREN	21
5.2	QUALITÄTSPARAMETER	21
5.3	MISCH-REGELN	22
6	TEMPERATURDYNAMIK	24
6.1	DIFFERENTIALGLEICHUNGEN	24
6.2	WÄRMEÜBERGANGS-KOEFFIZIENT IN SIMONE	25
6.3	UNTERDRÜCKEN DES JOULE-THOMSON-EFFEKTS FÜR ROHRE	27
7	VERDICHTERSTATIONEN	28
7.1	GRUNDLEGENDE THERMODYNAMISCHE BEZIEHUNGEN	28
7.1.1	<i>Druckverhältnis</i>	28
7.1.2	<i>Isentrope Enthalpieänderung</i>	28
7.1.3	<i>Isentroper Wirkungsgrad</i>	28
7.1.4	<i>Antriebsleistung</i>	28
7.1.5	<i>Ausgangstemperatur</i>	29
7.1.6	<i>Isentropischer Exponent</i>	30
7.1.7	<i>Betriebsvolumenfluss</i>	30
7.2	TURBOVERDICHTER	31
7.3	KOLBENVERDICHTER	31
7.4	GASTURBINE	32
7.5	GASMOTOR	32
7.6	ELEKTROANTRIEB	33
7.7	DAMPFTURBINENANTRIEB (COMBINED CYCLE)	33
7.8	GASKÜHLER	34

7.9	LOKALER DRUCKVERLUST	34
8	REGLER	36
8.1	VORWÄRMLEISTUNG	36
8.2	REGLER MIT KENNLINIEN	36
8.2.1	<i>Kennlinie A (Mokveld)</i>	37
8.2.2	<i>Kennlinie B (Argus)</i>	38
8.3	LOKALER DRUCKVERLUST	38
9	WIDERSTAND	40
10	ZUSTANDSREKONSTRUKTION	41
10.1	ZUSTANDSREKONSTRUKTION IN SIMONE	42
10.2	MESSWERTE AUßERHALB DER FEHLERTOLERANZ	43
10.3	PARAMETER DER ZUSTANDSREKONSTRUKTION	43
10.4	DARSTELLUNG DER ERGEBNISSE DER ZUSTANDSREKONSTRUKTION	44
10.5	MESSSTATIONEN	44
11	STATIONÄRE OPTIMIERUNG	46
11.1	DIE ZIELFUNKTION	46
11.2	RESTRIKTIONEN	46
11.3	METHODE DER STATIONÄREN OPTIMIERUNG IN SIMONE	46
12	HYDRATBILDUNGSRISIKO	48
12.1	GLEICHGEWICHTSBEDINGUNG	48
12.2	WASSER TAUPUNKT	48
12.2.1	<i>Bukacek Näherung</i>	49
12.3	HYDRATGLEICHGEWICHT	49
12.3.1	<i>Motiee Näherung</i>	50
12.3.2	<i>Carson-Katz Methode</i>	50
12.3.3	<i>Ponomarev Näherung</i>	51
12.3.4	<i>Anmerkungen zur Genauigkeit und zur Wahl der Modelle</i>	52
12.4	INHIBITOR-EFFEKT	54
12.5	RISIKO INDIKATOREN	55

1 Einführung

Dieses Dokument gibt einen Überblick über die grundlegenden Gleichungen und Methoden, die in SIMONE genutzt werden um das Verhalten von Gas, Durchflüssen und von Anlagen in einem Rohrnetz zu modellieren.

2 Einheiten

2.1 Überdruck in Niederdruck-Netzen

In Niederdruck-Netzen wird der lokale Druck oft als Überdruck in der Größenordnung von 5 kPa angegeben.

Die Auswirkung der geringen Gasdichte verglichen mit der Dichte der Luft (d.h. Auftrieb) führt daher zu nicht zu vernachlässigenden Änderungen des lokalen Überdrucks mit der Höhe.

SIMONE berechnet alle Drücke als absolut. Für die korrekte Simulation von Niederdruck- Systemen wird der lokale Luftdruck, abhängig von der Knotenhöhe, für die Umrechnung von absolutem und Überdruck-Wert genutzt. Dieses geschieht durch die Auswahl von "kPah" als Druckeinheit. Diese Einheit kann genutzt werden um Werte anzuzeigen, oder auch für die Eingabe von Druckbedingungen sowie von Sollwerten.

Die Umrechnung basiert auf folgender Gleichung:

$$p_{\ell} = p - p_{air}(h)$$

wobei

p_{ℓ}	Lokaler Überdruck	[kPah]
p	Absoluter Gasdruck	[kPa]
$p_{air}(h)$	Lokaler Luftdruck (absolut) abhängig von der Höhe	[kPa]
h	Höhe	[m]

Die Höhenänderung des Luftdrucks wird von der barometrischen Gleichung unter Nutzung der Definition der internationalen Normatmosphäre abgeleitet:

$$p_{air}(h) = p_0 \cdot \exp\left(-\frac{gh}{R_{air}T_0}\right)$$

$p_0 = 101.325$ kPa ist der Luftdruck auf Normalnull.

$t_0 = 15$ °C ist die Lufttemperatur auf Normalnull (für die barometrische Gleichung).

$$T_0 = t_0 + 273.15 \text{ K}$$

$R_{air} = 286.89$ J.kg⁻¹.K⁻¹ ist die spezifische Gaskonstante von Luft.

$g = 9.80665$ m.s⁻² ist die Erdbeschleunigung

3 Flussgleichungen

Die Simulation von dynamischen Prozessen bei Gastransport und -verteilung basiert auf nichtlinearen, partiellen Differentialgleichungen, die die dynamische Kontinuitätsgleichung und die Impulsgleichung beschreiben.

Um die wärmedynamischen Prozesse beim Gasfluss differenzierter und ausführlicher zu beschreiben, muss eine weitere, partielle Differentialgleichung zusätzlich zu den oben genannten berücksichtigt werden, siehe Kapitel 5 und 6.

3.1 Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial m}{\partial x} + S \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

wobei

m	Mengendurchfluss	$[\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}]$
S	Rohrleitungsquerschnitt	$[\text{m}^2]$
ρ	Gasdichte	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$
x	'Längen'Koordinate	$[\text{m}]$
t	Zeit	$[\text{s}]$

3.2 Impulsgleichung

$$\frac{1}{S} \frac{\partial m}{\partial t} - 2w \frac{\partial \rho}{\partial t} + w^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial P}{\partial x} + g\rho \frac{dh}{dx} + f_R = 0$$

wobei

p	Druck	$[\text{Pa}]$
g	Erdbeschleunigung	$[\text{m} \cdot \text{s}^{-2}]$
ρ	Gasdichte	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$
f_R	Druckverlust durch Reibung pro Rohrlängeneinheit	$[\text{Pa} \cdot \text{m}^{-1}]$
h	Geodätische Höhe	$[\text{m}]$
S	Rohrleitungsquerschnitt	$[\text{m}^2]$
m	Mengendurchfluss	$[\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}]$
w	Fließgeschwindigkeit	$[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]$
x	'Längen'Koordinate	$[\text{m}]$
t	Zeit	$[\text{s}]$

Der hydraulische Widerstand in einem Rohrleitungssegment wird durch die Darcy-Weisbach-Gleichung beschrieben:

$$f_R = \frac{\lambda |w| w}{2D} \rho$$

wobei

λ	Reibungsfaktor	$[1]$
w	Fließgeschwindigkeit	$[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]$
ρ	Gasdichte	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$
D	Rohrinnendurchmesser	$[\text{m}]$

3.3 Reibungsfaktor

SIMONE ist mit mehreren Formeln für den Reibungsfaktor λ ausgestattet (wählbar mit dem Szenarioparameter LAMBDA).

- **Hofer** Formel (Standard)
- **Nikuradze** Formel
- **PMT-1025** Formel (Gazprom)

3.3.1 Hofer Formel

Die Hofer Formel ist eine explizite Annäherung an die übliche Colebrook-White Formel.

$$\lambda = \frac{1}{\left(2 \log \left(\frac{4.518}{\text{Re}} \log \left(\frac{\text{Re}}{7} \right) + \frac{k}{3.71D} \right) \right)^2}$$

wobei

k	dem Rohr entsprechende Rauigkeit	[m]
D	Rohrinnendurchmesser	[m]
Re	Reynolds Zahl	[1]

Die **Reynolds Zahl** ist definiert als

$$\text{Re} = w \frac{D}{\nu} = \frac{4}{\pi \mu} \frac{M}{D}$$

wobei

D	Rohrinnendurchmesser	[m]
w	Fließgeschwindigkeit	[m.s ⁻¹]
ν	Kinematische Viskosität	[m ² .s ⁻¹]
M	Mengendurchfluss	[kg.s ⁻¹]
μ	Dynamische Viskosität	[kg m ⁻¹ s ⁻¹]

Der Wert der dynamischen Viskosität für Erdgas ist annähernd $10^{-5} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$.

3.3.2 Nikuradze Formel

Die Nikuradze Formel, die für hohe Reynolds-Zahlen gültig ist, hat die Form

$$\lambda = \frac{1}{\left(2 \log \left(\frac{D}{k} \right) + 1.138 \right)^2}$$

Es ist leicht zu sehen dass bei $\text{Re} \rightarrow +\infty$ die Hofer Formel gleich der Nikuradze Formel ist.

3.3.3 PMT-1025 Formel

$$\lambda = 0.067 \left(\frac{158}{\text{Re}} + \frac{2k}{D} \right)^{0.2}$$

Hier wird die äquivalente Rohrrauigkeit als Konstante eingesetzt ($k = 0.03 \text{ mm}$).

3.3.4 Hydraulischer Wirkungsgrad

Der hydraulische Wirkungsgrad η_{pipe} eines Rohres wird üblicherweise als Korrekturfaktor für $1/\sqrt{\lambda}$ in der Impulsgleichung oder in der Darcy-Weisbach-Gleichung eingeführt, d.h. der Reibungsterm wird

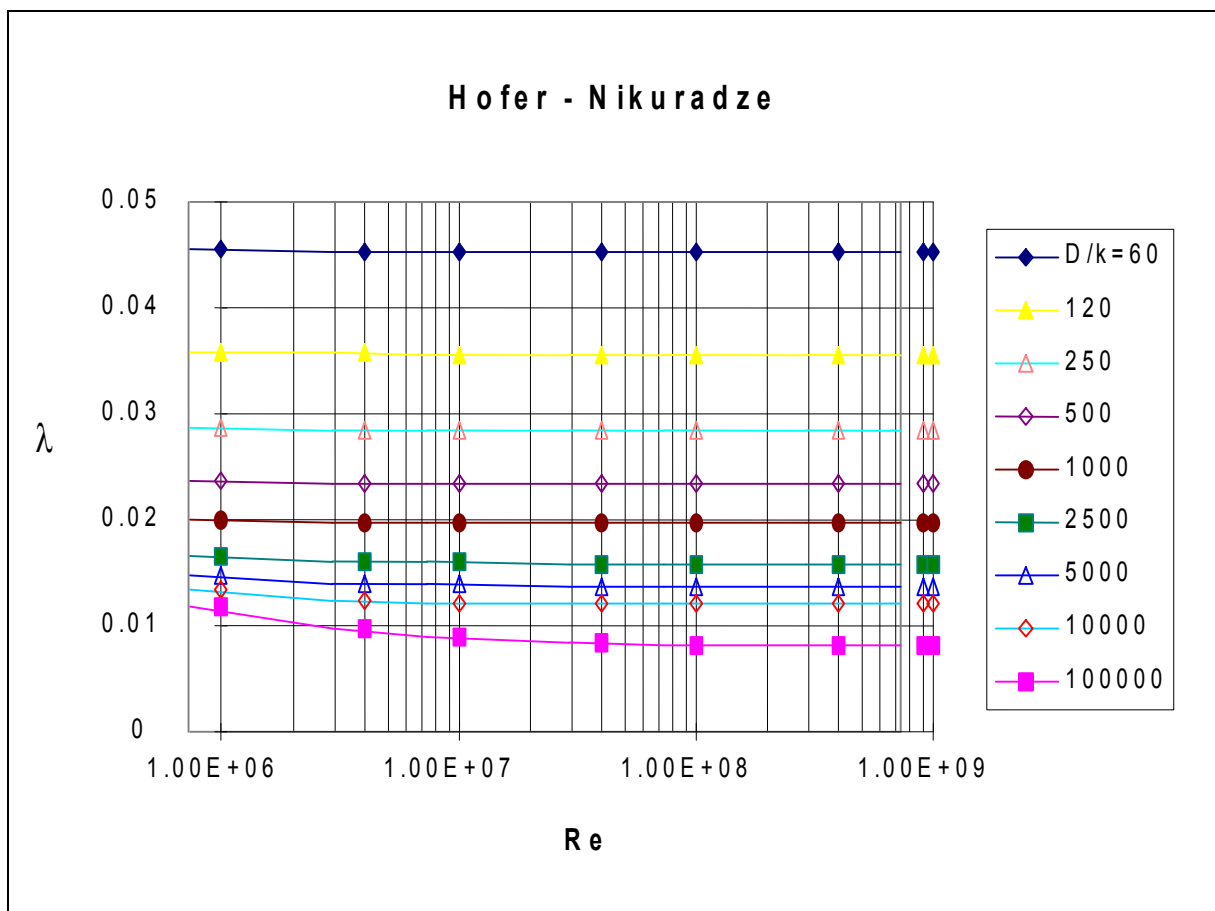
$$f_R = \frac{\lambda}{\eta_{pipe}^2} \frac{|w| w}{2D} \rho$$

Zwischen Flussrate und hydraulischem Wirkungsgrad gibt es eine einfache und direkte Beziehung für statischen Fluss: wenn man von einem hydraulischen Wirkungsgrad von 0.99 anstelle von 1.00 ausgeht, reduziert sich die Flussrate bei konstantem Druckverlust ebenfalls auf 0.99 ihres ursprünglichen Wertes.

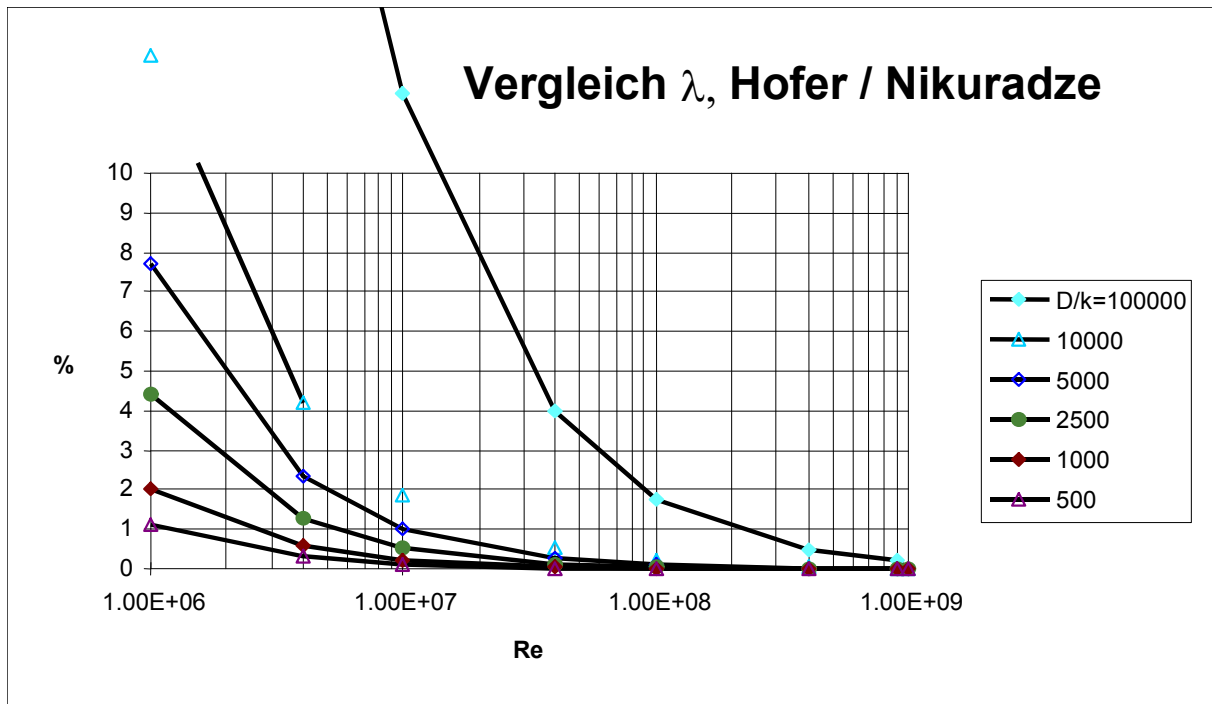
Der hydraulische Wirkungsgrad kann durch Setzen des CORLAM Szenarioparameters für ein Subsystem oder für ein einzelnes Rohrelement geändert werden (der Standardwert ist 1).

3.3.5 Vergleich zwischen Hofer und Nikuradze Formel

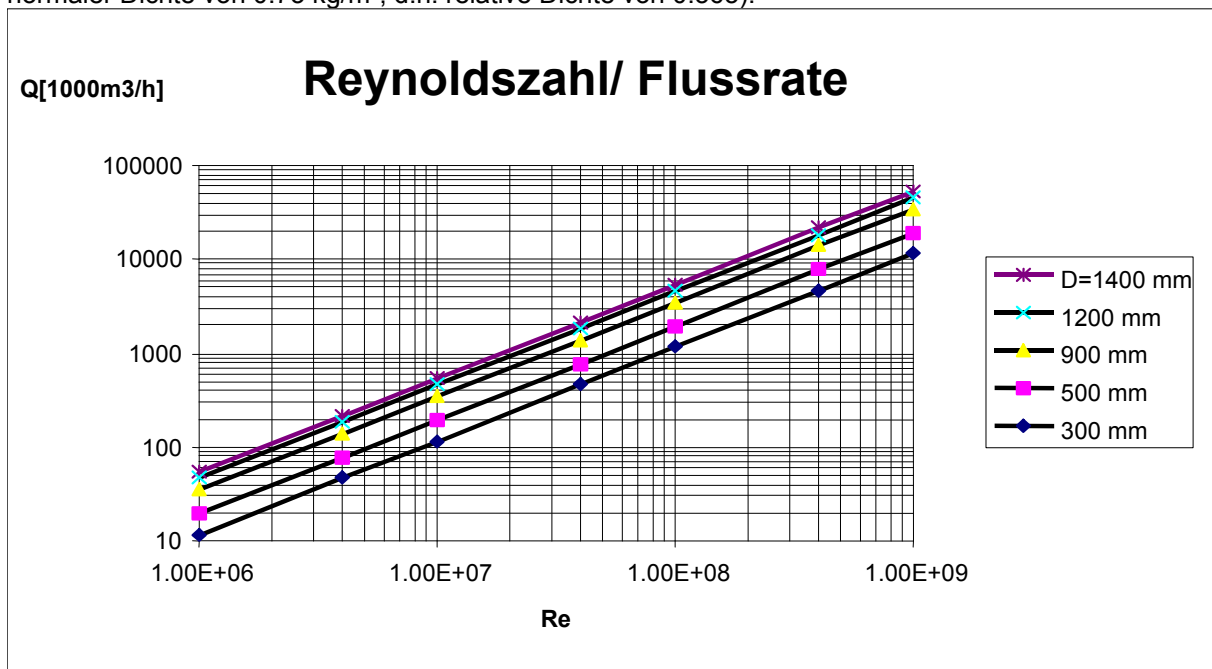
Der folgende Vergleich beider Formeln soll die Unterschiede, Vor- und Nachteile aufzeigen. Im ersten Bild wird die Kurve mit der Hofer Formel, der letzte Punkt mit der Nikuradze Formel gerechnet (sofern $Re \rightarrow +\infty$):



Prozentuale Unterschiede zwischen Hofer und Nikuradze Formel werden im nächsten Bild dargestellt.



In der folgenden Grafik erhält man ein grobes Bild von Flussrate und Reynoldszahl (für Erdgas normaler Dichte von 0.73 kg/m^3 , d.h. relative Dichte von 0.565):



Für $D=1000 \text{ mm}$, $k=0.01 \text{ mm}$, und einer üblichen Last von $10^6 \text{ m}^3/\text{h}$ ergibt sich $Re=2.4 \times 10^7$; dadurch wird die nicht zu vernachlässigende Differenz zwischen Hofer und Nikuradze sichtbar.

4 Zustandsgleichung für reales Gas

Die Zustandsgleichung für reales Gas wird üblicherweise in der folgenden Form geschrieben:

$$p = \rho R T z$$

wobei

p	Druck	[Pa]
ρ	Gasdichte	[kg.m ⁻³]
R	Gaskonstante	[J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]
T	Absolute Temperatur	[K]
z	Kompressibilitätsfaktor	[1]

Die Gaskonstante bezieht sich auf das Molargewicht oder auf die relative Dichte des Gases.

$$R = \frac{\tilde{R}}{M}$$

$$r = \frac{\rho_0}{\rho_{air,0}} = \frac{z_{air,0} R_{air}}{z_0 R} = \frac{z_{air,0} M}{z_0 M_{air}}$$

wobei

\tilde{R}	Universelle Gaskonstante	[J.kmol ⁻¹ .K ⁻¹]
M	Molargewicht	[kg.kmol ⁻¹]
r	relative Gasdichte	[1]
ρ	Dichte	[kg.m ⁻³]
z	Kompressibilitätsfaktor	[1]
tiefgestellt 0	für Normbedingungen (101.325 kPa und 0, 15 oder 20°C)	
tiefgestellt <i>air</i>	für <i>Luft</i>	

Das nicht-ideale Verhalten von Gas wird durch den Kompressibilitätskoeffizienten z ausgedrückt. Der Kompressibilitätskoeffizient ist eine Funktion von Druck, Temperatur und Gaszusammensetzung. Die folgende Auswahl ist in SIMONE verfügbar:

- **2-parametrische Zustandsgleichungen:**

$$z = z(p_r, T_r)$$

wobei

$$p_r = \frac{p}{p_c} \quad \text{reduzierter Druck} \quad [1]$$

$$T_r = \frac{T}{T_c} \quad \text{reduzierte Temperatur} \quad [1]$$

$$p_c = \sum_{i=1}^N x_i p_{c,i} \quad \text{Pseudokritischer Druck der Gasmischung} \quad [\text{Pa}]$$

$$T_c = \sum_{i=1}^N x_i T_{c,i} \quad \text{Pseudokritische Temperatur der Gasmischung} \quad [\text{K}]$$

$$x_1 \dots x_N \quad \text{Molare Anteile der Gaskomponenten} \quad [1]$$

$$p_{c,i} \quad \text{Kritischer Druck von Komponente } i \quad [\text{Pa}]$$

$$T_{c,i} \quad \text{Kritische Temperatur von Komponente } i \quad [\text{K}]$$

- **3-parametrische Zustandsgleichungen:**

$$z = z(p_r, T_r, \omega)$$

wobei

$$\omega = \sum_{i=1}^N x_i \omega_i \quad \text{Azentrizitätsfaktor der Gasmischung} \quad [1]$$

$$\omega_i \quad \text{Azentrizitätsfaktor der Komponente } i \quad [1]$$

- **Allgemeine Zustandsgleichung:**

$$z = z(p, T, x_1 \dots x_N)$$

Unter Verwendung komplexerer Mischregeln als oben aufgeführt.

Die folgenden Gleichungen sind momentan in SIMONE verfügbar (gewählt über den Szenarioparameter ZET)

- **AGA**
- **Papay** (Standard)
- **Redlich-Kwong**
- **BWR** in vereinfachter Form (Fasold et al.)
- **BWR**
- **AGA8 DC92** (ISO 12213-2)

4.1 AGA (American Gas Association)

$$z = 1 + 0.257 p_r - 0.533 \frac{p_r}{T_r}$$

Für Erdgas ist diese Beziehung adäquat für Drücke bis zu 70 Bar.

4.2 Papay Formel

$$z = 1 - 3.52 p_r \exp(-2.260 T_r) + 0.274 p_r^2 \exp(-1.878 T_r)$$

Für Erdgas ist diese Beziehung adäquat für Drücke bis zu 150 Bar.

4.3 Redlich-Kwong Gleichung

Die Redlich-Kwong Zustandsgleichung wird üblicherweise in der folgenden Form geschrieben:

$$p = \frac{\tilde{R}T}{\tilde{V} - b} - \frac{a}{\sqrt{T}\tilde{V}(\tilde{V} + b)}$$

wobei

p	Druck	[Pa]
T	Temperatur	[K]
\tilde{R}	universelle Gaskonstante	[J.mol ⁻¹ .K ⁻¹]
\tilde{V}	Molarvolumen des Gases	[m ³ .mol ⁻¹]

$$a = \Omega_a \frac{\tilde{R}^2 T_c^{2.5}}{p_c}$$

$$b = \Omega_b \frac{\tilde{R}T_c}{p_c}$$

$$\Omega_a = \frac{1}{9(2^{1/3} - 1)}$$

$$\Omega_a = \frac{2^{1/3} - 1}{3}$$

c steht für pseudokritische Werte der Gasmischung

Für reines Gas ist die Redlich-Kwong-Gleichung die genaueste 2-Konstanten-Zustandsgleichung. Die Redlich-Kwong-Gleichung wird momentan in vereinfachter Form mit der einfachen Definition von pseudokritischem Druck und Temperatur angewendet:

$$p_c = \sum_{i=1}^N x_i p_{c,i}$$

$$T_c = \sum_{i=1}^N x_i T_{c,i}$$

In so einem Fall wird die Redlich-Kwong-Gleichung als 2-Parameter-Gleichung in der Form $z = z(p_r, T_r)$ angewendet.

Die genaue, komplexere Mischregel oder andere Modifikationen der Redlich-Kwong-Gleichung kann bei Bedarf implementiert werden.

4.4 BWR Gleichung

Die Benedict-Webb-Rubin-Zustandsgleichung wird üblicherweise in der folgenden Form (und mit traditionellen physikalischen Einheiten!) geschrieben:

$$p = \tilde{R}T\tilde{\rho} + \left(B_0\tilde{R}T - A_0 - \frac{C_0}{T} \right) \tilde{\rho}^2 - \left(b\tilde{R}T - a \right) \tilde{\rho}^3 + a\alpha\tilde{\rho}^6 + \frac{c\tilde{\rho}^3}{T^2} (1 + \gamma\tilde{\rho}^2) \exp(-\gamma\tilde{\rho}^2)$$

wobei

p	Druck	[atm]
T	Temperatur	[K]
\tilde{R}	universelle Gaskonstante	[atm.dm ³ mol ⁻¹ .K ⁻¹]
$\tilde{\rho}$	Molare Gasdichte	[mol.dm ⁻³]
$A_0, B_0, C_0, a, b, c, \alpha, \gamma$	BWR Gleichungskonstanten (traditionelle Einheiten)	

4.4.1 Vereinfachter Ansatz

Nach Fasold et al, können die Konstanten für die BWR-Gleichung für Erdgas an 3 Parameter der Gasmischung geknüpft werden:

$$A_0 = A'_0 \frac{T_c^2 \tilde{R}^2}{p_c} \quad A'_0 = -0.06000000\alpha_c + 0.6900000$$

$$B_0 = B'_0 \frac{T_c \tilde{R}}{p_c} \quad B'_0 = 0.00797872\alpha_c + 0.0781383$$

$$C_0 = C'_0 \frac{T_c^4 \tilde{R}^2}{p_c} \quad C'_0 = 0.02000000\alpha_c + 0.0340000$$

$$a = a' \frac{T_c^3 \tilde{R}^3}{p_c^2} \quad a' = 0.04083330\alpha_c - 0.2128330$$

$$b = b' \frac{T_c^2 \tilde{R}^2}{p_c} \quad a' = 0.01700000\alpha_c - 0.0706000$$

$$c = c' \frac{T_c^5 \tilde{R}^3}{p_c^2} \quad a' = 0.02400000\alpha_c - 0.0980000$$

$$\alpha = \alpha' \frac{T_c^3 \tilde{R}^3}{p_c^3} \quad \alpha' = -0.00183333\alpha_c + 0.0138333$$

$$\gamma = \gamma' \frac{T_c^2 \tilde{R}^2}{p_c} \quad \gamma' = -0.01400000\alpha_c + 0.1332000$$

$$p_c = \sum_{i=1}^N x_i p_{c,i} \quad \text{Pseudokritischer Druck der Gasmischung} \quad [\text{atm}]$$

$$T_c = \sum_{i=1}^N x_i T_{c,i} \quad \text{Pseudokritische Temperatur der Gasmischung} \quad [\text{K}]$$

$$\alpha_c = \sum_{i=1}^N x_i \alpha_{c,i} \quad \text{Kritischer Riedel-Faktor für Gasmischungen} \quad [1]$$

$$\alpha_{c,i} \quad \text{Kritischer Riedel-Faktor für Komponente } i$$

$$x_1 \dots x_N \quad \text{Molaranteil der Gaskomponenten}$$

Der kritische Riedel-Faktor wird unter Nutzung des azentrischen Faktors der Edminster-Gleichung berechnet

$$\alpha_c = 5.7839 + 4.8763\omega$$

Als Ergebnis führt diese Vereinfachung zur 3-Parameter-Gleichung in der Form $z = z(p_r, T_r, \omega)$.

4.4.2 Vollständige Mischregeln

Die allgemeinen Mischregeln für die BWR-Zustandsgleichung sind:

$$A_0 = \left(\sum_{i=1}^N x_i \sqrt{A_{0,i}} \right)^2$$

$$B_0 = \sum_{i=1}^N x_i B_{0,i}$$

$$C_0 = \left(\sum_{i=1}^N x_i \sqrt{C_{0,i}} \right)^2$$

$$a = \left(\sum_{i=1}^N x_i \sqrt[3]{a_i} \right)^3$$

$$b = \left(\sum_{i=1}^N x_i \sqrt[3]{b_i} \right)^3$$

$$c = \left(\sum_{i=1}^N x_i \sqrt[3]{c_i} \right)^3$$

$$\alpha = \left(\sum_{i=1}^N x_i \sqrt[3]{\alpha_i} \right)^3$$

$$\gamma = \left(\sum_{i=1}^N x_i \sqrt{\gamma_i} \right)^2$$

wobei

$x_1 \dots x_N$ Molaranteile der Gas Komponenten [1]

tiefgestellt i steht für BWR Gleichungskonstante für Komponente i

Die Konstanten für die BWR-Gleichung der grundlegenden 21 Gaskomponenten, die in ISO 12213 aufgeführt sind, sind in SIMONE vordefiniert. Der Anwender hat die Möglichkeit, neue Gaskomponenten mit ihren Konstanten hinzuzufügen.

4.5 AGA8 DC92 Gleichung

Die Expansion des Kompressibilitätsfaktors entsprechend der AGA8- und DC92- (ISO 12213-2) Gleichungen ist

$$z = 1 + B\tilde{\rho} - \rho_r \sum_{n=13}^{18} C_n^* + \sum_{n=13}^{58} C_n^* (b_n - c_n k_n \rho_r^{k_n}) \rho_r^{b_n} \exp(-c_n \rho_r^{k_n})$$

wobei

z	Kompressibilitätsfaktor	[1]
B	Zweiter Virialkoeffizient (Funktion der Temperatur und der Zusammensetzung)	[dm ³ .mol ⁻¹]
$\tilde{\rho}$	Molare Gasdichte	[mol.dm ⁻³]
ρ_r	reduzierte Dichte	[1]
b_n, c_n, k_n	Konstanten	[1]
C_n^*	Koeffizienten, abhängig von Temperatur und Zusammensetzung	[1]

Die reduzierte Dichte ist durch die Gleichung auf die Molardichte bezogen.

$$\rho_r = K^3 \tilde{\rho}$$

wobei

$$K^3 \quad \text{Mischgrößen-Parameter (Funktion der Zusammensetzung)} \quad [\text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}]$$

Das Verfahren zur Berechnung der von Zusammensetzung und Temperatur abhängigen Koeffizienten ist relativ kompliziert. Für weitere Details siehe ISO 12213-2.

4.6 Thermodynamische Eigenschaften des realen Gases

Alle wichtigen thermodynamischen Gaseigenschaften können aus der Zustandsgleichung abgeleitet werden, und zwar

- Wärmekapazität
- Isentropen Exponent
- Joule-Thomson Koeffizient

4.6.1 Wärmekapazität

Die molare Wärmekapazität des realen Gases wird berechnet mit

$$\tilde{c}_p = \tilde{c}_p^0(T) + \Delta\tilde{c}_p(p, T, x_1, \dots, x_N)$$

wobei

$$\tilde{c}_p \quad \text{Molare Wärmekapazität (für konstanten Druck)} \quad [\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$$

$$\tilde{c}_{p0}(T) \quad \text{Molare Wärmekapazität des idealen Gases} \quad [\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$$

$$\Delta\tilde{c}_p(p, T, x_1, \dots, x_N) \quad \text{Korrektur zum Verhalten des realen Gases} \quad [\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$$

Die Wärmekapazität pro Einheit der Masse ist dann

$$c_p = \frac{\tilde{c}_p}{M}$$

$$c_p \quad \text{Wärmekapazität des realen Gases} \quad [\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$$

$$M \quad \text{Molargewicht des Gases} \quad [\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}]$$

Die Wärmekapazität des idealen Gases ist eine Funktion der Temperatur und in SIMONE angenähert durch eine Parabel zweiter Ordnung

$$\tilde{c}_p^0(T) = A + B \cdot T + C \cdot T^2$$

Für ein Gasgemisch sind die Koeffizienten einfach aus reinen Komponentenwerten gemischt.

$$\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^N x_i \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \\ C_i \end{pmatrix}$$

wobei

$$x_1 \dots x_N \quad \text{Molare Anteile der Gaskomponenten}$$

tiefgestellt i Steht für die Mischkomponente i

Die Korrektur für das reale Gas wird mit der folgenden Gleichung ausgedrückt

$$\Delta \tilde{c}_p = -\tilde{R} \int_0^p \left[2T \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_p + T^2 \left(\frac{\partial^2 z}{\partial T^2} \right)_p \right] \frac{dp}{p}$$

wobei

\tilde{R} universelle Gaskonstante [J.mol⁻¹.K⁻¹]
 z Kompressibilitätsfaktor [1]

4.6.2 Isentropenexponent

Der Isentropenexponent κ wird definiert durch die Beziehung

$$p \tilde{V}^\kappa = \text{const. oder } \kappa = -\frac{\tilde{V}}{p} \left(\frac{\partial p}{\partial \tilde{V}} \right)_s$$

und kann mit folgender Formel berechnet werden:

$$\kappa = \frac{z}{Z_p - \frac{\tilde{R}}{\tilde{c}_p} Z_T^2}$$

wobei

p	Druck	[Pa]
\tilde{V}	Molares Volumen	[m ³ .mol ⁻¹]
S	Entropie	[J.mol ⁻¹ .K ⁻¹]
z	Kompressibilitätsfaktor	[1]
$Z_p = z - p \left(\frac{\partial z}{\partial p} \right)_{T, x_1, \dots, x_N}$	Dimensionslose Ableitung des Kompressibilitätsfaktors	[1]
$Z_T = z + T \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{p, x_1, \dots, x_N}$	Dimensionslose Ableitung des Kompressibilitätsfaktors	[1]
\tilde{R}	universelle Gaskonstante	[J.mol ⁻¹ .K ⁻¹]
\tilde{c}_p	Molare Wärmekapazität des realen Gases (für konstanten Druck)	[J.mol ⁻¹ .K ⁻¹]

4.6.3 Joule-Thomson Koeffizient

Der (differentiale) Joule Thomson-Koeffizient wird definiert als

$$\mu_{JT} = \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_H$$

und kann mit folgender Gleichung berechnet werden

$$\mu_{JT} = \frac{T}{p} \frac{\tilde{R}}{\tilde{c}_p} (Z_T - z)$$

wobei

μ_{JT}	Joule-Thomson-Koeffizient	[K.Pa ⁻¹]
p	Druck	[Pa]
T	Temperatur	[K]

H	Enthalpie	$[\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}]$
z	Kompressibilitätsfaktor	[1]
$Z_T = z + T \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{p, x_1, \dots, x_N}$	Dimensionslose Ableitung des Kompressibilitätsfaktors	[1]
\tilde{R}	universelle Gaskonstante	$[\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}]$
\tilde{c}_p	Molare Wärmekapazität des realen Gases (für konstanten Druck)	$[\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}]$

Der integrierte Joule Thomson Effekt, d.h. der Temperaturwechsel aufgrund des Druckverlustes während des isenthalpen Entspannungsprozesses kann mit dem Anfangswert-Problem beschrieben werden:

$$T(p_1) = T_1$$

$$\frac{dT}{dp} = \mu_{JT}(p, T)$$

$$T_2 = T(p_2)$$

wobei

p_1	Anfangsdruck	[Pa]
T_1	Anfangstemperatur	[K]
p_2	Enddruck	[Pa]
$T(p)$	Lösung des Anfangswert-Problems	
T_2	Endtemperatur	[K]

4.7 Berechnung der Gaseigenschaften unter Nutzung der Gaszusammensetzung

Bei Gastransport und -verteilung sind volumetrische Mengen und Einheiten gebräuchlich.

- Durchfluss und Leitungsinhalt werden in volumetrischen Standardeinheiten ausgedrückt (definiert für Normbedingungen, z.B. ein Druck von 101.325 kPa und eine Temperatur von typischerweise 0, 15 oder 20°C)
- Volumetrischer Brennwert – pro Volumeneinheit zu Normbedingungen, die thermische Abrechnung basiert auf volumetrischem Fluss und volumetrischem Brennwert.
- Die relative Dichte wird genutzt um das Volumen des Gases in Masse zu konvertieren.
- Die Gaszusammensetzung kann in volumetrischen Anteilen ausgedrückt werden (definiert für Normbedingungen) statt in molaren oder Masse-Anteilen.

Andererseits basieren alle oben genannten Gleichungen (Flussgleichung, Zustandsgleichung) auf Masse oder molar ausgedrückten Größen.

SIMONE unterstützt die Konvertierung von molaren Mengen in volumetrische und zurück, wo immer möglich, im Einklang mit der ISO 6976 Norm.

4.7.1 Die Berechnung von relativer Dichte und volumetrischer Brennwert bei Gaszusammensetzungen

Die relative Gasdichte r ist bezogen auf die molare Masse M

$$r = \frac{z_{air,0} M}{z_0 M_{air}}$$

wobei

$z_{air,0}$ Kompressibilitätsfaktor von Luft bei Normbedingungen [1]

$$z_{air}(p_0, 0^\circ\text{C}) = 0.99941$$

$$z_{air}(p_0, 15^\circ\text{C}) = 0.99958$$

$$z_{air}(p_0, 20^\circ\text{C}) = 0.99963$$

$$p_0 = 101.325 \text{ kPa}$$

M_{air} Molares Gewicht von Luft [kg.kmol⁻¹]

$$M_{air} = 28.9626 \text{ kg.kmol}^{-1}$$

z_0 Kompressibilitätsfaktor von Luft bei Normbedingungen [1]

M Molare Masse des Gasgemisches [kg.kmol⁻¹]

$$M = \sum_{i=1}^N x_i M_i$$

x_i Molare Anteile der Gemischkomponenten [1]

M_i Molares Gewicht der Gemischkomponenten [kg.kmol⁻¹]

Der molare Brennwert ist die Wärmemenge, die freigesetzt wird wenn 1 kmol Gas bei konstantem Druck $p_0 = 101.325 \text{ kPa}$ verbrannt wird, wobei die Temperatur von Gas und Luft vor der Verbrennung sowie die Temperatur der Verbrennungsprodukte gleich ist.

$$\tilde{H}_U [T_H] \text{ [MJ.kmol}^{-1}\text{]}$$

T_H Temperatur der Verbrennungsprodukte (0, 15, 20 oder 25°C)

SIMONE nutzt den oberen Brennwert (d.h. das gesamte Wasser in den Verbrennungsprodukten ist kondensiert) bei einer Temperatur von $T_H = 25^\circ\text{C}$

Der molare Brennwert für ein Gasgemisch ist gegeben durch die einfach gewichtete Summe der molaren Brennwerte der individuellen Gemischkomponenten:

$$\tilde{H}_U = \sum_{i=1}^N x_i \tilde{H}_{U,i}$$

Der volumetrische Brennwert ist die Wärmemenge die freigesetzt wird wenn 1 m³ std Gas bei einem konstanten Druck $p_0 = 101.325 \text{ kPa}$ verbrennt (wobei die Temperatur von Gas und Luft vor der Verbrennung sowie die Temperatur der Verbrennungsprodukte gleich ist).

$$H_U = H_U [T_H, T_0] \text{ [MJ/m}^3 \text{ std.]}$$

T_0 Temperatur bei Normbedingungen (typischerweise 0, 15 oder 20°C) um 1 m³ std zu definieren.

Die Beziehung zwischen molarem und volumetrischem Brennwert ist durch folgende Formel gegeben

$$H_U[T_H, T_0] = \frac{\tilde{H}_U[T_H]}{z_0} \frac{p_0}{\tilde{R}T_0}$$

Für die oben genannte Konvertierungsformel ist der Kompressibilitätsfaktor von Gas bei Normbedingungen z_0 notwendig.

Für bekannte Zusammensetzungen von Gasgemischen kann der Kompressibilitätsfaktor bei Normbedingungen mit der ISO 6976 Formel berechnet werden.

$$z_0 = 1 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \sqrt{b_i} \right)^2$$

$\sqrt{b_i}$ Summationsfaktor für die Komponente i [1]

Die Daten für individuelle Komponenten (Brennwerte $\tilde{H}_{U,i}$, Summationsfaktoren $\sqrt{b_i}$ für 0, 15 und 20°C) sind der Tabelle ISO 6976:1995(E), Tabelle 1-3 entnommen.

4.7.2 Die Umrechnung von molaren zu volumetrischen Anteilen und umgekehrt

Volumetrische Anteile y_i sind für Normbedingungen $p_0 = 101.325$ kPa, T_0 (typischerweise 0, 15 oder 20°C) definiert. Die Umrechnungsformeln lauten

$$x_i = \frac{\frac{y_i}{z_{0,i}}}{\sum_{j=1}^N \frac{y_j}{z_{0,j}}}, \quad i = 1, \dots, N$$

$$y_i = \frac{x_i z_{0,i}}{\sum_{j=1}^N x_j z_{0,j}}, \quad i = 1, \dots, N$$

wobei

$z_{0,i}$ Kompressibilitätsfaktor von Komponente i unter Normbedingungen [1]

Die Werte von $z_{0,i}$ sind ISO 6976:1995(E), Tabelle 2 entnommen.

5 Qualitätsverfolgung

Um die Dynamik einzelner Komponenten eines Gasgemischs in einem Rohrleitungssystem exakt zu beschreiben, muss das mathematische Modell die Mengenbilanzgleichung für jede Komponente enthalten.

$$\frac{\partial mc_i}{\partial x} + S \frac{\partial \rho c_i}{\partial t} = 0, \quad i = 1 \dots N$$

wobei

m	Mengendurchfluss	$[\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}]$
S	Rohrquerschnitt	$[\text{m}^2]$
ρ	Gasdichte	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$
$c_i \dots c_N$	Mengenanteile der Gaskomponenten	[1]
x	Längenkoordinate	$[\text{m}]$
t	Zeit	$[\text{s}]$

Die Impulsgleichung bleibt unberührt.

5.1 Lösungsverfahren

Die Anzahl der oben genannten zusätzlichen teilweise differentialen Gleichungen würde die Lösung essentiell erschweren. Aus diesem Grund wurde ein Näherungsverfahren, basierend auf folgenden Annahmen, eingeführt:

- Das Qualitätssignal ist diskret, d.h., sein Wert ist nur für die diskrete Abtastzeit bekannt und es gibt keine Information innerhalb des Abtastzeitraums,
- Weder der Zeitschritt des Abtastens noch der Zeitschritt der Berechnung noch der Abtastzeitraum anderer Variablen muss gleich sein.

Der Wert einer Abtastung eines Qualitätsparameters – Qualitätsmarke genannt, ist bezogen auf das Infinitesimalvolumen von Gas welches genau zu dem Zeitpunkt der Abtastung vorhanden ist. Die Qualitätsmarke ist gekennzeichnet durch ihre Position sowie durch eine Reihe von Werten, die sich auf die jeweils entsprechenden, zu verfolgenden Qualitätsparameter beziehen.

Die Qualitätsverfolgung hat also die Aufgabe

- Die Bewegung aller Qualitätsmarken, die an den Einspeiseknoten in das Netz eintreten, bis zum Verlassen des Systems zu verfolgen,
- Das Mischen von Qualitätswerten in allen Knoten eines Netzes, mit denen mehr als ein Gasstrom verbunden ist, zu simulieren.

Die Bewegung von Qualitätsmarken wird in einer 2-stufigen Prozedur simuliert:

1. In jedem Zeitschritt der Simulation oder Zustandsrekonstruktion werden alle Zustandsvariablen für jedes Rohrelement berechnet. Nachdem diese Berechnung des Zeitschritts beendet ist, werden die Fließgeschwindigkeiten von der Qualitätsverfolgung dazu verwendet, die neuen Positionen aller Qualitätsmarken, die Mischung der Qualitätsparameter in den Kreuzungen des Netzes und die interpolierten Qualitätswerte in den Knoten zu berechnen.
2. Da einige Koeffizienten des Simulationsmodells selbst von den Gasparametern abhängen, und zwar von der relativen Dichte, dem Brennwert, der kritischen Temperatur und dem kritischen Druck, werden alle diese Werte im nächsten Schritt der Simulation dazu verwendet, neue Werte der entsprechenden Koeffizienten zu berechnen.

5.2 Qualitätsparameter

Die Qualitätsparameter werden grundsätzlich in drei Gruppen eingeteilt:

1. *Gasphysikalische Eigenschaften*

- Relative Dichte von Gas
- Volumetrischer Gasbrennwert
- Pseudokritische Temperatur eines Gasgemischs
- Pseudokritischer Druck eines Gasgemischs
- Azentritätsfaktor eines Gasgemischs
- Drei Koeffizienten für die spezifische Wärme des idealen Gases

$$(\tilde{c}_p^0(T) = A + B \cdot T + C \cdot T^2)$$

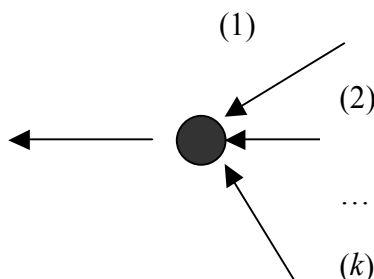
2. *Benutzerdefinierte Parameter*
 - Jede benutzerdefinierte Gaseigenschaft (pro 1 m³ std. Gas)
3. *Gaszusammensetzung*
 - Molare Anteile von Gaskomponenten

Eine solche Aufteilung korrespondiert mit den Qualitätsverfolgungsoptionen, die im Netzeditor für das jeweilige Netz gesetzt wurden. Die verfügbaren Optionen sind:

- *Einheitliche Qualitätsverteilung* – das Netz ist mit Gas nur einer Zusammensetzung gefüllt.
- *Verfolgung physikalischer Parameter* – verschiedene Gase können an individuellen Einspeiseknoten in das Netz kommen. Zur Beschreibung des Gasverhaltens wird nur der Satz der physikalischen Eigenschaften für das Netz genutzt und verfolgt. Diese Vorgehensweise impliziert, dass nur 2 oder 3 parametrische Zustandsgleichungen genutzt werden können.
- *Verfolgung der Gaszusammensetzung* – verschiedene Gase können an individuellen Einspeiseknoten in das Netz kommen, und beides, physikalische Eigenschaften und Gaszusammensetzung werden durch das Netz verfolgt.

5.3 Misch-Regeln

Im folgenden wird die Mischung von k Gasströmen in einem Knoten betrachtet:



Die Mischung verschiedener Gasströme wird durch die folgende Bilanzgleichungen beschrieben:

- Massenbilanz:

$$m = \sum_{j=1}^k m^{(j)}$$

- Molarbilanz (zu beachten: keine chemische Reaktionen):

$$\frac{m}{M} = \sum_{j=1}^k \frac{m^{(j)}}{M^{(j)}}$$

wobei

m	Massendurchfluss	[kg·s ⁻¹]
M	Molares Gasgewicht	[kg·kmol ⁻¹]
hochgestellt (j)	Gasstrom j	

Daher kann die Mischregel für alle Gasqualitätsparameter in einer kompakten Form geschrieben werden:

$$\begin{pmatrix} M \\ \tilde{H}_U \\ T_c \\ p_c \\ \omega \\ A \\ B \\ C \\ x_1 \\ \vdots \\ x_N \\ \tilde{\Psi} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sum_{j=1}^k \frac{m^{(j)}}{M^{(j)}}} \sum_{j=1}^k \frac{m^{(j)}}{M^{(j)}} \begin{pmatrix} M^{(j)} \\ \tilde{H}_U^{(j)} \\ T_c^{(j)} \\ p_c^{(j)} \\ \omega^{(j)} \\ A^{(j)} \\ B^{(j)} \\ C^{(j)} \\ x_1^{(j)} \\ \vdots \\ x_N^{(j)} \\ \tilde{\Psi}^{(j)} \end{pmatrix}$$

wobei

M	Molare Gasmasse	[kg.kmol ⁻¹]
\tilde{H}_U	Molarer Gasbrennwert	[MJ.kmol ⁻¹]
T_c	Pseudokritischer Gasdruck	[K]
p_c	Pseudokritische Gastemperatur	[bar]
ω	Azentritätsfaktor	[1]
A, B, C	Koeffizienten der spezifischen Wärme des idealen Gases	$\tilde{c}_p^0(T) = A + B \cdot T + C \cdot T^2$
x_i	Molare Anteile der Mischkomponenten	[1]
$\tilde{\Psi}$	Jeder (benutzerdefinierte) Gasparameter pro 1 kmol. Gas	[x.kmol ⁻¹]

6 Temperaturdynamik

In einer Standard-SIMONE Installation ist die Temperaturdynamik insofern berücksichtigt, als dass der Temperaturverlust in einer Rohrleitung hinter einer Verdichterstation oder einem Regler mit einem festen exponentiellen Modell berechnet werden. Die Temperatur an jedem Knoten kann für jeden Zeitschritt individuell eingegeben werden.

Für die meisten Fälle ist dieses Konzept völlig ausreichend. Nichtsdestotrotz gibt es Fälle in denen die Beschreibung der Temperaturdynamik erforderlich ist – Rohrabschnitte die einer Verdichterstation nachgelagert sind, Unterwasserleitungen, und lange Rohrabschnitte mit hohem Druckverlust. In all diesen Fällen führt das Vernachlässigen der Wärmebilanz zu einem Verlust an Genauigkeit. Aus diesem Grund ist das Temperaturdynamik-Modell in SIMONE verfügbar.

6.1 Differentialgleichungen

Die Temperaturdynamik besteht aus zwei Komponenten:

- dynamische Temperatureffekte im Gas aufgrund des Joule-Thomson -Effekts – "axiale" Dynamik.
- dynamische Temperatureffekte aufgrund des Wärmeaustausches zwischen dem fließendem Gas und dem umgebenden Rohr zusammen mit der weiteren Umgebung - "radiale" Dynamik.

Die folgende Form der Energiegleichung wird in SIMONE benutzt:

$$S\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + w \frac{\partial T}{\partial x} \right) - S \left(1 + \frac{T}{z} \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_p \right) \frac{\partial p}{\partial t} - S w \frac{T}{z} \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_p \frac{\partial p}{\partial x} + S w g_p \frac{dh}{dx} + Q_E = 0$$

wobei

S	Rohrleitungsquerschnitt	$[m^2]$
ρ	Gasdichte	$[kg.m^{-3}]$
c_p	spezifische Wärme	$[J.kg^{-1}.K^{-1}]$
T	Gastemperatur	$[K]$
t	Zeit	$[s]$
w	Fließgeschwindigkeit	$[m.s^{-1}]$
x	'Längen-' Koordinate	$[m]$
p	Druck	$[Pa]$
z	Kompressibilitätsfaktor	$[1]$
g	Erdbeschleunigung	$[m.s^{-2}]$
h	Geodätische Höhe	$[m]$
Q_E	Wärmefluss durch die innere Oberfläche des Rohres in das umgebende Erdreich pro Längeneinheit	$[J.s^{-1}.m^{-1}]$

Die Beschreibung des Wärmeflusses Q_E sollte den Effekt der Wärmekapazität des rohrumgebenden Erdreichs aufzeigen, z.B. wenn ein Gas, welches kälter als das nahe Erdreich ist in das Rohr kommt, tritt ein Wärmerückfluss von der Erde zum Gas ein (bis dass das nahe Erdreich abgekühlt ist). Dieses sollte genau modelliert werden.

Der Charakter der dynamischen Prozesse im Rohr und im umgebenden Boden ist "starr" – er besteht aus einer schnellen Komponente die sich auf die nahe Umgebung bezieht und einer sehr langsamen Komponente in Bezug auf die entfernte Umgebung. Darum sollte dieser Prozess mindestens durch 2 Kapazitäten mit unterschiedlichen Zeitkonstanten modelliert werden:

$$C_1 \frac{dT_{s1}}{dT} = \alpha_1 (T - T_{s1}) - \alpha_2 (T_{s1} - T_{s2})$$

$$C_2 \frac{dT_{s2}}{dT} = \alpha_2 (T_{s1} - T_{s2}) - \alpha_3 (T_{s2} - T_{soil})$$

wobei

T	Gastemperatur	[K]
T_{s1}	Temperatur des nahen Erdreichs auf der Oberfläche der ersten Schicht	[K]
T_{s2}	Temperatur des nahen Erdreichs auf der Oberfläche der zweiten Schicht	[K]
T_{soil}	Temperatur des entfernten Erdreichs, nicht beeinflusst durch die Temperaturschwankungen des Gases, dieser Wert wird im SIMONE Szenario als Bodentemperatur (GT) bezeichnet.	[K]
C_1	Wärmekapazität der ersten Schicht (pro Einheit der Rohrlänge)	[J.m ⁻¹ .K ⁻¹]
C_2	Wärmekapazität der zweiten Schicht (pro Einheit der Rohrlänge)	[J.m ⁻¹ .K ⁻¹]
α_1	Wärmeübergangs-Koeffizient durch die erste Schicht (pro Einheit der Rohrlänge)	[J.m ⁻¹ .K ⁻¹ .s ⁻¹]
α_2	Wärmeübergangs-Koeffizient durch die zweite Schicht (pro Einheit der Rohrlänge)	[J.m ⁻¹ .K ⁻¹ .s ⁻¹]
α_3	Wärmeübergangs-Koeffizient zwischen der Oberfläche der zweiten Schicht und der Oberfläche des entfernten Bodens (mit konstanter Temperatur)	[J.m ⁻¹ .K ⁻¹ .s ⁻¹]

Der Wärmemengendurchfluss Q_E ist dann in der Gleichung durch den ersten Ausdruck auf der rechten Seite für die Temperatur der ersten Schicht gegeben.

$$Q_E = \alpha_1 (T - T_{s1})$$

Die stationäre Lösung der axialen Wärmedynamik führt zu der Formel:

$$Q_E = \pi D k (T - T_{soil})$$

wobei

D	Innerer Rohrdurchmesser	[m]
k	Wärmetransferkoeffizient zwischen Gas und entferntem Erdreich (pro Einheit der inneren Rohroberfläche), dieser Wert wird in SIMONE als Wärmetransferkoeffizient bezeichnet (HTC).	[J.m ⁻² .K ⁻¹ .s ⁻¹]

SIMONE ermöglicht die Nutzung beider Modelle axialer Wärmedynamik in Szenarien:

- Einfach – nur der stationäre Wärmemengendurchfluss zwischen Rohr und Umgebung wird berücksichtigt. Dieses Modell wird in stationären Szenarien genutzt.
- Voll – die volle axiale Dynamik wird berücksichtigt. Der Anfangszustand muss jedoch sorgfältig vorbereitet werden – die initiale Gastemperaturverteilung sollte eine stationär gerechnete sein, um das axiale Modell sinnvoll zu initialisieren.

6.2 Wärmeübergangs-Koeffizient in SIMONE

Im folgenden Abschnitt werden grundlegende Empfehlungen für den Wert des Wärmeübergangs-Koeffizienten zusammengefasst.

Der Wärmefluss zwischen Gas und Umgebung (in einer stationären Situation) wird in Simone mit folgender Gleichung beschrieben:

$$Q_E = \pi D HTC (T - T_{soil})$$

wobei

Q_E	Wärmefluss von Gas durch die innere Rohroberfläche in die Umgebung pro Längeneinheit	$[J.s^{-1}.m^{-1}]$
D	Innerer Rohrdurchmesser	$[m]$
T	Gastemperatur	$[K]$
HTC	Wärmetransferkoeffizient zwischen Gas und entferntem Erdreich (pro Einheit der internen Rohroberfläche), dieser Wert wird in einem SIMONE Szenario als Wärmetransferkoeffizient (HTC) bezeichnet.	$[J.m^{-2}.K^{-1}.s^{-1}]$
T_{soil}	Bodentemperatur, nicht beeinflusst durch die Temperaturschwankungen des Gases, dieser Wert wird in SIMONE als Bodentemperatur (GT) bezeichnet.	$[K]$

Angenommen, bei einem zylindrischen Modell von n Schichten verschiedener Materialien hat die letzte Schicht eine konstante Temperatur gleich T_{soil} . Der Wärmefluss zwischen Gas und Umgebung ist dann beschrieben als

$$Q_E = \frac{2\pi}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i} \ln \frac{D_{i+1}}{D_i}} (T - T_{soil})$$

wobei

D_i	Durchmesser der Schicht i , für $i = 1$ ist dies der innere Rohrdurchmesser	$[m]$
λ_i	Wärmeleitfähigkeit des Materials der Schicht zwischen D_i und D_{i+1}	$[W.m^{-1}.K^{-1}]$

Durch den Vergleich beider Gleichungen erhält man die Gleichung für den Wärmetransferkoeffizienten

$$HTC = \frac{2}{D_1 \sum_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i} \ln \frac{D_{i+1}}{D_i}}$$

Aufgrund der hohen Leitfähigkeit und geringen Dicke der Rohrwand kann diese vernachlässigt werden. Eine typische Situation stellt sich bei zwei Schichten, Bitumen und Lehm. Da λ für Bitumen gleich ist mit dem Wert für feuchten Lehm, ist nur eine Schicht nötig und die Gleichung für HTC kann umgestellt werden:

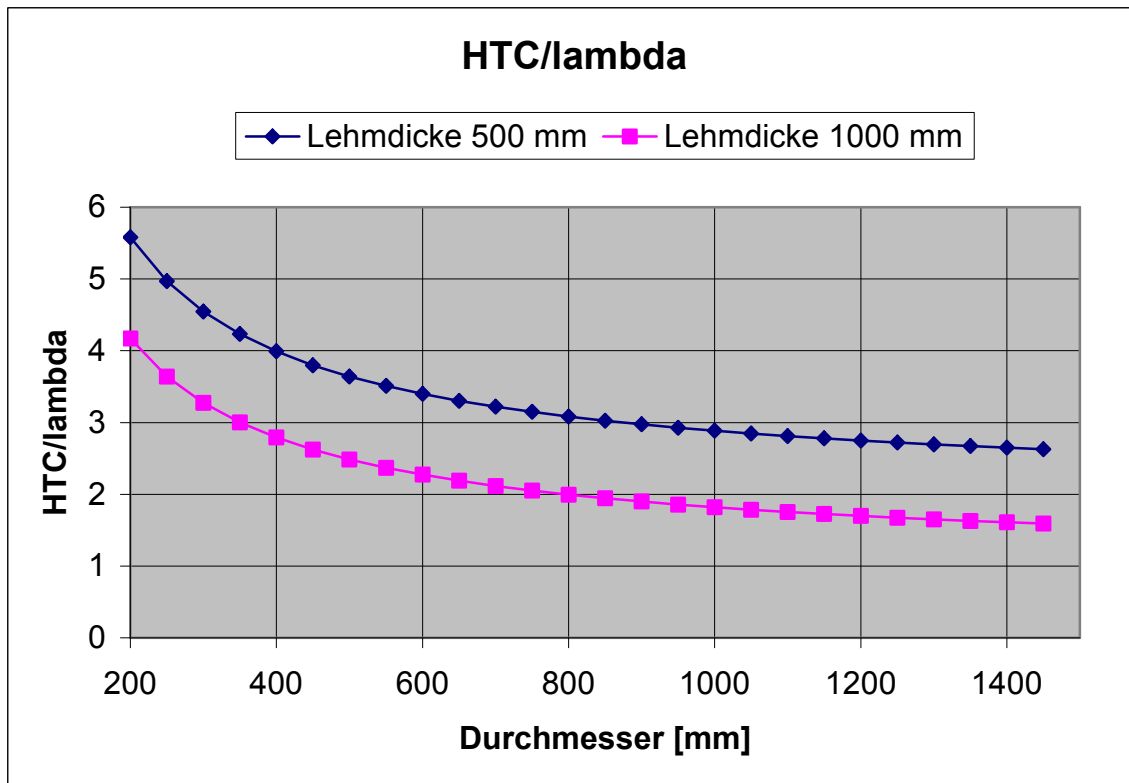
$$HTC = \frac{2\lambda}{D \ln \left(1 + \frac{2\xi}{D} \right)}$$

wobei

ξ	Dicke der Lehmschicht, die Temperatur der äußeren Oberfläche des Lehms wird gleich T_{soil} angenommen.	$[m]$
-------	---	-------

Das folgende Bild zeigt, wie die Dicke des Lehms ξ und der Rohrdurchmesser D die Beziehung zwischen HTC und λ beeinflussen. Die typischen Werte für λ werden in der Tabelle zusammengefasst.

Material	$\lambda [W.m^{-1}.K^{-1}]$
Beton	1.28 – 1.5
Trockener Lehm	0.14
Feuchter Lehm	0.65
Bitumen	0.6



6.3 Unterdrücken des Joule-Thomson-Effekts für Rohre

Eine spezielle Anwenderanforderung, den Joule-Thomson-Effekt fallweise zu unterdrücken, wird von SIMONE erfüllt, wenn im Szenario explizit der JTEP-Parameter verwendet wird.

Wenn man die Energiegleichung umstellt um den Joule-Thomson-Koeffizienten herauszuarbeiten

$$S \rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + w \frac{\partial T}{\partial x} \right) - S \left(1 + \rho c_p \mu_{JT} \right) \frac{\partial p}{\partial t} - S w \rho c_p \mu_{JT} \frac{\partial p}{\partial x} + S w g \rho \frac{dh}{dx} + Q_E = 0$$

dann führt das Vernachlässigen des Joule-Thomson-Effekts zu

$$S \rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + w \frac{\partial T}{\partial x} \right) - S \frac{\partial p}{\partial t} + S w g \rho \frac{dh}{dx} + Q_E = 0$$

7 Verdichterstationen

7.1 Grundlegende thermodynamische Beziehungen

7.1.1 Druckverhältnis

$$\varepsilon = \frac{p_o}{p_i}$$

wobei

ε	Druckverhältnis	[1]
p_i	Eingangs- (Ansaug-) druck	[Pa]
p_o	Ausgangs- (Austritts-) druck	[Pa]

7.1.2 Isentrope Enthalpieänderung

$$H_{ad} = \frac{\kappa}{\kappa - 1} R T_i z_i \left(\varepsilon^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} - 1 \right)$$

wobei

H_{ad}	Isentrope Enthalpieänderung	[kJ.kg ⁻¹]
κ	Isentropischer Exponent (Mittelwert)	[1]
R	Gaskonstante	[J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]
T_i	Gas-Eingangstemperatur	[K]
$z_i = z(p_i, T_i)$	Kompressibilitätsfaktor bei Eingangsbedingungen	[1]
ε	Druckverhältnis	[1]

7.1.3 Isentroper Wirkungsgrad

$$\eta_{ad} = \frac{H_{ad}}{H_o - H_i}$$

wobei

η_{ad}	Isentroper Wirkungsgrad	[1]
H_{ad}	Isentrope Enthalpieänderung	[kJ.kg ⁻¹]
H_i	Enthalpie bei Eingangsbedingungen	[kJ.kg ⁻¹]
H_o	Enthalpie bei Ausgangsbedingungen	[kJ.kg ⁻¹]

7.1.4 Antriebsleistung

$$P = m(H_o - H_i) = m \frac{H_{ad}}{\eta_{ad}}$$

wobei

m	Mengendurchfluss	[kg.s ⁻¹]
η_{ad}	Isentroper Wirkungsgrad	[1]
H_{ad}	Isentrope Enthalpieänderung	[kJ.kg ⁻¹]
H_i	Enthalpie bei Eingangsbedingung	[kJ.kg ⁻¹]
H_o	Enthalpie bei Ausgangsbedingung	[kJ.kg ⁻¹]

7.1.5 Ausgangstemperatur

Die Berechnung der Ausgangstemperatur erfolgt in zwei Schritten:

1. Temperaturänderung infolge der Verdichtung des idealen Gases. Die Formel benutzt den THETAEQ (Theta-Gleichungs-) Szenarioparameter:

- **Grundlegende** (Standard-) Gleichung unter Berücksichtigung von

$$T_x = T_i \varepsilon^{\frac{\kappa-1}{\kappa \eta_{ad}}}$$

- **RG1991** (Fasold et al)

$$T_x = T_i \left(\frac{\varepsilon^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} - 1}{\eta_{ad}} + 1 \right)$$

- **Isentropische** Gleichung

$$T_x = T_i \varepsilon^{\frac{\kappa-1}{\kappa}}$$

2. Die Temperatur T_x aus dem vorhergehenden Schritt wird für das Verhalten des realen Gases mit einer der folgenden Gleichungen korrigiert, wie durch den Szenarioparameter THETACOR- (Theta Korrektur) gewählt:

- **Grundlegend** (Standard)

$$T_o = T_x \frac{z_i}{z(p_o, T_x)}$$

- **RG1991** – T_o iterativ, beginnend mit T_x (Fasold et al)

$$T_o = T_x \frac{z_i}{z(p_o, T_o)}$$

- **Keine** Korrektur

$$T_o = T_x$$

wobei

T_i	Eingangstemperatur des Gases	[K]
κ	Isentropischer Exponent (Mittelwert)	[1]
ε	Druckverhältnis	[1]
η_{ad}	Isentroper Wirkungsgrad	[1]
T_x	Ausgangstemperatur des idealen Gases nach Verdichtung	[K]
z	Kompressibilitätsfaktor	[1]
T_o	Ausgangstemperatur des Gases	[K]

7.1.6 Isentropischer Exponent

Der Mittelwert des Isentropischen Exponenten wird mit einer der drei Methoden berechnet, gemäß dem KAPPA (isentropische Exponentenberechnung) –Szenarioparameter:

1. **Konstant** (Standard) – der isentropische Exponent ist konstant und gleich dem Wert der im Netzeditor gesetzt wurde.
2. **RG Gleichung** – eine Temperaturabhängige Beziehung wird genutzt

$$k(T) = 1.290 - 5.8824 \times 10^{-4} (T - 273.15)$$

wobei

$$T = \frac{T_i + T_o}{2} \quad \text{mittlere Gastemperatur während der Verdichtung} \quad [\text{K}]$$

3. **Zustandsgleichung** – der isentropische Exponent wird berechnet aus der jeweils genutzten Zustandsgleichung

$$\kappa = \frac{z}{Z_p - \frac{R}{c_p} Z_T^2}$$

wobei

$$z \quad \text{Kompressibilitätsfaktor} \quad [1]$$

$$Z_p = z - p \left(\frac{\partial z}{\partial p} \right)_{T, x_1 \dots x_N} \quad \text{Dimensionlose Ableitung des Kompressibilitätsfaktors} \quad [1]$$

$$Z_T = z + T \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{p, x_1 \dots x_N} \quad \text{Dimensionlose Ableitung des Kompressibilitätsfaktors} \quad [1]$$

$$R \quad \text{Gaskonstante} \quad [\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$$

$$c_p \quad \text{Wärmekapazität des realen Gases (bei konstantem Druck)} \quad [\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$$

Der Mittelwert des isentropischen Exponenten wird benutzt:

$$\kappa = \frac{\kappa_i + \kappa_o}{2}$$

7.1.7 Betriebsvolumenfluss

$$Q_{vol,i} = \frac{m}{\rho_i} = m \frac{RT_i z_i}{p_i}$$

wobei

$$Q_{vol,i} \quad \text{Betriebsvolumenfluss bei Eingangsbedingungen} \quad [\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}]$$

$$m \quad \text{Mengendurchfluss} \quad [\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}]$$

$$\rho_i \quad \text{Gasdichte bei Eingangsbedingungen} \quad [\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$$

$$R \quad \text{Gaskonstante} \quad [\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$$

$$T_i \quad \text{Eingangstemperatur des Gases} \quad [\text{K}]$$

$$z_i \quad \text{Kompressibilitätsfaktor bei Eingangsbedingungen} \quad [1]$$

7.2 Turboverdichter

SIMONE benutzt die Kennfeldbeschreibung des Turboverdichters in den Koordinaten

Eingangsbetriebsvolumenfluss $Q_{vol,i}$ - Isentrope Enthalpieänderung H_{ad} .

Das Kennfeld wird durch eine Reihe von Kurven angenähert, die die isentrope Enthalpie und den isentropen Wirkungsgrad als biquadratische Polynome in Drehzahl und Betriebsvolumenfluss ausdrücken:

$$H_{ad} = \begin{pmatrix} 1 & n & n^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 & a_4 & a_7 \\ a_2 & a_5 & a_8 \\ a_3 & a_6 & a_9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ Q_{vol,i} \\ Q_{vol,i}^2 \end{pmatrix}$$

$$\eta_{ad} = \begin{pmatrix} 1 & n & n^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 & b_4 & b_7 \\ b_2 & b_5 & b_8 \\ b_3 & b_6 & b_9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ Q_{vol,i} \\ Q_{vol,i}^2 \end{pmatrix}$$

wobei

η_{ad}	isentropen Wirkungsgrad	[1]
H_{ad}	isentrope Enthalpieänderung	[kJ.kg ⁻¹]
n	Verdichterzahl (r.p.m.)	[min ⁻¹]
$Q_{vol,i}$	Betriebsvolumenfluss bei Eingangsbedingungen	[m ³ .s ⁻¹]
$a_1 \dots a_9, b_1 \dots b_9$	Koeffizienten	

7.3 Kolbenverdichter

Das Arbeitskennfeld des Kolbenverdichters wird in Koordinaten Eingangsbetriebsvolumenfluss $Q_{vol,i}$ - Wellendrehmoment M_T ausgedrückt.

Der Eingangsbetriebsvolumenfluss entspricht der Drehzahl

$$Q_{vol,i} = V_W \frac{n}{60}$$

wobei

$Q_{vol,i}$	Betriebsvolumenflussrate bei Eingangsbedingung	[m ³ .s ⁻¹]
V_W	Arbeitsvolumen des Verdichters (pro Umdrehung)	[m ³]
n	Umdrehungen pro Minute	[min ⁻¹]

Das Drehmoment bezieht sich auf die Wellenleistung

$$P_S = 2\pi \frac{n}{60} M_T$$

wobei

P_S	Wellenleistung	[kW]
n	Umdrehungen	[min ⁻¹]
M_T	Drehmoment	[kNm]

Kombiniert man die oben genannten Gleichungen mit der allgemeinen Formel für Verdichter-Wellenleistung, erhält man die Beziehung zwischen isentroper Enthalpieänderung und Drehmoment:

$$M_T = \frac{V_W}{2\pi\eta_{ad}} H_{ad} \rho_i$$

wobei

V_W	Arbeitsvolumen des Verdichters (pro 1 Wellenumdrehung)	[m ³]
η_{ad}	Isentroper Wirkungsgrad (im gesamten Arbeitsbereich des Kolbenverdichters als konstant vorausgesetzt)	[1]
H_{ad}	Isentrope Enthalpieänderung	[kJ.kg ⁻¹]
ρ_i	Dichte des Gases bei Eingangsbedingungen	[kg.m ⁻³]

7.4 Gasturbine

Gasturbinen werden durch zwei Diagramme beschrieben:

1. Der maximale Turbinendurchsatz als Funktion von Verdichterdrehzahl und Umgebungstemperatur, angenähert durch ein biquadratisches Polynom:

$$P_{\max} = \begin{pmatrix} 1 & n & n^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 & c_4 & c_7 \\ c_2 & c_5 & c_8 \\ c_3 & c_6 & c_9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ t_{amb} \\ t_{amb}^2 \end{pmatrix}$$

wobei

P_{\max}	maximaler Turbinendurchsatz	[kW]
n	Verdichterdrehzahl (r.p.m.)	[min ⁻¹]
t_{amb}	Außen-(Ansaugluft-)temperatur	[°C]
$c_1 \dots c_9$	Koeffizienten	

2. Brenngasverbrauch als Funktion der Wellenleistung, angenähert durch die Parabel

$$P_F = d_1 + d_2 P_S + d_3 P_S^2$$

wobei

P_F	Brenngasverbrauch in Energieeinheiten	[kWh.h ⁻¹]
P_S	Turbinenleistung	[kW]
$d_1 \dots d_3$	Koeffizienten	

7.5 Gasmotor

Ein Gasmotor wird mit 2 Kurven beschrieben:

1. Wellenleistung als Funktion der Geschwindigkeit, angenähert durch die Parabel:

$$P_{\max} = c_1 + c_2 n + c_3 n^2$$

wobei

P_{\max}	Maximale Motorleistung	[kW]
n	Motordrehzahl (r.p.m.)	[min ⁻¹]
$c_1 \dots c_3$	Koeffizienten	

2. Der Brenngasverbrauch als Funktion der Wellenleistung, angenähert durch die Parabel:

$$P_F = d_1 + d_2 P_S + d_3 P_S^2$$

wobei

P_F	Brenngasverbrauch in Energieeinheiten	[kWh.h ⁻¹]
P_E	Motorleistung	[kW]
n	Motordrehzahl (r.p.m.)	[min ⁻¹]
$d_1 \dots d_3$	Koeffizienten	

7.6 Elektroantrieb

Der Elektroantrieb wird durch zwei Kurven beschrieben:

1. Wellenleistungskurve:

- a. Für asynchrone Antriebe und Antriebe mit kontinuierlicher Drehzahl wird eine Funktion aus Geschwindigkeit (r.p.m.) und Außentemperatur (Einfluss der Kühlung) in ähnlicher Weise wie für Gasturbinen beschrieben:

$$P_{\max} = \begin{pmatrix} 1 & n & n^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 & c_4 & c_7 \\ c_2 & c_5 & c_8 \\ c_3 & c_6 & c_9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ t_{\text{amb}} \\ t_{\text{amb}}^2 \end{pmatrix}$$

wobei

P_{\max}	Maximale Antriebsleistung	[kW]
n	Antriebsdrehzahl (Geschwindigkeit in r.p.m.)	[min ⁻¹]
t_{amb}	Außentemperatur	[°C]
$c_1 \dots c_9$	Koeffizienten	

- b. Für synchrone Antriebe wird die maximale Wellenleistung als Funktion aus der Drehzahl in ähnlicher Weise wie für Gasmotoren beschrieben:

$$P_{\max} = c_1 + c_2 n + c_3 n^2$$

wobei

P_{\max}	Maximale Antriebsleistung	[kW]
n	Antriebsdrehzahl (Geschwindigkeit in r.p.m.)	[min ⁻¹]
$c_1 \dots c_3$	Koeffizienten	

2. Die Energieverbrauchskurve ist eine Funktion der Wellenleistung:

$$P_E = d_1 + d_2 P_S + d_3 P_S^2$$

wobei

P_E	Energieverbrauch	[kW]
P_S	Antriebsleistung	[kW]
$d_1 \dots d_3$	Koeffizienten	

7.7 Dampfturbinenantrieb (combined cycle)

Um Antriebe mit combined-cycle zu modellieren (primär Gasturbinen, Dampfkessel die deren Abwärme nutzen und sekundär Dampfturbinen als Antrieb eines Verdichters) wird der

Zusammenhang zwischen dem Gesamtverbrauch an Energie der primären Turbinen und der Wellenleistung der sekundären Turbinen beschrieben:

$$F_{FP} = a_1 + a_2 P_{SS} + a_3 P_{SS}^2 \quad \text{oder} \quad P_{SS} = b_1 + b_2 F_{FP} + b_3 F_{FP}^2$$

wobei

F_{FP}	Brenngasverbrauch der primären Gasturbine (Summe für alle primären Gasturbinen) in Energieeinheiten	[kWh.h ⁻¹]
P_{SS}	Wellenleistung der sekundären Dampfturbine	[kW]
$a_1 \dots a_3, b_1 \dots b_3$	Koeffizienten	

Um ständiges Ein/Ausschalten zu vermeiden, kann der combined-cycle:

- Nur dann gestartet werden, wenn der Brenngasverbrauch der primären Turbinen hoch genug ist

$$F_{FP} > F_{FP,start}$$
- Nur dann gestoppt werden, wenn der Brenngasverbrauch unter eine vorgegebene Ausschalt-Schwelle sinkt.

$$F_{FP} < F_{FP,stop} < F_{FT,start}$$

7.8 Gaskühler

Der Gaskühler wird durch eine charakteristische Näherungsgleichung beschrieben:

$$T_o = T_{c,i} + (T_i - T_{c,i}) \exp\left(-\frac{k}{m}\right)$$

wobei

T_i	Gastemperatur am Kühlereingang	[K]
T_o	Gastemperatur am Kühlerausgang	[K]
$T_{c,i}$	Kühlmitteleintrittstemperatur	
m	Durchfluss (Massenstrom)	[kg.s ⁻¹]
k	konstanter Koeffizient	[kg.s ⁻¹]

7.9 Lokaler Druckverlust

Für das Verdichterstationselement kann der Druckverlust an Eingangs- und Ausgangsarmaturen und Rohrleitungen innerhalb der Verdichterstation selbst modelliert werden. Außerdem kann der lokale Druckverlust zwischen Stufen in Betracht gezogen werden.

Der lokale Druckverlust wird mit dem lokalen Druckverlust Koeffizienten berechnet

$$p_i - p_o = \frac{1}{2} \xi \rho_i w_i^2$$

wobei

p_i	Druck am Widerstands-Eingang	[Pa]
p_o	Druck am Widerstands-Ausgang	[Pa]
ξ	Druckverlusts-Koeffizient	[1]
ρ_i	Gasdichte beim Widerstands-Eingang	[kg.m ⁻³]
w_i	Geschwindigkeit beim Widerstands-Eingang	[m.s ⁻¹]

Die Geschwindigkeit des Gases wird mit dem repräsentativen internen Durchmesser der Verdichterstation D berechnet, der in den Netzelementdaten eingegeben wurde:

$$w_i = \frac{4m}{\pi D^2 \rho_i}$$

wobei

m Mengendurchflussrate durch das Element [kg.s⁻¹]
 D Elementdurchmesser [m]

8 Regler

8.1 Vorwärmleistung

Infolge des Joule-Thomson-Effekts geht mit dem Druckverlust in Reglern ein Temperaturverlust einher. Um gefährlich niedrige Temperaturen am Reglerausgang zu vermeiden wird das Gas vorgewärmt, bevor es in den Regler geht.

Der Temperaturverlust wird aus dem integralen Joule-Thomson-Effekt berechnet:

$$T(p_i) = T_i$$

$$\frac{dT}{dp} = \mu_{JT}(p, T)$$

$$T_o = T(p_o)$$

wobei

p_i	Eingangsdruck	[Pa]
T_i	Eingangstemperatur	[K]
p_o	Ausgangsdruck	[Pa]
μ_{JT}	Joule-Thomson-Koeffizient	[K.bar ⁻¹]
$T(p)$	Lösung des Anfangswertproblems	
T_o	Ausgangstemperatur	[K]

Die Vorwärmleistung wird aus folgender Formel berechnet:

$$P = m(T_2 - T_1) \frac{c_p(p_1, T_1) + c_p(p_2, T_2)}{2}$$

wobei

P	Vorwärmleistung	[kW]
m	Mengendurchfluss	[kg.s ⁻¹]
c_p	spezifische Gaswärme	[kJ.kg ⁻¹ .K ⁻¹]
p	Druck	[Pa]
T	Temperatur	[K]
tiefgestellt 1	Wärmetauscher Eingangsbedingung	
tiefgestellt 2	Wärmetauscher Ausgangsbedingung	

8.2 Regler mit Kennlinien

Ein Regler in Zwischenstellung kann modelliert werden als Reglerelement in einem speziellen Betriebszustand und mit einem Sollwert gleich dem prozentualen Öffnungsanteil (ausgedrückt durch den Szenarioparameter SCVO).

Der Durchfluss durch den Regler in Zwischenstellung ist eine Funktion des Eingangsdrucks, des Ausgangsdrucks und der Position des Reglers. Die Position des Reglers wird durch den prozentualen Öffnungsanteil (geschlossen 0 % und völlig offen 100 %) ausgedrückt. Eine individuelle Gleichung für jeden Reglerproduzenten und -typ beschreibt diese Gleichung:

$$m = m(p_i, p_o, o, \dots)$$

wobei

m	Mengendurchfluss	[kg.s ⁻¹]
p_i	Eingangsdruck	[Pa]
p_o	Ausgangsdruck	[Pa]
o	prozentuale Öffnung, $o \in \langle 0,100 \rangle$; 0=geschlossen; 100=völlig offen	[1]
...	steht für andere Parameter, und zwar Gasqualität (relative Dichte) und Eingangstemperatur	

Zwei solcher Formeln sind zurzeit in SIMONE implementiert.

8.2.1 Kennlinie A (Mokveld)

Der Durchfluss durch den Regler ist durch die folgende Formel gegeben:

$$V_0 = C_{V0} C_{VR} \frac{241 F_1 p_1 (Y - 0.148 Y^3)}{\sqrt{r T_1 z_1}}$$

$$Y = \min \left(1.5; \frac{1.63}{F_1} \sqrt{\frac{p_1 - p_2}{p_1}} \right)$$

wobei

V_0	Betriebsvolumenfluss bei Normbedingungen (101.325 kPa und 0°C)	[m ³ .h ⁻¹]
C_{V0}	Größenkoeffizient	[-]
o	prozentuale Öffnung, $o \in \langle 0,100 \rangle$	[1]
$C_{VR}(o)$	Kennlinienkoeffizient, abhängig von der prozentualen Öffnung $C_{VR}(0)=0$; $C_{VR}(100)=1$	[1]
$F_1(o)$	Kennlinienkoeffizient, abhängig von der prozentualen Öffnung $F_1(0)=1$; F_1 fallende Funktion	[1]
p_1	Eingangsdruck (absolut)	[bar]
p_2	Ausgangsdruck (absolut)	[bar]
T_1	Eintrittstemperatur des Gases	[K]
z_1	Kompressibilitätsfaktor bei Eingangsbedingungen	[1]
r	Relative Gasdichte	[1]

Das Verhalten des Reglers ist deshalb mit dem Größenkoeffizienten C_{V0} und den Funktionen $C_{VR}(o)$, $F_1(o)$ (durch die Tabellenwerte definiert) beschrieben.

8.2.2 Kennlinie B (Argus)

Der Durchfluss durch den Regler ist durch die folgende Formel gegeben

- Bei unterkritischer Strömung

$$\frac{p_1}{p_2} < 2$$

$$K_{VS} K_{VR}(o) = \frac{Q_0}{514} \sqrt{\frac{\rho_0 T_1}{(p_1 - p_2) p_2}}$$

- Bei überkritischer Strömung

$$\frac{p_1}{p_2} \geq 2$$

$$K_{VS} K_{VR}(o) = \frac{Q_0}{257 p_1} \sqrt{\rho_0 T_1}$$

wobei

K_{VS}	Größenkoeffizient	$[\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}]$
o	prozentuale Öffnung, $o \in \langle 0, 100 \rangle$	[1]
$K_{VR}(o)$	Funktion des prozentualen Öffnungsanteils	[1]
	$K_{VR}(0) = 0$; $K_{VR}(100) = 1$	
Q_0	Betriebsvolumenstrom bei Normbedingungen (101.325 kPa und 0°C)	$[\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}]$
p_1	Eingangsdruck (absolut)	[bar]
p_2	Ausgangsdruck (absolut)	[bar]
T_1	Eintrittstemperatur des Gases	[K]
ρ_0	Gasdichte bei Normbedingungen (101.325 kPa, 0°C)	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$

Das Reglerverhalten ist deshalb durch den Größenkoeffizienten K_{VS} und die Funktion $K_{VR}(o)$ (definiert durch Tabellenwerte) beschrieben.

8.3 Lokaler Druckverlust

Für das Reglerelement kann der Druckverlust an Eingangs- und Ausgangsteilen im Rohrbereich der Reglerstation dargestellt werden.

Der lokale Druckverlust wird mit dem lokalen Druckverlustkoeffizienten berechnet.

$$p_i - p_o = \frac{1}{2} \xi \rho_i w_i^2$$

wobei

p_i	Druck beim Widerstandseingang	[Pa]
p_o	Druck beim Widerstandsausgang	[Pa]
ξ	Druckverlustkoeffizient	[1]
ρ_i	Gasdichte am Widerstandseingang	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$
w_i	Geschwindigkeit am Widerstandseingang	$[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]$

Die Geschwindigkeit des Gases wird mit dem repräsentativen inneren Durchmesser des Reglers D berechnet, der bei den Netzelementdaten eingegeben wurde.

$$w_i = \frac{4m}{\pi D^2 \rho_i}$$

wobei

m	Durchfluss durch das Element (Massenstrom)	$[\text{kg.s}^{-1}]$
D	Elementdurchmesser	$[\text{m}]$

9 Widerstand

Ein Widerstand ist ein Element, welches den zusammengefassten Widerstand einer Armatur, von teilweise geschlossenen Schiebern, Filteranlagen u.s.w. repräsentiert. Der hydraulische Widerstand ist durch den lokalen Druckverlustkoeffizienten beschrieben. Der resultierende Druckverlust wird mit folgender Gleichung berechnet

$$p_i - p_o = \frac{1}{2} \xi \rho_i w_i^2$$

wobei

p_i	Druck am Widerstandseingang	[Pa]
p_o	Druck am Widerstandsausgang	[Pa]
ξ	Druckverlustkoeffizient	[1]
ρ_i	Gasdichte beim Widerstandseingang	[kg.m ⁻³]
w_i	Geschwindigkeit beim Widerstandseingang	[m.s ⁻¹]

Die Geschwindigkeit des Gases wird mit dem repräsentativen inneren Durchmesser des Widerstands D berechnet, der bei den Netzelementdaten eingegeben wurde.

$$w_i = \frac{4m}{\pi D^2 \rho_i}$$

Das Widerstandselement arbeitet in beiden Richtungen des Gasflusses.

Die Beschreibung des Widerstands schließt den Temperaturverlust aufgrund des Joule Thomson-Effekts ein:

$$T(p_i) = T_i$$

$$\frac{dT}{dp} = \mu_{JT}(p, T)$$

$$T_o = T(p_o)$$

wobei

p_i	Eingangsdruck	[Pa]
T_i	Eingangstemperatur	[K]
p_o	Ausgangsdruck	[Pa]
μ_{JT}	Joule-Thomson –Koeffizient	[K.bar ⁻¹]
$T(p)$	Lösung des Anfangswert-Problems	
T_o	Ausgangstemperatur	[K]

10 Zustandsrekonstruktion

Der *Zustand* eines Netzes wird durch einen vollständigen Wertesatz aller Prozessvariablen, einschließlich der Drücke und Flüsse im gesamten Netz beschrieben. Wegen der Ausgleichsvorgänge ändert sich der Zustand laufend.

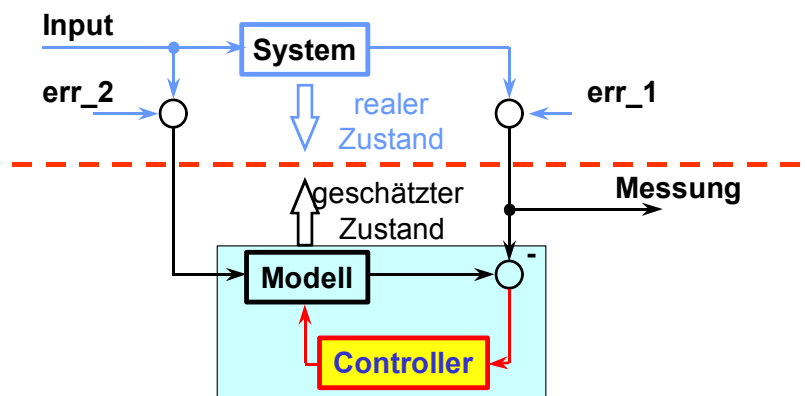
Die Aufgabe, den wahrscheinlichsten aktuellen Zustand eines Netzes auf Basis einer beschränkten Anzahl vom Messwerten zu bestimmen, wird *Zustandsrekonstruktion* (Zustandserkennung, Zustandsestimation) genannt..

In der Regelungstheorie wird das Konzept des *Zustandsbeobachters* zur Lösung dieser Aufgabe genutzt.

In der Literatur sind nur solche Verfahren beschrieben, die für die Messwerte keinen mittleren Fehler und keinen systematischen Fehleranteil voraussetzen.

Die Fähigkeit, den Zustand des gegebenen dynamischen Systems auf der Grundlage eines in einem Zeitintervall gemessenen Messwertesatzes zu finden, wird **Beobachtbarkeit** genannt. Wenn man sich alle im Betrieb befindlichen Kompressorstationen, Steuerventile und geschlossenen Ventile als aus dem Netz entfernt denkt, dann zerfällt das Netz in Teilnetze. Wenn alle Einspeisungen und Abnahmen gemessen sind, die Sollwerte der Nichtrohrelemente bekannt und mindestens eine Druckmessung je Teilnetz vorhanden ist, ist das gesamte System beobachtbar. Ein Teilnetz, in dem die Druckmessung für längere Zeit nicht verfügbar ist, ist nicht beobachtbar, und zwar aus folgendem Grund: Die Fehler der Flussraten-Messung ergeben eine Ungenauigkeit in Bezug auf die Einspeisung-Abnahme Bilanz des Teilnetzes. Ohne die Information über den Druck ist das System nicht in der Lage, diese Ungenauigkeit zu kompensieren.

Die Zustandsrekonstruktion wird als "closed loop" System konstruiert, das aus dynamischem Modell und "Controller" besteht.



Das, was sich oberhalb der gestrichelten Linie befindet, ist uns unbekannt. Wir haben nur ein Modell des Systems und eine eingeschränkte Anzahl Messungen, die durch Fehler ungenau sind. Wenn das Modell eine gute Näherung des Systems darstellt und der Controller den closed loop stabilisiert, dann ist der "Beobachter" (unter der gestrichelten Linie) in der Lage, die Aufgabe der Zustandsrekonstruktion zu erfüllen.

Die Ausgabe des dynamischen Modells wird mit den gemessenen Variablen verglichen. Die Differenz wird vom Controller minimiert, um den Zustand des simulierten Systems möglichst nah an die Realität anzupassen. Die Aufgabe ist es, eine einer optimalen Lösung entsprechende Steuerung zu finden. Wenn die optimale Lösung definiert ist als minimale Varianz des Fehlers der Zustandsrekonstruktion, so ist diese Lösung bekannt als **Kalman Filter**.

10.1 Zustandsrekonstruktion in SIMONE

Bei Rohrleitungsnetzen ist so eine Lösung aufgrund der hohen Dimensionalität nicht praktikabel. Anstelle eines Optimums ist daher ein suboptimales Verfahren implementiert, welches die mathematische Annäherung mit technischen Aspekten kombiniert. Das Resultat ist die

Zustandsrekonstruktion.

Die Zustandsrekonstruktion wird in zwei Schritten durchgeführt:

1. Im ersten Schritt wird ein Simulationslauf berechnet. In diesem Lauf werden die Korrekturen an Einspeisungen und Abnahmen an den Knoten mit Druckmessungen durchgeführt. Die Korrektur erfolgt durch eine zusätzliche fiktive Entnahme, das ist eine Menge, die aufgrund der Druckmessungen unter Beachtung der Genauigkeit der Druck- und Durchflussdaten berechnet wird.
Üblicherweise werden Eingangsdruck, Ausgangsdruck sowie Durchfluss geregelter Elemente (Verdichterstationen und Regler) gemessen. Aus diesen Werten wird ein spezieller Steuermodus konstruiert, um für jedes kontrollierte Element folgende von den hydraulischen Bedingungen abhängige Zielfunktion in den Rohren zu minimieren. Andere Restriktionen, wie die Eigenschaften des Kompressors, werden nicht berücksichtigt.

$$\frac{(p_i - p_i^*)^2}{\sigma_{pi}^2} + \frac{(p_o - p_o^*)^2}{\sigma_{po}^2} + \frac{(m - m^*)^2}{\sigma_m^2} + \frac{(m - m_s)^2}{\sigma_s^2}$$

wobei

p_i, σ_{pi} Eingangsdruck, Genauigkeit der Eingangsdruckmessungen

p_o, σ_{po} Ausgangsdruck, Genauigkeit der Ausgangsdruckmessungen

m, σ_m Durchfluss, Genauigkeit der Durchflussmessungen

m_s, σ_s Durchfluss, bestimmt aus Sollwertanforderungen, Genauigkeit der Durchfluss Sollwertanforderung

* markiert gemessene Werte

Die Genauigkeit des aus den Sollwertanforderungen ermittelten Durchflusses ist auf $0.07m_s$ gesetzt. Wenn ein Messwert nicht verfügbar ist, wird der entsprechende Term in der Zielfunktion ausgelassen..

2. Im zweiten Schritt werden die Abstände zwischen gemessenem und geschätztem Druck der Rohrelemente unter Berücksichtigung der Unsicherheit des Druckabfalls, die im ersten Schritt berechnet wurde, minimiert. Die minimierte Zielfunktion lautet

$$(P - P^*)^T R_{P^*}^{-1} (P - P^*) + (\Delta P - \Delta P_-)^T R_{\Delta P}^{-1} (\Delta P - \Delta P_-) + (P - P_-)^T R_-^{-1} (P - P_-)$$

wobei

P Vektor des geschätzten Drucks

P_- Vektor des Drucks aus dem ersten Schritt

P^* Vektor des gemessenen Drucks (Null in der Diagonalmatrix $R_{P^*}^{-1}$ entspricht dem nichtgemessenen Druck)

ΔP Vektor des geschätzten Druckabfalls in Rohrelementen

ΔP_- Vektor des Druckabfalls in Rohrelementen im ersten Schritt

R_{P^*} Diagonalmatrix in der Elemente ungleich Null nur in den Knoten mit Druckmessungen vorkommen. Die Werte dieser Elemente sind die Varianzen der Druckmessungen.

R_-^{-1} Diagonalmatrix mit positiven Elementen nahe Null. Sie wird nur dann genutzt, um numerische Probleme bei fehlenden Druckmessungen in einigen Teilen

des Netzes zu vermeiden.

$R_{\Delta P}$ diagonale Kovarianzmatrix des Druckabfalls, der vom Rohrwiderstand und von der Unsicherheit des Durchflusses im ersten Schritt abgeleitet wird.

10.2 Messwerte außerhalb der Fehlertoleranz

Das SIMONE Konzept basiert darauf, sogenannte "Ausreißer" bei den Messwerten zu unterdrücken anstatt sie wegzulassen, um den Fall zu vermeiden, dass in einem Teilnetz alle Messwerte fehlen und die Beobachtbarkeit dadurch nicht gegeben ist. SIMONE wendet die folgende Methode an:

- Wenn der Unterschied zwischen den Ergebnissen des ersten Rekonstruktionsschritts und der Druckmessung größer ist als $rel_P * \sigma_P$, wobei rel_P Koeffizient und σ_P die Messgenauigkeit der Druckmessung ist, wird der Differenzwert lokal zur Korrektur der Messgenauigkeit genutzt.
- In gleicher Weise wird, wenn der Unterschied zwischen dem ersten Rekonstruktionsschritt und der Durchflussmessung größer ist als $rel_M * \sigma_M$ ist, wobei rel_M Koeffizient und σ_M die Genauigkeit der Durchflussmessung, dieser Wert lokal genutzt um die Genauigkeit der Messung zu korrigieren.

Die Ergebnisse dieser Annäherung hängen offenkundig von den Parametern rel_P und rel_M ab.

10.3 Parameter der Zustandsrekonstruktion

Die Zustandsrekonstruktion erfordert mehrere Parameter, die in der Programmumgebung definiert sein müssen. Für den initialen Rekonstruktionslauf, bei dem die Ausgangsbedingungen weit von der Wirklichkeit entfernt sein können, sowie für den "normalen" Rekonstruktionslauf, bei dem die Ausgangsbedingungen bereits ziemlich realistisch sind, werden unterschiedliche Parametereinstellungen empfohlen. Die Modifikation dieser Parameter wird jedoch nur erfahrenen Anwendern empfohlen.

rel_qp Reelle Zahl, die die fiktiven Abnahmen modifiziert (diese werden in allen Einspeise-/Abnahmeknoten definiert in denen Druckmessungen verfügbar sind)

$$QP = \frac{\sigma_Q * rel_qp}{\sigma_P} (P - P^*)$$

wobei σ_Q die Genauigkeit der Einspeisung/Abnahme, σ_P die Genauigkeit der Druckmessung darstellt

Empfohlener Wert $\langle 0.2; 1 \rangle$

$sigma_m$ Koeffizient, der die Messungenauigkeit des Druckabfalls im ersten Rekonstruktionsschritt reflektiert. (siehe Matrix $R_{\Delta P}$).

Empfohlener Wert $\langle 0.03; 0.10 \rangle$

rel_P Koeffizient zur Handhabung von "Ausreißer"- Druckmesswerten.
Empfohlener Wert $\langle 3; 10 \rangle$

rel_M Koeffizient zur Handhabung von "Ausreißer"- Durchflussmesswerten.
Empfohlener Wert $\langle 5; 20 \rangle$

Für den initialen Rekonstruktionslauf sollten Parameterwerte nahe der oberen Grenze, für den "normalen" Rekonstruktionslauf Parameterwerte nahe der unteren Grenze genutzt werden.

10.4 Darstellung der Ergebnisse der Zustandsrekonstruktion

Folgende Werte können mit der SIMONE Grafikoberfläche zur Überprüfung der Rekonstruktionsergebnisse angezeigt werden.

<i>Knotenname.phat</i>	Druckkorrektur im Knoten " <i>Knotenname</i> " im zweiten Rekonstruktionsschritt [bar].
<i>Knoten1^Knoten2.qrec</i>	Mittelwert des "Extra Durchflusses" [kg/s], entsprechend der Druckänderung im Element " <i>Knoten1^Knoten2</i> " im letzten (gespeicherten) Zeitschritt.
<i>Teilsystem.aqrec</i>	Mittelwert des "Extra Durchflusses" [kg/s], entsprechend der Druckänderung im Teilsystem " <i>Teilsystem</i> " im letzten (gespeicherten) Zeitschritt. Dieser Wert informiert über das Ungleichgewicht zwischen Einspeisungen/Abnahmen im Teilsystem.
<i>Teilsystem.aqp</i>	Mittelwert des Durchflusses [kg/s] entsprechend der Druckänderung im Teilsystem " <i>Teilsystem</i> " im letzten (gespeicherten) Zeitschritt.
<i>Teilsystem.asupp</i>	Mittelwert des Durchflusses [kg/s] entsprechend der Summe der Einspeisungen im Teilsystem " <i>Teilsystem</i> " im letzten (gespeicherten) Zeitschritt.
<i>Teilsystem.aoff</i>	Mittelwert des Durchflusses [kg/s] entsprechend der Summe der Abnahmen im Teilsystem " <i>Teilsystem</i> " im letzten (gespeicherten) Zeitschritt.

Für das Teilsystem „**TOTAL**“ werden die oben angegebenen Daten für das gesamte Netz angezeigt. Da im Netz Gase unterschiedlicher Qualität fließen können, muss der Durchfluss in einer unveränderlichen Einheit ausgedrückt werden: in Energie/Zeit oder Masse/Zeit. In SIMONE wird der Mengendurchfluss in kg/s genutzt.

Da innerhalb eines gespeicherten Zeitschrittes auch intern berechnete Schritte eingelegt werden können, wird der "Mittelwert im letzten gespeicherten Zeitschritt" ausgegeben, um auf Basis dieses Wertes eine korrekte Massenbilanz berechnen zu können.

Es gibt zwei Integralfunktionen in SIMONE: **INTG** und **INTG2**. **INTG** ist das Integral von x seit der Startzeit, berechnet mit linearer Interpolation unter Benutzung der Werte für jeden Zeitschritt. **INTG2** ist wie **INTG** zu sehen, aber unter Verwendung der Treppenfunktion, die durch die am rechten Rand des jeweiligen Zeitintervalls liegenden Werte gebildet wird.

Die Anweisung **tv.qrec *** kann in der Kommandozeile eingegeben werden, um einen schnellen Überblick über die Situation im Netz für einen Zeitpunkt zu erhalten.

10.5 Messstationen

Die Anlagen zur Flussmessung befinden sich typischerweise entweder an Stationen an denen Gas in das Leitungssystem einströmt oder es verlässt oder an Verdichterstationen und Reglern. Im ersten Fall wird die Flussinformation der Zustandsrekonstruktion als Randwert an Knoten weitergegeben, in den anderen Fällen werden die Flusswerte den Verdichterstationen und Reglern zugeordnet.

Der einzige Fall, der durch dieses Konzept nicht abgedeckt wird, tritt bei einer Flussmessung zwischen Rohrelementen ohne signifikante oder kontrollierte Druckänderungen ein. Um einen solchen Messwert der Zustandsrekonstruktion weiterzugeben, kann ein speziell markiertes Reglerelement genutzt werden – die Messstation.

Der Name eines Reglers, der als Messstationen genutzt wird, muss wie folgt im Netzeditor geändert werden

control valve name:1:

(Achtung: Ein Name darf maximal 12 Zeichen lang sein.)

Im aktivierten Netz werden die zusätzlichen Zeichen **:1:** wieder entfernt und der Regler behält seinen ursprünglichen Namen. Die Namensänderung bleibt nur im Netzeditor sichtbar. Das hat den Vorteil, dass der Name für die Zustandsrekonstruktion unverändert bleibt.

Der Regler hat jetzt nur drei Zustände: **OFF**, **BP** und **MEA**.

Im Zustand **MEA** wird ein gemessener Fluss im Element für die Rekonstruktion genutzt. Dann versucht die Rekonstruktion, den Fluss entsprechend anzupassen, aber einen Druckverlust von Null über das Element zu halten.

11 Stationäre Optimierung

Die stationäre Optimierung für feste Verdichterkonfigurationen basiert auf der Gradientenmethode. Der Schwerpunkt liegt hierbei auf der Steuerungsstrategie unter Berücksichtigung der Netz- und Speicherkapazitäten, der Vertragsstrukturen u.s.w..

11.1 Die Zielfunktion

Die Zielfunktion wird als Summe verschiedener Terme, die Strafkosten darstellen, repräsentiert (für Antriebskosten, für den Preis gekauften Gases, für Druckbedingungen u.s.w.). Die Komponenten der Strafkostenterme können in zwei Gruppen eingeteilt werden:

- Terme, die die grundlegenden Ziele der Optimierung ausdrücken (Antriebskosten, Gaspreise u.s.w.)
- Terme, die einige Restriktionen durch Strafkostenterme darstellen (z.B. für Druck- und Flussbedingungen) um die Ausführbarkeit zu gewährleisten.

Wenn die Komponenten der oben genannten zwei Klassen in einer Zielfunktion zusammengefasst werden, kann es zu einem "Talproblem" kommen, was die Konvergenzgeschwindigkeit reduziert. Darum werden nur die Terme der zweiten Klasse genutzt, um eine sinnvolle Lösung zu finden, und dann die Terme der ersten Klasse (vervollständigt um alle Restriktionen) für die Optimierung selbst.

11.2 Restriktionen

Die Restriktionen können in drei grundlegende Gruppen eingeteilt werden:

1. Restriktionen bezogen auf Rohrelemente. Diese Restriktionen sind Gleichungen.
2. Restriktionen bezogen auf Nicht-Rohrelemente, die feste Betriebsgrenzen von installierten technischen Anlagen (Verdichterstationen, Regler) repräsentieren. Diese Restriktionen sind Ungleichungen.
3. Restriktionen bestimmt durch Vertragsbedingungen. Diese Restriktionen sind Ungleichungen.

Die Restriktionen 1 und 2 können aus dem Simulationsmodell abgeleitet werden, die Restriktion 3 wird vom Anwender definiert und geändert.

11.3 Methode der Stationären Optimierung in SIMONE

Die Methode basiert auf einer verallgemeinerten reduzierten Gradientenmethode und einer verallgemeinerten Projektionsgradientenmethode unter Nutzung eines stationären Simulationsmodells.

Die Restriktionen können in zwei grundlegende Gruppen eingeteilt werden: die Gleichungs-Restriktionen (Gruppe 1) und die Ungleichungsrestriktionen (Gruppe 2 und 3).

Nach lokaler Linearisierung am Punkt x_0 können die Restriktionen der ersten Gruppe geschrieben werden :

$$A_{x0}x = a_{x0}$$

und für die zweite Gruppe:

$$B_{x0}x \leq b_{x0}$$

Die Anzahl von Gleichungsrestriktionen kann groß sein (sie ist bestimmt von der Größe des Netzes), aber die folgende Transformation kann einfach berechnet werden (unter Ausnutzung der Kenntnis über die Struktur von A_{x0}):

$$x = D_{x0}y$$

wobei y eine Auswahl von linear abhängigen Variablen von x ist und die Matrix D_{x0} eine spezielle Struktur hat, die durch die Konfiguration des Netzes gegeben ist. Daraus ergibt sich, dass es vorteilhaft ist, diese Restriktionen bei der Berechnung eines neuen Optimierungsschritts durch Gradientenreduktion zu berücksichtigen.

Die Ungleichungsrestriktionen werden dann transformiert zu:

$$M_{x0} y \leq b_{x0}$$

$$M_{x0} = B_{x0} D_{x0}$$

Es ist zu beachten, dass der Vektor y die Menge der Kontrollvariablen repräsentiert. Die Sollwerte von Nicht-Rohrelementen müssen nicht notwendigerweise zu realen Kontrollvariablen korrespondieren, die in der Optimierung genutzt werden - es ist besser, sie zu interpretieren als eine Methode, die letztendlich optimale Lösung zu beschreiben (ggf. vervollständigt durch zusätzliche Informationen über die Druck- und Flussverteilung).

Die Anzahl aktiver Restriktionen der zweiten Gruppe ist, verglichen mit der Anzahl der ersten Gruppe viel kleiner, aber sie ändert sich innerhalb der Iterationen. Die Integration der Restriktionen der ersten Gruppe würde die Berechnung und die Struktur der Matrix D_{x0} nennenswert verkomplizieren.

Außerdem würde die Bestimmung der Matrix D_{x0} jeweils wiederholt werden müssen, wenn die Anzahl aktiver Restriktionen sich ändert. Aus diesen Gründen wurde die Methode der Gradientenprojektion gewählt um die Restriktionen zu berücksichtigen. Dies erlaubt die Anzahl aktiver Restriktionen sehr leicht zu ändern. Die Methode erlaubt ebenso das Problem linear abhängiger Restriktionen zu lösen (dieses Problem tritt in der ersten Gruppe der Restriktionen nicht auf).

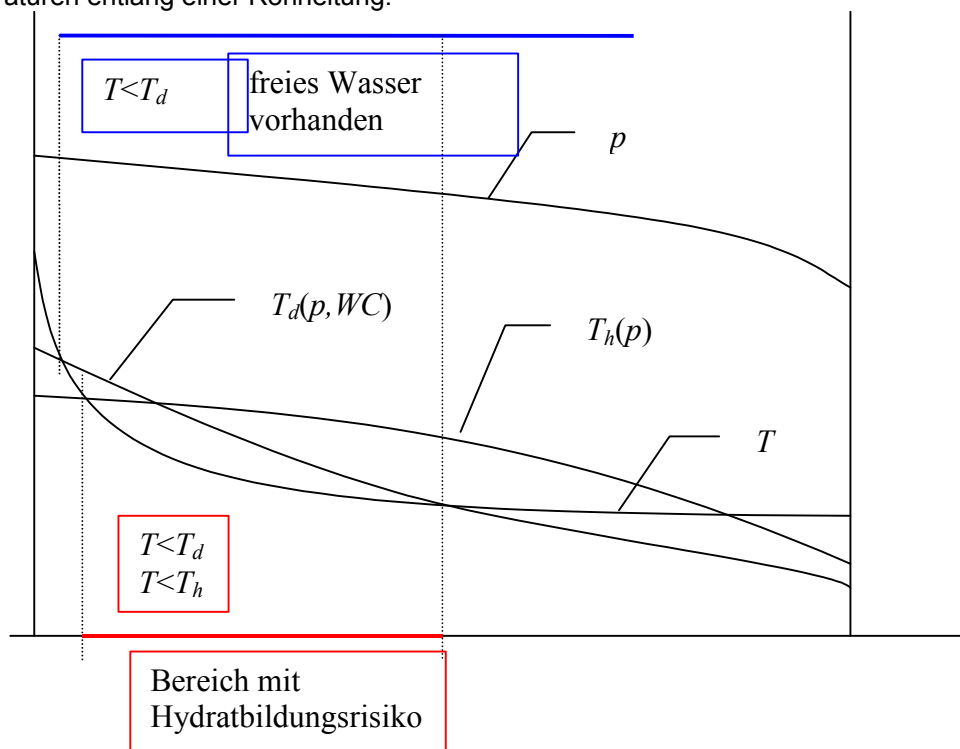
12 Hydratbildungsrisiko

12.1 Gleichgewichtsbedingung

Die Analyse des Hydratbildungsrisikos basiert auf der Bestimmung der drei Phasen Gleichgewichtsbedingung *Gas- freies Wasser – Hydrat* im Rohrsystem. Dieses Gleichgewicht wird ausgedrückt durch die Beziehung von

- Lokaler Gastemperatur T
- Wassertaupunkttemperatur T_d
- Hydratgleichgewichtstemperatur T_h

Diese Beziehung wird auf dem folgenden Bild dargestellt. Es zeigt die Längsprofile des Drucks und der Temperaturen entlang einer Rohrleitung.



Der Wassergehalt von Gas WC [g/m³ std. trocken] wird als Gasparameter durch das Netz verfolgt. Bei bekanntem Wassergehalt und gegebenem Druck kann der Wassertaupunkt überall im Netz berechnet werden.

Die Berechnung der Hydratgleichgewichtstemperatur kann den Effekt des Hydratinhibitors (Methanol, Glykol) berücksichtigen. Für diesen Zweck wird der Inhibitorgehalt des Gases IC [g/m³ std. trocken] durch das Netz verfolgt.

12.2 Wasser Taupunkt

Die Wassertaupunkttemperatur T_d wird aus dem Wassergehalt des Gases berechnet

$$T_d = T_d(p, WC, x).$$

wobei

p	Druck	[Pa]
WC	Wassergehalt des Gases	[g/m ³ std. trocken]
x	Gaszusammensetzung (molar) (Trockengas)	[1]

12.2.1 Bukacek Näherung

Das Gleichgewicht des Wassergehalts von Gas wird als eine Funktion aus Druck und Temperatur ausgedrückt:

$$WC^0 = \frac{A}{p} + B$$

wobei

WC^0	Gleichgewicht des Wassergehalts	[g/m ³ bei 101.325 kPa und 0°C, trocken]
p	Gasdruck	[bar]
A, B	Temperaturabhängige Koeffizienten:	

Die Koeffizienten A und B sind durch die folgenden Gleichungen gegeben:

$$t \in \langle -40^\circ\text{C}, +40^\circ\text{C} \rangle :$$

$$A = 4.9265573 \exp(0.0737433t - 0.00030673912t^2)$$

$$B = 0.0448739 \exp(0.053570327t - 0.00019866041t^2)$$

$$t \in \langle +40^\circ\text{C}, +90^\circ\text{C} \rangle :$$

$$A = 6.1569611 \exp(0.0620686t - 0.00013096345t^2)$$

$$B = 0.0405058 \exp(0.055042799t - 0.00016553793t^2)$$

$$t \in \langle +90^\circ\text{C}, +130^\circ\text{C} \rangle :$$

$$A = 6.1569611 \exp(0.0620686t - 0.00013096345t^2)$$

$$B = 0.0700737 \exp(0.032637894t)$$

Die Bukacek Näherung ist nur für süße Erdgase geeignet ($r \leq 0.8$, $x_{CO_2} < 2\%$, $x_{H_2S} < 1.5\%$)

12.3 Hydratgleichgewicht

Die Hydratgleichgewichtstemperatur ist durch eine Funktion gegeben

$$T_h = T_h(p, x)$$

wobei

p	Druck	[Pa]
x	Gaszusammensetzung (molar) (Trockengas)	[1]

12.3.1 Motiee Näherung

Eine einfache Beziehung, die nur die relative Gasdichte benutzt (veröffentlicht als Diagramme)

$$T_h = T_h(p, r)$$

wurde durch Motiee angenähert mit der Gleichung

$$t = b_1 + b_2 \log p + b_3 \log^2 p + b_4 r + b_5 r^2 + b_6 r \log p$$

wobei

t	Temperatur	[°F]
p	Druck	[psia]
r	relative Gasdichte	[1]
$b_1 \dots b_6$	Koeffizienten	

Die Werte der Koeffizienten sind

i	b_i
1	-238.24469
2	78.996674
3	-5.352544
4	349.473877
5	-150.854675
6	-27.604065

Die Originaldiagramme weisen eine relativ hohe Ungenauigkeit auf, im speziellen für die relative Gasdichte um 0.6. Dennoch scheint die Motiee Näherung für süßes, methanreiches Gas ihre Funktion zu erfüllen.

12.3.2 Carson-Katz Methode

Das Carson-Katz K_{vs} -Modell basiert auf dem Sublimations-Verteilungskoeffizienten. Die Hydratgleichgewichtstemperatur berechnet sich aus der Bedingung

$$\sum_i \frac{x_i}{K_{vs,i}(p, T_h)} = 1$$

wobei

$K_{vs,i}$ Sublimations-Verteilungskoeffizient für die Gaskomponente i [1]

x_i Molaranteil der Komponente i in Trockengas [1]

Subscript i Hydratbildende Komponenten von Erdgas CH₄, C₂H₆, C₃H₈, i-C₄H₁₀, n-C₄H₁₀, N₂, CO₂, H₂S

Die $K_{vs,i}$ Koeffizienten werden mit der von Sloan publizierten Näherung berechnet:

$$\ln K_{vs,i} = A_i + B_i t + C_i p + D_i t^{-1} + E_i p^{-1} + F_i p t + G_i t^2 + H_i p^2 + I_i p t^{-1} + J_i \ln(p t^{-1}) + K_i p^{-2} + L_i t p^{-1} + M_i t^2 p^{-1} + N_i p t^{-2} + O_i t p^{-3} + P_i t^3 + Q_i p^3 t^{-2} + R_i t^4$$

wobei

t	Temperatur	[°F]
p	Druck	[psia]
$A_i \dots R_i$	Koeffizienten	

12.3.3 Ponomarev Näherung

Die Ponomarev Näherung für Hydratgleichgewicht schreibt sich

$$\log p = \begin{cases} 0.0541(P_0 + t) & \text{für } t > 0^\circ\text{C} \\ 0.0171(P_1 + t) & \text{für } t < 0^\circ\text{C} \end{cases}$$

wobei

p Druck [at]

P_0, P_1 Koeffizienten, abhängig von der reduzierten relativen Gasdichte r' [1]

$$r' = \frac{\sum_i r_i x_i}{\sum_i x_i} \quad \text{Reduzierte relative Dichte} \quad [1]$$

r_i Relative Dichte von Komponente i [1]

x_i Molaranteil der Komponente i in Trockengas [1]

tiefgestellt i steht für CH₄, C₂H₆, C₃H₈, C₄H₁₀ (Summe aus i-C₄H₁₀ und n-C₄H₁₀), CO₂, H₂S

Die Werte für P_0, P_1 zeigt die folgende Tabelle:

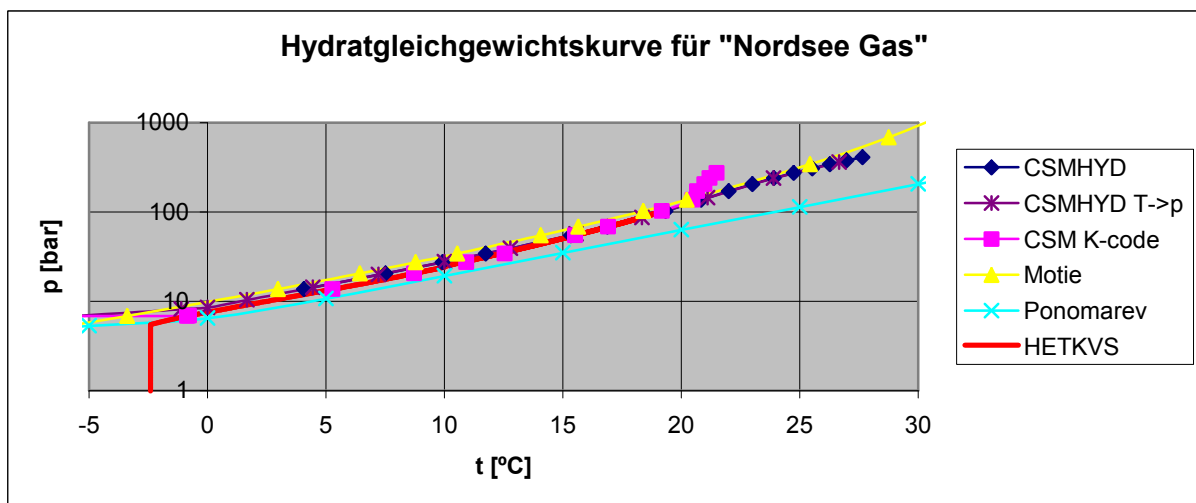
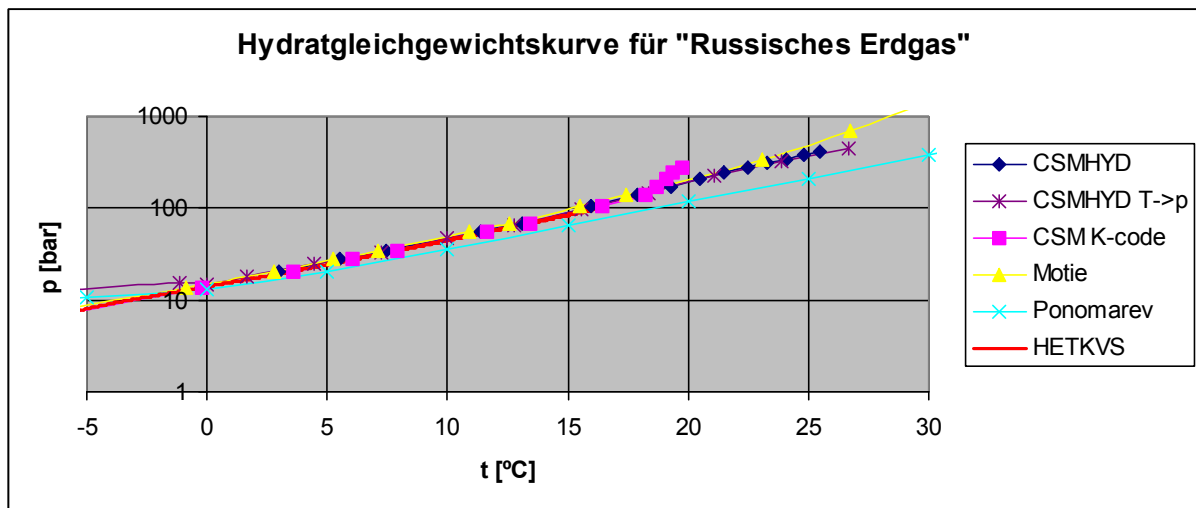
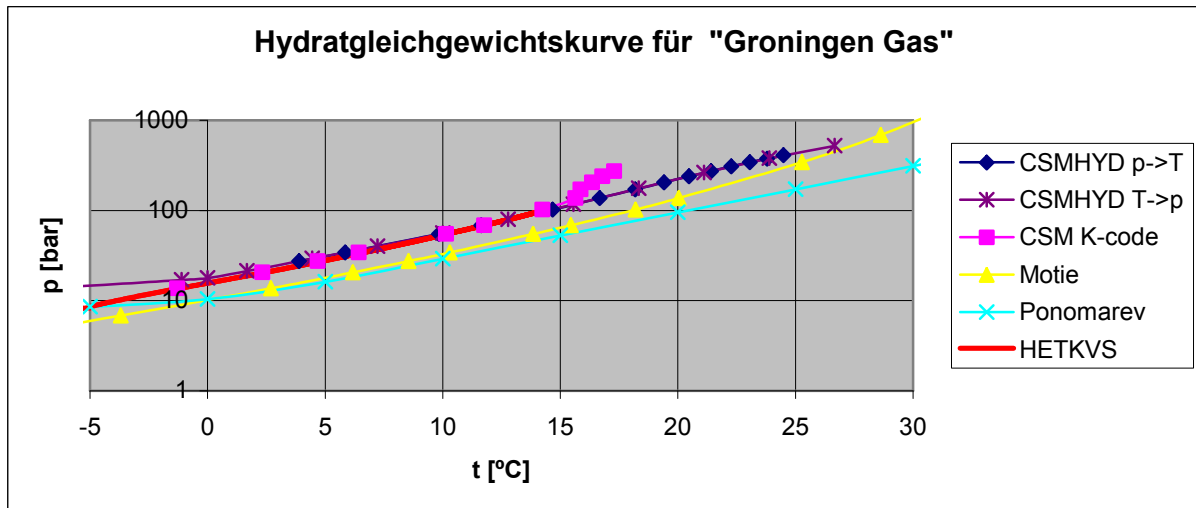
r'	P_0	P_1	r'	P_0	P_1	r'	P_0	P_1
0,56	24,25	77,4	0,71	13,85	43,9	0,86	12,07	37,6
0,57	21,80	70,2	0,72	13,72	43,4	0,87	11,97	37,2
0,58	20,00	64,2	0,73	13,57	42,9	0,88	11,87	36,8
0,59	18,53	59,5	0,74	13,44	42,4	0,89	11,77	36,5
0,60	17,67	56,1	0,75	13,32	42,0	0,90	11,66	36,2
0,61	17,00	53,6	0,76	13,20	41,6	0,91	11,57	35,8
0,62	16,45	51,6	0,77	13,08	41,2	0,92	11,47	35,4
0,63	15,93	50,0	0,78	12,97	40,7	0,93	11,37	35,1
0,64	15,47	48,6	0,79	12,85	40,3	0,94	11,27	34,8
0,65	15,07	47,6	0,80	12,74	39,9	0,95	11,17	34,5
0,66	14,76	46,9	0,81	12,62	39,5	0,96	11,10	34,2
0,67	14,51	46,2	0,82	12,50	39,1	0,97	11,00	33,9
0,68	14,34	45,6	0,83	12,40	38,7	0,98	10,92	33,6
0,69	14,16	45,0	0,84	12,28	38,3	0,99	10,85	33,3
0,70	14,00	44,5	0,85	12,18	37,9	1,00	10,77	33,1

12.3.4 Anmerkungen zur Genauigkeit und zur Wahl der Modelle

Diese Modelle für die Berechnung der Hydratgleichgewichtstemperatur sind für drei typische Erdgaszusammenstellungen von der Colorado School of Mines gegen die Codes CSMHYD (detailliertes thermodynamisches Modell des Hydratgleichgewichts) und HYDK (Implementation des K_{vs} Modells) für einen Druckbereich bis zu 100 bar (1500 pisa) verifiziert worden.

Komponente [%mol.]	L-gas "Groningen"	CH ₄ -rich "russisches Gas"	H-gas "Nord See"
CH ₄	81,29	96,52	85,91
N ₂	14,32	0,26	1,00
CO ₂	0,89	0,60	1,49
C ₂ H ₆	2,87	1,82	8,49
C ₃ H ₈	0,38	0,46	2,31
H ₂ O	0,00	0,00	0,00
H ₂ S	0,00	0,00	0,00
H ₂	0,00	0,00	0,00
CO	0,00	0,00	0,00
O ₂	0,01	0,00	0,00
i-C ₄ H ₁₀	0,00	0,10	0,35
n-C ₄ H ₁₀	0,15	0,10	0,35
i-C ₅ H ₁₂	0,00	0,05	0,05
n-C ₅ H ₁₂	0,04	0,03	0,05
n-C ₆ H ₁₄	0,05	0,07	0,00
Relative Dichte r	0,645	0,581	0,650
Reduzierte relative Dichte r'	0,589	0,578	0,646

Die folgenden Bilder zeigen die Ergebnisse von CSMHYD, HYDK, Motiee, Ponomarev und unserer Implementation des K_{vs} -Modells (unten als HETKVS referenziert)



Die Ergebnisse der Berechnung der Hydratgleichgewichtstemperatur bei gegebenem Druck werden in den folgenden Punkten zusammengefasst:

- Die rechnerisch einfachste Näherung von Motiee arbeitet mit einer Genauigkeit von 0.5°C für CH₄-reiches Gas ("Russisches Erdgas"). Für andere Erdgase (C₂H₆-reiches H-Gas "Nordsee" und N₂-reiches L-Gas "Groningen") können die Fehler signifikant ansteigen (bis zu 5°C).
- Für die Ponomarev Näherung gelten die gleichen Ergebnisse wie für die Motiee Formel (um 1°C für "Russisches Erdgas" und signifikanter Genauigkeitsverlust für die anderen beiden Erdgastypen). Die rechnerisch höhere Komplexität (Gasbeschaffenheitsverfolgung) lässt diese Methode jedoch hinter die Motiee Formel treten.
- Das K_{vs} -Modell arbeitet viel besser, sogar für sehr unterschiedliche Gase, da es die Gaszusammensetzung berücksichtigt (beobachtete Genauigkeit von 1°C für alle drei oben genannten Gastypen, bis 0,5°C für "Russisches Erdgas"). Deshalb erscheint dieses Modell als die empfehlenswerteste allgemeine Lösung, da sie einen guten Kompromiss zwischen Genauigkeit und Geschwindigkeit darstellt.

12.4 Inhibitor-Effekt

Die Reduzierung der Hydratgleichgewichtstemperatur bei Zugabe eines Inhibitors wird mit der Hammerschmidt-Gleichung berechnet:

$$\Delta T_h = \frac{1297}{M} \frac{X}{100 - X}$$

wobei

ΔT_h	Reduzierung der Hydratgleichgewichtstemperatur	[K]
M	Molares Gewicht des Inhibitors	[g.mol ⁻¹]
X	Gewichtsanteil des Inhibitors gelöst in freiem Wasser	[% wt.]

Als Hydrat-Inhibitor werden momentan Methanol, Ethylenglycol and Diethylenglycol unterstützt. Der Gewichtsanteil X des in freiem Wasser gelösten Inhibitors wird mit den folgenden Gleichungen berechnet:

$$WC = WC^0(p, T, x) + WC^\ell$$

$$IC = MC^v(p, T)X + WC^\ell \frac{X}{100 - X} \quad \text{für Methanol}$$

$$X = \frac{IC}{WC^\ell + IC} \times 100 \quad \text{für Glykole}$$

wobei

WC	Gesamter (verfolgter) Wassergehalt des Gases	[g/m ³ std. trocken]
WC^0	Gleichgewicht des Wassergehaltes des Gases	[g/m ³ std. trocken]
WC^ℓ	Gehalt des freien Wassers	[g/m ³ std. trocken]
IC	Gesamter (verfolgter) Inhibitorgehalt des Gases	[g/m ³ std. trocken]
$MC^v(p, T)$	verdampfte Menge von Methanol pro gelöstem Gewichtsprozent Methanol in freiem Wasser	$\left[\frac{\text{g/m}^3 \text{ std.}}{\% \text{ wt. Methanol in freiem Wasser}} \right]$

Zurzeit wird eine auf dem klassischen Diagramm von $MC^v(p, T)$ aufgebaute Annäherung, publiziert von Campbell, genutzt:

$$MC^v = \begin{pmatrix} 1, t, t^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 & b_4 & b_7 \\ b_2 & b_5 & b_8 \\ b_3 & b_6 & b_9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \log p \\ \log^2 p \end{pmatrix}$$

wobei

$$MC^v(p, T) \quad \begin{array}{l} \text{verdampfte Menge von Methanol} \\ \text{pro gelöstem Gewichtsprozent} \\ \text{Methanol in freiem Wasser} \end{array} \quad \left[\frac{\text{g/m}^3 (101.325 \text{ kPa}, 15^\circ\text{C})}{\% \text{ wt. Methanol in freiem Wasser}} \right]$$

$$t \quad \begin{array}{l} \text{Temperatur} \\ \text{Druck} \end{array} \quad \begin{array}{l} [^\circ\text{C}] \\ [\text{bar}] \end{array}$$

Die Hammerschmidt-Gleichung soll bis zu einem bestimmten oberen Grenzwert des Inhibitoranteils genau sein (30% für Methanol und 50% für Glykole). Deshalb ist der Wert von ΔT_h begrenzt auf das entsprechende Maximum.

12.5 Risiko Indikatoren

Die Ergebnisse der Gleichgewichtsanalyse über ein Rohrelement werden aus dem internen Temperaturprofil abgeleitet, das vom SIMONE Temperaturdynamik-Modul ermittelt wird. Die folgenden Parameter zeigen, wie weit die lokalen Bedingungen vom Gleichgewichtszustand entfernt sind. Für jedes Rohrelement wird der ungünstigste Fall, d.h. die Unterkühlungswerte über die Elementlänge, gespeichert:

- Gasunterkühlung in Bezug auf die Wassertaupunkt-Temperatur:

$$DTDP = \min_{\xi \in [0; L]} (T - T_d)$$
- Gasunterkühlung in Bezug auf die Hydratgleichgewichts-Temperatur:

$$DTHE = \min_{\xi \in [0; L]} (T - T_h)$$
- Gasunterkühlung in Bezug auf die Dreiphasen-Gleichgewichts-Grenzwerttemperatur:

$$DTHF = \min_{\xi \in [0; L]} (T - \min(T_d, T_h))$$

wobei

$$L \quad \text{Rohrlänge} \quad [\text{m}]$$

$$\xi \quad \text{Longitudinal Koordinate} \quad [\text{m}]$$

Beachte: Wenn die Profile aller Temperaturen längs dem Rohrelement monoton sind (das ist der häufigste Fall), zeigen diese drei Indikatoren nur zwei unterschiedliche Werte:

$$DTHF = \max(DTDP, DTHE)$$

Dennoch ist die Monotonität aller Profile längs dem Rohrelement grundsätzlich nicht garantiert (z.B. im Fall eines möglichen "Batch" von Gasen verschiedenem Wassergehalts im Rohrelement). Also müssen alle drei Indikatoren gespeichert werden.