

Thermolib 综合能源仿真系统 解决方案

山东氢探新能源科技有限公司

2020 年 5 月

文件状态：

☐ 草稿

☒ 正式发布

☐ 正在修改

文件起草分工：

XXX, 方案制定；

XXX, 方案审核；

XXX, 方案批准。

编制：XXX	签名日期
审核：XXX	签名日期
批准：XXX	签名日期

所有权声明

该文档及其所含信息是山东氢探新能源科技有限公司的财产。该文档及其所含信息的复制、使用及披露必须得到山东氢探新能源科技有限公司的书面授权。

更改历史

版本	更改描述	更改日期	更改人
V1	模型方案模板	2017 年 6 月	陈忠言
V1.1	Thermolib 基础介绍	2018 年 3 月	谈宇辰、陈忠言
V2.0	燃料电池模型修改	2018 年 8 月	陈忠言
V2.1	燃料电池模型完善	2019 年 10 月	谈宇辰
V3.0	综合能源模型介绍	2019 年 11 月	谈宇辰
V3.1	综合能源案例介绍	2020 年 3 月	孙远志、陈忠言

目录

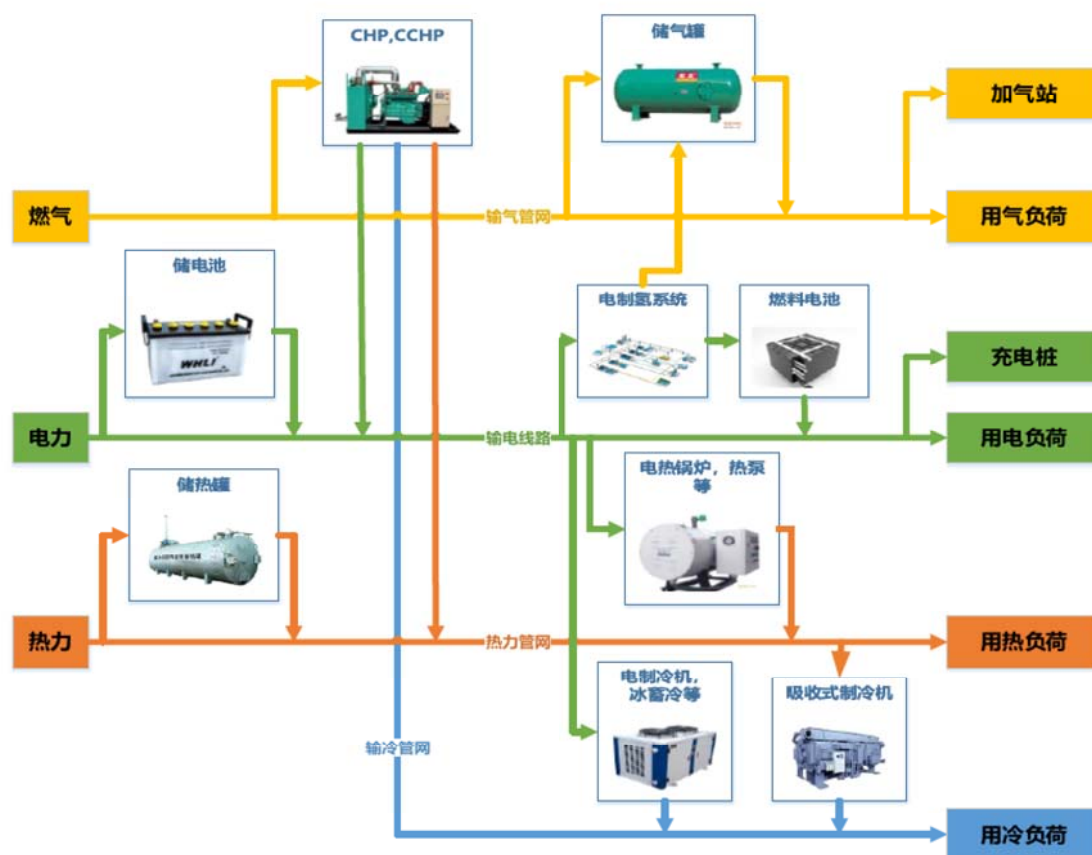
1	综合能源仿真介绍	1
1.1	基于 Thermolib 的综合能源仿真概述	1
1.2	不同系统仿真模型示例	2
2	Thermolib 热力学仿真模型	5
2.1	Thermolib 模型特色	6
2.2	基础热力学库	7
2.3	热力学基础部件库	8
2.4	实时应用许可	9
3	Thermolib 的建模基础	9
3.1	流体总线	9
3.2	质量平衡	11
3.3	能量存储	11
3.4	气相	12
3.5	液相	12
3.6	蒸汽-液体平衡	13
3.7	混合模型	13
3.8	化学平衡	14
3.9	超临界状态	14

1 综合能源仿真介绍

1.1 基于 Thermolib 的综合能源仿真概述

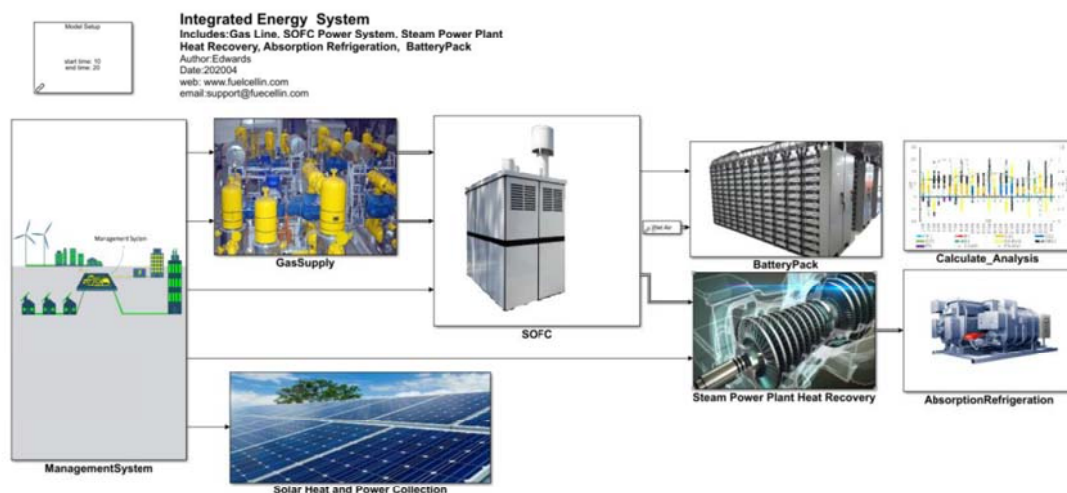
Thermolib 热力学仿真模型是德国 Eutech Scientific 公司为热力学系统系统仿真开发的专用模型工具。该模型是基于 MATLAB®/Simulink®建模和仿真工具箱，主要用于综合能源系统（CHP、CCHP 等）、新能源汽车热管理、发动机热管理、空调系统、燃气发动机等控制系统的 MIL 以及 HIL 测试、系统仿真验证。该模型基于热力学理论及工程热物理方法对热力学系统进行建模；提供丰富的模型库、气相及液相物质的热力学数据库等。

典型复杂的综合能源系统架构如下：



图片源于网络

基于 Thermolib 所搭建的热管理系统仿真模型架构：

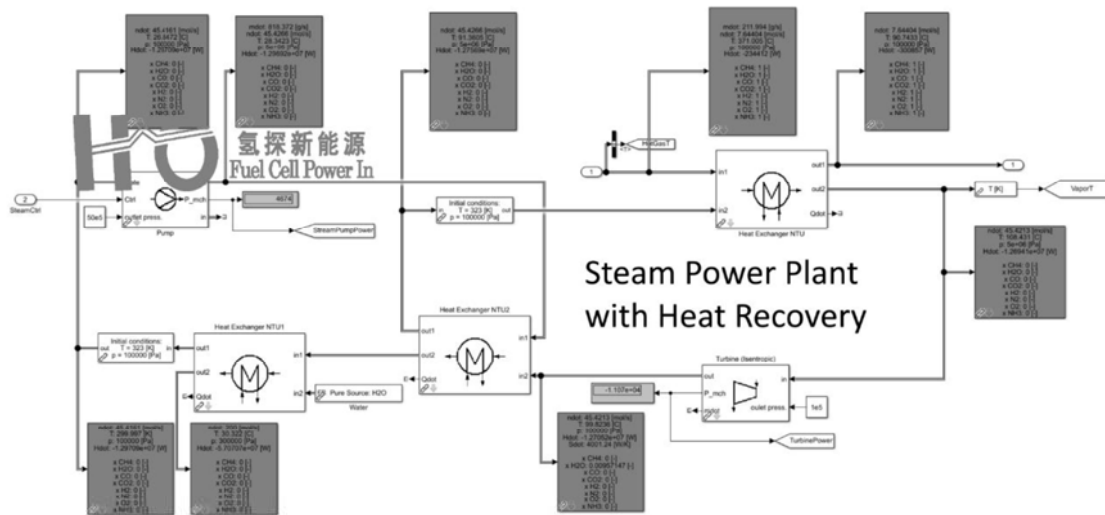


该综合能源系统包括了：供气系统仿真、SOFC 燃料电池发电系统仿真、蒸汽轮机发电系统仿真、吸收式制冷系统仿真、太阳能热电系统仿真、以及锂电储能系统仿真，基于综合能源的管理优化目标，可对控制系统进行配置，客户如需进行电网仿真，可基于 Simulink 的 SimPower 模型库与 Thermolib 模型库进行快速建模。从而实现太阳能、气、热、冷、电的复杂耦合系统仿真。

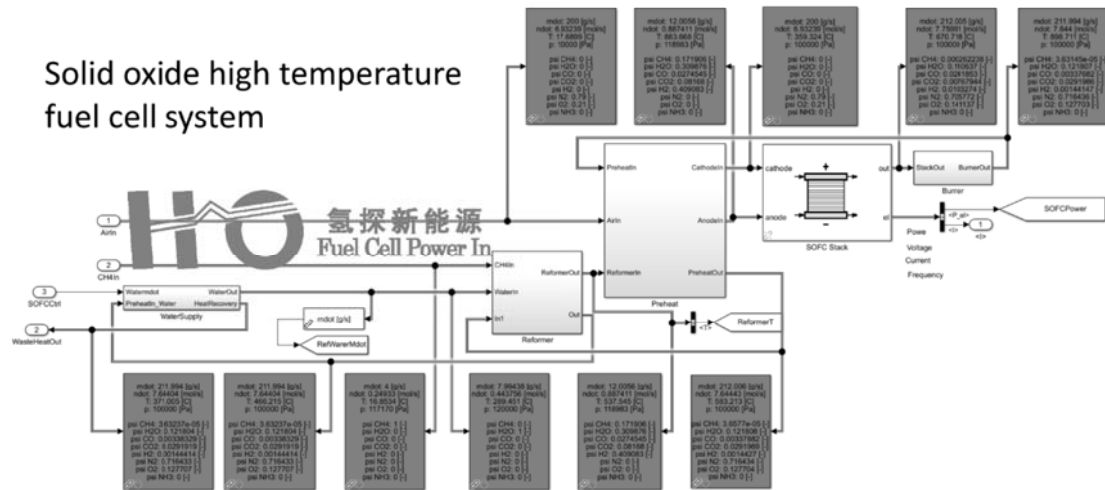
1.2 不同系统仿真模型示例

以下模型为模型简介，包括了：具备余热利用的蒸汽轮机发电机组模型，SOFC 高温燃料电池发电系统，具备余热回收的吸收式制冷机组，太阳能热电机组，锂电储能系统模型，燃气轮机机组模型，热泵空调，质子交换膜燃料电池 PEMFC 仿真模型，数据中心热力学系统模型；模型由德国 EUtech 以及山东氢探新能源公司联合开发。

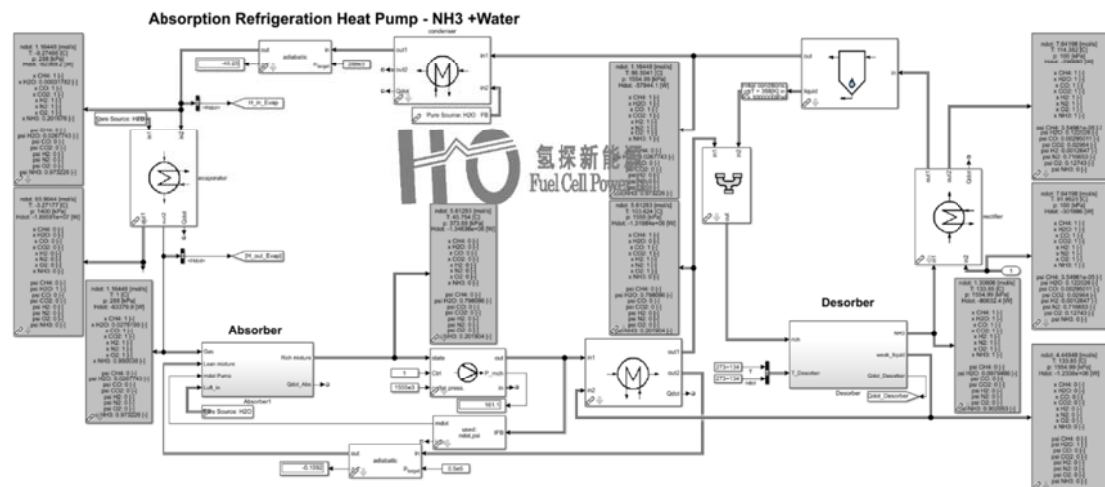
其中所涉及的具备余热利用的蒸汽轮机发电机组（Steam Power Plant with Heat Recovery）模型如下：



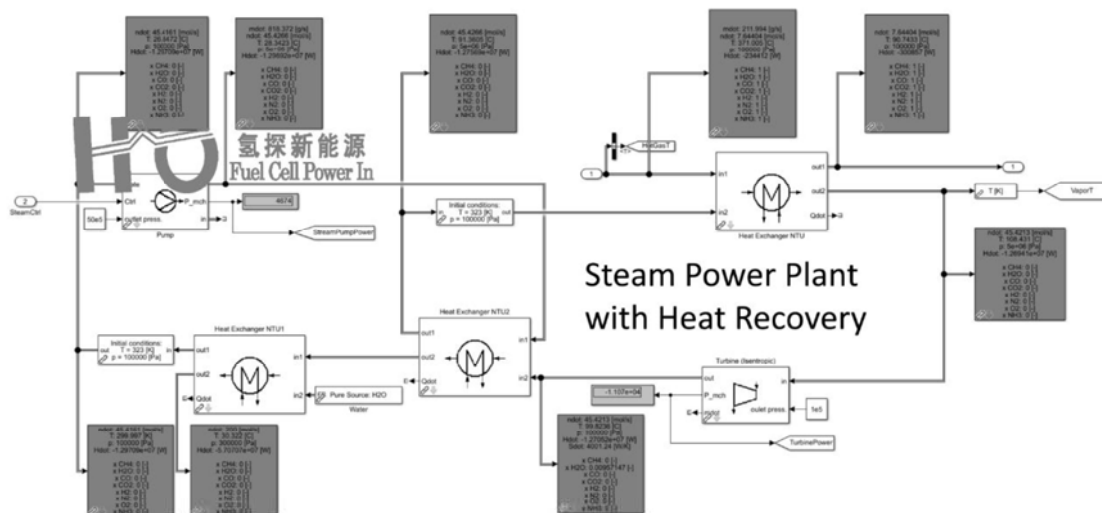
SOFC 高温燃料电池发电系统仿真模型如下：



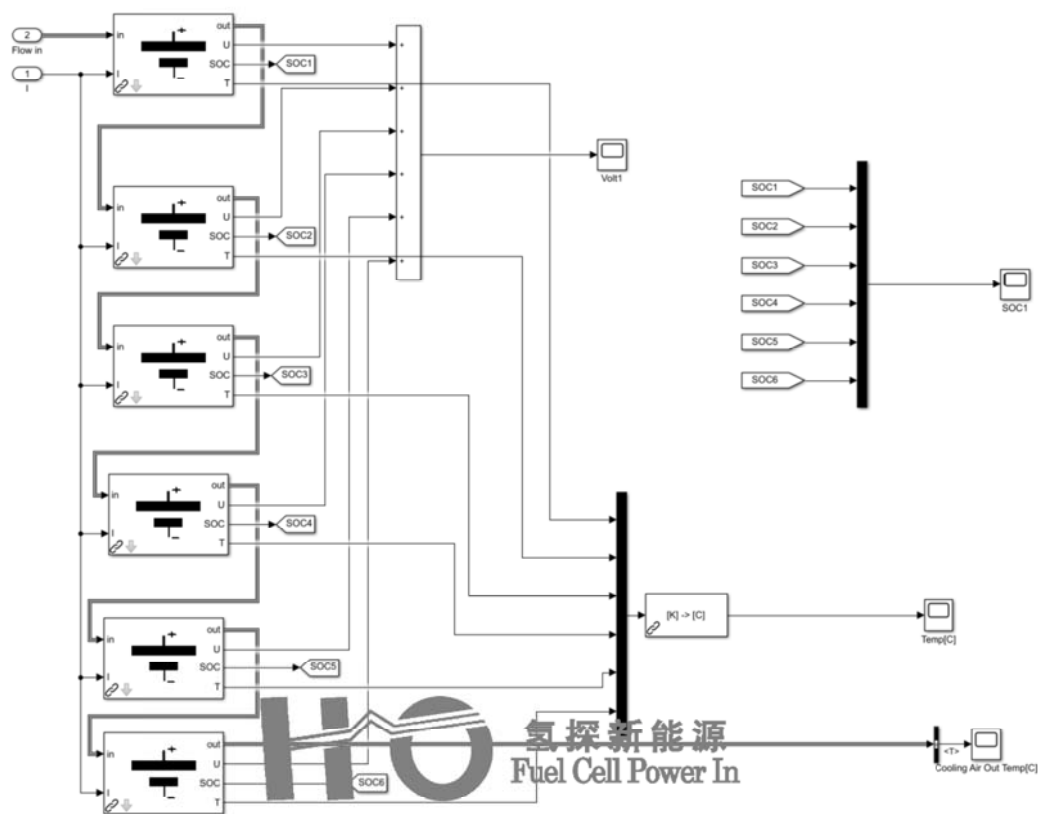
具备余热回收的吸收式制冷机组（Absorption Refrigeration Heat Pump）模型如下：



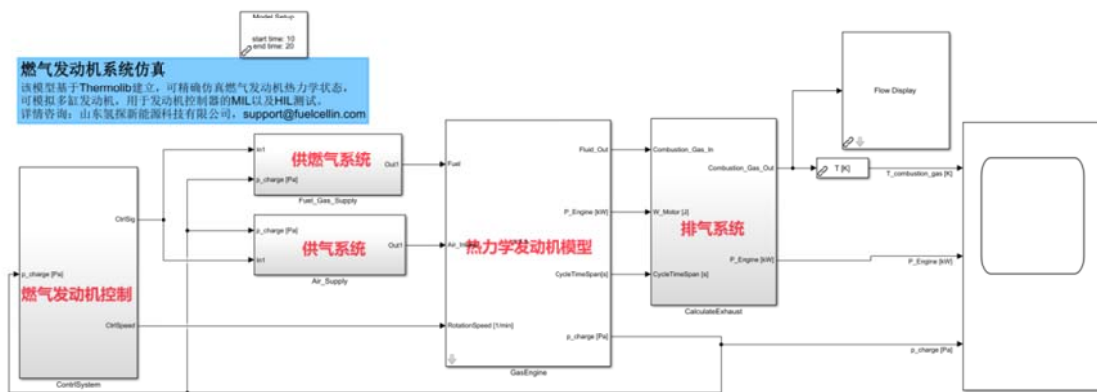
太阳能热发电机组（Solar Heat and Power Collection）模型如下：



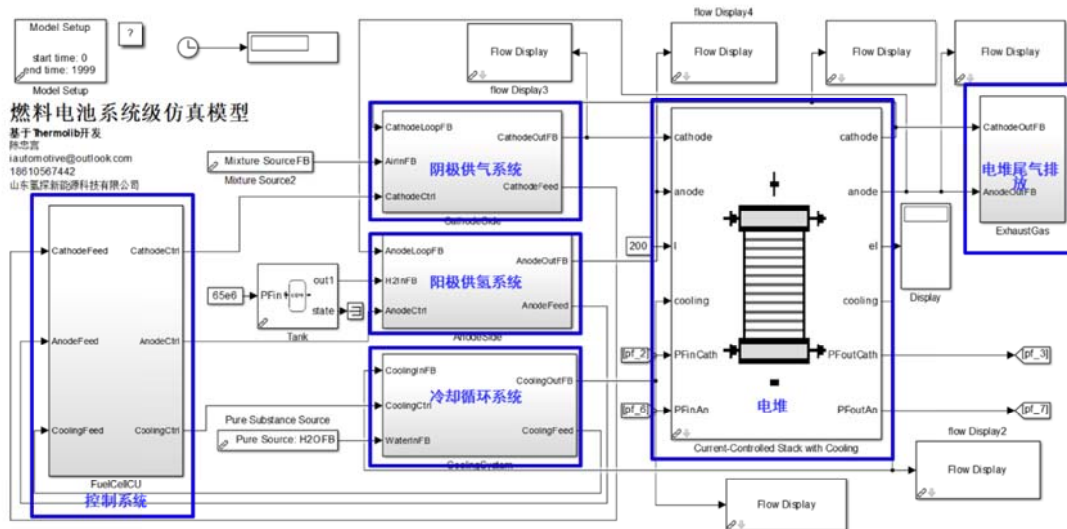
锂电储能（Lithium battery energy storage）系统模型如下：



燃气轮机模型（Gas turbine model）



PEMFC 质子交换膜燃料电池系统级仿真模型架构：



另外，用户还可以选择包括：电热锅炉、燃气供热锅炉（Combined Cycle Power Plant）、热泵空调系统（Heat pump air conditioning system）、电解制氢模型（Electrolytic hydrogen production）、储热系统模型（Heat storage system）

2 Thermolib 热力学仿真模型

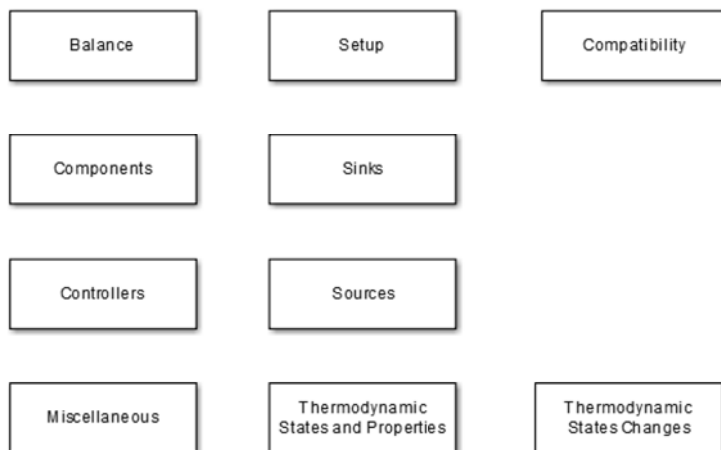
Program: Thermolib
Version: 5.4.0
Matlab: Version R2012b
Id:



Online
Help

Copyright (c) 2003 - 2016 by EUTECH Scientific Engineering GmbH

=====



2.1 Thermolib 模型特色

Thermolib 热力学系统级仿真模型特点如下：

✓ 应用行业：

- 综合能源系统仿真
- 燃料电池（PEMFC/SOFC/DMFC）系统仿真
- 燃气及燃油发动机仿真；
- 传统发动机集成热管理；
- 新能源汽车整车热管理
- 电池包热管理
- 热电厂（蒸汽轮机、燃气轮机等）；
- 空调系统（热泵、吸收式、压缩式）；
- 热力学过程；

✓ 基于工程热物理基本原理建模；

- 结合经验以及经典的热力学方程、求解器，模拟真实的气体行为；
- 理想气体和真实气体的热力学状态计算（Peng-Robinson）；

- 支持气体、液体混合物；可用户自定义化学反应。
- ✓ 具备热力学状态及其变换计算模块：
 - 包括真实气体模型；等压、等熵、等温、绝热等过程；
 - 质量及能量守恒模型；
 - 气相、液相源模型；
 - 热力学状态及状态变化；
 - 流体总线及状态总线模型，总线内包括压力、温度、熵、焓、摩尔组分、气体组分、吉布斯自由能等信号。
- ✓ 提供丰富的 Matlab/Simulink 模型库
- ✓ 预定义前后处理命令行
 - 基于 matlab 命令行输入；解决仿真数据预后处理的问题。
- ✓ 气相及液相物质的热力学数据库
 - 支持国际标准热力学数据库，如：NASA 多项表达式的 JANAF 热物理表格方式表达。
- ✓ 提供示例模型
 - 丰富直接可用的 demo 模型。

2.2 基础热力学库

主要针对专业的热力学以及传热学科工程师，可通过 matlab 命令行对热力学进行计算，对物质热力学变化进行计算。同时提供基础的热力学 simulink 库文件，方便进行热力学循环仿真、搭建自主的部件模型；具体如下：

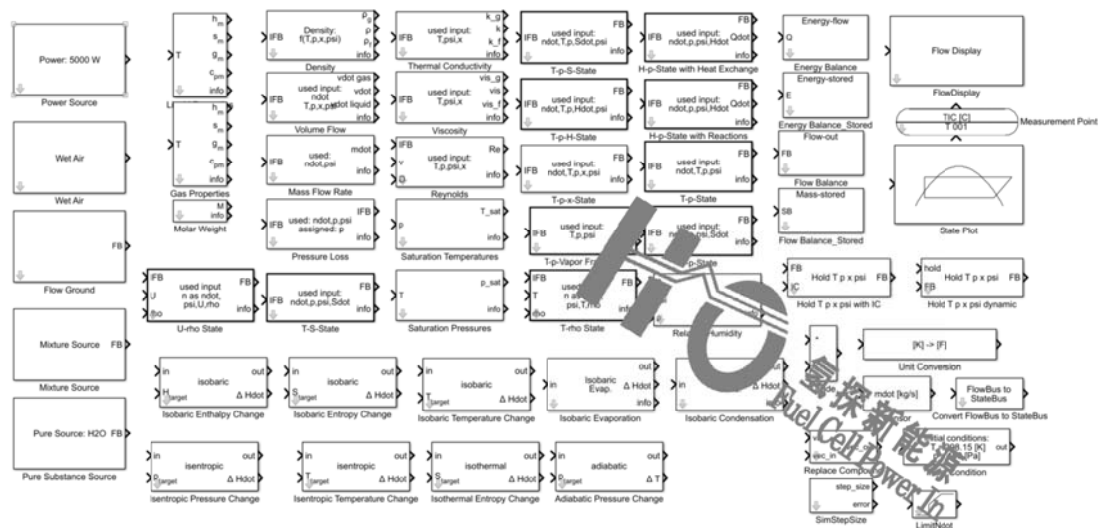
模型库提供源模型，支持混合气体、纯物质、湿润空气等模型；

模型库包括热力学状态及变化库以及化学反应平衡模型库，包括：等压（焓变、熵变、温变、蒸发、冷凝）；等熵（压变、温变）；等温（熵变）；绝热（压变）；

源模块支持混合物质、纯物质、湿润空气等选择，支持不同化学物质选择并且所有模型支持如下介质计算与选择，包括：CH₄ H₂O H₂O-IF97 CO CO₂ H₂ p-H₂ o-H₂ N₂ O₂ isooctane Methanol 1-Buten 1,3-Butadien R134a, no chem NH₃ NO Ethanol n-Propane n-Butane i-Pentane R12 R407C, no chem R125, no chem R32, no chem R1234yf, no chem R245fa Coal Dodecane Isobutane R143a Ethylene glycol

R410A R404A ETHANE

气相及液相物质的热力学数据库：支持国际标准热力学数据库，如：NASA 多项表达式的 JANAF 热物理表格方式表达。客户可修改 Excel 文件方式修改热力学基础数据库。

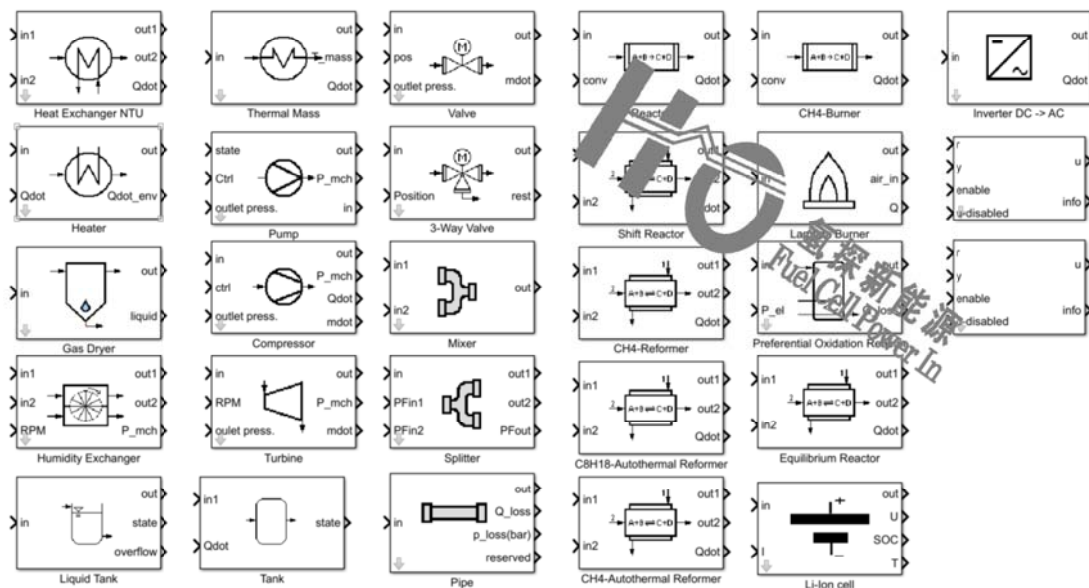


2.3 热力学基础部件库

热力学基础部件库，根据基础热力学库以及各部件的抽象数学公式以及工程热物理的方法，搭建出热力学系统常见的部件库模型，方便用户进行系统搭建以及应用。适用于有一定热力学基础的系统工程师。具体如下：

热力学部件模型库：支持三类热交换器、热质量流、加热器、气体干燥器（分水器）、焓轮增湿器、支持 4 类泵、4 类阀门、6 类压缩机、3 类涡轮机、三通阀、混合器、分流器等模型；

提供丰富的支持热力学燃烧及高温变化过程的反应器模型库：平衡反应堆、可变反应堆、甲烷燃烧器、甲烷重整器、Lambda 燃烧器、C8H18 自热重整器、优先氧化反应器、甲烷自热重整器



2.4 实时应用许可

实时系统支持—需配置实时仿真模块，主要用于研发测试以及生产测试。

模型可针对 HIL 系统进行代码生成，包括所有 Simulink 生成代码生成必要文件包括 TLC 文件以及静态库文件，用于编译，实现热力学模型的实时仿真机部署，用于 HIL 测试。可支持控制器以及热力学系统本体代码生成，从而能实现及硬件在环测试应用。可保证模型在多目标机、多核实时系统上运行。

可支持如下目标平台：通用实时仿真目标平台、S-Function 目标平台、快速仿真目标平台、xPC 目标平台、NI PXI 平台、RTLAB 实时仿真平台（根据支持平台种类数量）

3 Thermolib 的建模基础

3.1 流体总线

在基于 Thermolib 的模型中，描述模块之间介质流动的信号流由所谓的流体总线（FB）来描述。

流体总线包含流动介质上的主要信息。除总摩尔流量和化学成分外，它还包含热力学性质温度，压力和蒸汽分数。

流体总线结构如下：

Signal Name	Symbol	符号	Unit
ndot	总摩尔流量	\dot{n}	mol/s

T	温度	T	K
p	压力	p	Pa
Hdot	焓流	\dot{H}	W
Sdot	熵流	\dot{S}	W/ K
Gdot	吉布斯能量率	\dot{G}	W
Cpdot	热容量率	c_p	W/ K
x	所有化合物的蒸汽分数	x	mol/mol
psi	所有化合物的摩尔分数	Ψ	mol/mol

信号 x 和 psi 是相同长度的向量。长度与所选化合物的使用数量相同。您可以在模型设置模块中选择化合物。

对于所有这些化合物，用于计算热容量，焓和熵的系数在 Excel 文件（ChemicalMediaData.xls）中给出。用户可以轻松扩展该文件或生成的 ChemicalMediaData.mat，以便与其他化合物进行仿真。

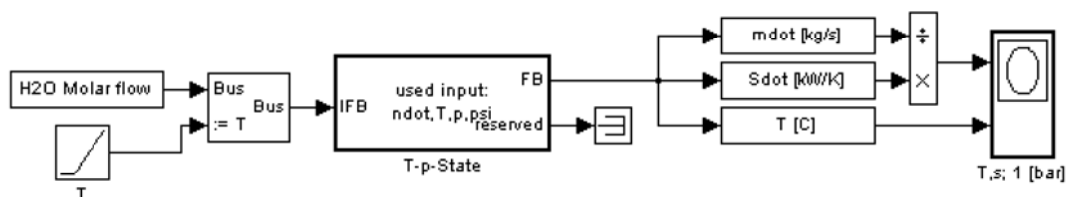
有完整流体总线（FB）和不完整流体总线（IFB）的概念。完整的流体总线的特性在热力学上是一致的，例如，计算来自 T，p 和 H 的蒸汽分数简单地得到已经存在于 FB 中的蒸汽分数 x。

不完整的流量总线或多或少是值的向量，并且不保证它们在上述意义上是一致的。相反，在大多数情况下，它们不是。

简而言之，输出 FB 的模块可确保结果是一致的流体总线，并且所有属性都是有效的。

如果改变 FB 上的信号属性，则该热力学状态变得不一致，所以 FB 变成 IFB。然后根据需要使用“热力学状态和属性”部分的模块来更新总线上的其他信号。

下图显示了这是如何工作的。



左侧的源模块创建一个一致的流体总线。总线分配仅改变总线上的温度并使状态“不一致”，如温度现在不再与焓相对应。现在，使用 T-p-State 模块来更新 FB 并使用 IFB 的“ndot, T, p, psi”使值保持一致。

右侧的模块是传感器模块，最终用于创建 T-S 图

3.2 质量平衡

质量是一个守恒量（核反应除外），如果系统中没有发生化学反应，任何单个化合物的质量也是如此。让我们写下这个守恒方程：

$$\frac{dm}{dt} = \sum \dot{m}_{out} - \sum \dot{m}_{in}$$

Thermolib 中除罐外的所有组件都不会累积质量。如果在控制体中没有质量积累，如在稳定状态下，稳定流动过程，则其简化为：

$$\sum \dot{m}_{out} - \sum \dot{m}_{in} = 0$$

3.3 能量存储

Thermolib 中的许多组件模块具有像“Qdot”或“P_mch”这样的输入和输出，代表能量流过模块的边界。

如果这样的信号一次具有大于 0 的值，则当前能量流从模块外部到模块内部。然后将能量/功率/热量加到流体或内部能量存储器中。

如果这样的信号一次具有<0 的值，则当前能量流从模块内部到模块外部。能量/功率/热量从流体或内部能量存储中提取。

一般来说，它有：

$$\frac{dU}{dt} = \sum \dot{H}_{in,i} - \sum \dot{H}_{out,j} + \sum \dot{Q}_K + \sum P_m$$

作为能量守恒定律（热力学第一定律）。Thermolib 和上述公式中忽略了输入和输出流动的动能和势能。

其中， $\dot{H}_{in,i}$ 是输入流 i 的焓流， $\dot{H}_{out,j}$ 是输出流 j 的焓流， \dot{Q}_K 是热流 k， P_m 是

机械功 m , U 是组件的内能。

这意味着对于压缩机来说, P_{mch} 通常是正值, 因为轴上的机械能被加到流体中, 而对于涡轮机而言, 由于流体释放功率, 它是负的。

对于像反应堆这样的热组件, $Qdot$ 信号 (与环境的热交换) 通常是负的, 因为这些热量将离开反应堆 (假配置了冷环境)。

在稳态的绝热化学反应堆中, 输入和输出总焓 (热量+生成焓) 是相同的。但由于入口和出口处化合物的浓度不同, 入口和出口处的温度可能会有很大差异。

3.4 气相

对于气相来说, 修改后的理想气体定律

$$Z \times R \times T = p \times v$$

用于计算实际气体在给定温度和压力下的密度, 焓和熵差。

在模型设置模块中, 您可以选择两个选项:

- 理想气体 ($Z = 1$)
- 真实气体 (使用彭 - 罗宾逊状态方程计算)

3.5 液相

饱和液体密度的温度相关性使用以下等式进行建模:

$$\rho_{f,sat}(T) = \rho_c (1 + A\tau^{1/3} + B\tau^{2/3} + C\tau + D\tau^{4/3})$$

$$\tau = 1 - \frac{T}{T_c}$$

如果在模型设置模块中激活了基于 PR-EOS 的真实气体计算。使用 PR-EOS 计算液体密度, 其偏移量与参考温度下的液体密度 (T_{v_ref}) 相匹配。

采用给定的体积模量, 将液相建模为可压缩的。

$$\rho_f(p, T) = \frac{\rho_{f,sat}}{1 - \frac{p - p_{sat}(T)}{E}}$$

对于液相, 假设所有化合物的热容均取决于温度:

$$c_{p,m,f} = A + BT + CT^2 + DT^3$$

系数 A, B, C 和 D 必须在化学流体介质数据库中给出。也可以给出多项式的有效性的限制。在限制之外, 假设热容是恒定的。

为了确保与气相计算的一致性, 液体焓基于气体焓计算, 并使用蒸发焓的显

性给定函数转变为液体焓。

$$h_{m,f,sat,i}(T) = h_{m,g}(T) - h_{fg}(T)$$

为保证密集状态和超临界区路径计算的一致性，在饱和压力和临界压力之间对压力相关的液体焓进行线性插值。

$$h_{m,f,i}(T, p) = h_{m,f,sat,i}(T) + \frac{(p - p_{sat,i})}{p_{c,i} - p_{sat,i}} (h_{m,g,i}(T, p_{c,i}) - h_{m,f,sat,i}(T))$$

3.6 蒸汽-液体平衡

Thermolib 可以处理气相和液相。两个阶段都假定处于热力学平衡状态。这意味着，两个阶段的压力和温度是相同的。

为了计算相平衡中各相中化合物的浓度，使用蒸气压曲线和劳尔定律。

用 Antoine 方程计算饱和压力 (p_{sat}) 作为饱和温度 T_{sat} 的函数，反之亦然。

Antoine 方程为：

$$\log_{10}(p_{sat}) = 1 - \left(\frac{B}{T_{sat} + C} \right)$$

其中， p_{sat} 以 bar 为量纲，而 T_{sat} 以开尔文为单位。系数 A, B, C 必须在化学流体介质数据库中给出（参见第 4 章化学流体介质数据库）。

如果你想模拟一个总是定义为液体的物质，那么你只需要设置常数 A，化合物在仿真的整个温度范围内保持液体，或者你可以简单地使用从不在验证范围内凝结的气体的值（如 H₂）。

3.7 混合模型

Thermolib 采用理想的液体和气体混合物。

因此，混合物的性质是由纯物质的性质通过简单的求和计算得到的：

混合物的焓：

$$H = \sum_i (n_{i,g} h_{m,i,g} + n_{i,l} h_{m,i,l})$$

混合物的熵：

$$S = \sum_i (n_{i,g} s_{m,i,g} + n_{i,l} s_{m,i,l}) - R \sum_i (n_{i,g} \ln \psi_{i,g})$$

3.8 化学平衡

Thermolib 的一个关键部件是平衡反应器。它计算给定初始组分和给定压力下的温度的化学平衡。

热力学平衡由吉布斯自由能 G 的最小值定义。

对于给定的反应：



化学平衡条件可以写成

$$\ln(k) = -\frac{\Delta G}{RT}$$

$$k = \left(\frac{\Psi_C^c \cdot \Psi_D^d}{\Psi_A^a \cdot \Psi_B^b} \right) \cdot \left(\frac{P}{P_0} \right)^{c+d-a-b}$$

Ψ_j 是物质 j 的摩尔分数， ΔG 是产物和反应物之间的吉布斯自由能的差值， R 是通用气体常数。

假定所有产物和反应物都处于气相。所有使用的浓度都是化合物的总浓度。

3.9 超临界状态

如果温度高于临界温度，则认为只有气相。因此，流体总线上的蒸气分数将为 1。在此状态下，饱和压力没有意义，只是 Antoine 公式在临界温度以外的简单外推。