

## Bericht

# Berechnung und Optimierung des zeitlichen Druckverlaufs beim Befüllen eines GfK-Salzsäurebehälters

vorgelegt von:  
Fraunhofer-Institut für Umwelt-, Sicherheits-  
und Energietechnik UMSICHT

Ihr Ansprechpartner für diesen Bericht:

Andreas Dudlik	E-mail:	<a href="mailto:andreas.dudlik@umsicht.fhg.de">andreas.dudlik@umsicht.fhg.de</a>

Oberhausen, den 01.10.2009

## Inhaltsverzeichnis

Bericht.....	1
Berechnung und Optimierung des zeitlichen Druckverlaufs beim Befüllen eines GfK-Salzsäurebehälters .....	1
Zusammenfassung .....	3
Problemstellung.....	3
Lösungsweg .....	4
Modellgleichungen .....	4
Isotherme Gasphase .....	5
Adiabate Gasphase .....	6
Berechnungsdaten.....	7
Ergebnisse .....	9
Anmerkungen .....	13

## Zusammenfassung

Zur Ermittlung der maximal auftretenden Drücke im GfK-Salzsäurebehälter während des Befüllvorgangs wurden zeitliche Druckverläufe im Behälter bei unterschiedlicher Auslegung der Atmungsleitung durch ein dynamisches Modell simuliert. Das Simulationsmodell setzt dabei eine adiabate Gasströmung in der Zu- und Austrittsleitung sowie isothermes bzw. adiabates Verhalten der Gasphase im Salzsäurebehälter voraus. Es wurden Berechnungen für jeweils vier unterschiedliche Innendurchmesser der Austrittsleitung durchgeführt und die dabei resultierenden Druckverläufe im Behälter aufgezeichnet. Hierbei zeigte sich, dass ein Austrittsdurchmesser von  $d_2 = 115$  mm im isothermen wie im adiabaten Berechnungsfall sehr nahe auf den zulässigen Druck von 0,5 barü führt und somit als minimal zulässiger Austrittsdurchmesser angesehen werden darf. Um einen gewissen Sicherheitsspielraum zu haben, wird für die Auslegung der Atmungsleitung ein Innendurchmesser von  $d_2 = 125$  mm empfohlen, für den die berechneten Behälterdrücke sicher unterhalb von 0,5 barü bleiben.

Der empfohlene Auslegungsdurchmesser muss dabei im gesamten Verlauf der Austrittsleitung vorliegen, also auch im Bereich der Stutzen am Salzsäurebehälter und am Lagertank. Die Berechnungen setzen voraus, dass die Gasphase im Prozessverlauf ein konstantes Volumen aufweist und nicht durch etwaiges Aufwallen der Flüssigkeit komprimiert wird. Der Auslassstutzen der Zuströmung darf sich daher nicht unterhalb der Flüssigkeitsspiegels befinden und die Auslassöffnung muss geometrisch so beschaffen sein, dass durch die Auströmung keine erhebliche Bewegung der Flüssigkeitsphase mit event. auftretender Kompression des Gasraumes aufgrund von Schwankungen des Flüssigkeitsspiegels auftritt.

## Problemstellung

Beim Auftraggeber wird ein 20 m<sup>3</sup> TKW-Auflieger auf 3 barü Luftdruck mittels Kompressor aufgedrückt. Der TKW-Auflieger ist mit einem Schlauch und einer DN50 PE-Leitung an einen Salzsäurebehälter mit  $V = 114$  m<sup>3</sup> angeschlossen. Der Salzsäurebehälter hat eine Atmungsleitung aus PE zu einem Lagertank mit 20 mbar Unterdruck. Am Ende des Beladungsvorgangs drückt der TKW-Behälter mit 3 barü Gas in die Beladungsleitung. Der Salzsäuretank ist zu diesem Zeitpunkt mit einem Flüssigkeitsvolumen von  $V_{Fl} = 109$  m<sup>3</sup> befüllt.

Es ist zu ermitteln, welchen Innendurchmesser die Atmungsleitung haben

muss, damit der Druck des verbleibenden Gasvolumens im Salzsäurebehälter ( $V_G = 5 \text{ m}^3$ ) nicht über einen zulässigen Wert von 0,50 bar ansteigt.

## Lösungsweg

Für das System TKW-Auflieger, Salzsäuretank, Lagerbehälter, Zuleitung und Atmungsleitung wird ein instationäres Modell aufgestellt, das den zeitlichen Druckverlauf im Gasraum des Salzsäuretanks beschreibt.

*Voraussetzungen:* adiabates Ausströmen aus dem TKW-Auflieger bei konstantem Vordruck, ideale Gasphase in einem Gasraum mit konstantem Volumen; Massenstromdichte der ein- und ausströmenden Gase mit quasistationärer<sup>1</sup> Annahme, angeschlossene Leitungen werden über quasistationären Druckverlust berücksichtigt, isothermes bzw. adiabates Verhalten im Gasraum.

Mit dem Modell werden die zeitlichen Druckverläufe im Salzsäuretank beschrieben und aus Vergleichsrechnungen eine notwendige Ausströmfläche ermittelt.

## Modellgleichungen

Die Massenbilanz für den Gasraum des Salzsäurebehälters lautet:

$$\frac{dM}{dt} = \dot{m}_1 A_1 - \dot{m}_2 A_2 \quad (1)$$

Der Speicherterm auf der linken Seite von Gl. (1) läßt sich durch

$$\frac{dM}{dt} = V \frac{dr}{dt} = V \frac{dr}{dP} \frac{dP}{dt} \quad (2)$$

ausdrücken, so dass für den zeitlichen Druckverlauf im Behälter die Differenzialgleichung

---

<sup>1</sup> Der Massenstrom in den Zu- und Ableitung stellt sich unter den jeweils herrschenden Druckverhältnissen jeweils verzögerungsfrei auf den zum Behälterinnendruck gehörigen stationären Wert ein.

$$V \frac{dr}{dP} \frac{dP}{dt} = \dot{m}_1 A_1 - \dot{m}_2 A_2 \quad (3)$$

folgt. Der Index 1 steht für den Zustand im TKW-Auflieger, der Zustand 2 für den Zustand im Salzsäurebehälter. Gesucht wird nach der Ausströmfläche  $A_2$ . Die Aufgabe besteht darin, Ausdrücke für die Massenstromdichten  $\dot{m}_1$  und  $\dot{m}_2$  zu finden und die zeitliche Ableitung der Masse als zeitlich Ableitung des Systemdrucks zu beschreiben. Im folgenden sind die hierfür gültigen Gleichungen für den Fall einer isothermen und für den Fall einer adiabaten (nicht isothermen) Gasphase im Salzsäurebehälter dargestellt.

### Isotherme Gasphase

Für den Fall der isotherm betrachteten Gasphase lauten die beschreibenden Gleichungen des Problems wie folgt:

$$r = \frac{P}{RT} \dot{M} \quad \text{③} \quad \frac{dr}{dP} = \frac{\dot{M}}{RT} \quad (4)$$

$$\frac{dP}{dt} = \frac{RT}{VM} \frac{P}{4} (\dot{m}_1 d_1^2 - \dot{m}_2 d_2^2) \quad (5)$$

$$\dot{m}_1 = f_1 C_1 \sqrt{\frac{2k}{k-1} P_1 r_1 \left[ \frac{e}{C} \frac{P_1^{\frac{2}{k}}}{P_1^{\frac{1}{\phi}}} - \frac{a P_1^{\frac{k+1}{k}}}{C P_1^{\frac{1}{\phi}}} \right]} \quad (6)$$

$$\dot{m}_2 = f_2 C_2 \sqrt{\frac{2k}{k-1} P r \left[ \frac{e}{C} \frac{P_2^{\frac{2}{k}}}{P_2^{\frac{1}{\phi}}} - \frac{a P_2^{\frac{k+1}{k}}}{C P_2^{\frac{1}{\phi}}} \right]} \quad (7)$$

$$P \phi = \max(P_{1,krit}, P), \quad P_{1,krit} = P_1 \frac{a}{C} \frac{2}{k+1} \frac{\phi^{k-1}}{\phi} \quad (8)$$

$$P_2 \phi = \max(P_{2,krit}, P_2), \quad P_{2,krit} = P \frac{a}{C} \frac{2}{k+1} \frac{\phi^{k-1}}{\phi} \quad (9)$$

$$\text{mit } r_1 = \frac{P_1}{RT} M, \quad r = r(P) = \frac{P}{RT} M$$

$$f_1 = 1, \quad f_2 = C_1 + z_2 \frac{L_2}{d_2} + n_B z_B \frac{\delta}{\phi}$$

$$C_1 = C_2 = 1$$

Die Gln. (6) bis (9) beschreiben das adiabate Ausströmen eines idealen Gases zwischen zwei Druckniveaus, wobei Vorabrechnungen ergeben, dass in der Zuleitung 1 kritisches Ausströmen auftritt, während dies in der Abströmleitung 2 bei Einhaltung des zulässigen Behälterdrucks nicht der Fall ist. Die Ausflusskennziffern werden zu Eins gesetzt, um insbesondere für den Einströmprozess auf der sicheren Seite zu liegen. Für den gesamten Prozess gilt eine konstante Temperatur  $T = T_0$ .

### Adiabate Gasphase

Für den Fall der adiabaten Gasphase im Salzsäurebehälter ist der Zusammenhang zwischen Druck und Gasdichte unter Annahme der Adiabatangleichung zu bestimmen:

$$\frac{P}{r^k} = \frac{P_0}{r_0^k} \quad \textcircled{R} \quad \frac{dr}{dP} = \frac{1}{k} \frac{M}{RT_0} \frac{\partial P}{\partial P_0} \frac{\delta^{1-k}}{\phi^k} \quad (10)$$

Es wird davon ausgegangen, dass der TKW-Behälter und der Salzsäuretank zu Beginn des Einströmens auf der gleichen Temperatur  $T_0$  liegen. Unter dieser Voraussetzung sind die Modellgleichungen für den Prozess wie folgt zu schreiben:

$$\frac{dP}{dt} = \frac{kRT_0}{VM} \frac{\partial P}{\partial P_0} \frac{\delta^{k-1}}{\phi^k} \frac{p}{4} (n_1 d_1^2 - n_2 d_2^2) \quad (11)$$

$$n_1 = f_1 C_1 \sqrt{\frac{2k}{k-1} P_1 r_1 \frac{\partial P}{\partial P_1} \frac{\delta^{\frac{2}{k}}}{\phi^{\frac{2}{k}}} - \frac{\partial P}{\partial P_1} \frac{\delta^{\frac{k+1}{k}}}{\phi^{\frac{k+1}{k}}}} \quad (12)$$

$$n_2 = f_2 C_2 \sqrt{\frac{2k}{k-1} P r \frac{\partial P}{\partial P} \frac{\delta^{\frac{2}{k}}}{\phi^{\frac{2}{k}}} - \frac{\partial P}{\partial P} \frac{\delta^{\frac{k+1}{k}}}{\phi^{\frac{k+1}{k}}}} \quad (13)$$

$$P_{\phi} = \max(P_{1,krit}, P), \quad P_{1,krit} = P_0 \frac{2}{k+1} \frac{\dot{V}_0^{k-1}}{\dot{V}_1} \quad (14)$$

$$P_{2\phi} = \max(P_{2,krit}, P_2), \quad P_{2,krit} = P_0 \frac{2}{k+1} \frac{\dot{V}_0^{k-1}}{\dot{V}_2} \quad (15)$$

$$\text{mit } r_1 = \frac{P_1}{RT_0} \dot{M}, \quad r = r(P) = \frac{P_0}{RT_0} \dot{M} \frac{P_0 \dot{V}_0^{k-1}}{P \dot{V}}$$

$$f_1 = 1, \quad f_2 = \frac{1}{2} + z_2 \frac{L_2}{d_2} + n_{B,z,B} \frac{\dot{V}_0^{1/2}}{\dot{V}}$$

$$C_1 = C_2 = 1$$

Die leichte Temperatursteigerung im Salzsäuretank wird über die Adiabata-  
 tengleichung (10) implizit berücksichtigt. Eine Abkühlung des einströmenden  
 Gases durch den Joule-Thomson-Effekt<sup>2</sup> ist nicht berücksichtigt, da die Be-  
 rechnung unter Annahme idealer Gase durchgeführt wird. Die Temperatur im  
 Gasraum des Salzsäuretanks beträgt über dem Prozessverlauf jeweils

$$T = T_0 \frac{P_0 \dot{V}_0^{k-1}}{P \dot{V}} \quad (16)$$

## Berechnungsdaten

Die Berechnung wird mit den folgenden Daten durchgeführt:

Variable	Wert	Einheit	Bedeutung
$d_1$	0,0408	m	Innendurchmesser Zuleitung
$L_1$	12,3	m	Länge der Zuleitung

<sup>2</sup> Der Joule-Thomson-Koeffizient für Luft beträgt bei Prozessbedingungen 0,25 K/bar; die aus der Expansion resultierende Abkühlung ist demgemäß vernachlässigbar.

$L_2$	55,0	m	Länge der Atmungsleitung
$n_B$	15	1	Anzahl an 90°-Bögen in der Atmungsleitung
$P_0$	1,013 x 10 <sup>5</sup>	Pa	Anfangsdruck im Salzsäurebehälter (absolut)
$P_1$	4,013 x 10 <sup>5</sup>	Pa	Druck im TKW-Behälter (absolut)
$P_2$	0,993 x 10 <sup>5</sup>	Pa	Druck im Lagertank (absolut)
$P_{max}$	1,513 x 10 <sup>5</sup>	Pa	zulässiger Druck im Salzsäuretank (absolut)
$R$	8,3143	J/(molK)	Allgemeine Gaskonstante
$T_0$	293,15	K	Anfangstemperatur
$V$	5,0	m <sup>3</sup>	Gasvolumen Salzsäurebehälter
$M$	0,02896	kg/mol	Molmasse Luft
$k$	1,40	1	Adiabatexponent
$h$	1,722 x 10 <sup>-5</sup>	Pa s	dynamische Viskosität Luft (bei 0°C)

Tabelle 1: Berechnungsdaten

Die o. g. Leitungsdaten  $d_1, L_1, L_2, n_B$  wurden einer vom Auftraggeber bereitgestellten Isometrie entnommen. Alle Berechnungen werden für Luft mit Standardzusammensetzung durchgeführt. Für die Zu- und Ableitung ist vorab zu prüfen, ob kritisches Ausströmen auftritt. Gemäß VDI-Wärmeatlas, Abschnitt Ibd, ergibt sich:

$$P_{1,krit} = P_1 \cdot \frac{2}{k+1} \cdot \frac{1}{\left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k}{k-1}}} = 4,013 \times 10^5 \cdot \frac{2}{1,40+1} \cdot \frac{1}{\left(\frac{2}{1,40+1}\right)^{\frac{1,40}{0,40-1}}} = 2,12 \times 10^5 \text{ Pa}$$

$$P_{2,krit} = P_{max} \cdot \frac{2}{k+1} \cdot \frac{1}{\left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k}{k-1}}} = 1,513 \times 10^5 \cdot \frac{2}{1,40+1} \cdot \frac{1}{\left(\frac{2}{1,40+1}\right)^{\frac{1,40}{0,40-1}}} = 0,80 \times 10^5 \text{ Pa}$$

Damit ist  $P_{1,krit} > P_{max}$  und  $P_{2,krit} < P_2$ . Es ist somit in der Zuleitung bis zum Erreichen des maximal zulässigen Drucks mit kritischem Ausströmen zu rechnen, während in der Atmungsleitung auch beim maximal zulässigen Druck im Salzsäurebehälter kein kritisches Ausströmen zu erwarten ist. Die Simulation

wird jedoch unter Verwendung der Gln. (14) und (15) durchgeführt und kann damit auch Fälle abdecken, die von den o.g. Verhältnissen abweichen.

Die Druckverlustbeiwerte können vorab unter Annahme isothermer Verhältnisse abgeschätzt werden. Für die Zuleitung ergeben sich gemäß Gl. (6) Reynoldszahlen im Bereich  $Re > 10^6$ .

PE-Rohre können als näherungsweise hydraulisch glatt gelten; die maximale absolute Rauigkeit von Kunststoffrohren beträgt 0,0015 mm (Quelle: VDI-Wärmeatlas 2006, Abschnitt L). Gemäß der Beziehung von Colebrook-White

$$\frac{1}{\sqrt{z_2}} = -2 \lg \left( \frac{2,51}{Re_2 \sqrt{z_2}} + \frac{K/d_2}{3,71} \right) \quad (17)$$

ergibt sich für eine Atmungsleitung mit  $d_2 = 110$  mm und einer absoluten Rauigkeit von  $K = 0,0015$  mm ein Druckverlustbeiwert von  $z_2 = 0,0125$ . In der Simulation wird aber für die unterschiedlichen Durchmesser und Geschwindigkeiten mit den exakten Werten gemäß Gl. (17) gerechnet, da bedingt durch die Länge der Atmungsleitung der Druckverlust einen deutlichen Einfluss auf das Ergebnis hat. Die Reynoldszahl in der Atmungsleitung ergibt sich mit den Massenstromdichten gemäß Gl. (7) bzw. Gl. (13) zu

$$Re_2 = \frac{m_2 d_2}{h_2} \quad (18)$$

Der Druckverlustbeiwert der 90°-Bögen wird gemäß VDI-Wärmeatlas 2006, Abschnitt Lac, Abbildung 15 abgeschätzt. Für höhere Reynoldszahlen  $Re > 10^6$  und mittlere Krümmungsradien ergeben sich für glatte Rohre Druckverlustbeiwerte von  $z_B \gg 0,10$ . Für die Simulation wird daher durchgehend mit

$$z_B = 0,10 \quad (19)$$

gerechnet.

In der Zuleitung wird kein Druckverlust berücksichtigt, da hier eine kritische Strömung vorliegt und bedingt durch das kritische Druckverhältnis noch ausreichend Reserven zum Ausgleich von Druckverlusten vorhanden sind.

## Ergebnisse

Es wurden für den isothermen und den adiabaten Fall jeweils vier Berechnungen mit unterschiedlichen Auslassdurchmessern durchgeführt. Die Ergebnisse sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst. Es ist unbedingt zu berücksichtigen,

sichtigen, dass die genannten Durchmesserwerte als *Innendurchmesser* der Leitung und nicht als deren Normdurchmesser zu verstehen sind.

Berechnungsfall	$d_2$ [mm]	$P_{max}$ [bar ü]
isotherm	40,83	2,956
	80	2,006
	115	0,506
	125	0,334
adiabat	40,8	2,971
	80	2,245
	115	0,582
	125	0,368

*Tabelle 2: Ergebnisse der Simulationsrechnungen*

Weitere Simulationen zeigen, dass der Mindestinnendurchmesser der Atmungsleitung für den isothermen Fall  $d_{2,min}^{isotherm} = 116$  mm und für den adiabaten Fall  $d_{2,min}^{adiabat} = 119$  mm beträgt, um den Druckanstieg im Salzsäurebehälter auf exakt 0,50 bar zu begrenzen.

Für einen Innendurchmesser von  $d_2 = 125$  mm bleibt der Druckanstieg in beiden Fällen deutlich unterhalb der erlaubten 0,50 bar. Diese Auslegung wird daher empfohlen.

---

<sup>3</sup> 40,8 mm ist gemäß vorliegender Isometrie der Innendurchmesser der DN50-Leitung nach derzeitiger Planung

In den folgenden beiden Diagrammen sind die zeitlichen Druckverläufe im Tank für den isothermen und für den adiabaten Berechnungsfall dargestellt.

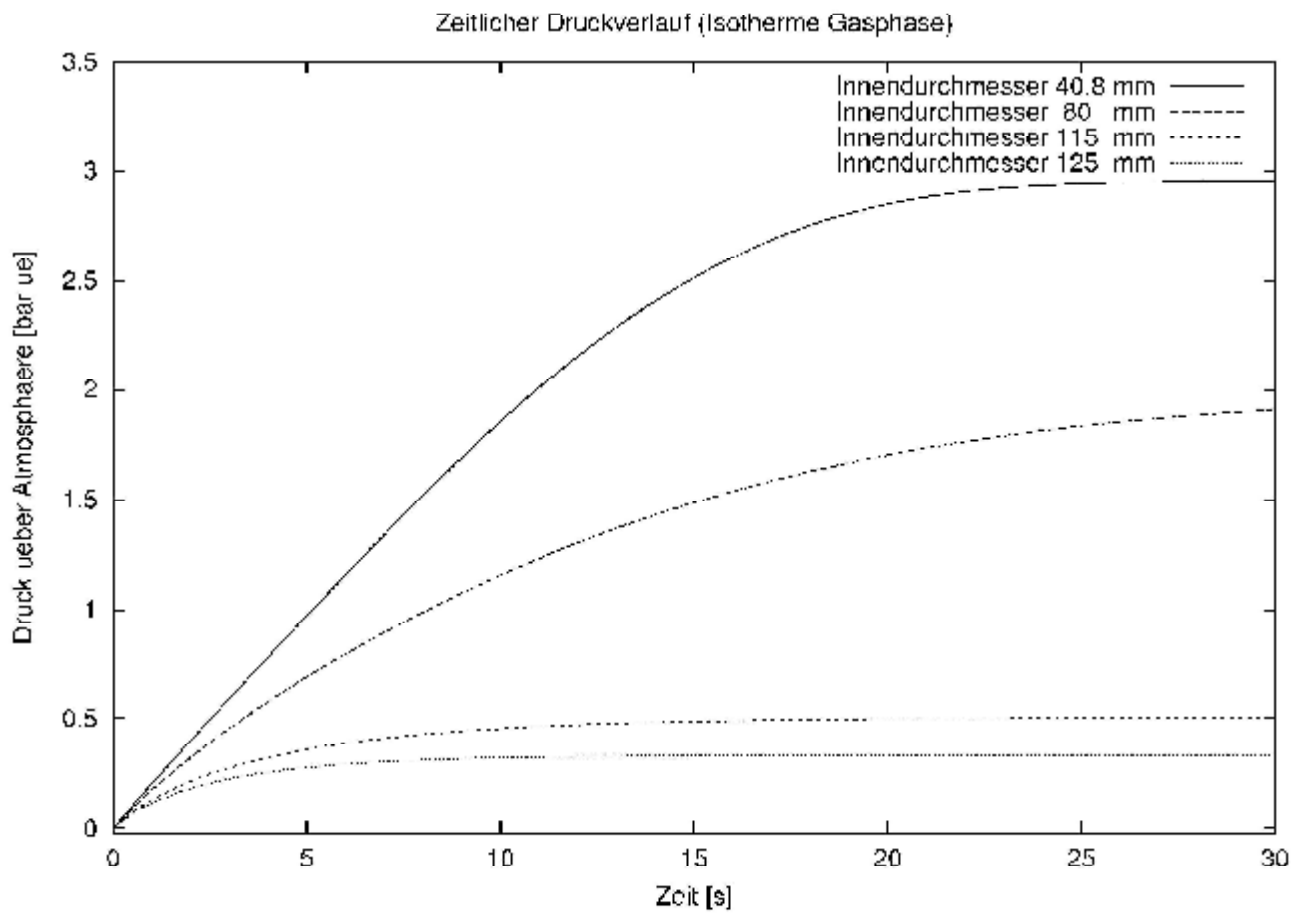


Abb. 1: Druckverläufe für den isothermen Berechnungsfall

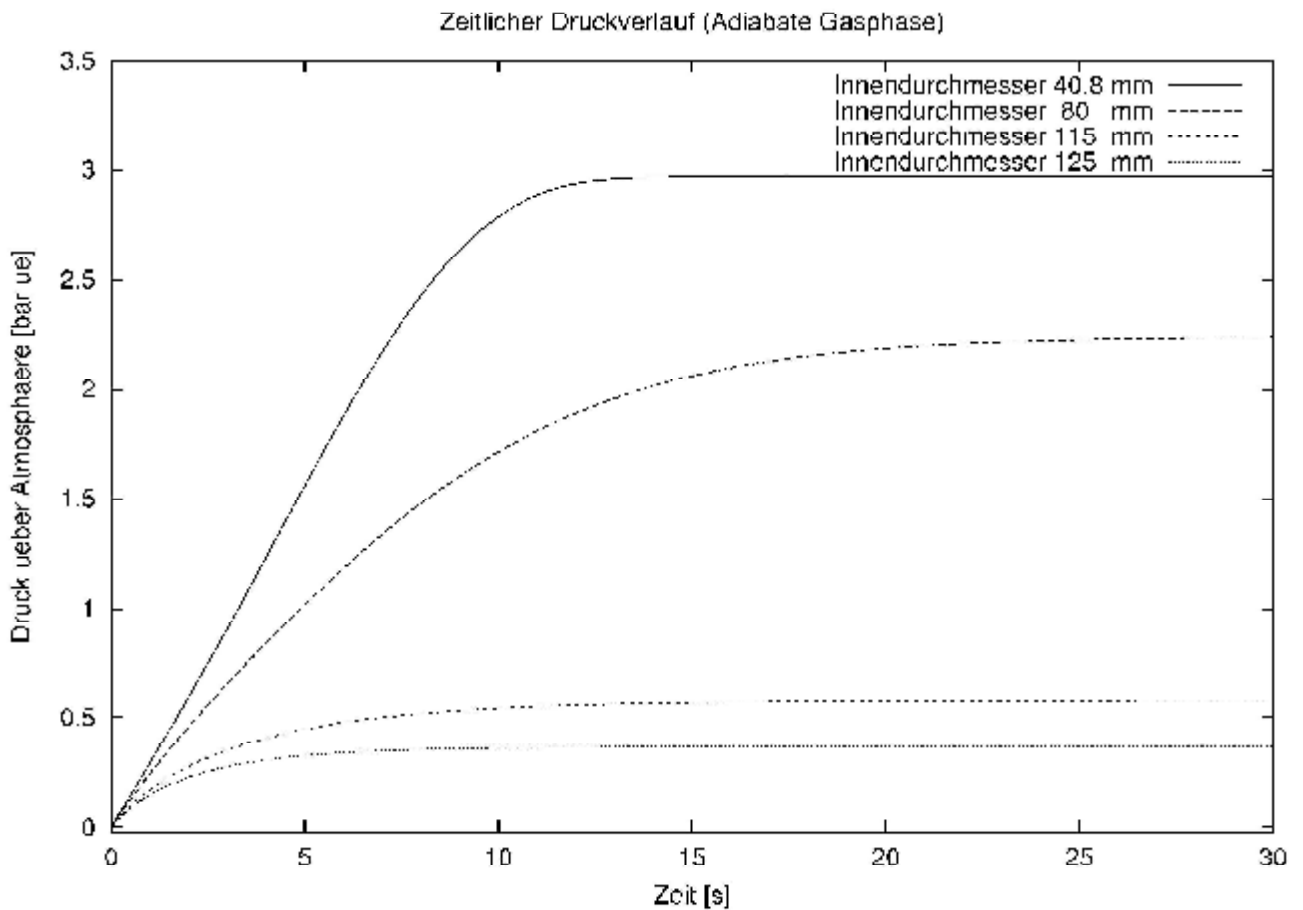


Abb. 2: Druckverläufe für den adiabaten Berechnungsfall

Der adiabate Prozess setzt eine Erwärmung der Gasphase im Behälter gemäß der Adiabatengleichung voraus (siehe Gl. (16)), wodurch die Gasdrücke im Tank etwas höher liegen und die Druckkurven etwas steiler verlaufen als im isothermen Prozess. Ob dies tatsächlich so eintritt, oder ob die hohe Wärmekapazität der Salzsäure den Gasraum auf nahezu konstanter Temperatur hält, kann vorab nicht ohne Weiteres entschieden werden. Die Druckverläufe beider Fälle weichen aber nicht stark voneinander ab und die empfohlene Auslegung gilt für beide Modellvarianten, so dass diese Frage nicht genau geklärt werden muss.

## Anmerkungen

Die Berechnungen setzen voraus, dass die Gasphase im Prozessverlauf ein konstantes Volumen aufweist und nicht durch etwaiges Aufwallen der Flüssigkeit komprimiert wird.

Der Auslassstutzen der Zuströmung darf sich daher nicht unterhalb der Flüssigkeitsspiegels befinden und die Auslassöffnung muss geometrisch so beschaffen sein, dass durch die Ausströmung keine erhebliche Bewegung der Flüssigkeitsphase mit event. auftretender Kompression des Gasraumes aufgrund von Schwankungen des Flüssigkeitsspiegels auftritt.

Die Ausströmgeschwindigkeit der Gasphase aus der Zulaufleitung beträgt bei kritischer Strömung unter den gegebenen Bedingungen 313 m/s. Dies bedeutet, dass auch bei Anordnung der Ausströmöffnung oberhalb des Flüssigkeitsspiegels darauf geachtet werden muss, dass durch die kinetische Energie des Gases keine Flüssigkeitsteilchen in die Atmungsleitung gerissen werden. Dies kann durch entsprechende Einbauten (Prallplatte o.ä.) sichergestellt werden. Es ist hierbei zu beachten, dass die Einbauten auch für die Impulskraft der vorangehenden Flüssigkeitsströmung ausgelegt sein müssen.

Da zu erwarten ist, dass die Gasphase aufgrund der hohen Ausströmgeschwindigkeit in erheblichem Masse mit der Flüssigkeitsmasse in Kontakt kommt, ist ein Abkühlen der Gasmasse auf die Temperatur der Flüssigkeit sehr wahrscheinlich. Es ist daher eher der isotherme Berechnungsfall für die Auslegung maßgebend. Da im adiabaten Fall jedoch nur unbedeutend höhere Auslassdurchmesser für die Atmungsleitung berechnet werden, ist diese Unterscheidung für die Auslegung letztlich unerheblich.

## Symbolverzeichnis

Symbol	Einheit	Bedeutung
$A$	$m^2$	Fläche
$C$	1	Ausflusskennziffer
$d$	m	Leitungsinwenddurchmesser
$f$	1	Druckverlustfunktion
$K$	m	absolute Rauigkeit
$L$	m	Länge
$\dot{m}$	$kg/(m^2s)$	Massenstromdichte
$M$	kg	Masse
$M^0$	kg/mol	Molmasse
$n$	1	Anzahl
$P$	Pa	Druck
$T$	K	Temperatur
$t$	s	Zeit
$V$	$m^3$	Volumen
$h$	Pa s	dynamische Viskosität
$p$	1	Kreiszahl
$r$	$kg/m^3$	Dichte
$z$	1	Druckverlustbeiwert

### Indices

B	90°-Bogen
max	maximal
krit	kritisches Ausströmen
0	Anfangszustand
1	Zuleitung
2	Atmungsleitung