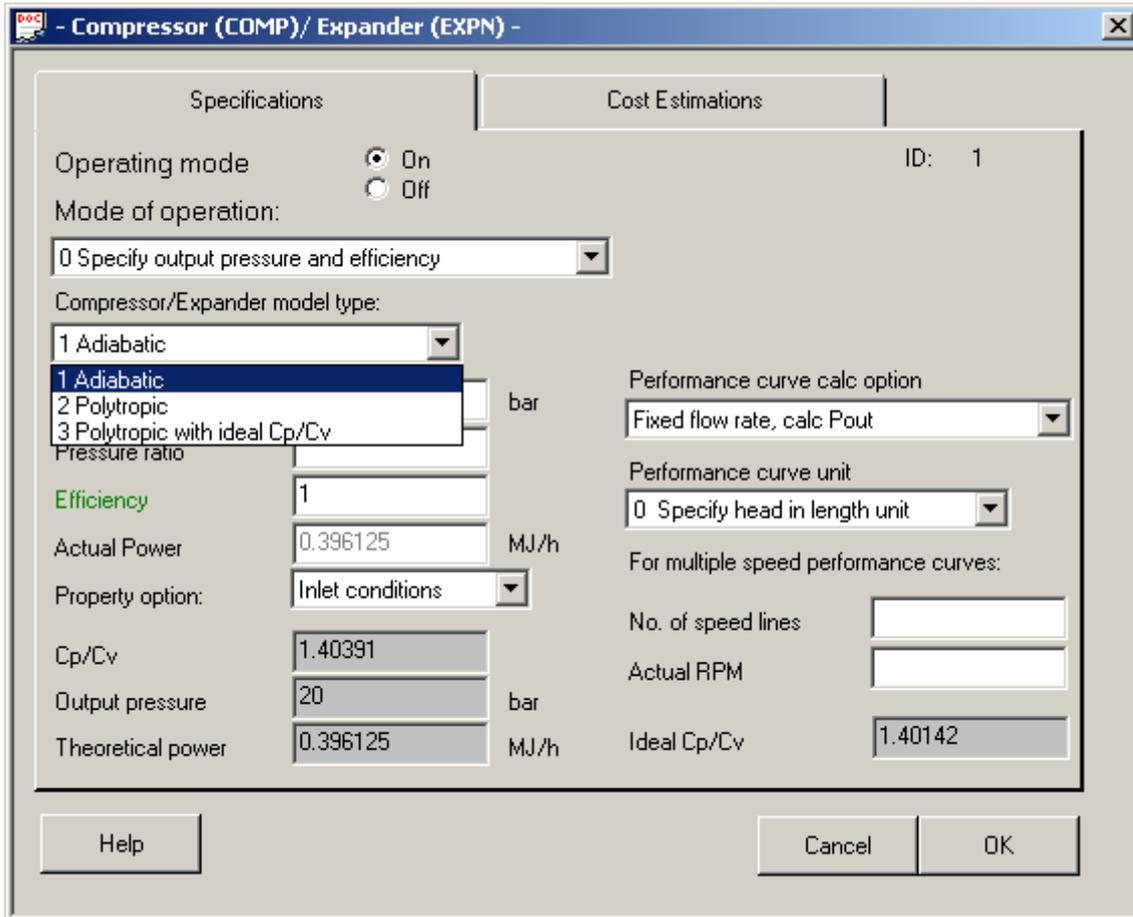


## Kompressor in CHEMCAD

Berechnungsmethoden

Die im Menü des Kompressors zu wählenden Berechnungsmethoden sollen hier näher besprochen werden:



Die Auswahl besteht aus 1. Adiabatic, 2. Polytropic und 3. Polytropic with ideal Cp/Cv.

### 1. Adiabatic

bedeutet adiabatisch reversibel = isentropisch. D.h. bei der isentropen Kompression bleibt die Entropie  $S$  konstant. Zum selben Ergebnis gelangt man mit einem Flash im isentropic mode. Chemcad simuliert den Ausgangszustand mit Hilfe der Zustandsgleichung SRK (oder der gewählten Zustandsgleichung z.B. PR) so, dass  $S = \text{konstant}$  ist. Die allgemeine Kompressionsformel wird also nicht verwendet. Die isentrope Kompression ist ein Idealfall.

## 2. Polytropic

die polytrope Kompression ist nicht-adiabatisch, d.h. mit Wärmeverlust behaftet. Der polytrope Exponent  $n$  liegt zwischen dem isentropen Exponent  $\chi$  und 1. Dies wird allein durch den Wirkungsgrad bestimmt, den man einzugeben hat. Ist  $n = 1$ , läge isotherme Kompression vor. Die polytrope Kompression wird im CHEMCAD Kompressor daher durch Kombination der isentropen Kompression und dem Wirkungsgrad berechnet. Dabei wird der isentrope Exponent  $\chi = C_p/C_v$  in der isentropen Kompressionsformel verwendet.  $C_v$  wird auf Basis einer Zustandsgleichung (SRK) auf den Eingang oder den Mittelwert bezogen, berechnet.  $C_p$  ergibt sich aus  $dH/dT$ .

### Compressor/Expander model type

- |   |   |
|---|---|
| 1 <i>Adiabatic compression/expansion</i>            | This is the default setting. In this mode, the unit will perform adiabatic (isentropic) compression/expansion.                                      |
| 2 <i>Polytropic compression/expansion</i>           | In this mode, we will calculate $C_v$ rigorously using an equation of state enthalpy model.   |
| 3 <i>Polytropic with ideal <math>C_p/C_v</math></i> | In this mode, CHEMCAD will calculate $C_v$ based on the ideal gas correlation $C_p - C_v = R$ . Note that this is not accurate for most real gases. |

## 3. Polytropic with ideal $C_p/C_v$

bei diesem Modell wird im Gegensatz zum vorherigen Modell  $C_v$  aus dem idealen Gasgesetz für den Eingangszustand berechnet. Mit dem Wirkungsgrad  $\eta = 1$  erhält in guter Näherung dasselbe Ergebnis wie bei der isentropen Kompression.

### Wirkungsgrad (Efficiency)

Der Wirkungsgrad ist für die Methoden Polytropic und Polytropic with ideal  $C_p/C_v$  erforderlich. Der Wirkungsgrad in der adiabatischen Methode ist das Verhältnis der idealen zur realen Arbeit, sonst das Verhältnis der isentropen zur polytropen Arbeit. In der Methode Adiabatic ist bei einem Wirkungsgrad von z.B. 0,5, die reale Arbeit exakt doppelt so groß wie die ideale Arbeit. Die reale Arbeit der Polytropic – Methoden 2 und 3 ist aber immer größer als die reale Arbeit der adiabatischen Methode. Aus der polytropen Arbeit und der Gas-Enthalpiefunktion berechnet CHEMCAD die Endtemperatur.

Die nachstehenden Gleichungen sind sicherlich von Interesse.  
CHEMCAD Help:

## Methods

For a polytropic compressor, the actual work is calculated by the following equations:

$$polyc = (k - 1) / peff$$

where:

polyc = polytropic coefficient

k = cp/cv (ratio of heat capacities)

peff = polytropic efficiency

$$Actual\ work = [F * Z * R * T / polyc] * ((Pout / Pin) ** polyc - 1) / peff$$

where:

F = flow rate

Z = the compressibility factor

R = the gas

T = the stream temperature

Pout = the output pressure

Pin = the input pressure

Darin muss der polytropic coefficient  $polyc = (n-1)/n$  in der 1. Gleichung durch k dividiert werden. Dies ist ein reiner Schreibfehler, der nicht in CHEMCAD zu finden ist. Ansonsten ist die Gleichung richtig. Sie stammt von Kayode Coker, S. 427, Nr. 6-33 und 6-39. R ist natürlich die Gaskonstante = 8,31447 kJ/K.Kmol. F sollte man daher in kmol eingeben.

Nach den Autoren Stephan und Cerbe gilt folgender Zusammenhang zwischen Wirkungsgrad und Exponenten:

$$\eta = \frac{n - \chi}{\chi - 1}$$

Darin ist n der polytrope und  $\chi$  der isentrope Exponent.

Perry definiert den Wirkungsgrad  $\eta$  als Verhältnis des isentropen Koeffizienten zum polytropen Koeffizienten wie folgt

$$\eta = \frac{n(\chi - 1)}{\chi(n - 1)}$$

Perry nennt diesen den small stage Efficiency.

## Anhang

**Isotherme Kompression.** Die Kompression findet in einem Thermostaten statt. Real müsste man die Kompression unendlich langsam durchführen, damit die Wärmeübertragung schnell genug ist, um die Temperatur des Gases tatsächlich konstant zu halten und die Gasmoleküle keine Beschleunigung erfahren.

Es gilt der erste Hauptsatz der Thermodynamik:  $dU = dQ - pdV$ . Für ein Mol schreibt man  $du = dq - pdv$ . Da die Temperatur des Gases konstant ist, ist die innere Energie  $U$  konstant und es gilt  $dU = 0$  und damit  $Q = pdV$ . Für 1 Mol gilt  $pV = RT$ . Da  $T$  konstant ist, ist auch  $pV$  konstant. Für die bei der Kompression aufzubringende Arbeit gilt daher

$$a = \int_{v_1}^{v_2} p dv = \int_{p_1}^{p_2} v dp \quad \text{Den zweiten Teil nennt man die technische Arbeit.}$$

Für ein ideales Gas gilt  $p = \frac{RT}{v}$

eingesetzt und integriert erhält man

$$a = RT \ln \frac{v_2}{v_1} = RT \ln \frac{p_2}{p_1}$$

Der isotherme Kurvenverlauf  $p - v$  stellt beim idealen Gas eine Hyperbel dar. Daher sind beide Integrale identisch.

**Adiabatische Kompression.** Die adiabatische, reversible Kompression findet in einem perfekt isolierten Zylinder statt. Dabei wird die Kompression so durchgeführt, dass die Kolbenkraft stets ausgeglichen ist, d.h. der Kolben steht an jeder beliebigen Stellung im Kräftegleichgewicht mit dem Gasdruck. Dies lässt sich z.B. durch eine entsprechende Kurvenscheibe mit anhängendem Gewicht erreichen. Die bei der Kompression aufgewendete Arbeit, die gleich wäre der Hubarbeit des an der Kurvenscheibe hängenden Gewichtes, wird als innere Energie des Gases umgewandelt und gespeichert. Dies führt zu einer Zunahme der inneren Energie  $u$  (molare Größe), was letztendlich eine Temperaturzunahme  $dT$  des Gases bewirkt.

### Ableitung nach Brdicka:

Aus dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik ( $q$  ist die molare mit der Umgebung ausgetauschte Wärme,  $a$  die erbrachte molare Volumenarbeit und  $u$  die innere molare Energie)

$$du = da + dq$$

für reversible ausgetauschte molare Volumenarbeit gilt

$$da = -pdv \text{ und}$$

$$dq = 0$$

Die innere, molare Energie  $u$  eines idealen Gases hängt nur vom Druck und weder von der Temperatur, noch vom Volumen ab. Daher gilt

$$du = C_v dt \quad \text{und damit}$$

$$C_v dT = -p dv$$

$$\text{Mit } p = RT/v$$

erhält man

$$C_v dT = -\frac{RT dv}{v}$$

nach Trennung der Variablen ergibt sich die Gleichung

$$C_v \int_{T_1}^{T_2} d \ln T = -R \int_{v_1}^{v_2} d \ln v$$

(Anm.: Indize werden der besseren Lesbarkeit wegen großgeschrieben)

die Integration liefert

$$\ln \frac{T_2}{T_1} = \frac{R}{C_v} \ln \frac{v_1}{v_2} \quad (\text{Anm.: wegen des neg. Vorzeichen sind bei } v \text{ die Grenzen vertauscht})$$

da  $R = C_p - C_v$  ist (ohne Ableitung)

erhält man

$$\frac{R}{C_v} = \frac{C_p}{C_v} - 1 = \chi - 1 \quad \chi = \frac{C_p}{C_v}$$

eingesetzt und aufgelöst erhält man

$$\left( \frac{v_1}{v_2} \right)^{\chi-1} = \frac{T_2}{T_1} \quad \text{oder}$$

$$T v^{\chi-1} = \text{const.} \quad \text{oder} \quad p^{1-\chi} T^\chi = \text{const.} \quad \text{sowie die Poisson'sche Gleichung} \quad p v^\chi = \text{const.}$$

Die Anwendung dieser Gleichungen bedeutet

$$p_2 v_2^\chi = p_1 v_1^\chi \text{ und } p_2^{1-\chi} T_2^\chi = p_1^{1-\chi} T_1^\chi \text{ und } T_2 v_2^{\chi-1} = T_1 v_1^{\chi-1}$$

Als Gebrauchsformel sind bekannt:

$$p_2 = p_1 \left( \frac{v_1}{v_2} \right)^\chi \quad \text{oder} \quad T_2 = T_1 \left( \frac{p_2}{p_1} \right)^{\frac{\chi-1}{\chi}}$$

Die Arbeit ist

$$a = C_v (T_2 - T_1)$$

**Ableitung nach Prof. Dr. Feile (Internet):**

$$du = C_v dT$$

$$\frac{dT}{T} = -\frac{R}{C_v} \frac{dv}{v} = \frac{C_p - C_v}{C_v} \frac{dv}{v} = \left( 1 - \chi \right) \frac{dv}{v}$$

$$\int_{T_1}^{T_2} \frac{dT}{T} = \int_{v_1}^{v_2} \left( 1 - \chi \frac{dv}{v} \right) \rightarrow \ln \left( \frac{T_2}{T_1} \right) = (1 - \chi) \ln \left( \frac{v_2}{v_1} \right) \rightarrow \frac{T}{T} = \left( \frac{v}{v} \right)^{1-\chi}$$

## Ableitung nach Kortüm:

Für die isentrope Arbeit gilt  $a = C_v(T_2 - T_1) = -\int_{v_1}^{v_2} p dv = -R \int_{v_1}^{v_2} T \frac{dv}{v}$  mit  $p = \frac{RT}{v}$

Aus  $Tv^{(\chi-1)}$  erhält man durch Ableitung  $\ln T + (\chi-1)\ln v = \ln C$

Daraus durch Differenzieren

$$\frac{dT}{T} = -(\chi - 1) \frac{dv}{v} \quad \text{eingesetzt in die Gleichung für } a \text{ ergibt}$$

$$a = \frac{R}{\chi - 1} \int_{T_1}^{T_2} dT = \frac{R}{\chi - 1} (T_2 - T_1)$$

$$p = \frac{p_1 v_1^\chi}{v^\chi}$$

von  $P_1, V_1$  nach  $P_2, V_2$  und erhalten dadurch unmittelbar die Arbeit

$$a = \frac{p_1 v_1}{\chi - 1} \left[ \left( \frac{p_2}{p_1} \right)^{\frac{\chi-1}{\chi}} - 1 \right] \quad \text{oder} \quad a = \frac{p_1 v_1}{\chi - 1} \left[ \left( \frac{v_1}{v_2} \right)^{\chi-1} - 1 \right] \quad \text{oder}$$

## Ableitung nach Cerbe und Hering

$$du + pdv = dq = 0 \quad (du = C_v dT)$$

$$C_v dT + pdv = dq = 0, \text{ d.h. } C_v dT = -pdv \quad (dT = -pdv/C_v)$$

sowie

$$dh = du + pdv + v dp = C_p dT \quad (dh = C_p dT)$$

eingesetzt erhält man

$$C_p dT = v dp \quad \text{mit } dT = -pdv/C_v \text{ erhält man}$$

$$\frac{C_p}{C_v} \frac{dv}{v} = -\frac{dp}{p}$$

daraus erhält man

$$\gamma \ln \frac{v_2}{v_1} = \ln \frac{p_1}{p_2}$$

und schließlich

$$p_2 v_2^\chi = p_1 v_1^\chi$$

Durch Einsetzen von  $v=RT/p$  ergibt sich wieder die o.g. Gleichung mit  $T_2$  und  $T_1$ .

#### **Ableitung nach Stephan:**

$$pdv + du = dq = 0$$

$$pdv + Cp dT = 0$$

mit  $R = Cp - Cv$  wird

$$pdv + \frac{R}{\chi - 1} dt = 0$$

mit der Ableitung des idealen Gasgesetzes  $p dV = R dT$  erhält man

$$pdv + v dp = RT$$

Beide Gleichung durch Ersetzen von  $dT$  zusammengefaßt ergibt

$$\frac{dp}{p} + \chi \frac{dv}{v} = 0$$

Durch Integration erhält man das o.g. bekannte Ergebnis

$$pV^\chi = \text{const.}$$

Ableitung nach Lüdecke:

$$Cv dT = \frac{RT}{v} dv$$

$$\frac{dT}{T} = \frac{R}{Cv} \frac{dv}{v} \quad \text{mit } \chi = \frac{Cp}{Cv} \quad \text{und } Cp - Cv = R$$

$$\frac{dT}{T} = -(\chi - 1) \frac{dv}{v}$$

$$\ln \frac{T_2}{T_1} = -\left( \chi - 1 \right) \ln \frac{v_2}{v_1}$$

$$T_1 v_1^{\chi-1} = T_2 v_2^{\chi-1}$$

#### Literatur:

1. Brdicka: Grundlagen der physikalischen Chemie, VEB Deutscher Verlag, 5. Auflage, 1965, S. 218
2. Kortüm: Einführung in die chemische Thermodynamik, Verlag Chemie, 5. Auflage, 1966, S. 94
3. Cerbe und Hoffmann: Einführung in die Thermodynamik, Hanser Lehrbuch, 12. Auflage 1999, S. 80
4. Stephan, Mayinger: Thermodynamik, Springer, 15 Auflage, 1998, S. 114
5. Hering, Martin, Stohrer: Physik für Ingenieure, Springer, 10. Auflage, 2007, S. 208
6. Lüdecke: Thermodynamik, Springer, 2000, S. 84
7. Perrys Chemical Handbook, 7. Auflage, S. 10-41
8. Kayode Coker: Fortran programs for chemical process design, analysis and simulation, Gulf publishing, 1995, S.420 ff.

*Chemstations Deutschland GmbH, Nov. 2010*

*Autor: Wolfgang Schmidt*