

**Desodorierung:
Mathematisch-mechanistische Modellierung, Experimente**

Vom Fachbereich Chemie und Chemietechnik
der Universität Paderborn genehmigte

Dissertation

zur Erlangung des Grades eines Doktors der
Naturwissenschaften

Dr. rer. nat.

von

Marc Heggemann

Paderborn 2001

Die vorliegende Dissertation wurde in der Zeit von Oktober 1997 bis März 2001 im Fachgebiet Technische Chemie und Chemische Verfahrenstechnik der Universität Paderborn angefertigt.

Referent: Prof. Dr.-Ing. Hans-Joachim Warnecke
Universität Paderborn

Korreferent: Prof. Dr. Hendrik J. Viljoen
University of Nebraska-Lincoln, U.S.A.

Datum der Abgabe: 25. Mai 2001

Tag der mündlichen Prüfung: 17. August 2001

Meinen Eltern und Simone

TC-Schriftenreihe

Band 10

Marc Heggemann

**Desodorierung:
Mathematisch-mechanistische Modellierung,
Experimente**

D 466 (Diss. Universität-GH Paderborn)

Shaker Verlag
Aachen 2002

Die Deutsche Bibliothek - CIP-Einheitsaufnahme

Heggemann, Marc:

Desodorierung: Mathematisch-mechanistische Modellierung, Experimente/
Marc Heggemann.

Aachen: Shaker, 2002

(TC-Schriftenreihe; Bd. 10)

Zugl.: Paderborn, Univ., Diss., 2001

ISBN 3-8265-9820-2

Copyright Shaker Verlag 2002

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen
oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungs-
anlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 3-8265-9820-2

ISSN 1433-6499

Shaker Verlag GmbH • Postfach 1290 • 52013 Aachen
Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9
Internet: www.shaker.de • eMail: info@shaker.de

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die durch ihr Interesse und ihre Unterstützung zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Mein besonderer Dank gilt:

Herrn Prof. Dr.-Ing. H.-J. Warnecke für die Möglichkeit, dieses interessante Thema zu bearbeiten und für das große Vertrauen, das mir von ihm entgegen gebracht wurde. Er war stets offen für neue Ideen und stand mir jederzeit verständnisvoll, kompetent und kritisch zur Seite. Durch seine Unterstützung und Förderung war es mir möglich, über das akademische Interesse hinaus zu konkreten verfahrenstechnischen Problemlösungen der Industrie beizutragen.

Herrn Prof. Dr. H. J. Viljoen für die Übernahme des Korreferats, für die Ermöglichung eines viermonatigen, wissenschaftlichen Austauschs an die University of Nebraska-Lincoln, U.S.A. sowie für die hervorragende, insbesondere mathematische Betreuung. Die darüber hinaus gehende freundschaftliche Integration in den "South-African / American Way of Life" sowie das Kennenlernen seiner Familie, Mitarbeiter und Kollegen vermittelten mir Lebenserfahrung, die ich nicht missen möchte.

Herrn Prof. Dr. J. Prüb, der mir die Anwendung der Mathematik in der Chemischen Technik sowie deren Möglichkeiten näher brachte und bei Problemlösungen stets behilflich war.

Der Weidmüller-Stiftung, Detmold sowie dem Westfälischen Umweltzentrum (WUZ), Paderborn für die finanzielle Förderung durch Graduiertenstipendien.

Der Henkel KGaA, Düsseldorf, insbesondere Herrn Dr. W. Rähse und Herrn Dr. M. Sunder für die Bereitstellung des Aerosol-Gegenstromreaktors sowie für die fachliche Betreuung.

Der Zimmermann Sonderabfallentsorgung und -verwertung GmbH & Co., Gütersloh, für die Versorgung mit ammoniakhaltigen Abwässern.

Stefan Iglauer für die Ermittlung erster Resultate in der strömungstechnischen Beschreibung des Aerosol-Gegenstromreaktors mittels *Computational Fluid Dynamics (CFD)* im Rahmen seiner Diplomarbeit, Johannes Bremer für die tatkräftige Unterstützung bei Experimenten und Auswertung.

Meinen Bürokollegen Frau Dr. M. Wiebe sowie Herrn Dr.-Ing. Ch. Hennig für viele interessante Diskussionen, die mich persönlich in vielerlei Hinsicht bereicherten.

Nicht zuletzt Simone, die mir stets unterstützend und aufbauend zur Seite stand und mir immer ihr Verständnis entgegenbrachte sowie meinen Eltern, die mich stets ermutigt und gefördert haben.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|-----------|
| SYMBOLE UND ABKÜRZUNGEN | 7 |
| 1 EINLEITUNG UND PROBLEMSTELLUNG | 11 |
| 2 THEORETISCHE GRUNDLAGEN | 13 |
| 2.1 Bilanzgleichungen..... | 13 |
| 2.2 Computational Fluid Dynamics (CFD) | 14 |
| 2.2.1 Ablauf einer Strömungssimulation | 14 |
| 2.2.2 Turbulenzmodellierung (<i>k-ε</i> -Modell)..... | 18 |
| 2.2.3 Mehrphasenströmung (<i>Euler-Lagrange</i> -Modell)..... | 19 |
| 2.3 Verweilzeit-Verteilung | 20 |
| 2.4 Dampfstrippung wässriger Systeme..... | 23 |
| 3 AEROSOL-GEGENSTROMREAKTOR: VERFAHRENSTECHNISCHE BEURTEILUNG | 25 |
| 3.1 Stand der Technik und Zielsetzung | 25 |
| 3.2 Aufbau und Betriebsweise der Versuchsanlage | 27 |
| 3.3 Grundlagen der Modellierung | 29 |
| 3.4 Reaktormodell..... | 32 |
| 3.5 Parameterermittlung..... | 38 |
| 3.5.1 Verteilungskoeffizienten | 38 |
| 3.5.2 Verweilzeit und Bodensteinzahl der Flüssigkeit | 41 |
| 3.5.3 Lebensdauer der Flüssigkeitstropfen: Anwendung von <i>CFD</i> | 42 |
| 3.6 Simulationsergebnisse und Diskussion | 48 |
| 3.6.1 Vergleich: Experimente – Modell bei 56 °C | 49 |
| 3.6.2 Vergleich: Experimente – Modell bei 20 °C | 50 |
| 3.6.3 Anzahl der Durchläufe <i>n</i> | 51 |
| 3.6.4 Flüssigkeitsvolumenstrom und Düsenparameter..... | 52 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 4 | SEMIBATCH-RÜHRREAKTOR: ENTFERNUNG VON AMMONIAK | 55 |
| 4.1 | Stand der Forschung und Technik | 55 |
| 4.2 | Zielsetzung..... | 57 |
| 4.3 | Aufbau und Betriebsweise der Versuchsanlage..... | 58 |
| 4.4 | Grundlagen der Modellierung..... | 60 |
| 4.5 | Reaktormodell | 61 |
| 4.6 | Simulationsergebnisse und Diskussion | 67 |
| 4.6.1 | <i>pH</i> -Wert | 68 |
| 4.6.2 | Flüssigkeitsvolumen..... | 69 |
| 4.6.3 | Dampfmassenstrom | 70 |
| 4.6.4 | Modellierung der Ammoniakentfernung aus Industrieabwässern | 71 |
| 5 | ZUSAMMENFASSUNG | 75 |
| 6 | LITERATURVERZEICHNIS | 79 |
| 7 | ANHANG | 85 |
| 7.1 | Parameter: Aerosol-Gegenstromreaktor..... | 85 |
| 7.2 | Parameter: Semibatch-Rührreaktor | 87 |