

Argumentation zum NTU-HTU-Modell

Im nachfolgenden Dokument wird die theoretische Auslegung der Abscheideleistung von Ammoniak in der angebotenen Füllkörperkolonne dargelegt. Bezugnehmend auf die Fragestellung der Abhängigkeit der Abscheideleistung in Bezug auf die Rohgaskonzentration kann gezeigt werden, dass unabhängig von der Eingangs- bzw. geforderten Ausgangskonzentration an NH_3 der HTU-Wert konstant bleibt. Gleiche Frage stellt sich für NTU unterschiedlichen Eingangskonzentrationen.

Erläuterung:

Das NTU-HTU-Modell stellt, originär ausgehend von der Zweifilmtheorie von Lewis and Whitham (1924), ein Modell zur kinetischen Betrachtung des Stoffübergangs (HTU=height of a theoretical unit) und der für die Trennaufgabe erforderlichen Anzahl an Trennstufen (NTU=Number of theoretical units) dar.

Der Stoffübergangskoeffizient β_{La} bzw. β_{La} ist eine die Kinetik beeinflussende Größe und daher im HTU-Ansatz implementiert. Die Höhe einer Trennstufe stellt die Summe aus der Trennstufenhöhe für den Stoffübergang von unendlicher Gasphase an Phasengrenze sowie von der Phasengrenze auf wässriger Seite in die Tiefe des Flüssigkeitströpfchens dar. Da das NTU-Modell eine Absorption/Desorption voraussetzt und im Falle des chemischen Wäschers in der Flüssigphase eine Reaktion (zu Ammonium) auftritt, ist der Summand für die flüssigkeitsseitige Trennstufenhöhe um den Faktor λ/E zu erweitern (λ =Desorptionskoeffizient; E =Enhancement-Faktor).

$$\text{HTU}^{\text{OG}} = \frac{w^{\text{G}}}{\beta_{\text{i}}^{\text{G}} a_{\text{v}}} + \frac{\lambda}{E} \frac{w^{\text{L}}}{\beta_{\text{i}}^{\text{L}} a_{\text{v}}}$$

Mit

$$E = \frac{\beta_{\text{mit chem. Reaktion}}^{\text{L}}}{\beta_{\text{ohne chem. Reaktion}}^{\text{L}}} = \frac{x_{\text{Reaktionsmittel j}}}{x_{\text{Schadstoff i}}}$$

$$\lambda = \frac{\dot{N}^{\text{G}}}{\dot{N}^{\text{L}}} \frac{p}{c^{\text{L}} H}$$

Der Enhancementfaktor beschreibt hierbei die stöchiometrische Überdosierung an Chemikalie im Vergleich zum Schadstoffmolenanteil (als Molenbruch x).

Der Desorptionsfaktor λ beschreibt das Verhältnis aus Gasstoffmengenstrom und Flüssigkeitsstoffmengenstrom, Absolutdruck p , Wasserkonzentration in mol/L (= 55,5 mol/L) sowie dem Henrykoeffizienten H .

Der Henry-Koeffizient ist gemäß Clausius-Clapeyron-Gleichung eine Funktion der Temperatur; hingegen nur geringfügig beeinflusst durch Druck, Präsenz anderer Komponenten u.ä. Die Stoffmengenströme an Gas und Flüssigkeit werden trotz Aufweitung der Gasphase als konstant in diesem Modell angesehen.

Bei fixem Querschnitt sind gemäß Kontinuitätsgleichung auch die Gas- und Flüssigkeitgeschwindigkeit w konstant.

Die verbleibenden Stoffübergangskoeffizienten können über verschiedene Modelle berechnet werden. Dargestellt sind die Ansätze nach Onda (Nr. 1) sowie Cussler (Nr. 2)

Ansatz nach Onda für den Stoffübergang:

Flüssigphase

$$Sh_L = \beta_L \cdot \left(\frac{1}{g \nu_L} \right)^{1/3} = \beta_L \frac{d}{D_L}$$

$$Sh_L = 0.0051 \left(\frac{Re_L}{\phi_B^*} \right)^{2/3} Sc_L^{-0.5} (ad)^{0.4}$$

$$Re_L = \frac{w_L}{a \nu_L}$$

$$Sc_L = \frac{\nu_L}{D_L}$$

$$w_L = \frac{\dot{m}_L}{\rho_L A_K}$$

$$\phi_B^* = 1 - \exp[-1.45 \left(\frac{\sigma_c}{\sigma} \right)^{0.75} Re_L^{0.1} Fr^{-0.05} We^{0.2}] = \frac{a_{eff}}{a}$$

$$Fr = \frac{w_L^2 a}{g}$$

$$We = \frac{w_L^2 \rho_L}{\sigma a}$$

$$\nu = \frac{\eta}{\rho}$$

Gasphase

$$Sh_G = \frac{\beta_G}{D_G a} = \beta_G \frac{d}{D_G}$$

$$Sh_G = 5.23 Re_G^{0.7} Sc_G^{0.33} (ad)^{-2}$$

$$Re_G = \frac{w_G}{a \nu_G}$$

$$Sc_G = \frac{\nu_G}{D_G}$$

$$w_G = \frac{\dot{m}_G}{\rho_G A_K}$$

Gültigkeitsbereich: $Re_L = 1 \dots 500$, $Re_G = 2 \dots 1000$

Raschigringe: $d = 10-50$ mm, Berlensättel, Pallringe: $d = 12-25$ mm

σ Oberflächenspannung Flüssigkeit [N/m]

σ_c kritische Oberflächenspannung [N/m]

	$\sigma_c / \text{Nm}^{-1}$
Keramik	0.0609
PVC	0.0403
Stahl	0.0706
Glas	0.0726

a spezifische Oberfläche Füllkörperschüttung [m^2/m^3]

d Durchmesser Füllkörper [m]

ρ_L Dichte Flüssigkeit [kg/m^3]

ρ_G Dichte Gas [kg/m^3]

w_L Leerrohrgeschwindigkeit Flüssigkeit [m/s]

w_G Leerrohrgeschwindigkeit Gas [m/s]

A_K Kolonnenquerschnittsfläche [m^2]

g Erdbeschleunigung (9.81 m/s^2)

ν_L kinematische Viskosität Flüssigkeit [m^2/s]

ν_G kinematische Viskosität Gas [m^2/s]

D_L Diffusionskoeffizient Flüssigkeit [m^2/s]

D_G Diffusionskoeffizient Gas [m^2/s]

Quelle: Weiß, S., Militzer, U.E., Gramlich, K.: Thermische Verfahrenstechnik, 1993

Der Modellansatz von Onda sieht vor, dass der Stoffübergangskoeffizient gasseitig bzw. flüssigkeitsseitig über dimensionslose Kennzahlen wie Weberzahl, Froudzahl, Reynoldszahl, Sherwoodzahl und Schmidtzahl berechnet werden kann. **Alle diese Kennzahlen beruhen wiederum auf konstanten Einzelparametern und sind somit konzentrationsunabhängig.**

Ansatz nach Cussler für den Stoffübergang ($k = \beta$, da US-Herkunft):

Table 8.3-2 Selected mass transfer correlations for fluid-fluid interfaces^a

Physical situation	Basic equation ^b	Key variables	Remarks
Liquid in a packed tower	$k \left(\frac{1}{v_g} \right)^{1/3} = 0.0051 \left(\frac{v^0}{av} \right)^{0.67} \left(\frac{D}{v} \right)^{0.50} (ad)^{0.4}$	a = packing area per bed volume d = nominal packing size	Probably the best available correlation for liquids; tends to give lower values than other correlations.
	$\frac{kd}{D} = 25 \left(\frac{dv^0}{v} \right)^{0.45} \left(\frac{v}{D} \right)^{0.5}$	d = nominal packing size	The classical result, widely quoted; probably less successful than above.
	$\frac{k}{v^0} = \alpha \left(\frac{dv^0}{v} \right)^{-0.3} \left(\frac{D}{v} \right)^{0.5}$	d = nominal packing size	Based on older measurements of height of transfer units (HTU's); α is of order one.
Gas in a packed tower	$\frac{k}{aD} = 3.6 \left(\frac{v^0}{av} \right)^{0.70} \left(\frac{v}{D} \right)^{1/3} (ad)^{-2.0}$	a = packing area per bed volume d = nominal packing size	Probably the best available correlation for gases.
	$\frac{kd}{D} = 1.2(1 - \epsilon)^{0.36} \left(\frac{dv^0}{v} \right)^{0.64} \left(\frac{v}{D} \right)^{1/3}$	d = nominal packing size ϵ = bed void fraction	Again, the most widely quoted classical result.
Pure gas bubbles in a stirred tank	$\frac{kd}{D} = 0.13 \left(\frac{(P/V)d^4}{\rho v^3} \right)^{1/4} \left(\frac{v}{D} \right)^{1/3}$	d = bubble diameter P/V = stirrer power per volume	Note that k does not depend on bubble size.
Pure gas bubbles in an unstirred liquid	$\frac{kd}{D} = 0.31 \left(\frac{d^3 g \Delta \rho / \rho}{v^2} \right)^{1/3} \left(\frac{v}{D} \right)^{1/3}$	d = bubble diameter $\Delta \rho$ = density difference between gas and liquid	For small swarms of bubbles rising in a liquid.
Large liquid drops rising in unstirred solution	$\frac{kd}{D} = 0.42 \left(\frac{d^3 \Delta \rho g}{\rho v^2} \right)^{1/3} \left(\frac{v}{D} \right)^{0.5}$	d = bubble diameter $\Delta \rho$ = density difference between bubbles and surrounding fluid	Drops 0.3-cm diameter or larger.
Small liquid drops rising in unstirred solution	$\frac{kd}{D} = 1.13 \left(\frac{dv^0}{D} \right)^{0.8}$	d = drop diameter v^0 = drop velocity	These small drops behave like rigid spheres.
Falling films	$\frac{kz}{D} = 0.69 \left(\frac{zv^0}{D} \right)^{0.5}$	z = position along film v^0 = average film velocity	Frequently embroidered and embellished.

Notes: ^aThe symbols used include the following: D is the diffusion coefficient; g is the acceleration due to gravity; k is the local mass transfer coefficient; v^0 is the superficial fluid velocity; and v is the kinematic viscosity.

^bDimensionless groups are as follows: dv/v and v/av are Reynolds numbers; v/D is the Schmidt number; $d^3 g(\Delta \rho / \rho) / v^2$ is the Grashoff number, kd/D is the Sherwood number; and $k/(v_g)^{1/3}$ is an unusual form of Stanton number.

Table 8.3-3 Selected mass transfer correlations for fluid-solid interfaces^a

Physical situation	Basic equation ^b	Key variables	Remarks
Membrane	$\frac{kl}{D} = 1$	l = membrane thickness	Often applied even where membrane is hypothetical.
Laminar flow along flat plate ^c	$\frac{kL}{D} = 0.646 \left(\frac{Lv^0}{\nu} \right)^{1/2} \left(\frac{\nu}{D} \right)^{1/3}$	L = plate length v^0 = bulk velocity	Solid theoretical foundation, which is unusual.
Turbulent flow through horizontal slit	$\frac{kd}{D} = 0.026 \left(\frac{dv^0}{\nu} \right)^{0.8} \left(\frac{\nu}{D} \right)^{1/3}$	v^0 = average velocity in slit $d = [2/\pi]$ (slit width)	Mass transfer here is identical with that in a pipe of equal wetted perimeter.
Turbulent flow through circular tube	$\frac{kd}{D} = 0.026 \left(\frac{dv^0}{\nu} \right)^{0.8} \left(\frac{\nu}{D} \right)^{1/3}$	v^0 = average velocity in tube d = pipe diameter	Same as slit, because only wall regime is involved.
Laminar flow through circular tube	$\frac{kd}{D} = 1.62 \left(\frac{d^2 v^0}{LD} \right)^{1/3}$	d = pipe diameter L = pipe length v^0 = average velocity in tube	Very strong theory and experiment
Flow outside and parallel to a capillary bed	$\frac{kd}{D} = 1.25 \left(\frac{d_r^2 v^0}{\nu l} \right)^{0.93} \left(\frac{\nu}{D} \right)^{1/3}$	d_r = 4 area/wetted perimeter v^0 = superficial velocity	Not reliable because of channeling in bed.
Flow outside and perpendicular to a capillary bed	$\frac{kd}{D} = 0.80 \left(\frac{dv^0}{\nu} \right)^{0.47} \left(\frac{\nu}{D} \right)^{1/3}$	d = capillary diameter v^0 = velocity approaching bed	Reliable if capillaries evenly spaced.
Forced convection around a solid sphere	$\frac{kd}{D} = 2.0 + 0.6 \left(\frac{dv^0}{\nu} \right)^{1/2} \left(\frac{\nu}{D} \right)^{1/3}$	d = sphere diameter v^0 = velocity of sphere	Very difficult to reach $(kd/D) = 2$ experimentally; no sudden laminar-turbulent transition.
Free convection around a solid sphere	$\frac{kd}{D} = 2.0 + 0.6 \left(\frac{d^3 \Delta \rho g}{\rho \nu^2} \right)^{1/4} \left(\frac{\nu}{D} \right)^{1/3}$	d = sphere diameter g = gravitational acceleration	For a 1-cm sphere in water, free convection is important when $\Delta \rho = 10^{-9} \text{ g/cm}^3$.
Packed beds	$\frac{k}{v^0} = 1.17 \left(\frac{dv^0}{\nu} \right)^{-0.42} \left(\frac{D}{\nu} \right)^{2/3}$	d = particle diameter v^0 = superficial velocity	The superficial velocity is that which would exist without packing.
Spinning disc	$\frac{kd}{D} = 0.62 \left(\frac{d^2 \omega}{\nu} \right)^{1/2} \left(\frac{\nu}{D} \right)^{1/3}$	d = disc diameter ω = disc rotation (radians/time)	Valid for Reynolds numbers between 100 and 20,000.

Note: ^aThe symbols used include the following: D is the diffusion coefficient of the material being transferred; k is the local mass transfer coefficient; ρ is the fluid density; ν is the kinematic viscosity. Other symbols are defined for the specific situation.

^bThe dimensionless groups are defined as follows: (dv^0/ν) and $(d^2\omega/\nu)$ are the Reynolds number; ν/D is the Schmidt number; $(d^3\Delta\rho g/\rho\nu^2)$ is the Grashöf number; kd/D is the Sherwood number; k/ν is the Stanton number.

^cThe mass transfer coefficient given here is the value averaged over the length L .

Quelle: Weiß, S., Militzer, U.E., Gramlich, K.: Thermische Verfahrenstechnik, 1993

Auch hier beruht $k=\beta$ auf physikalischen Kenngrößen und nicht der Schadstoffkonzentration.

Ableitung für HTU:

Da die Stoffübergangskoeffizienten unabhängig von Stoffkonzentrationen sind, kann der HTU-Ansatz wie folgt umgewandelt werden:

$$\text{HTU}^{\text{OG}} = \frac{w^G}{\beta_i^G a_V} + \frac{\lambda}{E} \frac{w^L}{\beta_i^L a_V} = C_1 + \frac{1}{E} C_2$$

HTU ist somit nur vom Enhancement-Faktor als Konzentrationsgröße abhängig.

Bei konstantem pH-Wert von 3,0 (und somit konstanter Menge an Chemikalien) führt eine Absenkung der Rohluftkonzentration an Ammoniak zu einer Vergrößerung von E . Somit folgt:

Mit sinkender Rohluftkonzentration und bei fixem pH-Wert steigt somit E an, wodurch HTU^L sinkt. **Die Trennstufenhöhe wird somit bei kleinen Konzentrationen insgesamt sinken.**

NTU-Betrachtung:

Im Falle des NTU-Teils gilt für einen chemischen Packungswäscher für die linke Seite der Gleichung

$$\int_{y_{i,2}}^{y_{i,1}} \frac{dy_i}{y_i - y_i^*} = NTU_i^{OG} = \frac{\beta_i^{OG} c^G A}{\dot{N}^G} = \frac{\beta_i^{OG} A}{\dot{V}^G} = \frac{\beta_i^{OG} c^G}{\dot{N}^G} H_R A_{QR} a_v$$

die vereinfachte Lösung des Integrals (1=Rohgas; 2 = Reingas):

$$NTU_i^{OG} = \ln \frac{y_{i,1}}{y_{i,2}}$$

bzw nach dem Wirkungsgrad aufgelöst:

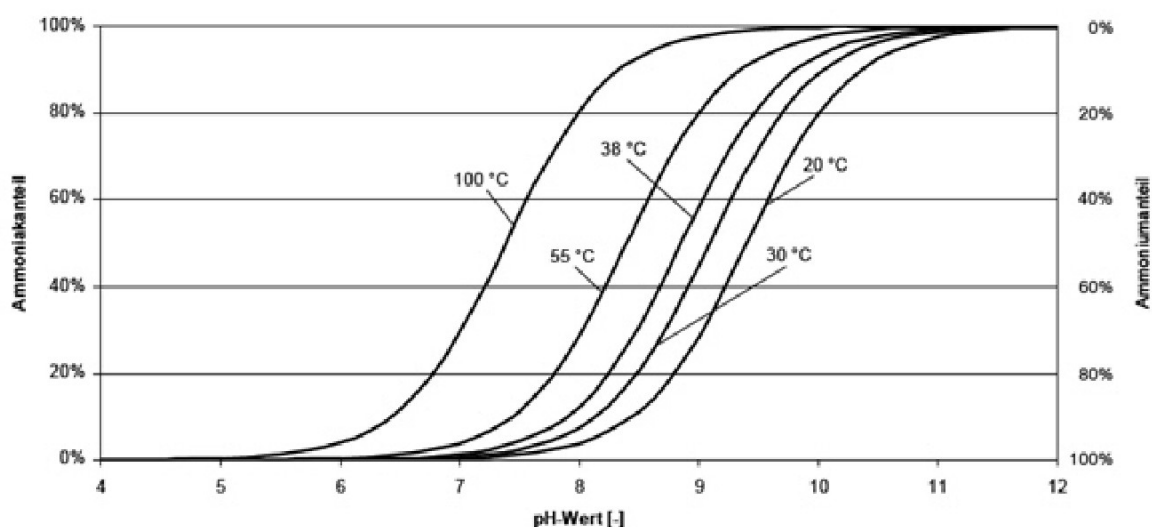
$$\eta_{Ab} = \frac{y_{i,1} - y_{i,2}}{y_{i,1}} = 1 - e^{-NTU_i^{OG}}$$

Die für Ammoniak auftretende Dissoziation in Ammonium wird bei diesem Ansatz nicht direkt berücksichtigt; vielmehr ist das Dissoziationsgleichgewicht für Ammoniak auf die resultierende Ausgaskonzentration anzuwenden. Dieses berechnet sich im Bedarfsfall:

$$c_{NH_3} = \frac{0,94412 \cdot c_{NH_3 + NH_4^+}}{1 + 10^{pK_A - pH}} \left[\frac{mg}{L} \right]$$

$$pK_A = 10,11 - 0,0385 \cdot T + 0,00015 \cdot T^2$$

T: Temperatur [°C]



Quelle: Kollbach 1996

Auswirkung auf die beiden Konzentrationsvarianten:

Für die Variante 1 (75 mg NH₃/m³ Rohgas auf ca. 0,75 mg NH₃/m³ Reingas) resultiert somit NTU = ln100 = 4,6.

Für die Variante 2 (0,75 mg NH₃/m³ Rohgas auf ca. 0,0039 mg NH₃/m³ Reingas) resultiert somit NTU=ln200 = 5,3.

Fazit: Für Variante 2 (niedrige Konzentration) sind ca. 0,7 Trennstufen mehr erforderlich.

Auswirkungen auf die Gesamthöhe der Austauschzone bei orientierender Annahme HTU_G= 0,10 m; HTU_L=0,13 m:

Ohne Pufferung bei pH 3 → $C(H^+) = 10^{-3}$ mol/L

Konzentration NH₃ (75 mg/L) → $c(NH_3) = 0,0044$ mol/L

Konzentration NH₃ (0,75 mg/L) → $c(NH_3) = 4,4 \cdot 10^{-5}$ mol/L

Der Enhancementfaktor Variante 1 beträgt somit $0,001/0,0044 = 0,22$; für Variante 2 $0,001/0,000044=22,72$

Durch Shift von Variante 1 auf Variante 2 ändert sich der HTU_L-Anteil von 0,13 m (gemäß Annahme) auf 0,013 m.

Durch die Pufferung der Flüssigkeit ist auch bei Variante 1 $E > 1$; wodurch der Flüssigkeitsanteil HTU_L zunehmend an Bedeutung verliert. **Fazit: Der Unterschied in den HTU-Werten ist marginal.**

Zu berücksichtigen ist ferner, dass die berechenbare Austauschhöhe von ca. 1,2 m durch folgende Sicherheitsfaktoren noch verbessert wird:

- 1) Austauschhöhe 3 m statt 1,2 m → Sicherheitsfaktor 2,5
- 2) Berücksichtigung eines Sicherheitsfaktors seitens der Software von 1,25
- 3) Das Dissoziationsgleichgewicht von NH₃ wird nicht berücksichtigt, liegt bei pH 3 aber bei 100 % Ammonium.

Fazit: Auf Basis des zugrundeliegenden NTU-HTU-Modellansatzes ist die angebotene Kolonne mit ausreichend Sicherheitspuffer ausgestattet, um die Anforderungen an die NH₃-Abscheidung gesichert umsetzen zu können.