

Untersuchung eines Ozonreaktors für die Kläranlage Rodenkirchen

BERICHT

erstellt für die

**Hydro Ingenieure - Planungsgesellschaft für Sied-
lungswasserwirtschaft mbH**

Bericht-Nummer: SSD-0380-00-L03-H0180-OR-015B

hydrograv GmbH
Eisenstückstraße 46
01069 Dresden
fon +49 (0) 351 / 811 355-0
fax +49 (0) 351 / 811 355 99
www.hydrograv.com
m.armbruster@hydrograv.com

November 2013

Versionskontrolle

Ersteller	Prüfung	Datum
Dr.-Ing. Martin Armbruster		14.11.2013
Dipl.-Hydrol. Robert Dittmann		14.11.2013
Dipl.-Math. Ines Rotzsche		14.11.2013

Verlauf

Version Nr.	Datum	Kommentare
01	14.11.2013	Original

Verteiler

Name	Firma/Ort	Kopie Nr.
Dipl.-Ing. Hauke Niehoff	Hydro Ingenieure - Planungsgesellschaft für Siedlungswasserwirtschaft	1

Inhalt

1	AUSGANGSSITUATION.....	4
2	GEOMETRIE UND RANDBEDINGUNGEN.....	5
2.1	Geometrie.....	5
2.2	Randbedingungen	8
3	SIMULATIONSERGEBNISSE	13
3.1	Hydraulik	13
3.2	Ergebnisse der Reaktionskinetik mit Startkonzentrationen ermittelt auf Basis der k_{obs} -Kurve.....	16
3.3	Ergebnisse der Reaktionskinetik mit Startkonzentrationen ermittelt auf Basis der Messpunkte	21
3.4	Vergleich der Methoden zur Bestimmung der Startkonzentrationen der Abwassermatrix	25
3.5	Vergleich zu den bisherigen Simulationen	26
4	ZUSAMMENFASSUNG.....	29

1 Ausgangssituation

Im vorliegenden Bericht wird eine weitere, dritte Geometrievariante (GV3) für den Ozonreaktor Rodenkirchen untersucht. Für die Simulationen werden im Vergleich zu den bisherigen Untersuchungen eine reduzierte Gasmenge und abweichende Reaktionsparameter für die Abwassermatrix verwendet. Basis für die neuen Reaktionskonstanten bzw. Zulaufkonzentrationen für die Abwassermatrix ist eine erneute Messung durch die RWTH Aachen im Juli 2013.

2 Geometrie und Randbedingungen

2.1 Geometrie

Die Geometrie für die Grundvariante GV3 ist in Abbildung 2.1 dargestellt. An der Unterseite des Zulaufrohres sind vier Reihen mit jeweils 36 Löchern mit einem Durchmesser von 2,5 cm angebracht.

Zugunsten der möglichen Verfeinerung anderer Details sowie einer zügigen Projektbearbeitung insbesondere im Hinblick auf die langen Rechenzeiten werden die Löcher des Zulaufrohres durch zwei Längsschlitze im Zulaufrohr im Modell vereinfacht abgebildet. Dadurch ist in diesem Bereich ein weniger hochaufgelöstes Rechengitter erforderlich. Die Fläche der Schlitze entspricht dabei der Fläche der Löcher. Dadurch bleibt der tatsächliche Impuls der Strömung (Einströmgeschwindigkeit) erhalten und sichert physikalisch ähnliche Bedingungen in Simulation und Realität. Die Schlitze sind an der Unterseite jeweils in einem 45°-Winkel zur Senkrechten angeordnet.

In jeder Kammer (getrennt durch Leitwände) befinden sich 50 cm über der Sohle acht Diffusorplatten, angeordnet in je zwei leicht versetzten Reihen.

Anmerkung: Die im Plan des Diffusordesigns („DE10255 diffusion design Rev.A staggered.xlsm.pdf“) dargestellten Grundmaße weichen von den Bauwerksplänen ab. Dies betrifft die Anzahl der Diffusorplatten (10 statt 8) und die Breite der zu begasenden Kammer (800 mm statt 850 mm).

Nach Abstimmung mit Hydro-Ingenieure orientiert sich die Umsetzung der Modellgeometrie an den Bauwerksplänen. Der Abstand zwischen den Diffusorenreihen und den Diffusorplatten beträgt wie im Plan des Diffusordesigns 315 mm bzw. 530 mm.

Die im Modell umgesetzten Maße sind Abbildung 2.2 dargestellt.

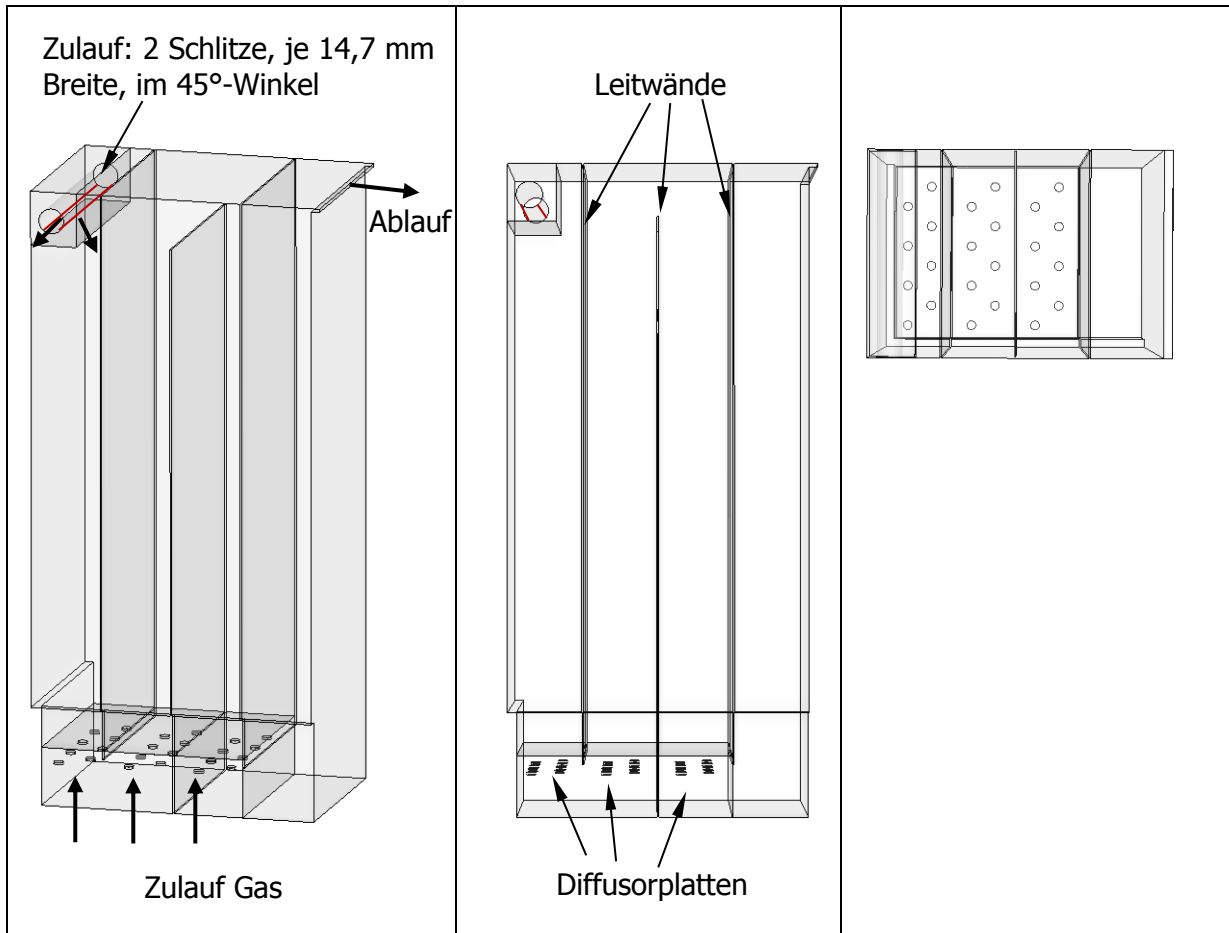


Abbildung 2.1: Geometrie Grundvariante GV3. Links: 3D-Ansicht mit Zu- und Abläufen. Mitte: Seitenansicht. Rechts: Draufsicht.

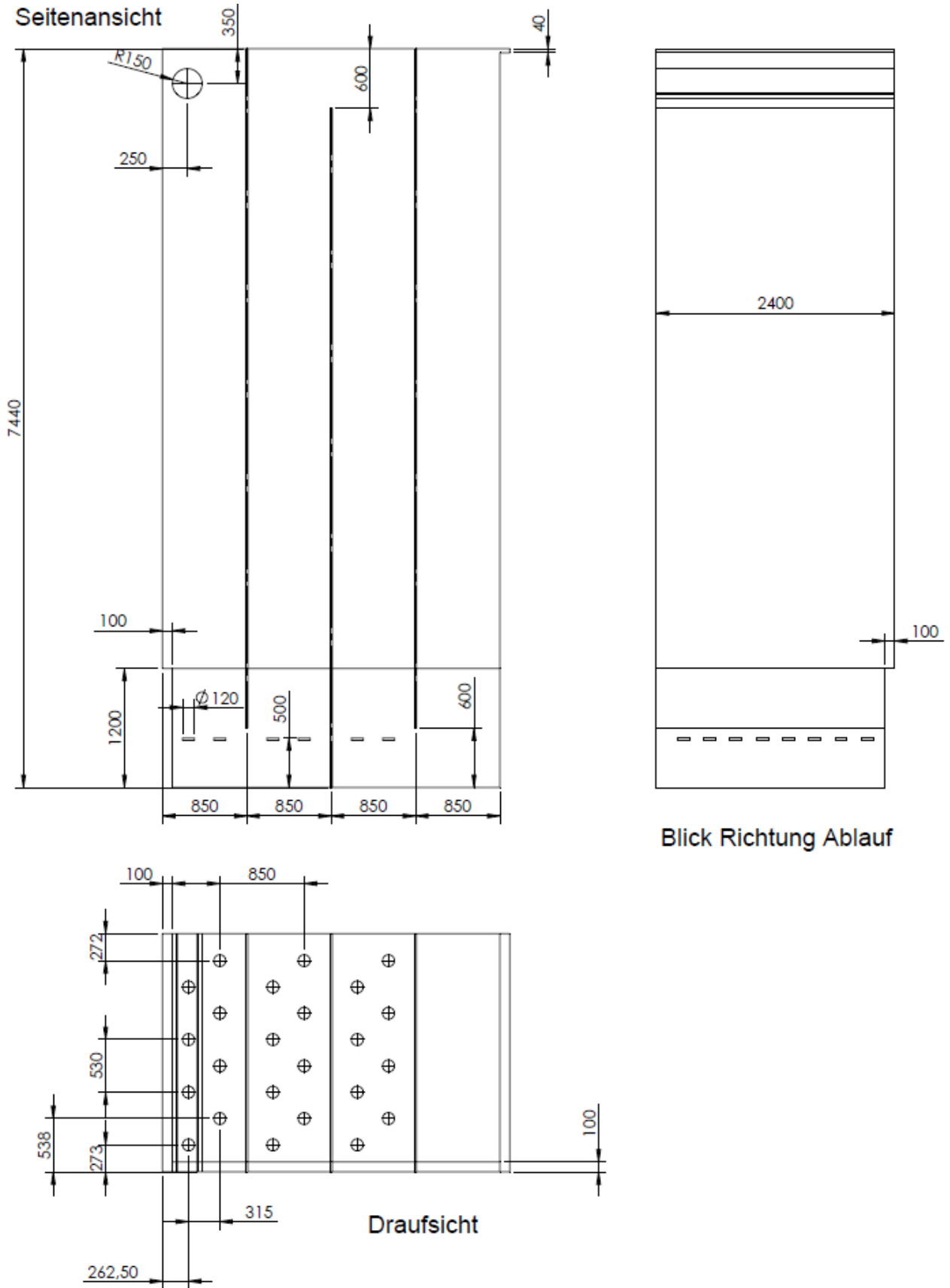


Abbildung 2.2: Bemaßte Skizze der Grundvariante GV3. Bemaßung in mm.

2.2 Randbedingungen

Die Grundvariante GV3 wird bei hydraulischer Niedrig- und Hochlast untersucht. Dazu wird jeweils eine Simulation der

- Hydraulik (Klarwasser + Gasphase) inklusive der Verweilzeituntersuchung mittels eines virtuellen Tracers und der
- Reaktionskinetik (Wasser + Gasphase + Ozon + Abwassermatrix + Spurenstoffe + Reaktionen)

durchgeführt. Die Randbedingungen sind Tabelle 2.1 zu entnehmen.

Tabelle 2.1: Randbedingungen für die Simulationen.*geschätzter Mittelwert aus Temperaturganglinie.

Parameter	Einheit	NL	HL
Zulauf Wasser	m ³ /h	50,4	209
	l/s	14	58
Zulauf Gas	Nm ³ /h	1,36	5,68
Ozoneintrag in Kompartiment		1 + 3	1 + 3
Ozonkonzentration	g/m ³ Wasser	4	4
Blasendurchmesser	mm	3	3
Temperatur Abwasser*	°C	17	17
Temperatur Gas	°C	22	22

Grundlagen der Ozonanalyse (Reaktionsparameter für die Abwassermatrix)

Nach Nöthe (2009) kann das Ozonzehrungsverhalten der organischen Hintergrundmatrix in einer zeitlichen Abfolge durch drei aufeinanderfolgende Reaktionsraten erster Ordnung angenähert werden. Die Wirkungsweise der Hintergrundmatrix kann demnach durch ein Gemisch von drei fiktiven Komponenten (Stoff A, B und C) mit unterschiedlichen Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten k_i und Startkonzentrationen c_i angenähert werden. Folgende drei Geschwindigkeitsbereiche werden vorgeschlagen:

- schnelle Reaktion (Stoff A): $0 \text{ s} \leq t < 0,2 \text{ s} \rightarrow k_{\text{obs},1}$
- mittlere Reaktion (Stoff B): $0,2 \text{ s} \leq t < 20 \text{ s} \rightarrow k_{\text{obs},2}$
- langsame Reaktion (Stoff C): $20 \text{ s} \leq t \leq 240 \text{ s} \rightarrow k_{\text{obs},3}$

Die Ermittlung der Reaktionskonstanten erfolgt, basierend auf einer experimentellen Bestimmung des Ozonzehrungsverhaltens, grafisch nach der Integralmethode. Dabei wird $\ln(c/c_0)$ gegen die Reaktionszeit aufgetragen (Abbildung 2.3).

Nöthe (2009) stellt fest, dass die zeitlichen aufeinander folgenden Reaktionskonstanten über einem Faktor 6 zusammenhängen.

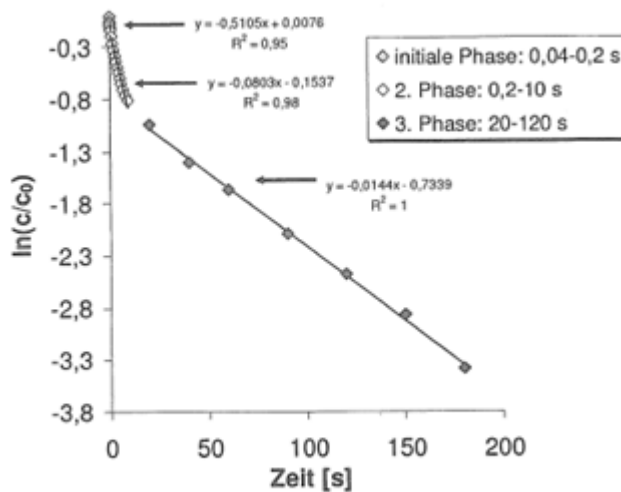


Abbildung 2.3: Beispielhafte Einteilung der Gesamtozonzerlegung in drei Reaktionsphasen und Anpassung von Regressionsgeraden zur Bestimmung der Reaktionskonstanten für jede Phase. Nöthe (2009).

Aus methodischen Gründen (mit vorhandener Mess-Apparatur nicht möglich) beginnt in dieser Untersuchung die erste Messaufnahme erst 15 s nach Beginn des Experiments (vgl. Abbildung 2.4). Damit fehlen Informationen für den ersten Geschwindigkeitsbereich. Die zweite Messaufnahme findet 30 s nach Beginn des Experiments statt. Damit liegen nur wenige Informationen über den zweiten Geschwindigkeitsbereich vor.

Aufgrund fehlender Messdaten in den ersten Sekunden der Ozonzehrung wird daher zunächst die Konstante $k_{obs,3}$ ($20 \text{ s} \leq t \leq 240 \text{ s}$) bestimmt und die Konstanten $k_{obs,1}$ bzw. $k_{obs,2}$ näherungsweise über den zuvor genannten Faktor 6 berechnet ($k_{obs,2} = 6 \cdot k_{obs,3}$, $k_{obs,1} = 6 \cdot k_{obs,2}$).

Anmerkungen: Der hier verwendete Faktor 6 wird von Nöthe (2009) nur bei zwei Messkampagnen festgestellt, ist jedoch aus Sicht von hydrograv nicht ausreichend verifiziert und generalisierbar. Bei anderen Betriebsbedingungen (z. B. Temperatur, pH-Wert) können sich andere Faktoren ergeben. Beispielsweise betragen im Projekt mit Bad Sassendorf (Grünebaum 2011) die Faktoren zwischen Phase 1 und 2 ca. 49 und zwischen Phase 2 und 3 ca. 1,6. Um diesen Behelf durch den Faktor zu umgehen, wird für die nachfolgende Untersuchungsphase empfohlen, zeitlich höher aufgelöste Messungen durchzuführen.

Die ermittelten Geschwindigkeitskonstanten k_i stellen sozusagen die Korrelationsfaktoren, d.h., die experimentell bestimmten und hierbei fest vorgegebenen Einflussgrößen der Abbaureaktion der jeweiligen fiktiven Komponente dar. Die den k_i -Werten zuzuordnenden Werte der Startkonzentrationen $c_{i,0}$ werden im nächsten Schritt mit Hilfe eines Gleichungslösers (z. B. Excel-Solver) numerisch für jeden Stoff i die zugehörige Startkonzentration $c_{i,03}$ ermittelt, so dass die als Abwassermatrix bezeichnete Mischung der Inhaltsstoffe die gemessene Ozonzehrungskurve nachbildet.

Bei Anpassung der Kurven der ersten Messung vom Februar 2013 konnte eine bessere Anpassung der Messwerte dann erzielt werden, wenn die k_{obs} -Kurve als Zielgröße der Optimierung verwendet wurde (siehe Abbildung 2.4, obere Bilder). Werden die Messwerte selbst verwendet, ergibt sich eine schlechtere Anpassung. Ursache hierfür sind die weniger vorhandenen Messpunkte. Somit diene die k_{obs} -Kurve hier als Hilfsfunktion, um weitere „fiktive“ Messpunkte zum besseren Anpassen der Startkonzentrationen $c_{i,0}$ zu erhalten.

Die gleiche Vorgehensweise funktioniert jedoch nicht bei den Messwerten vom Juli 2013. Hier ergibt die Anpassung an die k_{obs} -Kurve deutliche Abweichungen zu den Messwerten. Erst wenn die Zielgrößen die Messwerte selbst sind, wird die Messkurve relativ gut wiedergegeben. Dieses Vorgehen ist aus Sicht von hydrograv auch stimmig mit Nöthe (2009).

Dieser Vergleich verdeutlicht erneut die Notwendigkeit hoch aufgelöster Messwerte. Des Weiteren empfiehlt hydrograv eine mehrfache Messung der Ozonzehrungskurve einer Probe (z. B. drei Messungen derselben Probe), um zufällige Fehler, z. B. durch äußere Einflüsse so gering wie möglich zu halten.

Aufgrund der hier geschilderten Unsicherheiten in der Anpassung der Startwerte c_i werden in diesem Teil der Untersuchung beide Herangehensweisen zur Bestimmung der Startkonzentrationen $c_{i,0}$ verwendet, d. h. es werden für Niedriglast und Hochlast jeweils zwei Simulationen mit unterschiedlicher Startkonzentrationen der fiktiven Stoffe der Abwassermatrix durchgeführt.

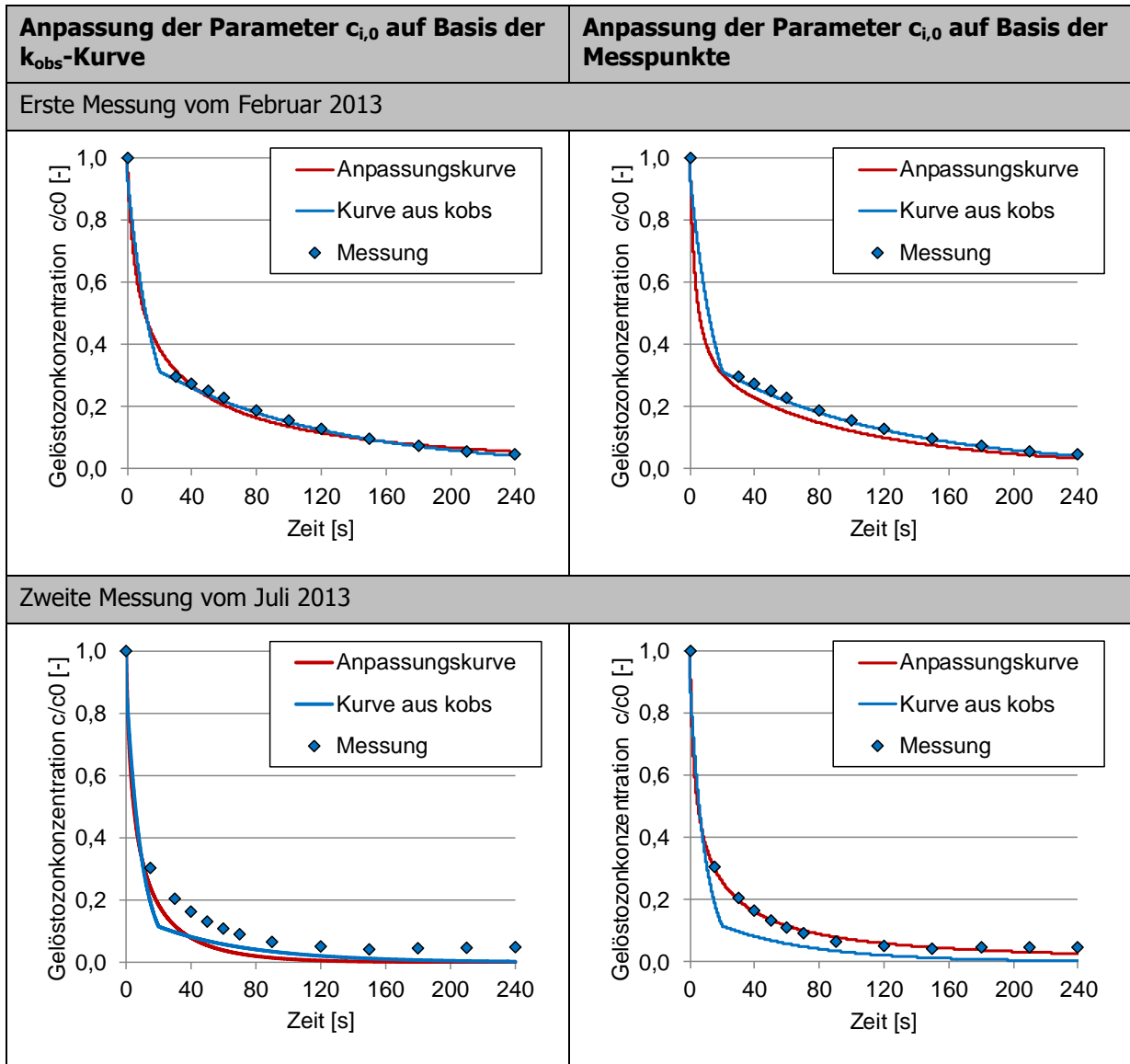


Abbildung 2.4: Vergleich der gemessenen und simulierten Ozonzehrungskurve für eine applizierte Ozondosis von $c_{O_3} = 5 \text{ mg/l}$. Ermittlung der Konstanten k_{obs} aus der Messkurve durch die RWTH Aachen, Anpassung der Zehrungskurve durch die Abwassermatrix an die Kurve aus k_{obs} (jeweils links) bzw. an die Messpunkte (jeweils rechts).

Ergebnisse der Ozonanalyse

Tabelle 2.2 gibt eine Übersicht über die Daten zur Beschreibung des Ozonzehrungsverhaltens der organischen Hintergrundmatrix. Im Gegensatz zur ersten Probenahme im Februar 2013 wird bei der Messung vom Juli 2013 eine stärkere Ozonzehrung durch die Abwassermatrix festgestellt.

Die Messwerte zeigen, dass nach ca. 140 s die Ozonkonzentration mit geringen Werten nahezu konstant bleibt, d. h., ab diesem Zeitpunkt findet kein Ozonabbau durch die Abwassermatrix mehr statt.

Dieses Verhalten wird auch durch die numerisch ermittelte Startkonzentration von Stoff C, der fiktiv für die langsam reagierenden Stoffe steht, wiedergegeben. Denn ergibt sich eine Startkonzentration für Stoff C von 0 mol/l. Ozon wird demnach nahezu ausschließlich durch die Stoffe mit hoher (Stoff A) bzw. mittlerer (Stoff B) Reaktionsgeschwindigkeit gezehrt. Somit ist es für diesen Fall ausreichend, den Abbau von Ozon durch die Abwassermatrix mit einem Gemisch aus nur zwei fiktiven Stoffen zu beschreiben.

Die ermittelten Startkonzentrationen, basierend auf der k_{obs} -Kurve, sind höher als die Konzentrationen, basierend auf den Messpunkten, und sind daher als konservativer bzgl. des Stoffabbaus jedoch weniger konservativ bzgl. der Ablaufkonzentration von Ozon zu betrachten.

Tabelle 2.2: Experimentell bestimmte Reaktionskonstanten erster Ordnung k_{obs} , Reaktionskonstanten zweiter Ordnung k und Konzentrationen c_i der fiktiven Stoffe i der organischen Hintergrundmatrix für die KA Rodenkirchen für eine applizierte Ozondosis von 5 mg/l. Messung vom Juli 2013.

Stoff i	k_{obs} [s^{-1}]	k_{i,O_3} [$\text{M}^{-1}\text{s}^{-1}$]	c_i : Basis k_{obs} -Kurve [mol/l]	c_i : Basis Messpunkte [mol/l]
A	0,6156	5533	$2,72 \cdot 10^{-5}$	$4,01 \cdot 10^{-5}$
B	0,1026	922	$1,14 \cdot 10^{-4}$	$7,28 \cdot 10^{-5}$
C	0,0171	154	0	0

3 Simulationsergebnisse

3.1 Hydraulik

Der Reaktor ist aufgrund der drei engstehenden Leitwände stark gekammert. Im ersten und dritten Kompartiment strömt das Abwasser der aufsteigenden Luft entgegen, was zu Turbulenzen und zu einer Vermischung von ozonarmen Abwasser und ozonangereichertem Wasser führt (Abbildung 3.3). Bei Niedriglast steigt das Gas sehr geradlinig und säulenförmig auf (Abbildung 3.4). Dabei ergibt sich eine geringe Vermischung. Bei Hochlast verteilt sich das Gas nahezu über die gesamte Breite des ersten bzw. dritten Kompartiments (Abbildung 3.4).

Innerhalb der einzelnen Kammern kommt es zu Ausbildung von lang gestreckten Wirbeln, die sich teilweise über die gesamte Reaktorhöhe erstrecken. Dadurch kann es zum Teil zu einem verminderten Kontakt zwischen Gasblasen und Abwasser kommen, da halbseitig ozonarmes, spurestoffreiches Wasser nach unten strömt.

Tabelle 3.1 und Abbildung 3.1 zeigen die Ergebnisse der Verweilzeituntersuchung. Der Ozonreaktor weist den Charakter einer Pfropfenströmung mit Kaskadenzahlen von $n = 3,5$ bei Niedriglast bzw. $n = 5,4$ bei Hochlast auf. Kurzschlussströmungen werden nicht festgestellt. Die bei Niedriglast geringere Kaskadenzahl und geringere Parameter T_{10} sind auf das geradlinige Aufsteigen der Gasblasen zurückzuführen. Dann strömt im Gegenzug der Volumenstrom auf einem reduzierten Querschnitt mit erhöhter Geschwindigkeit nach unten.

Tabelle 3.1: Verweilzeitbetrachtung. Bewertung verschiedener Kennzahlen. Grün = gut. Gelb = akzeptabel. Rot = unzureichend.

Lastfall	t_{\min} [s]	T_{10} [-]	T_{90} [-]	MDI [-]	n [-]
GV3 NL	1100	0,57	1,64	2,88	3,5
GV3 HL	350	0,70	1,62	2,32	5,4
Ziel einer Pfropfenströmung		> 0,5	< 1,5	< 2,00	> 3,0

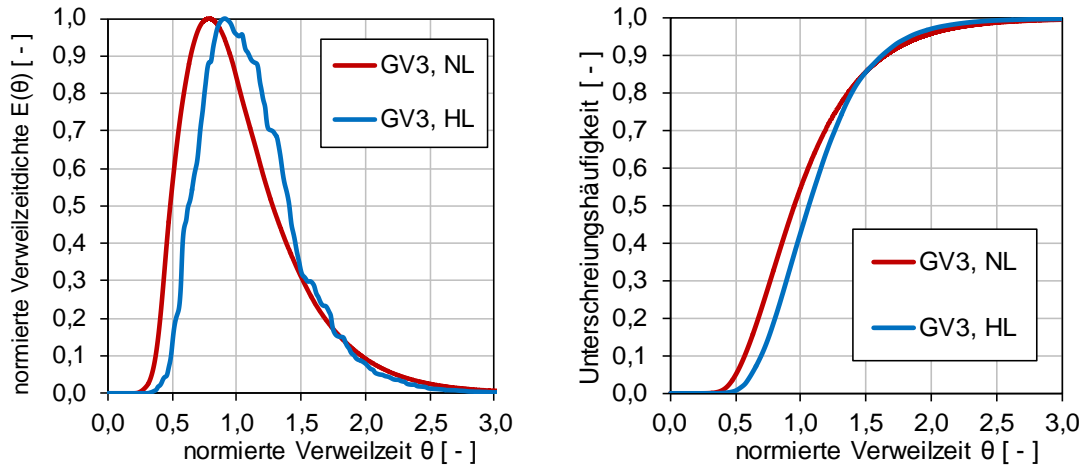


Abbildung 3.1: Verweilzeitverhalten. Links: Dichtefunktion. Rechts: Unterschreitungshäufigkeit.

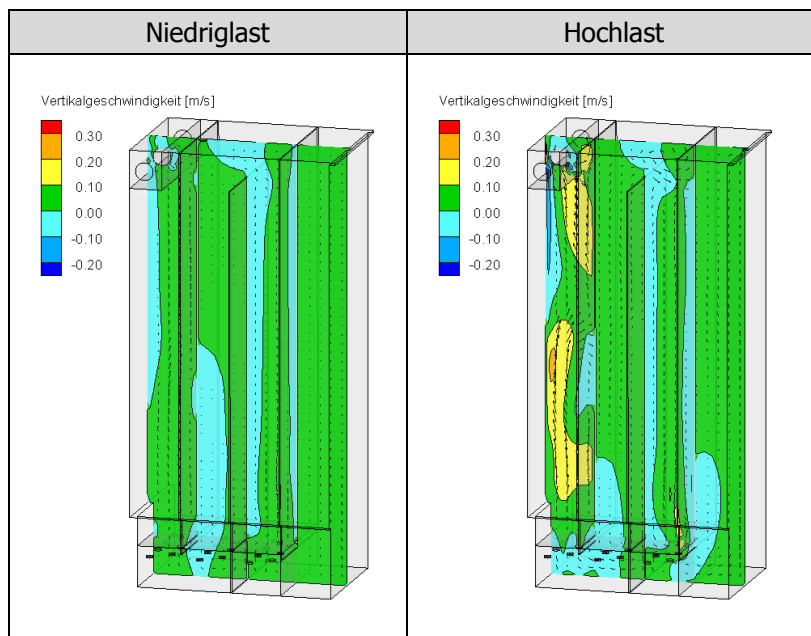


Abbildung 3.2: Grundvariante GV3. Geschwindigkeitsverteilung und Geschwindigkeitsvektoren, ausgewertet auf einer vertikalen Ebene in Reaktormitte.

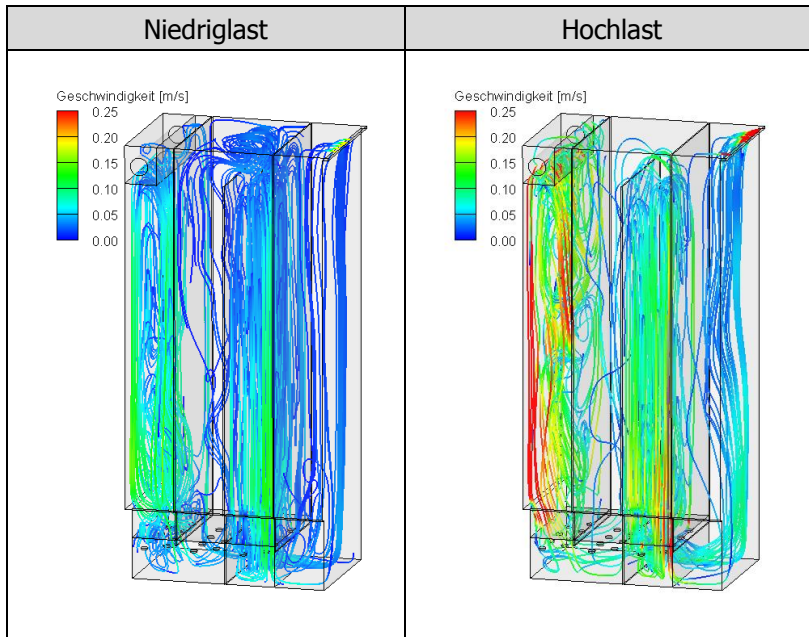


Abbildung 3.3: Grundvariante GV3. Strömungsbahnen mit aufgeprägter Geschwindigkeit.

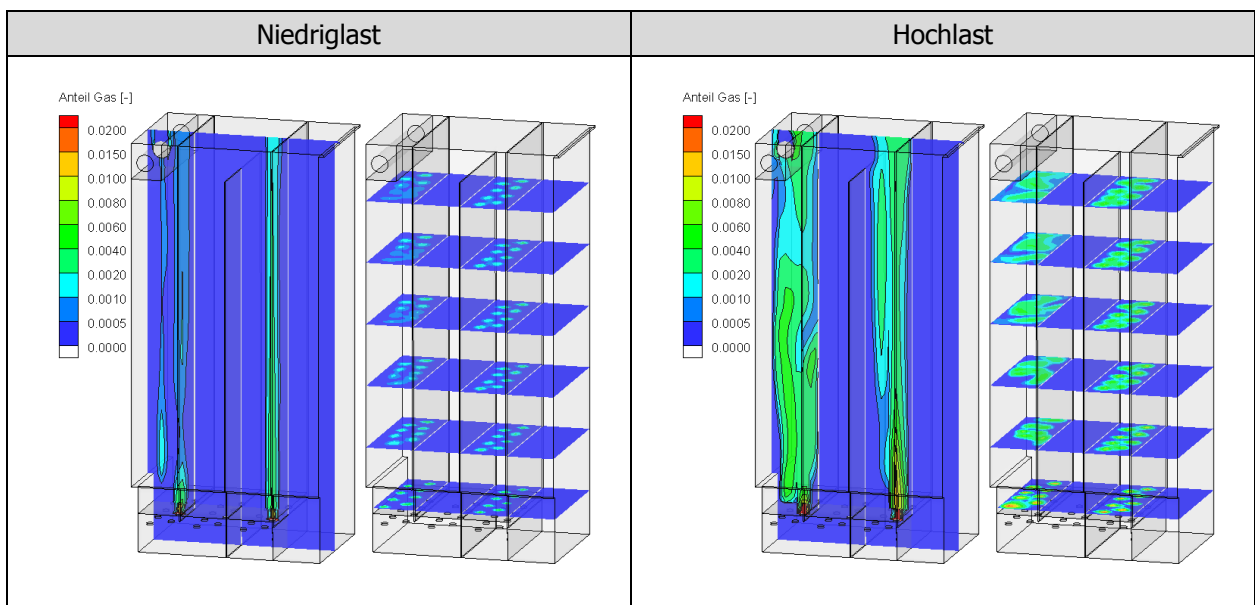


Abbildung 3.4: Grundvariante GV3. Verteilung der Gasphase, ausgewertet auf einer vertikalen Ebene in Reaktormitte bzw. mehreren horizontalen Ebenen

3.2 Ergebnisse der Reaktionskinetik mit Startkonzentrationen ermittelt auf Basis der k_{obs} -Kurve

Im Ablauf des Ozonreaktors werden nur sehr geringe Ozonkonzentrationen ermittelt, welche deutlich unterhalb des festgelegten Grenzwertes von $0,1 \text{ g/m}^3$ (siehe Abbildung 3.5, links) liegen.

Ozon verteilt sich hauptsächlich in den begasten Kompartimenten 1 und 3 (Abbildung 3.7, oben). Bei Hochlast wird durch den Hauptvolumenstrom teilweise ozonangereichertes Wasser in die nächsten unbegasten Kompartimente 2 bzw. 4 transportiert.

Die Abbaurate von Metoprolol beträgt 71 % bei Niedriglast bzw. 68 % bei Hochlast (Abbildung 3.5, rechts). Diclofenac wird vollständig abgebaut (Verteilung siehe Abbildung 3.8, unten).

Der Metoprololabbau findet hauptsächlich in den begasten Kompartimenten 1 und 3 statt, siehe Abbildung 3.6 rechts. In Kompartiment 1 beträgt die Abbaurate ca. 35 %, in Kompartiment 3 wird Metoprolol um weitere 35 % bis 40 % (bezogen auf die Zulaufkonzentration) reduziert. Auffallend ist die leicht erhöhte Metoprololkonzentration unterhalb der Diffusoren, die nur 10 cm unterhalb der Leitwandunterkante angebracht sind (siehe Abbildung 3.6 oben/Mitte rechts). Das heißt unterhalb der Diffusoren in Kompartiment 1 und 3 befinden sich Totzonen in denen sich Metoprolol ansammelt. Die unteren Bilder in Abbildung 3.6 zeigen den Verlauf der mittleren Ozonkonzentration über die Reaktorhöhe bzw. über die gesamte Fließstrecke. Ozonspitzen treten dabei jeweils in Kompartiment 1 bzw. 3 unten auf, wobei diese für Hochlast größer sind. Der größere Peak ist in Kompartiment 3 zu erkennen. Dort ist die Ozonzehrung etwas verlangsamt, da die ozonzehrenden Substanzen bereits stark reduziert sind.

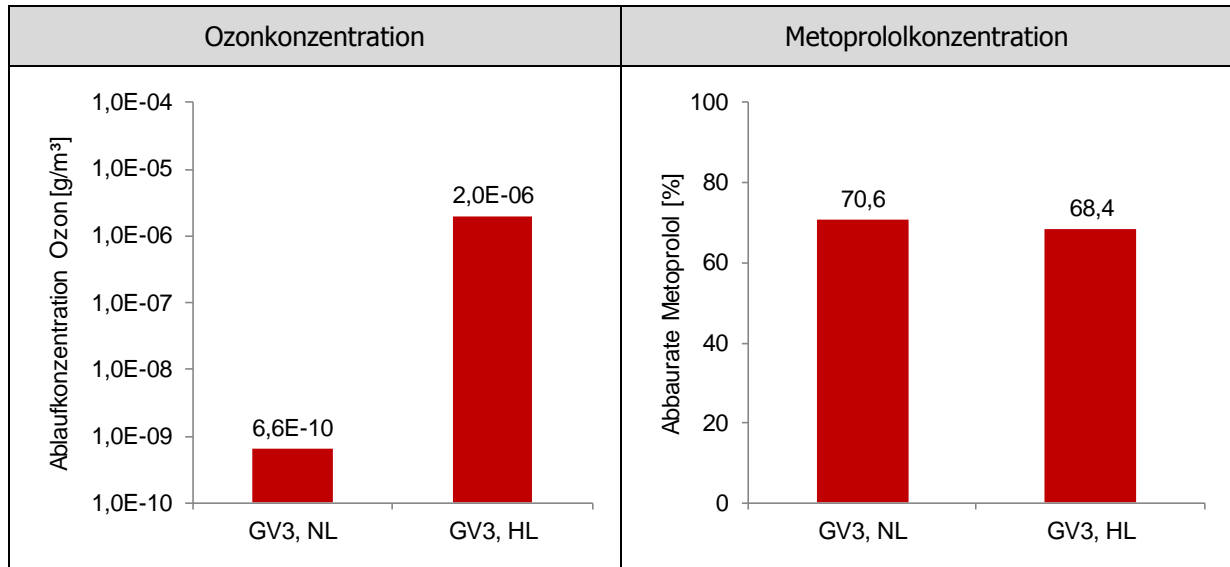


Abbildung 3.5: Grundvariante GV3. Startkonzentrationen der Abwasserwassermatrix auf Basis der k_{obs} -Kurve. Zeitlich gemittelte Ablaufkonzentration von Ozon bzw. Abbaurrate von Metoprolol.

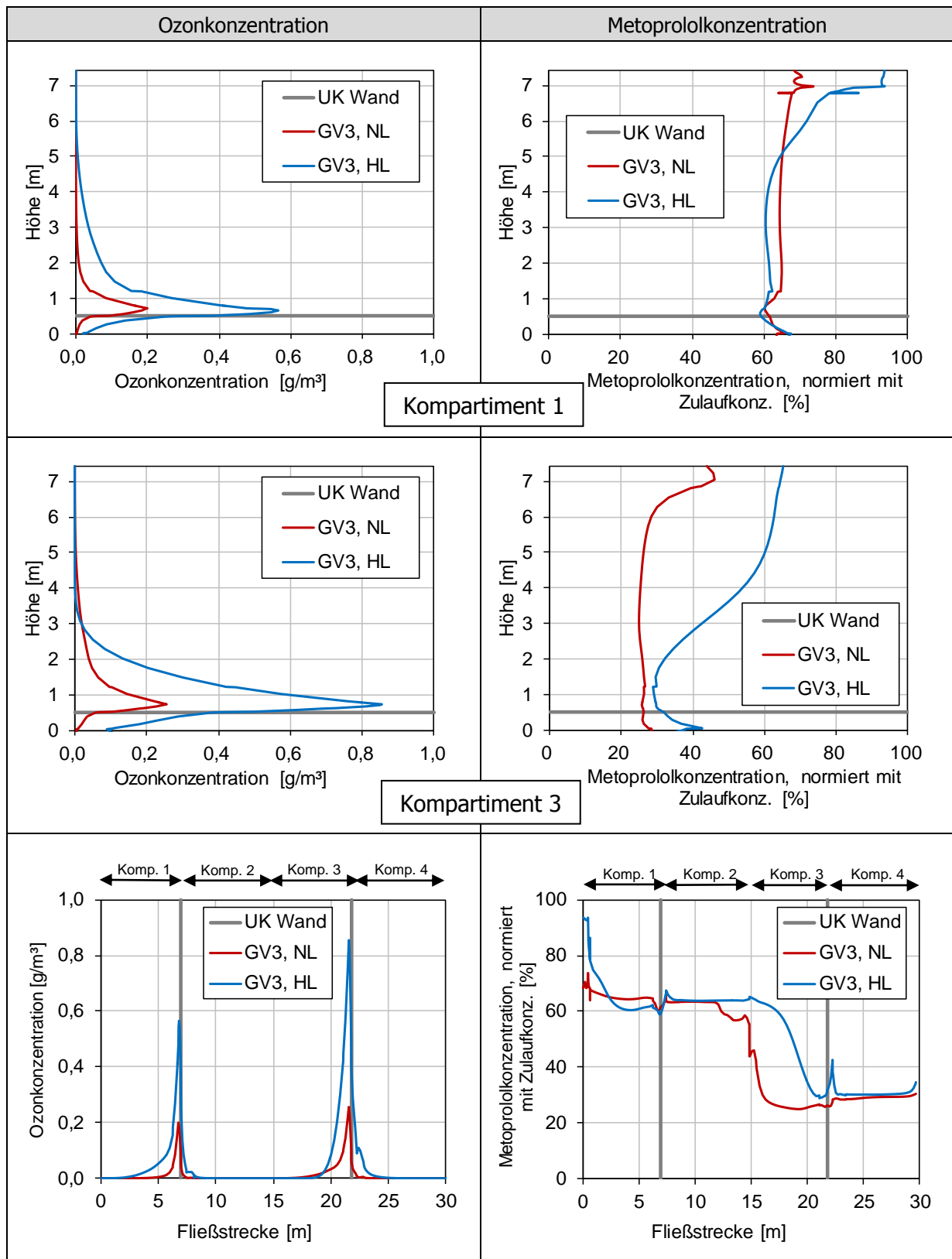


Abbildung 3.6: Grundvariante GV3. Startkonzentrationen der Abwasserwassermatrix auf Basis der k_{obs} -Kurve. Auswertung Ozon- bzw. Metoprololkonzentration im Reaktor. Oben/Mitte: Jeweils horizontal gemittelte Konzentration über der Behälterhöhe für Kompartiment 1 bzw. 3. Unten: Jeweils horizontal gemittelte Konzentration entlang der Fließstrecke.

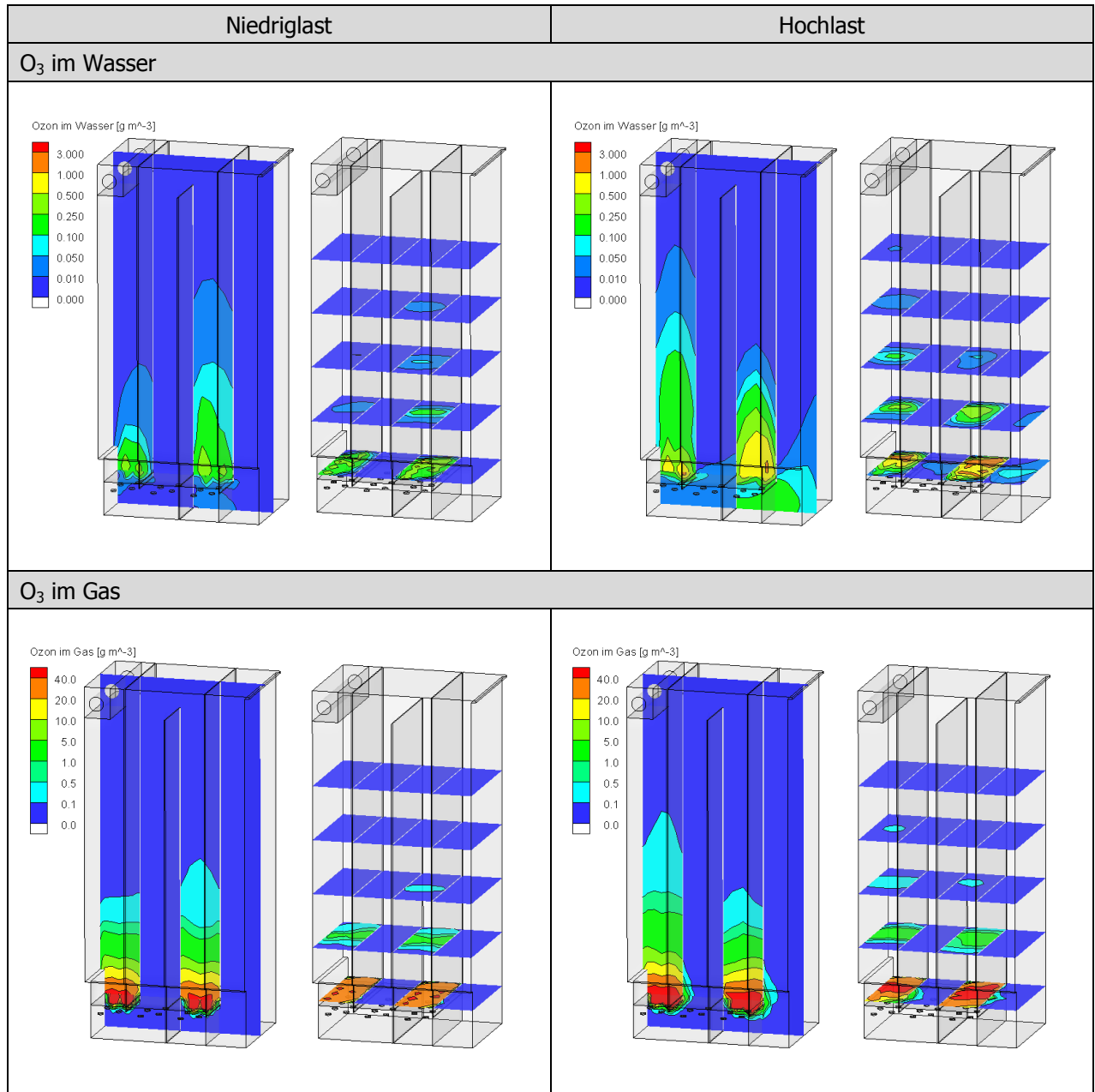


Abbildung 3.7: Grundvariante GV3. Startkonzentrationen der Abwasserwassermatrix auf Basis der k_{obs} -Kurve. Darstellung der Ozonverteilung im Wasser (jeweils oben) und in der Gasphase (jeweils unten), ausgewertet auf einer vertikalen Ebene in Reaktormitte bzw. mehreren horizontalen Ebenen.

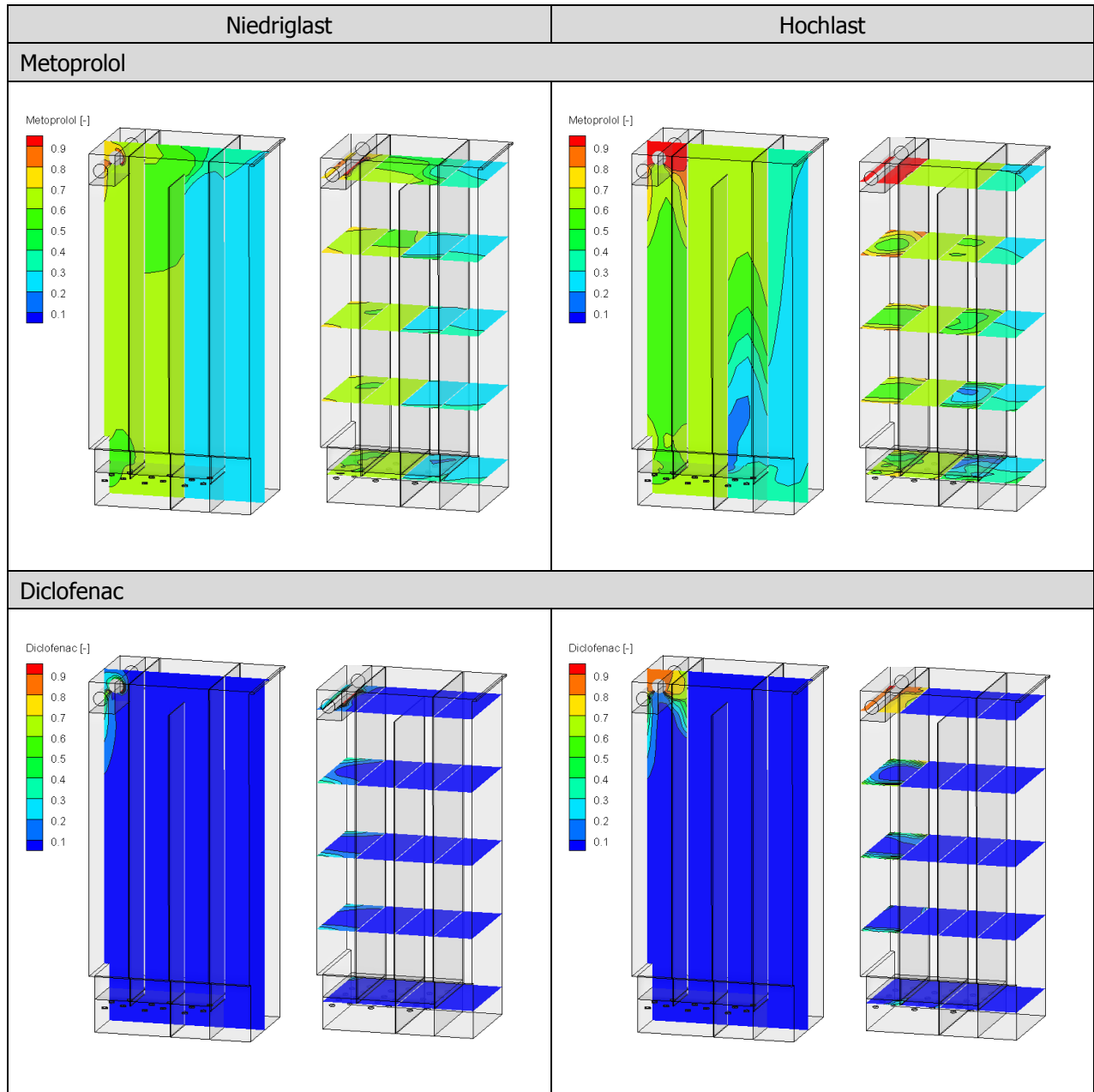


Abbildung 3.8: Grundvariante GV3. Startkonzentrationen der Abwasserwassermatrix auf Basis der k_{obs} -Kurve. Darstellung der Konzentrationsverteilung (normiert mit Zulaufkonzentration) Metoprolol (jeweils oben) und Diclofenac (jeweils unten), ausgewertet auf einer vertikalen Ebene in Reaktormitte bzw. mehreren horizontalen Ebenen.

3.3 Ergebnisse der Reaktionskinetik mit Startkonzentrationen ermittelt auf Basis der Messpunkte

Die hier verwendete Ozonzehrungskurve bildet im Vergleich zu den Startkonzentrationen der Abwassermatrix, die auf Basis der k_{obs} -Kurve ermittelt werden, eine geringere Zehrung des Ozons durch die Abwassermatrix ab. Die Ozonkonzentration im Reaktor ist dadurch höher und es verteilt sich auch stärker aus den begasten Kompartimenten 1 und 3 in die unbegasteten Kompartimente 2 und 4 (Abbildung 3.11). Dies führt zu einem schnelleren und stärkeren Abbau der Spurenstoffe (Verteilung Abbildung 3.12).

Die Abbaurrate von Metoprolol beträgt bei Niedriglast 79 % bzw. bei Hochlast 81 % (siehe Abbildung 3.9). Metoprolol wird hauptsächlich in den begasten Kompartimenten 1 und 3 (Komp. 1: ca. 35 - 40 %, Komp. 3: ca. 35 %, bezogen auf die Zulaufkonzentration) bzw. bei Niedriglast auch im oberen Bereich von Kompartiment 2 (ca. 5-10 %, bezogen auf die Zulaufkonzentration) abgebaut (Abbildung 3.10 rechts). Auch hier werden unterhalb der Diffusoren Bereiche mit höheren Metoprololkonzentrationen festgestellt (Abbildung 3.10 oben/Mitte rechts).

Hohe Ozonkonzentrationen sind erwartungsgemäß im unteren Bereich der begasten Kompartimente vorhanden, die Konzentrationen sind bei Hochlast deutlich höher als bei Niedriglast (Abbildung 3.10 links).

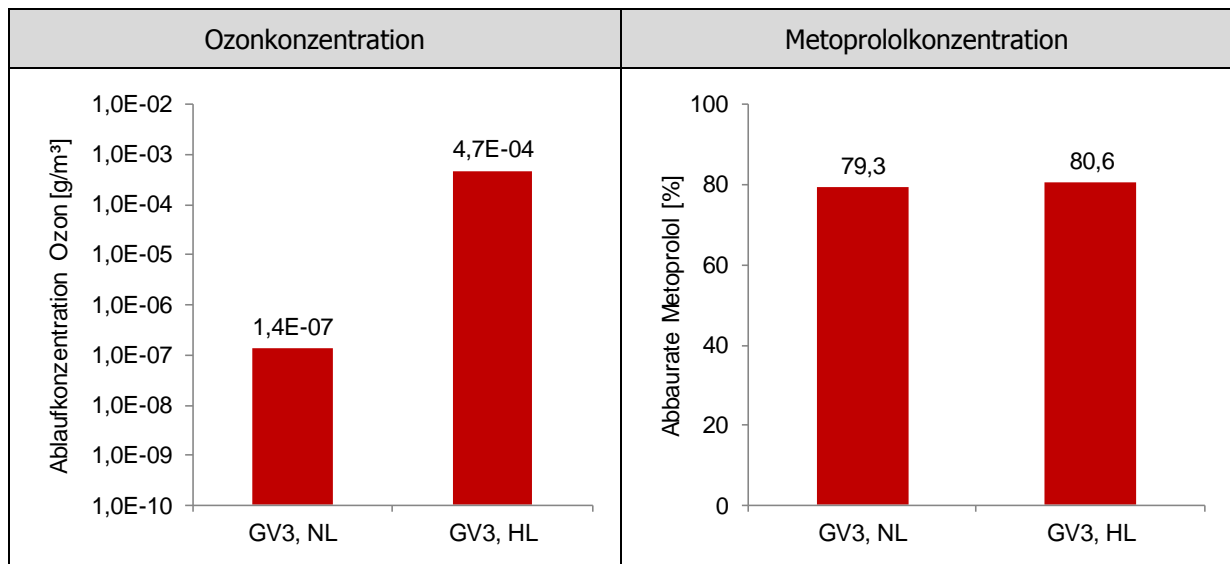


Abbildung 3.9: Grundvariante GV3. Startkonzentrationen der Abwasserwassermatrix auf Basis der Messpunkte. Zeitlich gemittelte Ablaufkonzentration von Ozon bzw. Abbaurrate von Metoprolol.

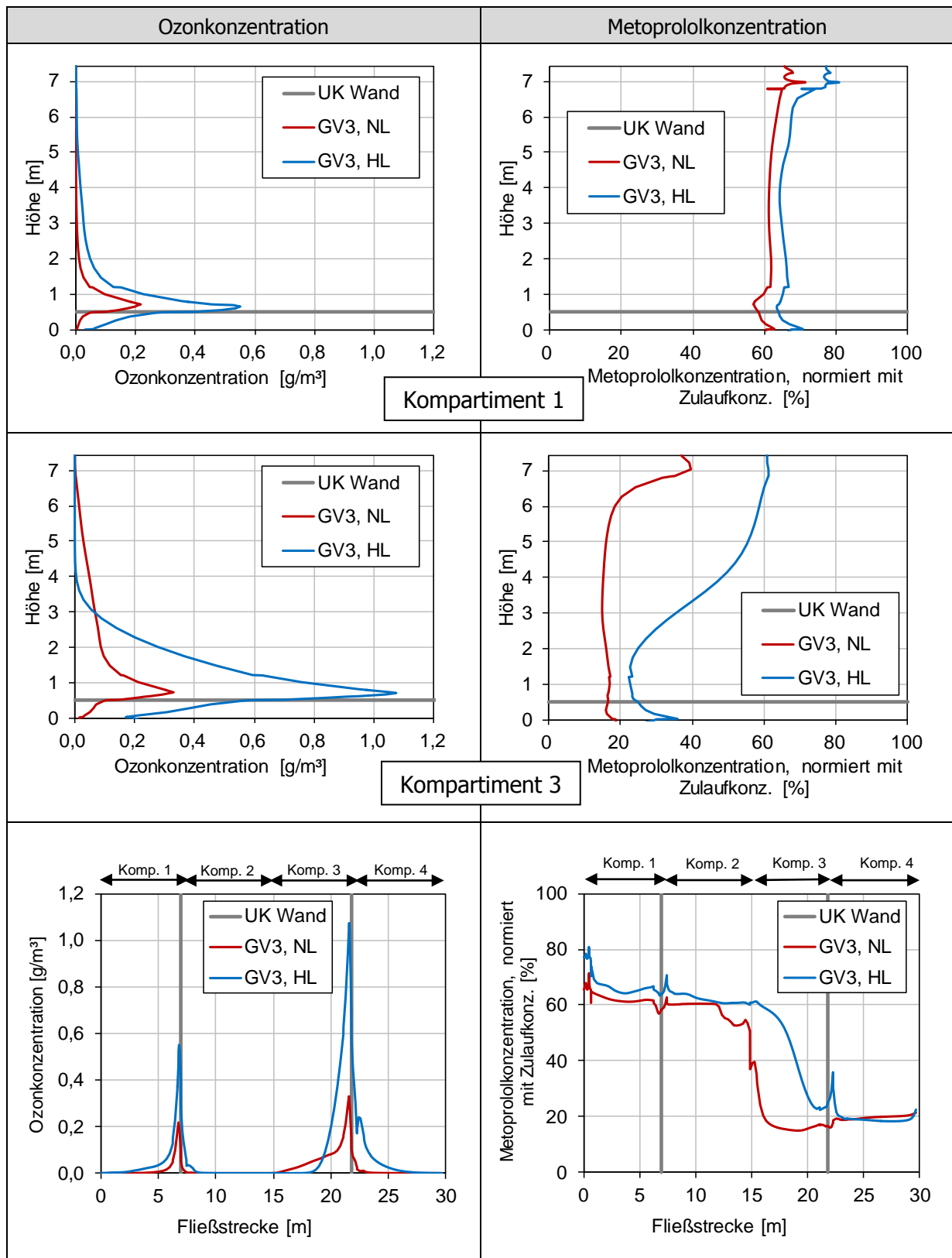


Abbildung 3.10: Grundvariante GV3. Startkonzentrationen der Abwasserwassermatrix auf Basis der Messpunkte. Auswertung Ozon- bzw. Metoprololkonzentration im Reaktor. Oben/Mitte: Jeweils horizontal gemittelte Konzentration über der Behälterhöhe für Kompartment 1 bzw. 3. Unten: Jeweils horizontal gemittelte Konzentration entlang der Fließstrecke.

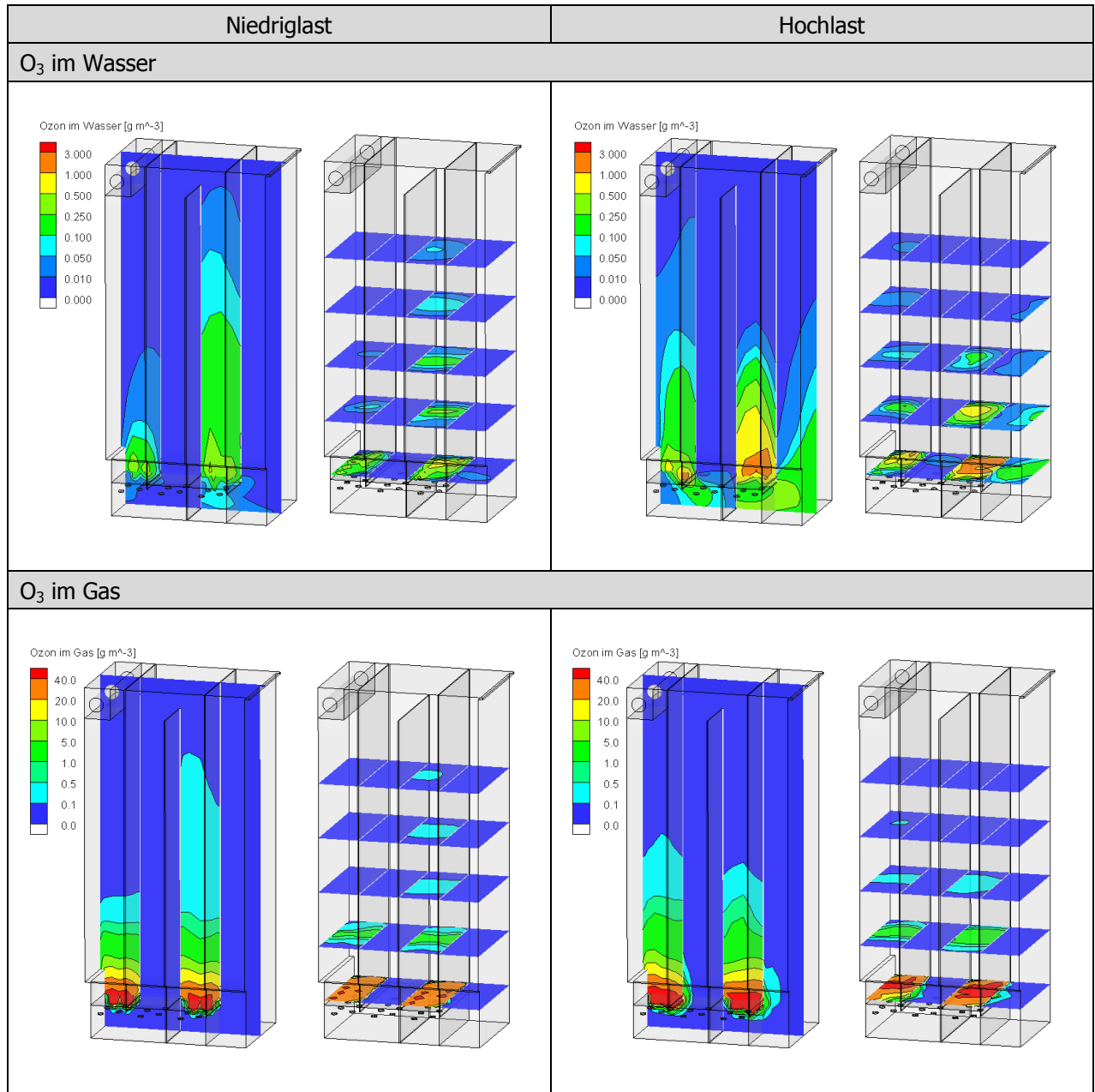


Abbildung 3.11: Grundvariante GV3. Startkonzentrationen der Abwasserwassermatrix auf Basis der Messpunkte. Ozonverteilung im Wasser (jeweils oben) und in der Gasphase (jeweils unten), ausgewertet auf einer vertikalen Ebene in Reaktormitte bzw. mehreren horizontalen Ebenen.

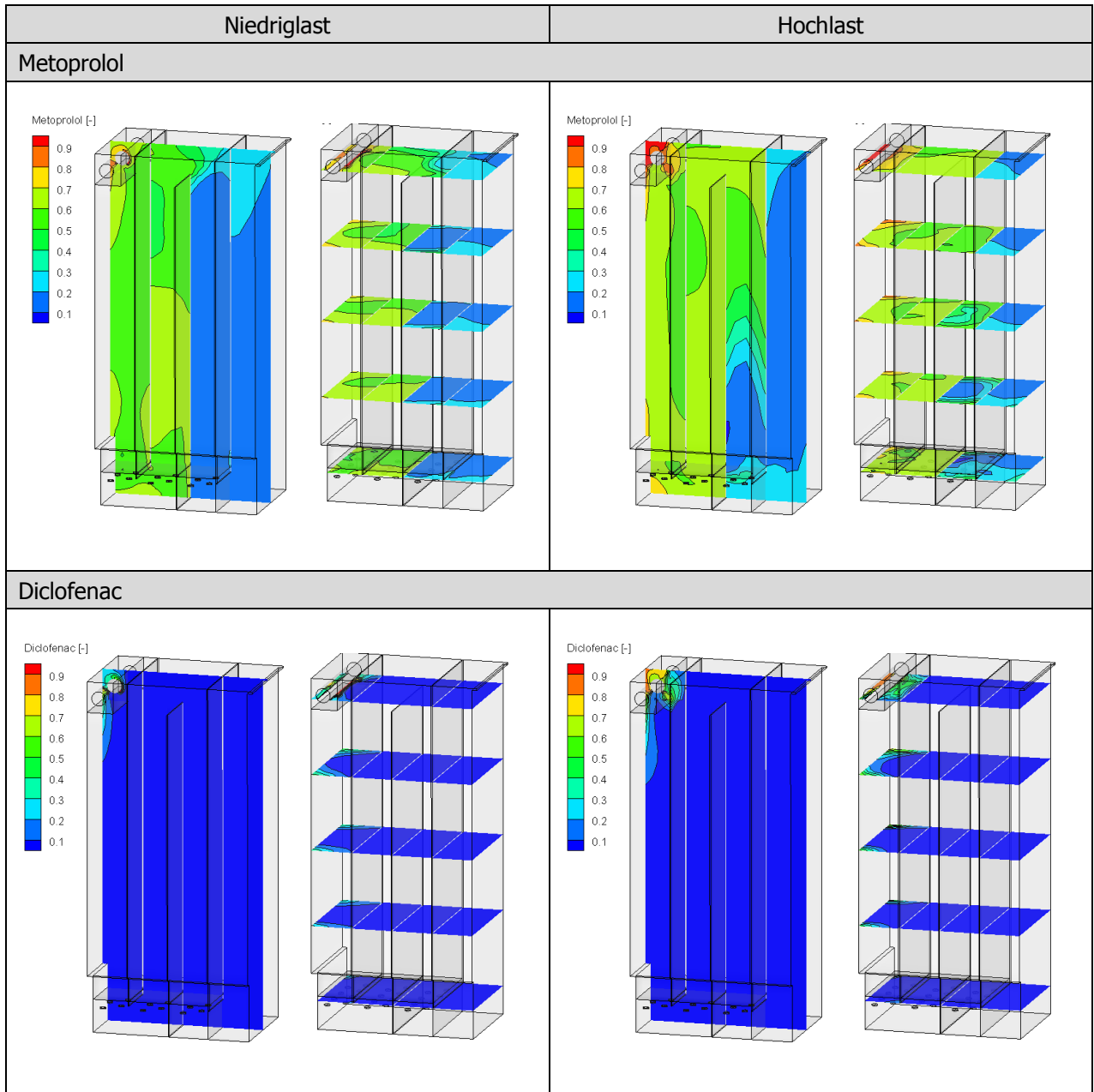


Abbildung 3.12: Grundvariante GV3. Startkonzentrationen der Abwasserwassermatrix auf Basis der Messpunkte. Konzentrationsverteilung Metoprolol (jeweils oben) und Diclofenac (jeweils unten), ausgewertet auf einer vertikalen Ebene in Reaktormitte bzw. mehreren horizontalen Ebenen.

3.4 Vergleich der Methoden zur Bestimmung der Startkonzentrationen der Abwassermatrix

Durch die Anpassung der Startkonzentrationen der Abwassermatrix an die k_{obs} -Kurve wird eine stärkere Ozonzehrung abgebildet als durch die Anpassung an die Messpunkte. Dadurch sind die Ozonkonzentrationen im Reaktor bei der ersten Bestimmungsmethode insbesondere in Kompartiment 3 höher (Abbildung 3.14). Dies führt zu einer größeren Abbaurrate von Metoprolol (HL: 81 % statt 68 %) und zu einer höheren Ozonkonzentration im Ablauf (Abbildung 3.13). Die Ablaufkonzentration von Ozon liegt mit $0,00047 \text{ g/m}^3$ jedoch immer noch weit unterhalb des festgelegten Grenzwertes von $0,1 \text{ g/m}^3$.

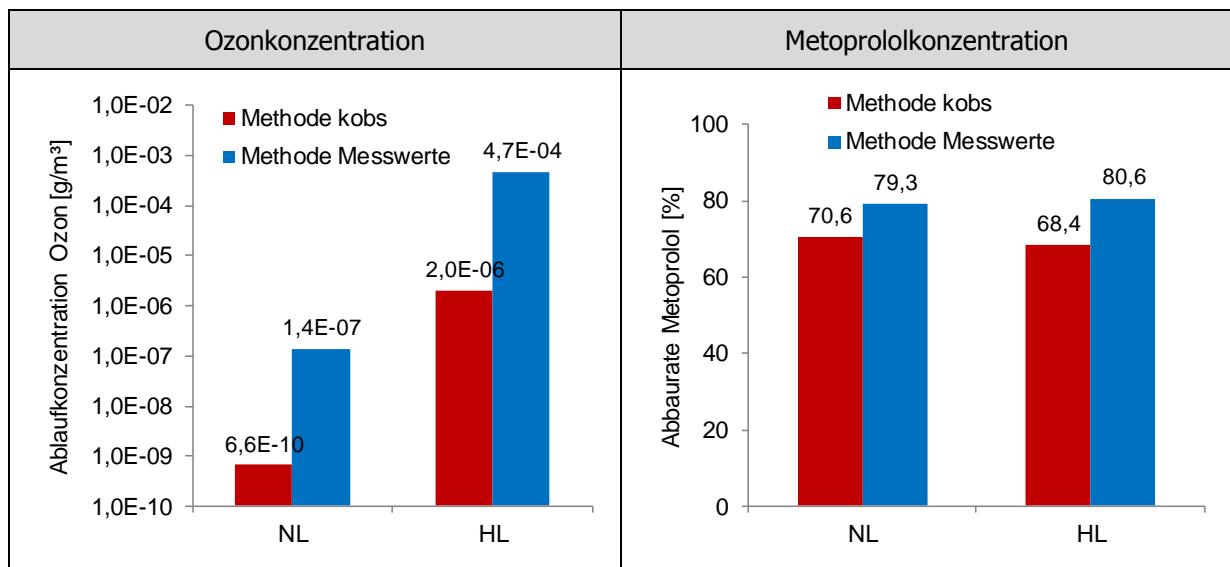


Abbildung 3.13: Grundvariante GV3. Methodenvergleich. Zeitlich gemittelte Ablaufkonzentration von Ozon bzw. Abbaurrate von Metoprolol.

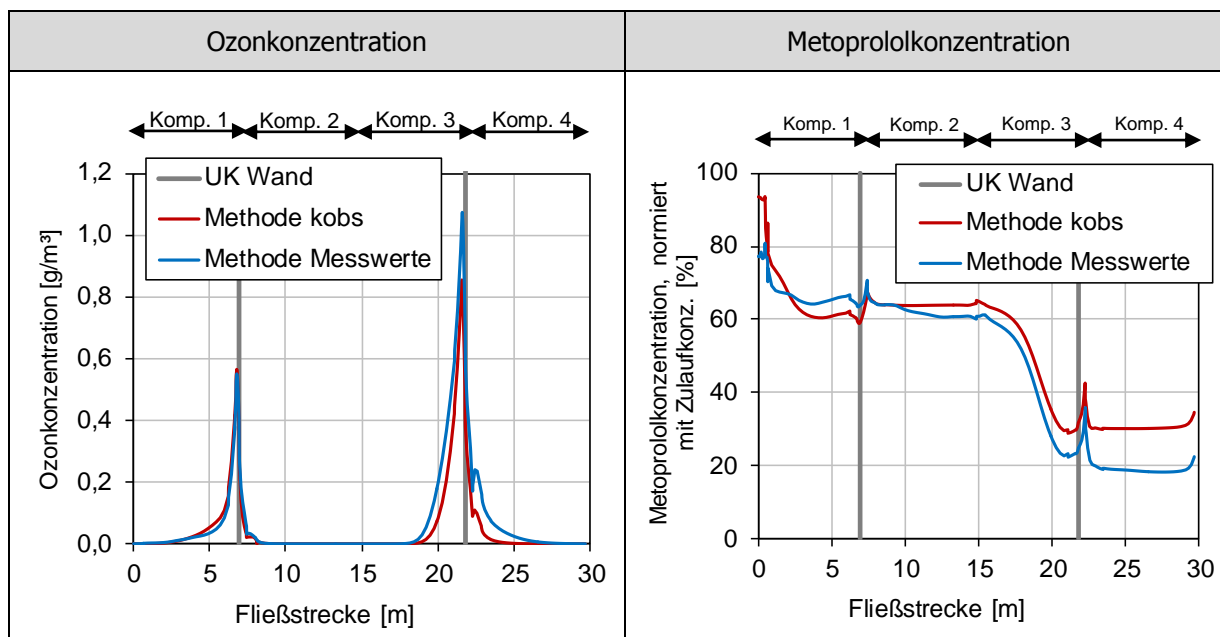


Abbildung 3.14: Grundvariante GV3. Methodenvergleich bei Hochlast. Auswertung Ozon- bzw. Metoprololkonzentration im Reaktor. Jeweils horizontal gemittelte Konzentration entlang der Fließstrecke.

3.5 Vergleich zu den bisherigen Simulationen

Im Vergleich der vorliegenden Ergebnisse mit den bisherigen Simulationen mit einer zugeführten Ozonkonzentration von $4 \text{ g O}_3 / \text{m}^3$ Wasser (siehe „SSD-0380-00-L03-H0180-OR-Rodenkirchen__008B_Abschlussbericht.pdf“, Abschnitt 5.3.4) sind die abweichenden Randbedingungen zu beachten. Zum anderen wird das Ozon durch die Abwassermatrix deutlich stärker gezehrt (aktuelle Ozonzehrungskurve, siehe Abbildung 2.4, unten links). Dies führt zu einer schnelleren Zehrung von Ozon im Wasser und damit wiederum zu einem schnelleren Übergang des Ozons vom Gas ins Wasser und einer deutlichen Reduktion von Ozon im Gas.

Ozon verteilt sich damit kleinräumiger als bei früheren Simulationen (Abbildung 3.7) (vgl. Abbildung 5.26 im Bericht „SSD-0380-00-L03-H0180-OR-Rodenkirchen__008B_Abschlussbericht.pdf“). Dies führt zu einer geringeren Abbaurrate für Metoprolol (Abbildung 3.15).

Die Grundvariante GV3 ist vergleichbar mit der bereits simulierten Variante V5 (Abbildung 3.16). Der Unterschied liegt darin, dass der Reaktor bei GV3 um 90° gedreht ist und dadurch die Kompartimente breiter geworden sind. Gegenüber der ursprünglichen Grundvariante GV1 mit nur einer Leitwand hatte die Variante V5 Vorteile bezüglich der Verweilzeit und der Abbaurrate von Metoprolol. Diese Ergebnisse sind vermutlich übertragbar. Auch für die Variante V5 wurde festgestellt, dass Ozon in das letzte Kompartiment eingetragen wird, was die Ablaufkonzentration erhöht. Diese beiden Geometrievarianten weisen demnach ein sehr ähnliches Verhalten auf.

Bei der Variante V5 wurden die ersten drei Kompartimente begast (GV3: nur Kompartiment 1 und 3). Dies führt dazu, dass auch im zweiten Kompartiment, welches im Gleichstrom durchfließen wird, Ozonkonzentrationen von durchschnittlich etwa 0,1 g/m³ vorliegen, was insbesondere im unteren Bereich des 2. Kompartiments zu weiterem Metoprololabbau führt. Ob die Begasung im zweiten Kompartiment Auswirkungen auf den gesamten Metoprololabbau hat, kann ohne direkten Vergleich nicht ermittelt werden.

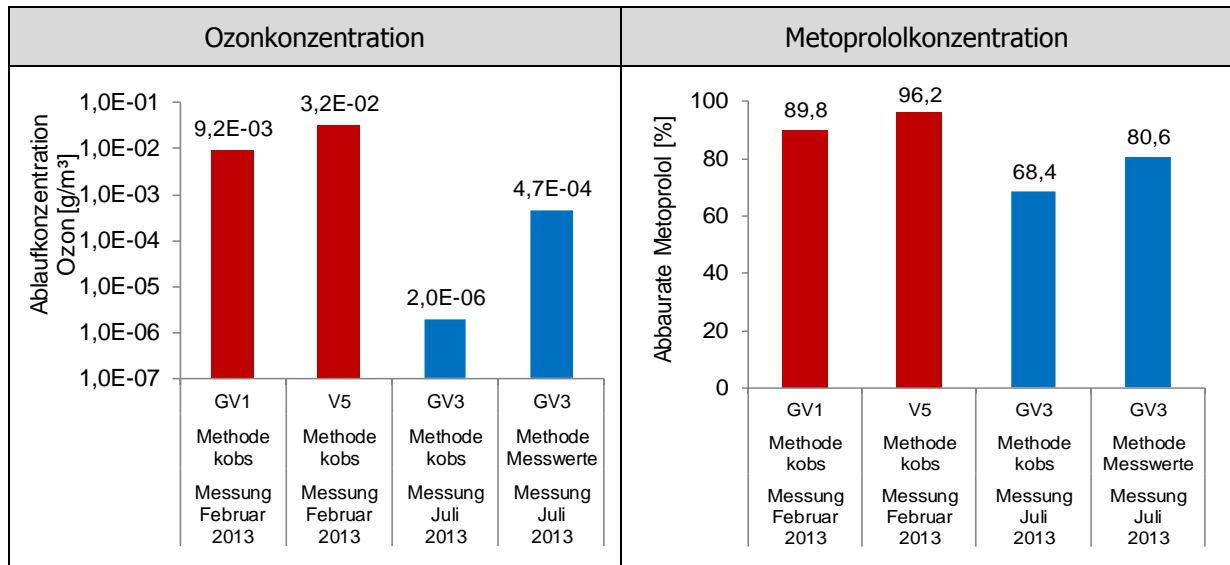


Abbildung 3.15: Vergleich bei Hochlast. Zeitlich gemittelte Ablaufkonzentration von Ozon bzw. Abbaurrate von Metoprolol.

Variante V5	Variante GV3
--------------------	---------------------

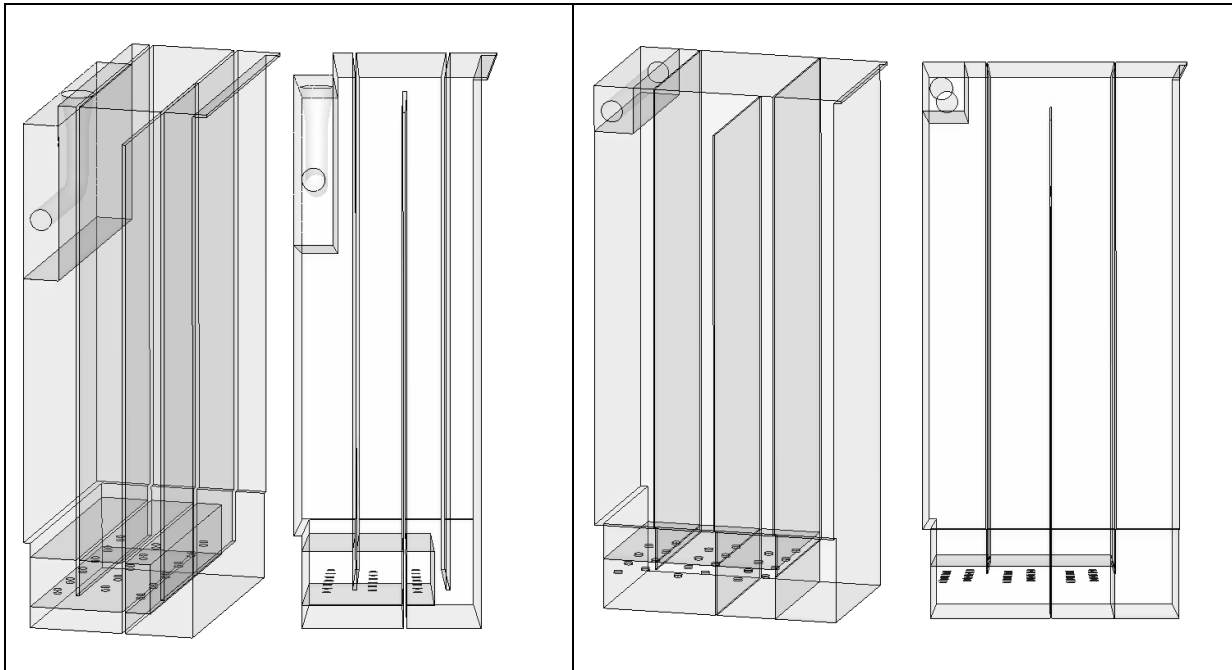


Abbildung 3.16: Vergleich Geometrie Variante V5 und GV3.

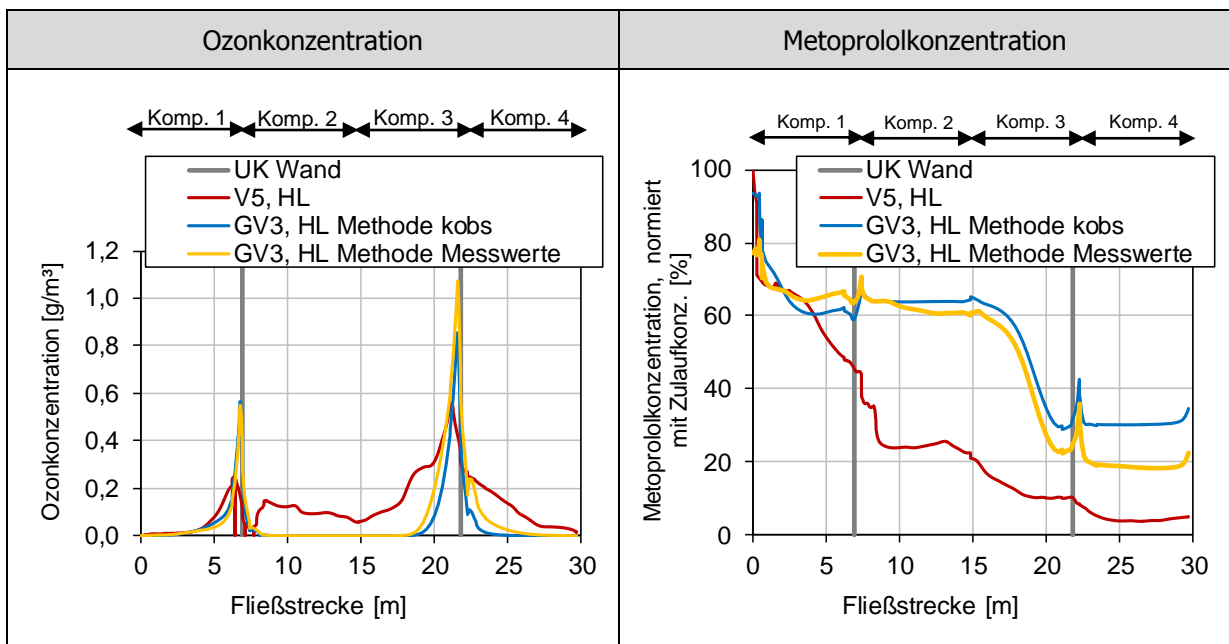


Abbildung 3.17: Grundvariante GV3. Methodenvergleich bei Hochlast. Auswertung Ozon- bzw. Metoprololkonzentration im Reaktor. Jeweils horizontal gemittelte Konzentration entlang der Fließstrecke.

4 Zusammenfassung

Im vorliegenden Bericht wird eine dritte Grundvariante des Ozonreaktors Rodenkirchen untersucht. Diese Geometrie wird im Vergleich zu den bisherigen Geometrien horizontal um 90° gedreht durchströmt und ist ähnlich wie Variante V5 durch 3 Leitwände in Kompartimente unterteilt.

Es werden Unsicherheiten in der Bestimmung der Reaktionsparameter der Abwassermatrix diskutiert. Um eine größere Vorhersagesicherheit der Simulationen zu erreichen, wird empfohlen, zum einen zeitlich höher aufgelöste Messungen und zum anderen mehrere Messungen des Ozonzehrungsverhaltens einer Probe durchzuführen. Dies sollte in der zweiten Phase des Projektes im Rahmen des Monitorings, wenn möglich, berücksichtigt werden.

Die hier untersuchte Variante weist den Charakter einer Pfropfenströmung auf. Die Abbaurate für Metoprolol liegt unter den in den bisherigen Simulationen ermittelten Abbauraten, was jedoch an den veränderten Randbedingungen und Reaktionsverhalten der Abwassermatrix liegt. Die größten Ozonkonzentrationen und damit auch der stärkste Metoprololabbau werden erwartungsgemäß in den begasten Kompartimenten ermittelt. In den unbegasten Kompartimenten ist die Abbaurate sehr gering.

Aus dem begasten Kompartiment 3 wird Ozon in das letzte Kompartiment getragen. Für die simulierte Kombination Ozonzehrung und Ozonzugabemenge ist dies jedoch unkritisch, da die Ablaufkonzentrationen weit unterhalb des gewählten Grenzwertes von 0,1 g/m³ liegen. Eine weitere Reduzierung der Ablaufwerte für Ozon könnte durch eine Verringerung des Sohlabstandes der letzten Leitwand erzielt werden.

Eine Erhöhung der Metoprololabbaurate könnte ggf. durch eine Begasung des zweiten Kompartiments erreicht werden.