

Institut für Strömungsmechanik
und Elektronisches Rechnen im Bauwesen
der Universität Hannover

Bericht Nr. 70 / 2004

Julia Weilbeer

Modellierung des Partikeltransports in Nachklärbecken als
Mehrphasenströmung

ISSN 0177-9028

Institut für Strömungsmechanik
und Elektronisches Rechnen im Bauwesen
Universität Hannover
Appelstraße 9A, D – 30167 Hannover

Tel.: +49 – 511 – 762-3568

Fax.: +49 – 511 – 762-3777

URL: <http://www.hydromech.uni-hannover.de>

Von dem Fachbereich für Bauingenieur- und Vermessungswesen
der Universität Hannover zur Erlangung des Grades Doktor-Ingenieur
genehmigte Dissertation.

Referent: Prof. Dr.-Ing. Werner Zielke
Korreferent: Prof. Dr.-Ing. Rainer Helmig

Tag der Promotion: 12. November 2004

Gefördert durch die
Deutsche Bundesstiftung Umwelt



Deutsche Bundesstiftung Umwelt
An der Bornau 2, 49090 Osnabrück, www.dbu.de

Abstract

The goal of this thesis is to model particle transport in a general form as multiphase flow of polydisperse suspensions. The applicability of such kind of models is not restricted due to certain physical properties of particles, e.g. inertia or deposition density. Theoretically a detailed and consistent description of the physical process without the need of process-based submodels (consolidation model, fluid mud model, ...) is achieved.

Flow and transport processes in a secondary clarifier are described and analyzed with respect to the most important physical processes. Based on this knowledge a granular Euler model is chosen consisting of a continuous and of a granular phase. Basic equations and adapted closures are described and discussed. Equations coming from gas dynamics and from solid mechanics are used to take into account variable shear stresses and compression processes. This approach allows to model not only the water body, but also muddy regions within one model. Dynamic processes of the suspension are modeled due to a Bingham-plastic approach for fractal flocs. In order to simulate changing particle diameter a flocculation model for multiphase flows is developed. This flocculation model is based on the transport equation for the number of particles and it is directly coupled with the flow due to the particle diameter.

Applications are focused in the field of waste water treatment. A model of a settling column is used for phenomenological verifications and for systematic studies of parameter sensitivities. Several settling regimes can be modeled due to changes of the efficiency parameter. Furthermore the simulation of the particle transport in a multiphase flow is validated with a model of an existing secondary clarifier. An intercomparison of these results with those coming from an one-phase model makes it feasible to assess the applicability of the multiphase model.

The advantage of this kind of model is based on the more directly modeling of physical processes, which makes the calibration procedure less sensitive. Hence this type of model should be applied to systems, where the behaviour of the suspension shall be predicted, and to systems, where the flow is initiated and driven due to particle movements.

Keywords: multiphase flow, settling column, secondary clarifier, flocculation model

Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit ist die Modellierung des Partikeltransports als Mehrphasenströmung polydispenser Suspensionen. Ein solches Modell unterliegt im Anwendungsbereich keinen Einschränkungen hinsichtlich Partikelträgheit und Partikellagerungsdichte und es gelingt eine durchgängige Beschreibung der Physik ohne prozessorientierte Teilmodelle (Konsolidierungsmodell, Fluid Mud Modell, ...).

Am Beispiel der Strömungs- und Transportprozesse in Nachklärbecken werden die verfahrenstechnisch bedeutsamen physikalischen Prozesse und Ursachen wie z.B. die Flokkulation herausgearbeitet. Basierend auf diesen Erkenntnissen wird ein granulares Euler-Modell mit einer kontinuierlichen und einer granularen Phase gewählt. Die zugehörigen Erhaltungsgleichungen werden hergeleitet, das entstehende Schließungsproblem diskutiert und durch problemangepasste konstitutive Beziehungen gelöst. Für die Entstehung von Spannungen in der dispersen Phase werden Ansätze aus der Gasdynamik und Festkörpermechanik verwendet, die das Scher- und Kompressionsverhalten von der Wasseroberfläche bis zum Boden charakterisieren und die Ausbildung des Strömungsfeldes und des Schlammspiegels beeinflussen. Für die Abbildung der Prozesse im Nachklärbecken wird ein Bingham-plastischer Ansatz für fraktale Flocken entwickelt. Zur Berücksichtigung des sich ändernden Partikeldurchmessers wird ein Modell der Flockendynamik für ein mehrphasiges System auf Basis der Transportgleichung für die Partikelanzahl entwickelt, das über den Partikeldurchmesser an das eigentliche Strömungsmodell gekoppelt wird.

Der Schwerpunkt der Anwendungen liegt auf Problemstellungen aus dem Bereich der Siedlungswasserwirtschaft wie der Modellierung der Suspension in einer Absetzsäule oder in einem Nachklärbecken. Anhand der Absetzsäule wird das entwickelte Modell phänomenologisch verifiziert und hinsichtlich der Parametersensitivität analysiert. Durch Änderung der Effizienzparameter und der Flockenbindungskraft im Modell der Flockendynamik können unterschiedliche Absetzregime modelliert werden. Für die Simulation des Partikeltransportes in einem realen Nachklärbecken wird das Modell anhand von In-situ Messwerten validiert. Durch einen Vergleich der mehrphasigen Ergebnisse mit denen eines einphasigen Modells erfolgt die Bewertung und Einordnung des mehrphasigen Modells.

Die Vorteile eines problemangepassten mehrphasigen Modells liegen grundsätzlich in der direkten Modellierung der tatsächlich ablaufenden Prozesse des Partikeltransports begründet. Aufwendige Validierungen der konstitutiven Ansätze für jedes neue System anhand von Messdaten entfallen. Der Anwendungsbereich des mehrphasigen Modells ist daher in der Vorhersage des Suspensionsverhaltens und in der Modellierung von Systemen, in denen Strömungen durch Partikelbewegungen initiiert werden, zu sehen.

Keywords: Mehrphasenströmung, Absetzsäule, Nachklärbecken, Flockenmodell

Vorwort

Die Idee zu dieser Arbeit entstand während meiner Diplomarbeit, bei der es einen Ansatz zur Modellierung der Flockendynamik und der Sinkgeschwindigkeit in ein einphasiges Modell zu integrieren galt und bei der der zweiphasige Aspekt deutlich zu Tage trat. Die Idee für ein zweiphasiges Modell eines Nachklärbeckens war geboren.

Mit Hilfe eines dreijährigen Stipendiums der Deutschen Bundesstiftung Umwelt (DBU) konnte ich sie realisieren. Der DBU insgesamt und besonders meinem Betreuer Herrn Dr. Hempel danke ich für ihre praktizierte Familienfreundlichkeit und das in mich gesetzte Vertrauen.

Am Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen fand ich neben einer sehr guten Rechnerausstattung stets kompetente Diskussionspartner. Herrn Professor Zielke danke ich für die Betreuung des Stipendiums, die Freiheiten und die konkreten Hinweise.

Herrn Professor Helmig danke ich für die Übernahme des Korreferates und die wertvollen Anregungen hinsichtlich der Mehrphasentheorie.

Von meinen Mitstreitern möchte ich Frau Dr.-ing habil. Michaela Hunze und Herrn Dipl.-Ing. Sebastian Schumacher hervorheben, die mir bei dem einphasigen Modell tatkräftig zur Seite standen. Frau Ramona Stammermann hat während ihrer Diplomarbeit den Grundstein für die Anwendung des Modells auf Gerinneströmungen gelegt.

Mein Mann Holger hat mich in so mancher kritischen Phase vor dem Aufgeben bewahrt. Glücklicherweise hat er auch heimlich Sicherungskopien angelegt ... Meine vier Töchter sind mir immer Motivation und Trost und haben so auf ihre Art zum Gelingen der Arbeit beigetragen. Mein Mann, meine Damen: Ihr seid Spitze!

Uetersen, September 2005

Julia Weilbeer



Inhaltsverzeichnis

Nomenklatur	vi
1 Motivation und Zielsetzung	1
2 Phänomene und Prozesse im Nachklärbecken	7
2.1 Aufgabe und Wirkungsweise eines Nachklärbeckens	7
2.2 Die Flockendynamik des belebten Schlammes	13
2.2.1 Modelle der Flockendynamik	17
3 Physikalische Grundlagen der Mehrphasenmodellierung	20
3.1 Modellvorstellung	20
3.2 Kontinuumsmechanische Erhaltungsgleichungen	21
3.2.1 Turbulenz im Mehrphasensystem	27
3.2.2 Schließungsbedingungen	29
3.3 Partikel in kontinuierlichen Medien	31
4 Schließungsbedingungen für polydisperse Suspensionen	36
4.1 Bestimmung der konstitutiven Gleichungen	36
4.1.1 Massenquelle und Phasenübergang	37
4.1.2 Bestimmung der Spannungstensoren	37
4.1.3 Impulsaustausch an der Grenzfläche	42
4.2 Mehrphasige Turbulenzmodellierung	44
4.3 Berücksichtigung der Flockendynamik	50
4.4 Vergleich zwischen ein- und mehrphasiger Modellierung des Partikeltrans- portes	57
4.5 Das numerische Modell	63
5 Prinzipstudien zur Mehrphasenmodellierung polydisperser Suspensio- nen	67
5.1 Gerinneströmung - Rouse-Profil	67
5.1.1 Experimentelle Untersuchungen und Physik des Systems	67
5.1.2 Numerische Modelluntersuchung	71
5.2 Standzylinder Versuch	75
5.2.1 Experimentelle Untersuchungen und Physik des Systems	75
5.2.2 Numerische Modelluntersuchung	76

6 Mehrphasenmodellierung in Nachklärbecken	92
6.1 Allgemeines	92
6.2 Das Nachklärbecken der Kläranlage Kierspe-Bahnhof	93
6.2.1 Experimentelle Untersuchungen und Physik des Systems	93
6.2.2 Numerische Modelluntersuchungen	95
7 Zusammenfassung und Ausblick	121
Literaturverzeichnis	125
Abbildungsverzeichnis	129
Tabellenverzeichnis	132

Nomenklatur

Abkürzungen

Abkürzung	Bedeutung
1D, 2D, 3D	ein-, zwei-, drei-dimensional
RB	Randbedingung
Gl.	Gleichung
TS	Trockensubstanz
NKB	Nachklärbecken
KA	Kläranlage
VSV	Vergleichsschlammvolumen
k.E.	keine Einschränkung
EPS	extrazelluläre polymere Substanzen

Indizes

Abkürzung	Bedeutung
k, l	Phase
d	disperse Phase
c	kontinuierliche Phase
m	Suspension
p	Partikel
t	turbulent
f	Flocke
i	Phasengrenzfläche
s	Sediment

Koordinatenbezeichnungen

Abkürzung	Bedeutung
x, y, z	Kartesische Koordinaten
$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$	Kartesische Koordinaten in Vektorschreibweise

Mathematische und numerische Symbole, Variablen und Konstanten

Symbol	Bedeutung
div	Divergenzoperator
$grad$	Gradient
\mathbf{A}, \mathbf{u}	Tensoren, Vektoren
A_{ij}, u_i	Tensorelemente, Vektorelemente
\mathbf{E}	Einheitstensor

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Fortsetzung der vorherigen Seite

n	Einheitsnormalenvektor
δ	Kronecker Delta
∇	Nabla-Operator

Physikalische Variablen und Konstanten

Symbol	Einheit	Bedeutung
f	N/kg	Volumenraftdichte
<i>p</i>	N/m ²	Druck
<i>h</i>	m	Wasserstand
<i>t</i>	s	Zeit
u = (<i>u, v, w</i>)	m/s	Geschwindigkeit und ihre Komponenten
ν	m ² /s	kinematische Viskosität
μ	kg/(m s)	dynamische Viskosität
ϱ	kg/m ³	Dichte
ϱ_0	kg/m ³	Dichte von reinem Wasser bei 20 ⁰ C
$\Delta\varrho$	kg/m ³	Dichteänderung bezüglich Reinwasser ($\varrho - \varrho_0$)
T	N/m ²	Spannungstensor
P	N/m ²	Reibungstensor
R	N/m ²	Reynoldsspannungstensor
τ_B	N/m ²	Bodenschubspannung
T_{ti}	N/m ²	Tensor der fluktuierenden Grenzflächenspannungen
P_{ti}	N/m ²	Tensor der fluktuierenden viskosen Grenzflächenspannungen
S	N/m ²	Deformationstensor (deviatorischer Spannungstensor)
W	N/m ²	Rotationstensor
D	m ² /s	Diffusionstensor
κ	kg/(m s)	Volumenviskosität
κ	-	von Kármán-Konstante
<i>C_D</i>	-	Widerstandsbeiwert
Γ	kg/(m ³ s)	Quellterm der Massenerhaltung
<i>k</i>	m ² /s ²	turbulente kinetische Energie
<i>k_{td}</i>	m ² /s ²	granulare Temperatur
ϵ	m ² /s ³	Energiedissipation
<i>C, c_μ</i>	-	Konstanten des <i>k</i> – ϵ – Modells
σ	-	Prandtl-Schmidt-Zahlen
g	m/s ²	Erdbeschleunigung
α	-	Volumenanteil
M	kg/(m ² s ²)	mittlerer Fluß an der Phasengrenzfläche
M_t	kg/(m ² s ²)	fluktuierender Fluß an der Phasengrenzfläche

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Fortsetzung der vorherigen Seite

F	N	Kraft
$C_{D,VM,L,R}$	-	Kraftbeiwerte
m	kg	Masse
u^*	m/s	Schubspannungsgeschwindigkeit
c	kg/m ³	Sedimentmassenkonzentration
Q_c	kg/(m ³ s)	Quellterm für die Konzentration
Ri	-	Richardsonzahl
ϕ	-	volumetrische Sedimentkonzentration
w_s	m/s	effektive Sinkgeschwindigkeit
d	m	Durchmesser
β_{ij}	-	Kollisionswahrscheinlichkeiten der Partikel
a	-	Koeffizient im Flokkulationsmodells
e_b	-	Bruchwahrscheinlichkeit der Flocken
e_c	-	Koagulationswahrscheinlichkeit der Flocken
e_d	-	Diffusionsparameter im Flokkulationsmodells
f_s	-	Formfaktor im Flokkulationsmodell
G	1/s	Absoluter Geschwindigkeitsgradient
N_p	-	Anzahl der Flocken pro Volumeneinheit
n_f	-	fraktale Flockendimension
t_p	s	Relaxationszeit
t_{tp}	s	Kollisionszeit
t_{cp}	s	Interaktionszeit
t_c	s	Langrangescher Zeitmaßstab
p	-	Exponent im Flokkulationsmodell
q	-	Exponent im Flokkulationsmodell
z	-	Rouseparameter
e	-	Porosität

Kapitel 1

Motivation und Zielsetzung

Die Transportmodellierung partikulärer Substanzen mit Hilfe der Advektions-Diffusionsgleichung stößt bei bestimmten Problemstellungen aus dem Bereich des Wasserwesens an die Grenzen ihrer Gültigkeit. Diese Grenze ist grundsätzlich dann erreicht, wenn die Partikel durch einen Impulsaustausch mit dem umgebenden Fluid die Hydrodynamik beeinflussen (Malcherek, 2003 [49]). Die Tatsache, dass dieser Impulsaustausch bei einem einphasigen Modellierungsansatz ¹ nicht oder nur in parametrisierter Form berücksichtigt werden kann, begründet das Ziel dieser Arbeit, den Partikeltransport in allgemeiner Form als Mehrphasenströmung polydisperser Suspensionen ² zu modellieren. Die Berücksichtigung eines Impulsaustausches zwischen den Phasen ist eine wichtige Komponente der Mehrphasenmodellierung und verhilft diesem Ansatz zur Allgemeingültigkeit.

Beispiele für solche Situationen finden sich bei vielen natürlichen und technischen Vorgängen. Im Bereich der Siedlungswasserwirtschaft trifft man in den verschiedenen Abschnitten einer Kläranlage auf vielfältige sedimentologische Effekte: Im Sandfang, in dem auf (strömungs)mechanischem Weg dem Abwasser Sinkstoffe entzogen werden, dominiert der gravitationelle Transport der Grobstoffe. Im Nachklärbecken sind aus verfahrenstechnischen Gründen bestimmte Sedimenttransportphänomene wie Flokkulation und das damit verbundene Absinken der Inhaltsstoffe (überwiegend Schwebstoffe und Kolloide) erwünscht und notwendig. In der Nähe der Beckensohle treten dabei Konzentrationen in einer Größenordnung von bis zu 20 g/l auf. Grundsätzlich gelten für diese Phänomene die gleichen Modellierungsprinzipien wie bei Transportprozessen in natürlichen Umgebungen, auch wenn die Prozesse in einer Kläranlage in technisch intensivierter kompakter Form auftreten. Aus diesem Grund stammt die Mehrzahl der Modellanwendungen dieser Arbeit aus diesem Bereich.

In natürlichen Fließgewässern führen vor allem die sohnnahen Sedimentbewegungen in vertikaler (Erosion/Deposition) oder horizontaler (Geschiebefracht) Richtung zu bereichsweise hohen Konzentrationen bzw. Frachten. Schwebstoffe akkumulieren in schwach

¹In dieser Arbeit wird die Transportmodellierung mit Hilfe der Advektions-Diffusionsgleichung als Gegenstück zur Mehrphasenmodellierung **einphasig** genannt.

²Polydisperse Suspension: Ein System aus festen und flüssigen Bestandteilen, die in ihrer Größe und Zusammensetzung heterogen sind.

durchströmten Bereichen und sinken zur Sohle. Die Volumenkonzentration des Sedimentes steigt sohnah an. Es bilden sich Schlickschichten aus, die weiter konsolidieren können. In einem tidebeeinflussten Ästuar kommt es bedingt durch die Umkehrung der Strömungsrichtung zu einem periodischen Wechsel zwischen Erosion und Deposition. Auch hierbei bilden sich zeitweise Schlickschichten (engl. fluid mud) aus. Als ein weiteres Beispiel aus dem Bereich des Wasserbaus kann das Verklappen von Baggergut genannt werden, wobei hier besonders der eigentliche Verklappvorgang, bei dem das Wasser-Sedimentgemisch quasi monolithisch zu Boden sinkt, in sehr anschaulicher Weise das Wesen der Mehrphasenmodellierung illustriert.

Während bei technischen Anwendungen in der Regel die Verfahrensoptimierung an erster Stelle steht, werden bei Fließgewässersimulationen verstärkt Prognosen und Analysen hinsichtlich Sohlentwicklung und Sedimentverteilung, aber auch bezüglich der Speicherungen bzw. Remobilisierungen von Schadstoffen durch die Sedimente gefordert. Der Erfahrungshorizont in der Entwicklung und Anwendung mehrdimensionaler Transportmodelle für Fließgewässer reicht wesentlich weiter als z.B. für die Nachklärbeckensimulation. Viele Grundgedanken und -ideen stammen daher aus dem Bereich des Wasserbaus und wurden in dieser und in früheren Arbeiten (Krüger, 1998 [40]) in den Bereich der Siedlungswasserwirtschaft übertragen.

Bevor der prinzipielle Unterschied zwischen ein- und mehrphasiger Modellierung erstmals kurz skizziert wird, soll das Verhalten kohäsiver Sedimente in Abhängigkeit von der Konzentration dargestellt werden. Eine solche Unterteilung kann als Kriterium angesehen werden, ab wann die Anwendung eines validierten Mehrphasenmodells Vorteile mit sich bringen kann.

Malcherek, 2003 [49] klassifiziert die Prozesse nach der Konzentration und charakterisiert Vertikalbewegung, Transport, Rheologie und Turbulenz. Nach dieser Unterteilung findet der Transport bis zu einer Konzentration von 1 g/l unbeeinflusst statt. Bei zunehmender Konzentration verändert sich das Verhalten der Suspension: Die Vertikalbewegung wird behindert (engl. hindered settling) und der turbulente Austausch wird gedämpft. Im Fluid Mud Bereich kommt die Vertikalbewegung allmählich zum Erliegen und auch das rheologische Verhalten verändert sich zum Bingham-plastischen. Bei weiterer Konsolidierung verschwinden Vertikalbewegung und Turbulenz vollständig, und das komprimierte Material verhält sich plastisch-elastisch.

In einphasigen Modellen kann der Übergang zwischen diesen Medien nur über individuelle situationsspezifische Parametrisierungen z.B. der Sinkgeschwindigkeit modelliert werden. Für eine weiterführende Prozeßsimulation müssen separate Programmbausteine (z.B. Konsolidierungsmodell) angekoppelt werden (siehe Kapitel 4.4). Eine durchgehende mathematische Beschreibung der vielfältigen sedimentologischen Teilprozesse ist in der einphasigen Modellierung nicht möglich.

Die Motivation für die Entwicklung eines mehrphasigen numerischen Modells für Suspensionen besteht darin, ein Werkzeug zur Verfügung zu haben, welches in dem Sinn universeller ist, dass sich Materialeigenschaften und damit auch die Fließeigenschaften kontinuierlich modellinhärent ändern können. Die Modellparameter sind vorwiegend physikalischer Natur und beschreiben z.B. Phaseneigenschaften. Die Mehrphasenmodellierung benötigt somit a priori keine gekoppelt zu betreibenden prozeßorientierten Teil-

Massenkonzentration	Medium	Vertikalbewegung	Transport	Rheologie	Turbulenz
≤ 1 g/l	Wässrige Suspension	freies Sinken	advektiv	Newton	unbeeinflusst
≥ 1 g/l	Konzentrierte Suspension	hindered settling	advektiv	Newton	gedämpft
≥ 100 g/l	Fluid Mud	hindered settling	Scherströmung	Bingham	nicht vorhanden
≥ 250 g/l	Konsolidierter Boden	Absetzen	nicht vorhanden	Prandtl	nicht vorhanden

Tabelle 1.1: Klassifizierung der Prozesse nach der Konzentration (Malcherek, 2003 [49])

modelle, da ihr Ansatz eine durchgängige Beschreibung der Physik des Feststofftransportes ermöglicht. Den Zugang zu dieser Betrachtungsweise findet man auf mikroskopischer Ebene.

Bei den meisten bindigen natürlichen Feinsedimenten und einigen verfahrenstechnisch verwendeten Schlämmen handelt es sich um kohäsive Partikel³, deren Eigenschaften, wie struktureller mikroskaliger physiochemischer Partikelbau, Partikelgröße und Partikeldichte, sich infolge von physikalischen, chemischen und biologischen Prozessen ändern können. Das Verhalten der Gesamtsuspension wird von Eigenschaften des Trägermediums und der Partikel gleichermaßen geprägt. Aus mikroskopischer Sicht charakterisieren folgende Prozesse die Feststoffdynamik:

- Konvektion während des Absinkens
- Auftriebseffekte
- Rückströmung und Nachlaufeffekte
- Einfluss benachbarter Partikel auf die Geschwindigkeitsgradienten im Nahfeld eines Partikels
- Partikelkollisionen
- Flockendynamik
- Änderung der effektiven Viskosität mit steigender Feststoffkonzentration

Die Feststoffdynamik wird durch strömungsmechanische Aspekte und Flockendynamik geprägt, die in Wechselwirkung zueinander stehen (Abbildung 1.1). Auch chemische und biologische Eigenschaften kommen hier zum Tragen.

³In dieser Arbeit wird im folgenden der allgemeine Begriff Partikel verwendet, der Teilchen eines Stoffes meint und natürlich entstandene Sedimente, Luftblasen und Schlammflocken gleichermaßen bezeichnet.

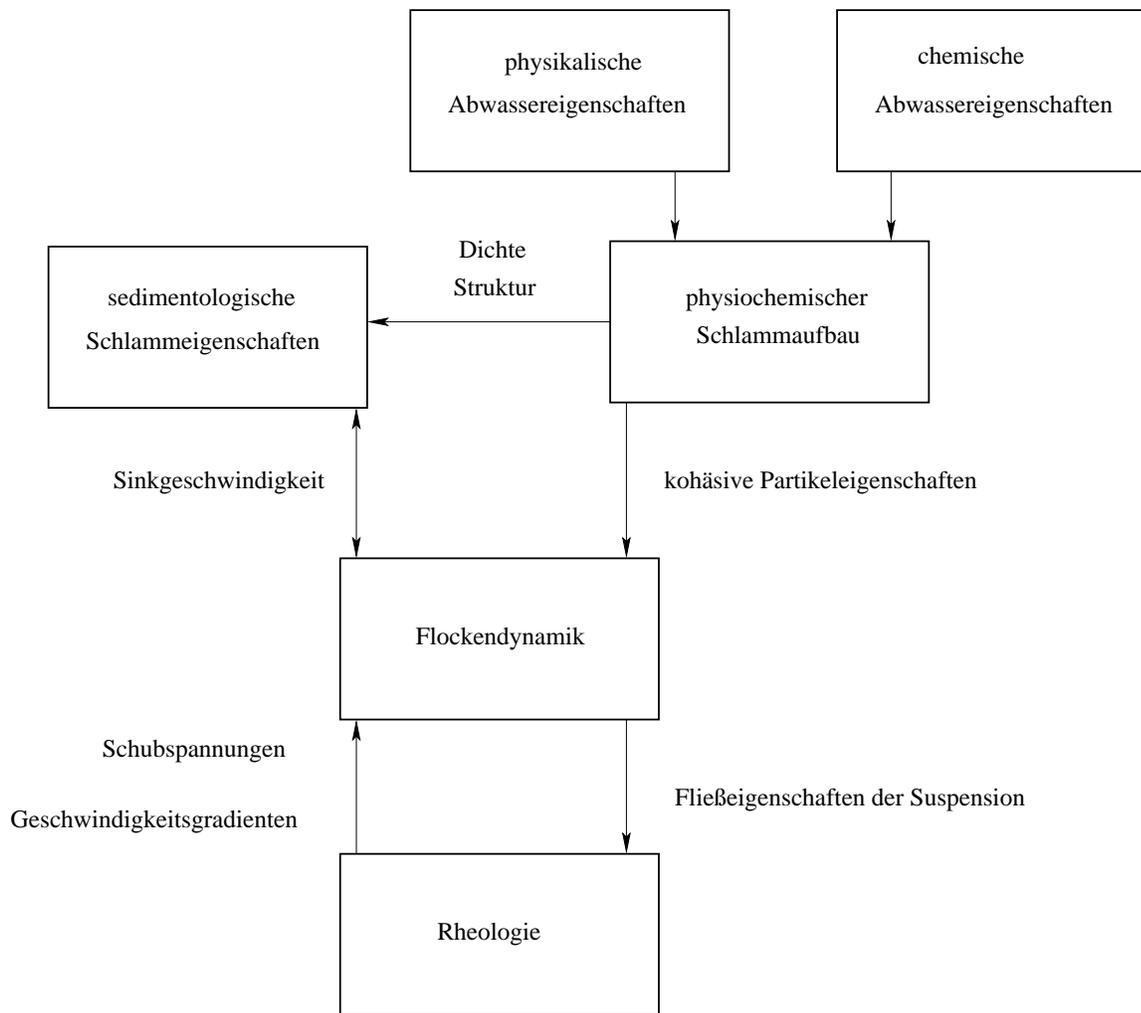


Abbildung 1.1: Die Dynamik polydisperser Suspensionen als Resultat der Wechselwirkungen zwischen biologischen, chemischen und physikalischen Größen und Prozessen

Mehrdimensionale hydrodynamisch-numerische Modelle sind prinzipiell ein geeignetes Werkzeug, um - eine korrekte Modellbildung vorausgesetzt - Wechselwirkungen von biologischen, chemischen und physikalischen Vorgängen zu simulieren. Die Entwicklung eines solchen *holistischen* Modells kann in seiner Gesamtheit natürlich nicht in dieser Arbeit realisiert werden⁴, doch ein Beitrag in diese Richtung soll geleistet werden, indem aufbauend auf dem Detailwissen verschiedener Fachrichtungen ein Mehrphasenmodell für kohäsive Sedimente konstruiert und diskutiert wird.

Verbunden mit dieser Entwicklungsarbeit ist die Absicht, in Zukunft das Verhalten von Suspensionen besser analysieren, verstehen und auch prognostizieren zu können.

⁴In einem ersten Schritt wird dazu z.B. die Flockendynamik nur über strömungsmechanische Größen modelliert, ohne dass chemische oder biologische Vorgänge einen Einfluss hätten.

Zur näheren Begründung, warum gerade ein mehrphasiges Modell für geeigneter gehalten wird, dieses Ziel zu erreichen, seien die Unterschiede zwischen der einphasigen und der mehrphasigen Modellierung nachfolgend kurz dargestellt. Eine detaillierte Gegenüberstellung findet sich in Kapitel 4.4

In der einphasigen Modellierung wird die Suspension als newtonsches Fluid mit mitbewegten Tracern angesehen. Für dieses Fluid werden die kontinuumsmechanischen Erhaltungsgleichungen von Masse und Impuls aufgestellt und so Geschwindigkeit, Wasserstand bzw. Druck und Turbulenz berechnet. Durch Wandgesetze wird der Reibungseinfluss fester Berandungen berücksichtigt. Es entstehen Schubspannungen, die in Wechselwirkung mit den eben genannten Größen stehen. Die Partikel werden von diesem Fluid transportiert. Ihre Bewegung wird über die Advektions-Diffusions-Gleichung beschrieben. Die Geschwindigkeitsfelder von Fluid und Sediment unterscheiden sich a priori nicht. Die Auswirkungen der Partikeleigenschaften auf das Verhalten der Suspension werden in den Spannungs- und Auftriebstermen und durch Massenflüsse parametrisiert.

Die wechselseitige Abhängigkeit zwischen Hydrodynamik und Stofftransport wird nur durch eine Kopplung, d.h. über eine nicht umkehrbare Beziehung zwischen die Strömung beschreibenden Größen erreicht.

In der mehrphasigen Modellierung sind beide Phasen gleichberechtigt. Für die kontinuierliche Phase werden aus den Erhaltungsgleichungen Phasenanteil, Geschwindigkeit, viskose und Reynoldsspannungen berechnet. Auch für die disperse Phase werden die Erhaltungsgleichungen gelöst und die genannten Größen bestimmt.

Beide Phase stehen über den Austausch von Impuls an den Phasengrenzflächen in Wechselwirkung, d.h. der Impulsaustauschterm ist für beide Phasen Bestandteil der Impulserhaltung. Infolge des Impulsaustausches findet auch ein Austausch von Turbulenz zwischen den Phasen statt, der Einfluss auf das Strömungsgeschehen beider Phasen nimmt.

Die Entstehung und Übertragung von Spannungen kann für die Phasen unterschiedlich modelliert werden. In Abhängigkeit des Phasenanteils können so verschiedene Spannungszustände der Phasen berücksichtigt werden. Spezielle sich ändernde Partikeleigenschaften gehen über algebraische Beschreibungen oder z.B. über ein Flokkulationsmodell direkt in die physikalische Größe ein, ändern z.B. Partikeldurchmesser und -dichte.

Die gegenseitige Beeinflussung der Phasen wird in der mehrphasigen Modellierung also tatsächlich über wechselseitige Abhängigkeiten von den gleichen Größen erreicht. Lediglich die Berücksichtigung der kohäsiven Partikeleigenschaften erfolgt gekoppelt.

Die Möglichkeiten eines Mehrphasenmodells werden am deutlichsten, wenn starke Wechselwirkungen zwischen Sediment und Trägermedium existieren und die Eigenschaften der dispersen Phase ausgeprägt sind. Daher wird das Hauptaugenmerk dieser Arbeit auf dem Sedimentationsprozess im Nachklärbecken liegen. Die Diversität der Partikellagerungsdichte, die zu starken Phaseninteraktionen führt, und die speziellen Eigenschaften von belebtem Schlamm rechtfertigen den erhöhten Rechenaufwand eines Mehrphasenmodells und lassen o.a. Vorteile deutlich werden.

Zuletzt soll das in dieser Arbeit entwickelte Mehrphasenmodell in die Welt der gegenwärtig in Praxis und Forschung vorhandenen Modelle eingeordnet werden.

Es existieren verschiedene Typen numerischer Modelle für Nachklärbecken, die Hunze,

2004 [28] ausführlich zusammengestellt hat. Die Entwicklung von Modellansätzen zur Berechnung der Prozesse im Nachklärbecken hat sich seit den 70er Jahren in zwei Richtungen orientiert. Der praxisorientierte Trend geht hin zu möglichst einfachen 0- oder quasi 1-dimensionalen Ansätzen. Die Bandbreite dieser Modelle ist groß. Sie reicht von reinen Bemessungsansätzen auf der Basis von Kenngrößen, wie der Oberflächenbeschickung nach ATV 131, bis hin zu Schichtenmodellen, die das Becken in der Vertikalen in verschiedene Schichten unterteilen und die Massenströme zwischen den einzelnen Schichten parametrisieren und bilanzieren. Diese Modelle werden zur Bemessung und zur dynamischen Simulation des Gesamtsystems Kläranlage eingesetzt. Ferner können sie durch Kopplung mit einem reaktionskinetischen Modell zur Optimierung von Steuerung und Verfahrenstechnik des Gesamtsystems Kläranlage und zu Systemstudien herangezogen werden. Dabei werden in letzter Zeit auch Ergebnisse hochauflösender mehrdimensionaler Modelle zur Kompartimentierung der 0- und quasi 1-dimensionalen Modelle herangezogen. Zur baulichen Optimierung eines Beckens sind sie wegen der nicht modellierbaren Beckengeometrie und der stark vereinfachten Abbildung der physikalischen Vorgänge nicht geeignet.

Der grundlagenorientierte Trend verwendet mehrdimensionale Modelle, die eine zeitliche und räumliche Analyse der ablaufenden Prozesse liefern können. Diese Modelle erlauben die gezielte Untersuchung baulicher Veränderungen und strömungsmechanischer Randbedingungen auf das Systemverhalten. Eine Analyse der ablaufenden Prozesse ist möglich und kann das Verständnis der physikalischen Phänomene verbessern. Das hier vorgestellte Modell gehört eindeutig zu dieser Gruppe. Mehrphasenmodelle für Nachklärbecken sind in der Fachliteratur nicht detailliert dokumentiert, und Mehrphasenansätze für den Transport partikulärer Substanzen sind nur für nicht-bindige Partikel beschrieben. Für kohäsive Sedimente wurde dieser Ansatz bislang noch nicht verfolgt.

Die Arbeit ist folgendermaßen gegliedert. Im nächsten Kapitel werden die Eigenschaften von belebtem Schlamm wie Dichte, Viskosität usw. und dessen Flockendynamik und -struktur herausgearbeitet. Anschließend werden die Grundlagen der Mehrphasentheorie dargestellt, die Unterschiede zur einphasigen Betrachtungsweise aufgezeigt und die zu erwartenden Vorteile benannt. Im vierten Kapitel werden die Erhaltungsgleichungen durch die Wahl geeigneter Schließungsansätze an die Suspension im Nachklärbecken angepaßt. Der Nachweis der Allgemeingültigkeit der Ansätze wird am Beispiel zweier akademischer Testfälle, einer Absetzsäule und dem Rouse-Profil, geführt. Die Anwendbarkeit des Modells auf reale Systeme wird schließlich anhand der Modellierung des Nachklärbeckens der Kläranlage in Kierspe gezeigt. Die Modellergebnisse werden mit einem einphasigen Modell nach Schumacher, 2004 [30] und Messwerten verglichen und bewertet. Den Schluss der Arbeit bildet eine Zusammenfassung der Entwicklungen und Erkenntnisse sowie eine Diskussion der Anwendungsbereiche des entstandenen Modells und ein Ausblick.

Kapitel 2

Phänomene und Prozesse im Nachklärbecken

2.1 Aufgabe und Wirkungsweise eines Nachklärbeckens

In einer kommunalen Kläranlage wird das Selbstreinigungspotential eines natürlichen Gewässers in einem technischen Verfahren intensiviert und zur Reinigung vorwiegend häuslicher Abwässer eingesetzt. Nach der mechanischen Entfernung der Grobstoffe und des Sands in Rechen, Vorklärung und Sandfang werden in der sich anschließenden biologischen Reinigungsstufe die gelösten und kolloidalen Abwasserinhaltsstoffe entfernt. Abbildung 2.1 Seite 11 zeigt das Fließschema einer Kläranlage.

Die biologische Reinigung wird verfahrenstechnisch unterschiedlich realisiert. Hier wird sich im Hinblick auf das numerische Modell auf das Belebungsverfahren beschränkt.

Das Belebungsverfahren durchläuft zwei Stufen, Belebungs- und Nachklärbecken, die räumlich voneinander getrennt sind und unterschiedliche Ziele verfolgen. In der ersten Stufe, dem Belebungsbecken, erfolgt die Reinigung des Abwassers durch reaktionskinetische Prozesse. Eine Bakterienbiozönose, der belebte Schlamm, setzt die Abwasserinhaltsstoffe in Biomasse als Endprodukt des Baustoffwechsels und in anorganische Endprodukte als Folge des Energiestoffwechsels um. Der für die Reaktionskinetik benötigte Sauerstoff wird dem belebten Schlamm von außen zugeführt. Durch Energieeintrag wird der belebte Schlamm in der Schwebelage gehalten und eine gute Durchmischung von Abwasser und belebtem Schlamm gewährleistet, so dass die Stoffumsetzung nicht durch Diffusion limitiert wird. Der Wirkungsgrad des belebten Schlammes wird durch die Anlagensteuerung, d.h. die Herstellung optimaler Milieubedingungen, optimiert. Schwankungen in der Zulauffracht kann die Bakterienbiozönose in gewissem Maße selbständig ausgleichen.

Die zweite Stufe, das Nachklärbecken, hat die Aufgabe, belebten Schlamm und Abwasser durch Sedimentation und Eindickung zu trennen. Erfolgt die Trennung nur unvollständig, gelangt ein Teil der sauerstoffzehrenden Stoffe in Form von Biomasse in das aufnehmende Gewässer und verschlechtert dessen Gewässergüte. Dieser Schlammabtrieb kann zu

einem Nichteinhalten der gesetzlich vorgeschriebenen Ablaufwerte führen, was finanzielle und rechtliche Konsequenzen nach sich ziehen kann. Zusätzlich dient das Nachklärbecken bei kurzzeitig erhöhter hydraulischer Belastung als Schlamm-speicher. Diese Ziele können nur erreicht werden, wenn die kohäsiven und sedimentologischen Eigenschaften des belebten Schlammes ausgenutzt werden und die Kennzahlen des belebten Schlammes, z.B. der Schlammvolumenindex, innerhalb der Bemessungsgrenzen bleiben.

Der belebte Schlamm besteht aus einzelnen Flocken, die aus Mikroorganismen, abgestorbenen Zellen, partikulärem organischem und anorganischem Material, extrazellulären Polymeren und Wasser aufgebaut sind (Abbildung 2.2).

Die Flocken können infolge ihrer biochemischen Zusammensetzung koagulieren und Makromoleküle binden, aber infolge Krafteinfluss auch wieder zerbrechen. Die Flockendynamik hängt von den Schlammeigenschaften, von den Abwasserinhaltsstoffen und der Hydrodynamik im Becken ab. Infolge der Flockendynamik ändern sich die entscheidenden sedimentologischen Parameter Partikelgröße und -dichte, so dass die Sedimentation des belebten Schlammes in einem verfahrenstechnisch vertretbaren Zeitraum stattfinden kann. Infolge der Sedimentation und der über die Vertikale zunehmenden Flockenkonzentration entsteht letztendlich ein Flockennetzwerk, das zunächst als Filter für sehr kleine Flocken und Makromoleküle wirkt, infolge der Konsolidierung mehr und mehr eindickt und ein relativ scherstabiles Schlamm-bett am Beckenboden bildet. Der getrennte Abzug des belebten Schlammes und des geklärten Abwassers aus dem Becken wird so gewährleistet. Wegen ihrer zentralen Rolle im Verfahrensablauf und ihrer Komplexität wird auf die Flockendynamik in Kapitel 2.2 genauer eingegangen. Die verfahrenstechnischen Aufgaben des Nachklärbeckens und die damit verbundenen z.T. konträren Anforderungen an die Flocken im Nachklärbecken sind in Tabelle 2.1 zusammengefasst.

Aufgabe	Flockenstruktur
Klären	unregelmäßig geformte große Flocken mit guter Filterwirkung
Absetzen und Eindicken	regelmäßig geformte kompakte Flocken mit großer Sinkgeschwindigkeit
Entwässerung	große stabile Flocken mit homogener Größenverteilung

Tabelle 2.1: Flockenanforderungen

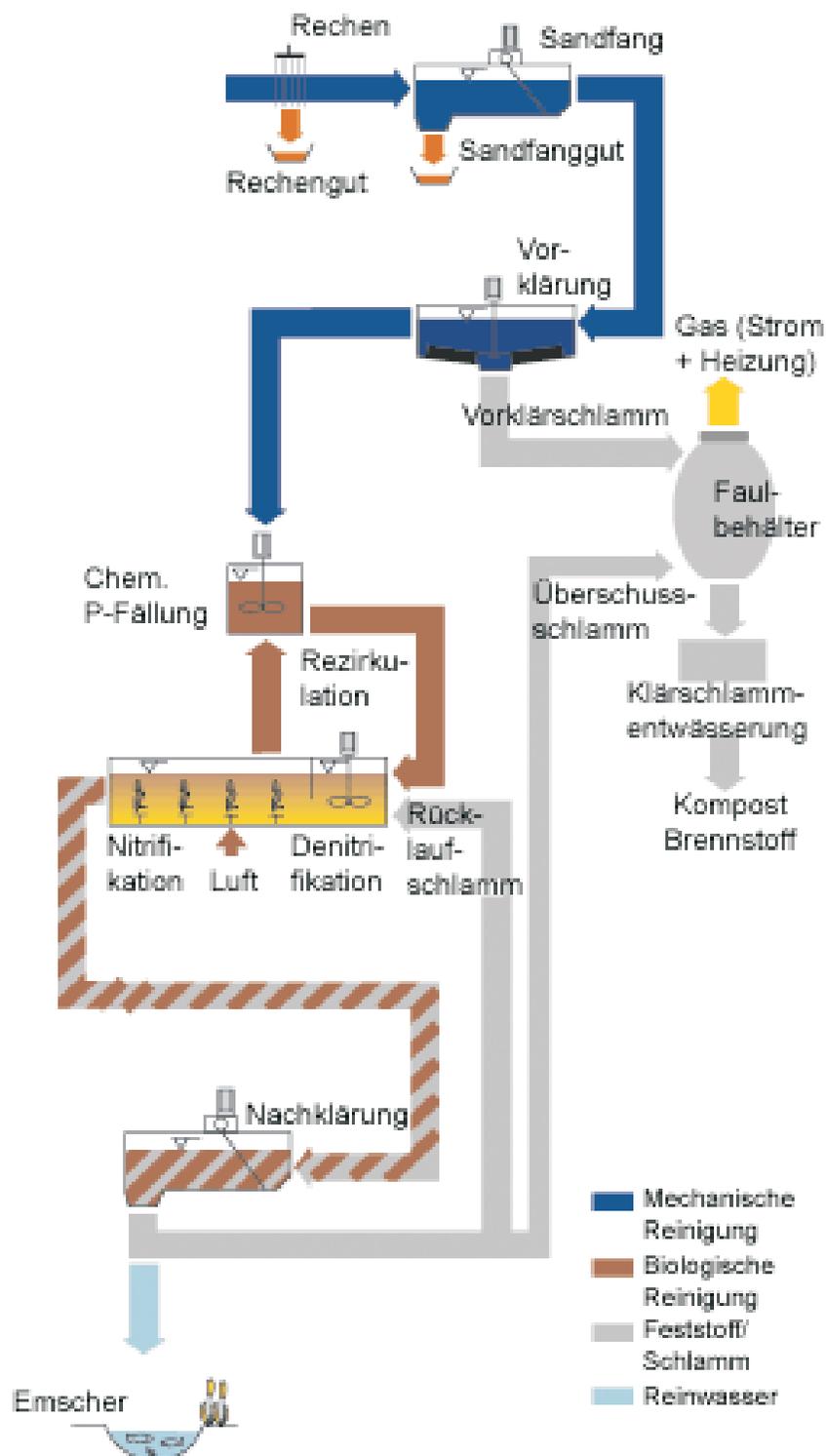
Das Nachklärbecken wird entsprechend dieser verfahrenstechnischen Aufgaben nach ATV131 [1] in funktionale Zonen aufgeteilt. In Abbildung 2.3 sind in Anlehnung an Tabelle 1.1 Seite 3 diesen Zonen die Konzentrationsverteilung und die damit einhergehenden Sinkgeschwindigkeitsregime in der Vertikalen zugeordnet. Die von Malcherek, 2003 [49] vorgeschlagene Klassifizierung für Ästuarsedimente trifft bei kleinen Konzentrationen in den beiden oberen Schichten auch auf belebten Schlamm zu. Der Übergang vom newtonschen Fluid zu einem bingham-plastischen Material tritt bei belebtem Schlamm jedoch schon bei im Vergleich zu Sedimenten sehr viel kleineren Konzentrationen ein. Hierfür ist die oben beschriebene Flockenstruktur und -zusammensetzung verantwortlich.

Die Strömungssituation im Nachklärbecken, auf die in Kapitel 6.1 näher eingegangen wird, wird baulich so gestaltet, dass die Bildung von Flocken und netzwerkartigen Strukturen unterstützt wird. Sie soll gerade so turbulent sein, dass sie die Flokkulation unterstützt und die entstandenen Strukturen nicht zerstört. In Bereichen mit geringen Konzentrationen werden die Partikel mit der Hauptströmung transportiert. Sie sind klein und freibeweglich, so dass sich die Suspension wie ein newtonsches Fluid verhält. Mit zunehmender Konzentration flokkulieren die Partikel untereinander und ihre Sinkgeschwindigkeit erhöht sich. Sie beeinflussen den turbulenten Mischungsprozess der Suspension. Ab einer Konzentration von 1 - 2 g/l behindern sich die Partikel gegenseitig und ihre Sinkgeschwindigkeit nimmt wieder ab. Die Viskosität wächst in diesem Bereich kontinuierlich an. Mit Erreichen der Gelierungskonzentration bildet sich ein Schlammbett, das weitestgehend unabhängig vom Fließgeschehen in der Wassersäule bleibt. Die Oberfläche des Schlammbetts ist scharf konturiert und wird als Schlamm Spiegel bezeichnet. Mit zunehmender Konsolidierung ändert sich das Fließverhalten des Schlammbetts zu bingham-plastisch, d.h., bei Überschreitung einer kritischen Spannung, z.B. durch Bodengefälle oder Räumler, kann das Schlammbett als Scherströmung in den Schlammtrichter als tiefstem Punkt gleiten. Der Zusammenhang zwischen Schubspannungen innerhalb der Suspension und den Formänderungsgeschwindigkeiten ist konzentrationsabhängig. Zusammenfassend ist der verfahrenstechnisch zentrale Feststoffhaushalt im Nachklärbecken allein aus strömungsmechanischer Sichtweise bereits durch eine Vielzahl von physikalischen Prozessen geprägt, die untereinander in Wechselwirkung stehen. Wesentliche Teilprozesse sind in der nachfolgenden Tabelle aufgeführt.

Prozess	Ursache
Absetzen und Mischen	Schwerkraft und turbulente Wasserbewegung
Flokkulation	kohäsive Partikeleigenschaften und Hydrodynamik → Änderung der Sinkgeschwindigkeit
Deposition	Ablagerung der Sedimente am Schlamm Spiegel
Aufwirbelung	beschleunigte Bewegung wirbelt bereits abgesetzte Partikel wieder auf → kohärente Strukturen
Gelierung	deponierende Partikel bilden eine netzwerkartige Struktur
Konsolidierung	Herauspressen des Porenwassers aus deponierten Partikeln
Verflüssigung	Aufbrechen der entstandenen Verbindungen zwischen deponierten Partikeln
Erosion	Zerstörung bereits konsolidierter Strukturen

Tabelle 2.2: Physikalische Prozesse im Nachklärbecken

Diese physikalischen Prozesse gilt es im Hinblick auf die anschließende numerische Modellierung mathematisch möglichst exakt zu formulieren und in die Erhaltungsgleichungen der Hydrodynamik zu integrieren. Die chemischen und biologischen Prozesse und Eigenschaften des belebten Schlammes werden in dieser Arbeit parametrisiert und in ihrer physikalischen Wirkung (z.B. als Änderung des Flockendurchmessers) modelliert.



© MZ EGLV

Abbildung 2.1: Fließschema einer Kläranlage; URL: www.emscher-genossenschaft.de

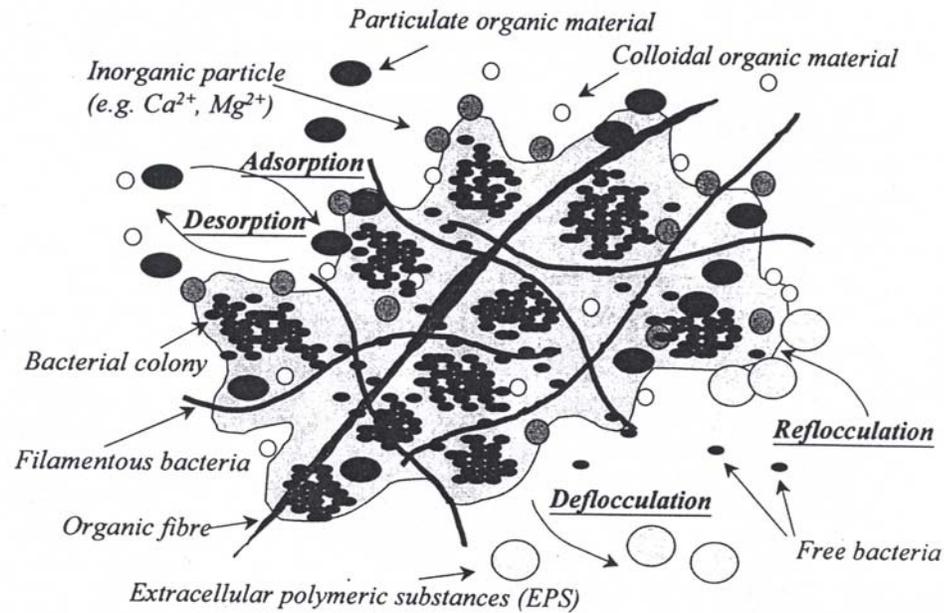


Abbildung 2.2: Aufbau einer Flocke des belebten Schlammes (Wilén, 1999 [75])

	Konzentration	Fließverhalten	Absetzregime
▼			
Klarwasser- und Rückstromzone	$\sim 20 \text{ mg/l}$	Newtonsches Fluid	Freies Absinken
Trenn- und Rückstromzone	$>1 \text{ g/l}$	Newtonsches Fluid mit erhöhter Viskosität	Behindertes Absinken
Dichtestrom- und Speicherzone	$>10 \text{ g/l}$	pseudoplastisches Fluid	Übergangsbereich
Eindick- und Räumzone		bingham-plastisches Fluid	Konsolidierungsbereich

Abbildung 2.3: Schematisierte Bereiche eines Nachklärbeckens

2.2 Die Flockendynamik des belebten Schlamm

Das Gemisch aus Abwasser und belebtem Schlamm kann als kolloidales ¹ System betrachtet werden. Es besteht aus feinstverteilten biologischen Makromolekülen (Schlammflocken), die in einer niedermolekularen Flüssigkeit (Abwasser) eingebettet sind. Dieses **Fest/Flüssig**-System wird hier gemäß Westphal, 1939 [74] als Suspension bezeichnet ². Die Struktur der Makromoleküle ist bezüglich Zusammensetzung und Größe heterogen, so dass das System als polydisperse Suspension bezeichnet wird.

Das System ist thermodynamisch instabil und neigt zur Phasentrennung durch Koagulation. Der Koagulationsprozess läuft in zwei Schritten ab. Die **chemische** Zusammensetzung der Suspension bestimmt den Entstabilisierungsvorgang und die sich einstellenden **physikalischen** Vorgänge Transport und Kontakt der entstabilisierten Kolloide. Es kommt zur Ausflockung der Kolloide in Form gelartiger, fraktaler oder kristalliner Strukturen. Ihr Elastizitätsmodul ist etwa zehn Größenordnungen kleiner als der von typischen Festkörpern. Sie reagieren daher empfindlich auf äußere Störungen und Zerbrechen. Eine Reflokkulation kann u.U. sehr lange dauern oder die Zerstörung irreversibel sein. Form und Struktur der Aggregate und ihre Wechselwirkungen sind von den Milieubedingungen abhängig.

Kolloide unterliegen den van-der-Waalschen-Anziehungskräften, die bei kleinen Partikelabständen zur Entstabilisierung der Suspension führen. In den meisten Systemen sind die van-der-Waalschen Kräfte jedoch nicht die einzigen wirkenden Kräfte, so dass die Entstabilisierung unterstützt oder gehemmt wird.

Eine Stabilisierung des Systems kann durch sterische Abstoßung oder elektrostatisch erfolgen. Bei der sterischen Stabilisation lagern sich Polymere an den Teilchenoberflächen an, so dass jedes Teilchen von einer „Polymerbürste“ eingeschlossen ist. Nähern sich jetzt zwei Partikel, dann müssen zunächst die Polymerschichten überlappen, bevor die Partikel sich berühren können. Die Partikel stoßen sich über kurze Entfernungen entropisch ab.

Die elektrostatische Stabilisierung von Kolloiden in polaren Lösungsmitteln, wie z.B. Wasser, beruht darauf, dass die Partikel durch Dissoziation ihrer funktionalen Gruppen oder Anlagerung von Polyelektrolyten elektrisch aufgeladen werden, also Makroionen entstehen, die sich gegenseitig mit großer Reichweite abstoßen. Die Dissoziation erfolgt durch positiv geladene Ionen aus dem Trägerfluid, die sich an die das Partikel umgebende negativ geladene Doppelschicht anlagern. Die damit verbundene Änderung der Größe des Oberflächenpotentials richtet sich nach dem Kationengehalt des Trägerfluids.

Die Anlagerung von Polyelektrolyten, z.B. hochmolekularen Polymeren, an den Zelloberflächen läßt ein Ladungs mosaik auf der Partikeloberfläche entstehen, so dass die Partikel in elektrostatische Wechselwirkung treten.

Die Neigung der Suspension zur Entstabilisierung kann durch permanenten Partikelkontakt infolge molekularer Brücken oder durch Verminderung der elektrostatischen absto-

¹Zusammengesetztes Wort aus dem Griechischen, das wörtlich genommen Substanzen bezeichnet, die so trüb wie Leim aussehen.

²Dispersion bezeichnet den Oberbegriff für alle flüssigen Systeme, die aus zwei oder mehr Materialien zusammengesetzt sind

benden Kräfte verstärkt werden. Molekulare Brücken entstehen infolge sich anlagernder in die Lösung hineinragender Polymerketten, die die diffusive Ionenschicht eines anderen Teilchens überspannen. Zusätzlich zu diesen chemischen Brücken entstehen Bindungen durch das Verknäulen der herausragenden Molekülketten einzelner Flocken. Die Rolle des Polymers für die Systemstabilität hängt von seiner Molmasse, seiner Ladung und dem Belegungsgrad der Kolloide ab.

Die Reichweite der elektrostatischen Abstoßung kann durch Anwesenheit von Salzionen und durch Hydrolyse mehrwertiger Metallionen, wie z.B. bei der Phosphatfällung durch Metallsalze, verringert werden.

Initiiert wird der Flockungsvorgang durch Hydrolyse oder Polymerisation der entstabilisierend wirkenden Suspensionsbestandteile und der anschließenden Adsorption an der Kolloidoberfläche. Tabelle 2.3 faßt die Vorgänge bei Entstabilisierung und Stabilisierung zusammen.

Entstabilisierung	Stabilisierung
<ul style="list-style-type: none"> • Verminderung der elektrostatischen abstoßenden Kräfte <ul style="list-style-type: none"> → Kompression der diffusen Doppelschicht → Änderung der Oberflächenladung • molekulare Brücken 	<ul style="list-style-type: none"> • Vergrößerung der elektrostatisch abstoßenden Kräfte <ul style="list-style-type: none"> → Dissoziation → Anlagerung von Polyelektrolyten • sterische Abstoßung

Tabelle 2.3: Entstabilisierungs- und Stabilisierungsprozeß

Mit der nach ihren Begründern benannten **DLVO-Theorie**³ für kolloidale Lösungen hoher Verdünnung wird die Stabilität der Suspension aus dem Wechselwirkungspotential, der Summe aus elektrostatischen und -dynamischen Kräften bestimmt (Schütz, 1999 [60] und Homeyer, 1999 [26]). Die Größe der elektrostatischen Abstoßungskräfte kann aus dem messbaren Zetapotential berechnet werden. Die Größe der elektrodynamischen Kräfte hängt von dem Partikelabstand, der Partikelgeometrie und der Hydrophobizität der Partikel ab. Die Koagulation von Partikeln tritt dann ein, wenn sich der Wert der Gesamtenergie Null nähert oder die Teilchen über genügend kinetische Energie (z.B. Brownsche Molekularbewegung oder Strömung) verfügen, um die Energiebarriere überwinden zu können. Die elektrodynamischen Kräfte werden dann größer als die elektrostatischen. Diese Theorie ist auf die komplexe Flockendynamik von belebtem Schlamm anwendbar, auch wenn Prozesse wie sterische Abstoßung unberücksichtigt bleiben (Zita und Hermansson, 1994 [79]).

Überlagert wird der Koagulationsprozess von der strömungsmechanischen Situation des Systems. Diese unterstützt die Flockenbildung, indem sie kinetische Energie liefert, hemmt sie aber auch, indem sie bereits entstandene Strukturen zerstört. In einer turbulenten Strömung, wie sie im Nachklärbecken vorliegt, verursachen die Geschwindigkeitsfluktuationen Scher-, Zug- und Druckspannungen, die zum Zerschneiden einer Flocke

³Theorie nach Derjaguin, Landau, Verwey und Overbeek (Verwey et al., 1948 [70])

führen können. Die für belebten Schlamm typische netzwerkartige Flockenstruktur mit angelagerten Bakterien und Makromolekülen lässt unterschiedliche Arten des Flockenzerbrechens zu. So kann die Erosion der Flockenoberfläche sowohl durch Abscheren einzelner Partikel, als auch Mikrofloken erfolgen. Darüberhinaus kann das gesamte Netzwerk in mehrere Teile zerbrechen oder vollständig zerstört werden. Entscheidend für die Art des Zerbrechens ist das Verhältnis der Größe der Bindungskräfte innerhalb der Flocke und der angreifenden Kräfte. Die Bindungskräfte hängen von biochemischen Faktoren ab, die nur schwer bestimmbar sind. Die Art der maßgebenden Bruchspannung wird vom Verhältnis der Flocken- zur Wirbelgröße, das das Strömungsregime aus Sicht der Flocke und damit Größe und Richtung der Kraft bestimmt, diktiert.

Für Kollisionen von Partikeln und die Entstehung von Schubspannungen spielen physikalische Prozesse die Hauptrolle, während Entstabilisierung und Stabilisierung biochemischen Einflüssen unterliegen. Die Flockengröße ist nach oben hin begrenzt, und es stellt sich ein dynamisches Gleichgewicht zwischen Flokkulation und Flockenzerbrechen ein.

Der belebte Schlamm als **Biokolloid** und damit auch das Gesamtsystem unterliegen neben chemischen auch biologischen Einflüssen. Unterschiedliche Polymere entstehen durch Lysis oder durch Metabolismus der Bakterien. Ebenfalls eine Rolle für die Flokkulation spielen hydrophobe Interaktionen zwischen Bakterien. Sind Bakterien hydrophob ordnen sie sich mit Bakterien innerhalb anderer Flocken so an, dass sie möglichst wenig Kontakt mit dem Wasser haben und tragen so zur Destabilisierung des Systems bei. Darüberhinaus ist die Hydrophobizität der Zelloberflächen für die Adhäsion von Bakterien und Makromolekülen an Flocken mitverantwortlich. Untersuchungen hinsichtlich des Einflusses von Substrat- und Milieubedingungen auf die Hydrophobierung von Zelloberflächen sowie die Produktion von Polymeren sind erforderlich. Sie bestimmen die Adsorptionsfähigkeit von Substraten, deren interzelluläre Stabilität und die Flockenstruktur und -natur. Sie spielen nicht nur für die Sedimentation im Nachklärbecken sondern auch für den Nitrat- und Phosphatabbau im Belebungsbecken eine entscheidende Rolle (Lemmer et al., 1996 [44]).

Eine Besiedelung der Flocken mit Protozoen begünstigt die Flockenbildung, da diese flokkulierende Polymere ausscheiden, die Bakterien zu chemisch-induzierten Verteidigungsmechanismen, wie z.B. die Produktion von Polymeren, anregen und fraßresistente zumeist kompakte Wuchsformen entstehen lassen.

Die Konzentration an gelöstem Sauerstoff beeinflusst die Produktion von extrazellulären Polymeren und hemmt das Eukariontenwachstum ⁴. Diese binden freie Bakterien und tragen so zur Flokkulation bei. Die Temperatur der Suspension bestimmt über die Stoffwechselaktivität der Biozönose die Produktion extrazellulärer Polymeren und nimmt so ebenfalls Einfluss auf die Flockendynamik.

Zusammenfassend sind die wichtigsten Prozesse der Flockendynamik in Tabelle 2.4 gegenübergestellt.

Die strukturellen Änderungen der Flocken bedingen eine Änderung der physikalischen und damit auch der sedimentologischen Eigenschaften Porosität, Dichte und Partikeldurchmesser. Ihre Porosität wächst mit zunehmender Größe (Andreadakis, 1993 [3])

⁴Mehrzeller

Flockenbildung	Flockenzerstörung	
Kollisionen infolge	Spannungen infolge	
<ul style="list-style-type: none"> • Strömungsfeld • Brownsche Molekularbewegung • Differentielles Absinken 	<ul style="list-style-type: none"> • Kollisionen → Strömungsfeld → Differentielles Absinken • Geschwindigkeitsgradienten an der Flockenoberfläche 	physikalisch
Entstabilisierung	Stabilisierung	
<ul style="list-style-type: none"> • Extrazelluläre Polymere • Ioneneffekte • Flockenzusammensetzung 	<ul style="list-style-type: none"> • Oberflächenpotential • Ioneneffekte • Flockenzusammensetzung • Sauerstoffkonzentration 	chemisch u. biologisch

Tabelle 2.4: Prozesse der Flockendynamik

und ist abhängig von der Art des Aggregationsprozesses (Kapitel 4.3 50). Experimentelle Untersuchungen (Li und Ganczarzyk, 1987 [46]) zeigen, dass die Änderung der Porosität mit der größten räumlichen Flockenausdehnung einhergeht und in zwei Stufen verläuft. Bis zu einer maximalen Ausdehnung von 0.2 mm steigt die Porosität mit zunehmender Flockengröße drastisch an. Für Flocken größer als 0.2 mm steigt sie nur noch sehr langsam. Die Verteilung der Poren ist wegen der einsetzenden Durchströmung der Flocke von entscheidender Bedeutung für die Größe der Sinkgeschwindigkeit (Johnson et al., 1996 [34]) die sich aus der Bilanz der auf die Flocke wirkenden Kräfte ergibt (Kapitel 3.3 Seite 31). Sie kann ein bis zwei Größenordnungen höher liegen als die nach der Stokeschen Formel berechneten Werte für undurchlässige Flocken derselben Größe und Masse.

Die Flockendichte ist von der Art des Aggregationsprozesses und von der Höhe des Anteils an anorganischen Material abhängig, ist also nicht konstant. Ihre messtechnische Bestimmung ist relativ schwierig und erfolgt meist mit dem Sinkgeschwindigkeitsansatz nach Stokes, dessen Anwendung u.a. wegen der unregelmäßigen Flockenform jedoch keine befriedigenden Ergebnisse liefert (Li und Ganczarzyk, 1987 [46] und Andreadakis, 1993 [3]). In der Literatur finden sich eine Reihe von empirischen Ansätzen, die die Flockendichte, z.B. aus Sedimenttrockendichte und Massenkonzentration, errechnen.

In situ Beobachtungen zeigen sehr heterogene Flockenformen von rund bis unregelmäßig mit einer deutlichen Zweiteilung. Flocken, deren Durchmesser kleiner als $10\mu\text{m}$ ist (Mikroflocken), sind bezüglich der Partikelanzahl exponentiell verteilt, während größere Flocken (Makroflocken) der logarithmischen Normalverteilung genügen (Wilén, 1999

[75]). Mikroflokkeln flokkulieren untereinander in der Regel nicht. Die Änderung ihrer sedimentologischen Eigenschaften ist daher minimal. Mikroflokkeln sind rund und kompakt, werden wie passive Tracer von der fluiden Phase mitbewegt und können während ihrer Aufenthaltszeit im Nachklärbecken nicht sedimentieren. Ihre Elimination erfolgt durch Flokkulation mit Makroflokkeln und durch die Filterwirkung des sich absetzenden belebten Schlamms. Makroflokkeln ändern ihre sedimentologischen Eigenschaften aufgrund ihrer Flockendynamik, die für die Elimination der Mikroorganismen und Schwebstoffe als stofflicher Belastungsquelle unbedingt erforderlich ist.

Die Interaktionen der Flokkeln untereinander und mit den Abwasserinhaltsstoffen, die Aktivitäten der Bakterien und Protozoen führen zu einer ständigen Änderung der Flockeneigenschaften nach unterschiedlichen Zeitskalen. Bakterienpopulation, Flockengröße und -struktur ändern sich im Gegensatz zur Oberflächenchemie nur langsam. Wie die verschiedenen, am Abbau beteiligten Arten zusammenwirken und wie die komplexen Strukturen mikrobieller Aggregate mit der Aktivität der strukturbildenden Mikroorganismen verknüpft sind, ist noch ungeklärt.

Für das Mehrphasenmodell bedeutet dies, dass die Änderungen der sedimentologischen Partikeleigenschaften Form, Dichte, Durchmesser, Porosität infolge physikalischer Vorgänge modelliert werden sollten. Sie bestimmen die Wechselwirkungen zwischen den Phasen. Änderungen der Partikeleigenschaften infolge der chemischen und biologischen Suspensionszusammensetzung können zum gegenwärtigen Zeitpunkt allenfalls parametrisiert werden.

2.2.1 Modelle der Flockendynamik

Es seien hier nur die grundlegenden Theorien umrissen. Auflistungen der daraus entstandenen Modelle finden sich z.B. in Wilen, 1999 [75] und Schütz, 1999 [60].

Die 1917 von v. Schmoluchowski [59] aufgestellte Theorie der Koagulationskinetik kolloidaler Lösungen hat bis heute Gültigkeit und dient den meisten Modellen als Grundlage. Die Koagulation wird als Diffusionsprozess beschrieben, so dass die Modellierung der Flockendynamik durch Lösen der Advektions-Diffusions-Gleichung der Flokkelanzahl pro Volumeneinheit N_p beschrieben werden kann (Friedlander, 1977 [20]):

$$\frac{\partial N_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}N_p) = \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla N_p) + f(N_p) \quad (2.1)$$

Die Quell- und Senkterme $f(N_p)$ beschreiben die Wechselwirkungen der einzelnen Teilchen untereinander und werden über Wechselwirkungskinetiken bestimmt. Für die Kollisions- und Bruchmechanismen Brownsche Molekularbewegung, differentielles Absinken und turbulente Geschwindigkeitsgradienten werden Frequenzen berechnet, wobei nur binäre Kollisionen zugelassen sind. Die Effektivität von Flokkulation und Flokkelzerbrechen wird über empirische Koeffizienten berücksichtigt. Änderungen der Strömung infolge der Kollisionen und Kräfte, die bei Annäherung der Partikel entstehen, werden vernachlässigt. Die Bahnlinie der Partikel bleibt von der Kollision unbeeinflusst und ist

eine Gerade.

Ein auf dieser Theorie entstandenes Modell der Flockendynamik von belebtem Schlamm stammt z.B. von Parker et al. 1971 [53]. In Abhängigkeit von Sedimentmassenkonzentration und absolutem Geschwindigkeitsgradienten wird die Anzahl der Primärpartikel berechnet, die wegen der Trübung des Ablaufes von praxisrelevanter Bedeutung ist.

Mikkelsen et al., 1996 [50] verwenden ein ähnliches Modell und bestimmt das Verhältnis der Koeffizienten aus der Interaktionsenergie (dem zweiten Energieminimum) mit Hilfe der thermodynamischen Erhaltungsgleichungen und erhält so ein Maß für die Adsorptionsfähigkeit der Flocken.

Die fraktale Geometrie wird für die Wechselwirkungskinetik poröser Flocken verwendet. Sie betrachtet Flocken kohäsiver Sedimente als fraktale selbstähnliche Strukturen, d.h. der strukturelle Aufbau ist bis in die Ebene der primären Partikel identisch. Masse und Aggregatgröße sind proportional und bilden bei logarithmischem Auftrag eine Gerade. Die Steigung der Gerade wird als fraktale Dimension bezeichnet. Sie ist ein Maß für die Flockenstruktur. Bilden sich die Aggregate aus Flocken, wird die fraktale Dimension kleiner, lagern sich einzelne Partikel an ein Aggregat an, wird sie größer, d.h. je kompakter die Flocke desto größer die fraktale Dimension.

Für die Flokkulation wird neben den möglichen Flokkulationspartnern, Flocke und Primärpartikel, zwischen zwei Aggregationsmodellen unterschieden:

- Diffusion-Limited-Aggregation (DLA)
Die Aggregatgröße wird bei einer Koagulationswahrscheinlichkeit von eins (keine Partikelabstoßung) durch den Diffusionsprozess limitiert
- Reaction-Limited-Aggregation (RLA)
Die Koagulationswahrscheinlichkeit bestimmt die Aggregatgröße (Partikel stoßen einander ab).

Partikelmodelle liefern Werte für die fraktale Dimension unter den oben aufgeführten Bedingungen. Im Nachklärbecken läuft der Aggregationsprozess wegen des hohen organischen Anteils als DLA ab (Weitz et al., 1985 [73]). In den unteren Schichten bilden in erster Linie Flocken neue Aggregate. Im Einschichtungsgebiet des Jets reagieren Partikel und Flocken miteinander.

Die Populationstheorie stellt Populationsbilanzen auf, die die zeitliche und örtliche Änderung der Eigenschaftsverteilung der Partikel als Funktion der vorliegenden Prozessbedingungen beschreiben. Die strömungsmechanischen Größen der dispersen Phase sind Funktionen der Eigenschaftskonvektion. Man erhält den Zustand eines Partikels als Funktion von Ort, Zeit und problemangepassten Eigenschaften z.B. Durchmesser, Masse usw. Aus der Gleichung der Flockendynamik 2.1 wird mit dieser Methode eine partielle Integro-Differentialgleichung, die die zeitliche Änderung einer Eigenschaftsverteilungsdichtefunktion in Abhängigkeit von Strömung und Wechselwirkungskinetik beschreibt. Diese werden mit der sogenannten Momentenmethode in partielle Differentialgleichungen für die Momente der Eigenschaftsverteilung überführt und letztere dann rekonstruiert (Schütz, 1999 [60]).

Winterwerp, 1999 [77] kombiniert Ansätze aus der Kolloidchemie und der fraktalen Be-

trachtungsweise und entwickelt daraus ein Modell für den Einsatz in der Ästuardynamik. Dieses Modell wird in ähnlicher Form für die mehrphasige Simulation der Flockendynamik von belebtem Schlamm verwendet. Eine ausführliche Darstellung findet sich daher in Kapitel 4.3.

Kapitel 3

Physikalische Grundlagen der Mehrphasenmodellierung

3.1 Modellvorstellung

Modelling is still an art, but you are a better artist when you understand the physics better. ¹

Unter einem Mehrphasensystem versteht man ein Konglomerat von makroskopischen, kontinuierlichen und beweglichen Einphasenbereichen, die durch bewegliche Phasengrenzflächen getrennt werden. An den Phasengrenzflächen sind die Zustandsgrößen diskontinuierlich. Phasen sind physikalisch verschiedene und mechanisch trennbare Teile des Systems, die bezüglich ihrer physikalischen Eigenschaften homogen sind.

Die Erhaltungsgleichungen eines Mehrphasensystems ergeben sich aus der Anwendung der klassischen Prinzipien der Physik auf die einzelnen Phasen und ihre Interaktionen. Durch eine Mittelung über die Variabilitäten des Systems erhält man eine idealisierte Form des Systems, die die örtlich momentane Beschreibung des Strömungssystems ersetzt. Die Mittelung kann dabei sowohl räumlich und zeitlich als auch statistisch, d.h. über ein Ensemble identischer Experimente, und gemäß des gewünschten physikalischen Konzepts (Euler oder Lagrange) erfolgen. Die Schließung des entstehenden Gleichungssystems erfolgt durch kontinuumsmechanische oder kinetische Ansätze, die die Phasenwechselwirkungen und die speziellen Eigenschaften jeder Phase beschreiben.

Die vorhergehende Charakterisierung des Gemisches im Nachklärbecken als Suspension legt eine zweiphasige Unterteilung in belebten Schlamm und Abwasser nahe, wobei der belebte Schlamm bei kleinen Konzentrationen aus einzelnen Flocken besteht, also in diskreter Form vorliegt. Die Flockendynamik und das Anwachsen der Konzentration führt dazu, dass sich die physikalischen Eigenschaften des belebten Schlammes verändern und dieser letztendlich eine zusammenhängende Struktur bildet. Die diskrete Strömungsstruktur wird durch eine kontinuierliche ersetzt. Das Abwasser (Trägerfluid)

¹J.C. Winterwerp, Delft 2000

kann durch ein sich in seinen Eigenschaften nicht änderndes Kontinuum idealisiert werden. Es handelt sich um eine Flüssigkeit-Feststoff-Strömung mit sich ändernden Suspensionseigenschaften.

Die Modellierung einer dispersen Mehrphasenströmung kann durch Euler- und Lagrangeverfahren, sogenannte Partikelmethode, oder deren Kombination erfolgen. Die Lagrangeverfahren und die kombinierten Verfahren kommen zumindest für die Partikelphase ohne Informationsverlust durch Mittelung aus. Letzere sind aber für höhere Phasenanteile i.d.R. nicht mehr anwendbar und berücksichtigen sich ändernde Partikeleigenschaften nicht. Erstere stecken noch in den Kinderschuhen und weisen insbesondere hinsichtlich der Modellierung der kontinuierlichen Phase noch Unsicherheiten auf. Aus diesen Gründen wird in dieser Arbeit ein Euler-Modell gewählt. Beide Phasen werden als Kontinua idealisiert und den sich ändernden Eigenschaften des belebten Schlammes durch spezielle granulare Ansätze in den Schließungsansätzen Rechnung getragen. Es werden dadurch keine einzelnen Partikel betrachtet, sondern die über ein Rechelement gemittelten Eigenschaften der diskreten Phase. Die Partikelverteilung ist in einem Rechelement konstant.

3.2 Kontinuumsmechanische Erhaltungsgleichungen

Mit Hilfe der kontinuumsmechanischen Betrachtungsweise können Erhaltungsgleichungen für jede Phase auf der **mikroskopischen** Ebene aufgestellt werden.

Erhaltungsgleichung:

$$\frac{\partial \varrho \Psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \Psi \mathbf{u}) = \nabla \cdot \mathbf{J} + \varrho \Phi \quad (3.1)$$

Durch die Interaktionen der Phasen finden Impuls- und Energieaustauschprozesse an den Grenzflächen statt. Hier sind die Feldgrößen diskontinuierlich, aber der Erhalt von Masse und Impuls muss gewährleistet bleiben, was in den Sprungbedingungen mathematisch formuliert wird. Auch Spannungs- und Energieflüsse werden beeinflusst, was die Erhaltungsgleichungen ebenfalls repräsentieren müssen. Auf energetische Betrachtungen wird im Rahmen dieser Arbeit jedoch verzichtet. Sie seien hier nur der Vollständigkeit halber genannt.

Sprungbedingung:

$$((\varrho \Psi (\mathbf{u} - \mathbf{u}_i) + \mathbf{J})) \cdot \mathbf{n} = m \quad (3.2)$$

- mit ϱ : Dichte
 Ψ : Erhaltungsgröße
 \mathbf{u} : Geschwindigkeit
 \mathbf{J} : molekularer oder diffusiver fluss
 Φ : Quelledichte der Erhaltungsgröße
 m : Grenzflächenquelle der Erhaltungsgröße

Die Erhaltungsgrößen mit den zugehörigen Quell- und flusstermen sind in Tabelle 3.1 zusammengestellt.

Erhaltung von	Ψ	\mathbf{J}	Φ	m
Masse	1	0	0	0
Impuls	\mathbf{u}	\mathbf{T}	\mathbf{f}	\mathbf{m}_i^σ
Energie	e	$\mathbf{T} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{q}$	$\mathbf{f} \cdot \mathbf{u} + r$	ϵ_i^σ

Tabelle 3.1: Variablen der Erhaltungsgleichung und Sprungbedingung

mit \mathbf{T} : Spannungstensor
 \mathbf{f} : Volumenkraftdichte
 \mathbf{m}_i^σ : Spannungsquelle an der Grenzfläche
 e : Energie
 \mathbf{q} : Wärmefluss
 r : Wärmequelle
 ϵ_i^σ : Energiequelle an der Grenzfläche

Diese allgemeinen jede Phase exakt beschreibenden Erhaltungsgleichungen und Sprungbedingungen werden für die gewünschte **makroskopische** Betrachtungsweise des Systems mit der charakteristischen Funktion $X_k(\mathbf{x}, t; \Omega)$ multipliziert und anschließend gemittelt. Die charakteristische Funktion ist ein Indikator für die betrachtete Phase und ist folgendermaßen definiert:

$$X_k(\mathbf{x}, t; \Omega) = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} \in k \text{ in } \Omega \\ 0 & \text{in jedem anderen Fall} \end{cases}$$

Die Erhaltungsgleichungen für die Strömungsgrößen erhalten bei Mittelung über ein Ensemble folgende Form (ausführliche Herleitungen liefern z.B. in Drew und Passman, 1998 [14] und Greimann et al., 1999 [25]).

Massenerhaltung:

$$\frac{\partial \overline{X_k \varrho}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{X_k \varrho \mathbf{u}} = \overline{\varrho(\mathbf{u} - \mathbf{u}_i) \cdot \nabla X_k} \quad (3.3)$$

Impulserhaltung:

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{\partial \overline{X_k \varrho \mathbf{u}}}{\partial t}}_I + \underbrace{\nabla \cdot \overline{X_k \varrho \mathbf{u} \mathbf{u}}}_{II} &= \underbrace{\overline{\nabla \cdot X_k \mathbf{T}}}_{III} + \underbrace{\overline{X_k \varrho \mathbf{f}}}_{IV} \\ &\quad - \underbrace{\overline{\mathbf{T} \cdot \nabla X_k}}_V + \underbrace{\overline{(\varrho \mathbf{u}(\mathbf{u} - \mathbf{u}_i)) \cdot \nabla X_k}}_{VI} \\ &\quad - \underbrace{\overline{X_k \varrho \mathbf{u}_{tk} \mathbf{u}_{tk}}}_{VII} \end{aligned} \quad (3.4)$$

mit	\mathbf{T}	: Spannungstensor
	\mathbf{u}	: Geschwindigkeit
	\mathbf{f}	: Dichte der äußeren Kräfte
	ϱ	: Materialdichte
	I	: Zeitliche Änderung des Impulses
	II	: advektiver fluss
	III	: Spannungen
	IV	: äußere Kräfte
	V	: molekularer fluss an den Phasengrenzflächen
	VI	: advektiver fluss an den Phasengrenzflächen
	VII	: turbulente Spannungen

Die einzelnen gewichteten und gemittelten Größen werden zu **mittleren** Variablen zusammengefaßt ²

$$\begin{aligned}
 \alpha_k &= \overline{X_k} & \varrho_k &= \frac{\overline{X_k \varrho}}{\alpha_k} \\
 \mathbf{u}_k &= \frac{\overline{X_k \varrho \mathbf{u}}}{\alpha_k \varrho_k} & \mathbf{T}_k &= \frac{\overline{X_k \mathbf{T}}}{\alpha_k} \\
 \mathbf{R}_k &= \frac{\overline{X_k \varrho \mathbf{u}_{tk} \mathbf{u}_{tk}}}{\alpha_k} & \mathbf{M}_k &= -\overline{\mathbf{T} \cdot \nabla X_k} \\
 \Gamma_k &= \overline{\varrho(\mathbf{u} - \mathbf{u}_i) \cdot \nabla X_k} & \mathbf{u}_{ik} \Gamma_k &= \overline{\varrho \mathbf{u}(\mathbf{u} - \mathbf{u}_i) \cdot \nabla X_k} \\
 \mathbf{f}_k &= \frac{\overline{X_k \varrho \mathbf{f}}}{\alpha_k \varrho_k}
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

mit	α_k	: mittlerer Anteil des Vorkommens der Komponente k am Ort \mathbf{x} zur Zeit t
	ϱ_k	: mittlere Dichte der Phase k
	\mathbf{u}_k	: mittlere Geschwindigkeit der Phase k
	\mathbf{T}_k	: mittlerer Spannungstensor innerhalb der Phase k
	\mathbf{R}_k	: turbulente Spannungen innerhalb der Phase k
	\mathbf{M}_k	: mittlerer molekularer fluss an den Grenzflächen (Impulsquelle)
	Γ_k	: mittlerer advektiver fluss an den Grenzflächen (Massenquelle)
	\mathbf{u}_{ik}	: mittlere Geschwindigkeit der Phasengrenzfläche
	\mathbf{f}_k	: mittlere Dichte der äußeren Kräfte

Durch Einsetzen der mittleren Variablen in Gleichungen 3.3 und 3.4, erhält man ein Differentialgleichungssystem für die mittleren Strömungsgrößen. Anzumerken sei hier,

²Die Anwesenheit des Terms ∇X_k ist ein Indikator für die Austauschterme, da er nur an den Grenzflächen einen Wert besitzt.

dass der Reynoldsspannungstensor im Gegensatz zur einphasigen Modellierung auch Geschwindigkeitsfluktuationen enthält, die aus der Bewegung der Grenzflächen entstehen.

Massenerhaltung:

$$\frac{\partial \alpha_k \varrho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \varrho_k \mathbf{u}_k) = \Gamma_k \quad (3.6)$$

Impulserhaltung:

$$\underbrace{\frac{\partial \alpha_k \varrho_k \mathbf{u}_k}{\partial t}}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\alpha_k \varrho_k \mathbf{u}_k \mathbf{u}_k)}_{II} = \underbrace{\nabla \cdot (\alpha_k (\mathbf{T}_k + \mathbf{R}_k))}_{III, VII} + \underbrace{\alpha_k \varrho_k \mathbf{f}_k}_{IV} + \underbrace{\mathbf{M}_k}_V + \underbrace{\mathbf{u}_{ik} \Gamma_k}_{VI} \quad (3.7)$$

Werden die Spannungen in Druck und viskose Spannungen aufgeteilt, erhält man nach Mittelung die vertrautere Form des Spannungstensors.

$$\nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{T}_k) = \nabla (\alpha_k (-p_k \mathbf{E} + \mathbf{P}_k)) \quad (3.8)$$

mit \mathbf{P}_k : viskoser Reibungstensor
 p_k : Druck

Wird auch der Momentenaustausch an der Grenzfläche in Effekte aus dem mittleren Strömungsgeschehen und fluktuierende Anteile aufgeteilt, erhält er folgende gebräuchliche Form (Ishii, 1975 [32]):

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_k &= -\overline{\mathbf{T} \cdot \nabla X_k} = \nabla (\alpha_k p_{ik}) - \alpha_k \nabla p_{ik} - \mathbf{P}_{ik} \nabla \alpha_k + \underbrace{\overline{\mathbf{T}_{tik} \cdot \nabla X_k}}_{\mathbf{M}_{tk}} \\ \mathbf{T}_{tik} &= -\overline{p_{tik} \mathbf{E} + \mathbf{P}_{tik}} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Die analoge Behandlung der Sprungbedingungen liefert die gemittelten Erhaltungsgleichungen an den Grenzflächen:

Massenerhaltung an der Grenzfläche:

$$\sum_{k=1}^n \Gamma_{ik} = 0 \quad (3.10)$$

Impulserhaltung an der Grenzfläche:

$$\sum_{k=1}^n \mathbf{M}_{ik} + \sum_{k=1}^n \mathbf{u}_{ik} \Gamma_k = \overline{\mathbf{m}_i^\sigma} \quad (3.11)$$

mit $\overline{\mathbf{m}_i^\sigma}$: Kräfte infolge der Oberflächenspannung σ

Für ein disperses Zweiphasensystem, wie die Suspension im Nachklärbecken, erhält man unter Einbeziehung obiger Beziehungen folgende Gleichungen für die Erhaltung von Masse und Impuls:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_k \varrho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \varrho_k \mathbf{u}_k) &= \Gamma_k & (3.12) \\
\frac{\partial \alpha_k \varrho_k \mathbf{u}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \varrho_k \mathbf{u}_k \mathbf{u}_k) &= -\nabla \alpha_k (p_k - p_{ik}) - \alpha_k \nabla p_{ik} + \alpha_k \varrho_k \mathbf{g} - \\
&\quad \mathbf{P}_{ik} \nabla \alpha_k + \nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{P}_k - \alpha_k \mathbf{R}_k) + \mathbf{M}_{tk} + \mathbf{u}_{ik} \Gamma_k
\end{aligned}$$

Eine **problemabhängige** Bestimmung der Austauschterme, die von den Transporteigenschaften und den Geschwindigkeitsfluktuationen der Phasen abhängen, stellt die Hauptaufgabe der mehrphasigen Modellierung dar. Informationen, die die Mikrostruktur des System betreffen, werden durch konstitutive Gleichungen und Zustandsgleichungen mit den Feldgrößen in Beziehung gesetzt. Zu formulieren sind die Spannungstensoren innerhalb einer Phase und an den Grenzflächen und die Phaseninteraktion an den Grenzflächen. Anzumerken sei hier, dass durch die Mittelung der Partikeleigenschaften über alle Partikel einer Phase eine quasihomogene Suspension betrachtet wird, d.h. Aussagen über die Partikeleigenschaftsverteilungen können zunächst nicht getroffen werden. Sie müssen über zusätzliche Ansätze oder Modelle, ähnlich einem Turbulenzmodell, in das eigentliche Modell integriert werden (Kapitel 4.3).

Abbildung 3.1 verdeutlicht das generelle Vorgehen der kontinuumsmechanischen Modellbildung.

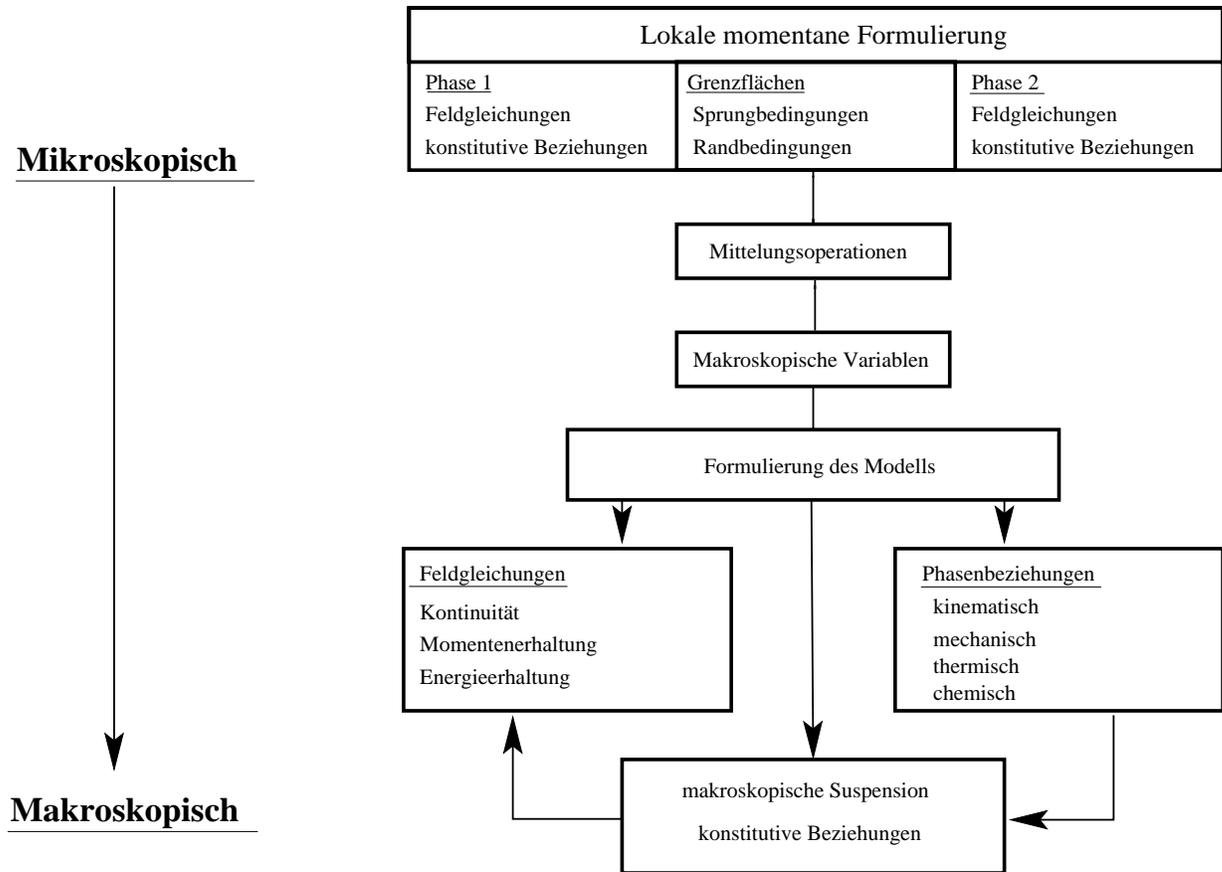


Abbildung 3.1: Konzeptionelle Modellbildung; nach Ishii 1975 [32]

3.2.1 Turbulenz im Mehrphasensystem

In einem dispersen Mehrphasensystem stören die Partikel die Strömung der kontinuierlichen Phase, so dass es strenggenommen keine laminare Mehrphasenströmung geben kann (Crowe et al., 1996 [10]). Die unterschiedlichen Phasen **kontinuierlich** und **dispers** lassen turbulente Geschwindigkeitsfluktuationen durch unterschiedliche Mechanismen entstehen. In der kontinuierlichen Phase sind viskose Effekte maßgebend. In der dispersen Phase überwiegen Trägheits- und Widerstandseffekte. Auch die Partikelgeschichte, d.h. z.B. der Verlauf der Partikelbahnlinie, und Partikelkollisionen können u.U. nicht vernachlässigt werden. Ein Maß für Eigenständigkeit jeder Phase bezüglich der Turbulenzentwicklung ist das Verhältnis der Zeitskalen der Bewegung der dispersen Phase und die Aufenthaltsdauer t_{cp} eines Partikels in einer turbulenten Einheit. Diese werden durch die physikalischen Eigenschaften der dispersen Phase wie z.B. Größe, Dichte und geometrische Form, die die Trägheit der Partikel charakterisieren, und dem Strömungsregime bestimmt.

Zeitskalen, die die Bewegung der **dispersen** Phase charakterisieren, sind die Partikelrelaxationszeit t_p und die Partikelkollisionszeit t_{tp} . Die Partikelrelaxationszeit charakterisiert die Zeit, die ein Partikel benötigt, um der Strömung bzw. den turbulenten Bewegungen der kontinuierlichen Phase zu folgen. Für die Relaxationszeit in einem partikulären Zweiphasensystem schlagen z.B. Greimann und Forrest, 2001 [24] folgende Formulierung vor:

$$t_p = \frac{\rho_p d_p^2 \alpha_c^\beta}{18\mu_c C_D} \quad (3.13)$$

- mit β : Koeffizient für das Kreuzen von Partikelbahnen
 $\beta = f(Re_p)$
 C_D : Widerstandsbeiwert
 $C_D = f(Re_p)$

Die volumetrische Konzentration der kontinuierlichen Phase dient als reziprokes Maß für das sich gegenseitige Beeinflussen der Partikel bei größer werdenden Konzentrationen.

Ist die Partikelkonzentration so hoch, dass Partikelkollisionen berücksichtigt werden müssen, so hat das dämpfenden Einfluss auf die turbulenten Fluidbewegungen. Die Partikelkollisionszeit berechnet sich dabei aus der kinetischen Gastheorie zu:

$$t_{tp} = \frac{d_p \sqrt{\pi}}{24\alpha_d f_0} k_{td}^{-\frac{1}{2}} \quad (3.14)$$

- mit f_0 : Verteilungsfunktion der Partikel als Maß für die Kollisionswahrscheinlichkeit
 k_{td} : granulare Temperatur

Der Zeitmaßstab t_{cp} , der die Aufenthaltszeit eines Partikels in einer turbulenten Einheit bestimmt, berücksichtigt „crossing trajectory effect“ und Kontinuitätseffekte über einen Koeffizienten γ_c (Simonin, 1991 [63]) (Gleichung 4.16 Seite 43).

$$t_{cp} = t_c \gamma_c \quad (3.15)$$

Die charakteristische Zeit der energiereichen Wirbel t_c berechnet sich aus der Turbulenz der fluiden Phase.

$$t_c = \nu_{tc} \sqrt{v_{tc}^2} \quad (3.16)$$

In der Regel ist aufgrund von „slip“ und „crossing trajectory effect“ die Interaktionszeit kleiner als die Lebensdauer der Wirbel (Kallio et al., 1996 [36]).

Abbildung 3.2 zeigt die einzelnen turbulenten Regime in einem Mehrphasensystem.

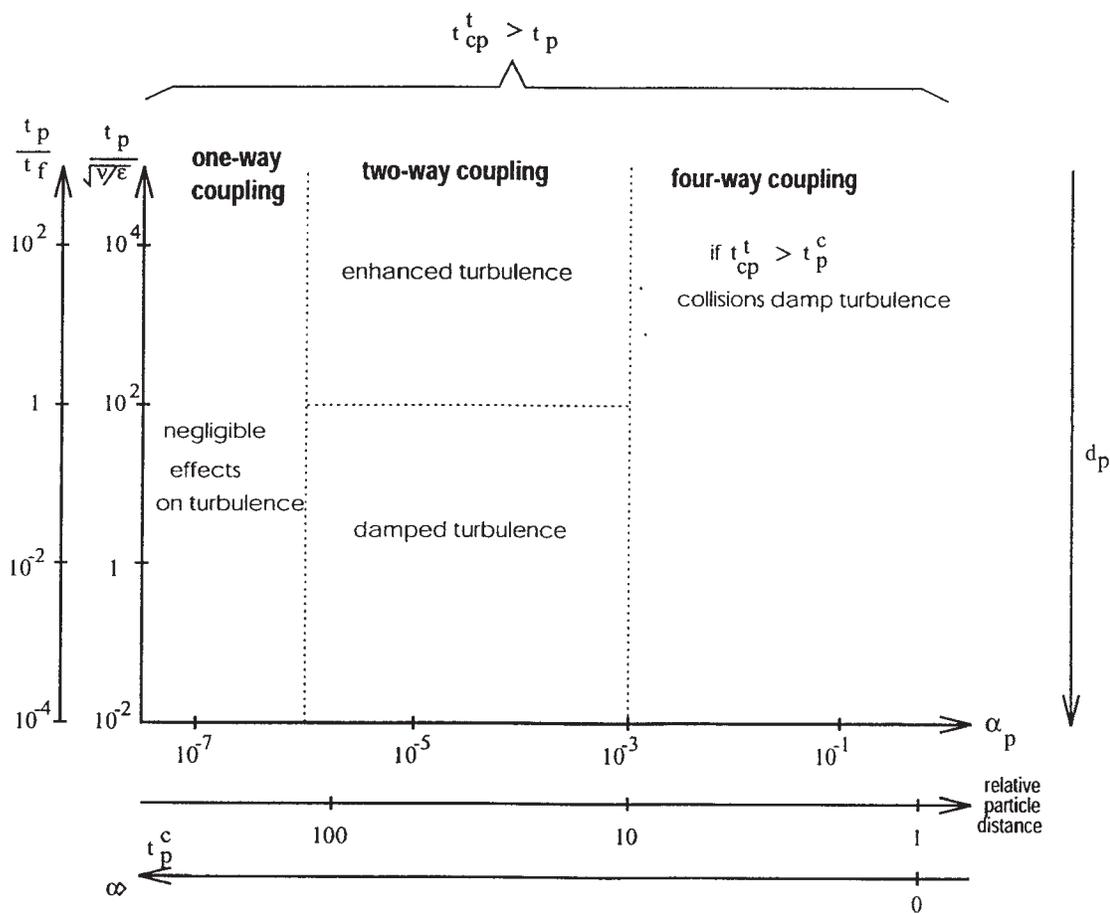


Abbildung 3.2: Turbulenzregime im Mehrphasensystem (Kallio et al., 1996)

Gleichungen 3.13 und 3.14 zeigen, dass die Größe der Partikel im Verhältnis zu der der turbulenten Wirbel für die Art der turbulenten Wechselwirkungen beider Phasen (Abbildung 3.2) und für die Flockendynamik von erheblichem Interesse ist. Partikel in der Größenordnung der Kolmogorovlänge wechseln nach einer bestimmten Aufenthaltszeit

den Wirbel. Größere Partikel dissipieren kleinere Wirbel vollständig oder zerstören deren Struktur (Shirolkar et al., 1996 [61]). Die Turbulenz wird angefacht oder gedämpft. Partikel größer als der maximal möglich Wirbel bleiben von der Turbulenz der kontinuierlichen Phase unbeeinflusst. Ihre Bewegung wird durch die Partikelträgheit und Kollisionen mit anderen Partikeln bzw. festen Rändern dominiert. Neben der Partikelgröße ist die volumetrische Partikelkonzentration ein weiterer wichtiger Parameter für die disperse Phase. Steigt diese an, bestimmen neben den Wechselwirkungen zwischen kontinuierlicher und disperser Phase auch Interaktionen innerhalb der dispersen Phase die fluktuierenden Bewegungen des Gesamtsystems (Crowe et al., 1996 [10]).

Experimentelle Untersuchungen zeigen, dass die Turbulenz der kontinuierlichen Phase hauptsächlich über zwei Mechanismen beeinflusst wird. Wirbelnachlauf hinter großen Partikeln facht die Turbulenz an. Dissipation von Wirbeln, die Partikel beschleunigen und auf diese Weise Energie abgeben, hemmt sie (Tu et al., 1994 [69]). Die turbulente Viskosität wächst mit der Anwesenheit von Partikeln, und auch Geschwindigkeitsgradienten zwischen benachbarten Partikeln, Deformation der dispersen Phase und Effekte aus der Beschleunigung zusätzlicher (virtueller) Masse wirken sich auf die Turbulenz aus (Yuan et al., 1992 [78]). Elghobashi et al., 1993 [16] stellten durch direkte numerische Simulation eine Anisotropie in der Wechselwirkung zwischen Partikeln und Turbulenz fest, die durch Gravitationskräfte hervorgerufen wird.

Zusammengefaßt gibt es zwei Grenzfälle und einen weiten Bereich dazwischen. Ist die Partikelrelaxationszeit klein gegenüber der Interaktionszeit, wird die Partikelbewegung durch die Turbulenz der kontinuierlichen Phase bestimmt. Die Reynoldsspannungen der dispersen Phase können dann aus denen der kontinuierlichen Phase berechnet werden (Drew and Passman, 1998 [14]).

$$\mathbf{R}_{td} \rightarrow \frac{\rho_d}{\rho_c} \mathbf{R}_{tc} \quad (3.17)$$

Im umgekehrten Fall bleibt die Partikelbewegung von der Turbulenz der kontinuierlichen Phase relativ unbeeinflusst, so dass die Reynoldsspannungen der dispersen Phase gegen null gehen.

Im Nachklärbecken zeigt eine Abschätzung der Zeit- und Längenskalen, dass die Art der turbulenten Wechselwirkungen bis hin zum „four-way-coupling“ erfolgen sollte. Das heißt, dass turbulente Schwankungen in beiden Phasen selber, aber auch durch deren Interaktionen entstehen bzw. beeinflusst werden. Im Idealfall sollte demzufolge im numerischen Modell für beide Phasen ein Turbulenzmodell formuliert werden (siehe Kapitel 4.2 Seite 44).

3.2.2 Schließungsbedingungen

Zur Lösung des durch die Gleichungen 3.12 repräsentierten Anfangs-Randwert-Problems muss das Gleichungssystem durch Aufstellen von Zustandsgleichungen und konstitutiven Gleichungen geschlossen werden. Erstere beschreiben den thermodynamischen Zustand einer Phase z.B. über die Dichte, letztere charakterisieren das Verhalten einer Phase und

die Interaktionen der Phasen untereinander. Mehrphasenmodelle benötigen also Ansätze für die Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Phasen, für die Phasenänderung und für Interaktionen innerhalb einer Phase in Abhängigkeit von Transporteigenschaften, Geschwindigkeitsfluktuationen und natürlich dem Phasenanteil, die wiederum voneinander abhängig sein können.

Für die Aufstellung möglichst **allgemein gültiger** konstitutiver Beziehungen forderten Truesdell und Noll, 1965 [68] folgende Prinzipien:

- principle of equipresence: Sämtliche Variablen sollen in jeder konstitutiven Gleichung enthalten sein, solange ihre Unabhängigkeit voneinander nicht gesichert ist.
- principle of well-posedness: Existenz einer eindeutigen Lösung des Anfangs-Randwert- Problems für definierte konstitutive Gleichungen, die von den Rand- und Anfangsbedingungen abhängig
- principle of frame-indifference: Die konstitutiven Gleichungen sollen von momentanem Ort eines Betrachters und der Zeit unabhängig sein.

Drew et al., 1979 [13] zeigen, dass die Forderung nach Equipräsenz eine derartige Vielzahl von skalaren Funktionen nach sich ziehen würde, dass eine realistische Lösung nicht mehr zu erwarten wäre. Konstitutive Beziehungen können daher nur aus der Physik des speziellen betrachteten Mehrphasensystems motiviert werden. Die in den konstitutiven Bedingungen enthaltenen Parameter, sollten, wenn möglich, aus Grenzwertbetrachtungen oder durch Mittelung analytischer oder numerischer Lösungen für vereinfachte Systeme bestimmt werden.

Im Nachklärbecken entfallen Phasenzustandsänderungen, wie sie z.B. durch Verdampfen hervorgerufen werden. Phaseninteraktionen und Interaktionen innerhalb **einer** Phase müssen berücksichtigt werden, da sie den Feststoffhaushalt prägen. Es entstehen große Geschwindigkeits- und Konzentrationsgradienten innerhalb des Beckens, die die Struktur und Rheologie der Suspension in erheblichem Maße beeinflussen (Kapitel 2). Für eine Mehrphasenströmung müssen die Terme für die Phaseninteraktion, die Phasenübergänge und die Vorgänge innerhalb einer Phase bestimmt werden. Das heißt, für die Variablen

$$\mathbf{M}_k, \Gamma_k, \mathbf{T}_k, \mathbf{u}_{ki}$$

werden konstitutive Beziehungen aus den Strömungsgrößen, die den oben genannten Forderungen genügen, aufgestellt. Diese spezifizieren neben den Wechselwirkungen zwischen den Phasen auch die speziellen Materialeigenschaften wie Dichte und Viskosität der einzelnen Phasen. Als objektive Strömungsgrößen stehen dabei

$$\alpha_k, \frac{d\alpha_k}{dt}, \nabla\alpha_k, \mathbf{u}_k - \mathbf{u}_l$$

zur Verfügung.

3.3 Partikel in kontinuierlichen Medien

Die Bewegung der Grenzflächen wird von der Bewegung der Partikel, der granularen Phase, bestimmt, die demzufolge auch den Impulsaustausch zwischen den Phasen charakterisiert. Ausgangspunkt für die Betrachtung der Dynamik der granularen Phase ist die Bewegung eines einzelnen Partikels in einem kontinuierlichen Medium, welche durch das zweite Newtonschen Gesetz beschrieben wird:

$$m_p \frac{d \mathbf{u}_p}{dt} = \mathbf{F}_p \quad (3.18)$$

Schlammteilchen im Nachklärbecken werden infolge von Gravitation und Auftrieb beschleunigt. Dabei verursachen sie eine entgegengesetzt gerichtete Verdrängungsströmung mit Nachlaufeffekten in der kontinuierlichen Phase, die als viskoser Widerstand (Strömungswiderstand) in die Kräftebilanz eingeht. Der Druckgradient um das Partikel erzeugt eine Kraft in umgekehrter Richtung. Durch die instationäre Partikelbewegung wird Fluidmasse verdrängt und mitbeschleunigt, so dass sich die Partikelmasse virtuell erhöht und sich die Partikelbeschleunigung verringert. Den Einfluss der instationären relativen Beschleunigung der Partikel gegenüber dem Fluid auf Partikelnachlauf und Grenzschichtbildung beschreibt die Zähigkeitskraft, der Basset-Widerstand.

Wird das Partikel als sphärisch³ idealisiert, können die Kräfte formuliert und die Bewegung eines einzelnen Partikels durch die Basset-Boussinesq-Oseen-Gleichung beschrieben werden:

$$\begin{aligned} \frac{1}{6} \pi d_p^3 \varrho_p \frac{d \mathbf{u}_p}{dt} &= \underbrace{- (\varrho_p - \varrho_c) \frac{1}{6} \pi d_p^3 \mathbf{g}}_{\mathbf{F}_G} \\ &\quad - \underbrace{\frac{1}{8} C_D \varrho_c \pi d_p^2 (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_c)^2}_{\mathbf{F}_{VD}} \\ &\quad - \underbrace{\frac{1}{6} \pi d_p^3 \nabla p}_{\mathbf{F}_P} \\ &\quad - \underbrace{\frac{1}{6} C_{VM} \varrho_c \pi d_p^3 \frac{d}{dt} (\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_p)}_{\mathbf{F}_{VM}} \\ &\quad - \underbrace{\frac{3}{2} \sqrt{\pi \varrho_c \mu_c} d_p^2 \int_0^t \frac{d}{ds} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_p) \frac{ds}{\sqrt{t-s}}}_{\mathbf{F}_B} \end{aligned} \quad (3.19)$$

³kugelförmig, d.h. $m_p = \varrho_p V_p = \varrho_p \frac{1}{6} \pi d_p^3$

mit	\mathbf{F}_G	: Gravitation und Auftrieb
	\mathbf{F}_{VD}	: Viskoser Widerstand
	\mathbf{F}_P	: Druckkraft
	\mathbf{F}_{VM}	: Virtuelle Masse
	\mathbf{F}_B	: Basset-Widerstand
	d_p	: Partikeldurchmesser
	ρ_p	: Partikeldichte
	\mathbf{u}_p	: Partikelgeschwindigkeit
	$C_{D,VM}$: Koeffizienten

Geschwindigkeitsgradienten in der kontinuierlichen Phase bzw. an der Partikeloberfläche führen zu einer Partikelbewegung senkrecht zur Strömungsrichtung, einer Zentrifugalkraft (Abbildung 3.3).

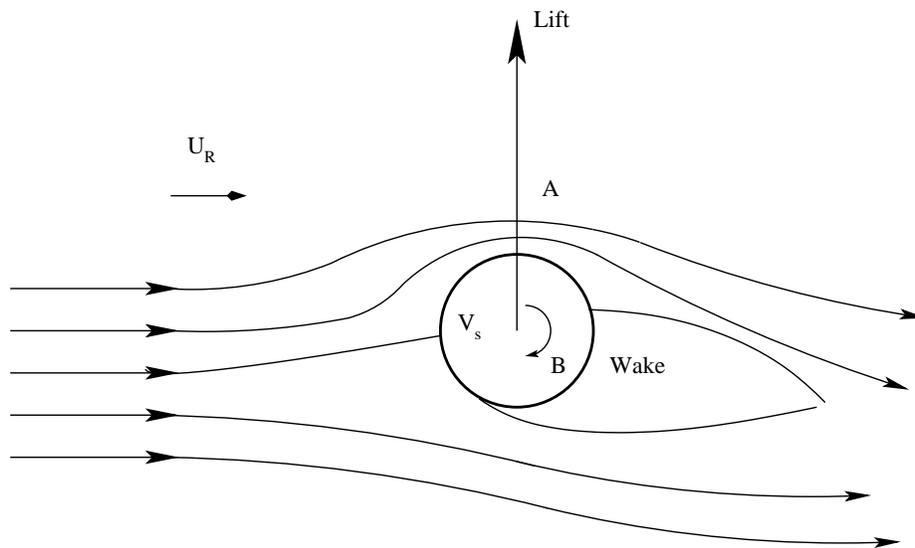


Abbildung 3.3: Lift-Kraft auf ein Partikel

Die exakte Form dieser Lift-Kraft ist nicht bekannt. Sie wird zumeist aber in Abhängigkeit von Partikelrelativgeschwindigkeit und Wirbelbildung in der kontinuierlichen Phase formuliert. Die Eigenrotation der Partikel, die in erster Linie durch Kontakt mit den Gebietsberandungen entsteht, erzeugt ebenfalls eine Zentrifugalkraft. Die Basset-Boussinesq-Oseen-Gleichung erweitert sich dann auf folgende Form:

$$\frac{1}{6} \pi d_p^3 \rho_p \frac{d \mathbf{u}_p}{dt} = \underbrace{- (\rho_p - \rho_c) \frac{1}{6} \pi d_p^3 \mathbf{g}}_{\mathbf{F}_G} - \underbrace{\frac{1}{8} C_D \rho_c \pi d_p^2 (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_c)^2}_{\mathbf{F}_{VD}}$$

$$\begin{aligned}
& - \underbrace{\frac{1}{6} \pi d_p^3 \nabla p}_{\mathbf{F}_P} \\
& - \underbrace{\frac{1}{6} C_{VM} \varrho_c \pi d_p^3 \frac{d}{dt} (\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_p)}_{\mathbf{F}_{VM}} \\
& - \underbrace{\frac{3}{2} \sqrt{\pi \varrho_c \mu_c} d_p^2 \int_0^t \frac{d}{ds} (\mathbf{u} - \mathbf{v}_p) \frac{ds}{\sqrt{t-s}}}_{\mathbf{F}_B} \\
& + \underbrace{\frac{1}{6} C_L \varrho_c \pi d_p^3 (\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_p) \otimes (\nabla \otimes \mathbf{u}_c)}_{\mathbf{F}_L} \\
& + \underbrace{\frac{1}{6} C_R \varrho_c \pi d_p^3 (\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_p) \otimes (\nabla \otimes \mathbf{u}_p)}_{\mathbf{F}_R} \tag{3.20}
\end{aligned}$$

mit \mathbf{F}_L : Liftkraft
 \mathbf{F}_R : Rotationskraft
 $C_{L,R}$: Beiwerte

Der Hauptanteil des Impulsaustausches zwischen den Phasen läuft über die viskose Widerstandskraft des Partikels, die über den Staudruck der Differenzgeschwindigkeit und einem von Partikelkonzentration und - reynoldszahl abhängigen Widerstandsbeiwert C_D . Die Partikelreynoldszahl

$$Re_p = \frac{d_p \varrho_c |\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_p|}{\mu_c} \tag{3.21}$$

beschreibt das durch die Partikelbewegung initiierte Strömungsfeld, d.h., die auftretenden Grenzflächeneffekte und Wirbelbildungen. Die Partikelträgheit wird zur Fluidzähigkeit in Beziehung gesetzt. Dementsprechend ergeben sich in Abhängigkeit des entstehenden Strömungsregimes unterschiedliche Ansätze für die Berechnung des Widerstandsbeiwertes.

Für den Fall eines stationären unendlich ausgedehnten Strömungsfelds, einer laminaren Partikelbewegung und Vernachlässigung von Partikeladvektion erhält man den Widerstandsbeiwert nach Stokes,

$$\begin{aligned}
C_D &= \frac{24}{Re_p} = \frac{24 \nu}{w_s d_p} \quad \text{d.h.} \\
w_r &= -\frac{g}{18 \nu} \frac{\varrho_p - \varrho_c}{\varrho_c} d_p^2 \tag{3.22}
\end{aligned}$$

mit $w_{r,s}$: Relativ- und Sinkgeschwindigkeit
 $w_r = w_p - w_c = -w_s$

der vielen Sedimenttransportmodellen als Basis für den Sinkgeschwindigkeitsansatz dient, obwohl er in seiner Gültigkeit wegen o.a. Kriterien stark eingeschränkt ist und nur für Partikelreynoldszahlen $Re_p < 0.5$ gilt.

Bei Anwesenheit mehrerer Partikel müssen die einzelnen Widerstände gegenüber dem bereits deformierten Strömungsfeld berücksichtigt werden. Mit zunehmender Partikelkonzentration wächst der Strömungswiderstand an. Dem wird über eine erhöhte sogenannte **effektive** Viskosität der Suspension Rechnung getragen. Die effektive Viskosität der Suspension ist dabei eine Funktion der Partikelverteilungsdichte und der Viskosität der kontinuierlichen Phase. Basierend auf der Formulierung von Einstein, 1906 [15] gibt es eine Reihe von Ansätzen, von denen exemplarisch der von Frankel und Acrivos, 1967 [18] für konzentrierte Suspensionen vorgestellt sei.

$$\mu_{eff} = C' \left(\frac{\frac{\alpha_d}{\alpha_{dm}}^{\frac{1}{3}}}{1 - \frac{\alpha_d}{\alpha_{dm}}^{\frac{1}{3}}} \right) \mu_c \quad (3.23)$$

mit α_{dm} : Dichteste Lagerung
 $\alpha_{dm} = 0.5 \div 0.74$ für Feststoffe
 C' : geometrische Form des Partikeleinflussbereichs

Ist das System turbulent gilt die obige Formulierung des viskosen Widerstandes nur, wenn die Partikel kleiner als die Kolmogorovlänge bleiben (Clift, 1978 [8]), da die Geschwindigkeit an der Partikeloberfläche sonst nicht mehr konstant ist. Im turbulenten Regime ist der viskose Widerstand von der Reaktionszeit des Partikels auf die turbulenten Schwankungen t_p abhängig.

$$\mathbf{F}_{VD} = \frac{1}{t_p} \varrho_d \mathbf{u}_r = \frac{18\nu_c \varrho_c C_D}{\varrho_d d_p^2 \alpha_c^\beta} \varrho_d \mathbf{u}_r \quad (3.24)$$

mit \mathbf{u}_r : Relativgeschwindigkeit
 $\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_d - \mathbf{u}_c$

Für die Bestimmung des Widerstandsbeiwertes in einem turbulenten Strömungsfeld sind wenige experimentelle Daten vorhanden. Die Partikelreynoldszahl erhält in der Regel eine zusätzliche Relativgeschwindigkeit \mathbf{u}_{tr} , die aus der Differenz der fluktuierenden Geschwindigkeiten von Partikel und Kontinuum berechnet wird.

$$Re_p = \frac{\sqrt{\mathbf{u}_r \mathbf{u}_r + \mathbf{u}_{tr} \mathbf{u}_{tr}} d_p}{\nu_c} \quad (3.25)$$

Zusammengefasst hängen die auf der mikrostrukturellen Ebene wirkenden Kräfte von Dichte und Durchmesser der Partikel und von Eigenschaften des kontinuierlichen Mediums ab. Die virtuelle Massenkraft und der Basset-Widerstand gewinnen mit zunehmendem Dichteunterschied zwischen Trägermedium und Partikeln an Bedeutung. Darüberhinaus nimmt ihr Einfluss mit sinkenden Partikelgröße ab. Gravitation und Auftrieb gewinnen bei kleinen Strömungsgeschwindigkeiten im Trägermedium an Bedeutung,

da die auftretenden Massenkräfte dann sehr klein sind und die Bewegung der Partikel durch Dichteunterschiede geprägt ist. Lift-, Rotations- und Druckkraft sind in erster Linie von der Strömungssituation abhängig. Die physikalischen Prozesse sind dabei nicht in ihrer Vollständigkeit bekannt (Syamlal et al., 1993 [65]).

In der **einphasigen** Modellierung werden die Kräfte zur Bestimmung der Sinkgeschwindigkeit herangezogen, wobei sich meistens auf die Widerstandskraft beschränkt wird. Die **mehrphasige** Modellierung benötigt sie zur Bestimmung der konstitutiven Gleichungen für den Impulsaustausch an den Grenzflächen. Problematisch ist hierbei, dass die Formulierung der wirkenden Kräfte schon für idealisierte Partikel, d.h. kugelförmige homogene Einzelpartikel, die ihre Eigenschaften nicht ändern, schwierig ist und die meisten in der Realität vorkommenden Partikel diesen Anforderungen nicht genügen. Dieser Problematik wird über die Einführung von empirischen und semi-empirischen Formfaktoren für nicht isometrische Körper und über gesonderten Ansätzen für sich ändernde Partikeleigenschaften, z.B. durch ein Flokkulationsmodell, Rechnung getragen.

Kapitel 4

Schließungsbedingungen für polydisperse Suspensionen

4.1 Bestimmung der konstitutiven Gleichungen

Zur Lösung der in Kapitel 3.2 vorgestellten Gleichungen müssen, wie schon angedeutet, konstitutive Gleichungen zur Schließung des Gleichungssystems sowie Anfangs- und Randbedingungen definiert werden. Die Bestimmung der konstitutiven Gleichungen muss sehr sorgfältig erfolgen, da sie die Güte des Modells in erheblichen Maße mitbestimmen.

Stochastische Ansätze z.B. Monte-Carlo-Methoden liefern für technische Strömungen in der Regel keine befriedigenden Lösungen. Trotzdem sich die meisten Untersuchungen auf die Umströmung eines einzelnen kugelförmigen Partikel beziehen, d.h. Effekte wie Geschwindigkeits- und Konzentrationsgradienten innerhalb eines Partikelschwarmes unberücksichtigt bleiben, und sich die Partikel nur auf Grund von hydrodynamischen Kräften bewegen und nicht kollidieren, entsteht für viele Probleme eine nicht zu handhabende Menge von Gleichungen mit einer Fülle von Rand- und Anfangsbedingungen. Eine Aufstellung von allgemein gültigen konstitutiven Beziehungen ist wegen der Komplexität mehrphasiger Probleme bisher noch nicht gelungen. Daher beschränken sich die folgenden Ausführungen auf den hier betrachteten Fall einer Suspension aus einer kontinuierlichen fluiden Phase und einer bzw. mehrerer disperser (partikulärer) Phasen.

Über **Mittelungsstrategien** wird jedem Partikel des Kontinuums eine mathematische Struktur zugeordnet, die die aus der heterogenen Struktur der Suspension resultierenden entscheidenden Phänomene widerspiegelt. Durch diese Idealisierung sind die Beschreibung von Bewegung und Deformation einzelner Partikel und die Modellierung der Umströmung einzelner Partikel nicht möglich. Die Datenfülle reduziert sich aber auf ein vernünftiges Maß. Aussagen über die mittleren Strömungsverhältnisse sowie die Wechselwirkungen zwischen den Phasen können getroffen werden.

Auf mathematische exakte Herleitungen gemäß den Grundprinzipien wird an dieser Stelle verzichtet. Es wird vielmehr versucht, die physikalische Motivation der Gleichungen zu verdeutlichen. Herleitungen finden sich z.B. in Drew und Passman, 1998 [14].

4.1.1 Massenquelle und Phasenübergang

Eine Massenquelle spezifiziert den Phasenübergang, d.h. die Aufnahme der einen Phase in die andere. Dieser Term spielt eine Rolle, wenn die Einlagerung von Wasser infolge der Flockendynamik und das Herauspressen von Porenwasser direkt berücksichtigt werden sollen. Da keine gesicherte Erkenntnisse über diese Mechanismen vorliegen, wird dieser Term hier zu Null gesetzt.

$$\Gamma_k = 0 \quad (4.1)$$

4.1.2 Bestimmung der Spannungstensoren

In der kontinuierlichen Phase und den dispersen Phasen entstehen Spannungen, die auf unterschiedliche Weise übertragen werden. Für die kontinuierliche Phase, das Abwasser, wird das aus der einphasigen Modellierung bekannte Konzept für newtonsche Fluide verwendet, während für die disperse Phase, den belebten Schlamm, Ansätze aus Gasdynamik und Festkörpermechanik zum Tragen kommen. Der Spannungstensor wird dazu in Druck- und viskose Spannungen aufgeteilt.

$$\mathbf{T}_k = -p_k \mathbf{E} + \mathbf{P}_k \quad (4.2)$$

mit \mathbf{P} : viskoser Spannungstensor
 p : Druck

Die **viskosen Spannungen** werden durch eine Stoffgleichung mit dem Geschwindigkeitsfeld verknüpft. Nach dem Stokeschen Ansatz für **newtonsche** Fluide wird ein linearer Zusammenhang zwischen viskosen Spannungen und Verzerrungsgeschwindigkeiten abgeleitet. Die Spannungs-Dehnungsbeziehung genügt dem Hookschen Gesetz und das Material wird als isotrop, homogen und linear elastisch idealisiert. Die Volumenviskosität κ_k gibt den Druck an, der pro relativer Volumenänderung erforderlich ist, entspricht also dem Kompressionsmodul und ist ein Maß für die kompressiven Eigenschaften der Phase.

$$\mathbf{P}_k = \mu_k (\nabla \mathbf{u}_k + \nabla \mathbf{u}_k^T) + \left(\kappa_k - \frac{2}{3} \mu_k \right) \nabla \cdot \mathbf{u}_k \mathbf{E} \quad (4.3)$$

Für die kontinuierliche Phase erfolgt die Berechnung analog zu der einphasigen Modellierung. Für ein newtonsches **inkompressibles** Fluid vereinfacht sich der viskose Spannungstensor zu:

$$\mathbf{P}_c = \mu_c \text{sym} \nabla \mathbf{u}_c = 2 \mu_c \mathbf{S}_c \quad (4.4)$$

In einer Suspension übertragen Partikel Impuls. Sie transportieren und konzentrieren Scher- und Druckspannungen der fluiden Phase, sie transportieren Impuls wie ein elastischer Festkörper, wenn sie die Gelierungskonzentration erreichen, und durch ihre fluktuierenden Bewegungen. Darüberhinaus ist die disperse Phase bis zum Erreichen ihrer

maximalen Lagerungsdichte kompressibel. Der viskose Spannungstensor der dispersen Phase enthält daher sämtliche Terme der Gleichung 4.3. Über die Viskositäten wird dabei die vom Phasenanteil abhängige Übertragung von Spannungen in der Phase, die Fließ- und Kompressionseigenschaften, modelliert.

Disperse Materialien, die in Abhängigkeit äußerer Randbedingungen, z.B. dem Wassergehalt, Eigenschaften von Gasen, Fluiden und Festkörpern annehmen können, nennt man granular. Untersuchungen granularer Materialien z.B. in der Vielteilchenphysik wurden bisher nur mit nicht kohäsiven Partikel durchgeführt. Trotzdem sind die Ursachen der zu beobachtenden physikalische Prozesse nicht zufriedenstellend geklärt. Ein Beispiel für ein solches Material stellt Sand dar, der in Abhängigkeit des Wassergehaltes Eigenschaften eines Festkörpers (Sandburg) oder eines Fluids (Eieruhr) annehmen kann.

In Bereichen kleiner Partikelkonzentrationen verhalten sich granulare Materialien ähnlich wie ein Gas. Der Abstand zwischen einzelnen Partikeln ist groß, so dass Partikelkollisionen und die kinetische Partikelenergie Spannungsübertragung und -entstehung prägen und fluktuierenden Partikelbewegungen entstehen. Ein viskoses Verhalten ist nicht erkennbar. Bei steigender Partikelkonzentration fangen die Partikel an, gegenseitig Verbindungen einzugehen z.B. Wasserbrücken infolge der Oberflächenspannung. Sie verhalten sich zunächst wie ein Fluid und mit Umordnung der Partikel infolge zunehmenden Druckes wie ein Festkörper. Es entsteht ein poröses Medium, das sich bei kleinen Scherbeanspruchungen wie ein elastischer Festkörper verhält, sich aber auch wieder verflüssigen kann. Die granulare Temperatur, das Maß für die mittlere kinetische Partikelenergie, ändert sich bei den Phasenübergängen gasförmig zu flüssig zu fest drastisch. Die kinetische Energie der Partikel reicht nicht mehr aus, um entstandene Partikelbrücken zu zerstören.

Granulare Materialien sind durch einen dynamischen Übergang in andere Aggregatzustände gekennzeichnet. Indikatoren für einen Phasenübergang sind Viskosität und granulare Temperatur. Dementsprechend ist ihre mathematische Modellierung entscheidend für die Qualität des Modelles.

Für kohäsive fraktale Biokolloide sind die physikalischen Prozesse weitaus komplexer. Bei Partikelkontakt spielen Haftreibung und Entstehung von Wasserbrücken infolge der Oberflächenspannung zwischen den Partikeln nur eine untergeordnete Rolle, da Biokolloide aufgrund ihrer Flockendynamik zusätzliche sehr viel stabilere physikalische und chemische Brücken eingehen (Kapitel 2.2 Seite 13). Das führt nach dem heutigen Stand der Forschung bei hohen Partikelkonzentrationen zu einem strukturviskosen Verhalten, das durch eine bingham-plastische Fließfunktion idealisiert werden. Erreicht die Scherbeanspruchung einen Grenzwert, ändert das Medium sein Verhalten von elastisch zu plastisch. Die Strömung gleicht einer stationären Schichtenströmung, d.h. die viskosen Spannungen hängen lediglich von den lokalen Schergeschwindigkeiten ab. Das Kompressionsverhalten ist hochgradig nichtlinear. Eine kontinuierliche Formulierung der Volumenviskosität steht noch aus. Inwieweit die Topologie des Netzwerkes und die Partikelform dessen Stabilität bestimmen ist noch unklar.

Im Mehrphasenmodell setzt sich die effektive Scherviskosität aus drei Teilen zusammen, die in Abhängigkeit des Phasenanteils der granularen Phase, des Partikeldurchmessers und der Strömungskräfte unterschiedliches Gewicht erhalten. In Bereichen kleiner Par-

tikelkonzentrationen dominieren die granularen Ansätze für nicht kohäsive Partikel. Ein bingham-plastischer Teil für fraktale Flocken deckt die Bereiche hoher Partikelkonzentrationen ab. Mit dem bingham-plastischen Fließgesetz

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_b + 2 \mu_b \mathbf{S}_d \quad (4.5)$$

läßt sich folgende Beziehung für die Viskosität ableiten:

$$\mu_{bing} = \frac{\mu_b}{1 - \frac{\mathbf{P}_b}{\mathbf{P}}} \quad (4.6)$$

mit \mathbf{S} : Deformationstensor
 \mathbf{P}_b : Fließspannung
 μ_b : plastische Viskosität

Die Bestimmung von Fließspannung und plastischer Viskosität erfolgt experimentell. Für fraktale Flocken konnte ein exponentieller Verlauf festgestellt werden (Kranenburg, 1994 [38]).

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_b &= K_b \alpha_d^{\frac{2}{3-n_f}} \\ \mu_b &= K_\mu \alpha_d^n \end{aligned} \quad (4.7)$$

mit $K_{b,\mu}$: Koeffizienten
 $K_b = 0.5 \cdot 10^9$ Pa
 n : Exponent
 $n = 2 - 6$

Für die Volumenviskosität wird ebenfalls ein Ansatz für nicht kohäsive Partikel gewählt, da nach ATV [2] zur Zeit keine brauchbare Theorie des Kompressionsverhaltens von blebtem Schlamm existiert. Dieser Ansatz unterschätzt den Kompressionsmodul, da fraktale Flocken, insbesondere belebter Schlamm, Wasser wesentlich stärker binden als nicht kohäsive Partikel.

Zusammengefaßt setzt sich die **effektive** Viskosität der dispersen Phase aus Kollisions-, kinetischen, Reibungs- oder bingham-plastischen und Volumenanteilen zusammen, die in Tabelle 4.1 zusammengestellt sind. Das kohäsive Verhalten der Biokolloide wird über ein Flokkulationsmodell berücksichtigt, das über den Partikeldurchmesser mit den Viskositätsansätzen gekoppelt ist (Kapitel 4.3).

Die Berechnung der **Druckspannungen** der kontinuierlichen Phase erfolgt in der Regel direkt aus dem numerischen Modell. Die Bestimmung der Druckspannungen innerhalb der dispersen Phase gestaltet sich erheblich schwieriger. Wegen der unterschiedlichen Übertragungsmechanismen muss ihre Berechnung in Abhängigkeit des Phasenanteils α_d erfolgen.

Für Partikelkonzentrationen oberhalb der Gelierungskonzentration dominieren Kollisionen Übertragung und Transport von Druckspannungen, die dann über die granuläre Temperatur berechnet werden können.

Kollisionen	$\mu_{col} = \frac{4}{5} \alpha_d \varrho_d d_p f_0 (1 + e_K) \left(\frac{k_{td}}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}}$ <p>(Gidaspow et al., 1992 [22])</p>
kinetisch	$\mu_{kin} = \frac{\alpha_d d_p \varrho_d \sqrt{k_{td} \pi}}{6(3 - e_K)} \left(1 + \frac{2}{5} (1 + e_K) (3e_K - 1) \alpha_d f_0 \right)$ <p>(Syamlal et al., 1993 [65])</p> $\mu_{kin} = \frac{10 \varrho_d d_p \sqrt{k_{td} \pi}}{96 \alpha_d (1 + e_K) f_0} \left(1 + \frac{4}{5} f_0 (1 + e_K) \right)^2$ <p>(Gidaspow et al., 1992)[22]</p>
Reibung (Körner)	$\mu_{fr} = \frac{p_d \sin \beta}{2 \sqrt{I_{2S}}}$ <p>(Schaeffer, 1987 [58])</p>
Bingham-plastisch (Flocken)	$\mu_{bing} = \frac{\mu_b}{1 - \frac{\mathbf{P}_b}{\mathbf{P}}}$
Volumen	$\kappa_d = \frac{4}{3} \alpha_d \varrho_d d_p f_0 (1 + e_K) \left(\frac{k_{td}}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}}$ <p>(Lun et al., 1984 [47])</p>
<p>mit f_0 : radiale Verteilungsfunktion</p> $f_0 = \left(1 - \frac{\alpha_d}{\alpha_{max}} \right)^{-2.5 \alpha_{max}} \quad (\text{Lun et al., 1984 [47]})$ <p>e_K : Stoßzahl $0 \leq e_K \leq 1$</p> <p>k_{td} : granulare Temperatur</p> <p>β : innerer Reibungswinkel</p> <p>I_{2S} : zweite Invariante des Deformationstensors</p>	

Tabelle 4.1: Effektive Viskositäten der dispersen Phase

$$p_d = \underbrace{\varrho_d k_{td}}_{\text{kinetischer Teil}} + \underbrace{2\varrho_d(1 + e_K)\alpha_d f_0 k_{td}}_{\text{Partikelkollisionen}} \quad (4.8)$$

Die Verteilungsfunktion f_0 bestimmt die momentane Kompressibilität.

Für Partikelkonzentrationen oberhalb der Gelierungskonzentration wird die Physik der Suspension durch die Konsolidierung infolge der Schwerkraft bzw. des Eigengewichts bestimmt, und es werden Modelle aus der Strukturmechanik verwendet. Aufgrund der relativ kurzen Aufenthaltszeit des belebten Schlammes im Nachklärbecken werden Spannungsänderungen infolge äußerer Kräfte, wie z.B. der Turbulenz, vernachlässigt. Die Kontaktspannungen zwischen Flocken sollten in Abhängigkeit der fraktalen Dimension berechnet werden (Kranenburg, 1994 [38]).

$$p_{d,cont} = K_p \alpha_d^{\frac{2}{3-n_f}} \quad (4.9)$$

mit K_p : empirischer Koeffizient
 $K_p = 2 \cdot 10^8$
 n_f : fraktale Dimension

Der Impulsaustausch an den Grenzflächen wird in der Regel in Effekte aus dem mittlere Strömungsgeschehen und lokale Grenzflächeneffekte aufgeteilt (Kapitel 4.1.3). Deshalb seien hier auch die Spannungen an der Grenzfläche behandelt.

$$\mathbf{T}_{ik} = -p_{ik}\mathbf{E} + \mathbf{P}_{ik} \quad (4.10)$$

Die Druckspannungen an den Phasengrenzflächen werden für die disperse Phase denen innerhalb der Phase gleichgesetzt. Für die kontinuierliche Phase können sie aus dem Bernoulli Theorem für die Bewegung einer Kugel in einem nicht viskosen Fluid bestimmt werden (Roco, 1993 [57]). Dieses setzt Druck und Geschwindigkeitspotential zueinander in Beziehung.

$$\begin{aligned} p_{id} &= p_d \\ p_{ic} &= p_c - \xi \varrho_c |\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_d|^2 \end{aligned} \quad (4.11)$$

mit ξ : Faktor zur Berücksichtigung der Ausbildung der Grenzschicht
 $\xi = \xi(\alpha_c, Re)$

Die viskosen Spannungen sind an den Grenzflächen größer als die mittleren Spannungen im Fluid selber. Dieser Effekt wird zumeist über die Änderung der effektiven Viskosität mitberücksichtigt, so dass die viskosen Spannungen an den Grenzflächen denen innerhalb der Phase gleichgesetzt werden. Eine etwaige Oberflächenspannung wird dabei vernachlässigt.

4.1.3 Impulsaustausch an der Grenzfläche

Die Formulierung dieses Terms bildet einen der neuralgischen Punkte eines Mehrphasenmodells, da die Existenz von Grenzflächen die Dynamik eines solchen Systems ausmacht. Ist die Grenzfläche über die Mittelung bewegungslos, wird \mathbf{M}_k singulär, d.h. der Tensor ist nicht mehr differenzierbar und eine numerische Lösung würde an dieser Stelle oszillieren. Dieses Problem tritt besonders bei Strömungen auf, die durch eine kontinuierliche relativ starre Grenzfläche getrennt sind (Schichtenströmung). Für Strömungen, bei denen die Phasen gemischt und ständig in Bewegung sind, kann dieses Problem vernachlässigt werden. Die Bewegung der Grenzflächen wird durch die Partikelbewegung bestimmt.

Mit dem ersten Newtonschen Gesetz und unter Vernachlässigung von Oberflächenspannung und Phasenübergang ist die Summe des Impulsaustausches an der Grenzflächen gleich null, d.h. $\mathbf{M}_{td} = -\mathbf{M}_{tc}$ (Gleichung 3.11). Die Formulierung konstitutiver Beziehungen reduziert sich auf eine Erweiterung und Mittelung der Kräfte auf ein einzelnes Partikel in dem speziellen Strömungsregime.

$$\mathbf{M}_{tk} = \overline{\mathbf{T}_{tik} \cdot \nabla X_k} = \overline{\mathbf{F}_D} \quad (4.12)$$

Für turbulente Strömungen wird davon ausgegangen, dass die Partikel kleiner als die Kolmogorovlänge λ_c bleiben, so dass die Fluidgeschwindigkeit an der Partikeloberfläche konstant ist und die in Kapitel 3.3 vorgestellten Kräfte verwendet werden können. Ferner wird zunächst davon ausgegangen, dass sich die Partikel gegenseitig nicht beeinflussen. Zur Berücksichtigung höherer Partikelkonzentrationen werden später empirische Koeffizienten eingefügt.

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{td} = & \underbrace{\frac{3}{8} \frac{\alpha_d \varrho_c C_D}{r_d} |\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_d| (\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_d)}_{\mathbf{F}_{VD}} + & (4.13) \\ & \underbrace{C_{VM} \alpha_d \varrho_c \left[\left(\frac{\partial \mathbf{u}_c}{\partial t} + \mathbf{u}_c \cdot \nabla \mathbf{u}_c \right) - \left(\frac{\partial \mathbf{u}_d}{\partial t} + \mathbf{u}_d \cdot \nabla \mathbf{u}_d \right) \right]}_{\mathbf{F}_{VM}} - \\ & \underbrace{C_L \alpha_d \varrho_c (\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_d) \otimes (\nabla \otimes \mathbf{u}_c)}_{\mathbf{F}_L} + \\ & \underbrace{C_F \alpha_d \eta_c \nabla^2 \mathbf{u}_c}_{\mathbf{F}_F} + \\ & \underbrace{\alpha_d \frac{9}{2r_p} \left(\frac{\varrho_c \eta_c}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^t \frac{\mathbf{a}(x, s) ds}{\sqrt{(t-s)}}}_{\mathbf{F}_B} + \\ & \underbrace{C_{tD} \frac{3}{8} \frac{\alpha_d \varrho_c C_D}{r_p} |\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_d| \mathbf{T}_c \cdot \nabla \alpha_d}_{\mathbf{F}_{tD}} \end{aligned}$$

mit \mathbf{a} : Beschleunigung

$$\mathbf{a} = \left(\frac{\partial \mathbf{u}_c}{\partial t} + \mathbf{u}_c \cdot \nabla \mathbf{u}_c \right) - \left(\frac{\partial \mathbf{u}_d}{\partial t} + \mathbf{u}_d \cdot \nabla \mathbf{u}_d \right) - (\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_d) \otimes (\nabla \otimes \mathbf{u}_c)$$

Statt die Wirkung der turbulenten Dispersion in einer Kraft \mathbf{F}_{tD} zusammenzufassen, kann sie auch über eine direkte Modellierung der durch die Mittelung entstandenen fluktuierenden Terme berücksichtigt werden. Simonin, 1991 [63] behandelt diese unter der Voraussetzung von homogener Turbulenz und eines partikulären Zweiphasensystems wie diffusive Flüsse und finden so eine mathematische Formulierung für die Driftgeschwindigkeit, die über ein Turbulenzmodell berechnet wird.

$$\begin{aligned} \frac{1}{\alpha_d} \overline{X_d \mathbf{u}_{tc}} &= -\mathbf{D}_{td} \left(\frac{1}{\alpha_d} \nabla \alpha_d - \frac{1}{\alpha_c} \nabla \alpha_c \right) \\ &= \mathbf{u}_{dr} \end{aligned} \quad (4.14)$$

Die Relativgeschwindigkeit der Phasen läßt sich dann folgendermaßen berechnen:

$$\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_c - \mathbf{u}_d + \mathbf{u}_{dr} \quad (4.15)$$

Die Bestimmung des Diffusionstensors der dispersen Phase \mathbf{D}_{td} erfolgt aus der Korrelation der Geschwindigkeitsfluktuationen beider Phasen und der Zeit t_{cp} , die ein charakteristisches Partikel in einem turbulenten Wirbel verbleibt (Tabelle 4.3 Seite 51).

$$\mathbf{D}_{td} = t_{cp} \overline{\mathbf{u}_{tc} \mathbf{u}_{td}} \quad (4.16)$$

$$t_{cp} = \frac{t_c}{\sqrt{1 + \left(C_\beta \beta_{cd} \sqrt{\frac{|\mathbf{u}_r|}{\frac{1}{3} \overline{\mathbf{u}_{tc} \mathbf{u}_{tc}}}} \right)^2}} \quad (4.17)$$

mit C_β : Koeffizient zur Berücksichtigung kreuzender Partikelbahnen

$$C_\beta = 1.8 - 1.35 \cos^2 \theta$$

θ : Winkel zwischen mittlerer Partikel- und mittlerer Relativgeschwindigkeit

β_{cd} : Koeffizient zur Berücksichtigung von Kontinuitätseffekten

$$\beta_{cd} = 0.67 \text{ (Greimann et al., 2001 [24])}$$

Kreuzende Partikelbahnen vermindern die turbulente Partikeldiffusion, da Partikel die Tendenz haben, Wirbel zu verlassen (Csanady, 1963 [11]). Der damit einhergehende Kontinuitätseffekt sorgt für eine Abnahme der Diffusion.

Nach Aufteilung in fluktuierende und gemittelte Anteile und unter Berücksichtigung der Driftgeschwindigkeit, d.h. unter Berücksichtigung des turbulenten Impulsaustausches, schlagen Greimann und Forrest, 2001 [24] folgende Form für den Impulsaustausch an der Grenzfläche vor, wobei die Basset-Kraft vernachlässigt wird.

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}_{td} = & \underbrace{\frac{\alpha_d \varrho_d \mathbf{u}_r}{t_p}}_{\mathbf{F}_{VD}} + \varrho_c C_{VM} \left(\frac{\partial}{\partial t} \alpha_d (\mathbf{u}_c + \mathbf{u}_{dr}) + \right. \\
& (\mathbf{u}_c + \mathbf{u}_{dr}) \cdot \nabla (\alpha_d (\mathbf{u}_c + \mathbf{u}_{dr})) - \\
& \left. \frac{\partial \alpha_d \mathbf{u}_d}{\partial t} - (\mathbf{u}_d \cdot \nabla \alpha_d \mathbf{u}_d) + \alpha_d (\overline{\mathbf{u}_{tc} \nabla \mathbf{u}_{tc} - \mathbf{u}_{td} \nabla \mathbf{u}_{td}}) \right) + \\
& \alpha_d \varrho_c C_L |\mathbf{u}_r| \otimes (\nabla \otimes \mathbf{u}_c)
\end{aligned} \tag{4.18}$$

4.2 Mehrphasige Turbulenzmodellierung

Die Bestimmung der Reynoldsspannungstensoren erfolgt auch in der Mehrphasenmodellierung durch ein Turbulenzmodell. Wie schon in den Erhaltungsgleichungen selbst entstehen auch hier Terme, die die Interaktion der Phasen beschreiben und auf deren Modellierung besonderes Gewicht liegen sollte, da hier die Chance besteht, die Dämpfung der Turbulenz der flüssigen Phase auf der einen und die Rückkopplung mit dem Transport der festen Phase auf der anderen Seite explizit zu modellieren.

In der Literatur finden sich wenige Ansätze für ein solches turbulentes Mehrphasenmodell. Für das $k - \epsilon$ -Modell sei hier exemplarisch der Ansatz nach Kashiwa und Gore, 1991[37] vorgestellt. Sie modellieren den Reynoldsspannungstensor über die erweiterte Form der Boussinesq-Approximation:

$$\alpha_k \mathbf{R}_k = 2\nu_{tk} \alpha_k \mathbf{S}_k - \frac{2}{3} \mathbf{E} \alpha_k k_k \tag{4.19}$$

- mit \mathbf{S}_k : Deformationstensor der Phase k
 ν_{tk} : Turbulente Viskosität der Phase k
 $\nu_{tk} = C_\mu \frac{k_k^2}{\epsilon_k}$
 $C_\mu = 0.09$
 k_k : turbulente kinetische Energie der Phase k

Die einphasige Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie k wird um Terme zur Berücksichtigung von Grenzflächeneffekte und der viskosen Energiedissipation erweitert. Sie hat dann folgende Form:

Transportgleichung für k :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} (\varrho_k \alpha_k k_k) + \nabla \cdot (\alpha_k \varrho_k \mathbf{u}_k k_k) = & \underbrace{\nabla \cdot \left(\alpha_k \frac{\mu_{tk}}{\sigma_k} \nabla k_k \right)}_I + \underbrace{\alpha_k 2 \mathbf{S}_k : \nabla \mathbf{u}_k}_{II} - \underbrace{\varrho_k \alpha_k \epsilon_k}_{III} \\
& + \underbrace{\sum_l a_{kl} I_{kl} (\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_k)^2}_{IV} + \underbrace{\sum_l R_{kl} (k_l - k_k)}_V
\end{aligned}$$

$$-\underbrace{\mu_c \nabla \mathbf{u}_c : \mathbf{u}_k \nabla \alpha_k}_{VI} \quad (4.20)$$

mit a_{kl} : Partitionierungsfunktion
 I_{kl}, R_{kl} : Austauschfunktionen
 $\sigma_{k,\epsilon}$: Prandtl-Schmidt-Zahlen
 $\sigma_k = 1.0$
 $\sigma_\epsilon = 1.3$

Die ersten drei Terme stehen wie ihre einphasigen Entsprechungen für die Produktion von turbulenter kinetischer Energie infolge der mittleren Geschwindigkeitsgradienten, der turbulenten Diffusion und der Druckgradienten.

Der vierte Term enthält die Produktion turbulenter kinetischer Energie aus interpenetrierenden Bewegungen an den Grenzflächen, d.h. durch Impulsunterschiede. a_{kl} beschreibt dabei, welcher Teil der produzierten Energie an die Komponenten k und l entfällt. Der fünfte Term steht für den Austausch von turbulenter Energie zwischen den Phasen (bei unterschiedlicher fluktuierender turbulenter Energie in den Phasen) an den Grenzflächen. Die viskose Dissipation turbulenter Energie wird durch den sechsten Term repräsentiert. Je nach Lagerungsdichte der dispersen Phase wird sie entweder über Fluktuationen des Drucks oder der Geschwindigkeit abgebaut.

Ein analoges Vorgehen liefert die Transportgleichung für die Energiedissipation ϵ .

Transportgleichung für ϵ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\varrho_k \alpha_k \epsilon_k) + \nabla \cdot (\alpha_k \varrho_k \mathbf{u}_k \epsilon_k) &= \nabla \cdot \left(\alpha_k \frac{\mu_{tk}}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon_k \right) + \frac{\epsilon_k}{k_k} (C_{1\epsilon} \alpha_k 2\mathbf{S}_k : \nabla \mathbf{u}_k - C_{2\epsilon} \varrho_k \alpha_k \epsilon_k) \\ &+ \frac{q_k}{r_p} \left(C_{3\epsilon} \sum_l a_{kl} I_{kl} (\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_k)^2 + C_{4\epsilon} \sum_l R_{kl} (k_l - k_k) \right) \\ &- \frac{q_k}{r_p} (C_{5\epsilon} \mu_c \nabla \mathbf{u}_c : \mathbf{u}_k \nabla \alpha_k) \end{aligned} \quad (4.21)$$

mit $\frac{q_k}{r_p}$: inverser Zeitmaßstab
 $q_k = \sqrt{\frac{2}{3} k_k}$
 r_p : Partikelradius
 $C_{1-5\epsilon}$: Konstanten
 $C_{1\epsilon} = 1.44$
 $C_{2\epsilon} = 1.92$
 $C_{3\epsilon} = 3.00$
 $C_{4\epsilon} = 1.00$
 $C_{5\epsilon} = 1.00$

Die Bestimmung der Funktionen I, R und a erfolgt problemabhängig. Für die Sedimentation kugelförmiger monodisperser Partikel in einem viskosen, inkompressiblen Fluid

vorgenommen berechnet sich der Impulsaustauschkoeffizient I_{cd} ohne Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Interaktionen aus der Widerstandskraft \mathbf{F}_D für einen Einzelpartikel.

$$I_{cd} = \alpha_c \alpha_d \frac{\varrho_c}{r_p} |\mathbf{u}_d - \mathbf{u}_c| \frac{3}{8} C_D \quad (4.22)$$

mit C_D : Widerstandkoeffizient

$$C_D = \underbrace{\frac{24}{Re_p}}_I + \underbrace{\frac{\beta}{r_p} (\alpha_c \lambda_c + \alpha_d \lambda_d)}_{II}$$

I: Widerstandsbeiwert nach Stokes

II: Beziehung zwischen Widerstand und Turbulenz

Re_p : Partikelreynoldszahl

$\lambda_{c,d}$: Kolmogorovlänge

β : Koeffizient

$$\beta = f(Re_p)$$

Für die Bestimmung der Partitionierungsfunktion a_{cd} wird auf Ergebnisse aus der Molekulardynamik für elastische Stöße zurückgegriffen. Die bei dem Stoß dissipierte Energie wird zum Teil in turbulente, d.h. fluktuierende, kinetische Energie umgewandelt, die im Verhältnis der Massen auf die Partner übertragen wird.

$$a_{cd} = \frac{\varrho_d}{\varrho_c \left(\frac{q_c}{q_d}\right)^3 + \varrho_d} \quad (4.23)$$

Für polydisperse Suspensionen werden unterschiedliche Ansätze zur Berechnung der Widerstandskraft \mathbf{F}_D gewählt (Kapitel 3.3) und anstelle der Partitionierungsfunktion die Partikelrelaxationszeit berücksichtigt.

$$I_{cd} = \frac{\alpha_d \varrho_d \mathbf{F}_D}{t_p} \quad (4.24)$$

Der inverse Zeitmaßstab q_k/r_p für den Energieaustausch ist nur von den fluktuierenden Bewegungen abhängig, da ein Austausch von Energie auch ohne mittleres Strömungsfeld stattfinden kann.

$$R_{cd} = \alpha_c \alpha_d \frac{\varrho_c}{r_p} (q_c + q_d) \frac{1}{Re_p} \quad (4.25)$$

Anstelle des inversen Zeitmaßstabs kann auch das Verhältnis von charakteristischer Strömungs- zur Partikelrelaxationszeit gewählt werden.

Wie alle statistischen Turbulenzmodelle ist auch das $k - \epsilon$ -Modell ursprünglich für zeitlich sich nur langsam verändernde Strömungen mit isotroper Turbulenz konzipiert

worden und überschätzt die Größe der turbulenten Scheinspannungen. Kohärente Strukturen können nicht nachgebildet werden.

Eine Modellierung der Turbulenz für **jede** Phase muss nur bei starker Phasenabhängigkeit und großem Phasenanteil erfolgen (Vierwegekopplung siehe Kapitel 3.2.1 Seite 27). Daher gibt es eine Reihe von Modellen, die die Turbulenz in der kontinuierlichen Phase explizit modellieren und den Einfluss der dispersen Phase über zusätzliche Terme berücksichtigen. Diese Modelle entsprechen einer Zweiwegekopplung. Für die Bestimmung der korrelierten Geschwindigkeitsschwankungen werden die charakteristischen Zeit- und Längenskalen der Phasen verglichen und die Änderung der Turbulenz durch die Anwesenheit von Partikeln bestimmt.

Beim $k - \epsilon$ -Modell entstehen z.B. neben den Dämpfungsfunktionen für dichtegeschichtete Fluide Terme, die spezielle Eigenschaften der dispersen Phase, wie z.B. Partikelträgheit und Partikelbahnlinienverläufe, mit einbeziehen. Für die Erhaltungsgleichungen von kinetischer Energie k und Energiedissipation ϵ ergeben sich dann folgende Terme:

$$\begin{aligned}\Pi_k &= \frac{I_{cd}}{\alpha_c \varrho_c} (\overline{\mathbf{u}_{tc} \mathbf{u}_{td}} + (\mathbf{u}_d - \mathbf{u}_c) \mathbf{u}_{dr}) \\ \Pi_\epsilon &= C_{3\epsilon} \frac{\epsilon_c}{k_c} \Pi_k\end{aligned}\quad (4.26)$$

mit \mathbf{u}_{dr} : Driftgeschwindigkeit (Kapitel 4.1.3)
 $C_{3\epsilon}$: Konstante
 $C_{3\epsilon} = 1.2$

Die kovarianten Geschwindigkeitsfluktuationen beider Phasen werden über die kinetische Energie der kontinuierlichen Phase und dem Verhältnis von Partikelrelaxationszeit und Interaktionsdauer beider Phasen (Kapitel 3.2.1) approximiert (Simonin et al., 1990 [62] und Simonin, 1991 [63]).

$$\begin{aligned}\overline{\mathbf{u}_{tc} \mathbf{u}_{td}} &= k_{cd} - 2k_c \\ k_{cd} &= 2.0k_c \left(\frac{b + \frac{t_{cp}}{t_p}}{1 + \frac{t_{cp}}{t_p}} \right) \\ b &= (1 + C_{VM}) \left(\frac{\varrho_d}{\varrho_c} + C_{VM} \right)^{-1}\end{aligned}\quad (4.27)$$

Mit diesem zusätzlichen Term ergeben sich die Erhaltungsgleichungen für die turbulenten Größen der **kontinuierlichen** Phase wie folgt:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}(\varrho_c \alpha_c k_c) + \nabla \cdot (\alpha_c \varrho_c \mathbf{u}_c k_c) &= \nabla \cdot \left(\alpha_c \frac{\mu_{tc}}{\sigma_k} \nabla k_c \right) + \alpha_c 2\mathbf{S}_c : \nabla \mathbf{u}_c - \varrho_c \alpha_c \epsilon_c \quad (4.28) \\
&\quad + \alpha_c \varrho_c \Pi_k \\
\frac{\partial}{\partial t}(\varrho_c \alpha_c \epsilon_c) + \nabla \cdot (\alpha_c \varrho_c \mathbf{u}_c \epsilon_c) &= \nabla \cdot \left(\alpha_c \frac{\mu_{tc}}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon_c \right) + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon_c}{k_c} (\alpha_c 2\mathbf{S}_c : \nabla \mathbf{u}_c) \\
&\quad - C_{2\epsilon} \varrho_c \alpha_c \frac{\epsilon_c^2}{k_c} + \alpha_c \varrho_c \Pi_\epsilon
\end{aligned}$$

mit $C_{1,2,3\epsilon}$: Konstanten

$$\begin{aligned}
C_{1\epsilon} &= 1.44 \\
C_{2\epsilon} &= 1.92
\end{aligned}$$

$\sigma_{k,\epsilon}$: Prandtl-Schmidt-Zahlen

$$\begin{aligned}
\sigma_k &= 1.0 \\
\sigma_\epsilon &= 1.3
\end{aligned}$$

Die turbulente Viskosität μ_t berechnet sich dann nach folgender Gleichung:

$$\mu_t = \varrho_c c_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (4.29)$$

mit c_μ : Konstante

$$c_\mu = 0.09$$

Solche Modelle kommen vorallem für Bereiche, in denen Partikel-Partikel-Interaktionen eine untergeordnete Rolle spielen, zum Einsatz. Die Turbulenz der dispersen Phase wird durch die der kontinuierlichen dominiert, letztere wird aber vorallem durch die Partikel-trägheit und ggf. Dichteeffekte beeinflusst.

Für granulare Strömungen besteht die Möglichkeit durch Analogien zu der kinetischen Theorie von Gasen mit homogener Turbulenz (Jenkins und Savage, 1983 [33] und Villaret und Davies, 1995 [71]) ein eigenes Turbulenzmodell für die disperse Phase zu finden. Die kinetische Partikelenergie entspricht der Temperatur eines Gases. Sie wird daher als granulare Temperatur k_{td} bezeichnet und ist ein Maß für die Geschwindigkeitsfluktuationen in der dispersen Phase, d.h. für die Reynoldsspannungen.

$$k_{td} = \frac{1}{2} \overline{\mathbf{u}_{td} \mathbf{u}_{td}} \quad (4.30)$$

Die Bestimmung der granularen Temperatur erfolgt durch Aufstellen ihrer Transportgleichung, die formal an die Transportgleichung der turbulenten kinetischen Energie k (Gleichung 4.19 Seite 44) erinnert.

$$\frac{3}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t}(\varrho_d \alpha_d k_{td}) + \nabla \cdot (\varrho_d \alpha_d \mathbf{u}_d k_{td}) \right) = \underbrace{(-p_d \mathbf{E} + \mathbf{P}_d)}_I : \nabla \mathbf{u}_d +$$

$$\underbrace{\nabla \cdot (D_{ktd} \nabla k_{td})}_{II} + \underbrace{\epsilon_{ktd}}_{III} + \underbrace{W_d}_{IV} \quad (4.31)$$

mit D_{ktd} : Diffusionskoeffizient

Der erste Term steht dabei für die Energieproduktion aus Spannungen, der zweite für den diffusiven Energiefluß, der dritte für die Energiedissipation infolge von Kollisionen und der vierte für den Energieaustausch mit anderen Phasen. Oftmals wird auf den erhöhten Rechenaufwand verzichtet und eine vereinfachte algebraische Formulierung für die granulare Temperatur gewählt.

Die Berücksichtigung der Turbulenz in der fluiden Phase kann bei Verwendung eines granularen Turbulenzmodells durch ein disperses oder ein $k - \epsilon$ -Modell für die Suspension (Gleichung 4.32) erfolgen.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\varrho_m k_m) + \nabla \cdot (\varrho_m \mathbf{u}_m k_m) &= \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{tm}}{\sigma_k} \nabla k_m \right) + 2\mathbf{S}_c : \nabla \mathbf{u}_c - \varrho_m \epsilon_c + G \quad (4.32) \\ \frac{\partial}{\partial t}(\varrho_m \epsilon_m) + \nabla \cdot (\varrho_m \mathbf{u}_m \epsilon_m) &= \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{tc}}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon_m \right) + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon_m}{k_m} (2\mathbf{S}_m : \nabla \mathbf{u}_m + (1 - C_{3\epsilon})G) \\ &\quad - C_{2\epsilon} \varrho_m \frac{\epsilon_m^2}{k_m} \end{aligned}$$

mit \mathbf{u}_m : Suspensionsgeschwindigkeit

$$\mathbf{u}_m = \frac{\alpha_c \varrho_c \mathbf{u}_c + \alpha_d \varrho_d \mathbf{u}_d}{\alpha_c \varrho_c + \alpha_d \varrho_d}$$

$C_{3\epsilon}$: Konstante

$$C_{3\epsilon} = \begin{cases} 1 & \text{stabile Schichtung} \\ 0 & \text{instabile Schichtung} \end{cases}$$

G : Auftriebsterm

$$G = \mathbf{g} K_t \frac{\partial \varrho_m}{\partial z}$$

ϱ_m : Suspensionsdichte

$$\varrho_m = \sum_{i=1}^N \alpha_i \varrho_i$$

N : Anzahl der dispersen Phasen

Die turbulente Viskosität der Suspension μ_{tm} gilt dann für die fluide Phase und wird wie in der einphasigen Modellierung zu:

$$\mu_{tm} = \varrho_m C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (4.33)$$

bestimmt.

In Bereichen kleiner Partikelkonzentrationen ist die Turbulenz der kontinuierlichen Phase

dominant. Mit steigender Partikelkonzentration wird die Turbulenz der kontinuierlichen Phase und damit des Gesamtsystems durch das zunehmende strukturviskose Verhalten der dispersen Phase gedämpft. Die molekulare Viskosität der dispersen Phase wird dann wesentlich größer als die turbulente der kontinuierlichen Phase oder der Suspension.

4.3 Berücksichtigung der Flockendynamik

Die in Kapitel 3.2 vorgestellten kontinuumsmechanischen Erhaltungsgleichungen einer Mehrphasenströmung sind über die Partikeleigenschaften aller Teilchen einer Phase gemittelt, d.h., sie gelten genau genommen nur für Suspensionen mit homogenen nicht kohäsiven Partikeln.

Die Änderungen der Eigenschaftsverteilungen können aber über zusätzliche Gleichungen berücksichtigt werden. Das ist dann erforderlich, wenn eine Änderung der Eigenschaftsverteilung eines dispersen Systems von den vorliegenden Strömungsbedingungen abhängt, und das Strömungsverhalten wiederum durch die Eigenschaften der einzelnen Phasen geprägt ist.

Für Suspensionen mit **kohäsiven** Partikeln ändern sich die Partikeleigenschaften, wie z.B. Partikelgröße und -masse, aufgrund der Flockendynamik. Diese kann über die Veränderung der Anzahl von Partikeln mit bestimmten Eigenschaften als Funktion der vorliegenden Prozessbedingungen beschrieben werden. Durch Kollision und Koagulation bzw. durch Zerbrechen von Partikeln verringert bzw. vergrößert sich die Partikelanzahl, aber die durchschnittliche Partikelgröße wächst bzw. sinkt. Die Änderung der Teilchenanzahl kann durch die Konvektions-Diffusions-Gleichung beschrieben werden, die mit der Reynoldsmittelung folgende Form erhält (Teisson, 1992 [67]):

$$\frac{\partial N_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_d N_p) = \nabla \cdot ((D_{tf} + D_f) \nabla N_p) + f(N_p) \quad (4.34)$$

mit N_p : Anzahl der Partikel pro Volumeneinheit
 D_{tf} : turbulente Diffusivität
 D_f : molekulare Diffusivität der Flocken
 $f(N_p)$: Wechselwirkungskinetik

Anders als bei den **einphasigen** Modellen wird die Advektion der Partikelanzahl über die Phasengeschwindigkeit beschrieben, so dass die Partikelträgheit in jede Raumrichtung eingeht ¹.

Der molekulare Diffusionskoeffizient ist von der Partikelgröße und den Eigenschaften der kontinuierlichen Phase abhängig (Friedlander, 1977 [20]).

$$D_f = \frac{KT}{6\pi\mu_c d_f} \quad (4.35)$$

¹In der einphasigen Modellierung werden die Partikel von der kontinuierlichen Phase advektiert und erhalten lediglich in vertikaler Richtung über die Sinkgeschwindigkeit eine gewisse Eigendynamik

mit K : Boltzmannkonstante
 $K = 1.38 \cdot 10^{-23}$
 T : absolute Temperatur der fluiden Phase

Für die Bestimmung des turbulenten Diffusionskoeffizienten der Flocken gibt es in der Literatur eine Reihe von Ansätzen, die von der Art der turbulenten Kopplung abhängig sind. Ist die Partikellagerungsdichte so groß, dass Partikelkollisionen das turbulente Verhalten der Partikel bestimmen, ist der Diffusionskoeffizient von der Turbulenz der kontinuierlichen Phase unabhängig. Hier kommen Ansätze aus der kinetischen Gastheorie zum Tragen. Wird die Partikellagerungsdichte kleiner, bleiben die Partikel eine Zeitlang in den turbulenten Wirbeln und verlassen diese vor deren Zusammenbruch. Dieses Kreuzen von Partikelbahnen reduziert die turbulente Diffusion und produziert eine Driftgeschwindigkeit zwischen Partikel und Fluid (Kapitel 4.1.3). Die im numerischen Modell verwendeten Diffusionskoeffizienten zeigt Tabelle 4.3.

einphasiger Standard	$D_{tf} = \frac{\nu_{tc}}{\sigma_t}$
kinetische Gastheorie	$D_{tf} = \frac{d_p \sqrt{k_{td}}}{18\alpha_d}$
Simonin (Simonin et al., 1990 [62])	$D_{tf} = \frac{1}{3}k_{cd}t_{cp} + \left(\frac{2}{3}k_d - b\frac{1}{3}k_{cd}\right)t_p$

Tabelle 4.2: turbulente Diffusionkoeffizienten

Die Bestimmung der Wechselwirkungskinetik erfolgt zumeist als Linearkombination von Aggregationsprozess und dem Prozess des Flockenzerbrechens. Die Mechanismen, die Partikel kollidieren und zerbrechen lassen, werden über Kollisions- bzw. Bruch- und Erosionsfrequenzen dargestellt, die von den **Systemeigenschaften** abhängig sind. Die Frequenzen werden durch Berechnung der diffusiven Flüsse infolge der unterschiedlichen Kollisionsmechanismen bestimmt.

$$\nabla \cdot (D \nabla N_p) = 0 \quad (4.36)$$

Es werden nur binäre Kollisionen zugelassen, d.h. die Partikellagerungsdichte ist gering. Die kohäsiven **Partikeleigenschaften** werden über Effektivitäten parametrisiert.

Die Modellierung kann dabei entweder mit kontinuierlicher oder diskreter Flockengrößenverteilung erfolgen. Für die polydisperse Suspension im Nachklärbecken bietet sich eine Unterteilung in Primärpartikel und Flocken mit unterschiedlichen Verteilungsfunktionen an (Kapitel 2.2). Für beide Flockenklassen müsste dann die Advektions-Diffusionsgleichung der Flockenanzahl gelöst werden. Durch die Modellierung der Wechselwirkungskinetik würden Integro-Partialgleichungen entstehen, die einen erheblichen numerischen Aufwand bedeuten. Dem gegenüber ständen jedoch kontinuierliche Verteilungen der Partikeldurchmesser beider Klassen. Im Rahmen dieser Arbeit wird auf diesen

komplexen Ansatz verzichtet und eine diskrete Partikelverteilung gewählt.

Unter Annahme einer **diskreten** Partikelverteilung können Gewinn Q_k und Verlust S_k der Größenklasse k berechnet werden (Friedlander, 1977 [20]).

$$Q_k = \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i+j=k} g_{ij} A_{ij} N_i N_j}_I + \underbrace{\sum_{j=k+1}^{\infty} A_{jk} g_j N_j}_{II} + \underbrace{\sum_{j=k+1}^{\infty} A_{ik} N_j \sum_{i=1}^{\infty} A_{ij} g_{ij} N_i}_{III} \quad (4.37)$$

- I : Flokkulation von kleineren Partikeln bzw. Flocken
- II : schubspannungsinduziertes Zerbrenen größerer Flocken
- III : stoßinduziertes Zerbrenen größerer Flocken

$$S_k = - \underbrace{N_k \sum_{i=1}^{\infty} g_{ik} A_{ik} N_i}_I - \underbrace{g_k N_k}_{II} - \underbrace{N_k \sum_{i=1}^{\infty} A_{ik} g_{ik} N_i}_{III} \quad (4.38)$$

- I : Flokkulation zu größeren Partikeln
- II : schubspannungsinduziertes Zerbrenen der Klasse k
- III : stoßinduziertes Zerbrenen der Klasse k

- mit A_{ij} : Entstehungswahrscheinlichkeiten
 A_i : Bruchwahrscheinlichkeiten
 g_{ij} : Kollisions- bzw. Bruchfrequenzen

Die Entstehungswahrscheinlichkeiten A_i hängen von den kohäsiven Eigenschaften der Partikel ab. Sie werden, besonders bei einem so komplexen Agglomerat wie belebtem Schlamm, stark von dem physiochemischen und biologischen Aufbau der Flocke beeinflusst, der wiederum durch die Abwasserzusammensetzung und das Flockenalter charakterisiert wird.

Initialisiert wird der Flokkulationsprozess durch Bildung von Mikroflokkeln infolge der Brownschen Molekularbewegung. Durch Geschwindigkeitsgradienten auf der Mikroflokkenebene wachsen diese an und nehmen beim Absinken andere Flocken mit sich (differentielles Absinken).

Die Kollisions- und Bruchfrequenzen für **kugelförmige** Partikel erhalten folgende Form (Friedlander, 1977 [20] und Schütz, 1999 [60]):

- mit g : Kollisionsfrequenz
 λ : Kolmogorovlänge

$$\lambda = \left(\frac{\mu^3}{\rho^3 \epsilon} \right)^{\frac{1}{4}}$$
 G : mittlerer Geschwindigkeitsgradient

$$G = \sqrt{\frac{\rho \epsilon}{\mu}}$$

Für poröse fraktale Flocken wird die Flokkulation infolge Brownscher Molekularbewegung und turbulenter Geschwindigkeitsgradienten mit den obigen Ansätzen unterschätzt,

Brownsche Molekularbewegung	$g_{ij} = \frac{2}{3} \frac{KT}{\mu} \frac{(d_i + d_j)^2}{d_i d_j}$
turbulente Geschwindigkeitsgradienten	$g_{ij} = \frac{G}{6} (d_i + d_j)^3$
differentielles Absinken	$g_{ij} = \pi \frac{(d_i + d_j)^2}{4.0} w_i - w_j $
Bruchfrequenz Kollision	$g_i = k_3 m_k^{k_4} \epsilon^{k_5 \epsilon + k_6}$
Erosionsfrequenz	$g_j = k_7 G$

Tabelle 4.3: Frequenzen der Flockendynamik

da der strömungsmechanische Partikelwiderstand über- und das Anwachsen der Flockengröße unterschätzt wird (Gregory, 1997 [23]).

Die Bruchfrequenzen sind eine Funktion der Weberzahl. Diese ist ein Maß für die Flockenstabilität und wird durch das Verhältnis von angreifenden und die Flocke stabilisierenden Kräften bestimmt. Für Flocken mit geringer Überschussdichte kann das Zerbrechen infolge Partikelkollisionen vernachlässigt werden (Winterwerp, 1999 [77]), d.h. der III. Term in Gleichung 4.38 entfällt. Die Anzahl kleinerer Flocken, in die eine große Flocke zerbricht, hängt vom Verhältnis der Flockengröße zur Größe der Primärpartikel, vom Verhältnis der turbulenten Spannungen zu denen innerhalb der Flocke und der Interaktionszeit von Partikel und turbulentem Wirbel ab.

In einer turbulenten Strömung verursachen Geschwindigkeitsfluktuationen Scher-, Zug- und Druckspannungen \mathbf{T}_{tc} , die zum Zerbrechen der Flocke oder zu Erosion von Partikeln führen können. Die Art der maßgebenden Bruchspannung hängt vom Verhältnis der Flocken- zur Wirbelgröße ab, das bestimmt, ob die Strömung aus Sicht der Flocke pseudolaminar oder turbulent ist, und so über Größe und Richtung der angreifenden strömungsinduzierten Kraft entscheidet.

Von Flocken in der Größe der Kolmogorovlänge, also der kleinsten nichtdissipierten Wirbel, werden lediglich Partikel erodiert. Befindet sich die Flocke im Wirbelzentrum, rotiert sie gleichförmig, d.h. mit einer konstanten Wirbelgeschwindigkeit. Die auf ihrer Oberfläche wirkende Scherspannung ist nach dem Oseen-Modell unabhängig vom Flockendurchmesser und nur vom Geschwindigkeitsgradienten abhängig (Mühle, 1993 [51] und Levich, 1962 [45]).

$$\mathbf{T}_{tc} \approx \mu_c G \quad (4.39)$$

Sind die Flocken größer als die Kolmogorovlänge dringen die turbulenten Wirbelstrukturen in die Flockenporen ein, so dass die Flocken Beanspruchungen ausgesetzt sind, die aus der Relativbewegung der Wirbel zueinander entstehen. Die Flocken zerbrechen in kleinere Teile.

$$\mathbf{T}_{tc} \propto \varrho_c \left(\frac{\epsilon^3}{\nu_c} \right)^{\frac{1}{4}} d_f \quad (4.40)$$

Die Bindungskraft innerhalb der Flocke \mathbf{T}_f ist von der Bindungsart (Kapitel 2.2) abhängig. Polymere Brückenbindungen sind in der Regel stabiler als van-der-Waalsche Bindungen (Sonntag, 1993 [64]). Ferner ist die Bindungskraft proportional zu der Anzahl der Einzelbindungen in der Bruchfläche, die über den Feststoffanteil bzw. die Porosität bestimmt wird. Flocken, die infolge des differentiellen Absinkens entstanden sind, sind weniger porös und haben eine höhere Sinkgeschwindigkeit als Flocken, die infolge turbulenter Geschwindigkeitsgradienten entstanden sind. Ein Vergleich der Kollisionsfrequenzen zeigt, dass beim differentiellen Absinken die Kollision zwischen Partikeln mit deutlich unterschiedlicher Sinkgeschwindigkeit bevorzugt eintritt, d.h., große Flocken sammeln kleinere Partikel ein. Diese setzen sich z.T. in die Flockenporen und führen so zu einer höheren Flockenporosität. Damit einher geht eine Erhöhung der fraktalen Dimension, die letztendlich eine fraktale Betrachtungsweise der durch differentielles Absinken entstandenen Flocken nicht mehr zuläßt (Huang, 1994 [27]).

$$\mathbf{T}_f \propto (1 - e_f) \frac{\mathbf{F}_f}{d_f^2} \quad (4.41)$$

$$(1 - e_f) = A d_f^{-m} \quad \text{turbulente Geschwindigkeitsgradienten}$$

$$(1 - e_f) = \alpha + \beta d_f^{-\gamma} \quad \text{differentielles Absinken}$$

mit \mathbf{F}_f : Einzelbindungskraft innerhalb der Flocke
 e_f : Flockenporosität
 A, m : empirische Koeffizienten
 $A = 2.27 - 7.91$
 $m = 1.03 - 1.17$
 α, β, γ : empirische Koeffizienten
 $\alpha = 0.02$
 $\beta = 55.0$
 $\gamma = 1.8$

Für fraktale Flocken ist die Anzahl der Einzelbindungen von der Flockengröße unabhängig und wird von der fraktalen Flockendimension bestimmt. Sie wird in der Bruchwahrscheinlichkeit als Exponent berücksichtigt. Die Spannung in der Flocke berechnet sich dann zu:

$$\mathbf{T}_f = \frac{\mathbf{F}_f}{d_f^2} \quad (4.42)$$

Die Einzelbindungskraft F_f wird von den physiochemischen und biologischen Eigenschaften des belebten Schlammes bestimmt. Erstere können über das Zetapotential bestimmt werden, wobei die in der Literatur aufgeführten Ansätze empirischen Charakter haben

und keine einheitliche Vorgehensweise existiert (Wilén, 1999 [75]).

Werden die Flocken als fraktale Einheiten betrachtet, deren kleinste Struktur die Primärpartikel sind, kann das Flockenzerbrechen folgendermaßen dargestellt werden:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_p} \frac{dN}{dt} &\propto \frac{1}{t_{cp}} f \left(\frac{d_f - d_p}{d_p}, \frac{\mathbf{T}_{tc}}{\mathbf{T}_f} \right) \\ f &= a \left(\frac{d_f - d_p}{d_p} \right)^p \left(\frac{\mathbf{T}_{tc}}{\mathbf{T}_f} \right)^q \end{aligned} \quad (4.43)$$

mit a, p, q : experimentell zu bestimmende Koeffizienten bzw. Exponenten
 e_b : Bruchwahrscheinlichkeit

Im Gegensatz zur einphasigen Modellierung wird hier die Interaktionszeit t_{cp} (Kapitel 3.2.1) zwischen Wirbel und Partikel anstelle der Wirbellebensdauer verwendet, da diese das Flockenzerbrechen erheblich beeinflusst (Lee et al., 1994 [43]). Je größer die Interaktionsdauer desto eher zerbrechen Flocken. Unter Verwendung der oben bestimmten Spannungen ändert sich die Flockenanzahl infolge Zerbrechen:

$$\frac{dN}{dt} = ae_b \frac{1}{t_{cp}} \left(\frac{d_f - d_p}{d_p} \right)^p \left(\frac{\mathbf{T}_{tc}}{\mathbf{T}_f} \right)^q N_p \quad (4.44)$$

Neben den Partikelbewegungen, die infolge der Bewegungen der Wassermoleküle entstehen, wird auch die Eigendynamik der dispersen Phase, d.h. Partikelkollisionen, berücksichtigt. Die turbulente Diffusion infolge der Eigendynamik wird nach Tabelle 4.3 berechnet.

$$g_{ij} = 2\pi D_{tf}(d_i d_j) \quad (4.45)$$

Unter der Annahme, dass die Suspension monodispers ist und nur eine Flockenklasse enthält kann die Änderung der Flockenanzahl infolge der Flokkulation folgendermaßen approximiert werden (Levich, 1962 [45]):

$$\frac{dN}{dt} = -4e_c e_d \pi D_f d_f N_p^2 - \frac{3}{2} e_c \pi e_d G d_f^3 N_p^2 - e_c e_d \frac{\rho_d}{\rho_c} \frac{\epsilon^{3/4}}{\nu^{5/4}} d_f^4 N_p^2 - e_c e_d 2\pi D_{tf} d_f N_p^2 \quad (4.46)$$

mit d_f : Flockendurchmesser
 e_c : Parameter für die Koagulationswahrscheinlichkeit
 e_d : Diffusionsparameter
 G : Absoluter Geschwindigkeitsgradient
 $G = \sqrt{\frac{\epsilon}{\nu}}$

Die Wechselwirkungskinetik nimmt mit den obigen Ansätzen folgende Form an:

$$\begin{aligned}
f(N_p) = & ae_b \frac{1}{t_{cp}} \left(\frac{d_f - d_p}{d_p} \right)^p \left(\frac{\eta G_c}{C(1 - e_f) \frac{\mathbf{F}_f}{d_f^2}} \right)^q N_p - \\
& \underbrace{\frac{3}{2} e_c \pi e_d G d_f^3 N_p^2}_{k_A} - 4 e_c e_d \pi D_f d_f N_p^2 - \\
& e_c e_d \frac{\rho_d}{\rho_c} \frac{\epsilon^{\frac{3}{4}}}{\nu^{\frac{3}{4}}} d_f^4 N_p^2 - e_c e_d 2\pi D_{tf} d_f N_p^2
\end{aligned} \tag{4.47}$$

Die Exponenten p und q werden unter Annahme von Gleichgewichtsbedingungen mit einem vereinfachten Modell der Flockendynamik und Messdaten zu

$$\begin{aligned}
p &= 3 - n_f \\
q &= \frac{1}{2}
\end{aligned} \tag{4.48}$$

bestimmt (Winterwerp, 1999 [77]).

Für die Parameter werden aus Messwerten folgende Empfehlungen für Ästuarsedimente gegeben:

$$\begin{aligned}
k_A &= 0.31 \\
e_c &= O \quad 0.01 \\
e_d &= 0.5 - 1 \\
ae_b &= 2 \cdot 10^{-5} \\
n_f &= 2 \\
\mathbf{F}_f &= O \quad 10^{-10}
\end{aligned} \tag{4.49}$$

Mit der geometrischen Beziehung zwischen Flockenanzahl und Flockengröße wird die Kopplung von Hydro- und Flockendynamik erreicht.

$$N_p = \frac{\alpha_p}{f_s d_f^3} \tag{4.50}$$

bzw.

$$d_f = \sqrt[3]{\frac{\alpha_p}{N_p f_s}} \tag{4.51}$$

mit f_s : Formfaktor

4.4 Vergleich zwischen ein- und mehrphasiger Modellierung des Partikeltransportes

Bei der **einphasigen** Modellierung werden Suspensionen als ein homogenes kontinuierliches System mit mitbewegten Tracern, die die Partikel repräsentieren, idealisiert. Die Erhaltungsgleichungen von Masse und Impuls (Navier-Stokes-Gleichungen) werden für dieses Gesamtsystem aufgestellt und zusätzlich die Advektions-Diffusionsgleichung (Transportgleichung) der Tracer, die sich aus der Erhaltungsgleichung mit der Reynoldsmittelung aus der Massenerhaltung der Tracer ergibt, gelöst. Dieses Vorgehen bedingt, dass die Auswirkungen der Partikeleigenschaften auf das Gesamtsystem durch konstitutive Beziehungen und Parametrisierungen berücksichtigt werden müssen.

Für den Feststofftransport in kontinuierlichen Medien sind Partikeldichte und -größe von entscheidender Bedeutung für das Gesamtsystem. Die Auswirkungen der Partikeldichte auf die Situation des Gesamtsystems, d.h. die Entstehung von Dichteströmungen, werden in der einphasigen Modellierung vereinfacht über die Boussinesq-Approximation in den Navier-Stokes-Gleichungen abgebildet. Sie geht davon aus, dass Dichteänderungen im Verhältnis zur mittleren Fluidichte klein sind und nur in den Auftriebs- und nicht in den Trägheitstermen berücksichtigt werden müssen. Dichte und Druck werden als Summen aus Referenzdichte und Dichteänderung bzw. aus Druck und der Druckänderung dargestellt. Die Dichteänderung wird aus der Zustandsgleichung ermittelt. Druck und Dichte sind nur sehr wenig korreliert (Malcherek, 2001 [48]). Der Einfluß der Dichteschichtung auf die Turbulenz erfolgt in Abhängigkeit der Stabilität der Schichtung durch Dämpfungsfunktionen in den vertikalen Austauschtermen.

Das errechnete Strömungsfeld gilt für das Gesamtsystem, charakterisiert also auch die Bewegung der Partikel. Die infolge der Partikelträgheit und der Dichtedifferenz entstehenden Relativgeschwindigkeiten in den drei Raumrichtungen werden in der Advektions-Diffusionsgleichung über die turbulenten Diffusionskoeffizienten und den Sinkgeschwindigkeitsterm parametrisiert. Sie verursachen über eine Änderung der Konzentrationsverteilung eine Dichteänderung und beeinflussen so letztendlich das Strömungsfeld der Suspension.

In der Formulierung der Sinkgeschwindigkeit müssen die Auswirkungen der entscheidenden Kräfte auf das Partikel und der Einfluß höherer Partikelkonzentrationen, z.B. das behinderte Absinken, parametrisiert werden. Die Verwendung der Massenkonzentration läßt die räumliche Ausdehnung der Partikel nicht erkennen, Lage und Ausdehnung einer Lutocline können a priori nicht abgebildet werden. In der Ästuarmodellierung, in der solche Prozesse von großer Bedeutung sind, wird daher der Konsolidierungsprozess in einem gesonderten Teilmodell, das über Grenzwerte der Massenkonzentration gesteuert wird und über Erosions- und Depositionsflüsse infolge der Bodenschubspannung mit dem Modell der Wassersäule gekoppelt ist, abgebildet. In der Nachklärbeckenmodellierung wird die Lage des Schlammspiegels durch die Formulierung des Sinkgeschwindigkeitsterms und Grenzwertes für die Massenkonzentrationen beeinflusst.

Änderungen der Fließeigenschaften der Suspension infolge Gelierung, d.h. bei dauerhaftem Partikelkontakt, werden über einen Viskositätsansatz oder ein Konsolidierungsmo-

dell modelliert. Die Aufwirbelung von Partikeln an der Oberfläche einer Lutocline erfolgt in Abhängigkeit von der Bodenschubspannung über den Erosionsfluss oder über die turbulente Partikeldiffusion und die Relativgeschwindigkeit.

Die kontinuierliche Entwicklung des Konzentrationsprofils von der Wasseroberfläche bis zum festen inkompressiblen Boden mit der Vielzahl von Prozessen und Eigenschaften kann nur durch Parametrisierungen oder die Kopplung unterschiedlicher Teilmodelle reproduziert werden (Teisson, 1994 [66]). Die in der einphasigen Modellierung verwendeten Variablen und deren Kopplungen sind in Abbildung 4.1 dargestellt.

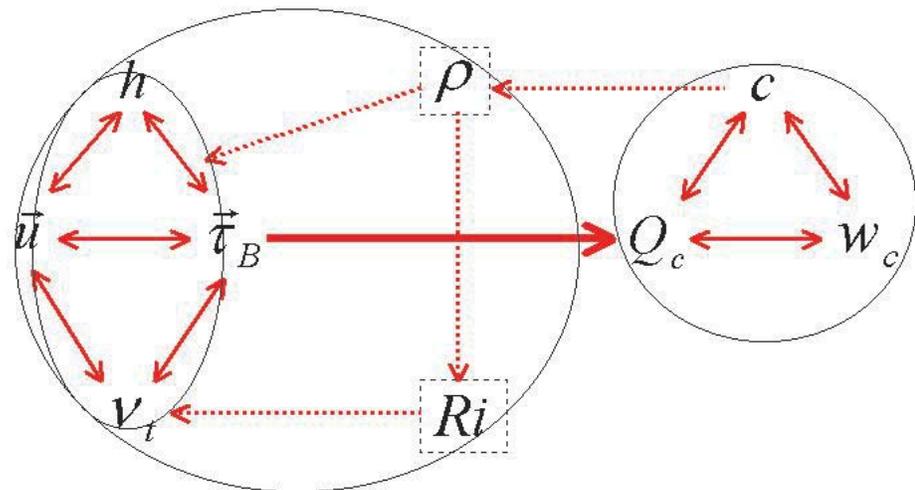


Abbildung 4.1: Einphasige Modellierung der Suspension

In der **mehrphasigen** Modellierung wird die Grundidee der einphasigen Modellierung, dass die Partikel von der kontinuierlichen Phase transportiert werden und diese relativ unbeeinflusst bleibt, nicht übernommen. Die Partikel erhalten vielmehr über ihre explizite Modellierung als eigene disperse Phase oder Phasen eine im Verhältnis zum Trägermedium gleichberechtigte Rolle. Die Partikelbewegung kann durch Lösung einer eigenen Impulserhaltungsgleichung unter direkter Berücksichtigung der Phaseninteraktionen als Funktion von Partikel- und Strömungseigenschaften und der Partikelkonzentration auch in den Bereichen des behinderten Absinkens und des Schlammspiegels explizit modelliert werden. Die Impulsaustauschsterme, die die Phaseninteraktionen beschreiben, modellieren die an den Grenzflächen wirkenden Kräfte und koppeln die Bewegung beider Phasen wechselseitig miteinander. Diese Kräfte, die bei einem einphasigen Modell im Sinkgeschwindigkeitsterm in algebraischer oder z.T. in vereinfachter Form enthalten sind, wirken direkt auf beide Phasen. Die Geschwindigkeitsfelder von Partikeln und Trägermedium können sich in allen drei Raumrichtungen infolge der Partikelträgheit und- dichte unterscheiden. Der Umweg über Dichteapproximation, Sinkgeschwindigkeit

und Diffusionskoeffizienten wie in der einphasigen Modellierung ist nicht erforderlich. Die Korrelation beider Phasen ist sehr viel stärker und wechselseitig. Mit einem eigenständigen Turbulenzmodell für jede Phase kann der unterschiedlichen Turbulenzentstehung und der wechselseitigen Beeinflussung Rechnung getragen werden.

Die Ausbildung der Lutocline und die anschließende Konsolidierung wird von einem mehrphasigen Modell berechnet, so dass die kontinuierliche Entwicklung des Konzentrationsprofils durch ein Modell abgebildet werden kann. Die konstitutive Beziehung für die Volumenviskosität beschreibt das Kompressionsverhalten der dispersen Phase, wobei die Partikel selber in der Regel als inkompressibel angenommen werden.

Die sich über die Vertikale ändernden rheologischen Eigenschaften der Suspension werden ähnlich der einphasigen Modellierung über die Spannungstensoren durch Stoffgesetze, d.h. in der Regel durch sich ändernde Viskositäten, berücksichtigt. Die konstitutive Beziehung wird aber nicht für die Gesamtsuspension, sondern für jede Phase getrennt aufgestellt. Die generellen Abhängigkeiten der zu berechnenden Größen untereinander sind für das hier verwendete mehrphasige Modell in Abbildung 4.2 dargestellt.

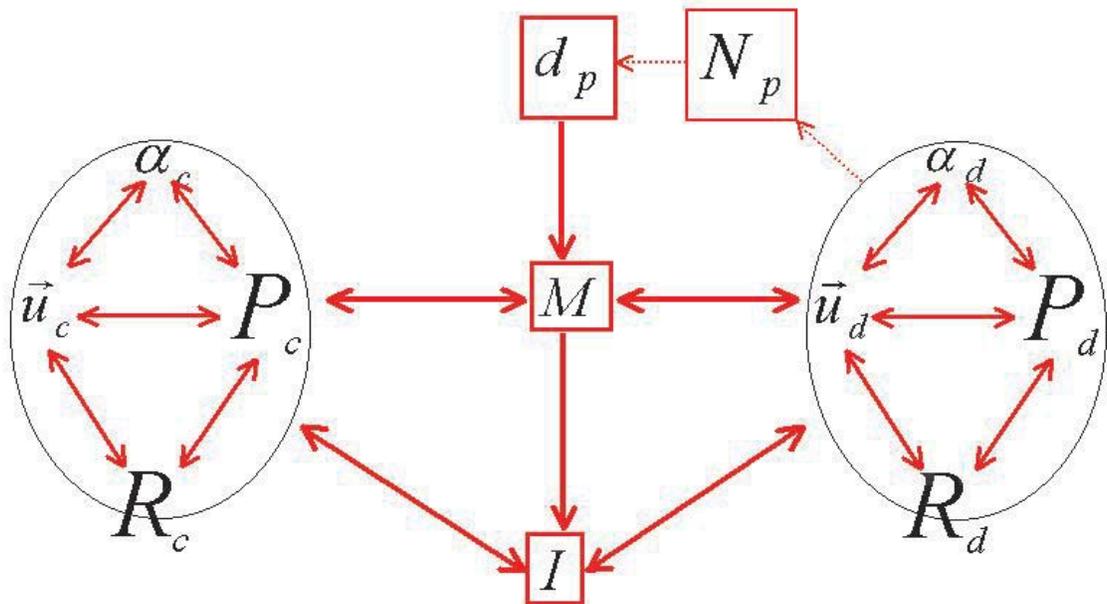


Abbildung 4.2: Mehrphasige Modellierung der Suspension

Anzumerken sei hier noch, dass der Feststoffhaushalt kohäsiver Partikel maßgeblich von der Flockendynamik geprägt wird. Ihre Modellierung ist nicht allein wegen der Parametrisierung der z.T. noch unbekanntenen chemischen und biologischen Vorgänge und Zusammenhänge auf der mikroskopischen Ebene stets ein Problem. Sie wird zumeist über

ein Teilmodell auf der Basis der Diffusionstheorie von v. Schmoluchowski, 1917 [59] abgebildet.

In der **einphasigen** Modellierung ändert sich infolge der Flockendynamik die Konzentrationsverteilung, das Modell der Flockendynamik wirkt als Konzentrationsquelle und damit indirekt auch auf das Strömungsfeld der Gesamtsuspension. Aussagen über eine Partikelgrößenverteilung sind nur über eine Umrechnung der Massenkonzentration in den Partikeldurchmesser möglich.

Wird **mehrphasig** modelliert ändert sich der Partikeldurchmesser, der das Verhalten der dispersen Phase und über die Austauschterme auch das des Trägermediums bestimmt. Aus der Partikelanzahl wird auf den Partikeldurchmesser rückgeschlossen.

Die oben genannten Grundlagen der ein- und mehrphasigen Modellierung sind in Tabelle 4.4 zusammengestellt und die dazugehörigen Erhaltungsgleichungen gegenübergestellt. Die zur Lösung notwendigen konstitutiven Beziehungen und Randwerte zeigt Tabelle 4.5. Die Bezeichnung der verwendeten Größen ist aus der Nomenklatur ersichtlich. Deutlich wird, dass bei Verwendung eines Mehrphasenmodells wesentlich mehr gekoppelte Gleichungen zu lösen sind, die Rechenzeiten also deutlich länger werden als bei einem einphasigen Modell. Darüberhinaus werden konstitutive Beziehungen für das Verhalten jeder Phase benötigt, insbesondere für die granulare Phase muss das Scher- und Kompressionsverhalten so modelliert werden, dass es das Verhalten bei unterschiedlichen „Aggregatzustände“, also in Abhängigkeit der Partikellagerungsdichte beschreibt. Die Kenntnis des Verhaltens der Suspension reicht hier nicht aus. Auch erfordert ein Mehrphasenmodell Randwerte für jede Phase und für die Validierung Messdaten für jede Phase. Eine abschließende Diskussion und Bewertung beider Modelltypen für den Einsatz in der Suspensionsmodellierung und dabei insbesondere in Nachklärbecken, eine Abgrenzung der Anwendungsbereiche und die Beschränkungen hinsichtlich der Möglichkeiten der Messtechnik erfolgt in den anschließenden Kapiteln.

einphasig	mehrphasig
Impulserhaltung kontinuierliche Phase <ul style="list-style-type: none"> • Boussinesq-Approximation • Zustandsgleichung • Spannungstensor kontinuierliche Phase → Viskositätsänderung 	Impulserhaltung jede Phase <ul style="list-style-type: none"> • Dichte jeder Phase • Phaseninteraktion • Dichte-Druckkorrelation • Spannungstensor jede Phase → Phaseigenschaften
Transportgleichung disperse Phase <ul style="list-style-type: none"> • Massenkonzentration • turbulente Diffusivität • Sinkgeschwindigkeit 	Erhaltungsgleichungen disperse Phase <ul style="list-style-type: none"> • volumetrische Konzentration • Phasenübergang • Geschwindigkeitsfeld • Spannungstensoren
<ul style="list-style-type: none"> • $\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{u}) = 0$ 	<ul style="list-style-type: none"> • $\frac{\partial \alpha_c \varrho_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c \varrho_c \mathbf{u}_c) = \Gamma_c$ • $\frac{\partial \alpha_d \varrho_d}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_d \varrho_d \mathbf{u}_d) = -\Gamma_c$
<ul style="list-style-type: none"> • $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u}) =$ $\nabla \cdot \left(-\frac{1}{\varrho_0} p \mathbf{E} + \frac{1}{\varrho} (\mathbf{P} + \mathbf{R}) \right) + \frac{\Delta \varrho}{\varrho_0} \mathbf{g}$ 	<ul style="list-style-type: none"> • $\frac{\partial \alpha_c \varrho_c \mathbf{u}_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c \varrho_c \mathbf{u}_c \mathbf{u}_c) =$ $\nabla \cdot (\alpha_c (-p_c \mathbf{E} + \mathbf{P}_c + \mathbf{R}_c)) + \alpha_c \varrho_c \mathbf{g}_c +$ $\mathbf{M} + \mathbf{u}_i \Gamma$ • $\frac{\partial \alpha_d \varrho_d \mathbf{u}_d}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_d \varrho_d \mathbf{u}_d \mathbf{u}_d) =$ $\nabla \cdot (\alpha_d (-p_d \mathbf{E} + \mathbf{P}_d + \mathbf{R}_d)) + \alpha_d \varrho_d \mathbf{g}_d -$ $\mathbf{M} - \mathbf{u}_i \Gamma$
<ul style="list-style-type: none"> • $\frac{\partial c}{\partial t} + ((\mathbf{u} - \delta w_s) \nabla c) = \nabla (\mathbf{D}_t \nabla c) + Q_c$ 	

Tabelle 4.4: Vergleich von einphasiger und mehrphasiger Sedimenttransportmodellierung

einphasig	mehrphasig
konstitutive Beziehungen	
<p>• $\mathbf{P}, \mathbf{R}, w_s, \mathbf{D}_t, Q_c$</p> <p>→ $\varrho = \varrho(c, S, T, \dots)$</p> <p>→ $\nu = \nu(c, \mathbf{P}, \dots)$</p>	<p>• $\mathbf{P}_{c,d}, \mathbf{R}_{c,d}, \mathbf{M}, \Gamma$</p> <p>→ $\varrho_c = \varrho_c(T_c, p_c, S, \dots)$</p> <p>→ $\varrho_d = \varrho_d(T_d, d_d, p_d, \dots)$</p> <p>→ $\nu_c = \nu_c(\mathbf{S}_c)$</p> <p>→ $\nu_d = \nu_d(\mathbf{S}_d, \alpha_d, k_{td}, \dots)$</p> <p>→ $\kappa_d = \kappa_d(\alpha_d, d_d, k_{td}, \dots)$</p>
Randwerte	
• \mathbf{u}, c	• $\mathbf{u}_{c,d}, \alpha_{c,d}$

Tabelle 4.5: Notwendige konstitutive Beziehungen und Randwerte im Vergleich

4.5 Das numerische Modell

Die numerische Umsetzung der in Kapitel 3 und 4 vorgestellten Erhaltungsgleichungen mit den konstitutiven Beziehungen für granulare Materialien erfolgt auf der Basis des kommerziellen Programmsystems FLUENT [17]. Dieses Programmsystem verwendet die Finite-Volumen-Methode zur Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen und stellt unterschiedliche Mehrphasenmodelle zur Beschreibung technischer Strömungen zur Verfügung. Verwendung finden in dieser Arbeit ausschließlich das mehrphasige granulare Eulermodell und ein einphasiges Modell, die im folgenden kurz skizziert werden.

Das **granulare Eulermodell** berechnet Systeme, die aus einer kontinuierlichen und ggf. mehreren granularen Phasen bestehen können. Für jede Phase werden die Erhaltungsgleichungen von Masse und Impuls gelöst. Dabei wird ein Druckfeld für beide Phasen berechnet, dem bei Betrachtung einer granularen Phase ein zusätzlicher Term, der die Entstehung von Druck infolge der granularen Temperatur und der Partikellagerungsdichte berechnet, superponiert wird. Die Formulierung der konstitutiven Gleichungen der Spannungstensoren und Impulsaustauschtermen erfolgt modellspezifisch, kann aber z.T. auch vom Benutzer definiert werden. Massenaustausch zwischen den Phasen und der Transport definierter Tracer kann ebenfalls vom Benutzer definiert werden.

Die Turbulenz der kontinuierlichen Phase wird über das RNG – k – ϵ –Modell ² approximiert, das je nach wechselseitigen Abhängigkeiten für die Mischung, für eine Phase mit entsprechenden Zusatztermen oder für beide Phasen formuliert werden kann (Kapitel 4.2). Bei granularen Systemen wird die Turbulenz der granularen Phase über eine algebraische Formulierung der mittleren kinetischen Partikelenergie, die durch Analogien zur Gasdynamik gewonnen wurde, berechnet.

Das einphasige Modell verwendet die in Kapitel 4.4 dargestellten Gleichungen zusammen mit dem RNG – k – ϵ –Modell. Der Einfluß der Dichte wird im Turbulenzmodell berücksichtigt.

Für die Anwendung dieses Programmsystems auf Nachklärbecken mussten die speziellen Eigenschaften des belebten Schlammes modelliert werden. Das granulare Eulermodell wurde um die in Kapitel 4.1 vorgestellten konstitutiven Beziehungen für kohäsive Partikel erweitert. Darüberhinaus wurde mit Hilfe der Transportgleichung für definierte Tracer die Änderung der Partikelanzahl infolge der Flockendynamik realisiert und mit dem Phasendurchmesser gekoppelt. Die Turbulenz der kontinuierlichen Phase wurde aufgrund programmtechnischer Restriktionen über ein Turbulenzmodell für die Suspension abgebildet. Die Modellierung der Turbulenz in der granularen Phase erfolgt über die oben erwähnte algebraische Formulierung der kinetischen Partikelenergie, zu der aber keine genaueren Angaben gemacht werden. Das erweiterte granulare Eulermodell löst folgende Gleichungen:

²Renormalization – group – k – ϵ –Modell

<p>Massenerhaltung für die kontinuierliche Phase:</p> $\frac{\partial \alpha_c \varrho_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c \varrho_c \mathbf{u}_c) = 0$
<p>Massenerhaltung für die granulare Phase:</p> $\frac{\partial \alpha_d \varrho_d}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_d \varrho_d \mathbf{u}_d) = 0$
<p>Impulserhaltung für die kontinuierliche Phase:</p> $\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_c \varrho_c \mathbf{u}_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c \varrho_c \mathbf{u}_c \mathbf{u}_c) &= -\nabla \alpha_c p_{c,d} + \alpha_c \varrho_c \mathbf{g} \\ &+ \nabla \cdot (\alpha_c (\mu_c + \mu_{tm}) (\nabla \mathbf{u}_c + \nabla \mathbf{u}_c^T)) - \mathbf{M}_{td} \end{aligned}$
<p>Impulserhaltung für die granulare Phase</p> $\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_d \varrho_d \mathbf{u}_d}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_d \varrho_d \mathbf{u}_d \mathbf{u}_d) &= -\nabla \alpha_d p_{c,d} - \nabla p_d + \alpha_d \varrho_d \mathbf{g} \\ &+ \nabla \cdot (\alpha_d (\sum \mu_d (\nabla \mathbf{u}_d + \nabla \mathbf{u}_d^T) + (\kappa_d - \frac{2}{3} \mu_d) \nabla \cdot \mathbf{u}_d \mathbf{E})) \\ &+ \mathbf{M}_{td} \end{aligned}$
<p>Transportgleichung der Flockenanzahl:</p> $\frac{\partial N_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_d N_p) = \nabla \cdot ((D_{tf} + D_f) \nabla N_p) + f(N_p)$
<p>Transportgleichung der kinetischen Energie der Suspension:</p> $\frac{\partial}{\partial t} (\varrho_m k_m) + \nabla \cdot (\varrho_m \mathbf{u}_m k_m) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{tm}}{\sigma_k} \nabla k_m \right) + 2 \mathbf{S}_c : \nabla \mathbf{u}_c - \varrho_m \epsilon_c + G$
<p>Transportgleichung der Energiedissipation der Suspension:</p> $\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\varrho_m \epsilon_m) + \nabla \cdot (\varrho_m \mathbf{u}_m \epsilon_m) &= \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{tc}}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon_m \right) + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon_m}{k_m} (2 \mathbf{S}_m : \nabla \mathbf{u}_m + (1 - C_{3\epsilon}) G) \\ &- C_{2\epsilon} \varrho_m \frac{\epsilon_m^2}{k_m} \end{aligned}$

Die einzelnen Terme werden dabei wie folgt modelliert:

$\begin{aligned} \mathbf{M}_{td} &= \frac{\alpha_d \varrho_d \mathbf{u}_r}{t_p} + \varrho_c C_{VM} \left(\frac{\partial}{\partial t} \alpha_d (\mathbf{u}_c + \mathbf{u}_{dr}) + \right. \\ &\quad (\mathbf{u}_c + \mathbf{u}_{dr}) \cdot \nabla (\alpha_d (\mathbf{u}_c + \mathbf{u}_{dr})) - \\ &\quad \left. \frac{\partial \alpha_d \mathbf{u}_d}{\partial t} - (\mathbf{u}_d \cdot \nabla \alpha_d \mathbf{u}_d) + \alpha_d (\overline{\mathbf{u}_{tc} \nabla \mathbf{u}_{tc}} - \overline{\mathbf{u}_{td} \nabla \mathbf{u}_{td}}) \right) + \\ &\quad \alpha_d \varrho_c C_L \mathbf{u}_r \otimes (\nabla \otimes \mathbf{u}_c) \end{aligned}$
$\begin{aligned} f(N_P) &= a e_b \frac{1}{t_{cp}} \left(\frac{d_f - d_p}{d_p} \right)^p \left(\frac{\eta G_c}{C(1 - e_f) \frac{\mathbf{F}_f}{d_f^2}} \right)^q N_p - \\ &\quad \frac{3}{2} e_c \pi e_d G d_f^3 N_p^2 - 4 e_c e_d \pi D_f d_f N_p^2 - \\ &\quad e_c e_d \frac{\varrho_d \epsilon^{\frac{3}{4}}}{\varrho_c \nu^{\frac{5}{4}}} d_f^4 N_p^2 - e_c e_d 2\pi D_{tf} d_f N_p^2 \end{aligned}$
$d_f = \sqrt[3]{\frac{\alpha_p}{N_p f_s}}$
$\mu_{tm} = \varrho_m C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}$

Das einphasige Modell wurde von Schumacher, 2004 [30] um einen Sinkgeschwindigkeits-term und einen Ansatz für die Suspensionsviskosität erweitert. Genauere Angaben hierzu finden sich in Kapitel 6.

Für die Beschreibung der Wirkung des Räumers im Nachklärbecken wurde ein Algorithmus implementiert. Die vom Räumler auf Phasen wirkende Kraft, die in den Impulsgleichungen integriert wurde, ergibt sich aus der Integration der Druckverteilung über die Räumeroberfläche. Die Phasen werden dabei vereinfacht als ein inkompressibles newtonsches Fluid angesehen. Sind Phasen- und Räumlerbeschleunigung parallel, setzt sich die Gesamtkraft aus einem experimentell ermittelten Körperwiderstand und einer theoretisch ermittelten Kraft für einen beschleunigten Körper in instationärer Strömung zusammen. In den Auftriebsterm geht dabei die Beschleunigung der Phase, in die Kraft infolge der virtuellen Masse die Relativbeschleunigung ein.

$$\mathbf{F}_k = c_{W_k} q \mathbf{A} + k m' \frac{d}{dt} (\mathbf{v}_{r_k}) - m' \frac{d\mathbf{v}_k}{dt} \quad (4.52)$$

- mit c_{W_k} : Widerstandsbeiwert der Phase k
 $c_{W_c} = c_{W_d} = 1.29$
 q : Staudruck
 $q = \frac{1}{2} \rho \mathbf{v}_{k\infty}^2$
 \mathbf{A} : Fläche quer zur Anströmung
 \mathbf{v}_{r_k} : Relativgeschwindigkeit zwischen Räumern und Phase k
 \mathbf{v}_k : Geschwindigkeit der Phase k
 k : Koeffizient
 m' : virtuelle Masse

Die Widerstandsbeiwerte sind für Bauprofile mit scharfen Abreißkanten nur wenig von der Reynoldszahl abhängig und werden als Konstanten betrachtet. Für den Räumern wird ein experimentell ermittelter Wert für quer angeströmte Platten in Abhängigkeit der Plattengeometrie verwendet.

Kapitel 5

Prinzipstudien zur Mehrphasenmodellierung polydisperser Suspensionen

5.1 Gerinneströmung - Rouse-Profil

Die Beschreibung des Partikeltransportes mit der Diffusionshypothese, d.h. über eine Advektions-Diffusionsgleichung (Transportgleichung), ist nur für ausreichend kleine Partikelkonzentrationen zulässig. Unter bestimmten Voraussetzungen, die denen in einem Gerinne ähneln, kann die Transportgleichung analytisch gelöst werden. Die dimensionlosen analytischen Lösungen, die sogenannten Rouse-Profile, liefern gute Übereinstimmungen mit Messwerte für feinkörnige homogene schwach konzentrierte Suspensionen, in denen die Partikelträgheit vernachlässigt werden kann. Greimann et al., 1999 [25] stellen eine Erweiterung der analytischen Lösung nach Rouse vor, die die Partikelträgheit bezüglich des turbulenten Verhaltens berücksichtigt.

Für hochkonzentrierte Suspensionen, insbesondere mit großen Sedimenten kleiner Überschussdichte, weichen beide analytischen Lösungen stark von den Messwerten ab.

Das mehrphasige Modell wird auf eine Gerinneströmungen, denen unterschiedliche Partikel zugesetzt wurden, angewendet, mit der Lösung eines einphasigen Modells, den analytischen Lösungen nach Rouse (aus van Rijn, 1993 [56]) und Greimann, 1999 [25] und mit aus der Literatur entnommenen Messwerten verglichen.

Der Anwendungsbereich eines mehrphasigen Modells wird über Kennzahlen deutlich und der Nachweis der Allgemeingültigkeit, d.h. z.B. der Anwendbarkeit auf die eingangs erwähnte Sedimenttransportmodellierung in Ästuaren, erbracht.

5.1.1 Experimentelle Untersuchungen und Physik des Systems

Die Advektions-Diffusions-Gleichung beschreibt das Verhalten eines schwach konzentrierten Tracers, der von dem Trägerfluid transportiert wird. In vertikaler Richtung bewegen

sich Partikel als Folge von Gravitation und Auftrieb relativ zum Fluid, was über eine Partikelsinkgeschwindigkeit w_s modelliert wird. Partikel-Partikel-Interaktionen und Partikelträgheit werden zunächst vernachlässigt.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + ((\mathbf{u} - \delta w_s) \nabla c) = \nabla(\mathbf{D}_t \nabla c) \quad (5.1)$$

Unter stationären Bedingungen und homogener isotroper Turbulenz besitzt diese Gleichung eine analytische Lösung. Die wohl bekannteste Lösung dieser Art ist das Rouse-Profil, das trotz zahlreicher Einschränkungen immer wieder herangezogen bzw. weiterentwickelt wird. Es liefert eine Schwebstoffverteilung für die Vertikale oberhalb der Gewässersohle, wenn die Turbulenzverteilung und die Referenzkonzentration des Gültigkeitsbereichs bekannt sind.

Die stationäre Advektions-Diffusions-Gleichung in vertikaler Richtung wird dazu einmal integriert:

$$w_s \phi + D_{tp} \frac{d\phi}{dy} + C = 0 \quad (5.2)$$

Die Integrationskonstante C ist Null, wenn die Konzentration an der Wasseroberfläche Null wird. Wird eine bekannte Referenzkonzentration am Boden ϕ_a vorausgesetzt und die turbulente Partikeldiffusion mit der des Trägerfluids gleichgesetzt, d.h. für kleine Partikel $\frac{t_p}{t_{cp}} \ll 1$ und kleine Geschwindigkeitsgradienten, erhält man

$$\ln \frac{\phi}{\phi_a} = -w_s \int_a^y \frac{1}{D_{tp}} dy \quad (5.3)$$

Wird die Geschwindigkeitsverteilung im Trägerfluid als logarithmisch und die Schubspannungsverteilung als linear angesehen, so dass sich für D_{tp} ein parabolischer Verlauf ergibt, erhält man dimensionslose analytische Lösungen, die sogenannten Rouse-Profile.

$$\frac{\phi(y)}{\phi_a} = \left[\frac{h-y}{y} \frac{a}{h-a} \right]^z \quad (5.4)$$

- mit z : Rouse-Parameter
 $z = \frac{w_s}{\kappa u^*}$
 w_s : konstante Sinkgeschwindigkeit
 κ : von Kármán-Konstante
 u^* : Schubspannungsgeschwindigkeit
 $u^* = \sqrt{\frac{\tau_0}{\rho}}$
 τ_0 : Schubspannung an der Sohle
 h : Wasserstand
 a : Abstand von der festen Sohle, Integrationsgrenze
 $\frac{a}{h} = 0.05$

Der Rouse-Parameter z beschreibt das Verhältnis von suspendierenden zu absetzenden Kräften. Für feinkörnige monodisperse Sedimente liefern die Rouse-Profile trotz der Vereinfachungen gute Übereinstimmungen mit Messwerten (Raudkivi, 1981 [55]). Die Bestimmung von Referenzkonzentration ϕ_a und von Kármán-Konstante stellt in der Praxis ein großes Problem dar (Malcherek, 2003 [49] und Crotagino, 1985 [9]).

Greimann et al. [25] stellen analytische Lösungen ähnlich den Rouse-Profilen vor, die die diffusiven Flüsse in Abhängigkeit der vertikalen Turbulenzintensitäten berechnen. Deren diffusive Eigenschaften sind für die mit zunehmender Partikelgröße ansteigende Partikeldiffusion verantwortlich.

Als Basis dient die mehrphasige Impulserhaltung in vertikaler Richtung für stationäre Strömungen über einer ebenen Gewässersohle für geringe Partikelkonzentrationen $\phi \ll 0.001$:

$$\frac{d\phi}{dy} \left(D_{yy} + t_p \left(\overline{v_{td}^2} + C_D \frac{\rho_c}{\rho_d} (\overline{v_{tc}^2} - \overline{v_{td}^2}) \right) \right) = \phi t_p \left(\left(\frac{\rho_c}{\rho_d} - 1 \right) g_y - \frac{d\overline{v_{td}^2}}{dy} \left(1 + \frac{C_D \rho_c}{\rho_d} \right) + \frac{\rho_c}{\rho_d} (1 + C_D) \frac{d\overline{v_{tc}^2}}{dy} + C_L \frac{\rho_c}{\rho_d} u_r \frac{du_c}{dy} \right) \quad (5.5)$$

Mit dem logarithmischen Geschwindigkeitsprofil, einer parabolischen Verteilung der turbulenten Viskosität der fluiden Phase, einer Berechnung der turbulenten Diffusion der dispersen Phase über vereinfachte Ansätze von Relaxationszeit und Reynoldsspannungen (vgl. Kapitel 4)

$$\begin{aligned} D_{xy} &= t_p \overline{v_{tc} u_{td}} \approx v_{tc} \frac{\overline{v_{tc} u_{tc}}}{\overline{v_{tc}^2}} \gamma_c \\ D_{yy} &= t_p \overline{v_{tc} v_{td}} \approx v_{tc} \gamma_c \end{aligned} \quad (5.6)$$

und einer turbulenten Viskosität in der dispersen Phase von

$$\nu_{tc} + \frac{1}{2} t_p \overline{v_{tc}^2} \quad (5.7)$$

ergibt sich die zu lösende dimensionslose Gleichung

$$\frac{d\phi}{dy^0} \left(\gamma_c \kappa y^0 (1 - y^0) + 1.51 St_b \right) = -\phi w_s^0 \quad (5.8)$$

Mit der Annahme, dass die vertikale Turbulenzintensität des Sediments über die Tiefe konstant ist, d.h. $\overline{v_{td}^2} = \overline{v_{tc}^2} = C_v = 1.51$ ergibt sich die analytische Lösung zu:

$$\frac{\phi}{\phi_a} = \left[\frac{y^0 - \frac{1}{2}(1 + S')}{y^0 - \frac{1}{2}(1 - S')} \cdot \frac{a - \frac{1}{2}(1 - S')}{a - \frac{1}{2}(1 + S')} \right]^{\frac{z}{\gamma_c S'}} \quad (5.9)$$

- mit y^0 : dimensionslose Wassertiefe
 $y^0 = \frac{y}{h}$
- w_s^0 : Maß für das Schweben
 $w_s^0 = \frac{w_s}{u^*}$
- St_b : Stokeszahl
 $St_b = \frac{t_p}{\frac{h}{u^*}}$
- γ_c : Koeffizient für kreuzende Partikelbahnen (Kapitel 4.1.3)
- S' : Konstante

$$S' = \sqrt{1 + \frac{4D_d D_c C_\nu St_b}{\gamma_c \kappa}}$$
- $D_c = \sqrt{\frac{\kappa}{\kappa_0}}$ } Diffusionskoeffizienten
 $D_d = \frac{v_d'^2}{v_c'^2}$ }
- C_ν : Koeffizient (Nezu & Rodi)
 $C_\nu = 1.51$
- t_p : Partikelrelaxationszeit

Gleichungen 5.4 und 5.9 unterscheiden sich durch die unterschiedliche Berechnung der diffusiven Flüsse. Während bei den Rouse-Profilen der Rouse-Parameter das Konzentrationsprofil charakterisiert, wird der Verlauf der Greimann-Profile zusätzlich von der Stokeszahl, als Maß für das Anwachsen der Diffusion in Abhängigkeit der Partikelgröße und -dichte, bestimmt. Gleichung 5.5 läßt sich für kleine Partikel $\frac{t_p}{t_{cp}} \ll 1$ und kleine Gradienten der mittleren und turbulenten Geschwindigkeiten in die Advektions-Diffusions-Gleichung (Gleichung 5.1) überführen. Der Gültigkeitsbereich der Advektions-Diffusionsgleichung und damit der Rouse-Profile läßt sich also über das Verhältnis von Stokeszahl, als Maß für die Partikelträgheit, und Turbulenz in der Wassersäule eingrenzen.

$$\frac{St_b}{\kappa \frac{y}{h}} \ll 1 \quad (5.10)$$

Die Beschreibung des Diffusionsprozesses der Partikel, der die Basis der Lösungen bildet, erfolgt für das Rouse-Profil unter der Annahme, dass sich die Horizontalgeschwindigkeiten von Trägerfluid und Partikeln nicht unterscheiden. Messtechnische Untersuchungen zeigen jedoch, dass diese Annahme nicht zutrifft (Muste und Patel, 1997 [52], Kaftori et al. [35] und Rashidi et al. [54]). Die turbulente Diffusivität der Partikel D_{tp} ist von der Turbulenz in der Wassersäule, den Partikeleigenschaften und der Partikelverteilungsdichte abhängig. Sie ist weder ein Skalar noch identisch mit der turbulenten Durchmischung der Wasserteilchen. Diesem Sachverhalt kann in den Rouse-Profilen durch einen empirischen Koeffizienten im Rouse-Parameter Rechnung getragen werden. Die Lösung nach Greimann berechnet diesen diffusiven Fluss. Die Unterschiede zwischen den analytischen

Lösungen werden also besonders für größere Partikel mit hohem diffusiven Fluss augenscheinlich sein.

Bedingung 5.10 ist ab einer gewissen Wassertiefe, nämlich genau der Referenzkonzentration, nicht mehr erfüllt. Dagegen ist die Lösung nach Greimann unabhängig von der Wassertiefe.

Bei höheren Partikelkonzentrationen $\phi \geq 0.001$, d.h., wenn die Partikel die Strömung und sich gegenseitig beeinflussen, sind beide analytischen Lösungen nicht mehr gültig. Eine Berücksichtigung hoher Partikelkonzentrationen kann nur durch eine numerische Lösung der Impulserhaltung des Sediments, z.B. durch ein mehrphasiges Modell, erfolgen.

5.1.2 Numerische Modelluntersuchung

Eine uniforme stationäre zweidimensionale Kanalströmung, die den hydrodynamischen Vereinfachungen der analytischen Lösungen genügt, wird mit unterschiedlicher Partikelbeladung ein- und mehrphasig modelliert. Die Ergebnisse werden den analytischen Lösungen nach Rouse und Greimann und Messwerten (Wang und Quian, 1992 [72] und Greimann und Forrest, 2001 [24]) gegenübergestellt und analysiert. In ausführlicher Form sind diese Untersuchungen bei Stammermann, 2004 [31] nachzulesen.

Im **einphasigen** Modell wird neben den Erhaltungsgleichungen für Masse und Impuls die Advektions-Diffusions-Gleichung mit konstantem turbulente Diffusionskoeffizienten für die Sedimentmassenkonzentration gelöst. Die konstante Sinkgeschwindigkeit des Sediments wurde in den advektiven Term integriert. Die Turbulenz wird über das $k - \epsilon$ -Modell berücksichtigt.

Das **mehrphasige** Modell löst die Erhaltungsgleichungen für beide Phasen. Verwendet wird das granulare Euler-Modell mit den konstitutiven Beziehungen für nicht kohäsive Partikel (Kapitel 4). Die Eigenschaften (Dichte und Durchmesser) der dispersen Phase bleiben wegen der Verwendung nichtbindiger körniger Sedimente in den Experimenten konstant. Viskositäten und Turbulenz der dispersen Phase ändern sich in Abhängigkeit des Phasenanteils. Wechselwirkungen zwischen beiden Phasen und innerhalb einer Phase werden berechnet. Die Turbulenz in der kontinuierlichen Phase wird über das $k - \epsilon$ -Modell für die Suspension berechnet.

Die Experimente wurden mit homogenen körnigen Partikeln unterschiedlicher Konzentration und Größe durchgeführt. Die Randbedingungen der ausgewählten Experimente sind in Tabelle 5.1 zusammengestellt.

Abbildung 5.1 zeigt einen Vergleich der analytischen und der numerischen Lösungen für das Experiment S11, bei dem relativ kleine Partikel $d_p = 0.274$ mm mit großer Rohdichte in geringer Konzentration verwendet wurden, so dass die Stokeszahl klein bleibt. Die grundlegenden Voraussetzungen der analytischen Lösung nach Rouse werden bei diesem Experiment eingehalten. Signifikante Abweichungen der beiden analytischen Lösungen sind nicht zu erwarten, da die Lösung nach Greimann bei kleinen Stokeszahlen in die von Rouse übergeht. In den Bereichen geringer Partikelkonzentrationen oberhalb der Referenzkonzentration stimmen analytische und numerische Lösungen gut überein. In den sohnahen Bereichen zeigt die analytische Lösung nach Greimann eine bessere

	Re	h [m]	u^* [$\frac{m}{s}$]	κ	d_p [m]	ρ_p [$\frac{kg}{m^3}$]	w_s [$\frac{m}{s}$]	St_b	$\bar{\phi}$
SC7	$1.97 \cdot 10^5$	0.1	0.0767	0.295	0.00142	1050	0.0229	0.0376	0.1193
SM7	$2.01 \cdot 10^5$	0.1	0.0767	0.282	0.00096	1050	0.0159	0.0261	0.1357
S11	$2.65 \cdot 10^5$	0.113	0.106	0.398	0.000274	2650	0.038	0.0050	0.00162

Tabelle 5.1: Versuchs- und Randbedingungen

Übereinstimmung mit den Messwerten. Das Rouse-Profil ist nach Gleichung 5.10 nur in einer Höhe von $y/h \gg 0.01$ gültig, liefert aber dennoch im Vergleich mit den Messwerten bessere Übereinstimmungen als die beiden numerischen Modelle. Eine Ursache ist im Turbulenzmodell zu sehen, durch das zuviel Sediment in der Wassersäule bleibt. Die Definition der im $k - \epsilon$ -Modell benötigten Randbedingung für ϵ in wandnahen Bereichen ist problematisch. Eine Verfeinerung des Rechnernetzes in den bodennahen Bereichen könnte die numerischen Ergebnisse verbessern. Partikel-Partikel-Interaktionen sind nur in geringem Maße zu erwarten, so dass die mehrphasige Berechnung ähnliche Ergebnisse wie die einphasige liefert. Die deutlich aufwendigere mehrphasige Berechnung lohnt sich in diesem Fall nicht. Die Verteilung der Sedimentkonzentration unterhalb der Referenzkonzentration wird von der analytischen Lösung nach Greimann gut vorhergesagt.

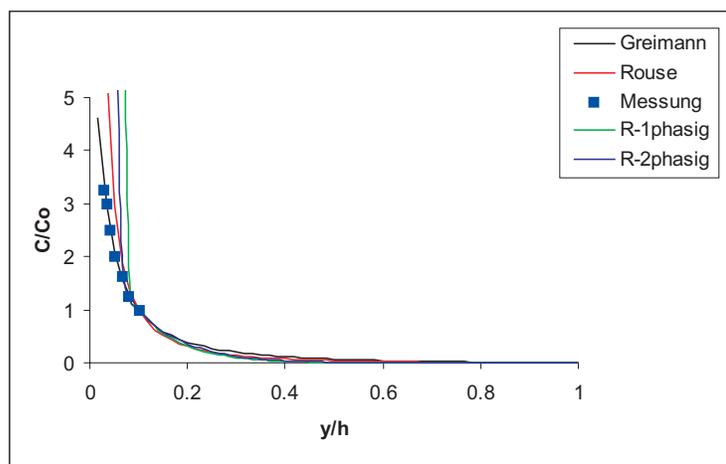


Abbildung 5.1: Vergleich analytischer und numerischer Lösungen; Versuch S11 (kleiner Partikeldurchmesser und hohe Partikeldichte)

Das Experiment SC7 zeigt ein deutlich anderes Verhalten. Der Versuch wurde mit größeren Partikeln geringer Rohdichte in hoher Konzentration durchgeführt. Die Abweichungen der einzelnen Lösungen sind signifikant. Die Stokeszahl verläßt den

Gültigkeitsbereich von Rouse-Profil und einphasigem Modell, so dass sich deren Ergebnisse nicht mit den Messwerten decken (Abbildung 5.2). Die einphasige numerische Lösung unterschätzt die Sedimentkonzentration in der Wassersäule stärker als die analytische Lösung nach Rouse. Die Partikelkonzentration ist in diesen Experimenten so hoch, dass Partikel-Partikel-Interaktionen nicht vernachlässigt werden können. Auch die analytische Lösung nach Greimann zeigt daher keine befriedigenden Ergebnisse, auch wenn im Vergleich zum Rouse-Profil deutlich mehr Sediment in der Schwebelösung bleibt. Das mehrphasige Modell gibt die Messwerte gut wieder. Durch Interaktionen der Partikel untereinander und die Partikelträgheit bleibt mehr Sediment in der Wassersäule. Das mehrphasige Modell ist in der Lage, diese Effekte abzubilden. Die mehrphasige numerische Lösung stimmt mit den Messwerten gut überein, und der erhöhte Rechenaufwand ist hier gerechtfertigt.

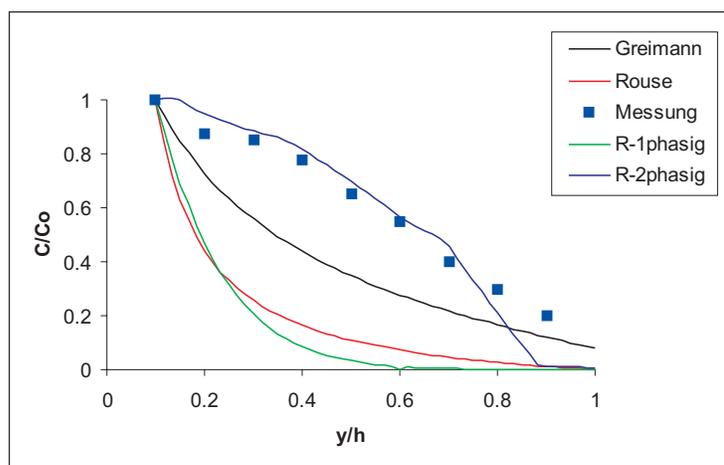


Abbildung 5.2: Vergleich analytischer und numerischer Lösungen; Versuch SC7 (großer Partikeldurchmesser und geringe Partikeldichte)

Versuch SM7 wurde im Vergleich zu SC7 mit kleineren Partikeln durchgeführt, die eine kleinere Stokeszahl aufweisen. Die Diskrepanz zwischen den Messwerten und den analytischen Lösungen ist etwas geringer als bei Versuch SC7 (Abbildung 5.3), da sowohl die Trägheitseffekte als auch die Wirkung der Partikel-Partikel-Interaktionen nicht so ausgeprägt sind. Auch die Ergebnisse des mehrphasigen numerischen Modells sind nicht so gut wie bei Versuch SC7. Es stellt sich kein stabiles Konzentrationsprofil im Kanal ein, sondern die Partikel werden in Wolken über die Kanalsohle transportiert. Das im Vergleich dargestellte Konzentrationsprofil zeigt die Partikelverteilung innerhalb einer Wolke. Auf halber Kanaltiefe wird die Konzentration vom Modell über-, in der Nähe der Wasseroberfläche unterschätzt. Der Grund für dieses Verhalten kann wiederum im Turbulenzmodell zu finden sein.

Die Auswertung der Versuche zeigt, dass die analytische Lösung nach Rouse und das einphasige Modell mit konstantem Ansatz für Sinkgeschwindigkeit und turbulente Diffusion für kleine Stokeszahlen und geringe Partikelkonzentrationen die Konzentrationsverteilung in der Wassersäule gut wiedergeben. Für Aussagen unterhalb der Referenzkonzentration liefert die Lösung nach Greimann hier sehr gute Werte. Mit steigender

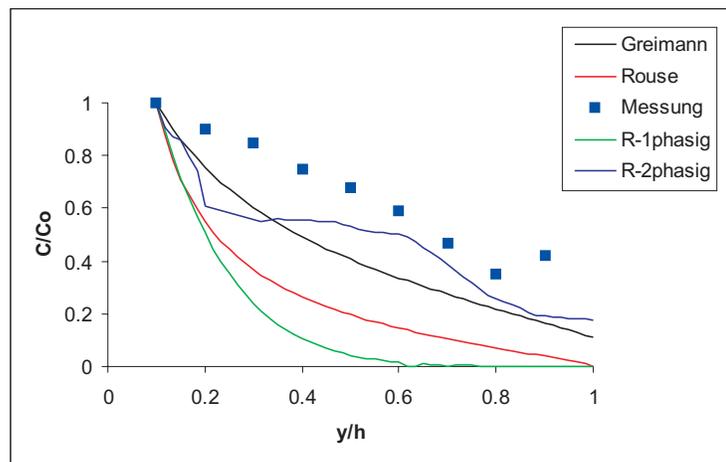


Abbildung 5.3: Vergleich analytischer und numerischer Lösungen; Versuch SM7 (mittlerer Partikeldurchmesser und geringe Partikeldichte)

Stokeszahl und steigender Partikelkonzentration stoßen die analytischen Lösungen und das einphasige Modell an ihre Grenzen. Hier ist der erhöhte Rechenaufwand eines mehrphasigen Modells gerechtfertigt, das die Messwerte deutlich besser wiedergibt. Weitere Versuche zum Verhalten großer Partikel mit geringer Überschussdichte in einem turbulenten Strömungsfeld und eine Untersuchung verschiedener mehrphasiger Turbulenzmodelle wäre jedoch wünschenswert. Die prinzipielle Anwendbarkeit eines solchen Modelltyps auf Gerinneströmungen mit nichtkohäsiven Partikeln wurde in diesem Kapitel ebenfalls nachgewiesen.

5.2 Standzylinderversuch

5.2.1 Experimentelle Untersuchungen und Physik des Systems

Die Nachklärung des Belebtschlammverfahrens wird nach ATV131 [1] für einen bestimmten Schlammvolumenindex und Trockensubstanzgehalt hydraulisch bemessen. Eine Überschreitung der Bemessungswerte kann zu Schlammabtrieb führen. Um eine Kontrolle über das Absetzverhalten des belebten Schlammes und die hydraulische Belastung der Nachklärung zu erhalten, werden dessen Absetzeigenschaften ständig überprüft.

Aus dem Belebungsbecken wird ein Liter Suspension entnommen und in einen Standzylinder gefüllt. Nach einer Absetzzeit von dreißig Minuten wird die Höhe des Schlammspiegels abgelesen. Anschließend wird der Trockensubstanzgehalt der eingefüllten Suspension bestimmt. Aus beiden Messwerten wird das Volumen errechnet, das ein Gramm Trockensubstanz nach dreißig Minuten einnimmt. Dieses Volumen wird als Schlammvolumenindex ISV bezeichnet. Je höher der Index desto schlechter sind die Absetzeigenschaften des belebten Schlammes.

Aufgrund ihrer im Verhältnis zum Abwasser höheren Dichte sinken die Schlammflocken zu Boden. Die Größe ihrer Sinkgeschwindigkeit hängt von Partikeldichte und -durchmesser ab, die sich durch die Flockendynamik während des Absinkens ändern. Umgekehrt bestimmen diese Partikeleigenschaften auch die durch das Absinken initiierte nach oben gerichtete Verdrängungsströmung im Abwasser, die die Partikel ggf. in der Schwebe hält. Impuls- und Turbulenzaustausch zwischen beiden Phasen prägen das Strömungsgeschehen. Neben der Flockendynamik bestimmt die Schlamm- und Flockenzusammensetzung die rheologischen Eigenschaften und den Kompressionswiderstand, bestimmt also Stabilität und Lage des Schlammspiegels.

Bei zu unterschiedlichen Zeiten aus dem gleichen Nachklärbecken entnommenen Proben kann sich das Absetzregime ändern. Es kommt nicht immer zu der Ausbildung eines deutlichen Schlammspiegels, sondern es müssen prinzipiell zwei unterschiedliche Absetzregime unterschieden werden.

Bei der sogenannten **dispersen Separation** bildet sich ein vertikaler Konzentrationsgradient ohne deutlichen Schlamm Spiegel, so dass ein beträchtlicher Teil der Biomasse in Suspension bleibt. Demgegenüber steht die **Separation im Verband**, bei der sich der gewünschte deutliche Schlamm Spiegel ausbildet. Das Schlammbett besteht dann aus einem Flockennetzwerk, das als Tiefenfilter für kleinere Flocken wirkt, sich aber nur langsam verdichtet und absinkt. Durch die Filterwirkung findet sich trotz des negativen Konzentrationsgradienten direkt über dem Schlamm Spiegel eine dünne Schicht, die deutlich weniger Flocken enthält als der restliche Überstand und diesen immer weiter verdünnt. Der Überstand weist keinen Konzentrationsgradienten auf. Die Separation im Verband ist demnach deutlich effektiver und führt letztendlich zu wesentlich besseren Ablaufwerten der Kläranlage.

Untersuchungen des Absetzverhaltens mit Transparenzmessungen (Fuchs, 1999 [21]) zeigen, dass sich bei disperser Separation einige Flocken sehr schnell absetzen und das System dann stagniert. Ungefähr 40 % der Biomasse bleiben in Suspension. Setzt sich der Schlamm dagegen im Verband ab, verringert sich mit Entstehen und Absinken des

Schlammspiegels die Flockenkonzentration oberhalb sprunghaft. 80 - 90 % der Biomasse werden auf diese Weise dem System entzogen.

Die Ursachen dieses unterschiedlichen Verhaltens von belebtem Schlamm sind zu einem großen Teil noch unbekannt. Ein hoher Trockensubstanzgehalt begünstigt offenbar das Absetzen im Verband, und auch die Milieubedingungen für die Bakterienbiozönose scheinen eine Rolle zu spielen.

Hierin liegt gleichermaßen Chance und Herausforderung für ein numerisches Modell, da man mit diesem Werkzeug durch die festgesetzten Anfangs- und Randbedingungen sowie durch die gewählte konstitutive Beziehungen und physikalischen Parameter einen eindeutig definierten Systemzustand erzeugt und somit Ursache und Wirkung klar voneinander trennen kann. Idealerweise sollte ein numerisches Modell einer Absetzsäule somit in der Lage sein, beide Absetzregime darzustellen.

Dieses Experiment ist von großer Bedeutung für diese Arbeit. Es dient zur phänomenologischen Verifikation des Mehrphasenmodells, da nur eine einfache geometrische Form modelliert werden muss und keine Randwerte dem System eine Strömung aufzwingen. Jegliche Strömungsmechanik entsteht aus dem Modell heraus.

Durch eine Änderung der physikalischen Parameter, wie Flockendichte und -durchmesser, können somit Aussagen über die Sensitivität des Systems bezüglich der Schlammeneigenschaften getroffen und die unterschiedlichen Absetzregime abgebildet werden. Eine Relation zu den biologischen und chemischen Komponenten bleibt unberücksichtigt, da die Zusammenhänge, z.B. zu üblicherweise auf der Kläranlage bestimmten Summenparametern wie BSB₅ und CSB, in weiten Bereichen noch unklar sind. Eine **Voraussage** des Verhaltens realer Schlämme ist daher zur Zeit nur eingeschränkt möglich.

5.2.2 Numerische Modelluntersuchung

Die Physik des Systems wird von dem Verhalten der dispersen Phase diktiert. Durch Impulsaustausch an den Grenzflächen zwischen Schlammflocken und Abwasser wird in letzterem eine Strömung initiiert. Neben dem Absinken der Flocken muss das mehrphasige Modell diese Strömung abbilden können. Die Geschwindigkeit der Suspension setzt sich aus diesen beiden Anteilen zusammen. Grundlegende Unterschiede zwischen ein- und mehrphasiger Modellierung sind wegen der „fehlenden“ Strömung des Abwassers durch z.B. äußere Kräfte offensichtlich.

Die Modellierung der Suspension als **ein** Kontinuum kann die an den Grenzflächen entstehenden Kräfte nicht nachbilden, so dass die Geschwindigkeiten im Kontinuum, der Suspension, null bleiben. Die Flocken sinken durch das Fehlen von Turbulenz mit der modellierten Sinkgeschwindigkeit zu Boden. Über diese Sinkgeschwindigkeit müssen sämtliche Phänomene wie das behinderte Absinken, das Schweben von sehr kleinen Flocken und die kompressiven Eigenschaften des belebten Schlammes (Lage des Schlammspiegels) parametrisiert werden.

Im **mehrphasigen** Modell bestimmen Flockendurchmesser, -dichte und -diffusion über die Grenzflächenkräfte (siehe Kapitel 3.3) das Absinken der Flocken und die Entstehung von Strömung. Ausgehend von einer homogenen monodispersen Suspension sinken

zunächst alle Flocken gleichmäßig ab und initiieren dabei eine turbulente Strömung, die die Flocken transportiert und die Grenzflächenkräfte beeinflusst. Es bilden sich Bereiche unterschiedlicher Phasenverteilungen. Verstärkt werden diese Phaseninteraktionen durch das Flokkulationsmodell, das die sedimentologischen Flockeneigenschaften bestimmt. Durch die kinetische Eigenenergie der Flocken wird der Prozess der Flockenbildung initiiert und der Flockendurchmesser wächst an. Verstärkt oder gehemmt wird dieser Prozess durch die entstehenden turbulenten Strömungen.

Anfangsbedingungen	
Geschwindigkeiten	$\mathbf{u}_k = 0 \quad \left[\frac{\text{m}}{\text{s}} \right]$
Phasenanteil	$\alpha_d = 0.163$
Flockendurchmesser	$d_p = 0.00005 \quad [\text{m}]$
Flockendichte	$\varrho_d = 999.3 \quad \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right]$
Parametereinstellungen	
maximaler Phasenanteil (Inkompressibilität)	$\alpha_{d,max} = 0.8$
Stoßzahl	$e_K = 0.3$
Diffusionsparameter	$e_d = 0.5$
Bruchwahrscheinlichkeit	$e_c = 0.1$
Bruchwahrscheinlichkeit	$ae_b = 3 \cdot 10^{-3}$
Flockenbindungskraft	$F_y = 10^{-7}$
konstitutive Beziehungen	
Rechenlauf 1	nicht kohäsive Partikel (Körner)
Rechenlauf 2	kohäsive Partikel (Schlammflocken)

Tabelle 5.2: Anfangsbedingungen, Parametereinstellungen und konstitutive Beziehungen der Rechenläufe

Die Effizienzparameter e_c und e_b und die Flockenbindungskraft F_y des Flokkulationsmodells parametrisieren die kohäsiven Eigenschaften des belebten Schlammes und bestim-

men die Dynamik der Phasentrennung. Über die Koagulationswahrscheinlichkeit e_c wird die Effektivität der Kollisionen, d.h. die Neigung zur Entstabilisierung, parametrisiert. Die Parameter e_b und F_y charakterisieren den Stabilisierungsvorgang über Bruchwahrscheinlichkeit und Flockenstabilität.

Es wird zunächst das Verhalten des Systems bei unterschiedlicher Flockendynamik untersucht. Die Sensitivität des Modells hinsichtlich Flokkulation und Flockenzerbrechen wird durch Änderung der Effizienzparameter analysiert. Als konstitutive Beziehungen für die Modellierung der Viskositäten wurden die körniger Partikel gewählt. In einem zweiten Schritt wird die Bedeutung und Wirkungsweise dieser konstitutiven Beziehungen durch Vergleichsrechnungen mit den Viskositätsansätzen für Flocken (siehe Tabelle 4.1 Seite 40) herausgestellt. Anfangsbedingungen und Parametereinstellungen für die Rechenläufe sind in Tabelle 5.2 zusammengestellt. Die jeweiligen Änderungen in den Parametern werden aus den einzelnen Abbildungen ersichtlich. Zu Beginn der Simulationen ist die Suspension homogen und monodispers. Die Strömungsgeschwindigkeiten beider Phasen sind null.

Abbildungen 5.4 und 5.5 zeigen eine hohe Sensitivität des Modells hinsichtlich der Koagulationswahrscheinlichkeit im Modell der Flockendynamik. Während sich bei einem Effizienzparameter von $e_c = 0.1$ ein deutlicher Schlamm Spiegel bildet, bleibt bei einem nur geringfügig verringerten Effizienzparameter $e_c = 0.08$ ein Großteil der Schlammflocken in der Schwebelage. Auch in der zeitlichen Entwicklung unterscheiden sich die beiden Simulationen. Der Flokkulationsprozess ist bei einem Effizienzparameter von $e_c = 0.1$ wesentlich dynamischer und - nach einer langsameren Anfangsphase - bereits nach 15 Minuten Simulationszeit weitgehend beendet.

Diese Tendenzen zeigen sich auch in den Verteilungen der physikalischen Eigenschaften der dispersen Phase am Versuchsende und den in der kontinuierlichen Phase entstehenden Geschwindigkeiten. Abbildung 5.6 zeigt, dass für $e_c = 0.08$ viele kleine Flocken in der Wassersäule zurückbleiben, die im Laufe der Versuchsdauer nicht sedimentieren können. Sie werden durch die wenig turbulente Aufwärtsströmung der kontinuierlichen Phase (Abbildung 5.8) in der Schwebelage gehalten. Der maximale Phasenanteil wird nicht erreicht. Hinsichtlich der Flockendynamik stellt sich, unterstützt von der gleichmäßigen Strömung, ein in weiten Bereichen gleichmäßiger Systemzustand ein. Lediglich im obersten Drittel ist eine Flockendynamik erkennbar (Abbildung 5.6). Hier ist auch die Strömung deutlich turbulenter. Die Flockengrößen bleiben kleiner als ein Millimeter.

In Abhängigkeit der Partikelgröße wird die Partikeldichte bestimmt. Je größer die Flocken, desto geringer ihre Dichte (Abbildung 5.6). Die mittlere Suspensionsdichte nimmt trotz abnehmender Flockendichte wegen des steigenden Feststoffgehaltes nach unten hin zu.

Eine Erhöhung der Koagulationswahrscheinlichkeit auf $e_c = 0.1$ führt zu bis zu ca. 3 mm großen Flocken (Abbildung 5.7), die ein dichtes und stabiles Schlamm Bett bilden, das den maximalen Phasenanteil fast erreicht (Abbildung 5.5). Die Strömung in der kontinuierlichen Phase stellt sich infolge des Kompressionswiderstands und der Partikeleigenschaften ein (Abbildung 5.9). Der Bereich oberhalb des Schlamm Spiegels ist durch ein instabiles Systemverhalten gekennzeichnet. Flokkulation und Flockenzerbrechen laufen nebeneinander ab (Abbildung 5.7) und die Strömung in der kontinuierlichen Phase

ist ausgeprägt und turbulent. Im Bereich des Schlammбетtes ist die Partikellagerungsdichte so groß, dass die Partikel sich gegenseitig berühren und sich nur noch infolge der Kompression bewegen. Die Strömung in der kontinuierlichen Phase ist in diesem Bereich daher deutlich kleiner und annähernd laminar.

Die Sinkgeschwindigkeit (entspricht der Relativgeschwindigkeit beider Phasen) der Flocken stellt sich in Abhängigkeit ihrer sedimentologischen Eigenschaften und des Phasenanteils, als Maß für die Lagerungsdichte, ein (Abbildung 5.10). Die größten Sinkgeschwindigkeiten finden sich im gut ausgeflockten mittleren Säulenbereich. Hier sinken die Flocken ungehindert mit relativ konstanter Sinkgeschwindigkeit zu Boden. In Bodennähe schließen sich die Bereiche des behinderten Absinkens und des Absetzens als Netzwerk mit deutlich geringeren Sinkgeschwindigkeiten an. Im oberen Bereich der Säule sind die Flocken so klein, dass ihre Sinkgeschwindigkeit in Abhängigkeit der Strömung der kontinuierlichen Phase (Abbildung 5.8) variiert und klein bleibt.

Die Viskosität der dispersen Phase ist durch die granularen Ansätze abhängig von der Lagerungsdichte der Schlammflocken. Ist der Phasenanteil klein, berühren sich die Flocken nicht und übertragen Spannungen nur infolge von Kollisionen und Bewegung. Die Viskosität ist in diesem Bereich sehr klein und die Flocken verhalten sich wie ein Gas. Erst bei Erreichen des maximalen Phasenanteils bilden sie eine Struktur, die Spannungen infolge der Reibung zwischen ihren einzelnen Bestandteilen übertragen kann. Hier steigt die Viskosität deutlich an (Abbildung 5.10).

Eine Erhöhung der Bruchwahrscheinlichkeit hat fast keine Auswirkungen (Abbildung 5.11), da die entstehenden strömungsinduzierten Kräfte wegen der geringen absoluten Geschwindigkeitsgradienten nicht ausreichen, die Flocken zu zerstören. Die Ergebnisse ähneln daher denen von Rechenlauf 1.2 (Abbildung 5.5).

Hinsichtlich der Flockenstabilität zeigt sich eine deutlichere Sensitivität des Modells. Eine Reduzierung der Flockenbindungskraft verhindert trotz einer Koagulationswahrscheinlichkeit von $e_c = 0.1$ die Ausbildung eines Flockenбетtes (Abbildung 5.12). Die strömungsinduzierten Kräfte lassen die Flocken zerbrechen, so dass die Ergebnisse denen von Rechenlauf 1.1 (Abbildung 5.4) gleichen.

Eine Berücksichtigung des bingham-plastischen Verhaltens ändert das Systemverhalten. Es bildet sich ein höherer Schlamm Spiegel der einen Konzentrationsgradienten aufweist. Die Suspension wird deutlich steifer und die Geschwindigkeiten in der dispersen Phase gedämpft (siehe auch Kapitel 6). Die entstehenden Schwingungen werden in dem Modellierungszeitraum nicht ausgeglichen. Sinkgeschwindigkeit der dispersen und Steiggeschwindigkeit der kontinuierlichen Phase werden mit zunehmender Viskosität deutlich geringer (Abbildung 5.13). Aufgrund der Laminarisierung der Strömung bleiben die Flocken deutlich kleiner.

Zusammenfassend kann man sagen, dass in der Realität zu beobachtende Strömungsstrukturen und die Flockendynamik des belebten Schlammes vom Modell abgebildet werden können. Besonders markant ist dabei die aufwärts gerichtete Strömung des Abwassers in der Säulenmitte und die zentrale Bedeutung des Flokkulationsmodells. Durch Änderung der Parameter des Flokkulationsmodells können die unterschiedlichen Absetzregime modelliert werden. Insbesondere die Parameter Koagulationswahrscheinlichkeit und Flockenbindungskraft bestimmen die Dynamik der Phasentrennung.

Flockendynamik und Turbulenz sind bis zu Beginn des behinderten Absetzens deutlich ausgeprägt. Die Partikeldiversität ist hier hoch und nimmt mit zunehmender Konzentration und der damit einhergehenden Laminarisierung der Strömung ab.

Eine einphasige Modellierung des Systems würde das Absinken des Schlammes gemäß des implementierten Sinkgeschwindigkeitsansatzes (vgl. Kapitel 4.4 und 6.2.2) über die Zeit berechnen. Infolge der Kopplung von Partikeldynamik und Strömung allein über die Dichte, kann keine Strömung in der Suspension entstehen. Aussagen über die Partikelverteilung und die Strömungssituation sind nicht möglich. Eine einphasige Berechnung des Systems kann zur Validierung des implementierten Sinkgeschwindigkeitsansatzes, dem eine zentrale Bedeutung beikommt (siehe Kapitel 6.2.2), verwendet werden. Eine Analyse des Systems kann nicht erfolgen.

Das mehrphasige Modell ist prinzipiell geeignet, die Flockendynamik belebten Schlammes, die entstehende Partikelverteilung und typische Strömungsstrukturen zu simulieren. Neue messtechnische Methoden und Untersuchungen (siehe Clercq, 2003 [7]) erhöhen die Chancen, In-situ Messungen der Flockengrößen zu erhalten, mit denen das Modell validiert und konstitutive Beziehungen für die biochemischen Schlammeigenschaften entwickelt werden können. Die Vorhersage der Flockendynamik realer Schlämme z.B. zur Auslegung von Flokkulationsreaktoren wäre dann möglich. Ferner sind mehrphasige Modelle immer dann nötig, wenn ausschließlich durch die Partikeldynamik Strömung in der kontinuierlichen Phase infolge der Gravitation initiiert wird, wie es in diesem System der Fall ist. Insbesondere bei geringen Dichteunterschiede zwischen beiden Phasen ist ein einphasiges Modell nur für bestimmte Fragestellungen anwendbar.

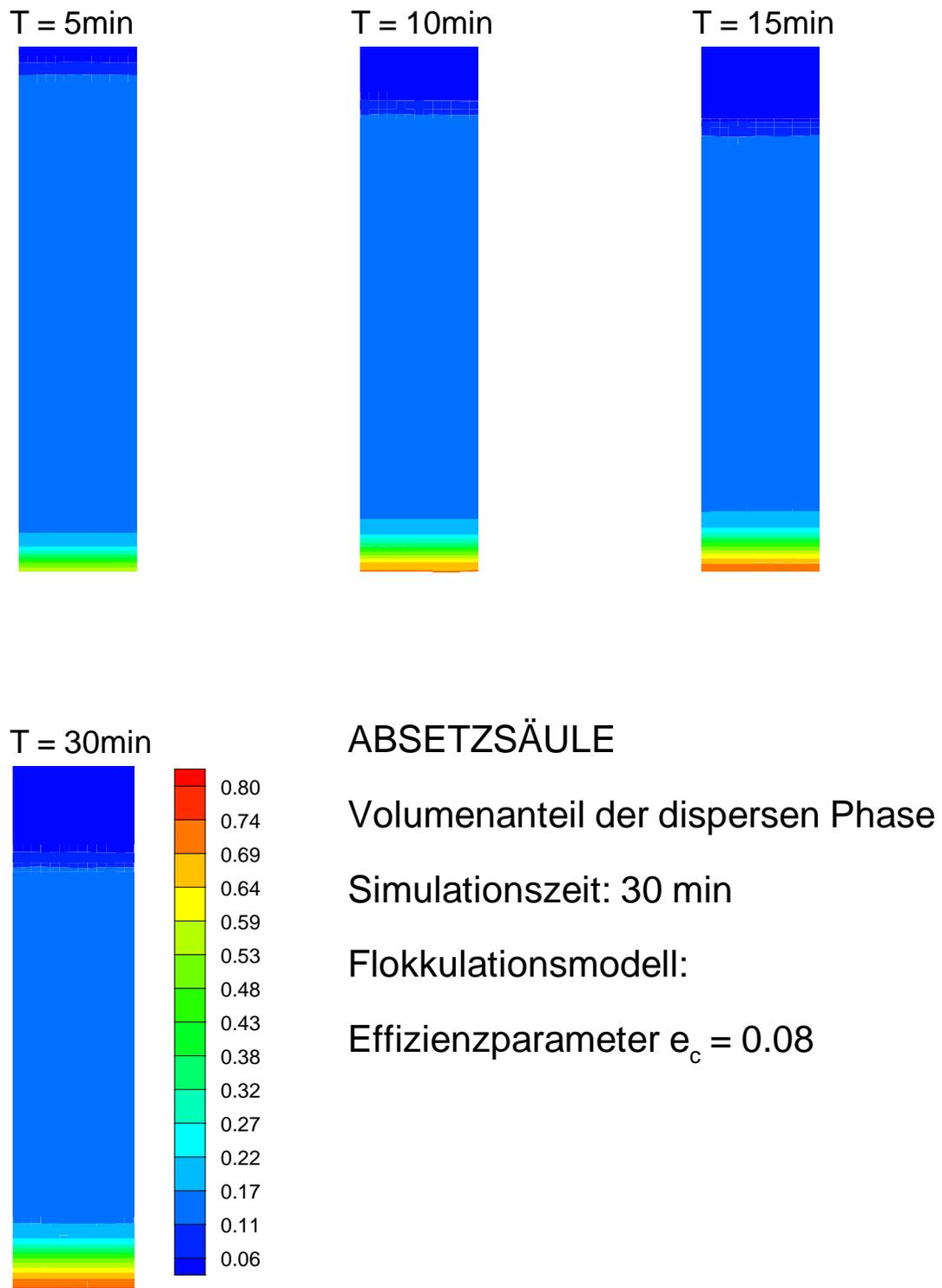


Abbildung 5.4: Zeitliche Entwicklung des Volumenanteils der dispersen Phase $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.1 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)

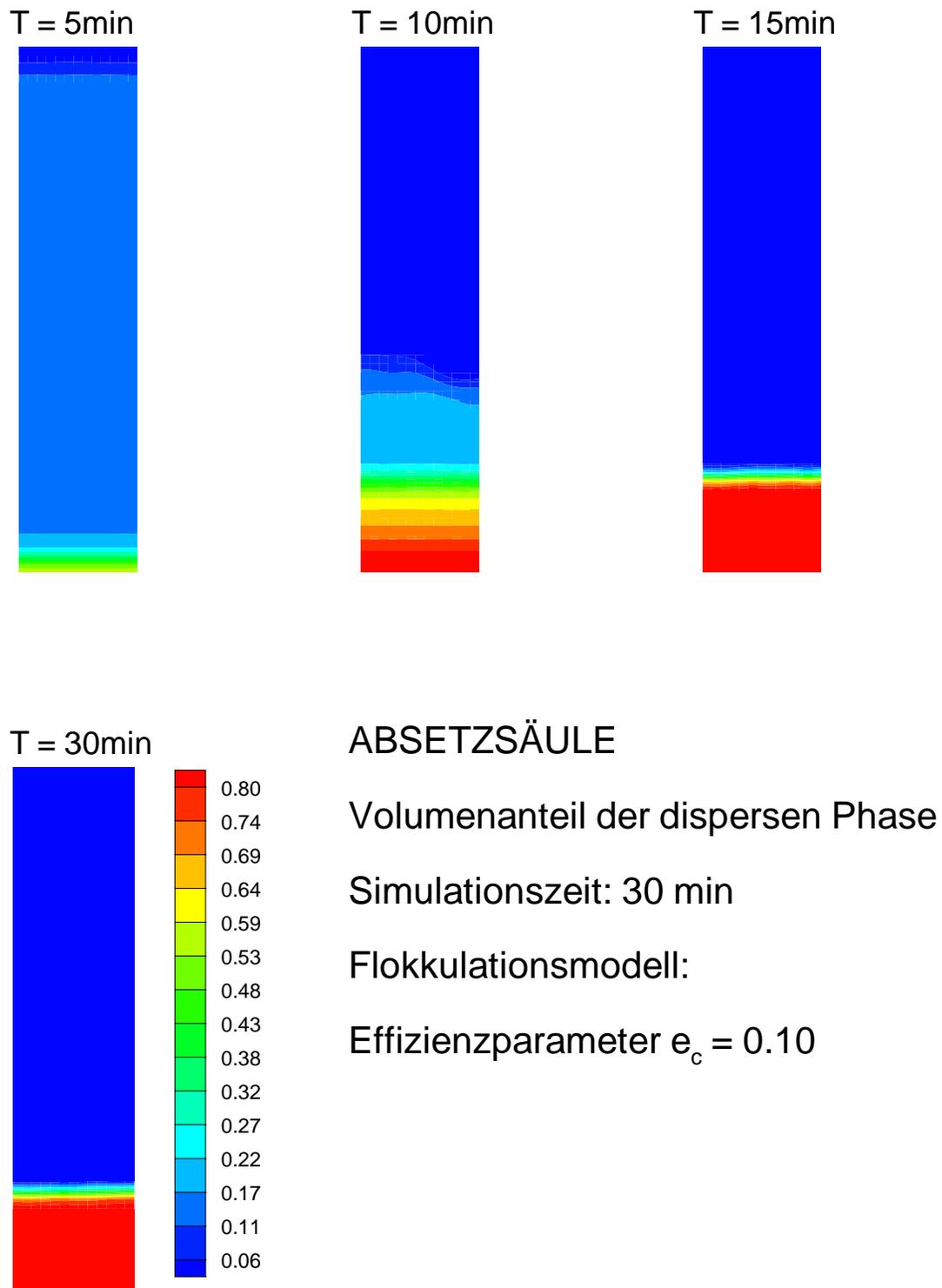


Abbildung 5.5: Zeitliche Entwicklung des Volumenanteils der dispersen Phase $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.2 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)

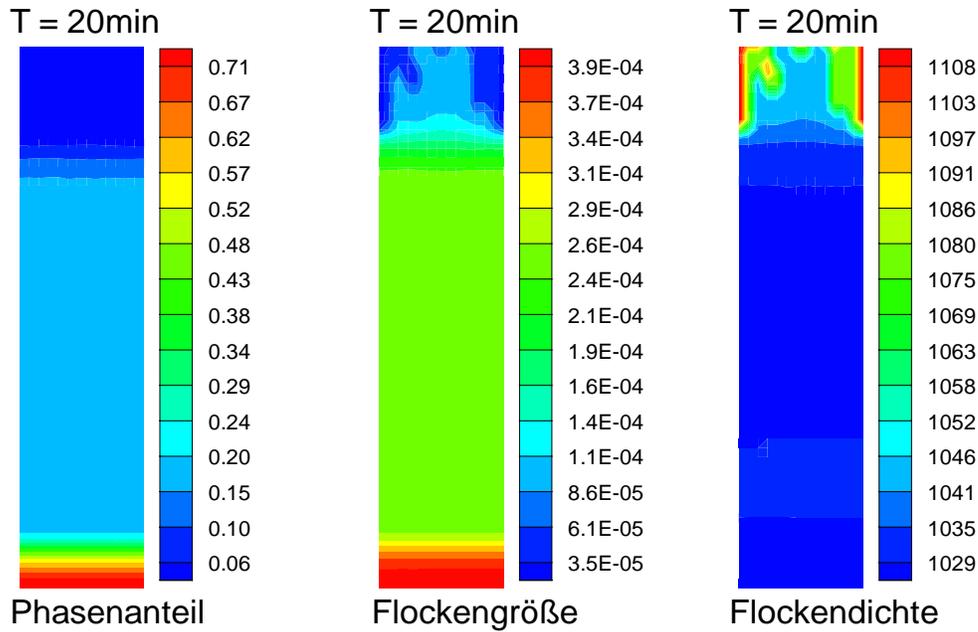


Abbildung 5.6: Physikalische Modellgrößen der dispersen Phase am Ende des Experiments $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.1 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)

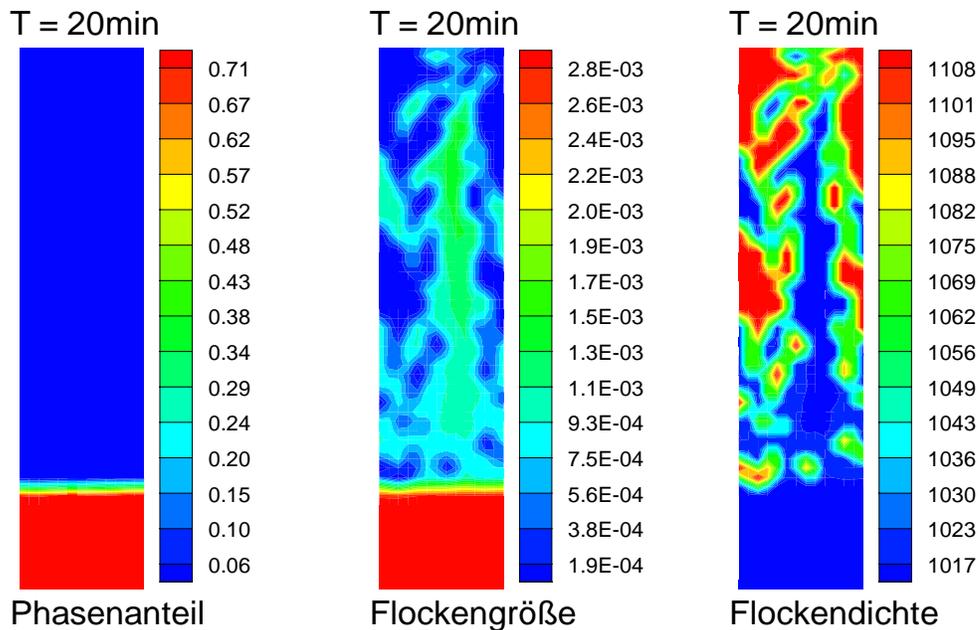


Abbildung 5.7: Physikalische Modellgrößen der dispersen Phase am Ende des Experiments $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.2 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)

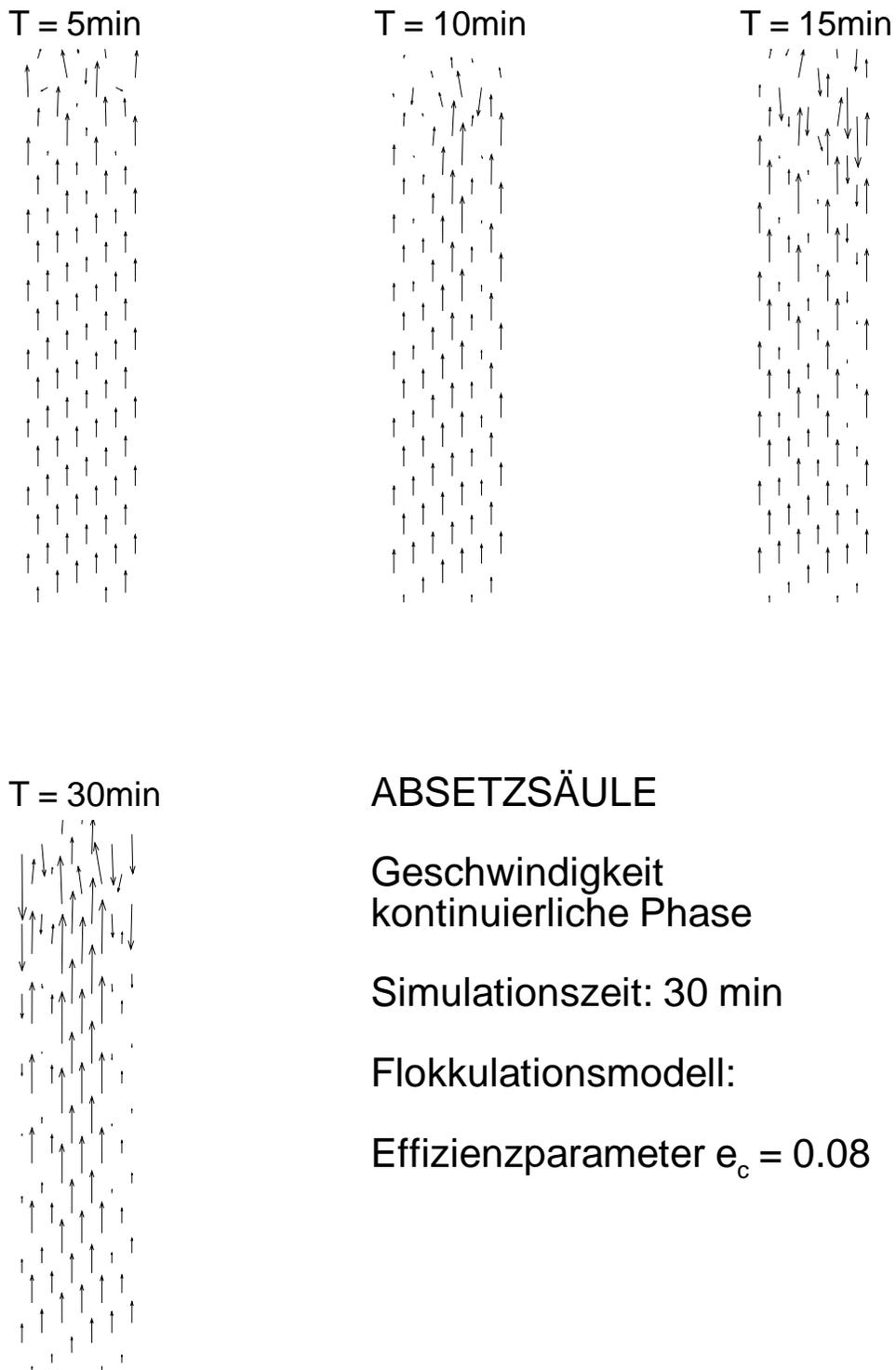


Abbildung 5.8: Zeitliche Entwicklung der Geschwindigkeit der kontinuierlichen Phase $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.1 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)

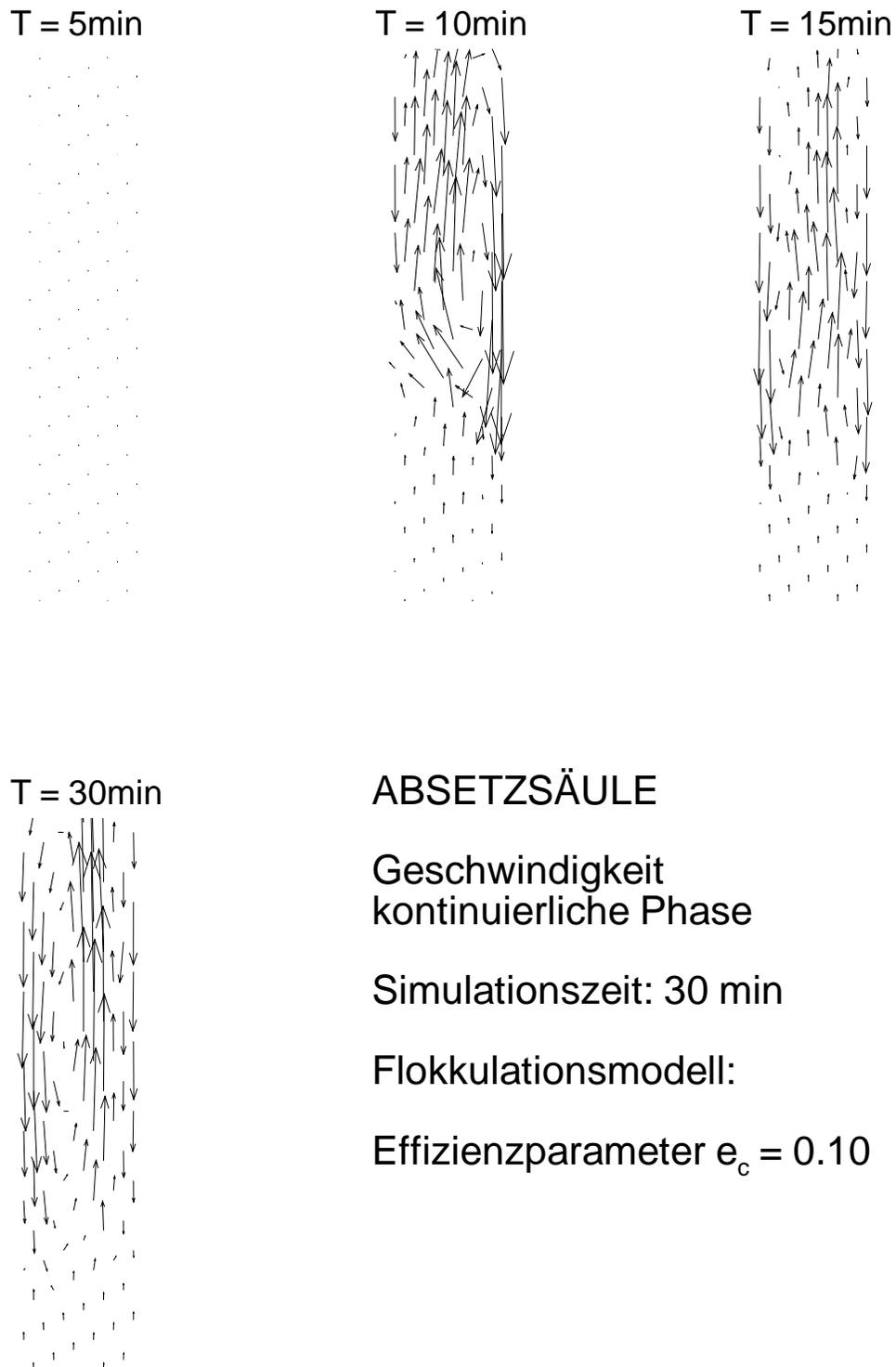


Abbildung 5.9: Zeitliche Entwicklung der Geschwindigkeit der kontinuierlichen Phase $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.2 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)

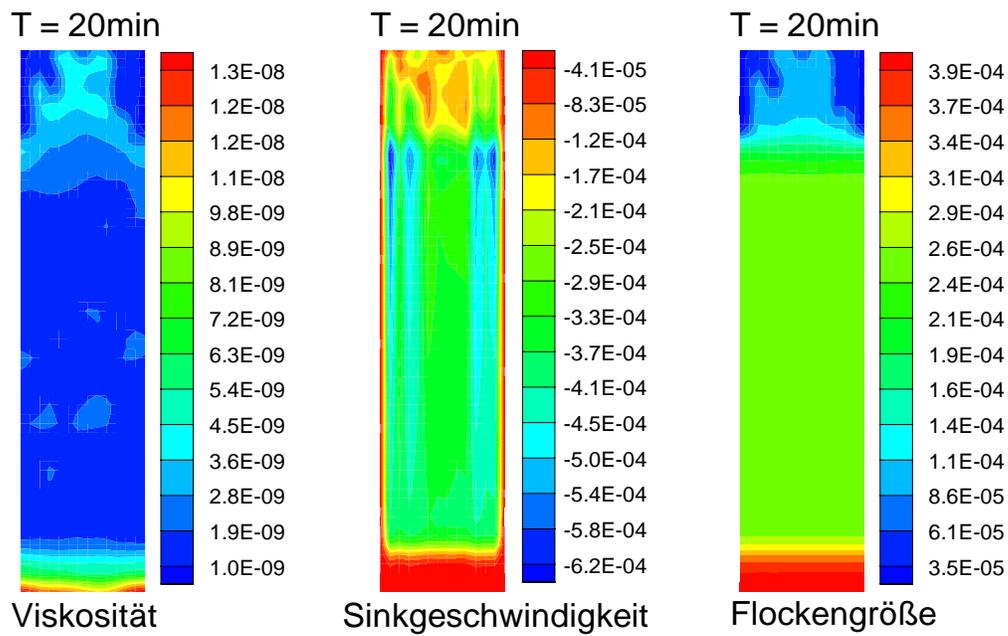


Abbildung 5.10: Physikalische Modellgrößen der dispersen Phase am Ende des Experiments $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.1 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)

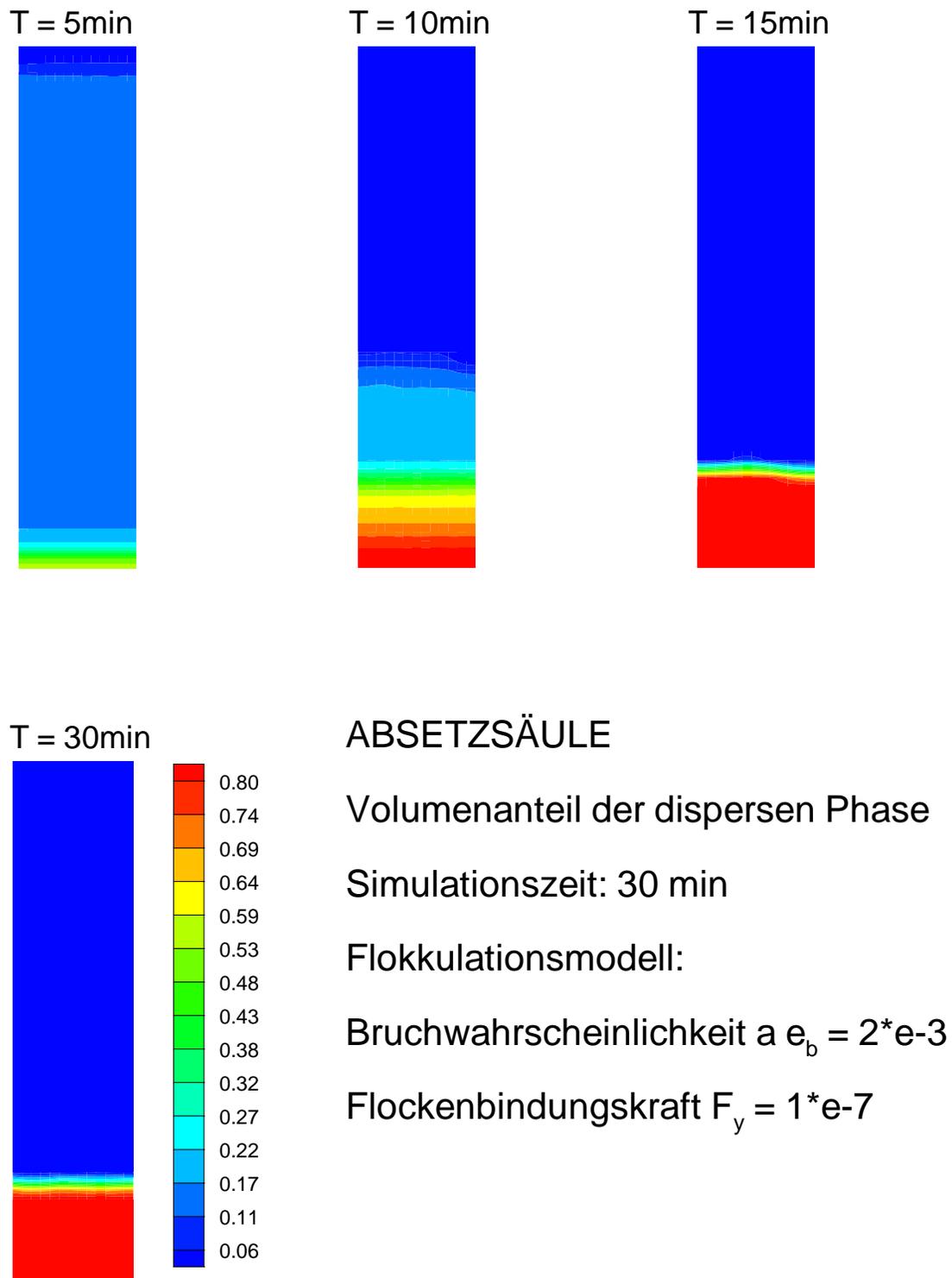


Abbildung 5.11: Zeitliche Entwicklung des Volumenanteils der dispersen Phase $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.3 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)

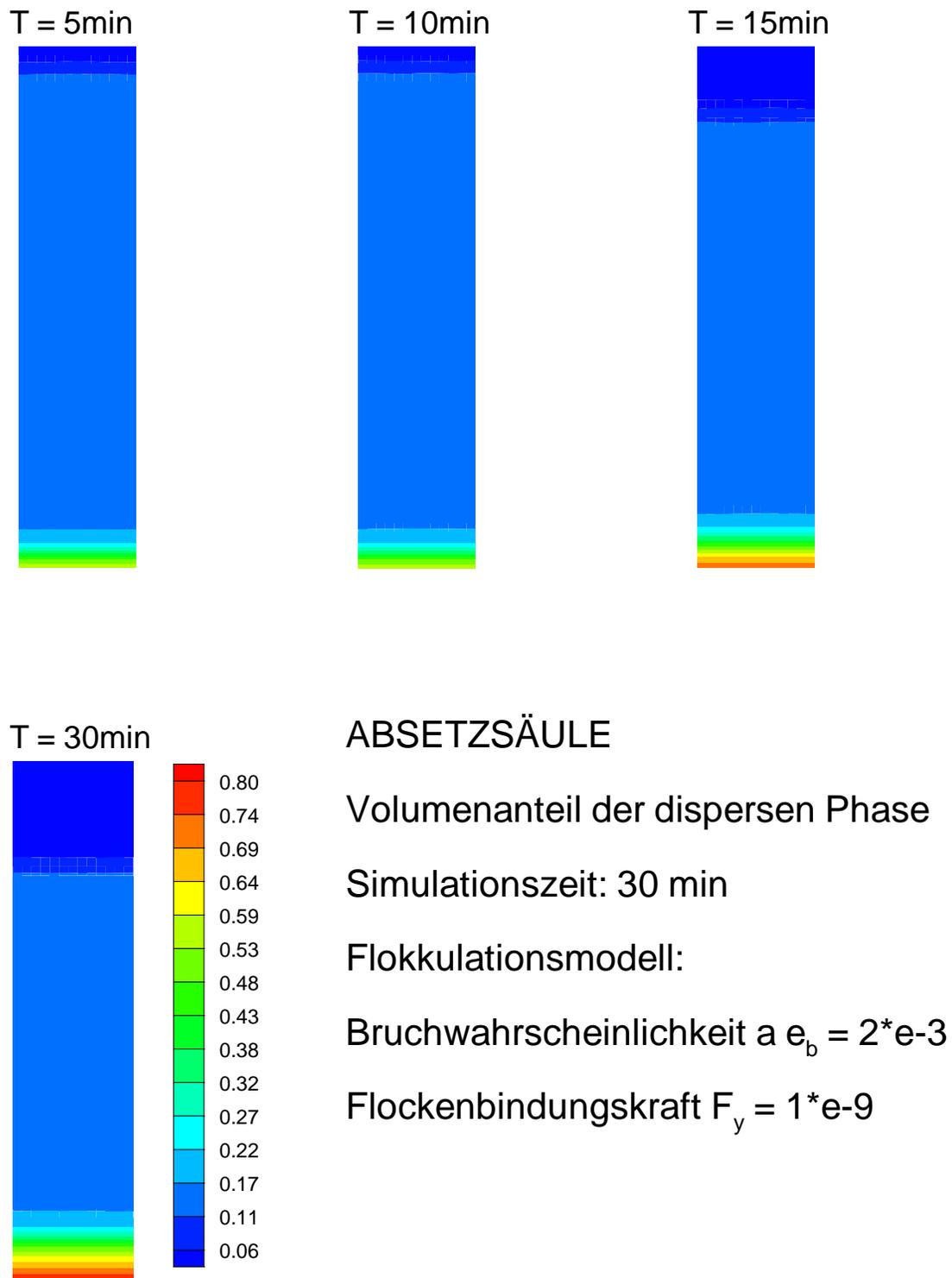


Abbildung 5.12: Zeitliche Entwicklung des Volumenanteils der dispersen Phase $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.4 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)

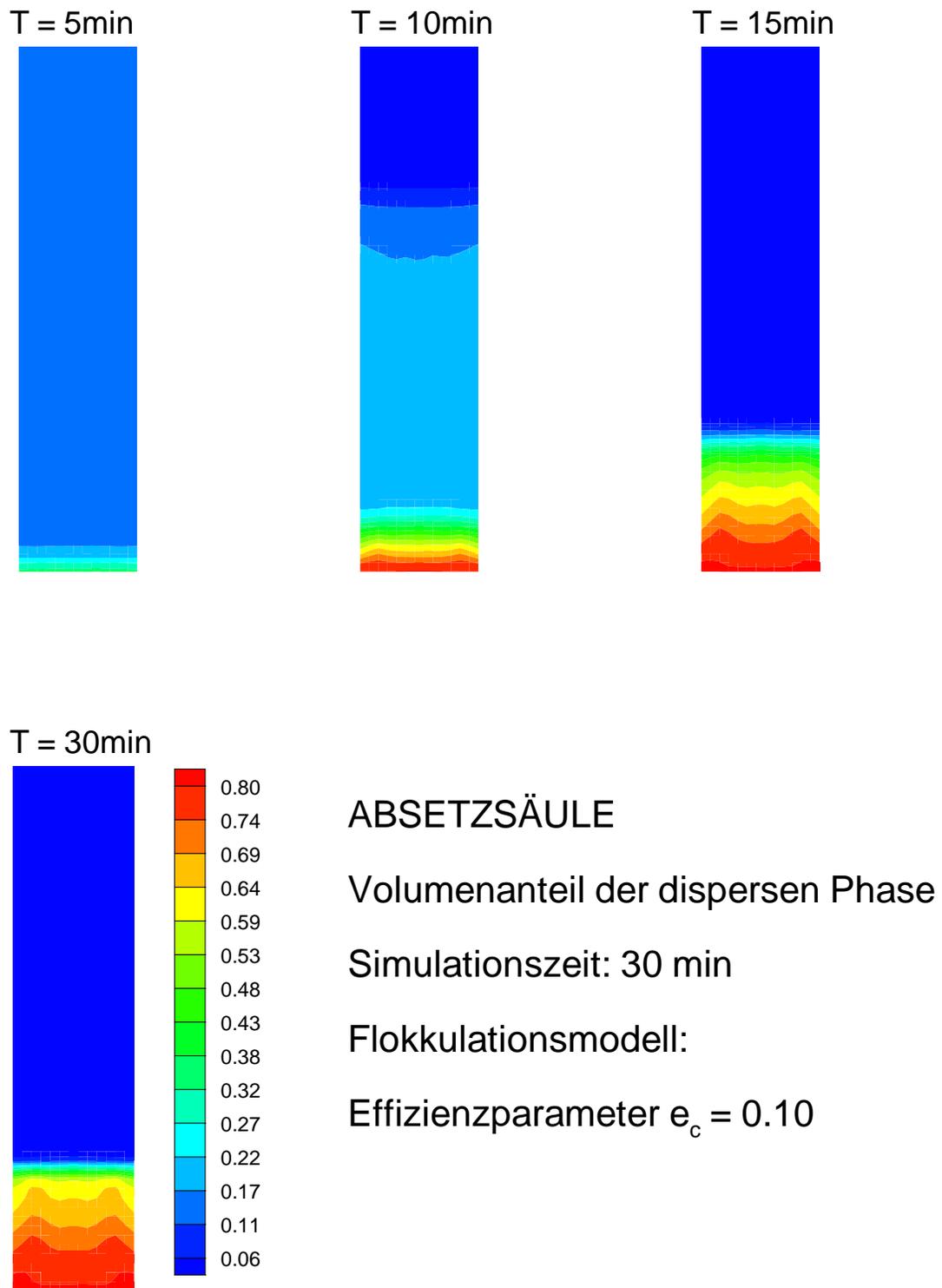


Abbildung 5.13: Zeitliche Entwicklung des Volumenanteils der dispersen Phase $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 2.1 (konstitutive Beziehungen für kohäsive Partikel)

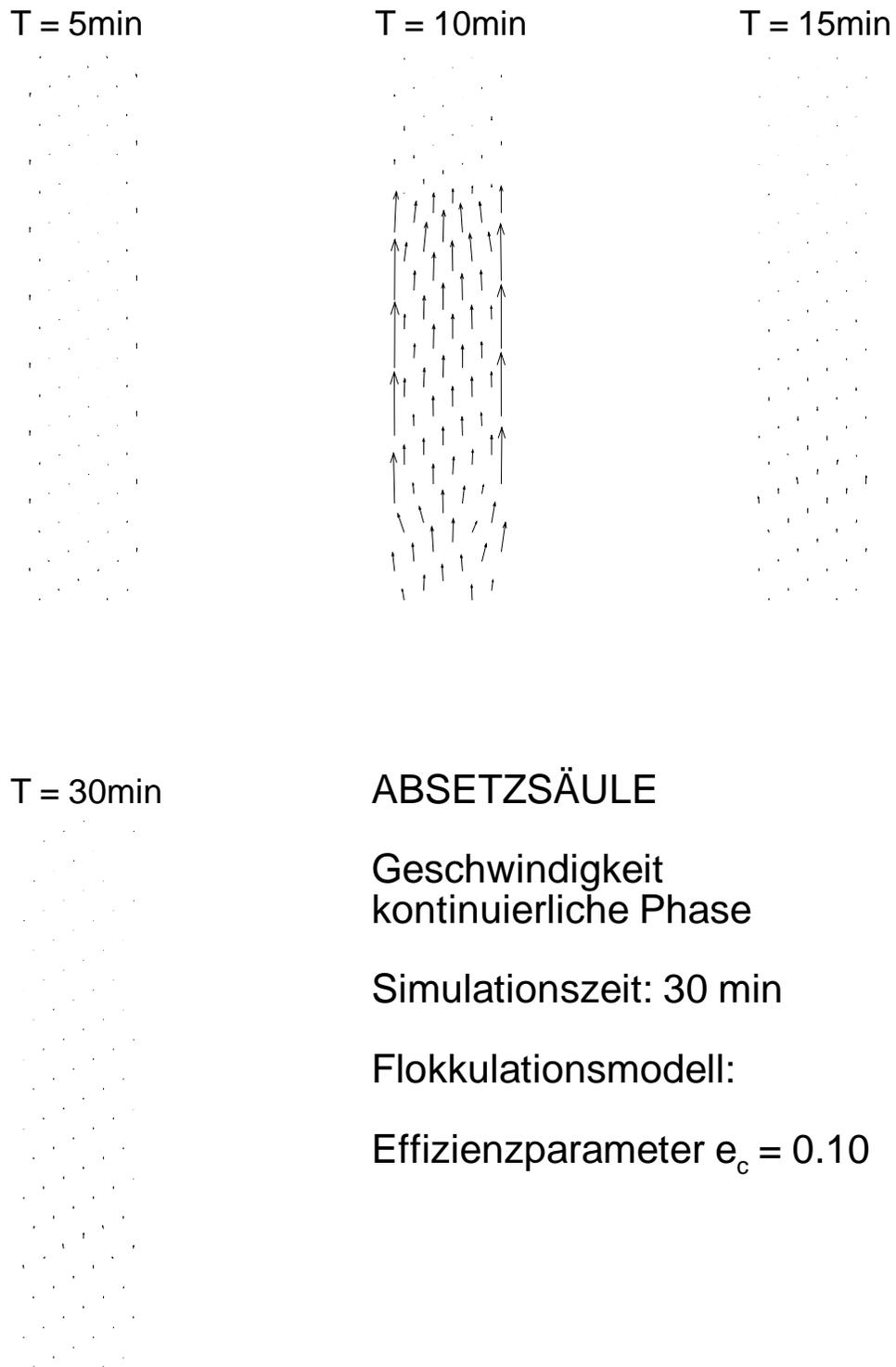


Abbildung 5.14: Zeitliche Entwicklung der Geschwindigkeit der kontinuierlichen Phase $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 2.1 (konstitutive Beziehungen für kohäsive Partikel)

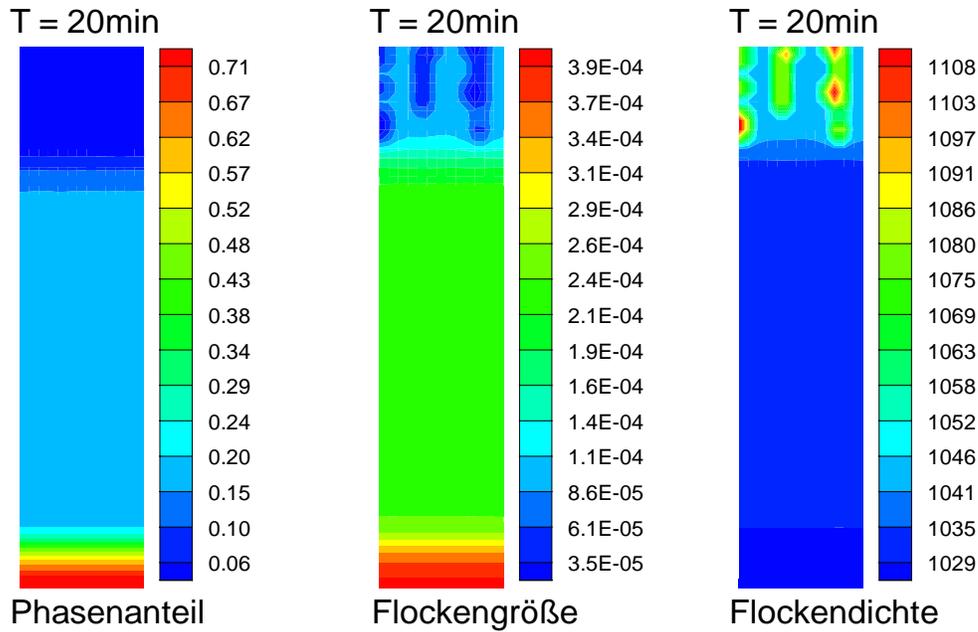


Abbildung 5.15: Physikalische Modellgrößen der dispersen Phase am Ende des Experiments $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.4 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)

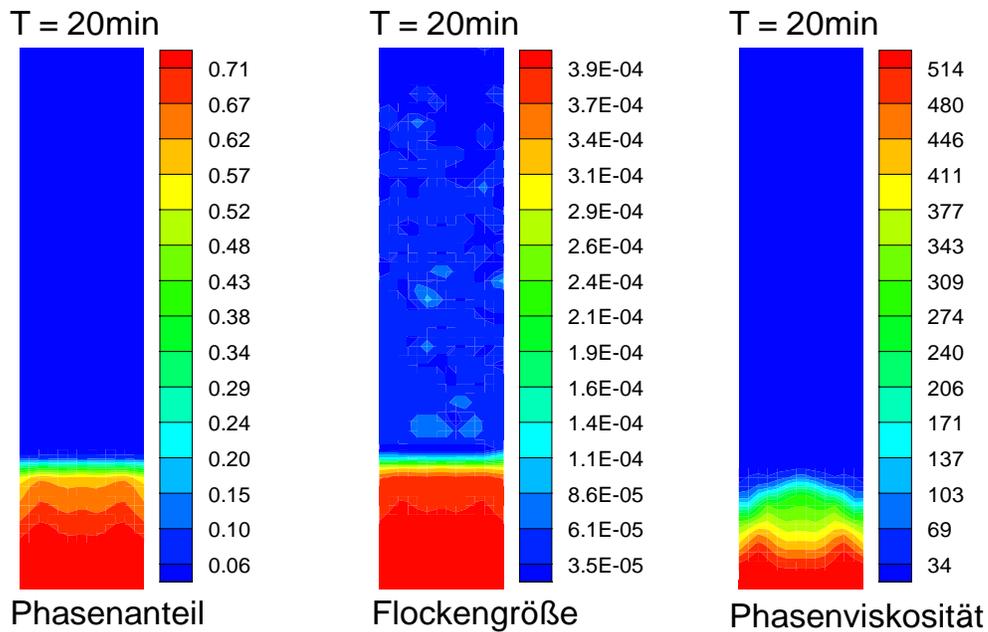


Abbildung 5.16: Physikalische Modellgrößen der dispersen Phase am Ende des Experiments $\alpha_{d,max} = 0.85$; Rechenlauf 2.1 (konstitutive Beziehungen für kohäsive Partikel)

Kapitel 6

Mehrphasenmodellierung in Nachklärbecken

6.1 Allgemeines

Das charakteristische mittlere Strömungsfeld in Nachklärbecken stellt sich infolge der Eigenschaften des belebten Schlammes, wie Flockendynamik und Schlammvolumenindex, den Wechselwirkungen zwischen Abwasser und belebtem Schlamm und geometrischen Bedingungen ein. Die in der Praxis üblichen Rund- und Rechteckbecken weisen gemeinsame Charakteristika auf. Grundlegende Unterschiede sind in der Konzentration des Rücklaufschlammes bei kontinuierlich (i.d.R. Rundbecken) und nicht kontinuierlich (i.d.R. Rechteckbecken) in den Schlammtrichter förderndem Räumern zu finden. Bei nicht kontinuierlicher Räumung steigt oder fällt die Konzentration des Rücklaufschlammes je nach momentaner Position des Räumers im Becken. Die Ausbildung eines konstanten Schlammspiegels im Schlammtrichter ist dann nicht zu beobachten.

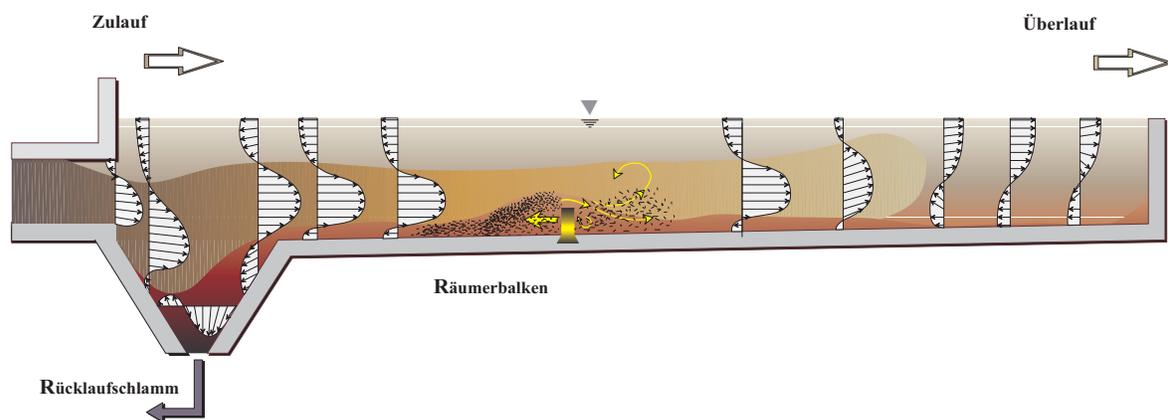


Abbildung 6.1: Schematisches Strömungsfeld in einem rechteckigen Nachklärbecken (nach Winkler, 2001 [76])

Das sich in beiden Beckentypen einstellende **mittlere** Strömungsfeld (Abbildung 6.1) ist durch Dichteunterschiede und strahlhydraulische Aspekte geprägt. In vertikaler

Richtung bildet sich ein Zirkulationssystem zwischen Schlamm Spiegel und Wasseroberfläche. Die Geschwindigkeit der sohnahen Vorwärtsströmung in Richtung Beckenwand oberhalb des Schlammspiegels übersteigt den Bemessungswert um ein Vielfaches (Larsen, 1977 [42] und Deininger, 1998 [12]). Aus Kontinuitätsgründen entsteht an der Beckenoberfläche eine Rückströmung.

Im Schlammbett entsteht ein gegenläufiges Zirkulationssystem durch die Schlammräumung an der Beckensohle.

Die vertikale und horizontale Ausdehnung des oberen Zirkulationssystems wird durch geometrische Bedingungen, wie Art und Höhe des Einlaufbauwerkes, und durch die Lage des Schlammspiegels, der hydraulisch ähnlich wie eine Gewässersohle wirkt, bestimmt (Freimann, 1999 [19]). Reicht die Walze bis an die Beckenaußenwand, gelangen erodierte Schlammteilchen direkt in den Beckenablauf. Zur Erosion am Schlamm Spiegel führen nicht nur die relativ hohe mittlere Geschwindigkeit der Walzenströmung, sondern auch die Entstehung kohärenter Turbulenzstrukturen infolge der geriffelten Schlamm Spiegeloberfläche. Darüberhinaus sind die größten Gradienten in den Schlammkonzentrationen im Bereich des Schlammspiegels zu finden.

Geschwindigkeit und Konzentration im sohnahen Beckenbereich werden durch den Räumler geprägt (Baumer und Winterthur, 1997 [4]). Auf der Anstromseite des Räumerbalkens häuft sich der Schlamm aufgrund des relativ geringen Dichteunterschieds des Schlammbettes zum Zulaufstrahl (ca. 5 Promille) auf und fällt schließlich als Dichtestrom entgegen der Fahrtrichtung über den Räumler. Dieser Dichtestrom lockert das Schlammbett auf, führt zur Erosion bereits sedimentierten Schlammes und zum Wasseraustausch mit darüberliegenden Schichten (Freimann, 1999 [19]).

Das mehrphasige Modell wird im folgenden auf das rechteckige Nachklärbecken der Kläranlage Kierspe-Bahnhof angewandt. Es muss in der Lage sein, das mittlere Strömungsfeld und die Verteilung des belebten Schlammes abzubilden. Die Ergebnisse des mehrphasigen Modells werden mit Messwerten und Ergebnissen eines einphasigen Modells verglichen und bewertet. Aussagen über die Anwendungsbereiche des Modells werden getroffen.

6.2 Das Nachklärbecken der Kläranlage Kierspe-Bahnhof

6.2.1 Experimentelle Untersuchungen und Physik des Systems

Die Nachklärung der Kläranlage Kierspe-Bahnhof des Ruhrverbands besteht aus zwei sehr langen, schmalen und flachen Becken (50 m Länge, 5 m Breite und 2.2 m Tiefe), die nicht mehr den heutigen Empfehlungen des ATV-DVWK A131 [1] entsprechen. Im Rahmen einer geplanten Umbaumaßnahme wurde der Ist-Zustand messtechnisch und mittels numerischer Simulationen analysiert und verschiedene Ausbauvarianten hinsichtlich ihrer Leistung numerisch überprüft (Krebs et al., 2001 [39]). Die hier verwendeten

Messdaten beziehen sich auf obige Untersuchungen.

Die Beschickung der Becken erfolgt über jeweils fünf DN 175 Mauerrohre mit vorgelagertem Prallteller auf halber Beckentiefe. Das Klarwasser wird über eine Ablaufrinne mit 61m Überfalllänge abgezogen. Der Schlamm wird aus zwei Schlammtrichtern über DN 200 Mauerrohre in einen gemeinsamen Schacht verdrängt und von dort über eine DN 300 Leitung zum Rücklaufschlammumpwerk geleitet.

An zwanzig Vertikalprofilen wurden Suspensionsgeschwindigkeit und Feststoffkonzentration (TS-Gehalt) an je sechs bis zehn Messpunkten zur Charakterisierung der Verhältnisse im gesamten Becken aufgenommen. Zusätzlich wurden im Einlaufbereich neunzehn Vertikalprofile mit je zehn Messpunkten erstellt, wobei die Messwertdichte in Fließrichtung verringert wurde (Abbildung 6.2).

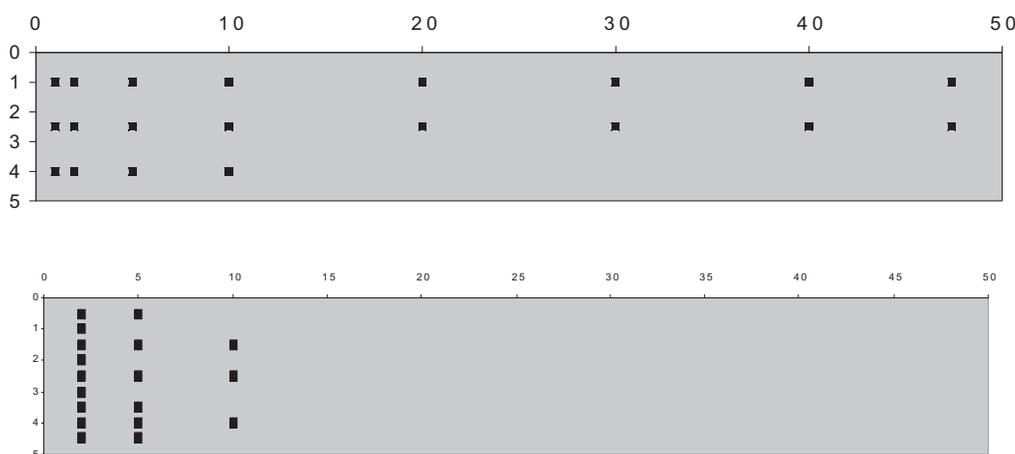


Abbildung 6.2: Messraster in Gesamtbecken und Einlaufbereich (Draufsicht) (Krebs et al., 2001 [39])

Während der Messwertaufnahme war der Nachklärbecken-zufluss (Abwasser und Rücklaufschlamm) relativ konstant und betrug ca. 100 l/s. Der Gehalt an Trockensubstanz im Zulauf zum Nachklärbecken lag bei 2.2 g/l.

Es bildete sich ein deutlicher Schlamm Spiegel mit Trockensubstanzgehalten von bis zu 12 g/l aus, so dass sich das charakteristische mittlere Strömungsfeld der Suspension (Abbildung 6.1 Seite 92) einstellte. Oberhalb des Schlamm Spiegels bildete sich eine vorwärts gerichtete Hauptströmung aus, die mit dem Ende des Schlamm bettes als Sohlströmung bestehen bleibt. Oberflächennah entstand eine Rückströmung (Abbildung 6.3).

Im Bereich des Schlamm trichters ist eine vertikal orientierte Strömung mit Beträgen von ca. 4 cm/s zu erkennen. Im Schlamm bett selber sind die Strömungsgeschwindigkeiten wesentlich geringer, lediglich im Bereich des Schlamm trichters erreichen sie maximal 2 cm/s. Oberhalb des Schlamm bettes sind die größten Geschwindigkeiten gemessen worden. Hier werden bis zu 5 cm/s erreicht, wohingegen die Rückströmung nahe der Oberfläche ca.

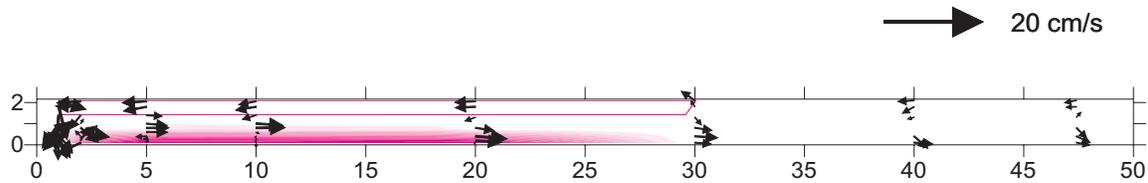


Abbildung 6.3: Gemessenes Geschwindigkeitsprofil in Beckenmitte $y=2.5$ m (Krebs et al., 2001 [39])

2-3 cm/s beträgt.

Die Autoren berichten von stärkeren Sekundärströmungen, die kurz hinter dem Einlauf von der gleichen Größenordnung wie die Horizontalgeschwindigkeiten sind. Als Ursache dafür werden Asymmetrien in der Austrittsströmung benannt.

Weiterhin betonen die Autoren, dass es nur wenige In-situ Messungen unter realen Bedingungen gibt, die für die Verifizierung einer mehrdimensionalen Strömungssimulation eine ausreichende Aussagekraft aufweisen. Sie sind kaum repräsentativ, weil es nicht möglich ist, die Randbedingungen über die lange Messdauer konstant zu halten. Ferner stellen die niedrigen Geschwindigkeiten und die intensive Trübung im Bereich des Schlammbettes ein Hindernis für eine hohe Messgenauigkeit dar.

Für die Validierung des mehrphasigen Modells kommt erschwerend hinzu, dass lediglich die Suspensionsgeschwindigkeiten und nicht die Geschwindigkeiten der einzelnen Phasen, wie sie vom Modell berechnet werden, gemessen wurden. Ferner wurde die Massenkonzentration und nicht die volumetrische Konzentration (Phasenanteil) messtechnisch bestimmt, so dass keine Aussagen über die räumliche Ausdehnung des belebten Schlammes bei unterschiedlichen Phasenanteilen und Flockengrößen verfügbar sind. Ein quantitativer Vergleich zwischen Messwerten und Ergebnissen des mehrphasigen Modells ist daher nur eingeschränkt möglich. Zudem wird das Modellgebiet lediglich zweidimensional aufgelöst, so dass die o.g. Sekundärströmungen nicht simuliert werden können.

6.2.2 Numerische Modelluntersuchungen

Das Nachklärbecken der Kläranlage Kierspe-Bahnhof soll nun mit dem mehrphasigen Modell simuliert werden. Die Ergebnisse werden Messwerten und Ergebnissen eines einphasigen Modells nach Schumacher, 2004 [30], das ebenfalls auf der Basis des Programmsystems FLUENT entwickelt wurde, gegenübergestellt.

Es wurden zwei Berechnungsnetze in unterschiedlichen Auflösungen verwendet, um Aussagen zum Diskretisierungseinfluss auf das Systemverhalten zu ermöglichen. Der Einlaufbereich wurde wegen seiner komplexen Geometrie unstrukturiert mit Dreiecken vernetzt, konnte aber wegen seiner dreidimensionalen Struktur nur vereinfacht abgebildet werden. Das eigentliche Becken ist strukturiert mit Vierecken vernetzt.

Beide Netze unterscheiden sich in der räumlichen Auflösung. Die Elementgröße im Einlaufbereich wurde beim feinen Netz reduziert. Im Beckenbereich wurde die Auflösung

in vertikaler Richtung über die gesamte Beckenlänge halbiert. In horizontaler Richtung wurde die Gitterweite zunächst halbiert und vergrößert sich dann sukzessive auf die Ausgangsweite. Dadurch erhöht sich die Anzahl der Berechnungszellen von 14721 bei der gröberen Diskretisierung auf 30585 bei der feineren Variante. Die Größe der Fläche einer Zelle variiert zwischen 8cm^2 und 90cm^2 bzw. 125cm^2 . Abbildung 6.5 Seite 103 zeigt den Einlaufbereich für beide Varianten.

Der Rechenzeitbedarf des mehrphasigen Modells liegt ungefähr um einen Faktor 3-4 über dem des einphasigen Modells. Hierbei ergeben sich Unterschiede bei der Verwendung verschiedener Hardware-Architekturen. Das Programm skaliert bei dieser Problemgröße auf einem Parallelrechner nur mäßig. Konkret bringt die Verwendung von mehr als 4 Prozessoren keine nennenswerte Verkürzung der turn-around Zeiten und für 1 Stunde simulierte Zeit werden bei Verwendung des mehrphasigen Modells ca. 3 Tage Rechenzeit benötigt. Die mehrphasigen Berechnungen wurden mit den Viskositätsansätzen für kohäsive Partikel (siehe Tabelle 4.1, Seite 40) angefertigt. Das nichtlineare Kompressionsverhalten des Schlammбетtes wurde wegen des für belebten Schlamm unbekanntem Kompressionsmoduls mit dem nichtlinearen Ansatz für nichtkohäsive Sedimente abgebildet. Der maximale Phasenanteil, der den Übergang zur Inkompressibilität der dispersen Phase charakterisiert, wurde so gewählt, dass er der durch statische Eindickung im Nachklärbecken maximal erreichbaren Feststoffkonzentration von 15 g/l entspricht.

Das Modell benötigt Anfangsbedingungen im gesamten Modellgebiet und Randwerte an Einlauf, Schlammabzug und Klarwasserüberlauf. Als Anfangszustand wurde ein mit Klarwasser gefülltes Becken angesetzt. Die Dirichletschen Randwerte am Einlauf wurden aus dem Nachklärbecken-zufluss und der Durchflussfläche bestimmt. Die Volumenkonzentration der dispersen Phase wurde aus dem im Nachklärbecken-zulauf bestimmten mittleren TS-Gehalt errechnet. Die Umrechnung der Massen- in eine Volumenkonzentration erfolgte nach einer von Winterwerp, 1999 [77] vorgeschlagenen Formulierung für kohäsive fraktale Sedimente.

$$\phi = \frac{c_d}{\varrho_{d,max}} \left(\frac{d_f}{d_p} \right)^{3-n_f} \quad (6.1)$$

- mit $\varrho_{d,max}$: Trockendichte der dispersen Phase
 c_d : Massenkonzentration der dispersen Phase
 d_f : Flockendurchmesser der dispersen Phase
 d_p : Durchmesser der Primärpartikel der dispersen Phase
 n_f : fraktaler Formfaktor
 $1.7 \leq n_f \leq 1.8$ (Chen und Eisma, 1995 [6])

Diese Formulierung ist hinsichtlich des Verhältnisses von Flocken- zu Primärpartikelgröße sehr sensitiv, da es in potenziertem Form eingeht. Geringe Änderungen der angesetzten Größen führen zu deutlichen Änderungen in der volumetrischen Konzentration.

Die Dichte der dispersen Phase ϱ_d wurde aus den für unterschiedliche Feststoffgehalte gemessenen Suspensionsdichten ϱ_m gemäß des Feststoffgehaltes im Einlauf mit folgender Beziehung bestimmt:

$$\varrho_d = \frac{\varrho_m - ((1 - \alpha_d)\varrho_c)}{\alpha_d} \quad (6.2)$$

Bereits hier wird deutlich, dass ein mehrphasiges Modell Größen als Randwerte benötigt, die auf kommunalen Kläranlagen derzeit nicht bestimmt werden, wie z.B. die Flockendichte und die volumetrische Phasenkonzentration. Das liegt z.T. an den erst in letzter Zeit verfügbaren Messgeräten, beispielsweise für die In-situ Messung der volumetrischen Konzentration, aber auch an dem enormen messtechnischen und finanziellen Aufwand, der im normalen Betrieb der Anlage kaum zu bewerkstelligen ist. Die Umrechnung der gemessenen Werte auf Randwerte des mehrphasigen Modells ist, wie schon erwähnt, sehr sensitiv.

Die Ergebnisse sollen mit einem einphasigen Modell nach Schumacher, 2004 [30] verglichen werden, das dem Stand der Wissenschaft in der einphasigen Modellierung von Nachklärbecken entspricht und ebenfalls auf der Basis des Programmsystems FLUENT entwickelt wurde. Dieses Modell löst die Advektions-Diffusionsgleichung der Massenkonzentration für den Partikeltransport mit einem Sinkgeschwindigkeitsansatz, der aus Absetzversuchen mit dem realen Schlamm ermittelt wird. Dieser Ansatz parametrisiert Flockenbildung, behindertes Absinken und die Ausbildung des Schlammspiegels. Den Zusammenhang zwischen Sinkgeschwindigkeit und TS-Gehalt für das Nachklärbecken der Kläranlage Kierspe zeigt Abbildung 6.4. Dabei ist anzumerken, dass nur sehr wenige Messdaten zur Generierung der Sinkgeschwindigkeitskurve vorlagen.

Sinkgeschwindigkeit

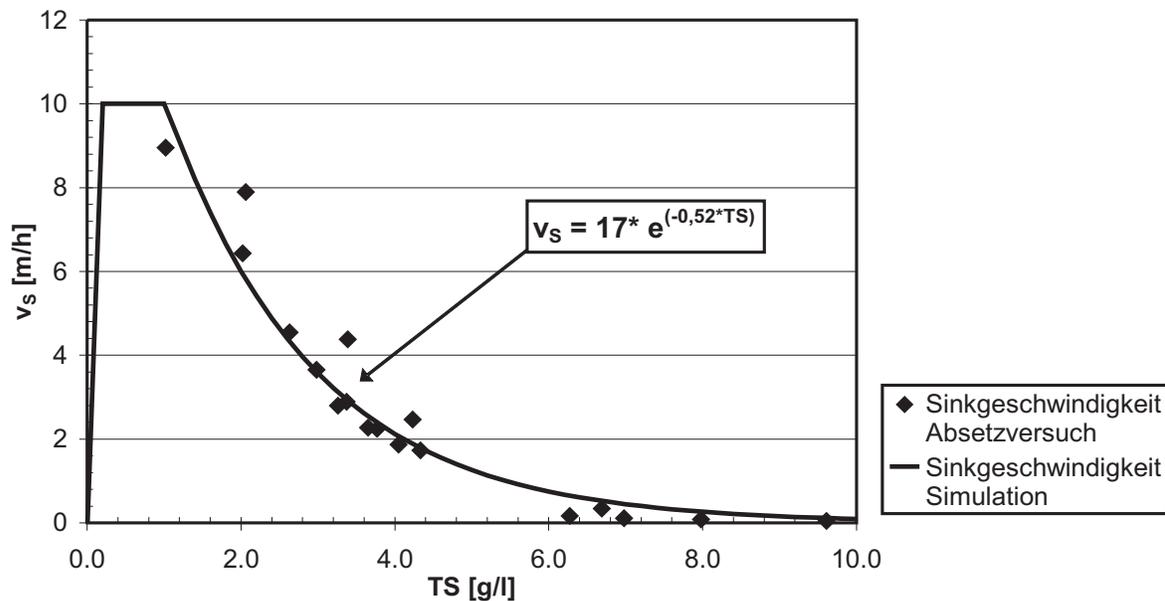


Abbildung 6.4: Sinkgeschwindigkeitsverlauf des einphasigen Modells nach Schumacher, 2004 [30]

Für die Suspension werden die Erhaltungsgleichungen von Masse und Impuls gelöst. Den speziellen Fließigenschaften der Suspension wird über einen gedämpften Bingham-

Ansatz Rechnung getragen, der eine Kombination der Spannungsansätze nach Lakehal, 1999 [41] und Casey, 1992 [5] darstellt. Die Suspensionsdichte wird in Abhängigkeit der Massenkonzentration über die Zustandsgleichung bestimmt. Die Turbulenz wird mit dem RNG – $k - \epsilon$ –Modell berechnet. Der Dichteeinfluss wird in Abhängigkeit der Stabilität der Schichtung über Zusatzterme berücksichtigt.

Das einphasige Modell benötigt Randwerte für die Massenkonzentration des belebten Schlammes (TS-Gehalt), die Suspensionsgeschwindigkeit im Nachklärbeckenzulauf und im Klarwasserablauf. Beide Größen sind messtechnisch relativ leicht zu ermitteln. Der TS-Gehalt wird wegen seiner Funktion als Bemessungsgröße und seiner Bedeutung für die reaktionskinetischen Prozesse auf den meisten Kläranlagen täglich per Hand oder sogar online gemessen. Der Anfangszustand des Modells entspricht dem des mehrphasigen Modells.

Die hier verwendeten Anfangs- und Randwerte beider Modelle sind in Tabelle 6.1 zusammengefasst.

Die ersten Studien wurden mit dem groben Berechnungsnetz durchgeführt, um einen Überblick über das prinzipielle Systemverhalten, insbesondere die Ausbreitung der festen Phase, der Wirkungsweise des Räumers und der Wahl des für die Mehrphasenmodellierung wichtigen Parameters $\alpha_{d,max}$ zu erhalten. Die Abbildungen 6.6 bis 6.8 illustrieren diese ersten Modelluntersuchungen, indem die volumetrische Schlammkonzentration für verschiedene äquidistante Zeitpunkte und unterschiedliche maximale Phasenanteile dargestellt ist.

Die Abbildung 6.6 zeigt die Modellergebnisse einer Simulation mit Ansätzen für nicht kohäsive Partikel. Hier ist die Abhängigkeit der Schlammbettlage und -ausdehnung von der Räumerverposition deutlich zu erkennen. Dieser schiebt das Schlammbett vor sich her, staut es bis zur Überströmung auf und fördert es letztendlich in den Schlammtrichter (T=6h05min). Als Folge der diskontinuierlichen Räumerverstrategie füllt sich der Schlammtrichter periodisch, so dass der Feststoffgehalt des abgezogenen Schlammes von der Räumerverposition abhängig ist.

In den Abbildungen 6.7 und 6.8 ist eine ähnliche Sequenz zu sehen, wobei hier kohäsive Partikeleigenschaften berücksichtigt und der maximale Phasenanteil $\alpha_{d,max}$ variiert wurden. In Abbildung 6.7 ist dieser Wert wie auch in Abbildung 6.6 zu $\alpha_{d,max} = 0.80$ gewählt worden. Der Räumvorgang sieht auf den ersten Blick ähnlich aus wie schon zuvor bei der Simulation mit den Ansätzen für nicht kohäsive Partikel (Abbildung 6.6), doch bei genauerer Analyse lassen sich Unterschiede erkennen. Besonders in dem Augenblick, in dem der Schlamm in den Trichter geschoben wird, kann man phasenweise ein steiferes und weniger granulares Systemverhalten erkennen.

Bei Erniedrigung des maximalen Phasenanteils auf $\alpha_{d,max} = 0.65$ ist ein völlig anderes Systemverhalten erkennbar (Abbildung 6.8). Erwartungsgemäß stellt sich ein wesentlich höherer Schlamm Spiegel im Becken ein. Der Dichtestrahle mischt sich stärker in das ihn umgebende Medium ein. Auch die Wirkung des Räumers ändert sich deutlich. Der in Abhängigkeit des Phasenanteils formulierte Ansatz für das bingham-plastische Verhalten liefert bei geringerem Phasenanteil kleinere Viskositäten. Das Schlammbett ist weniger steif und instabiler. Der Rümer schiebt es nicht mehr wie ein Schneeschieber vor sich her, sondern zerstört es. Da diese starken Verwirbelungen in natura nicht zu

Randwerte	
Einlauf	$Q = 0.0575 \left[\frac{\text{m}^3}{\text{s}} \right]$
Einlaufgeschwindigkeit	$u_{k, \text{ein}} = 0.8108 \left[\frac{\text{m}}{\text{s}} \right]$
Schlammabzug	$Q = 0.004 \left[\frac{\text{m}^3}{\text{s}} \right]$
Räumergeschwindigkeit	$u_R = 0.02 \left[\frac{\text{m}}{\text{s}} \right]$
Trockensubstanzgehalt im Zulauf	$TS = 2.2 \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right]$
Volumenanteil im Einlauf	$\alpha_{d, \text{ein}} = 0.143$
mittlere Flockengröße im Einlauf	$d_p = 50.0 \left[\mu\text{m} \right]$
Dichte des belebten Schlammes	$\rho_d = 1005 \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right]$
maximaler Volumenanteil	$\alpha_{d, \text{max}} = 0.8$
Anfangswerte	
Volumenanteil im Becken	$\alpha_d = 0.0$
Geschwindigkeit im Becken	$\mathbf{u}_k = 0.0 \left[\frac{\text{m}}{\text{s}} \right]$

Tabelle 6.1: Anfangs- und Randwerte für die Simulation des Nachklärbeckens der Kläranlage Kierspe-Bahnhof

beobachtet sind, wurde für die weiteren Simulationen mit dem Mehrphasenmodell der Übergang zur Inkompressibilität der dispersen Phase bei $\alpha_{d,max} = 0.80$ belassen.

Diese ersten Studien zeigten weiterhin, dass sich die disperse Phase anders als bei den Messungen beobachtet im gesamten Becken ausbreitet. Eine mögliche Ursache für dieses Verhalten kann eine für das Mehrphasenmodell ungenügende Auflösung des Modellgebietes sein, weswegen diese Untersuchungen wie eingangs erwähnt auch mit einem Berechnungsnetz durchgeführt wurden, das etwa doppelt so viele Zellen verwendet.

Die Ergebnisse der ein- und zweiphasigen Modellrechnungen sind vergleichend in der Abbildung 6.9 dargestellt. Hier zeigt sich bei den in der oberen Bildhälfte dargestellten Ergebnissen des mehrphasigen Modells ein gravierender Unterschied. Während sich der Schlamm bei dem groben Modell gleichmäßig über das Becken verteilt und einschichtet verbleibt er bei dem feinen Modell ähnlich wie bei den Messungen beobachtet im vorderen Drittel. Dieses signifikant veränderte Systemverhalten ist eine Folge der Strömungsverteilung im Einlaufbereich, die in den Abbildungen 6.10 bis 6.16 detailliert dargestellt wird. Bei diesen Abbildungen ist der Bereich vor dem Prallteller mit seinen hohen Strömungsgeschwindigkeiten ausgeblendet, um eine bessere vektorielle Darstellung der Strömung zu ermöglichen. Dargestellt sind in diesen Abbildungen die Strömungsgeschwindigkeiten der Suspension, die aus den gewichteten einzelnen Phasengeschwindigkeiten berechnet wurden, und die aus den Volumenanteilen der dispersen Phase berechneten Konzentrationen im Einlaufbereich zu verschiedenen Zeitpunkten und Räumernpositionen. Die Isoflächendarstellung der Konzentration wird zusätzlich durch Stromlinien überlagert, die die Strömungsrichtung und durch zusätzliche Marker die Suspensionsgeschwindigkeit anzeigen.

Bei dem feinen Mehrphasenmodell stellt sich ein zeitweise stabiles Wirbelsystem ein, das sowohl charakteristische Dichteströmungen wie auch Kurzschlussströmungen aufweist. Ist der Räumern im vorderen Bereich des Beckens, so wird dieses Wirbelsystem zeitweise deformiert (Abbildungen 6.12 und 6.13), doch nach der Schlammräumern stellt es sich wieder so ein, dass dem System kontinuierlich Schlamm zugeführt wird. Der Schlamm schichtet sich aufgrund der großen berechneten Flockendurchmesser (bis zu 3 mm) (Abbildungen 6.14) bereits im vorderen Bereich ein und bildet eine vergleichsweise steife Masse. Oberhalb des kontinuierlich wachsenden Schlammspiegels strömt die Suspension in einer stark ausgeprägten Schicht mit einer Schichtdicke von ca. 40 cm in das Becken und initiiert dadurch die typische großräumige Rezirkulation, die sich aber nicht stark genug ausbildet.

Die strömungsmechanischen Voraussetzungen für den Flokkulationsprozess sind bei diesem System offenbar gegeben, während sich bei dem groben Mehrphasenmodell die Strömung im Eingangsbereich sehr unruhig verhält und keinen konzentrierten Strahl in das Becken ausbildet. Bei diesem System breitet sich der Schlamm stärker über die Vertikale verteilt im Becken aus und wird daher auch leichter in die hinteren Bereiche transportiert. Exemplarisch zeigen die Abbildungen 6.15 und 6.16 das Systemverhalten des mehrphasigen Modells bei Verwendung des größeren Berechnungsnetzes.

Bei der einphasigen Modellierung sind diese extremen Unterschiede nicht zu finden. Das Systemverhalten beider Modelle ist sehr ähnlich, lediglich im Einlaufbereich sind

die Strömungsstrukturen bei dem feinen Modell detaillierter ausgebildet. Hier bildet sich ebenfalls ein stabiles Wirbelsystem aus, das lediglich durch den Räumerbetrieb gelegentlich gestört wird (Abbildungen 6.17 und 6.18). Der Schlamm lagert sich hier nicht bereits im vorderen Bereich des Nachklärbeckens ab, weswegen sich bei diesem System die obere Strömungswalze weiter in das Becken ausdehnen kann und dadurch für etwas höhere Strömungsgeschwindigkeiten sorgt. Erfahrungen von Schumacher, 2004 [30] mit dem einphasigen Modell zeigen aber, dass das Modell sensitiv auf den Verlauf des Sinkgeschwindigkeitsansatzes im Zusammenhang mit der Diskretisierung des Berechnungsgebietes reagiert. Die Auswirkungen einer feineren Auflösung sind dabei, wie oben erwähnt, nicht so sehr in der Strömungsstruktur des Einlaufbereiches zu finden, sondern in der Ausdehnung des Schlammбетtes in den hinteren Beckenteil. Für die Modellierung der Sinkgeschwindigkeit des belebten Schlammes im Nachklärbecken Kierspe standen nur sehr wenige Messdaten zur Verfügung (Abbildung 6.4 Seite 97), was die Qualität der Ergebnisse hinsichtlich der Lage und Ausdehnung des Schlammбетtes erheblich beeinflusst.

Die Abbildungen 6.19 bis 6.22 ermöglichen einen Vergleich zwischen den Ergebnissen der ein- und mehrphasigen Modelle mit den Messung von Krebs et al., 2001 [39]. In der oberen Bildhälfte sind jeweils die Strömungsgeschwindigkeiten der Suspension in Beckenmitte an den Positionen 5m und 10m zu sehen, in den beiden darunter angeordneten Grafiken die vertikale Konzentrationsverteilung an diesen Positionen. Die Modellergebnisse sind grün dargestellt, die Messungen schwarz.

Wie schon zuvor anhand der flächenhaften Darstellungen in der Abbildung 6.9 zu sehen war, unterscheiden sich die Ergebnisse der einphasigen Systemstudien nicht wesentlich. Die Konzentrationsverteilung ist weniger stark geschichtet als in natura, und die Strömungsgeschwindigkeiten werden teils über- und teils unterschätzt, wenn auch die Grundmuster zu erkennen sind. Im Bereich des Schlammбетtes und darüber sind die Geschwindigkeiten etwas zu groß, und die oberflächennahe Rückströmung ist zu schwach ausgeprägt. Insgesamt liegen die Ergebnisse der einphasigen Berechnungen im wesentlichen in der Größenordnung der Messwerte.

Ähnliches gilt für die Suspensionsgeschwindigkeiten der Mehrphasenmodelle, wobei in diesen Modellen kaum eine Strömung im Schlammбетт vorhanden ist. Deutlich sind auch in dieser Darstellung die Unterschiede in der Lage des Schlammspiegels zu sehen. Während das grobe Modell bei dieser Prognose vollends versagt, liegt die Konzentrationsverteilung bei dem feinen Modell im Bereich der Messungen. Die Höhe des Schlammspiegels wird etwas überschätzt. Infolge des Ansatzes eines bingham-plastischen Verhaltens ähneln die vom Modell berechneten Viskositäten der dispersen Phase bei großem Phasenanteil und fehlender Scherung denen eines Festkörpers. Das führt dazu, dass sich der abgesetzte Schlamm versteift und nicht mehr transportiert wird. Dadurch wächst der Schlamm Spiegel im Einlaufbereich sehr stark an und die weitere Ausdehnung wird unterbunden. Die Konzentrationen in der Klarwasserzone sind hingegen zu hoch. Es ist sicherlich möglich, dieses Ergebnis durch eine gezielte Variation verbleibender Eingangsgrößen, insbesondere durch Dämpfung des bingham-plastischen Verhaltens und durch die Flokkulationsparameter, noch zu verbessern. Infolge der notwendigen Umrechnung des Phasenanteils in eine Massenkonzentration ist ein quantitativer

Vergleich der mehrphasigen Ergebnisse mit den Messwerten a priori problematisch.

Die in Kapitel 6.1 beschriebenen Strömungsmuster finden sich also auch in den Ergebnissen der ein- und mehrphasigen Modelle. Die Beträge der Geschwindigkeiten weichen bereichsweise bis zu 2 cm/s von den gemessenen ab. Die Vereinfachungen eines zweidimensionalen Modells (Geometrie des Einlaufbereiches; fehlende Sekundärströmungen) sind sicherlich mit ein Grund für diese Abweichungen, doch auch unsichere Eingangsgrößen in das Mehrphasenmodell wie z.B. der oben diskutierte Volumenanteil der dispersen Phase beeinflussen das Simulationsergebnis. Grundsätzlich muss ein numerisches Modell eine hinreichende Auflösung verwenden, damit es nicht bereits aus diesem Grund zu einer zu starken Energiedissipation im Einlaufbereich kommt. Die Lage und Ausprägung der Wirbel im Nahbereich des Pralltellers ist maßgebend für die Strahlhydraulik, die die Strömung im Becken antreibt. Das mehrphasige Modell zeigt sich bezüglich dieses Effektes besonders empfindlich, liefert dann aber ohne weiteres *tuning* überraschend naturnahe Ergebnisse.

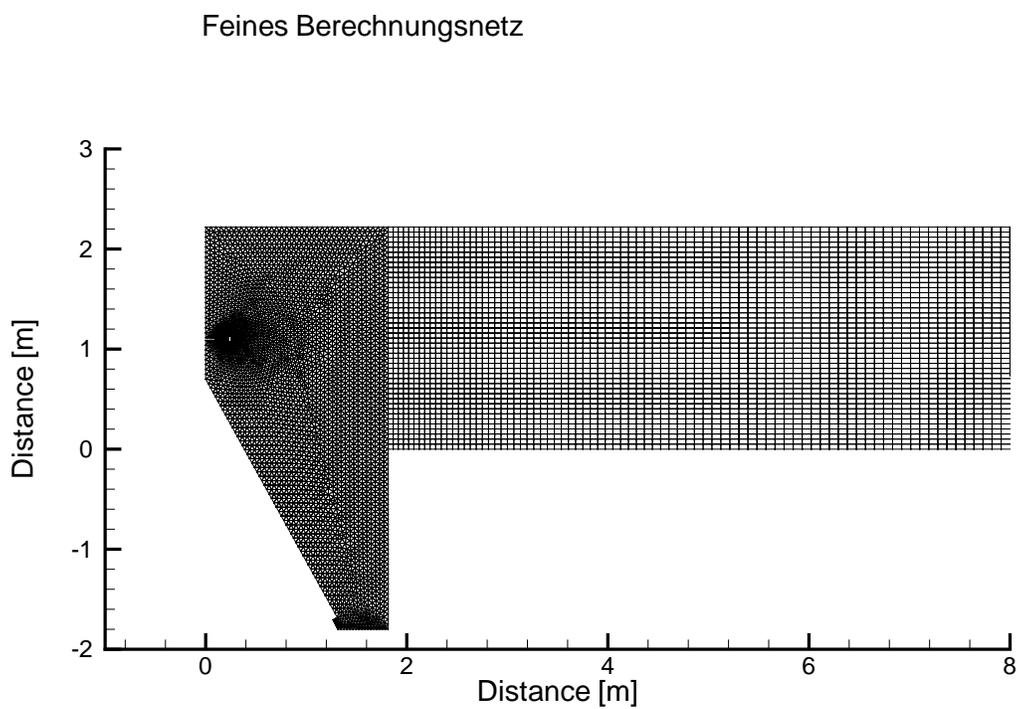
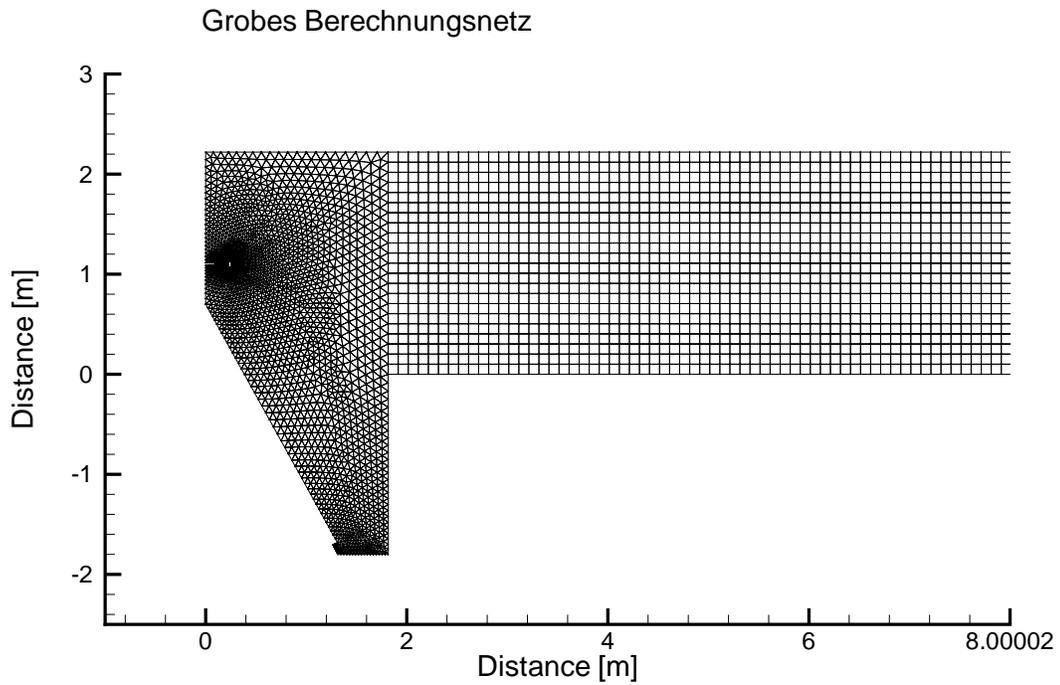


Abbildung 6.5: Ausschnitt aus den Berechnungsnetzen für das NKB Kierspe in zwei unterschiedlichen räumlichen Auflösungen.

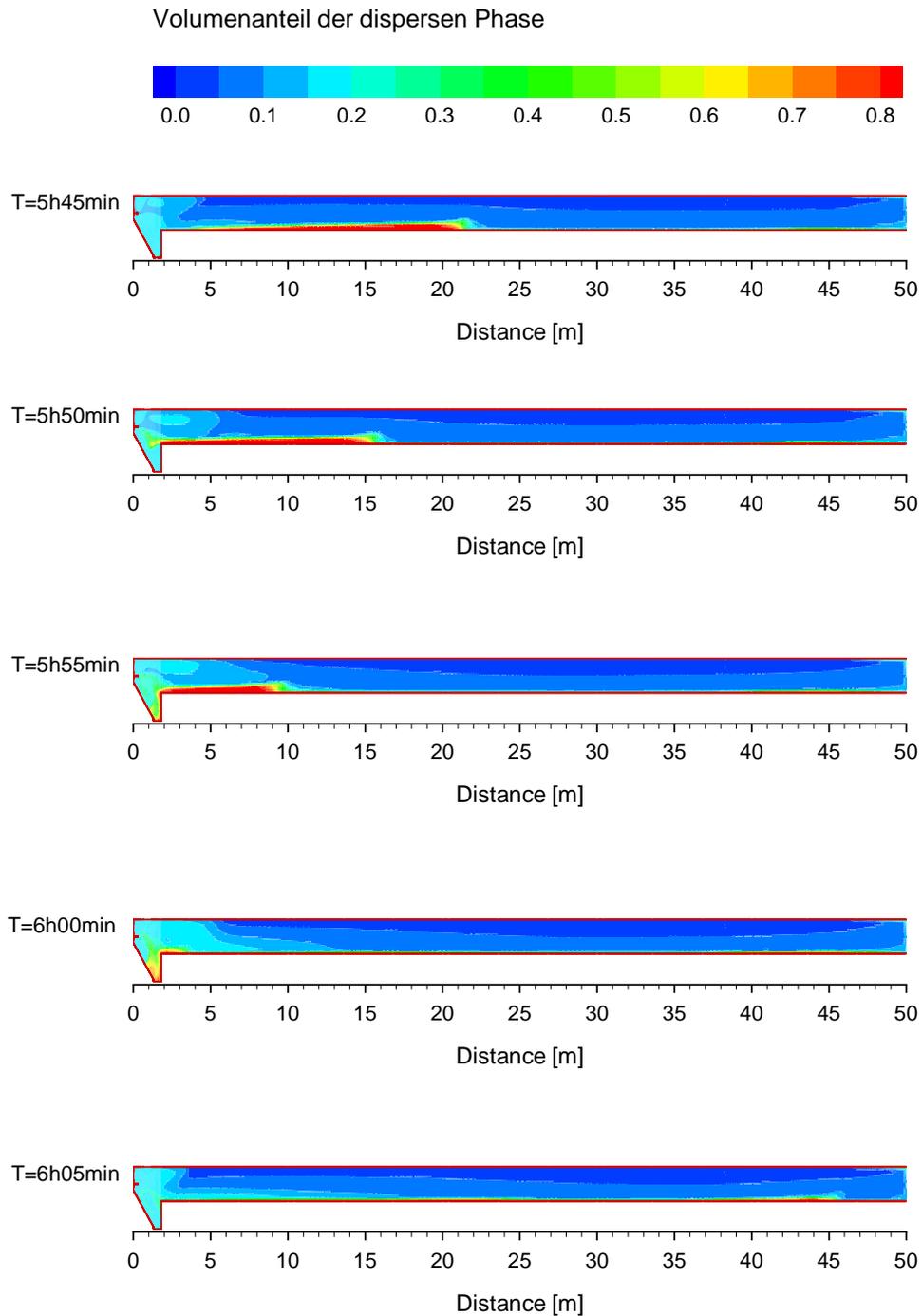


Abbildung 6.6: Zeitliche Entwicklung des Anteils der dispersen Phase $\alpha_{d,max} = 0.80$, Rechenlauf KIERSPE1 (konstitutive Beziehungen für nicht kohäsive Partikel) - mehrphasiges Modell

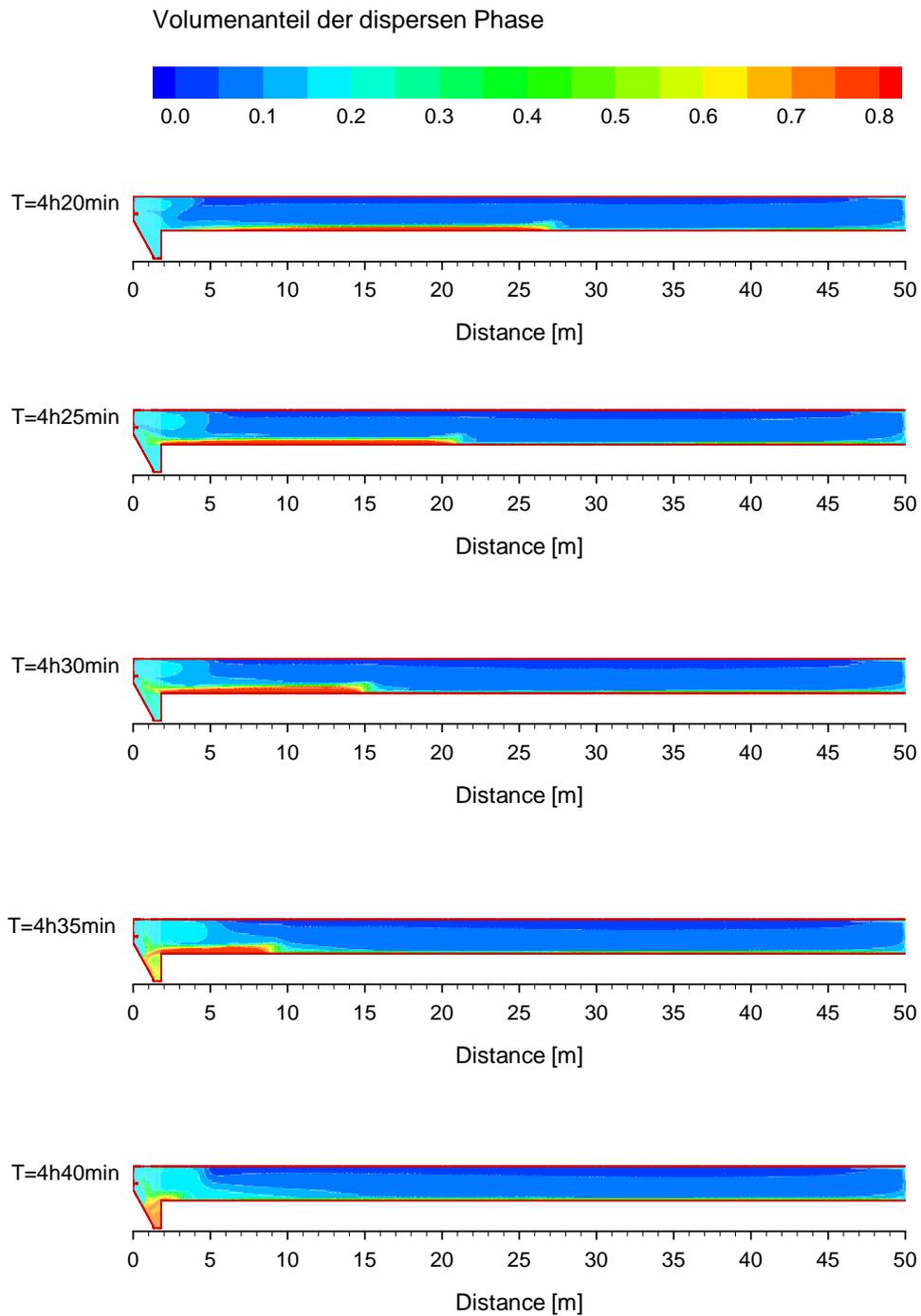


Abbildung 6.7: Zeitliche Entwicklung des Anteils der dispersen Phase $\alpha_{d,max} = 0.80$, Rechenlauf KIERSPE2 (konstitutive Beziehungen für kohäsive Partikel) - mehrphasiges Modell

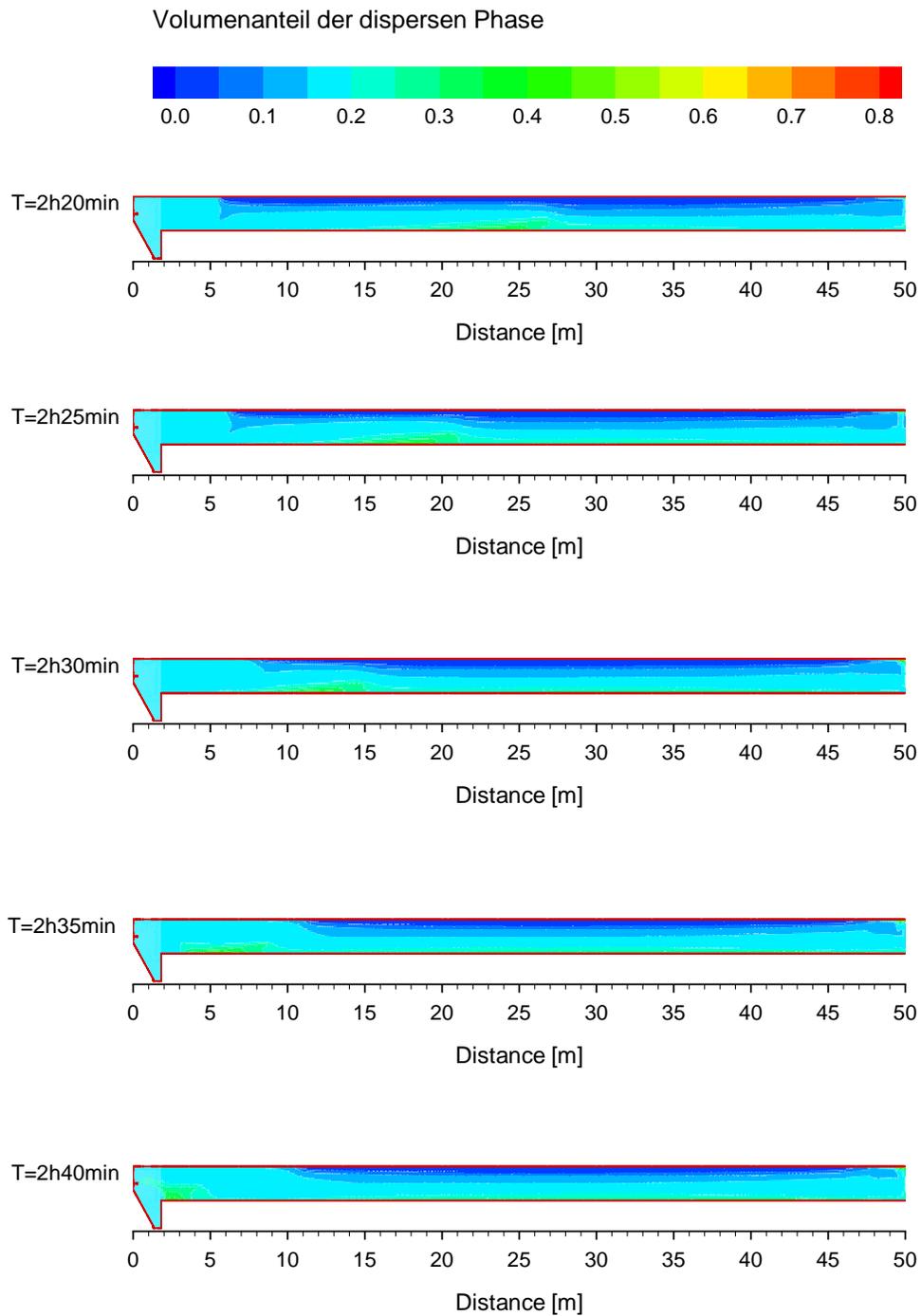


Abbildung 6.8: Zeitliche Entwicklung des Anteils der dispersen Phase $\alpha_{d,max} = 0.65$, Rechenlauf KIERSPE2 (konstitutive Beziehungen für kohäsive Partikel) - mehrphasiges Modell

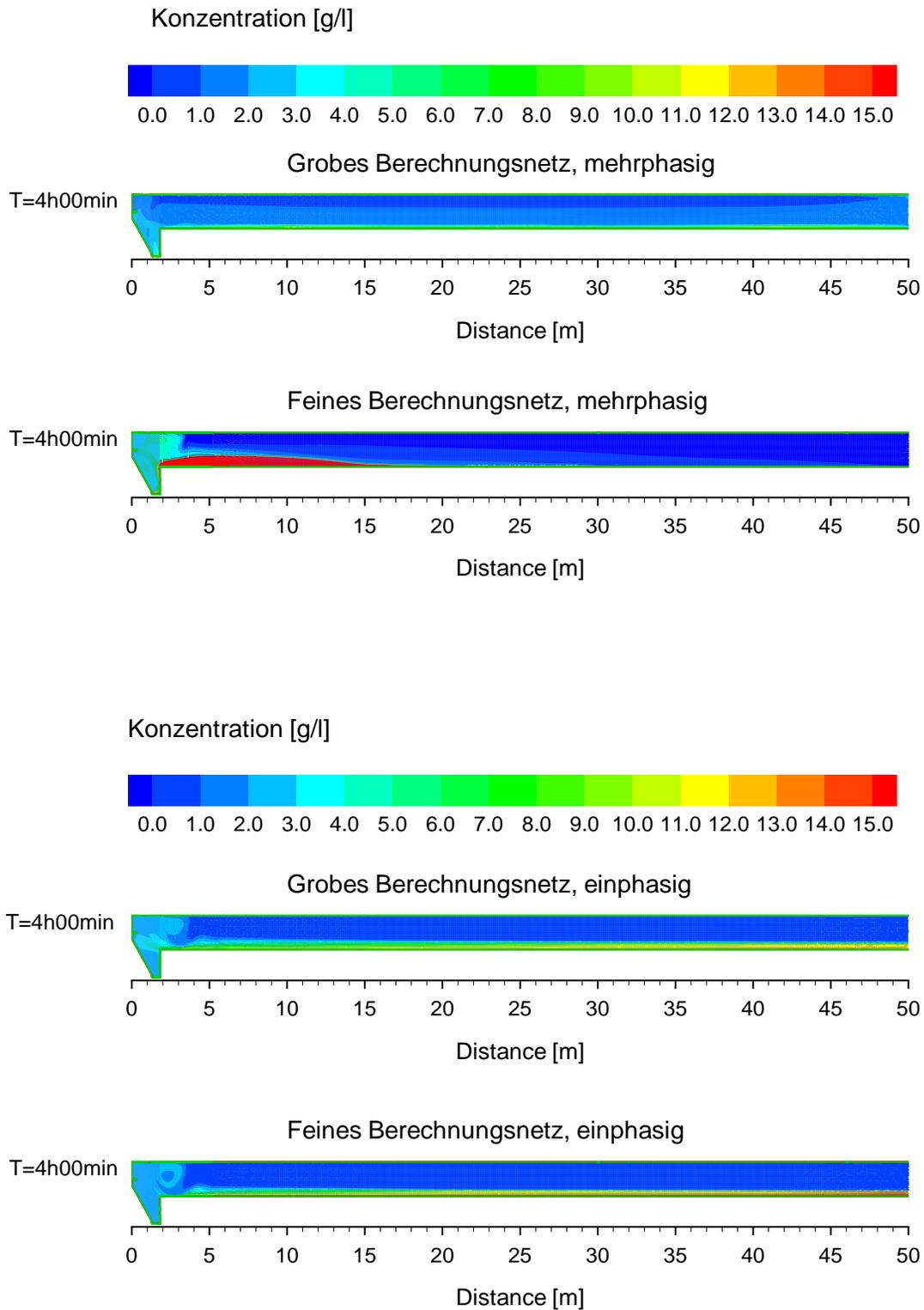


Abbildung 6.9: Synoptische Darstellung der Konzentration für alle Modellvarianten nach 4 Stunden Simulationszeit. Oben sind die Ergebnisse des mehrphasigen und unten die des einphasigen Modells jeweils für zwei verschiedene Berechnungnetze dargestellt.

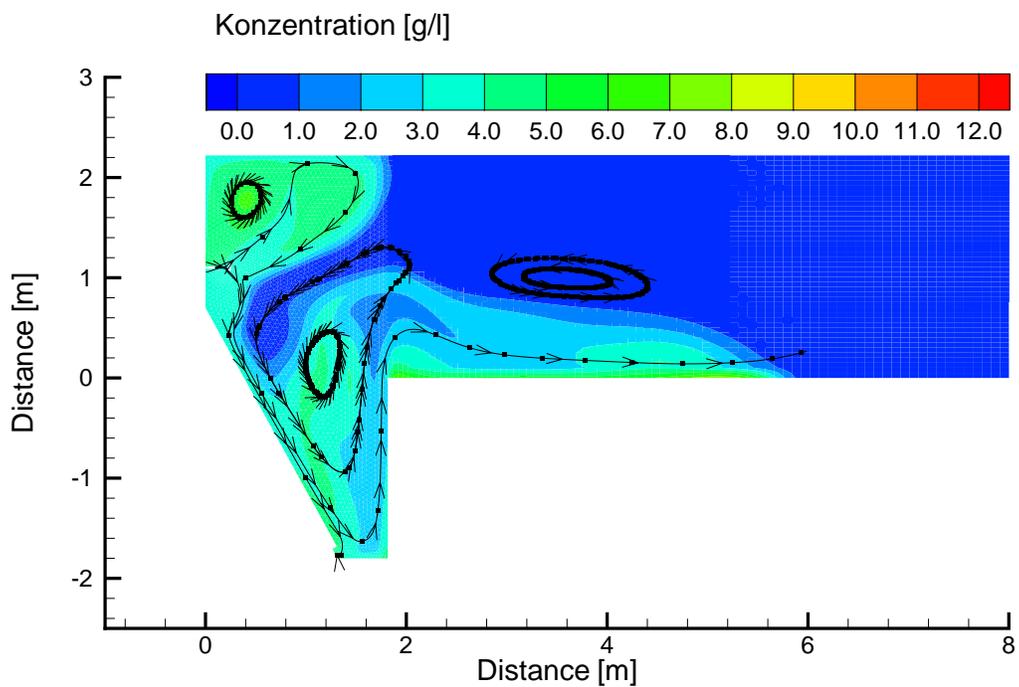
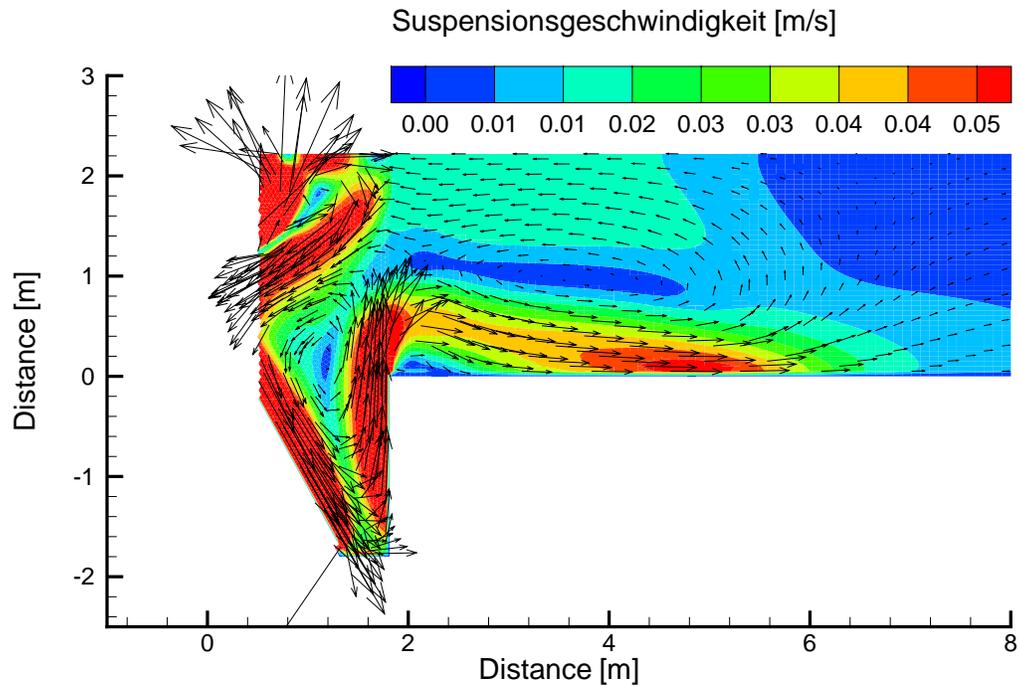


Abbildung 6.10: Mehrphasiges Modell, feines Berechnungsnetz, 15 Minuten simulierte Zeit. Oben: Suspensionsgeschwindigkeit. Unten: Konzentrationsverteilung, überlagert mit Stromlinien.

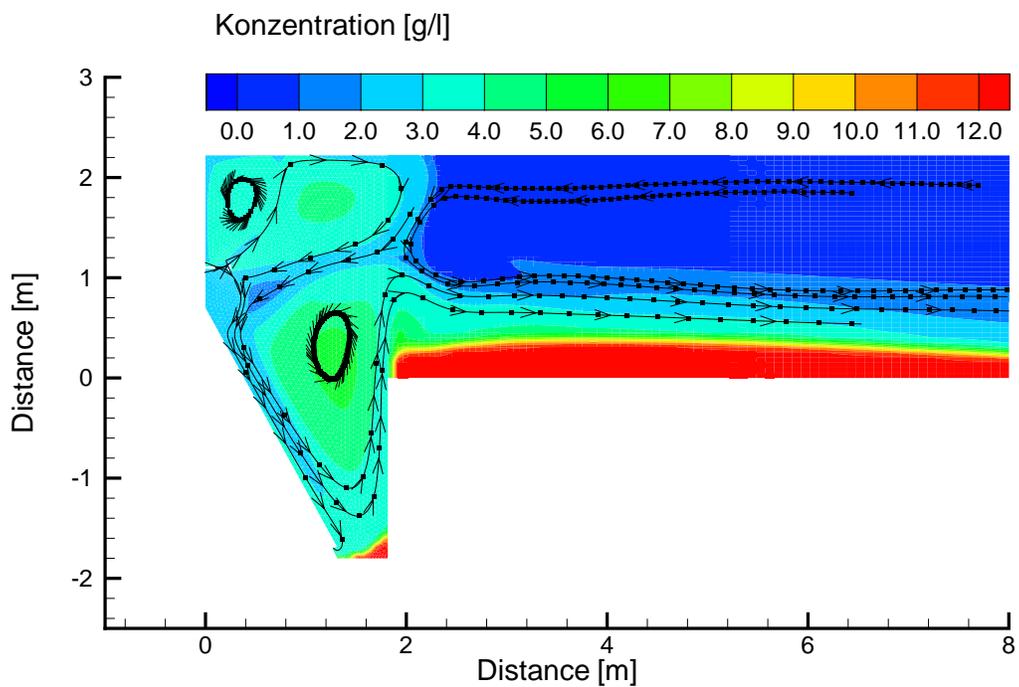
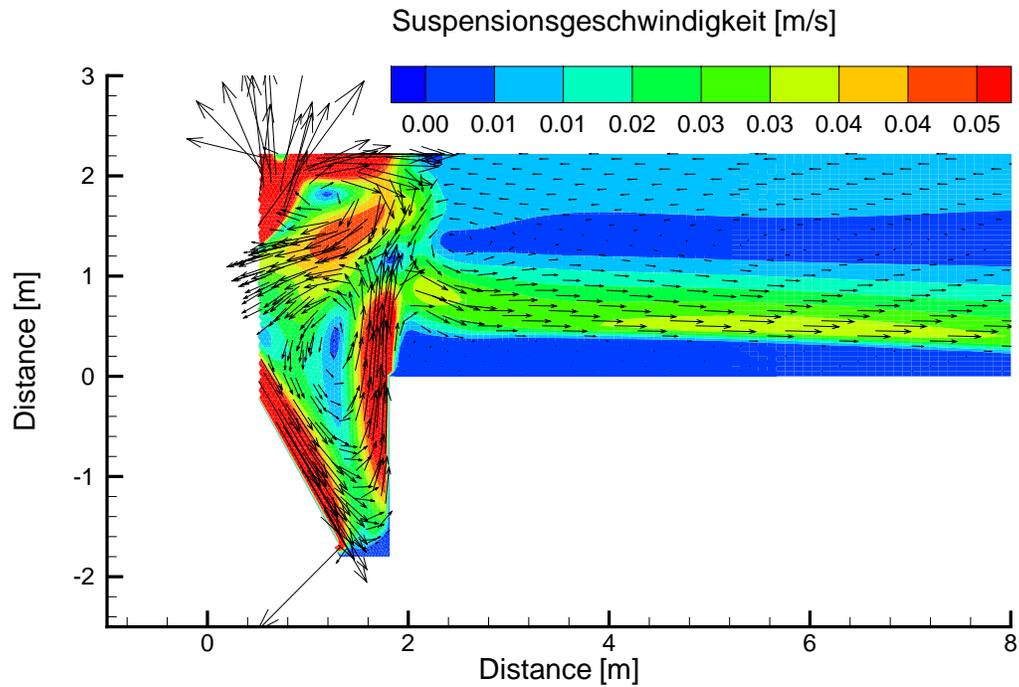


Abbildung 6.11: Mehrphasiges Modell, feines Berechnungsnetz, 1 Stunde simulierte Zeit. Oben: Suspensionsgeschwindigkeit. Unten: Konzentrationsverteilung, überlagert mit Stromlinien.

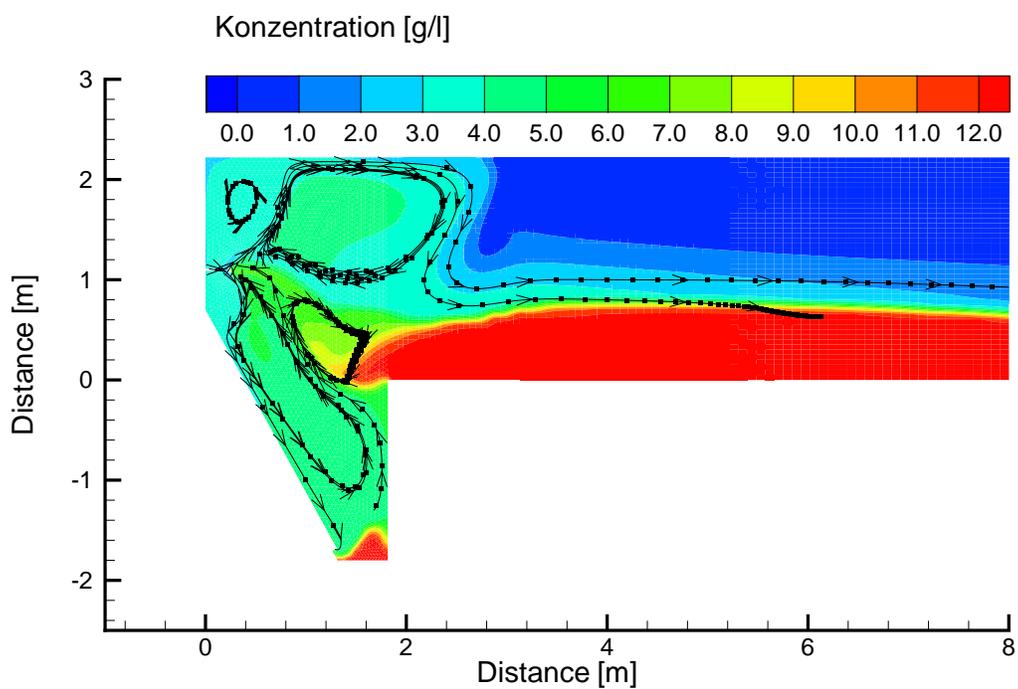
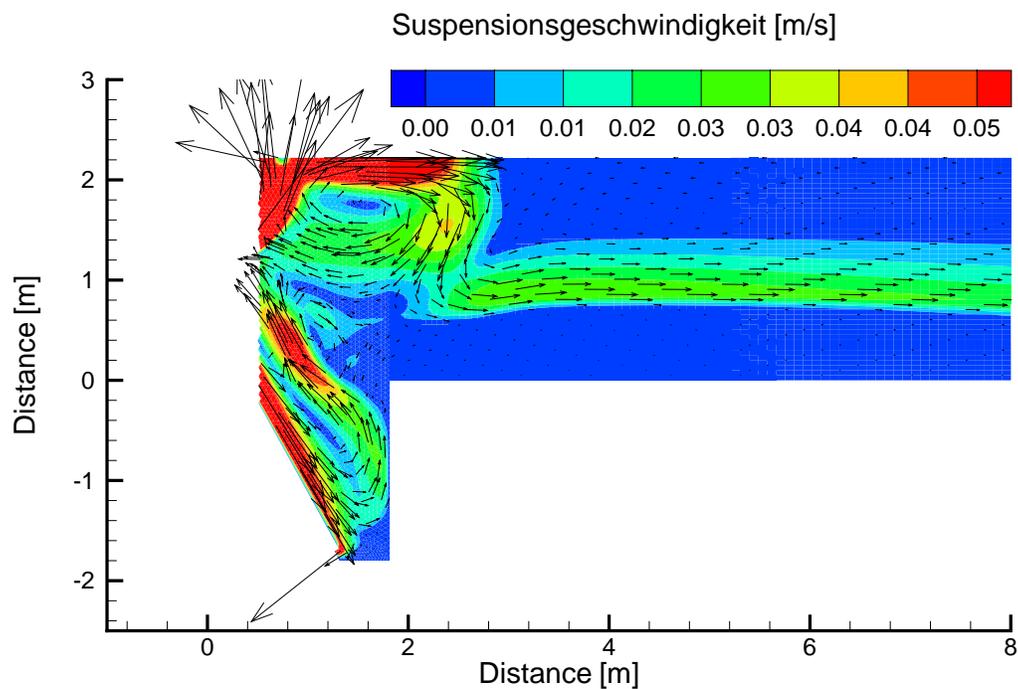


Abbildung 6.12: Mehrphasiges Modell, feines Berechnungsnetz, 2,5 Stunden simulierte Zeit. Oben: Suspensionsgeschwindigkeit. Unten: Konzentrationsverteilung, überlagert mit Stromlinien.

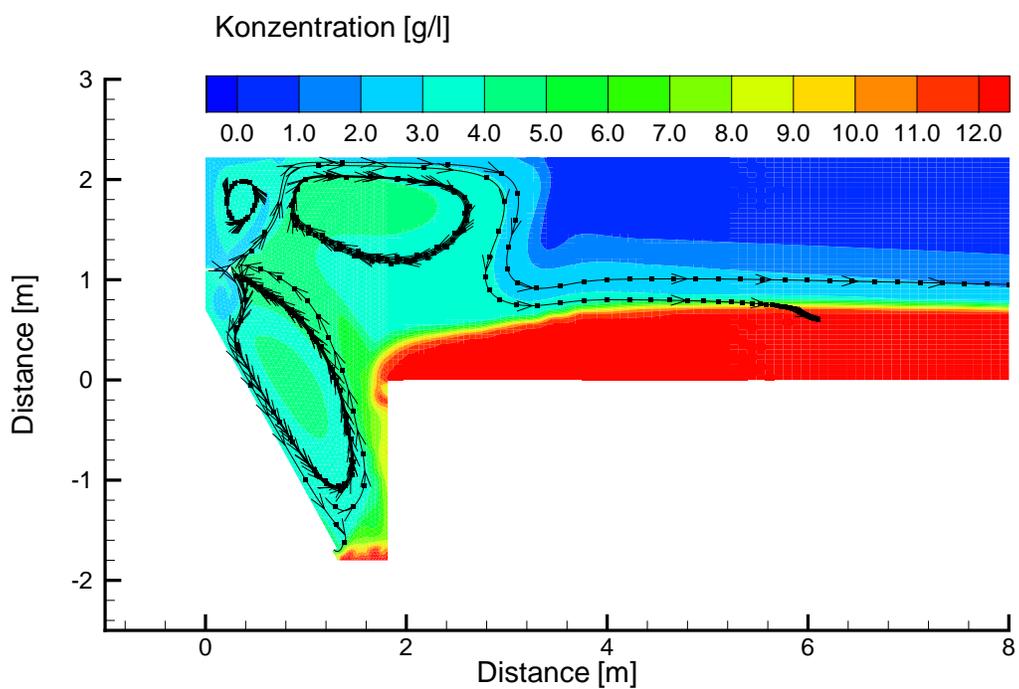
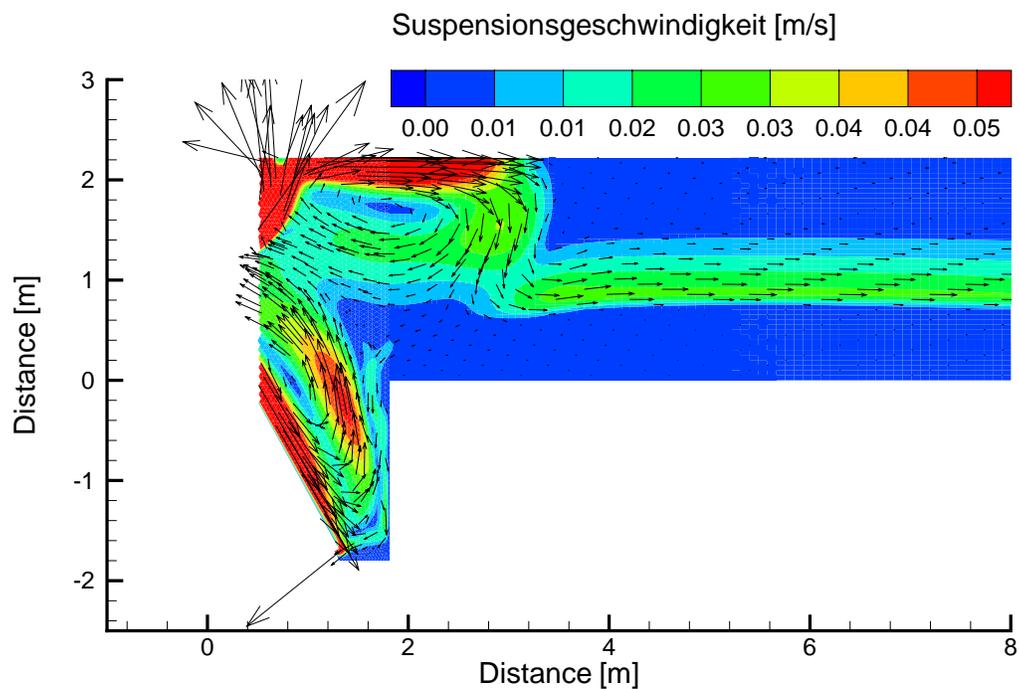


Abbildung 6.13: Mehrphasiges Modell, feines Berechnungsnetz, 4 Stunden simulierte Zeit. Oben: Suspensionsgeschwindigkeit. Unten: Konzentrationsverteilung, überlagert mit Stromlinien.

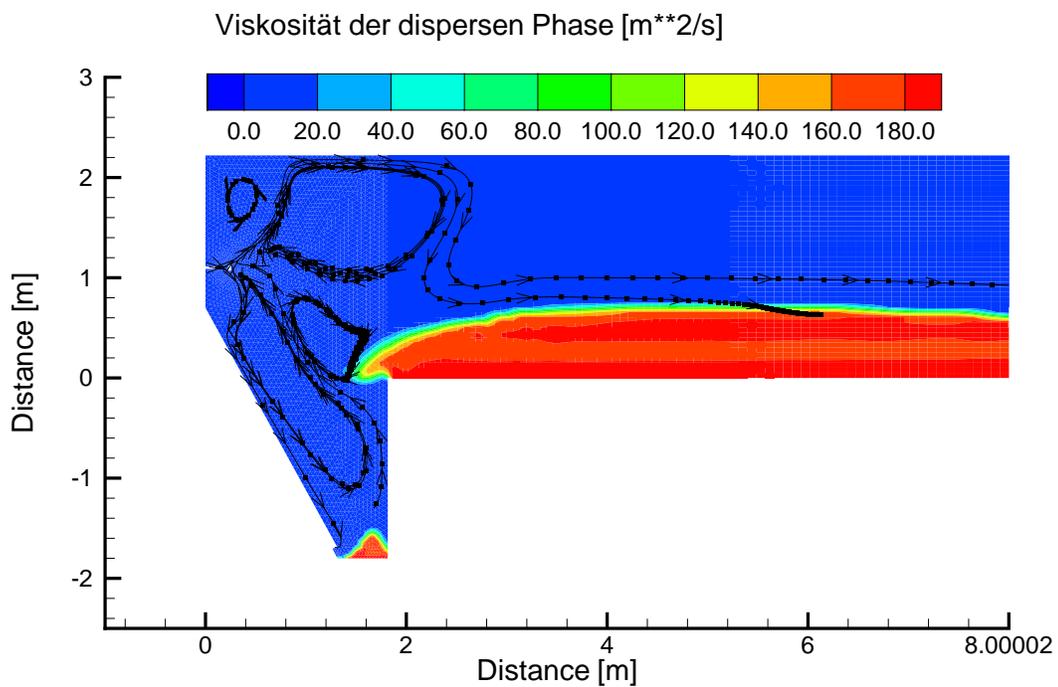
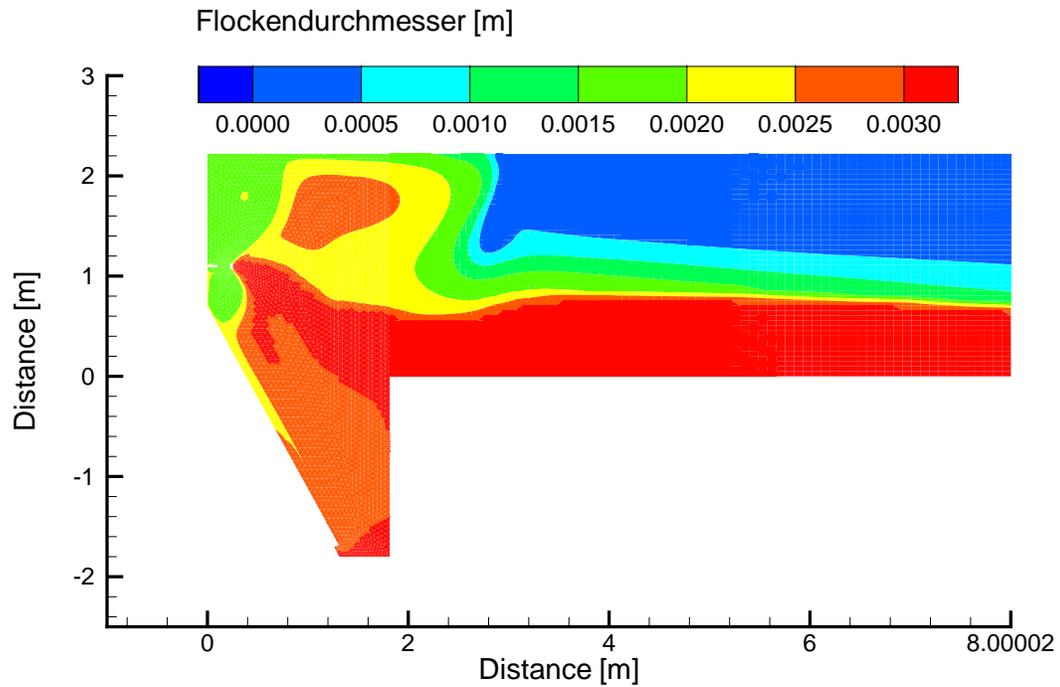


Abbildung 6.14: Mehrphasiges Modell, feines Berechnungsnetz, 2,5 Stunden simulierte Zeit. Oben: Flockendurchmesser. Unten: Viskosität der dispersen Phase, überlagert mit Stromlinien.

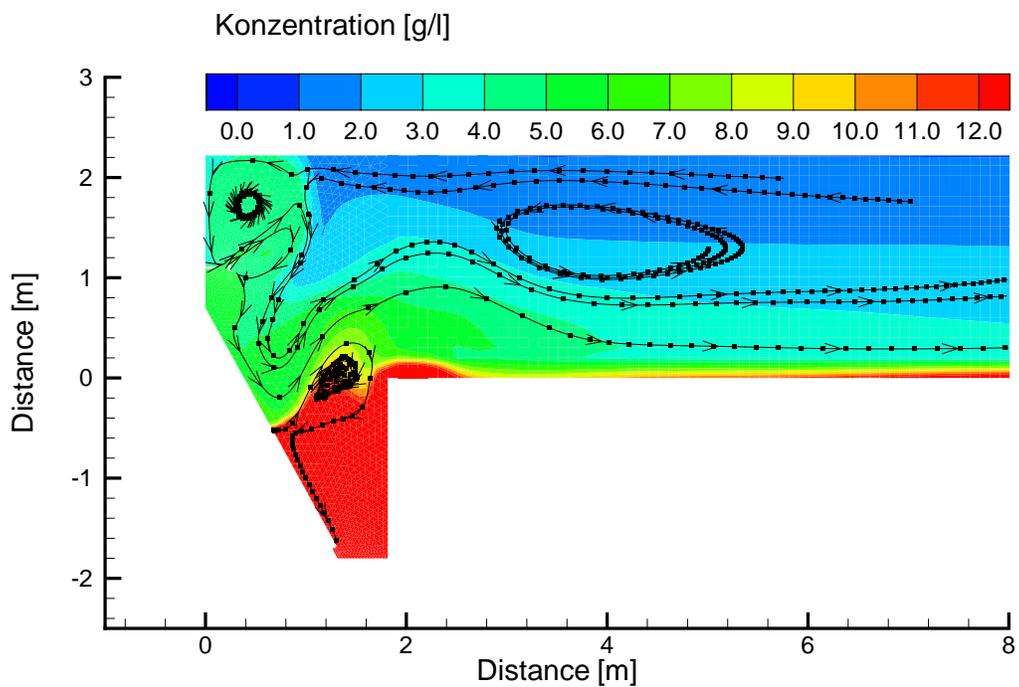
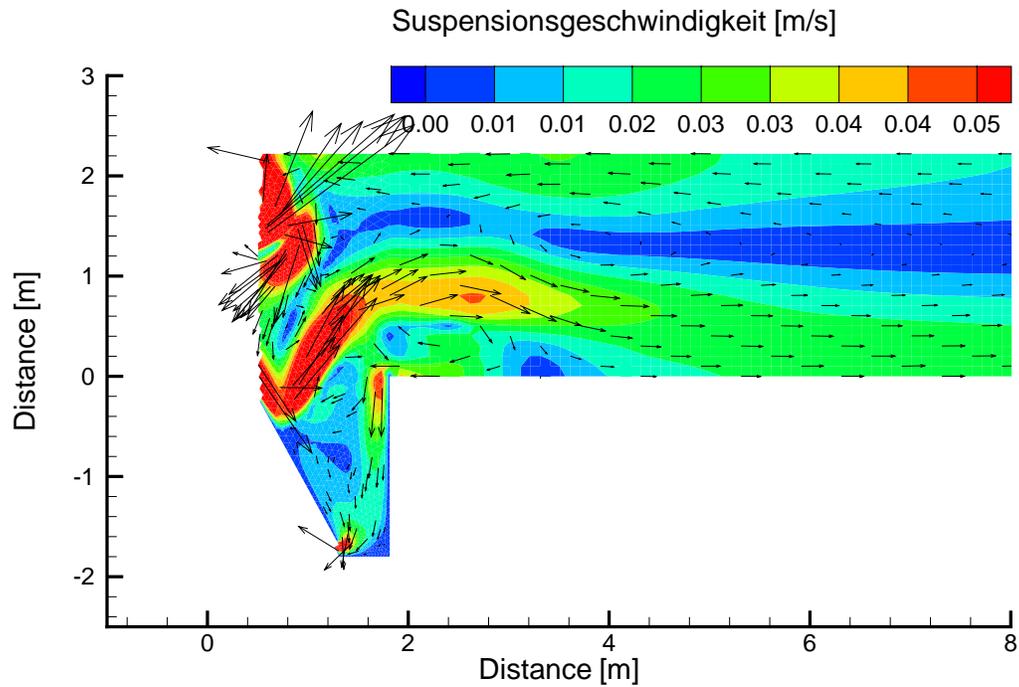


Abbildung 6.15: Mehrphasiges Modell, grobes Berechnungsnetz, 2 Stunden simulierte Zeit. Oben: Suspensionsgeschwindigkeit. Unten: Konzentrationsverteilung, überlagert mit Stromlinien.

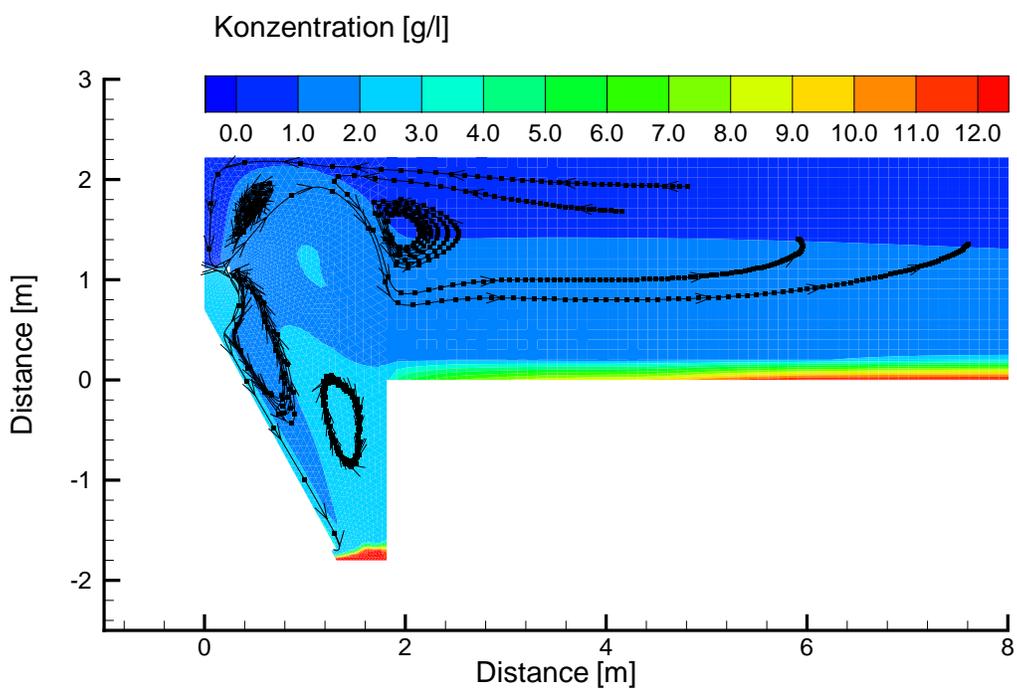
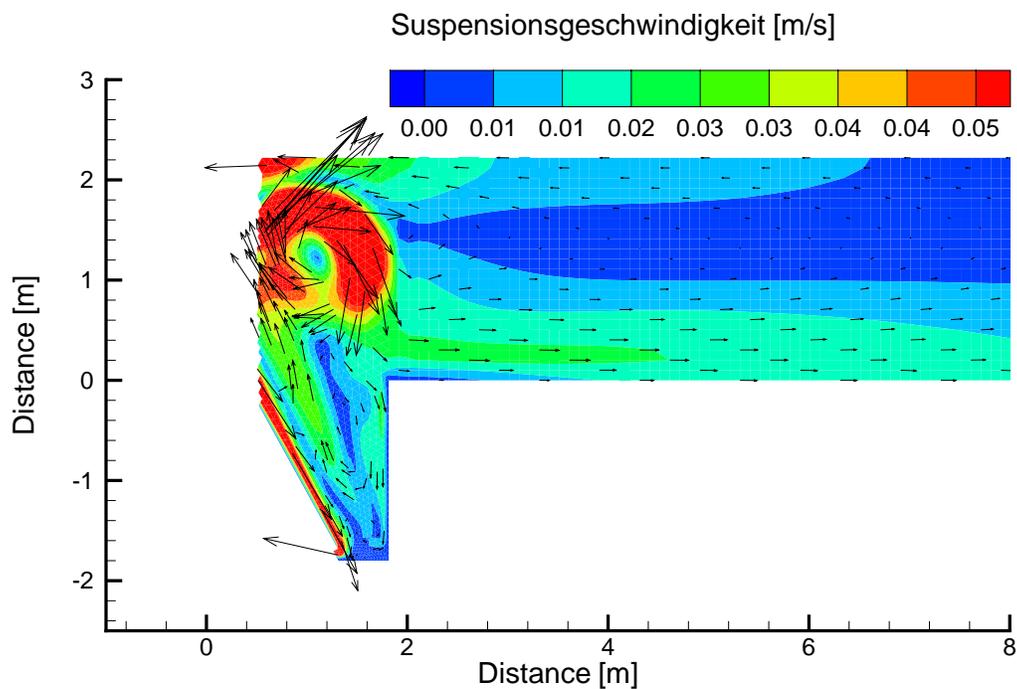


Abbildung 6.16: Mehrphasiges Modell, grobes Berechnungsnetz, 3 Stunden simulierte Zeit. Oben: Suspensionsgeschwindigkeit. Unten: Konzentrationsverteilung, überlagert mit Stromlinien.

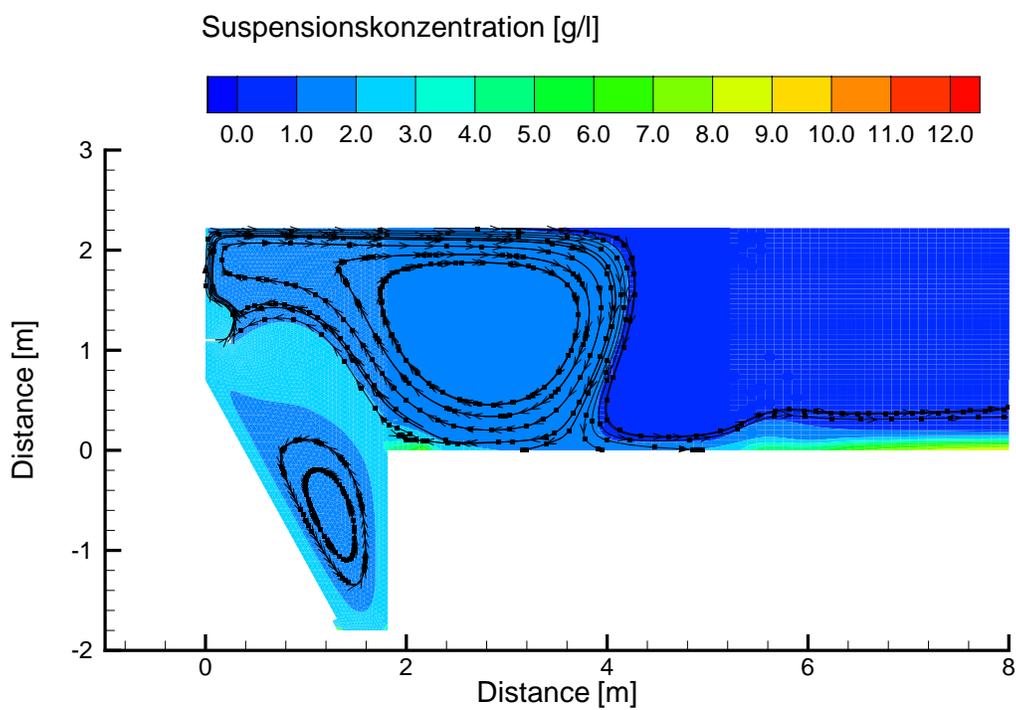
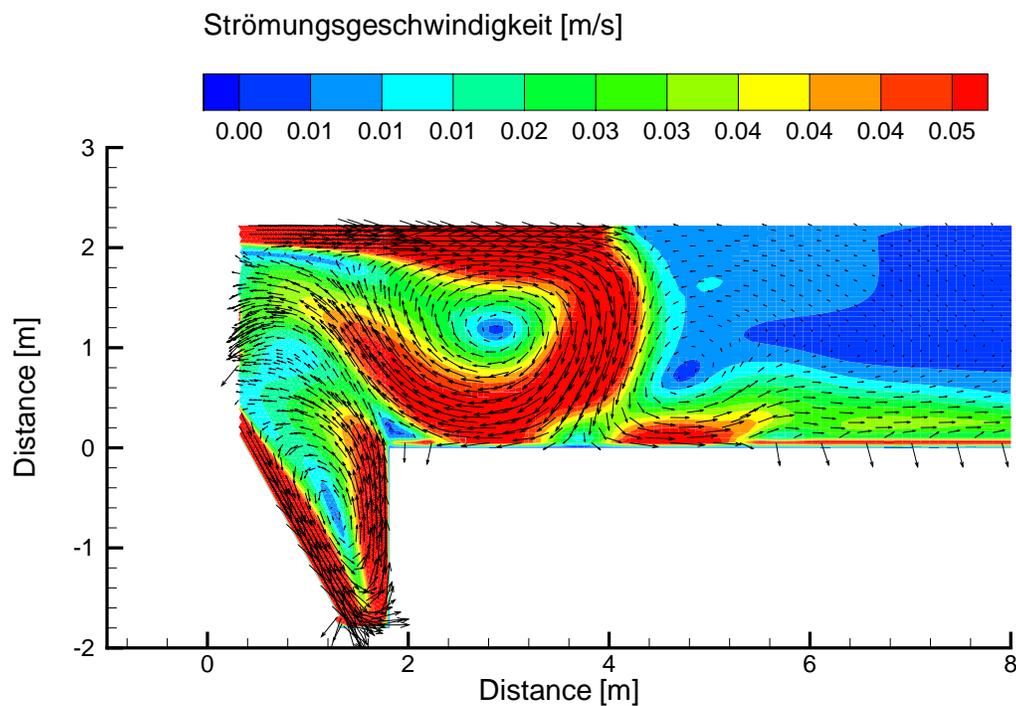


Abbildung 6.17: Einphasiges Modell, feines Berechnungsnetz, 15 Minuten simulierte Zeit. Oben: Strömungsgeschwindigkeit. Unten: Konzentrationsverteilung, überlagert mit Stromlinien.

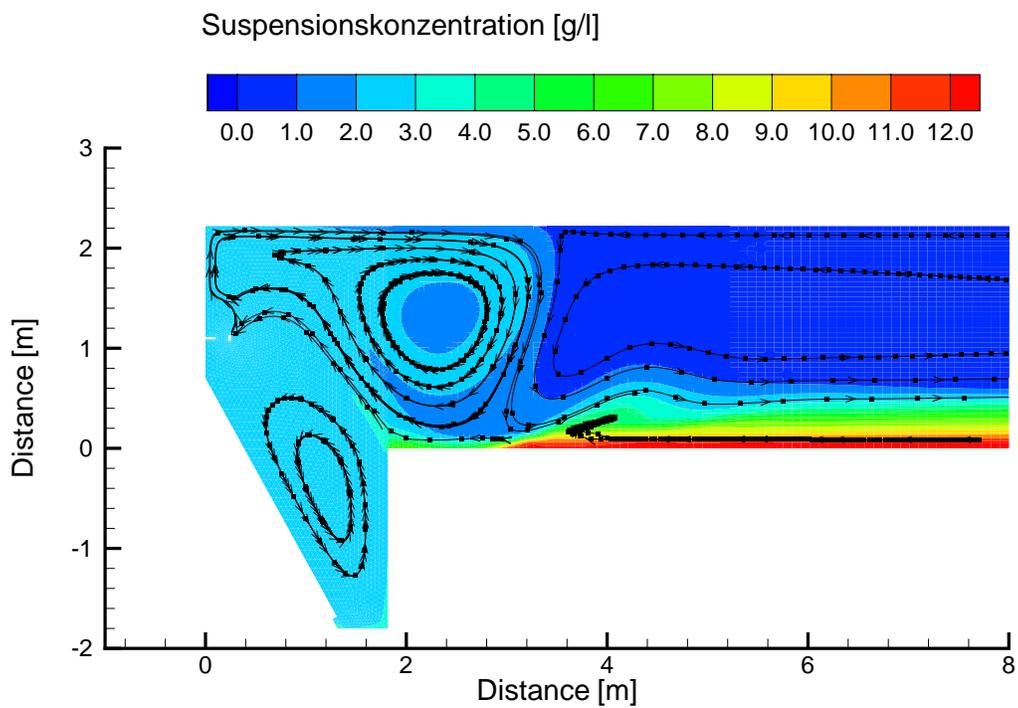
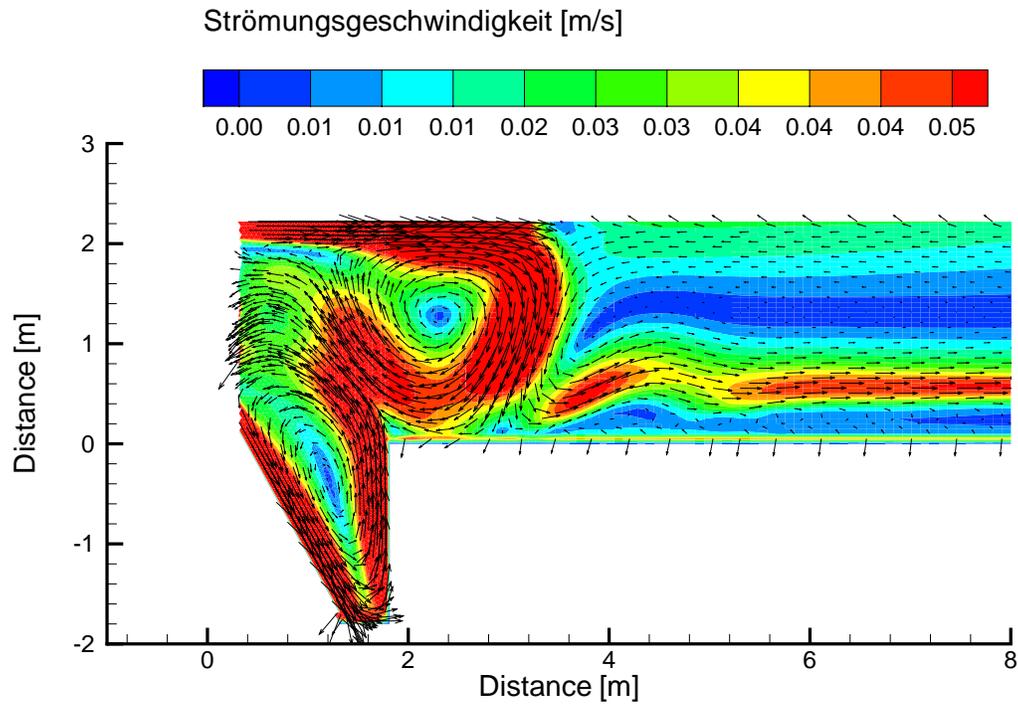


Abbildung 6.18: Einphasiges Modell, feines Berechnungsnetz, 4 Stunden simulierte Zeit. Oben: Strömungsgeschwindigkeit. Unten: Konzentrationsverteilung, überlagert mit Stromlinien.

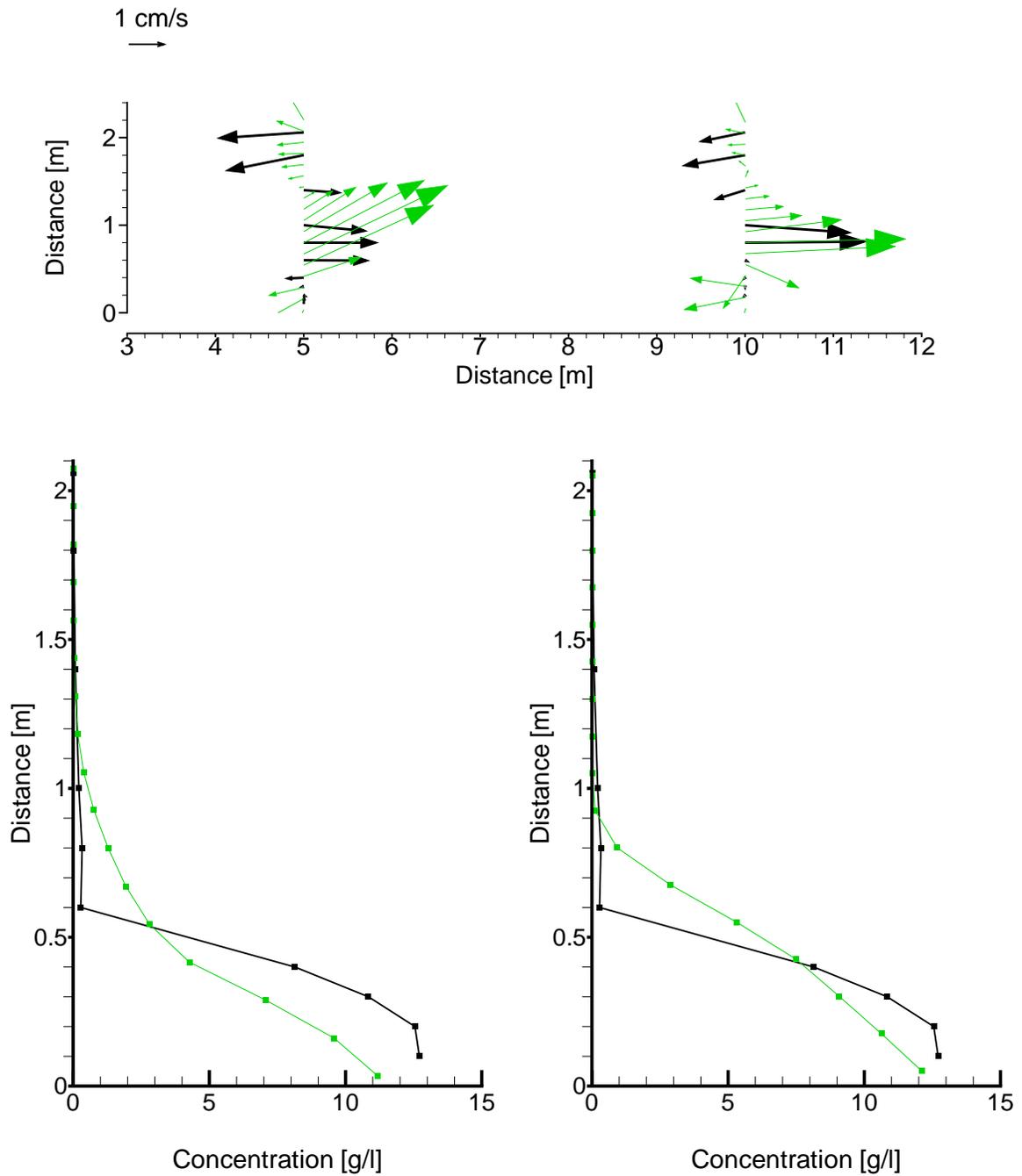


Abbildung 6.19: Einphasiges Modell, grobes Berechnungsnetz. Oben: Gegenüberstellung von gemessenen (schwarz) und berechneten Strömungsgeschwindigkeiten (grün). Unten: Gegenüberstellung von gemessenen (schwarz) und berechneten Konzentrationen (grün).

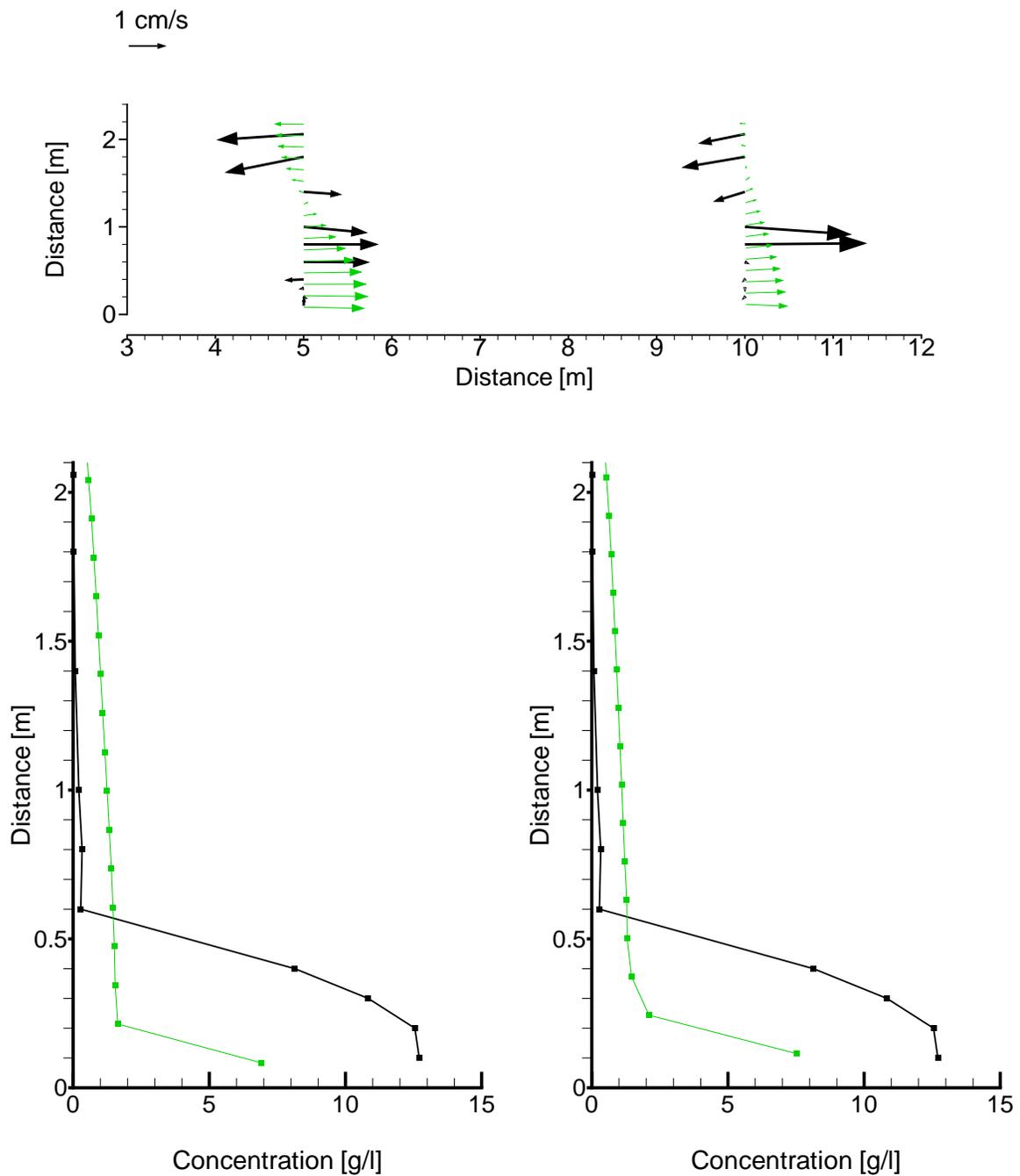


Abbildung 6.20: Mehrphasiges Modell, grobes Berechnungsnetz. Oben: Gegenüberstellung von gemessenen (schwarz) und berechneten Strömungsgeschwindigkeiten (grün). Unten: Gegenüberstellung von gemessenen (schwarz) und berechneten Konzentrationen (grün).

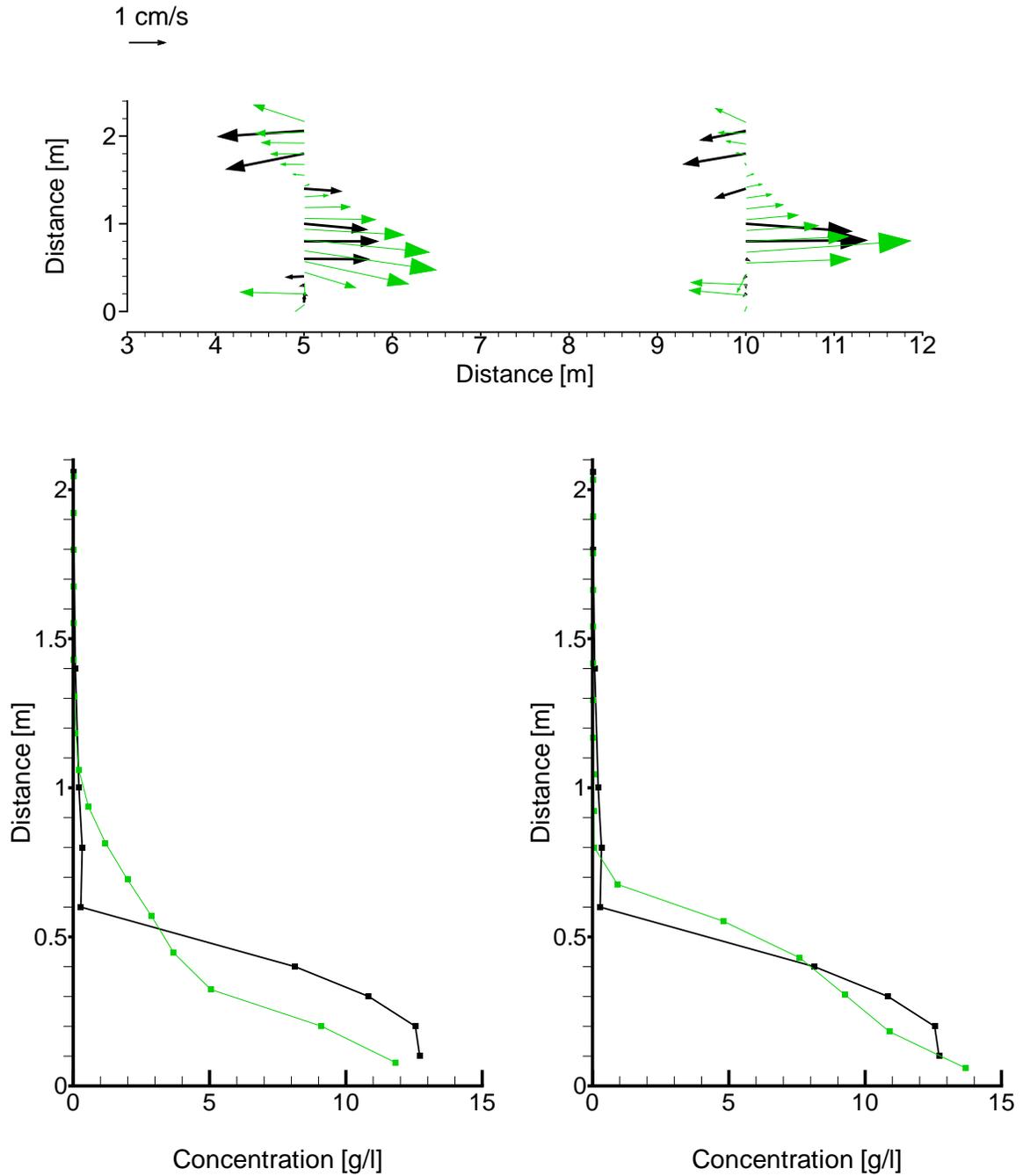


Abbildung 6.21: Einphasiges Modell, feines Berechnungsnetz. Oben: Gegenüberstellung von gemessenen (schwarz) und berechneten Strömungsgeschwindigkeiten (grün). Unten: Gegenüberstellung von gemessenen (schwarz) und berechneten Konzentrationen (grün).

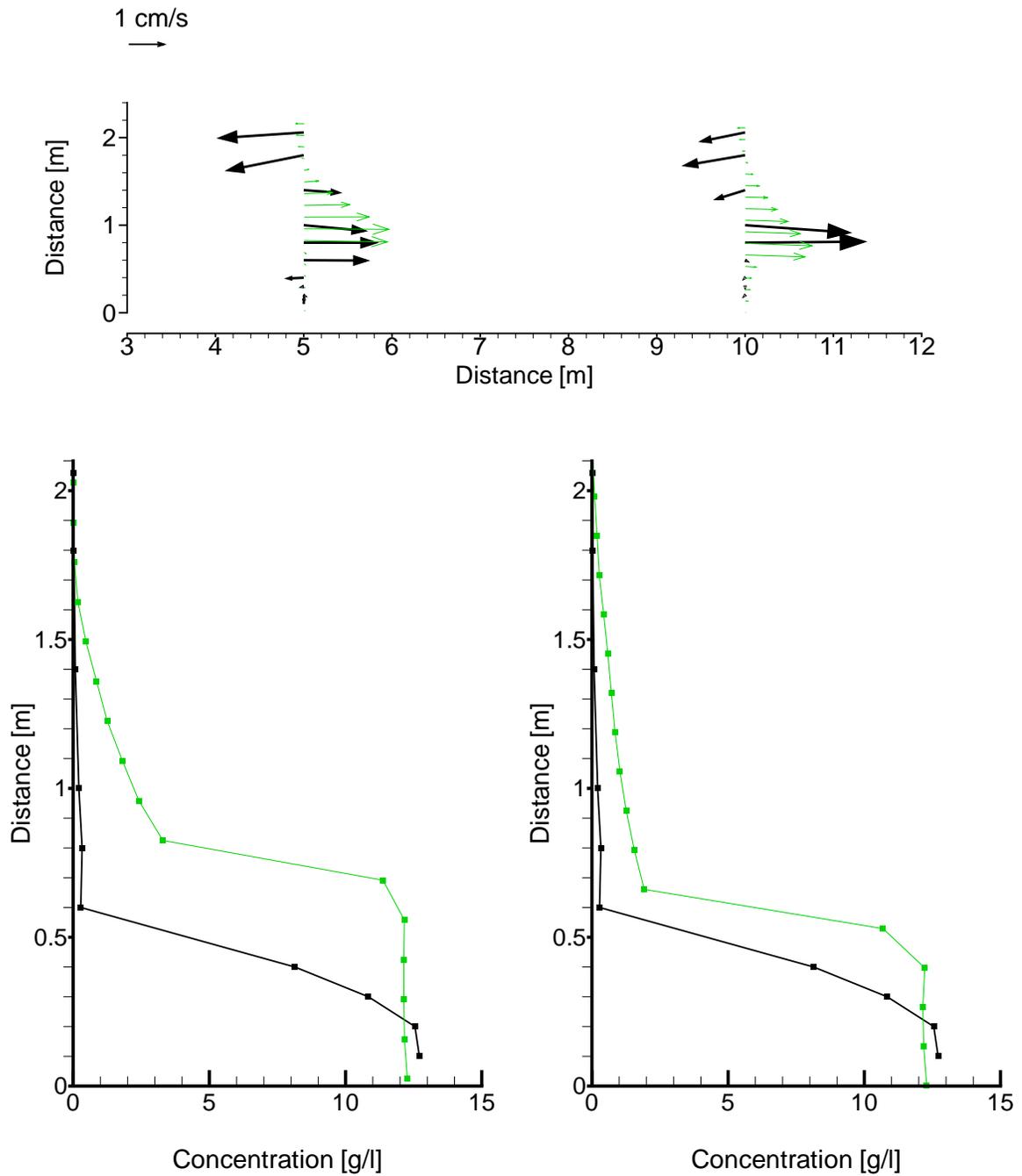


Abbildung 6.22: Mehrphasiges Modell, feines Berechnungsnetz. Oben: Gegenüberstellung von gemessenen (schwarz) und berechneten Strömungsgeschwindigkeiten (grün). Unten: Gegenüberstellung von gemessenen (schwarz) und berechneten Konzentrationen (grün).

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

Das Ziel dieser Arbeit ist die Modellierung des Partikeltransports in allgemeiner Form als Mehrphasenströmung polydisperser Suspensionen. Der Schwerpunkt der Anwendungen liegt dabei auf Problemstellungen aus dem Bereich der Siedlungswasserwirtschaft wie der Modellierung der Suspension in einer Absetzsäule oder in einem Nachklärbecken.

Nach einer einführenden Skizze zur Funktionsweise eines Nachklärbeckens und einer abschließenden Charakterisierung verschiedener Bereiche hinsichtlich Funktion, Fließverhalten und Absetzregime werden die verfahrenstechnisch bedeutsamen physikalischen Prozesse und Ursachen herausgearbeitet. Eine interdisziplinäre Darstellung des Standes der Wissenschaft zum Thema Flokkulation zeigt, dass die auf der mikroskopischen Ebene ablaufenden vorwiegend biochemischen Prozesse bisher nur in Ansätzen bekannt sind. Sie können daher in einem makroskopischen Modell nur in ihrer physikalischen Wirkung abgebildet werden. Ein Überblick über die für die numerische Modellierung relevanten Modelle der Flockendynamik wird gegeben.

Im Kapitel 3 wird basierend auf diesen Erkenntnissen nach einer Darstellung der grundsätzlichen Modellvorstellung die Entscheidung für den Modelltyp und die Phasenanzahl getroffen. Gewählt wird ein granulares Euler-Modell mit einer kontinuierlichen und einer granularen Phase. Die zugehörigen Erhaltungsgleichungen werden hergeleitet und das entstehende Schließungsproblem dargestellt. Eine Analyse der Turbulenzstruktur bei Anwesenheit von Partikeln und der abschließenden Benennung von Kenngrößen für die Art der turbulenten Wechselwirkungen zeigt, dass bei mehrphasiger Modellierung im Hinblick auf die Prozesse in einem Nachklärbecken ein Turbulenzmodell für jede Phase erforderlich ist.

Eine problemangepasste Bestimmung der konstitutiven Beziehungen zur Lösung des Schließungsproblems erfolgt in Kapitel 4. Durch konstitutive Beziehungen wird den speziellen Eigenschaften beider Phasen Rechnung getragen. Für die Entstehung von Spannungen in der dispersen Phase werden Ansätze aus der Gasdynamik und Festkörpermechanik verwendet, die das Scher- und Kompressionsverhalten von der Wasseroberfläche bis zum Boden charakterisieren und die Ausbildung des Strömungsfeldes und des Schlammspiegels beeinflussen. Für die Abbildung der Prozesse im Nachklärbecken wird ein bingham-plastischer Ansatz für fraktale Flocken entwickelt. Zur Berücksichtigung des sich ändernden Partikeldurchmessers wird ein Modell der Flockendynamik für ein mehr-

phasiges System auf Basis der Transportgleichung für die Partikelanzahl entwickelt, das über den Partikeldurchmesser an das eigentliche Strömungsmodell gekoppelt wird. Vom Flokkulationsmodell wird ein konstanter mittlerer Partikeldurchmesser pro Element berechnet, d.h. es liefert eine quasi-kontinuierliche Partikelgrößenverteilung. Die numerische Umsetzung des Modells erfolgt auf der Basis des Programmsystems FLUENT [17].

In Kapitel 5 wird das entstandene Modell auf zwei akademische Testfälle, das Konzentrationsprofil in einer uniformen stationären homogenen Kanalströmung und auf eine Absetzsäule, angewendet. Für das Konzentrationsprofil werden zwei analytische Lösungen und deren Gültigkeitsgrenzen vorgestellt und durch einen Vergleich mit Messdaten aufgezeigt. Das mehrphasige Modell kennt diese Gültigkeitsgrenzen nicht, was der Vergleich mit den Messwerten belegt. Die Auswirkungen von Partikelträgheit und Partikel-Partikel-Interaktionen auf die Konzentrationsverteilung in der Wassersäule werden abgebildet. Die Allgemeingültigkeit des Modells und sein Anwendungsbereich für Gerinne-strömungen wird so nachgewiesen.

Die Absetzsäule stellt einen alltäglichen Versuch aus der Siedlungswasserwirtschaft dar, der zur Charakterisierung der Schlammabsetzeigenschaften eingesetzt wird. Die Physik des Systems wird vom Verhalten der dispersen Phase diktiert, die infolge des Dichteunterschieds absinkt und Strömung auch in der kontinuierlichen Phase initiiert. Anhand dieses Versuches wird das entwickelte mehrphasige Modell einschließlich des Flokkulationsmodells phänomenologisch verifiziert und hinsichtlich der Parametersensitivität analysiert. Das Modell bildet das Strömungsgeschehen, die Flockendynamik und deren Wechselwirkungen ab. Durch Änderung der Effizienzparameter und der Flockenbindungskraft im Modell der Flockendynamik können unterschiedliche Absetzregime modelliert werden. Es wird jedoch deutlich, dass Messdaten zur Validierung des Modells der Flockendynamik unbedingt erforderlich sind.

Die Simulation des Partikeltransportes in einem realen Nachklärbecken mit dem entwickelten Modell erfolgt in Kapitel 6. Das Modell wird anhand von In-situ Messwerten validiert. Dabei wird deutlich, dass die üblicherweise gemessenen Größen Suspensionsgeschwindigkeit und TS-Gehalt zur Validierung eines mehrphasigen Modells nur eingeschränkt geeignet sind. Ferner zeigt sich eine starke Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von der Diskretisierung des Modellgebietes. Durch einen Vergleich der mehrphasigen Ergebnisse mit denen eines einphasigen Modells erfolgt die Bewertung und Einordnung des mehrphasigen Modells.

Die Anwendungskapitel 5 und 6 zeigen, dass ein vollständiges mehrphasiges Modell keinen Einschränkungen im Anwendungsbereich hinsichtlich Partikelträgheit und Partikel-lagerungsdichte unterliegt und eine durchgängige Beschreibung der Physik ohne prozessorientierte Teilmodelle gelingt. Besonderes Augenmerk muss dabei aber auf die räumliche Auflösung des Untersuchungsgebietes gelegt werden, da sich das Mehrphasenmodell sehr sensitiv gegenüber zu groben Diskretisierungen zeigt. Die Qualitäten des mehrphasigen Modells treten dabei besonders hervor, wenn Strömungen durch Partikelbewegungen infolge der Gravitation initiiert werden. Die direkte Modellierung des Impulsaustausches an den Grenzflächen führt zur Entstehung von Strömungen in der kontinuierlichen Phase allein durch die Partikelbewegungen. Über den Impulsaustausch an den Grenzflächen wird die Relativgeschwindigkeit beider Phasen modelliert. Die einphasigen Modelle sind

in diesem Fall nur auf bestimmte Problemstellungen anwendbar, z.B. auf die Validierung des Sinkgeschwindigkeitsansatzes, da Partikelbewegung und Impulserhaltung nur indirekt über die Dichteterme gekoppelt sind. Darüberhinaus entfällt bei einem mehrphasigen Modell durch die Modellierung der Grenzflächenkräfte die Validierung des Sinkgeschwindigkeitsansatzes anhand von Messdaten. Voraussagen des Partikelverhaltens sind dadurch möglich.

Durch die Abbildung kohäsiver Partikeleigenschaften über ein in das Strömungsmodell integriertes Flokkulationsmodell und spezielle Viskositätsansätze für die disperse Phase kann prinzipiell auch das Verhalten kohäsiver Partikel abgebildet werden. Partikelgrößenverteilungen und Änderungen des Scher- und Kompressionsverhaltens werden modelliert. Sich ändernde Absatzregime werden zur Zeit über die Parameter des Flokkulationsmodell erreicht. Die Änderung des Partikeldurchmessers infolge der Flockendynamik hat über die sich ändernden Grenzflächenkräfte und Spannungen innerhalb einer Phase direkte Auswirkungen auf die Ausbildung des Strömungsfeldes.

Den genannten Vorteilen stehen die längeren Rechenzeiten (ca. Faktor 3-4) eines mehrphasigen Modells im Vergleich zu einem einphasigen Modell gegenüber. Auch können die Messdaten, die für die Bestimmung der Randwerte und zur Validierung eines mehrphasigen Modells gebraucht werden, nur mit deutlich größerem Aufwand gewonnen werden. Eine Charakterisierung des Verhaltens jeder Phase ist notwendig. Die für die einphasige Modellierung ausreichende Bestimmung des mittleren Suspensionsverhaltens ist nicht geeignet. Auch die Bestimmung der volumetrischen anstelle der Massenkonzentration ist aufwendiger. Für das Modell der Flockendynamik wäre außerdem die Bestimmung der Partikelgrößenverteilung erforderlich.

Die Vorteile eines mehrphasigen Modells liegen grundsätzlich in der direkten Modellierung der tatsächlich ablaufenden Prozesse des Partikeltransports begründet. Aufwendige Validierungen der konstitutiven Ansätze für jedes neue System anhand von Messdaten entfallen. Der Anwendungsbereich des mehrphasigen Modell ist daher in der Vorhersage des Suspensionsverhaltens und in der Modellierung von Systemen, in denen Strömungen durch Partikelbewegungen initiiert werden, zu sehen. Aus dem Bereich der Siedlungswasserwirtschaft sind hier z.B. belüftete Sandfänge und druckbelüftete Belebungsbecken zu nennen. Für praxisnahe Untersuchungen bieten sich hier vereinfachte Eulermodelle, z.B. das Mischungsmodell, an, wie Hunze und Schumacher, 2004 [29] zeigen. Für Systeme mit ausgeprägter Strömung in der kontinuierlichen Phase infolge äußerer Kräfte und ausreichenden Messdaten lohnt sich der Mehraufwand nur, wenn auf prozessorientierte Teilmodelle verzichtet und Partikel-Partikel-Interaktionen direkt abgebildet werden sollen.

Ein weiterer Anwendungsbereich des hier entwickelten mehrphasigen Modells sind Systeme, bei denen die Flockendynamik untersucht und Aussagen über die Partikelgrößenverteilung getroffen werden sollen. Hier ist z.B. die Auslegung von Flokkulationsreaktoren und die Fest-Flüssig-Trennung in Zentrifugen zu nennen.

Neue messtechnische Methoden und Untersuchungen erhöhen die Chancen, In-situ Messungen der Flockengrößen und Phasengeschwindigkeiten zu erhalten, mit denen das Modell validiert werden kann. Diese neuen Messmethoden ermöglichen vielleicht auch, Zusammenhänge zwischen üblicherweise auf Kläranlagen bestimmten Summenparametern,

wie CSB und BSB₅ und der Verfahrensführung zu den biochemischen Partikeleigenschaften herzustellen. Die Ableitung konstitutiver Beziehungen für die Wahrscheinlichkeiten von Koagulation und Flockenzerbrechen wäre dann denkbar.

Erheblicher Forschungsbedarf besteht in der Analyse und Modellierung des Scher- und Kompressionsverhaltens granularer kohäsiver Partikel. Hier sind die ablaufenden Prozesse und ihre Einflussfaktoren weitgehend unbekannt. Vielteilchenmodelle der Physik und physikalische Experimente könnten hier weiterhelfen.

Literaturverzeichnis

- [1] Abwassertechnische Vereinigung e.V., 1986. Lehr- und Handbuch der Abwassertechnik. Verlag für Architektur und technische Wissenschaften.
- [2] Abwassertechnische Vereinigung e.V., 1996. ATV-Handbuch Klärschlamm. Ernst & Sohn.
- [3] Andreadakis, A., 1993. Physical and chemical properties of activated sludge floc. *Water Research*, **27**(12), 1707–1714.
- [4] Baumer, P., and Winterthur, P., 1997. Strömungsverbesserungen bei rechteckigen, horizontal durchströmten Nachklärbecken. *Gas Wasser Abwasser*, **97**(12), 871–880.
- [5] Casey, T., 1992. Water and wastewater engineering hydraulics. Oxford University Press N.Y.
- [6] Chen, S., and Eisma, D., 1995. Fractal geometry of in situ flocs in the estuarine and coastal environments. *Netherlands Journal of Sea Research*, **32**(2), 173–182.
- [7] Clercq, B. d., 2003. Computational fluid dynamics of settling tanks: Development of experiments and rheological, settling and scraper submodels. PhD thesis, Universiteit Gent.
- [8] Clift, R., Grace, J., and Weber, M., 1978. Bubbles, Drops and Particles. Academic Press.
- [9] Crotogino, A., 1985. Ein Beitrag zur numerischen Modellierung des Sedimenttransports in Verbindung mit vertikal integrierten Strömungsmodellen. PhD thesis, Universität Hannover. Institut für Strömungsmechanik und ERiB; Bericht Nr.17/1985.
- [10] Crowe, C., Troutt, T., and Chung, J., 1996. Numerical models for two-phase turbulent flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, **28**, 11–43.
- [11] Csanady, G., 1963. Turbulent diffusion of heavy particles in the atmosphere. *J. Atmospheric Sci.*, **20**, 201–208.
- [12] Deininger, A., Holthausen, E., and Wilderer, P., 1998. Velocity and solids distribution in circular secondary clarifiers: full scale measurements and numerical modelling. *Water Research*, **32**(10), 2951–2958.
- [13] Drew, D., and Lahey, R., 1979. Application of general constitutive principles to the derivation of multidimensional two-phase flow equations. *International Journal of Multiphase Flow*, **5**, 243–264.
- [14] Drew, D., and Passman, S. L., 1998. Theory of multicomponent fluids. In *Theory of Multicomponent Fluids*, J. Marsden and L. Sirovich, Eds., vol. 135 of *Applied Mathematical Science*. Springer-Verlag.

- [15] Einstein, A., 1906. Eine neue Bestimmung der Moleküldimension. *Annalen der Physik*, 289–306.
- [16] Elghobashi, S., and Truesdell, G., 1993. On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles. *Physics of Fluids A*, **5**(7), 1790–1801.
- [17] Fluent Incorporated, 2002. *Handbuch*. Lebanon, NH, USA.
- [18] Frankel, N., and Acrivos, A., 1967. On the viscosity of a concentrated suspension of solid spheres. *Chemical Engineering Science*, **22**, 847–853.
- [19] Freimann, R., 1999. Strömungsstrukturen in horizontal durchströmten Nachklärbecken. PhD thesis, Technische Universität München. Institut für Hydraulik und Gewässerkunde.
- [20] Friedlander, S., 1977. Smoke, dust and haze - fundamentals of aerosol behaviour. John Wiley and Sons.
- [21] Fuchs, A., 1999. Untersuchung der zeitlichen Veränderung der Feststoffkonzentration im Überstand sich absetzender, biologischer Schlämme. PhD thesis, Technische Universität Graz.
- [22] Gidaspow, D., Bezburuah, R., and Ding, J., 1992. Hydrodynamics of circulating fluidized beds, kinetic theory approach. In *Fluidization VII*, pp. 75–82.
- [23] Gregory, J., 1997. The density of particle aggregates. *Water Science and Technology*, **36**(4), 1–13.
- [24] Greimann, B., and Forrest, M., 2001. Two-phase flow analysis of concentration profiles. *Journal of Hydraulic Engineering*, **127**(9), 753–500.
- [25] Greimann, B., Muste, M., and Holly, F., 1999. Two-phase formulation of suspended sediment transport. *Journal of Hydraulic Research*, **37**(4), 479–762.
- [26] Homeyer, A. v., 1999. Adsorptions- und Flockungsverhalten von synthetischen und modifizierten nativen Polyelektrolyten bei der mechanischen Fest/Flüssig-Trennung von technischen Schlammsuspensionen. PhD thesis, Universität Hamburg.
- [27] Huang, H., 1994. Fractal properties of flocs formed by fluid shear and differential settling. *Physics of Fluids*, **6**(10), 3229–3234.
- [28] Hunze, M., 2004. Simulation in der kommunalen Abwasserreinigung. Oldenburg Verlag. Habilitationsschrift am Fachbereich für Bauingenieurwesen der Universität Hannover, im Druck.
- [29] Hunze, M. und Schumacher, S., 2004. CFD-Modellierung in der Abwasserreinigung. *Wasser, Luft und Boden*(5), 26–29.
- [30] 2004. persönliche Mitteilung.
- [31] 2004. Diplomarbeit Ramona Stammermann in Vorbereitung.
- [32] Ishii, M., 1975. Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow. Paris: Eyrolles.
- [33] Jenkins, J., and Savage, S., 1983. A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles. *Journal of Fluid Mechanics*, **130**, 187–202.

- [34] Johnson, C., Li, X., and Logan, B., 1996. Settling velocities of fractal aggregates. *Environmental Science and Technology*, **30**(6), 1911–1918.
- [35] Kaftori, D., Hetsroni, G., and Banerjee, S., 1995. Particle behaviour in the turbulent boundary layer. ii. velocity and distribution profiles. *Physics of Fluids*, **7**(5), 1107–1121.
- [36] Kallio, S., Manninen, M., and Taivassalo, V., 1996. Turbulence in mixture models. Tech. rep., Åbo Akademi University.
- [37] Kashiwa, B., and Gore, R., 1991. A four equation model for multiphase turbulent flow. In *Proceedings of the first ASME • JSME fluids engineering conference Portland, Oregon 1991, Vol 110*, pp. 23–27.
- [38] Kranenburg, C., 1994. The fractal structure of cohesive sediment aggregates. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, **39**, 451–460.
- [39] Krebs, P., Franz, T., Hunze, M., and Jardin, N., 2001. Einsatz von Messungen und numerischen Simulationen zur Gestaltung von Nachklärbecken. Tech. rep., Universität Hannover. 14. Fachtagung Travemünde.
- [40] Krüger, A., 1998. Physikalische Prozesse im Nachklärbecken - Modellbildung und Simulation. PhD thesis, Universität Hannover. Institut für Strömungsmechanik und ERiB; Bericht Nr.54/1998.
- [41] Lakehal, D., Krebs, P., Krijgsman, J., and Rodi, W., 1999. Computing shear flow and sludge blanket in secondary clarifiers. *Journal of Hydraulic Engineering*, **125**(3), 253–262.
- [42] Larsen, P., 1977. On the hydraulics of rectangular settling basins. Tech. Rep. 1001, Department of Water Research Engineering. Lund Institute of Technology, Sweden.
- [43] Lee, S.-I., Seo, I.-S., and Koopman, B., 1994. Effect of mean velocity gradient and mixing time on particle removal in sea water induced flocculation. *Water, Air and Soil Pollution*, **78**, 179–188.
- [44] Lemmer, H., Griebe, T., and Flemming, H.-C., 1996. Ökologie der Abwasserorganismen. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York.
- [45] Levich, V., 1962. Physicochemical hydrodynamics. Prentice Hall, Inc.
- [46] Li, D.-H., and Ganczarczyk, J., 1987. Stroboscopic determination of settling velocity, size and porosity of activated sludge flocs. *Water Research*, **21**(3), 257–262.
- [47] Lun, C., Savage, S., Jeffrey, D., and Chepurnyi, N., 1984. Kinetic theories for granular flow: Inelastic particles in couette flow and slightly inelastic particlesw in a general flow field. *Journal of Fluid Mechanics*, **140**, 223–256.
- [48] Malcherek, A., 2001. Hydromechanik der Fließgewässer. Tech. rep., Universität Hannover. Institut für Strömungsmechanik und ERiB; Bericht Nr.61/2001.
- [49] Malcherek, A., 2003. Hydromechanik der Fließgewässer. Tech. rep., Bundesanstalt für Wasserbau Aussenstelle Küste Hamburg.

- [50] Mikkelsen, L., Gotfredsen, A., Agerbæk, M., Nielsen, P., and Keiding, K., 1996. Effects of colloidal stability on clarification and dewatering of activated sludge. *Water Science and Technology*, **34**, 449–457.
- [51] Mühle, K., 1993. Flocc stability in laminar and turbulent flow. In *Coagulation and flocculation theory and application*. Bohuslav Dobias, pp. 267–304.
- [52] Muste, M., and Patel, V., 1997. Velocity profiles for particles and liquid in open-channel flow with suspended sediment. *Journal of Hydraulic Engineering*, **123**(9), 742–751.
- [53] Parker, D., Kaufman, W., and Jenkins, D., 1971. Physical conditioning of activated sludge flocs. *Journal of Water Pollution Cont. Fed.???*, **43**, 1817–1833.
- [54] Rashidi, M., Hetsroni, G., and Banerjee, S., 1990. Particle-turbulence interaction in a boundary layer. *International Journal of Multiphase Flow*, **16**(6), 935–949.
- [55] Raudkivi, A., 1981. Grundlagen des Sedimenttransports. In *Grundlagen des Sedimenttransports*, Sonderforschungsbereich79, Ed., vol. 1 of *Sonderforschungsbereich79*. Universität Hannover.
- [56] Rijn, L. v., 1993. Principles of sediment transport. Aqua Publications, Amsterdam.
- [57] Roco, M., 1993. Particulate two-phase flow. Butterworth-Heinemann, Stoneham, MA 02180.
- [58] Schaeffer, D., 1987. Instability in the evolution equations describing incompressible granular flow. *Journal of Differential Equations*, **66**, 19–50.
- [59] Schmoluchowski, M. v., 1917. Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik. *Zeitschrift physikalische Chemie*, **92**, 129–168.
- [60] Schütz, S., 1999. Modellbildung und Simulation von Partikelwechselwirkungen bei dispersen Stoffsystemen am Beispiel von Flockungsprozessen. PhD thesis, Universität Stuttgart. Institut für Mechanische Verfahrenstechnik.
- [61] Shirolkar, J., Coimbra, C., and Queiroz McQuay, M., 1996. Fundamental aspects of modeling turbulent particle dispersion in dilute flows. *Progr. Energy Combustion Science*, **22**, 363–399.
- [62] Simonin, O., 1990. Eulerian formulation for particle dispersion in turbulent two-phase flows. In *Proceedings 5th Workshop on Two-Phase Flow Predictions, Erlangen 1990*, pp. 156–166.
- [63] Simonin, O., 1991. Prediction of the dispersed phase turbulence in particle-laden jets. *Gas-solid flows*, **121**, 197–206. American Society of Mechanical Engineers - Fluids Engineering Division.
- [64] Sonntag, H., 1993. Coagulation kinetics. In *Coagulation and flocculation theory and application*. Bohuslav Dobias, pp. 355–390.
- [65] Syamlal, M., Rogers, W., and O'Brien, T., 1993. Mfix documentation: Volume 1, theory guide. Tech. rep., National Technical Information Service, Springfield, VA.

- [66] Teisson, C., 1994. A review of cohesive sediment transport models. Tech. Rep. 36, EDF-Laboratoire National d'Hydraulique.
- [67] Teisson, C., Simonin, O., Galland, J., and Laurence, D., 1992. Turbulence and sedimentation: A reynolds stress model and a two-phase flow model. In *Proceedings of the 23rd International Conference on Coastal Engineering, ICCE, Venice 1992, Vol 3*, pp. 2853–2866.
- [68] Truesdell, C. and Noll, W., 1965. The non-linear field theories of mechanics. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokio, London.
- [69] Tu, J., and Fletcher, C., 1994. An improved model for particulate turbulence modulation in confined two-phase flow. *Int.Comm.in Heat and Mass Transfer*, **21**(6), 775–783.
- [70] Verwey, E., and Overbeek, J., 1948. Theory of the stability of lyophobic colloids. Elsevier.
- [71] Villaret, C., and Davies, A., 1995. Modeling sediment-turbulent flow interactions. *Appl. Mech. Review*, **48**(9), 601–609.
- [72] Wang, X., and Quian, N., 1997. Velocity profiles of sediment laden flow. *International Journal of Sediment Research*, **7**(1), 27–58.
- [73] Weitz, D., Huang, J., Lin, M., and Sung, J., 1985. Limits of the fractal dimension for irreversible kinetic aggregation of gold colloids. *Physical Review Letters*, **54**(13), 1416–1419.
- [74] Westphal, W., 1939. Physik. Springer Verlag.
- [75] Wilen, B.-M., 1999. Properties of activated sludge flocs. PhD thesis, Chalmers University of Technology Göteborg.
- [76] Winkler, K., 2001. Räumung in Nachklärbecken von Abwasserreinigungsanlagen. PhD thesis, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich. Versuchsanstalt für Wasserbau, Hydrologie und Glaziologie.
- [77] Winterwerp, J., 1999. On the dynamics of high-concentrated mud suspensions. PhD thesis, Delft University of Technology. Faculty of Civil Engineering and Geoscience.
- [78] Yuan, Z., and Michaelides, E., 1992. Turbulence modulation in particulate flows - a theoretical approach. *International Journal of Multiphase flow*, **18**(5), 779–785.
- [79] Zita, A., and Hermansson, M., 1994. Effects of ionic strength on bacterial adhesion and stability of flocs in a wastewater activated sludge system. *Applied Environmental Microbiology*, **60**, 3041–3048.

Abbildungsverzeichnis

1.1	Die Dynamik polydisperser Suspensionen als Resultat der Wechselwirkungen zwischen biologischen, chemischen und physikalischen Größen und Prozessen . . .	4
2.1	Fließschema einer Kläranlage; URL:www.emschergerossenschaft.de	11
2.2	Aufbau einer Flocke des belebten Schlammes (Wilén, 1999 [75])	12
2.3	Schematisierte Bereiche eines Nachklärbeckens	12
3.1	Konzeptionelle Modellbildung; nach Ishii 1975 [32]	26
3.2	Turbulenzregime im Mehrphasensystem (Kallio et al., 1996)	28
3.3	lift-Kraft auf ein Partikel	32
4.1	Einphasige Modellierung der Suspension	58
4.2	Mehrphasige Modellierung der Suspension	59
5.1	Vergleich analytischer und numerischer Lösungen; Versuch S11 (kleiner Partikeldurchmesser und hohe Partikeldichte)	72
5.2	Vergleich analytischer und numerischer Lösungen; Versuch SC7 (großer Partikeldurchmesser und geringe Partikeldichte)	73
5.3	Vergleich analytischer und numerischer Lösungen; Versuch SM7 (mittlerer Partikeldurchmesser und geringe Partikeldichte)	74
5.4	Zeitliche Entwicklung des Volumenanteils der dispersen Phase $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.1 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)	81
5.5	Zeitliche Entwicklung des Volumenanteils der dispersen Phase $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.2 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)	82
5.6	Physikalische Modellgrößen der dispersen Phase am Ende des Experiments $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.1 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)	83
5.7	Physikalische Modellgrößen der dispersen Phase am Ende des Experiments $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.2 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)	83
5.8	Zeitliche Entwicklung der Geschwindigkeit der kontinuierlichen Phase $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.1 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)	84
5.9	Zeitliche Entwicklung der Geschwindigkeit der kontinuierlichen Phase $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.2 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)	85
5.10	Physikalische Modellgrößen der dispersen Phase am Ende des Experiments $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.1 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)	86
5.11	Zeitliche Entwicklung des Volumenanteils der dispersen Phase $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.3 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)	87
5.12	Zeitliche Entwicklung des Volumenanteils der dispersen Phase $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.4 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)	88

5.13	Zeitliche Entwicklung des Volumenanteils der dispersen Phase $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 2.1 (konstitutive Beziehungen für kohäsive Partikel)	89
5.14	Zeitliche Entwicklung der Geschwindigkeit der kontinuierlichen Phase $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 2.1 (konstitutive Beziehungen für kohäsive Partikel)	90
5.15	Physikalische Modellgrößen der dispersen Phase am Ende des Experiments $\alpha_{d,max} = 0.8$; Rechenlauf 1.4 (konstitutive Beziehungen für nichtkohäsive Partikel)	91
5.16	Physikalische Modellgrößen der dispersen Phase am Ende des Experiments $\alpha_{d,max} = 0.85$; Rechenlauf 2.1 (konstitutive Beziehungen für kohäsive Partikel)	91
6.1	Schematisches Strömungsfeld in einem rechteckigen Nachklärbecken (nach Winkler, 2001 [76])	92
6.2	Messraster in Gesamtbecken und Einlaufbereich (Draufsicht) (Krebs et al., 2001 [39])	94
6.3	Gemessenes Geschwindigkeitsprofil in Beckenmitte $y=2.5$ m (Krebs et al., 2001 [39])	95
6.4	Sinkgeschwindigkeitsverlauf des einphasigen Modells nach Schumacher, 2004 [30]	97
6.5	Ausschnitt aus den Berechnungsnetzen für das NKB Kierspe in zwei unterschiedlichen räumlichen Auflösungen.	103
6.6	Zeitliche Entwicklung des Anteils der dispersen Phase $\alpha_{d,max} = 0.80$, Rechenlauf KIERSPE1 (konstitutive Beziehungen für nicht kohäsive Partikel) - mehrphasiges Modell	104
6.7	Zeitliche Entwicklung des Anteils der dispersen Phase $\alpha_{d,max} = 0.80$, Rechenlauf KIERSPE2 (konstitutive Beziehungen für kohäsive Partikel) - mehrphasiges Modell	105
6.8	Zeitliche Entwicklung des Anteils der dispersen Phase $\alpha_{d,max} = 0.65$, Rechenlauf KIERSPE2 (konstitutive Beziehungen für kohäsive Partikel) - mehrphasiges Modell	106
6.9	Synoptische Darstellung der Konzentration für alle Modellvarianten nach 4 Stunden Simulationszeit. Oben sind die Ergebnisse des mehrphasigen und unten die des einphasigen Modells jeweils für zwei verschiedene Berechnungsnetze dargestellt.	107
6.10	Mehrphasiges Modell, feines Berechnungsnetz, 15 Minuten simulierte Zeit. Oben: Suspensionsgeschwindigkeit. Unten: Konzentrationsverteilung, überlagert mit Stromlinien.	108
6.11	Mehrphasiges Modell, feines Berechnungsnetz, 1 Stunde simulierte Zeit. Oben: Suspensionsgeschwindigkeit. Unten: Konzentrationsverteilung, überlagert mit Stromlinien.	109
6.12	Mehrphasiges Modell, feines Berechnungsnetz, 2,5 Stunden simulierte Zeit. Oben: Suspensionsgeschwindigkeit. Unten: Konzentrationsverteilung, überlagert mit Stromlinien.	110
6.13	Mehrphasiges Modell, feines Berechnungsnetz, 4 Stunden simulierte Zeit. Oben: Suspensionsgeschwindigkeit. Unten: Konzentrationsverteilung, überlagert mit Stromlinien.	111
6.14	Mehrphasiges Modell, feines Berechnungsnetz, 2,5 Stunden simulierte Zeit. Oben: Flockendurchmesser. Unten: Viskosität der dispersen Phase, überlagert mit Stromlinien.	112
6.15	Mehrphasiges Modell, grobes Berechnungsnetz, 2 Stunden simulierte Zeit. Oben: Suspensionsgeschwindigkeit. Unten: Konzentrationsverteilung, überlagert mit Stromlinien.	113

6.16	Mehrphasiges Modell, grobes Berechnungsnetz, 3 Stunden simulierte Zeit. Oben: Suspensionsgeschwindigkeit. Unten: Konzentrationsverteilung, überlagert mit Stromlinien.	114
6.17	Einphasiges Modell, feines Berechnungsnetz, 15 Minuten simulierte Zeit. Oben: Strömungsgeschwindigkeit. Unten: Konzentrationsverteilung, überlagert mit Stromlinien.	115
6.18	Einphasiges Modell, feines Berechnungsnetz, 4 Stunden simulierte Zeit. Oben: Strömungsgeschwindigkeit. Unten: Konzentrationsverteilung, überlagert mit Stromlinien.	116
6.19	Einphasiges Modell, grobes Berechnungsnetz. Oben: Gegenüberstellung von gemessenen (schwarz) und berechneten Strömungsgeschwindigkeiten (grün). Unten: Gegenüberstellung von gemessenen (schwarz) und berechneten Konzentrationen (grün).	117
6.20	Mehrphasiges Modell, grobes Berechnungsnetz. Oben: Gegenüberstellung von gemessenen (schwarz) und berechneten Strömungsgeschwindigkeiten (grün). Unten: Gegenüberstellung von gemessenen (schwarz) und berechneten Konzentrationen (grün).	118
6.21	Einphasiges Modell, feines Berechnungsnetz. Oben: Gegenüberstellung von gemessenen (schwarz) und berechneten Strömungsgeschwindigkeiten (grün). Unten: Gegenüberstellung von gemessenen (schwarz) und berechneten Konzentrationen (grün).	119
6.22	Mehrphasiges Modell, feines Berechnungsnetz. Oben: Gegenüberstellung von gemessenen (schwarz) und berechneten Strömungsgeschwindigkeiten (grün). Unten: Gegenüberstellung von gemessenen (schwarz) und berechneten Konzentrationen (grün).	120

Tabellenverzeichnis

1.1	Klassifizierung der Prozesse nach der Konzentration (Malcherek, 2003 [49]) . . .	3
2.1	Flockenanforderungen	8
2.2	Physikalische Prozesse im Nachklärbecken	9
2.3	Entstabilisierungs- und Stabilisierungsprozeß	14
2.4	Prozesse der Flockendynamik	16
3.1	Variablen der Erhaltungsgleichung und Sprungbedingung	22
4.1	Effektive Viskositäten der dispersen Phase	40
4.2	turbulente Diffusionkoeffizienten	51
4.3	Frequenzen der Flockendynamik	53
4.4	Vergleich von einphasiger und mehrphasiger Sedimenttransportmodellierung . .	61
4.5	Notwendige konstitutive Beziehungen und Randwerte im Vergleich	62
5.1	Versuchs- und Randbedingungen	72
5.2	Anfangsbedingungen, Parametereinstellungen und konstitutive Beziehungen der Rechenläufe	77
6.1	Anfangs- und Randwerte für die Simulation des Nachklärbeckens der Kläranlage Kierspe-Bahnhof	99