
Simulation des Absetzverhaltens von Be- lebtschlamm mit einem mehrphasigen numeri- schen Flokkulationsmodell



Studienarbeit

Oliver Göthel

Matr.-Nr. 1780581

Hannover, Januar 2002

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
Flockenbildung und ihre Modellierung	3
2.1 Einführung	3
2.2 Das ASM–Modell	4
2.3 Die Kollisionstheorie von v. Smoluchowski	5
2.4 Flockung	6
2.4.1 Koagulationsmechanismen	6
2.4.2 Flockenstabilität	8
2.5 Flokkulationsmodelle mit diskreter Verteilung	10
2.5.1 Modell nach Krishnappan	10
2.5.2 Modell nach Greenspan und Ungarish	13
2.6 Flokkulationsmodell mit kontinuierlicher Verteilung	18
2.6.1 Modell nach Greenspan und Ungarish	18
2.6.2 Modell von Friedlander	20
2.6.2.1 Koagulation	20
2.6.2.2 Zerschneiden von Flocken	22
2.6.3 Flokkulationsmodell nach Winterwerp	23
2.6.3.1 Koagulation	23
2.6.3.2 Zerschneiden von Flocken	24
Flokkulation in einem hydrodynamisch–numerischen Modell	25
3.1 Flokkulation in einem Absetzbehälter	25
Zusammenfassung und Ausblick	35
Literaturverzeichnis	37

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: kleinstes Teilchen mit negativer Doppelschicht und angelagerten positiven Ionen (Gregory, 1983)	6
Abbildung 2: Polymere Brückenbindung (van Leussen, 1988)	7
Abbildung 3: Darstellung einer Flocke (Gregory, 1983)	9
Abbildung 4: Zuordnungsschema für Flocken (Krishnappan, 1990)	13
Abbildung 5: Simulationsergebnisse nach $t=0s$	26
Abbildung 6: Simulationsergebnisse nach $t=60s$	27
Abbildung 7: Simulationsergebnisse nach $t=120s$	27
Abbildung 8: Simulationsergebnisse nach $t=540s$	28
Abbildung 9: Simulationsergebnisse nach $t=600s$	28
Abbildung 10: Simulationsergebnisse nach $t=610s$	29
Abbildung 11: Simulationsergebnisse nach $t=620s$	29
Abbildung 12: Simulationsergebnisse nach $t=630s$	30
Abbildung 13: Simulationsergebnisse nach $t=60s$	31
Abbildung 14: Simulationsergebnisse nach $t=120s$	32
Abbildung 15: Simulationsergebnisse nach $t=180s$	32
Abbildung 16: Simulationsergebnisse nach $t=240s$	33
Abbildung 17: Simulationsergebnisse nach $t=270s$	33

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Diskretisierung der Flockengrößenverteilung (Krishnappan, 1990)	12
Tabelle 2: Parameter nach Winterwerp	26

Kapitel 1

Einleitung

Wenn kleinste Feststoffteilchen oder Organismen aus einer Flüssigkeit entfernt werden soll, dann kann dies durch einen Absetzvorgang geschehen. Oft spielt dabei die Absetzdauer eine wesentliche Rolle. Eine beschleunigter Absetzvorgang ist hierbei gleichbedeutend mit einer höheren Sinkgeschwindigkeit der einzelnen Teilchen. Diese erhöhte Sinkgeschwindigkeit lässt sich durch die Bildung von Flocken, die aus den primären Partikeln bestehen, erreichen. Solche Absetzvorgänge findet man beispielsweise in Ästuarrien, wo Sedimentpartikel Flocken bilden und sich absetzen, oder bei der Abwasseraufbereitung, bei der Bakterien verwendet werden, die nach der Reinigung des Wasser wieder entfernt werden sollen. Flocken bilden sich, wenn die primären Partikel durch verschiedene Mechanismen kollidieren und es bindende Kräfte gibt, die die Partikel zusammenhalten. Die verschiedenen Kollisionsmechanismen und Bindungsarten werden nachfolgend genauer erläutert.

Der Vorgang der Flokkulation kann durch verschiedene Modelle nachgebildet werden. Die einzelnen Modelle sind für verschiedenen Einsatzgebiete entwickelt worden und

berücksichtigen aus diesem Grund auch verschiedene Flockungs– bzw Kollisionsmechanismen. Die vorgestellten Ansätze zur Nachbildung der Flokkulation können entweder den kontinuierlichen Größenverlauf von Flocken in einem Fluid nachbilden, oder es wird eine Diskretisierung des Größenspektrums durchgeführt. Diskretisierung heißt in diesem Zusammenhang, dass verschiedene Größenbereiche gebildet werden, denen Flocken mit verschiedenen Größen, die sich aber in dem gleichen Intervall befinden, zugeordnet werden.

Wenn ein numerisches Modell zur Simulation solcher Flokkulations– und Absetzvorgänge benutzt wird, dann ist es unerlässlich in diesem Zusammenhang eine Mehrphasenmodell einzusetzen. Da die Partikel eine eigene Phase bilden, die einen direkten Einfluss auf die Fluidphase ausübt, muss diese gegenseitige Abhängigkeit entsprechend berücksichtigt werden. Je nach Modellansatz kann ein vollständiges oder ein vereinfachtes Mehrphasenmodell zum Einsatz kommen. Ein echtes Mehrphasenmodell würde bedeuten, dass für jede Flockengröße eine eigene Phase gebildet wird. Bei einem vereinfachten Mehrphasenmodell gibt es zwei Phasen, bei der die Partikelphase alle Flockengrößen aufnimmt. Auf das für diese Arbeit verwendete Mehrphasenmodell wird nachfolgend genauer eingegangen.

Die in dieser Arbeit vorgestellten Flokkulationsmodelle sollen ein Einblick in Möglichkeiten in diesem Bereich geben. Um die Funktionsfähigkeit solcher Modelle zu testen wurden ein Ansatz in ein vereinfachtes Mehrphasenmodell implementiert und ein Absetzvorgang beispielhaft simuliert.

Kapitel 2

Flockenbildung und ihre Modellierung

2.1 Einführung

Ein sehr wichtiges Problem in der Technik ist die Abtrennung feiner Feststoffteilchen und kleinster Organismen aus Flüssigkeiten, die beispielsweise bei der Wasseraufbereitung häuslicher und industrieller Abwässer anfallen. Aus den feinen in Suspension befindlichen Teilchen und Organismen werden größere Flocken gebildet, die durch Absetzen oder Filtration aus der Flüssigkeit entfernt werden können. Flocken haben eine wesentlich höhere Sinkgeschwindigkeit als die einzelnen Teilchen, so dass der Abscheidungsprozess durch Absetzvorgänge stark beschleunigt werden kann. Für den Prozess der Flockenbildung sind die Koagulation bzw. die Flockung verantwortlich.

Ganz allgemein muss man zwischen den Begriffen Koagulation und Flockung unterscheiden. Diese Unterscheidung, die zuerst von La Mer (1964) besonders hervorgehoben wurde, wird allerdings auch in der neueren Literatur nicht immer gemacht. Unter Koagulation versteht man die Destabilisierung eines Teilchens durch Erniedrigung des

Abstoßungspotentials der Doppelschicht. Der Begriff Flockung beschreibt die Destabilisierung durch den Mechanismus einer chemischen Brückenbildung, bei dem die Teilchen zu einer Flocke vereinigt werden. Die Begriffe Koagulation und Flockung lassen sich nicht immer genau trennen. Meistens erfolgt die Destabilisierung durch ein Zusammenwirken beider Vorgänge. In der vorliegenden Arbeit wird das Wort Koagulation für den Zusammenschluss zweier Partikel bzw. Flocken verwendet, während der Begriff Flockung sowohl Koagulation als auch das Zerbrechen von Flocken beinhaltet.

2.2 Das ASM-Modell

Für die numerische Simulation gibt es verschiedene Modellansätze, um eine Mehrphasenströmung zu modellieren. Hier soll ein vereinfachtes Mehrphasenmodell, das Algebraic-Slip-Mixture-Modell (ASM) vorgestellt werden. Das ASM-Modell ist für eine Zweiphasenströmung entwickelt worden, bei der die einzelnen Phasen eine unterschiedliche Geschwindigkeit haben dürfen. Daraus resultiert eine Relativgeschwindigkeit zwischen den beiden Phasen (eng.: Slip Velocity). In dem Modell werden die Gleichungen für die Kontinuität der beiden Phasen (2.1) und den Impuls für das Gemisch (2.2) gelöst. Ausserdem wird eine Gleichung für den Volumenanteil der dispersen Phase (2.3) und ein Ausdruck für die Relativgeschwindigkeit der beiden Phasen zueinander (2.4) gelöst.

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_m + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_m u_{m,i}) = 0 \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_m u_{m,j}) + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_m u_{m,i} u_{m,j} = & - \frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \mu_m \left(\frac{\partial u_{m,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{m,j}}{\partial x_i} \right) \\ & + \rho_m g_j + F_j + \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k u_{Dk,i} u_{Dk,j} \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_p \rho_p + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_p \rho_p u_{m,i} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_p \rho_p u_{Dp,i} \quad (2.3)$$

$$\vec{v}_{qp} = \vec{u}_p - \vec{u}_q \quad (2.4)$$

In den oben genannten Gleichungen ist ρ_m die Mischdichte, u_m die massengemittelte Geschwindigkeit der Mischung, α_k der Volumenanteil der einzelnen Phase, μ_m die dy-

namische Viskosität der Mischung, F_j zusätzliche Kräfte und u_{DK} die Driftgeschwindigkeit. Die Indizes p und q stehen für die Primär- und die Sekundärphase.

Das ASM-Modell kann bei verschiedenen Anwendungen ein guter Ersatz für ein echtes Mehrphasenmodell sein. Die Benutzung eines vollen Mehrphasenmodells ist nicht möglich, wenn die Partikelphase zu breit gefächert ist oder wenn der Zusammenhang zwischen den Phasen nicht sicher beschrieben werden kann. Ein einfacheres Modell wie das ASM-Modell kann, unter der Annahme, dass gewisse Voraussetzungen wahr sind (um einen Ausdruck für die Relativgeschwindigkeit zu bekommen, sollte ein Gleichgewicht zwischen den Phasen über kurze räumliche Distanz erreicht werden), die gleichen Ergebnisse wie ein volles Mehrphasenmodell liefern, obwohl eine kleinere Anzahl an Variablen gelöst wird.

2.3 Die Kollisionstheorie von v. Smoluchowski

Gemäß der Kollisionstheorie von v. Smoluchowski sind für den Zusammenschluss einzelner Partikel zu einem Aggregat bzw. einer Flocke zwei Prozesse notwendig. Erstens muss eine Kollision zwischen zwei Partikeln erfolgen und zweitens müssen die Partikel kohäsive Eigenschaften haben. Während für die Kollision von Partikeln physikalische Prozesse die Hauptrolle spielen, werden die kohäsiven Eigenschaften, die für die Koagulation und die Flockenstabilität verantwortlich sind, durch die physiochemische Zusammensetzung der Flocke bestimmt. Beide Phänomene werden in der Koagulationstheorie über Wahrscheinlichkeitsfunktionen berücksichtigt.

Neben der Koagulation ist auch das Zerbrechen der Flocken für den Verfahrensablauf von entscheidender Bedeutung. Die Flockengröße ist nach oben hin begrenzt, und es stellt sich ein dynamisches Gleichgewicht zwischen Koagulation und dem Zerbrechen von Flocken ein. Flocken zerbrechen aufgrund von strömungsinduzierten Schubspannungen oder durch Kollisionen zwischen verschiedenen Partikeln. Diese Prozesse kann man über Wahrscheinlichkeitsfunktionen berücksichtigen.

2.4 Flockung

2.4.1 Koagulationsmechanismen

Der bei der Abwasserreinigung verwendete belebte Schlamm besteht u.a. aus kleinsten Teilchen, die von einer negativ geladenen Doppelschicht (Abbildung 1) umgeben werden. Im Fluid befinden sich positiv geladene Ionen, die sich an diese Doppelschicht anlagern. Daraus ergeben sich Abstoßungskräfte zwischen den einzelnen Teilchen. Die Überwindung dieser Abstoßungskräfte und die daraus resultierende Koagulation verschiedener Teilchen kann nur erreicht werden, wenn die anziehenden Kräfte (van-der-Waalsche-Kräfte) größer werden als die abstoßenden. Eine Verringerung des Oberflächenpotentials oder eine Komprimierung der Doppelschicht ist hierzu nötig. Das Oberflächenpotential ist abhängig vom Salzgehalt des Trägerfluids. Wird der Salzgehalt erhöht, befinden sich mehr positiv geladene Ionen im Fluid und das Oberflächenpotential nimmt ab. Die Ausdehnung der Doppelschicht um ein Teilchen wird nur kleiner, wenn die Ionenbindungen innerhalb stärker werden.

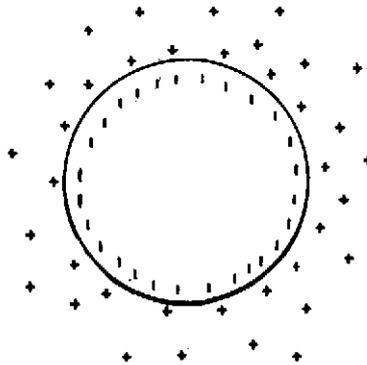


Abbildung 1: kleinstes Teilchen mit negativer Doppelschicht und angelagerten positiven Ionen
(Gregory, 1983)

Ein weiterer Mechanismus für die Koagulation verschiedener Teilchen ist die polymere Brückenbindung. Polymerstränge können aus der Doppelschicht herausragen und bei ausreichender Länge Verbindungen mit den Polymersträngen anderer Teilchen oder Flocken eingehen (Abbildung 2).

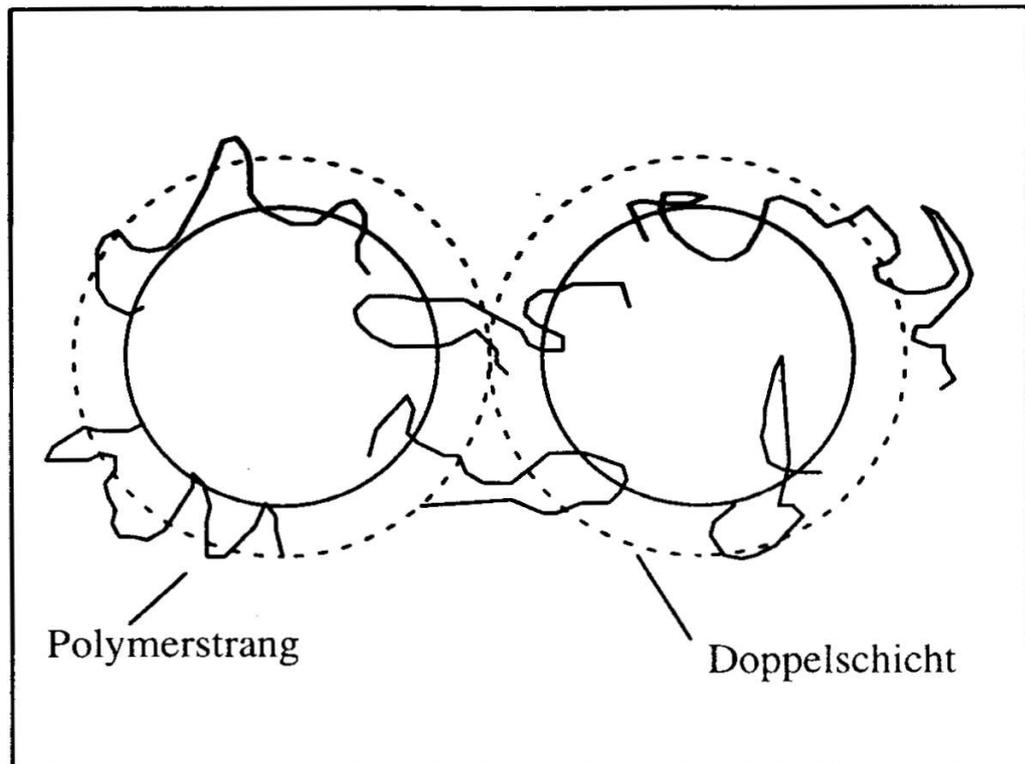


Abbildung 2: Polymere Brückenbindung (van Leussen, 1988)

In diesem Zusammenhang wurde und wird auch die Rolle von Protozoen (Urtierchen) bei der Flockenbildung diskutiert. Ausgangspunkt dafür ist die immer wieder neu bestätigte Beobachtung, dass zufriedenstellende Flockenbildung und klare Abläufe in Kläranlagen nur bei ausreichender Besiedlung mit Protozoen erreicht werden. Zur Erklärung solcher Befunde wurde u.a. vermutet, dass die Protozoen selbst durch Ausscheiden von flocculierenden Polymeren zur Flockenbildung beitragen (Characklis, 1990). Dabei müsste dieser Mechanismus vor allem durch die im Belebtschlamm vorherrschenden sessilen Ciliaten bewirkt werden, da in Anwesenheit anderer bakterienfressender Protozoen, wie frei schwimmender Ciliaten oder Flagellaten die Flockenbildung weit weniger effizient verläuft. Denkbar wären auch von den Protozoen ausgehende chemische Signale, die bei den Bakterien die Produktion von Polymeren auslösen. Ungeachtet der noch nicht hinreichend verstandenen beteiligten Mechanismen liegt inzwischen aber genügend Belegmaterial dafür vor, dass die Protozoen direkt oder indirekt an dem für den Verfahrensablauf entscheidenden Prozess der Flockenbildung wesentlich beteiligt sind (Güde, 1996).

Eine Flocke kann auch als ein Objekt aus der fraktalen Geometrie betrachtet werden. Der Koagulationsprozess kann dann in zwei verschiedene Arten unterteilt werden. Werden einzelne Partikel nacheinander in einem Fluid freigesetzt, bewegen sich in einem diffusen Prozess aufeinander zu und bilden schließlich ein Aggregat, dann wird diese Art als *Diffusion Limited Aggregation (DLA)* bezeichnet. In einem Sediment–Wasser oder Belebtschlamm–Wasser Gemisch werden die einzelnen Partikel natürlich nicht nacheinander freigesetzt, sondern sind gleichzeitig in der Lösung vorhanden. In diesem Fall wird der Prozess *Cluster–Cluster Aggregation (CCA)* genannt.

Der CCA–Prozess kann wiederum in zwei verschiedene Arten unterteilt werden. Wenn die Wahrscheinlichkeit, dass zwei Partikel aneinander haften bleiben gleichbleibend ist, dann ist der Diffusionsprozess die limitierende Größe für das Wachstum einer Flocke. In diesem Fall wird die Art der Koagulation als *Diffusion Limited Cluster–Cluster Aggregation (DLCCA)* bezeichnet. Falls die Haftungswahrscheinlichkeit ungleich verteilt ist, ist die Haftungsfähigkeit der einzelnen Partikel die limitierende Größe. Es handelt sich dann um einen *Reaction Limited Cluster–Cluster Aggregation (RLCCA)* Prozess.

In einem Gemisch aus Wasser und kohäsiven Sedimenten findet ein RLCCA Prozess statt, da die einzelnen Partikel eine geringe elektrische Ladung aufweisen und so Abstoßungskräfte mit geringer Reichweite auftreten können. Die Reaktionsfähigkeit der einzelnen Partikel ist somit entscheidend. In einem Gemisch aus Wasser und Belebtschlamm hingegen befindet sich ein hoher organischer Anteil, der durch die Bildung von Polymeren für eine gleichmäßige Haftungsfähigkeit der einzelnen Partikel sorgt. Diese Reaktionsart ähnelt stark einem DLCCA Prozess (Winterwerp, 1999).

2.4.2 Flockenstabilität

Eine Flocke (Abbildung 3) ist nur stabil, wenn die inneren Bindungskräfte der Flocke größer sind als die angreifenden Strömungskräfte oder die Kräfte, die durch eine Kollision mit einem Partikel oder einer anderen Flocke entstehen. Die Strömungskräfte, die auf die Flocke wirken, werden maßgeblich von der Turbulenz bestimmt. Scher-, Zug- und Druckspannungen werden durch eine turbulente Strömung auf eine Flocke übertragen. Werden die angreifenden Kräfte größer als die inneren Bindungskräfte, zerbricht die Flocke. Belebtschlammflocken haben typischerweise eine netzwerkartige Flockenstruktur mit angelagerten Bakterien. Diese Struktur und der Polymergehalt der Lösung lassen unterschiedliche Arten des Flockenzerbrechens zu. An der Oberfläche der Flocken könne einzelne Partikel oder Mikrofloken abscheren oder die netzwerkartige

Struktur kann vollständig zusammenbrechen und die Flocke in Einzelpartikel und Mikrofloccen zerfallen.

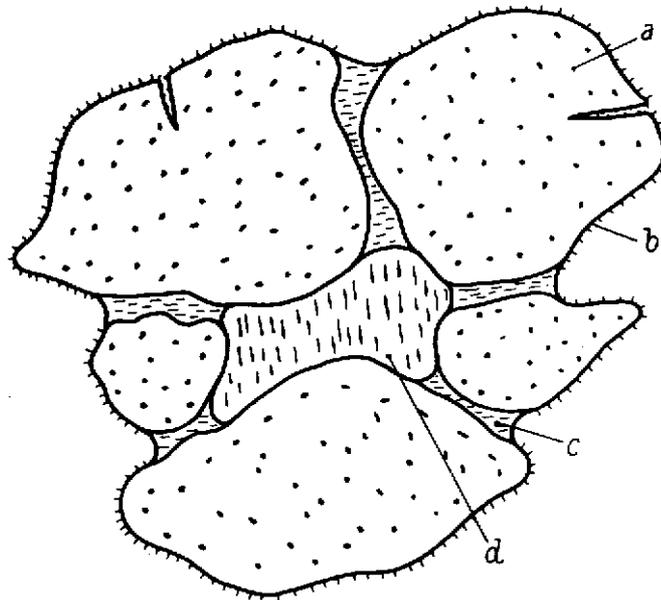


Abbildung 3: Darstellung einer Flocke (Gregory, 1983). (a) internes Wasser, (b) adsorptions und adhäsions Wasser, (c) kapillares Wasser, (d) eingeschlossenes Wasser

2.5 Flokkulationsmodelle mit diskreter Verteilung

2.5.1 Modell nach Krishnappan

In einem Ansatz für die Modellierung von Flokkulation kann die Größenverteilung der Flocken explizit mit einbezogen werden. Krishnappan (1990) hat unter diesem Gesichtspunkt ein Modell vorgestellt, dass die Flokkulation und Sedimentation von kleinsten Partikeln in einem Absetztank nachbildet. In diesem Modell werden die einzelnen Flockengrößen verschiedenen Größenklassen zugeteilt. Jede Klasse bildet eine Art Behälter, dem ein gewisser Flockengrößenbereich zugeteilt ist. Die kontinuierliche Größenverteilung der Flocken wird also diskretisiert. Diese Vereinfachung auf die Modellierung des Absetzvorgangs soll hier nicht weiter eingegangen werden.

Die Koagulation verschiedener Teilchen wird durch die Koagulationsgleichung beschrieben, die die Änderungsrate einer Flockenklasse i pro Fluidvolumeneinheit angibt.

$$\frac{\partial N(i, t)}{\partial t} = - N(i, t) \sum_{j=1}^{\infty} K(i, j) N(i, j) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\infty} K(i - j, j) N(i - j, t) N(j, t) \quad (2.5)$$

In Gleichung (2.5) sind $N(i, j)$ und $N(j, t)$ die Konzentrationen der Größenklassen i und j zum Zeitpunkt t . $K(i, j)$ ist die Funktion der Kollisionsfrequenz, die die Wahrscheinlichkeit angibt, dass eine Flocke der Größe i auf eine Flocke der Größe j trifft. Der erste Term der rechten Seite von Gleichung (2.5) berechnet die Verringerung der Anzahl von Flocken der Größenklasse i durch Koagulation von Flocken der i -ten Klasse mit Flocken aller anderen Klassen. Der zweite Term auf der rechten Seite berechnet die durch Koagulation von Flocken kleinerer Klassen neu zur i -ten Klasse hinzugekommenen Flocken. Für diesen Prozess wird angenommen, dass das Volumen der einzelnen Sedimentpartikel erhalten bleibt. Wenn also r_i und r_j die Radien von zwei Flocken der Klasse i und j sind, dann wird der Radius einer Flocke, die aus einer Koagulation von Flocken der i -ten und j -ten Klasse gebildet wird, durch Gleichung (2.6) berechnet.

$$r_i^3 + r_j^3 = r^3 \quad (2.6)$$

Die Kollisionsfrequenz nimmt verschiedene Formen an. Sie ist abhängig von der Art des Kollisionsmechanismus, der die Teilchen zusammen bringt. Kollisionsmechanismen, für die eine Kollisionsfrequenzfunktion bereits entwickelt wurde, sind die Brownsche Molekularbewegung, strömungsinduzierte Schubspannungen, Teilchenträgheit in tur-

bulenten Strömungen und differentiell Absinken. Die verschiedenen Funktionen wurden von Pearson *et al.* (1984) dokumentiert.

Krishnappan hat für sein Problem (Fokkulation in einem Absetztank) nur die Brownsche Molekularbewegung und das differentielle Absinken in das Modell mit einbezogen. Die Brownsche Molekularbewegung wird hier vernachlässigt, da sie für Partikel größer als 1 μm kaum Einfluss auf die Koagulation von Teilchen hat (Hunt, 1980). Die Funktion der Kollisionsfrequenz für differentielles Absinken wurde von Findheisen 1939 (*in*: Pearson *et al.*, 1984) erarbeitet:

$$K(i, j) = \frac{2\pi g}{9\nu} \left(\frac{\rho_s - \rho_w}{\rho_w} \right) (r_i + r_j)^2 |r_i^2 - r_j^2| \quad (2.7)$$

In Gleichung (2.7) ist g die Gravitation, ν die kinematische Viskosität des Trägerfluids, ρ_s die Dichte der Flocken und ρ_w die Dichte des Trägerfluids. Die Lösung von Gleichung (2.7) erfolgt vereinfacht mit diskretem Radius, da die Flockengröße sehr breit gefächert ist. Die Lösung wird einfacher, wenn der Radius diskretisiert wird:

$$r^i = r^1 2^{\frac{i-1}{3}} \quad i = 2, 3, \dots, M \quad (2.8)$$

Jeder Bereich kann wie ein Behälter betrachtet werden, der die Flocken eines bestimmten Größenbereichs enthält. r_1 ist der mittlere Durchmesser von Flocken in dem ersten Behälter. Insgesamt gibt es M Behälter. Die obige Diskretisierung setzt voraus, dass das Flockenvolumen in dem i -ten Behälter doppelt so groß sind wie in dem Behälter davor. Jeder Behälter beinhaltet Flocken mit einem Volumen von $(v_i - 0.5\Delta v_i)$ bis $(v_i + 0.5\Delta v_i)$, wobei $v_i = (4/3)\pi r_i^3$ und $\Delta v_i = 2^i v_1 / 3$ ist. Tabelle 1 gibt eine Übersicht über die Diskretisierung der Flockengrößenverteilung.

Behälter Nr.	mittlerer Flockenradius	mittleres Flockenvolumen	Flockenvolumen- bereich
1	r_1	v_1	$\frac{2}{3}v_1$ bis $\frac{4}{3}v_1$
2	$1.26r_1$	$2v_1$	$\frac{4}{3}v_1$ bis $\frac{8}{3}v_1$
3	$1.59r_1$	$4v_1$	$\frac{8}{3}v_1$ bis $\frac{16}{3}v_1$
4	$2.00r_1$	$8v_1$	$\frac{16}{3}v_1$ bis $\frac{32}{3}v_1$
· · ·			
M	$2^{(M-1)/3} r_1$	$2^{(M-1)} v_1$	$\frac{2^{(M-1)}}{3/2} v_1$ bis $\frac{2^{(M-1)}}{3/4} v_1$

Tabelle 1: Diskretisierung der Flockengrößenverteilung (Krishnapan, 1990)

Wenn eine Koagulation zwischen Flocken aus Behälter i und Behälter j ($j < i$) stattfindet, dann passt die neu entstandene Flocke sowohl in Behälter i als auch in Behälter $i+1$. Welchem Behälter die Flocke letztendlich zugeordnet wird, hängt von der Massenerhaltung ab. Ist beispielsweise N_{ij} die Anzahl der insgesamt neu gebildeten Partikel und N_x und N_y ist die Anzahl neuer Flocken, die den Behältern i und $i+1$ zugeteilt werden können, dann lautet die Massenbilanz:

$$\rho_s N_{ij} v_i + \rho_s N_{ij} v_j = \rho_s N_x v_i + \rho_s N_y v_{i+1} \quad (2.9a)$$

Daraus folgt:

$$v_i + v_j = v_i \frac{N_x}{N_{ij}} + v_{i+1} \frac{N_y}{N_{ij}} \quad (2.9b)$$

bzw.

$$v_i + v_j = v_i f_{ij} + v_{i+1} (1 - f_{ij}) \quad (2.10)$$

In Gleichung (2.10) ist f_{ij} die Fraktion, die dem Behälter i und $1 - f_{ij}$ die Fraktion, die dem Behälter $i+1$ zugeordnet wird (Abbildung 4).

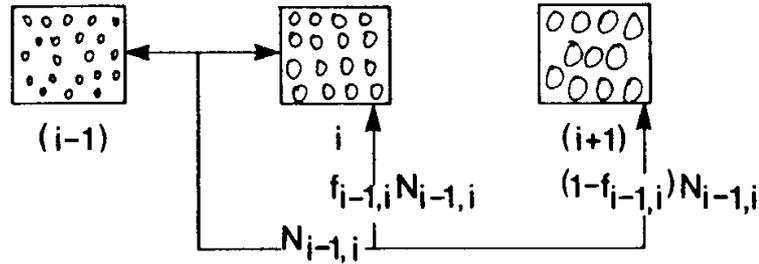


Abbildung 4: Zuordnungsschema für Flocken (Krishnappan, 1990)

Ist das Flockenvolumen der Behälter i , $i+1$ und j bekannt, dann kann die Flockenzuteilungsfunktion ausgedrückt werden als:

$$f_{ij} = \frac{(v_i + v_j - v_{i+1})}{(v_i - v_{i+1})} \quad (2.11)$$

Fügt man Gleichung (2.11) in Gleichung (2.5) ein, so erhält man:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta N_i}{\Delta t} = & - \sum_{j \neq i} K(i, j) N_i N_j + \sum_{j < i} f_{ij} K(i, j) N_i N_j \\ & + \sum_{j < i-1} (1 - f_{i-1, j}) K(i-1, j) N_{i-1} N_j \end{aligned} \quad (2.12)$$

Löst man Gleichung (2.12) für jeden Behälter, dann kann die Flockengrößenverteilung über ein Zeitintervall Δt berechnet werden.

2.5.2 Modell nach Greenspan und Ungarish

Greenspan und Ungarish (1982) haben sowohl ein Modell mit diskreter als auch mit kontinuierlicher Größenverteilung der Flocken vorgestellt. In beiden Modellen ist ein Partikel oder eine Flocke als kugelförmiger Körper definiert, der einen Radius r von n mögli-

chen Radien hat. Wenn r_s der kleinste und r_l der größte mögliche Radius ist, dann sind die Größen folgendermaßen geordnet:

$$r_s = r_n < r_{n-1} < \dots < r_1 = r_l \quad (2.13)$$

Wenn eine kontinuierliche Größenverteilung in n Intervalle geteilt wird, ist r_k der gemittelte Radius im k -ten Durchmesserbereich.

Die n Intervalle können als verschiedene Phasen einer Suspension angesehen werden, so dass eine Suspension mit Flocken in n verschiedenen Größen aus n verschiedenen inkompressiblen, dispersiven Phasen besteht. Die Bewegungsgleichungen für eine Multiphasensuspension wurden von Delhaye & Achard (1976) und Ishii (1975) entwickelt. Für inkompressible Fluide gelten die Erhaltungssätze für Masse und Moment, wie sie schon in Kap. 2.2 genannt wurden.

In den folgenden Gleichungen ist $\rho_0 = \rho_c$ und die Dichte des Materials der dispersen Phase für $k=1, \dots, n$ ist $\rho_k = \rho_D$.

Für den Druck innerhalb einer Flocke wird angenommen, dass er über den Kapillardruck mit dem Druck außerhalb zusammenhängt:

$$p_k = p_c + \frac{2\sigma}{r_k}, \quad k = 1, \dots, n \quad (2.14)$$

Die Oberflächenspannung σ wird hier konstant angenommen.

Für die Widerstandskraft auf die disperse Phase k wird angenommen, dass

$$F_k = \kappa \mu_c D(\alpha) \frac{\alpha_k}{r_k^2} (v_c - v_k) \quad (2.15)$$

und die Erhaltung des Moments erfordert dass

$$M_c + \sum_{k=1}^n M_k = 0 \quad (2.16)$$

mit:

$$\alpha = \alpha_D = \sum_{k=1}^n \alpha_k = 1 - \alpha_c \quad (2.17)$$

Hier ist α der gesamte Volumenanteil der dispersen Phase, μ_c ist die Viskosität des Trägerfluids und $\kappa D(\alpha)$ ist ein empirischer Faktor, der die Viskosität der Suspension berücksichtigt.

Vereinfachend wird angenommen, dass die Widerstandskraft der wichtigste Faktor für Kollision und Interaktion von Partikeln ist. Der Widerstand, der auf die disperse Phase k ausgeübt wird, ist abhängig vom gesamten Volumenanteil α , der Geschwindigkeit des Trägerfluids v_c und von der Größe, Anzahl und Geschwindigkeit von Flocken mit dem Radius r_k . Durch diese Vereinfachung kommt man zu einer Zweiphasenströmung. Smith (1965) konnte durch Experimente belegen, dass Gleichung (2.15) bei langsamen Sinkgeschwindigkeiten eine gute Näherung ist. Vernachlässigt wird hier allerdings die Trägheitskraft. Da die Flocken vergleichsweise groß sind, ist das Fehlen der Trägheitskräfte ein nicht unwesentlicher Fehler bei der Simulation der Flokkulation.

Die Variablen der gesamten dispersen Phase werden gemittelt und durch folgende Gleichung aus den einzelnen Werten ermittelt:

$$\Psi_D = \langle \psi_k \rangle = \frac{1}{\alpha} \sum_{k=1}^n \alpha_k \psi_k \quad (2.18)$$

Zum Beispiel:

$$v_D = \langle v_k \rangle, \quad p_D = \langle p_k \rangle \quad (2.19)$$

mit Gleichung (2.14) folgt, dass

$$p_D = p_C + 2\sigma \left\langle \frac{1}{r_k} \right\rangle \quad (2.20)$$

Die gesamte Widerstandskraft, die auf die disperse Phase wirkt ist dann:

$$\sum_{k=1}^n F_k = \kappa \mu_c \alpha D(\alpha) \left[\frac{v_c}{a^2} - \left\langle \frac{v_k}{r_k^2} \right\rangle \right] \quad (2.21)$$

mit

$$\frac{1}{a^2} = \left\langle \frac{1}{r_k^2} \right\rangle \quad (2.22)$$

Eine gleiche aber entgegengesetzte Kraft wirkt auf das Trägerfluid, so dass

$$M_c = -\alpha\kappa\mu_c D(\alpha) \left[\frac{v_c}{a^2} - \left\langle \frac{v_k}{r_k^2} \right\rangle \right] \quad (2.23)$$

Da σ und ρ_k ($= \rho_D$) konstant sind, können Gleichungen (2.17) und (2.18) geschrieben werden als

$$\frac{\partial}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_k v_k = 0 \quad (2.24)$$

$$\rho_D \alpha_k \left(\frac{\partial}{\partial t} v_k + v_k \cdot \nabla v_k \right) = -\alpha_k \nabla p_c + \nabla \cdot \alpha_k \pi_k + \rho_D \alpha_k g + \kappa \mu_c D(\alpha) \frac{\alpha_k}{r_k} (v_c - v_k) \quad (2.25)$$

für $k=1, \dots, n$

Da $\alpha_c = 1 - \alpha$ ist, können Momenten- und Massenerhaltung ausgedrückt werden durch:

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha + \nabla \cdot (1 - \alpha) v_c = 0 \quad (2.26)$$

$$\rho_c (1 - \alpha) \left(\frac{\partial}{\partial t} v_c + v_c \cdot \nabla v_c \right) = - (1 - \alpha) \nabla p_c + \nabla \cdot (1 - \alpha) \pi_c + \rho_c (1 - \alpha) g - \kappa \mu_c \alpha D(\alpha) \left[\frac{v_c}{a^2} - \left\langle \frac{v_k}{r_k^2} \right\rangle \right] \quad (2.27)$$

Schließlich erhält man die Gleichungen für die disperse Phase, indem man über k summiert:

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha + \nabla \cdot \alpha v_D = 0 \quad (2.28)$$

$$\rho_D \alpha \left(\frac{\partial}{\partial t} v_D + v_D \cdot \nabla v_D \right) = -\alpha \nabla p_c + \nabla \cdot \alpha \pi_D^E + \rho_D \alpha g + \kappa \alpha \mu_c D(\alpha) \left[\frac{v_c}{a^2} - \left\langle \frac{v_k}{r_k^2} \right\rangle \right] \quad (2.29)$$

mit:

$$\pi_D^E = \pi_D + v_D v_D - \langle v_k v_k \rangle \quad (2.30)$$

π_D^E ist hier die effektive Spannung.

Ein Maß für die Abhängigkeit der dispersen Phase von der Partikelgröße wird gemessen durch:

$$\left| \frac{v_D}{a^2} - \left\langle \frac{v_k}{r_k^2} \right\rangle \right| \quad (2.31)$$

In einem zweiphasen Gemisch ist $k=1$, $\alpha_1 = \alpha_D$, $v_D = v_1$, $a^2 = r_1^2$ und $\pi_D^E = \pi_D$.

2.6 Flokkulationsmodell mit kontinuierlicher Verteilung

2.6.1 Modell nach Greenspan und Ungarish

Greenspan und Ungarish (1982) haben das Modell mit diskreter Größenverteilung (Kap. 2.5.2) der Flocken zu einem Modell mit kontinuierlicher Verteilung erweitert. $\phi(\lambda, t; r)$ soll die Volumenverteilung von Flocken mit dem Radius r am Punkt λ zur Zeit t sein. Man kann auch sagen, dass $\phi(\lambda, t; r) dr d\lambda$ der Volumenanteil von dr am Punkt r zur Zeit t ist, der mit Flocken mit den Radien von r bis $r+dr$ gefüllt ist. Wenn $n(\lambda, t; r)$ die Dichte der Flocken ist, dann ist

$$\phi(\lambda, t; r) = \frac{4\pi}{3} r^3 n(\lambda, t; r) \quad (2.32)$$

Der Volumenanteil der dispersen Phase wird dann berechnet durch

$$\alpha(\lambda, t) = \int_{r_s}^{r_1} \phi(\lambda, t; r) dr \quad (2.33)$$

In Gleichung (2.33) sind r_s und r_1 der kleinste und der größte Flockenradius in der Suspension.

Wenn der gesamte Größenbereich (r_s, r_1) in n Intervalle der Größe Δr zerlegt wird, der Flocken mit dem gleichen Durchmesser enthält, dann ist der Volumenanteil der Flocken mit dem Radius r_k :

$$\Delta\alpha_k \approx \phi(\lambda, t; r_k) \Delta r \quad (2.34)$$

Die Gleichungen (2.15) und (2.18) können dann auf jedes Intervall angewendet werden, indem α_k durch $\Delta\alpha_k$ ersetzt wird. Wenn $\Delta r \rightarrow 0$ geht, werden aus π_k , v_k und p_k die Funktionen $\pi(\lambda, t; r)$, $v(\lambda, t; r)$ und $p(\lambda, t; r)$. Daraus ergeben sich die Gleichungen:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \phi \mathbf{v} = 0 \quad (2.35)$$

$$\rho_d \phi \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\phi \nabla p_c + \nabla \cdot \phi \boldsymbol{\pi} - \rho_D \phi \mathbf{g} + \kappa \mu_c D(\alpha) \frac{\phi}{r^2} (\mathbf{v}_c - \mathbf{v}) \quad (2.36)$$

mit:

$$p = p_c + \frac{2\sigma}{r} \quad (2.37)$$

Die kontinuierliche Größenverteilung erfordert eine Integration über r , anstatt der Summation, die bei einer diskreten Verteilung durchgeführt wurde. Daraus ergeben sich die Gleichungen für die Fluidphase:

$$-\frac{\partial \alpha}{\partial t} - \nabla \cdot (1 - \alpha) \mathbf{v}_c = 0 \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} \rho_c (1 - \alpha) \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v}_c + \mathbf{v}_c \cdot \nabla \mathbf{v}_c \right) = & - (1 - \alpha) \nabla p_c + \nabla \cdot (1 - \alpha) \boldsymbol{\pi}_c + \rho_c (1 - \alpha) \mathbf{g} \\ & - \alpha \kappa \mu_c D(\alpha) \left[\frac{\mathbf{v}_c}{a^2} - \frac{1}{\alpha} \int_{r_s}^{r_1} \frac{\phi \mathbf{v}}{r^2} dr \right] \end{aligned} \quad (2.39)$$

Der gemittelte Flockenradius a ist definiert als:

$$\frac{1}{a^2} = \frac{1}{\alpha} \int_{r_s}^{r_1} \frac{\phi dr}{r^2} \quad (2.40)$$

Die gemittelten Werte der dispersen Phase können nun ebenfalls integriert werden:

$$\left\{ \begin{array}{l} v_D(\lambda, t) \\ p_D(\lambda, t) \\ \pi_D(\lambda, t) \end{array} \right\} = \frac{1}{\alpha(r, t)} \int_{r_1}^{r_s} \phi(\lambda, t; r) \left\{ \begin{array}{l} v(\lambda, t; r) \\ p(\lambda, t; r) \\ \pi(\lambda, t; r) \end{array} \right\} dr \quad (2.41)$$

Analog zu den Gleichungen (2.28) und (2.29) folgt daraus:

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha + \nabla \cdot \alpha \mathbf{v}_D = 0 \quad (2.42)$$

$$\rho_D \alpha \left(\frac{\partial}{\partial t} v_D + v_D \cdot \nabla v_D \right) = -\alpha \nabla p_c + \nabla \cdot \alpha \pi_D^E + \alpha \rho_D g + \alpha \kappa \mu_c D(\alpha) \left[\frac{v_c}{a^2} - \frac{1}{\alpha} \int_{r_s}^{r_1} \frac{\phi v}{r^2} dr \right] \quad (2.43)$$

Gleichungen (2.42) und (2.43) sind die Bewegungsgleichungen für die disperse Phase mit kontinuierlicher Verteilung der Flockenradien.

2.6.2 Modell von Friedlander

2.6.2.1 Koagulation

Die Kollision von Partikel in einer Strömung wird durch den Transport der Partikel mit der Strömung (turbulente Geschwindigkeitsgradienten) und den Partikeleigenbewegungen infolge Sinkens (differentielles Absinken) und molekularen Bewegungen (Brown-sche Molekularbewegung) bestimmt. Der Gewinn von Flocken der Größe k pro Zeiteinheit durch Kollisionen kleinerer Partikel bzw. Flocken der Größen i und j kann mit Hilfe einer Kollisionsfrequenz beschrieben werden. Dabei wird vorausgesetzt, dass nur binäre Kollisionen, also die Kollision zweier Partikel oder Flocken, zur Koagulation führt.

$$N_k = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} \beta_{ij} n_i n_j \quad (2.44)$$

N_k : Änderung der Flockenzahl der Größe k

β_{ij} : Kollisionsfrequenz

n_{ij} : Anzahl der Partikel der Größe i bzw. j

Für jeden der oben angegebenen Kollisionsmechanismen kann eine Kollisionsfrequenz spezifiziert werden. Die Kollisionsfrequenz ist von den Systemeigenschaften wie Dichte Temperatur und dem Durchmesser der beteiligten Partikel bzw. Flocken abhängig.

Friedlander (1977) ermittelte für die Brownsche Molekularbewegung, d.h. die thermische Eigenbewegung der Partikel, in Abhängigkeit von Temperatur, Viskosität der Suspension, Partikelgröße und der Boltzmannkonstante Gleichung (2.45) für die Kollisionsfrequenz.

$$\beta_{ij} = \frac{2kT}{3\eta} \frac{(d_i + d_j)^2}{d_i d_j} \quad (2.45)$$

- k : Boltzmannkonstante
 T : Temperatur
 η : Viskosität
 d_i : Durchmesser des Partikels i

Aggregate, die infolge der Brownschen Molekularbewegung entstehen, haben nach Untersuchungen von Busch und Stumm (1968) eine zackige, ausgefrante Form und sind relativ instabil gegenüber Scherbeanspruchungen.

Unter differentiellem Absinken versteht man die Kollision von Partikeln infolge unterschiedlicher Sinkgeschwindigkeiten. Schnellere Partikel stoßen auf ihrem Weg nach unten mit langsameren zusammen. Die Kollisionsfrequenz ist demnach eine Funktion der relativen Sinkgeschwindigkeiten der Partikel und der Partikelgrößen. Wird für die Partikel eine Sinkgeschwindigkeit nach Stokes angenommen, sie also als kugelförmig und homogen idealisiert, ergibt sich die Kollisionsrate gemäß Friedlander (1977) zu:

$$\beta_{ij} = \frac{\pi g}{72\eta} (d_i + d_j)^2 (\Delta\rho_i d_i^2 - \Delta\rho_j d_j^2) \quad (2.46)$$

- mit: $\Delta\rho_i = \rho_i - \rho_w$
 ρ_i : Dichte des Partikels i
 ρ_w : Dichte des Trägerfluids

Der Transport der Partikel mit der Strömung führt ebenfalls zu Kollisionen, da sich die Partikel infolge der turbulenten Geschwindigkeitsgradienten mit unterschiedlichen Relativgeschwindigkeiten bewegen. Friedlander entwickelte für die hieraus resultierende Kollisionsrate die Gleichung (2.47).

$$\beta_{ij} = \frac{G}{6} (d_i + d_j)^3 \quad (2.47)$$

- mit: $G = \sqrt{\frac{\epsilon}{\nu}}$

G ist dabei der mittlere Geschwindigkeitsgradient auf der molekularen Ebene, d.h. ein Maß für den Geschwindigkeitsgradienten in dem die Flocke bewegenden Wirbel. Ag-

gregate, die infolge turbulenter Geschwindigkeitsgradienten entstehen sind nahezu kugelförmig und gegenüber Scherbeanspruchung relativ stabil.

Der Koagulationsprozess wird durch die thermische Bewegung sehr kleiner Partikel initiiert, die sich zu größeren verbinden. Ab einer Flockengröße von 1 μm wird die Koagulation infolge der mikroskaligen Turbulenz dominierend. Lediglich für sehr große Flocken ist, zumindest bei einer Sinkgeschwindigkeit nach Stokes, das differentielle Absinken entscheidend.

Da nicht alle Kollisionen auch zur Partikelkoagulation führen, wird ein Parameter A_{ij} eingeführt, der die Effektivität der Kollision beschreibt.

$$\beta_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} A_{ij} \beta_{ij} n_i n_j \quad (2.48)$$

Dieser Parameter A_{ij} hängt von den kohäsiven Eigenschaften der Partikel ab, die für die eigentliche Koagulation verantwortlich sind und die Flocke stabilisieren. Sie werden, besonders bei einem so komplexen Agglomerat wie Belebtschlamm, stark von dem physiochemischen Aufbau der Flocke beeinflusst, der wiederum durch die Abwasserzusammensetzung und das Flockenalter charakterisiert wird.

2.6.2.2 Zerbrechen von Flocken

Das Zerbrechen von Flocken wird durch Interaktionen zwischen Partikeln und zwischen Partikeln und dem Trägerfluid bestimmt. Es kommt zu einem Zerbrechen der Flocke infolge von strömungsinduzierten Schubspannungen bzw. infolge von Partikelinteraktionen. Wie bei den Kollisionsmechanismen werden auch hier Wahrscheinlichkeitsfunktionen zur Quantifizierung eingesetzt. Der Verlust von Flocken der Größe k pro Zeiteinheit infolge strömungsinduzierter Schubspannungen wird berechnet durch:

$$N_k = B_k n_k \quad (2.49)$$

N_k : Verlust von Flocken der Größe k

B_k : Bruchwahrscheinlichkeit der Flocken der Größe k

n_k : Anzahl der Flocken der Größe k

Für stoßinduziertes Zerbrechen ergibt sich der Term:

$$N_k = n_k \sum_{i=1}^{\infty} C_{ik} \beta_{ik} n_i \quad (2.50)$$

Der Parameter C_{ik} gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass eine Flocke i nach dem Zusammenstoßen mit der Flocke k zerbricht. Die beiden Bruchwahrscheinlichkeiten bzw. Flockenstabilitäten hängen zum einen ähnlich dem Parameter A_{ij} von den kohäsiven Partikeleigenschaften und der Flockengröße, zum anderen aber auch von der Stoßenergie ab.

2.6.3 Flokkulationsmodell nach Winterwerp

Winterwerp (1999) entwickelte ein Flokkulationsmodell für kohäsive Sedimente, mit dem es möglich ist die Absatzvorgänge in einem Ästuar nachzubilden. Der Begriff Flokkulation beinhaltet hierbei sowohl den Koagulationsprozess als auch das Zerbrechen von Flocken. Im Koagulationsmodell wird die Brownsche Molekularbewegung vernachlässigt, da der Einfluss der Molekularbewegung auf die Bildung von Aggregaten in Ästuaren und Küstengebieten äußerst gering ist (McCave, 1984; Van Leussen, 1994). Das Zerbrechen einer Flocke wird nur auf das Einwirken von strömungsinduzierten Schubspannungen zurückgeführt, d.h. Kollisionen von Flocken mit Flocken, die zu einem Zerbrechen führen können, werden nicht berücksichtigt.

2.6.3.1 Koagulation

Levich (1962) untersuchte den Koagulationsprozess in einer turbulenten Strömung mit Partikeln kleiner als die Kolmogorovlänge λ . In dieser Größenordnung sind Viskositätseffekte maßgebend, und er nahm an, dass kleine Wirbel von der Größenordnung λ_a ($\lambda_a \geq \lambda$) die Partikel zur Kollision bringen. Integriert man die Diffusionsgleichung von Smoluchowski über ein finites Volumen $\gg \lambda$, so erhält man einen Ausdruck für die Koagulationsrate in einem turbulenten Fluid:

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{3}{2}(1 - \phi_*) e_c \pi e_d G D^3 N^2 \quad (2.51)$$

In Gleichung (2.37) ist t die Zeit, e_c ist ein Effizienzparameter, der die Tatsache berücksichtigt, dass nicht alle Partikelkollisionen zu einer Koagulation führen. Der Parameter e_d berücksichtigt die Effizienz des diffusiven Transports. Der Parameter e_c ist von den physikalischen und chemischen Eigenschaften des Sediments, des Wassers, der organischen Komponenten und Form und Struktur der Flocken abhängig (Gregory, 1997). Empirisch ermittelte Werte für e_c können beispielsweise bei Van Leussen (1994) nachgelesen werden. G ist der Geschwindigkeitsgradient, D der Flockendurchmesser und N die Anzahl von Partikeln pro Volumeneinheit. Der Parameter ϕ_* ist definiert als $\phi_* = \min\{1, \phi\}$, wobei ϕ die Volumenkonzentration der gebildeten Aggregate ist.

Mit Ausnahme des Faktors $(1 - \phi_*)$ wird Gleichung (2.51) in vielen Arbeiten über Flokkulation benutzt. Vicsek (1992) hat gezeigt, dass diese Gleichung für RLCCA Prozesse gültig ist und den Koagulationsprozess von kohäsiven Sedimenten gut wiedergibt.

2.6.3.2 Zerbrechen von Flocken

In Winterwerps Modell wird Flockenzerbrechen durch Kollisionen mit anderen Flocken oder Partikeln vernachlässigt. Betrachtet wird lediglich das Zerbrechen durch strömungsinduzierte Schubspannungen. Diese Art des Zerbrechens erfolgt kontinuierlich. Winterwerp entwickelte hierfür die Gleichung (2.52).

$$\frac{dN}{dt} = ae_b G \left(\frac{D - D_p}{D_p} \right)^p \left[\frac{\mu G}{F_y D^2} \right]^q N \quad (2.52)$$

In dieser Gleichung bedeuten D der Flockendurchmesser, D_p der Partikeldurchmesser, μ die Viskosität und F_y die Flockenbindungskraft. Die Parameter a , p und q sind empirische Werte, die über experimentelle Versuche ermittelt werden müssen. Der Parameter e_b ist ein Effizienzparameter für den Prozess des Flockenzerbrechens.

Kapitel 3

Flokkulation in einem hydrodynamisch–numerischen Modell

3.1 Flokkulation in einem Absetzbehälter

Als Anwendungsbeispiel für Flokkulation in einem hydrodynamisch–numerischen Modell, soll das Verhalten einer volldurchmischten Wasser–Schlamm–Lösung in einem Absetzbehälter simuliert werden. Zur Modellierung wird das Programmsystem FLUENT verwendet. Als Mehrphasenmodell wird das Algebraic–Slip–Mixture–Modell (ASM) eingesetzt. Als Turbulenzmodell wurde ein RNG– k – ϵ Modell benutzt. Der Behälter für den Absetzvorgang ist 0.30 m hoch und hat einen Durchmesser von 0.065 m. Der Phasenanteil des Schlammes beträgt zu Simulationsbeginn 30% (Abbildung 5) und der Flockendurchmesser ist $2 \cdot 10^{-4}$ m. Die Berechnung wird mit einem zweidimensionalen Modell durchgeführt, d.h. der Zylinder wird als Rechteck idealisiert. Es wird ein strukturiertes Berechnungsgitter mit einer Seitenlänge von 1.0 mm verwendet. Als Flokkulationsmodell wurde der Ansatz von Winterwerp implementiert. Der erste Rechenlauf wurde mit den Parametern durchgeführt, die Winterwerp für die Flokkulation in einem Ästuar verifiziert hat (Tabelle 2). Die zeitliche Entwicklung des Schlammspiegels und der Flockengröße zeigen Abbildungen 5–11.

Parameter	Beschreibung	Wert
e_c	Koagulationswahrscheinlichkeit	$1 \cdot 10^{-3}$
e_d	Diffusionsparameter	$8 \cdot 10^{-1}$
F_y	Flockenbindungskraft	$1 \cdot 10^{-10} \text{N}$
n_f	Fraktaldimension	1,75
D_p	primärer Partikeldurchmesser	$2.5 \cdot 10^{-5} \text{m}$
ae_b	Effizienzparameter	$2 \cdot 10^{-5}$

Tabelle 2: Parameter nach Winterwerp

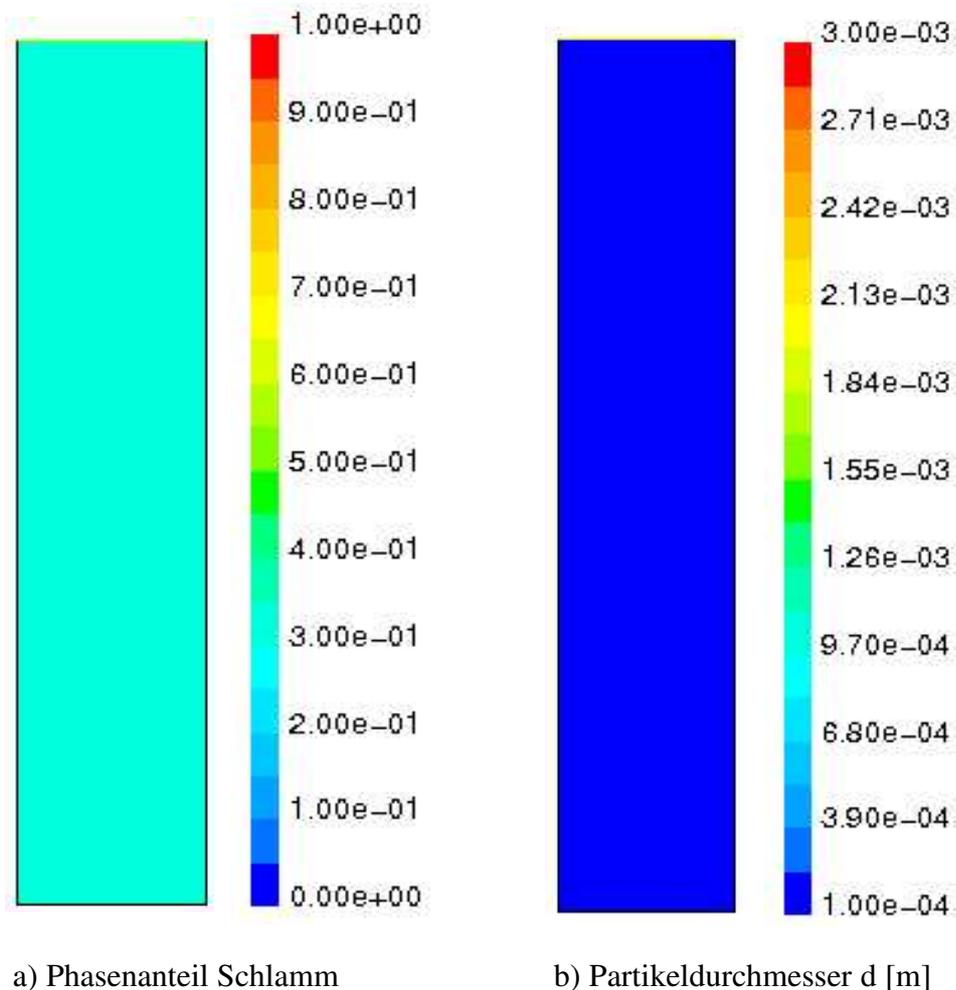


Abbildung 5: Simulationsergebnisse nach $t=0\text{s}$

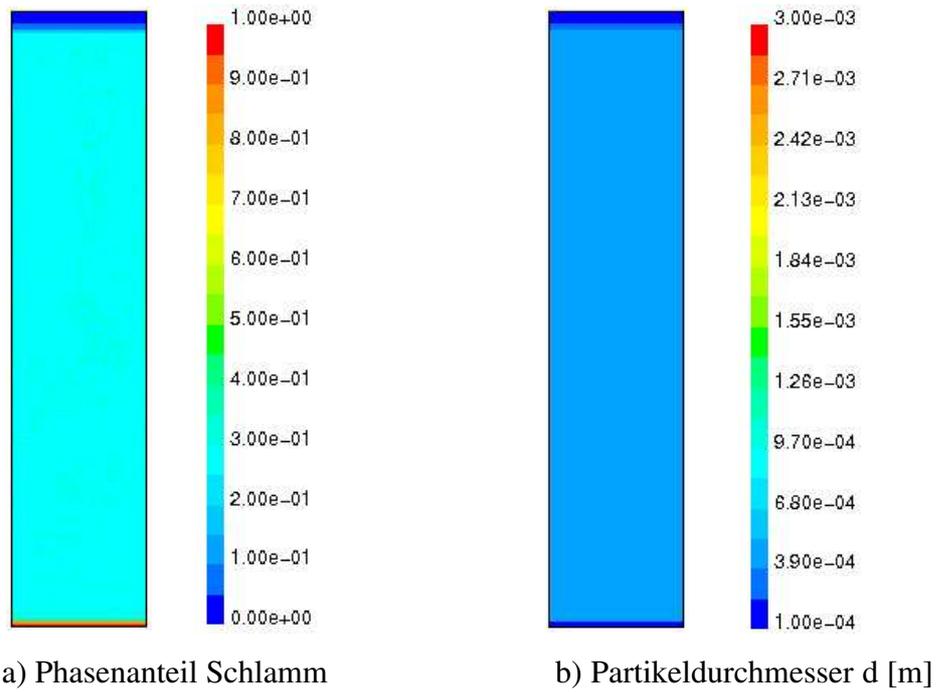


Abbildung 6: Simulationsergebnisse nach t=60s

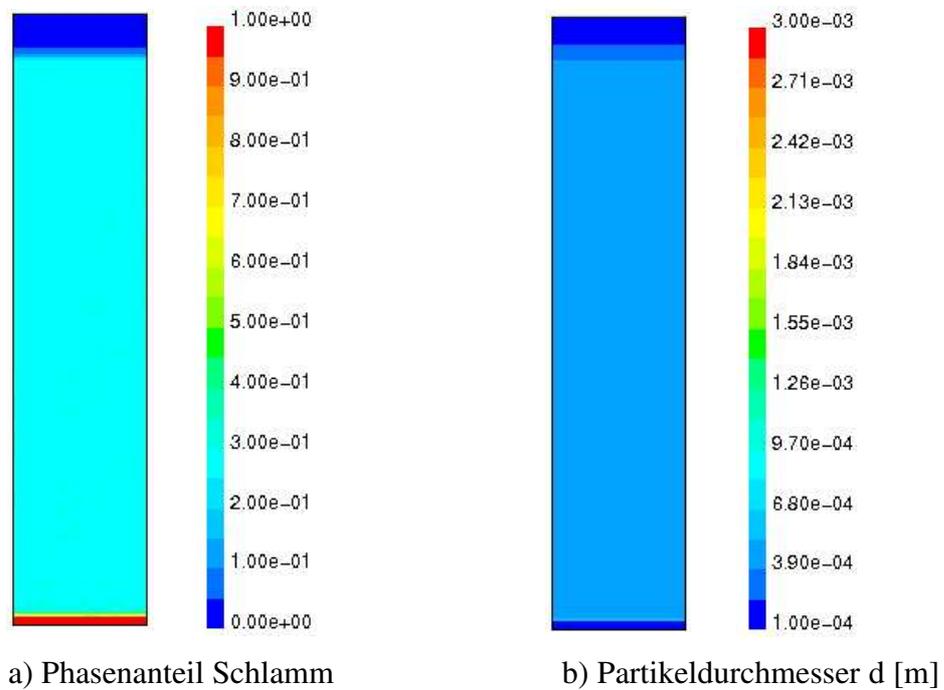
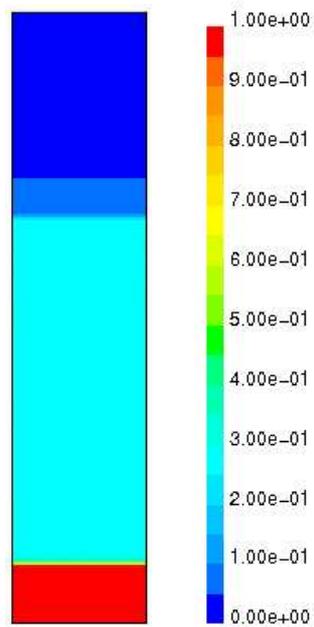
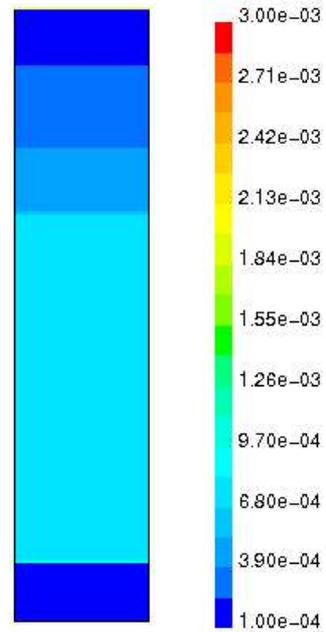


Abbildung 7: Simulationsergebnisse nach t=120s

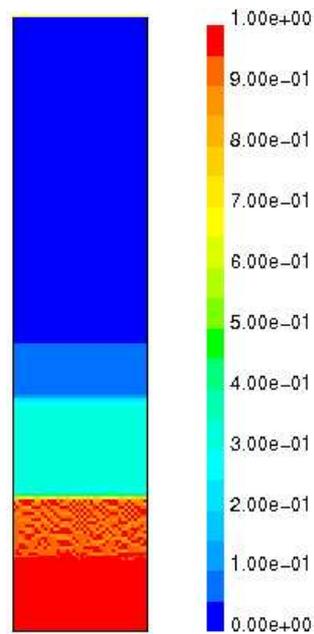


a) Phasenanteil Schlamm

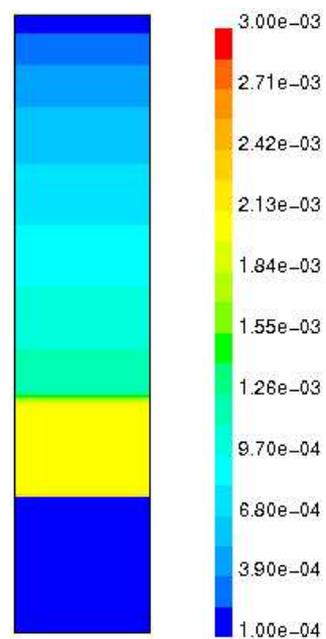


b) Partikeldurchmesser d [m]

Abbildung 8: Simulationsergebnisse nach t=540s



a) Phasenanteil Schlamm



b) Partikeldurchmesser d [m]

Abbildung 9: Simulationsergebnisse nach t=600s

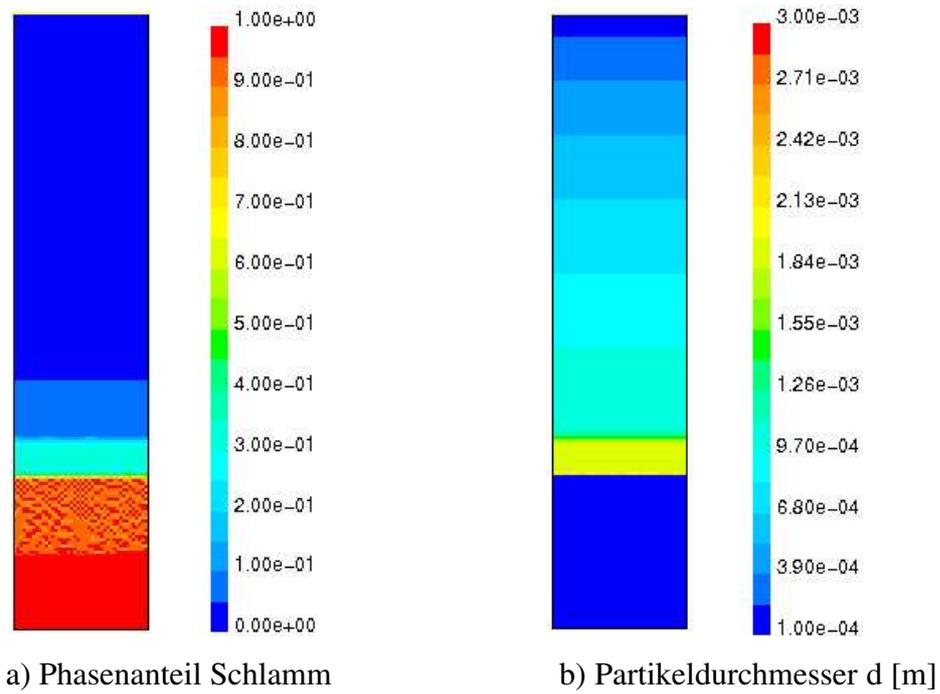


Abbildung 10: Simulationsergebnisse nach t=610s

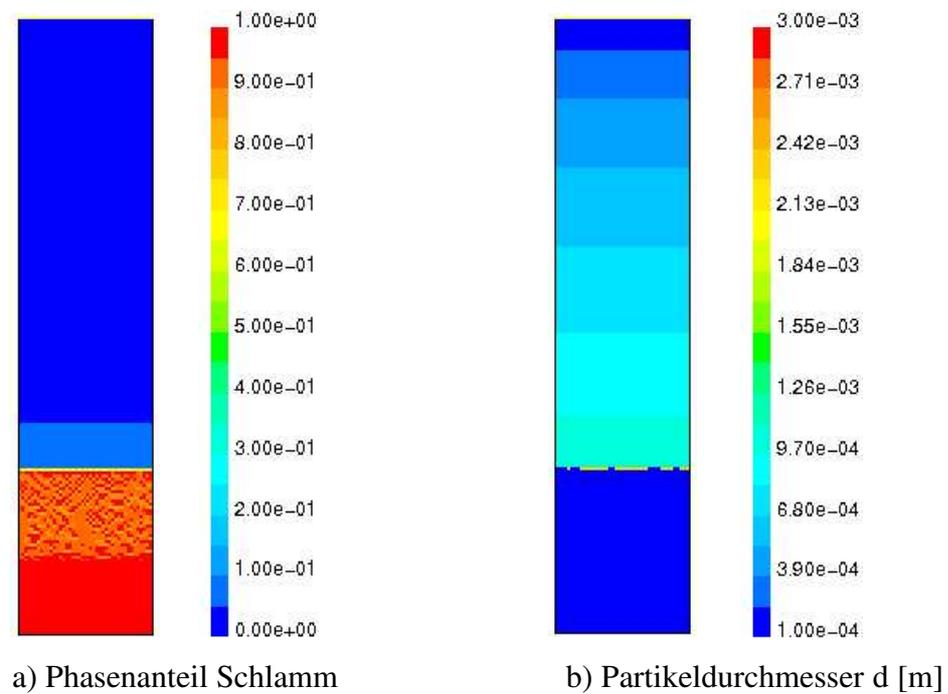


Abbildung 11: Simulationsergebnisse nach t=620s

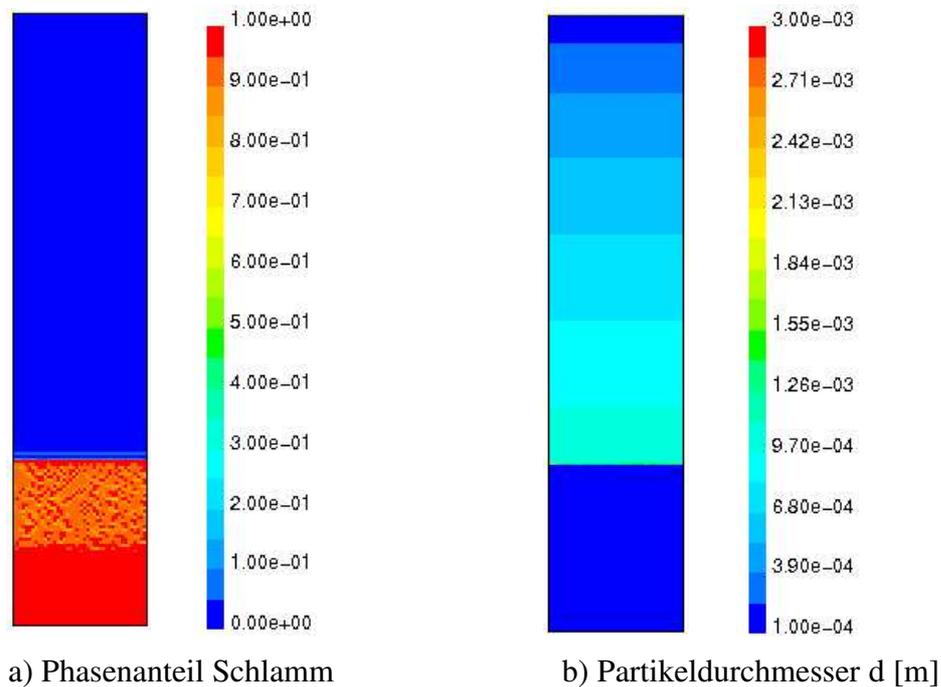


Abbildung 12: Simulationsergebnisse nach t=630s

Anhand der Abbildungen kann man erkennen, dass der Schlamm flokkuliert und die Flockengröße mit der Zeit zunimmt. Mit steigender Flockengröße beschleunigt sich der Absetzvorgang, wie man an Abbildung 8–11 erkennen kann. Der Durchmesser der Flocken erreicht dabei etwa das Zehnfache seiner ursprünglichen Größe. Da die Größe der Flocken bei $t=0s$ nicht der Größe der primären Partikel entsprach, kann der zeitliche Verlauf der Simulation nicht korrekt eingeordnet werden. Zwar liegen in der voll durchmischten Lösung zum Zeitpunkt $t=0s$ nicht nur primäre Partikel vor, allerdings ist die Anfangsgröße der Flocken hier mit $2 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ schon relativ hoch. Aus Gründen der Rechenzeit ist eine Rechnung mit einem kleineren Flockendurchmesser zu Simulationsbeginn nicht möglich.

Da für diesen Absetzversuch zur Bearbeitungszeit noch keine Verifikationsdaten aus physikalischen Versuchen vorlagen, ist eine Aussage über die Richtigkeit des zeitlichen Verlaufs nicht möglich. Gleiches gilt auch für die Flockengrößen, die von dem numerischen Flokkulationsmodell berechnet wurden.

In einer weiteren Rechnung wurde ein Parameter variiert, um das Verhalten des Modells bei gänderten Parameterwerten zu beobachten. Der geänderte Parameter war in diesem Fall die Flockenbindungskraft. Die Abbildungen 12–16 zeigen den Verlauf des Absetz-

vorgangs mit einer Flockenbindungskraft von $F_y = 1 \cdot 10^{-9}$ N. Alle anderen Parameter wurden beibehalten.

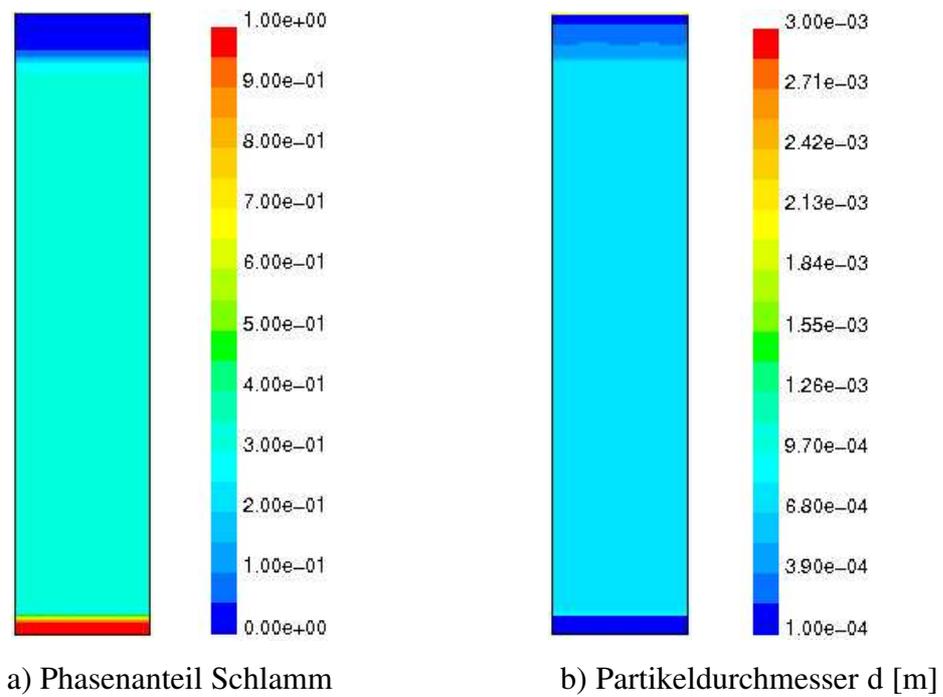


Abbildung 13: Simulationsergebnisse nach $t=60$ s

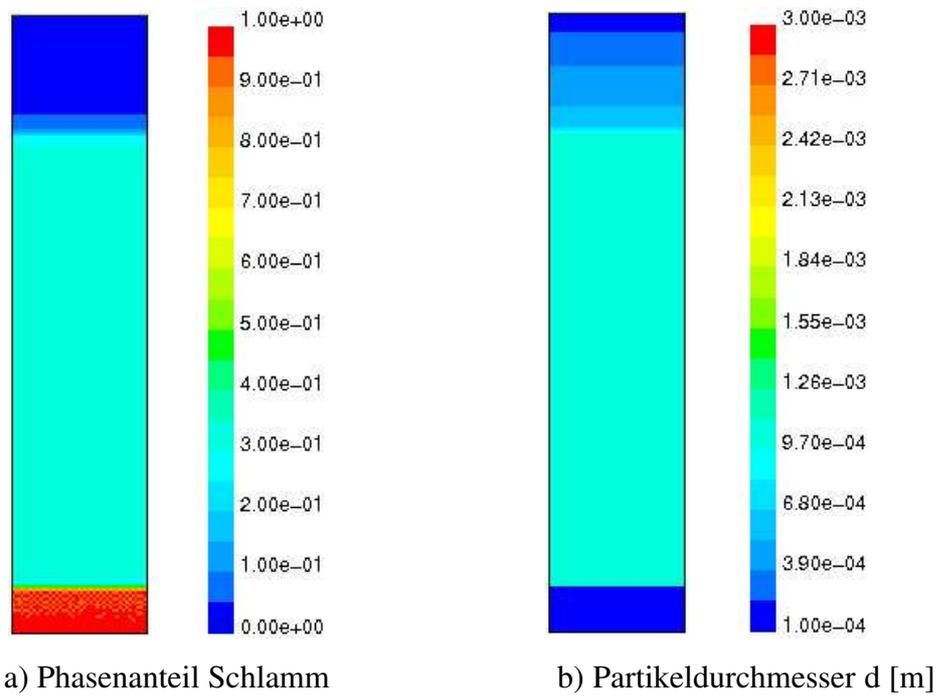


Abbildung 14: Simulationsergebnisse nach t=120s

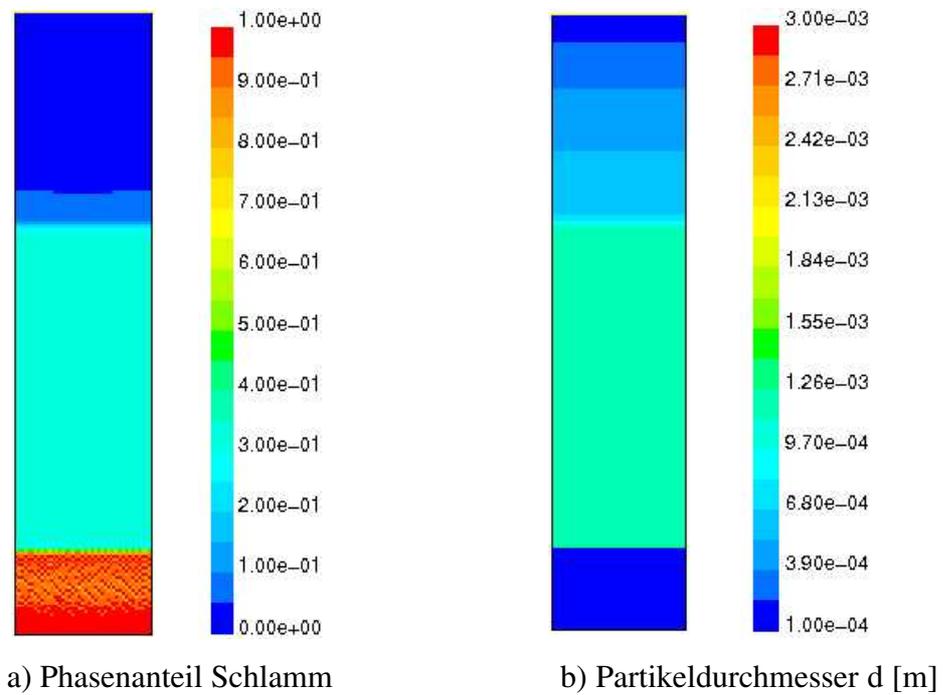
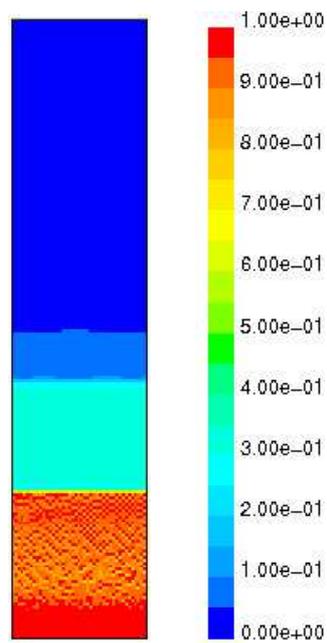
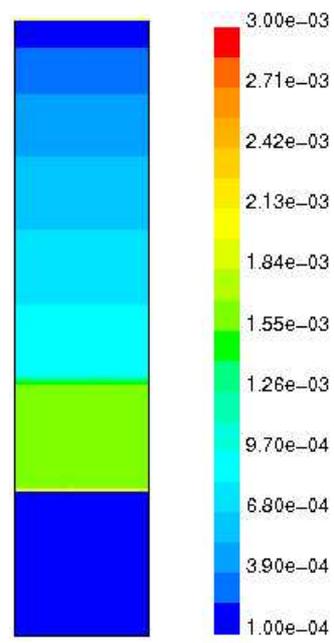


Abbildung 15: Simulationsergebnisse nach t=180s

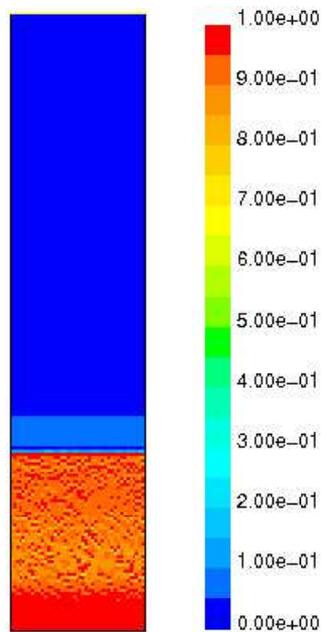


a) Phasenanteil Schlamm

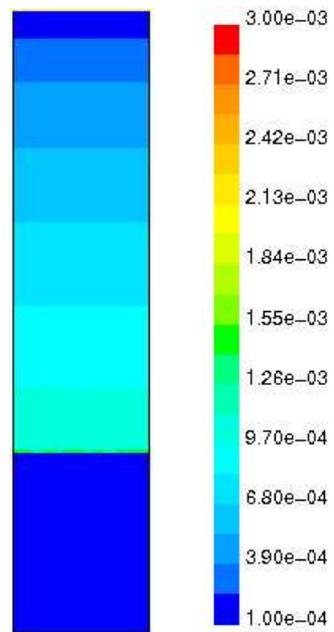


b) Partikeldurchmesser d [m]

Abbildung 16: Simulationsergebnisse nach t=240s



a) Phasenanteil Schlamm



b) Partikeldurchmesser d [m]

Abbildung 17: Simulationsergebnisse nach t=270s

Man kann an den Abbildungen erkennen, dass der Absetzvorgang wesentlich schneller voranschreitet. Aufgrund der größeren Flockenbindungskraft zerbrechen weniger Flocken und das Absetzen wird beschleunigt. Die Erhöhung der Bindungskraft um eine Zehnerpotenz bewirkt hierbei eine Beschleunigung des Absetzvorgangs um etwas mehr als das Doppelte.

Bei einer Simulation mit einer Flockenbindungskraft von $F_y = 1 \cdot 10^{-8} \text{ N}$ ist der Absetzvorgang bereits nach 90s beendet. Die Flockenbindungskraft hat also einen relativ starken Einfluss auf die Dauer des Absetzvorgangs.

Weitere Variationen der verschiedenen Parameter konnten aus Rechenzeitgründen in dieser Arbeit nicht durchgeführt werden.

Kapitel 4

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden Ansätze zur Modellierung von Flokkulation von verschiedener Komplexität vorgestellt. Die grundlegende Unterscheidung solcher Modelle kann nach der Art der Flockengrößenverteilung erfolgen. Modelle mit diskreter Größenverteilung des Flockenradius nehmen in verschiedenen definierten Größenbereichen die diesen Bereichen zugeordneten Flocken auf. Diese Modelle sind eine Vereinfachung des tatsächlichen Zustands der kontinuierlichen Größenverteilung, bei der die Anzahl der Flockengrößen gegen Unendlich geht. Zu dieser kontinuierlichen Größenverteilung wurden verschiedene Ansätze vorgestellt, die die Existenz einer nahezu unendlichen Anzahl von verschiedenen Flockenradien in beispielsweise einem Nachklärbecken oder Ästuar berücksichtigen.

Bei der Simulation von Flockung in einem hydrodynamisch-numerischen Modell, kann auf den Einsatz eines Mehrphasenmodells nicht verzichtet werden, da die Partikelphase

einen direkten Einfluss auf die Fluidphase ausübt, der nicht vernachlässigt werden darf. Als Alternative zu den echten Mehrphasenmodellen, bei denen jede Flockengröße eine eigene Phase bildet, existieren vereinfachte Modelle, wie beispielsweise das hier vorgestellte ASM-Modell, bei dem nur eine Fluid- und eine Partikelphase berücksichtigt wird, wobei die Partikelphase Flocken aller Größenordnungen aufnimmt. Grundsätzlich lassen sich Flokkulations- und Absetzvorgänge mit diesem Modell simulieren. Allerdings wird von diesem Modell die Trägheitskraft, die auf die Partikel wirkt, nicht berücksichtigt. Wie stark die Ergebnisse durch das Fehlen dieser Trägheitskräfte verfälscht werden, müsste in Zukunft noch genauer untersucht werden.

Die durchgeführten Untersuchungen mit dem Flokkulationsmodell von Winterwerp zeigen, dass die Flockung einen signifikanten Einfluss auf die Dauer des Absetzvorgangs hat. Eine Erhöhung der Flockenbindungskräfte bewirkt, dass weniger Flocken zerbrechen und der Absetzvorgang insgesamt beschleunigt wird. Dieses Verhalten wird vom Modell richtig wiedergegeben. Um eine Aussage über die Qualität der numerischen Simulationen machen zu können, müsste ein Vergleich mit Versuchen aus einem physikalischen Modell durchgeführt werden. Dies gilt insbesondere, wenn das Flokkulationsmodell beispielsweise bei einem durchströmten Nachklärbecken angewendet werden sollte. Hier wären entsprechende Messdaten zur Kalibrierung des numerischen Modells unerlässlich.

Literaturverzeichnis

- Banerjee, S., 1980. Separated flow models–II. *Int. J. Multiphase Flow* 6.
- Busch, P.L., Stumm, W., 1968. Chemical interactions in the aggregation of bacteria. *Division of Engineering and Applied Physics, Vol. 2.*
- Caracklis, W.G., Marshall, K.C., 1990. Biofilms. John Wiley & Sons, Inc, New York.
- Delhaye, J.N., Achard, J.L., 1976. On the use of averaging operators in two phase flow modelling. OECD INEA Specialists Meeting, on Transient Two–Phase Flow, Toronto, 3.–4. August 1976.
- Friedlander, S.K., 1977. Smoke, Dust and Haze. John Wiley & Sons, New York, London, Sydney, Toronto.
- Greenspan, H.P., Ungarish, M., 1982. On hindered settling of particles of different sizes. *Int. Journal of Multiphase Flow*, Vol. 8, No. 6.
- Gregory, J., 1983. Physical Properties. *In Sludge characteristics and behaviour*, edited by J.B. Carberry and A.J. Englande, Martinus Nijhoff Publishers, Boston The Hague Dordrecht Lancaster.
- Gregory, J., 1997. The density of particle aggregates. *Water Science Technology*, Vol. 36, No. 4.
- Güde, H., 1996. Wechselbeziehungen Bakterien–Protozoen. Ein Beitrag zur ökosystemaren Betrachtungsweise der biologischen Abwasserreinigung. Lemmer et al, Ökologie der Abwasserorganismen, Springer Verlag.
- Hunt, J.R., 1980. Prediction of oceanic particle size distributions from coagulation and sedimentation mechanisms. *In Advances in chemistry series No. 189 – particles in water. Edited by M.D. Kavanugh and J.O. Keckie.* American Chemical Society.
- Ishii, M., 1975. Thermo–Fluid Dynamic Theorie of Two–Phase Flow. Eyrolles, Paris.

-
- Krishnappan, B.G., 1990. Modelling of settling and flocculation of fine sediments in still water. *Canadian Journal of Civil Engineering*, Vol. 17.
- La Mer, V.K., 1964. Coagulation Symposium Introduction. *J. Colloid Sci.* 19.
- Levich, V.G., 1962. Physico–chemical Hydrodynamics. Prentice Hall, Inc.
- McCave, I.N., 1984. Size spectra and aggregation of suspended particles in the deep ocean. *Deep Sea Research*, Vol. 31, No. 4.
- Pearson, H.J., Valioulis, I.A., List, E.J., 1984. Monte Carlo simulation of coagulation in discrete particle–size distributions. Part 1. Brownian motion and fluid shearing. *Journal of Fluid Mechanics*. Vol. 143.
- Smith, T.N., 1965. The differential sedimentation of two different species. *Trans. Inst. Chem. Engrs* 43.
- Stuhmiller, J.H., 1977. The influence of interfacial pressure forces in the character of two–phase flow model equations, *Int. J. Multiphase Flow* 3.
- van Leussen, W., 1988. Aggregation of Particles, Settling Velocities of Mud Floccs. A Review. *Physical Process in Estuaries*, edited by J. Dronkers and W. van Leussen. Springer Verlag, Berlin Heidelberg.
- van Leussen, W., 1994. Estuarine macroflocs and their role in fine grained sediment transport. Ph.D. thesis, University of Utrecht.
- Vicsek, T., 1992. Fractal growth phenomena. World Scientific, Singapore.
- Winterwerp, H., 1999. On the dynamics of high–concentrated mud suspensions. Ph.D. thesis, Faculty of Civil Engineering and Geosciences, Delft University of Technology.