

Aqua vita est !

Studiengang: Umweltingenieurwesen M.Sc.

Modul

Wasseraufbereitungstechnologien

Hydrochemie der Wasseraufbereitung

Inhalt: 6. Reaktoren und Filter



Definitionen

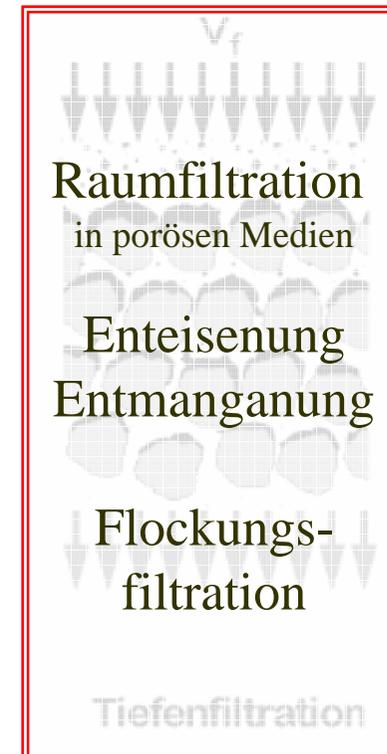
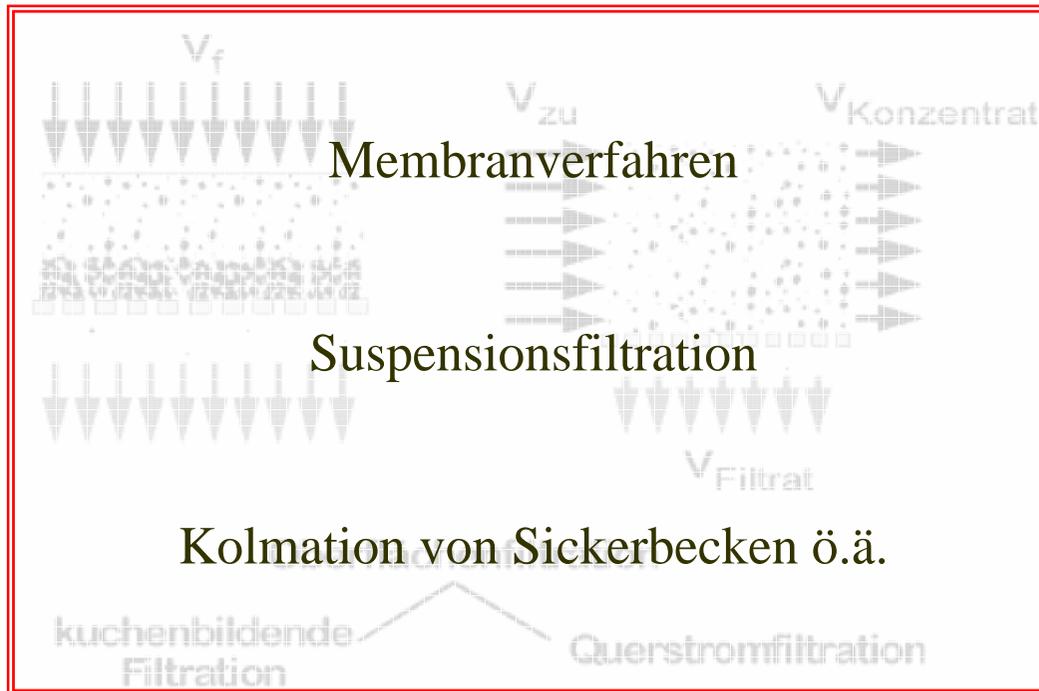
Der Begriff der Filtration wird meist für die Partikelabtrennung in dafür vorgesehenen durchströmten Apparaturen (Filter, Siebe, ...) angewandt.

Im Gegensatz zur Sedimentation werden die abgetrennten Stoffe in Strömungsrichtung oder zurückgehalten und müssen dort meist durch Regeneration wieder herausgeholt werden.

Technische Filter bestehen in der Regel aus einem mit den Filtermaterialien (Filtermedium) gefüllten Behälter durch den das zu behandelnde Wasser geleitet wird.

Analog lässt sich ein von Infiltrat oder Grundwasser durchströmter Bereich des Grundwasserleiters betrachten.

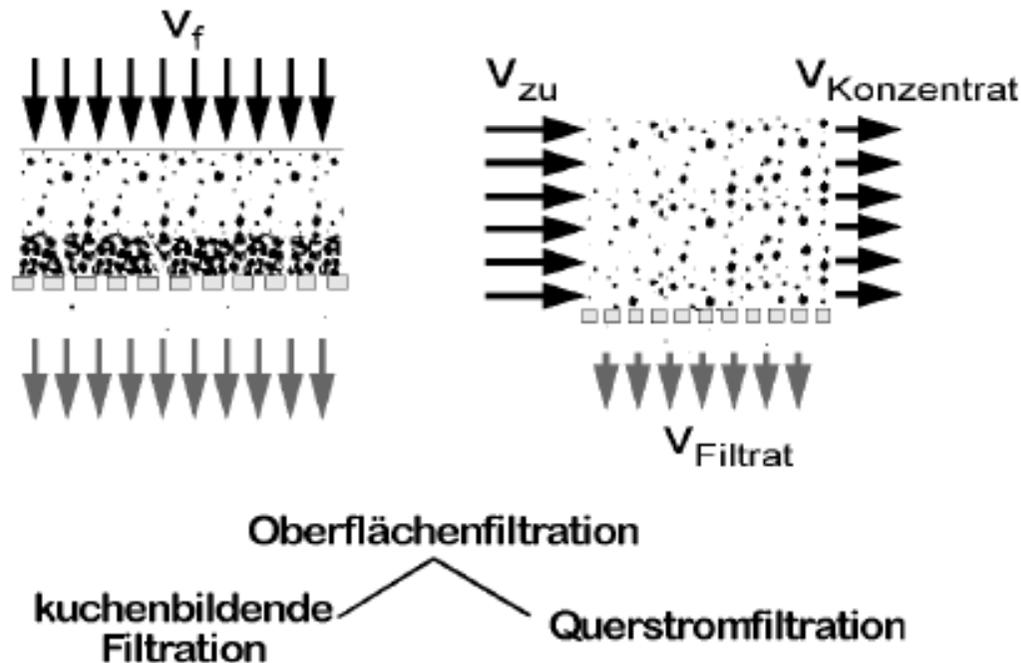
Definitionen:



/R3689-4/:

Schematische Darstellung der unterschiedlichen Wirkungsweise von kuchenbildender, Querstrom- und Tiefenfiltration.

Definitionen:



Bei der Tiefenfiltration werden die abzutrennenden kolloidalen oder feindispersen Wasserinhaltsstoffe im Innern, das heißt in der Tiefe einer porösen Filterschicht, zurückgehalten.

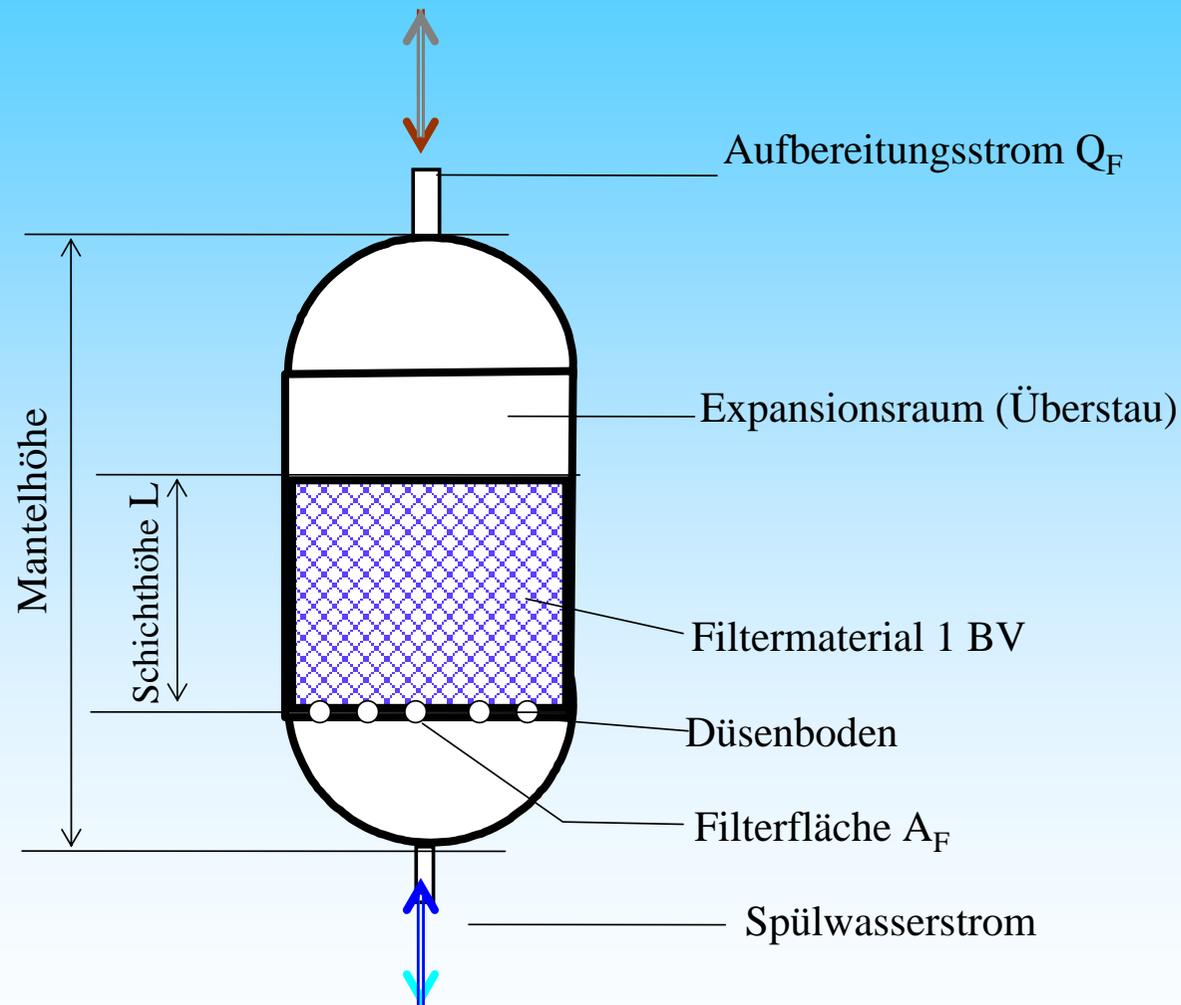
(deshalb auch Raumfilter genannt)

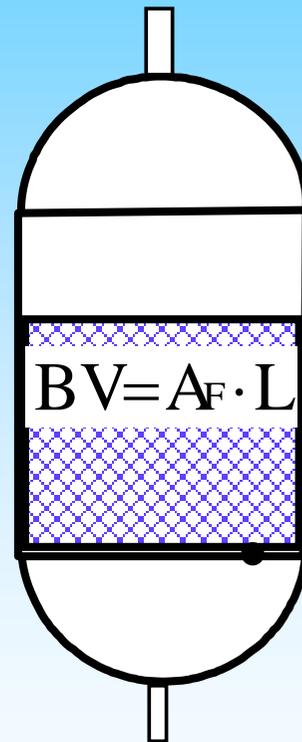
/R3689-4/:

Schematische Darstellung der unterschiedlichen Wirkungsweise von kuchenbildender, Querstrom- und Tiefenfiltration.

6. Reaktoren und Filter, Aufbau technischer Filter





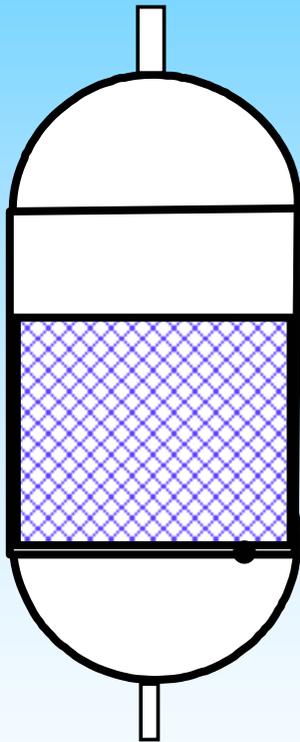


Filtergeschwindigkeit $v_f = \frac{Q_F}{A_F}$

Druckverlust h_f als Druckhöhe

fiktive Verweilzeit im Filterbett

$$t_F = \frac{BV}{Q_F} = \frac{L}{v_f}$$



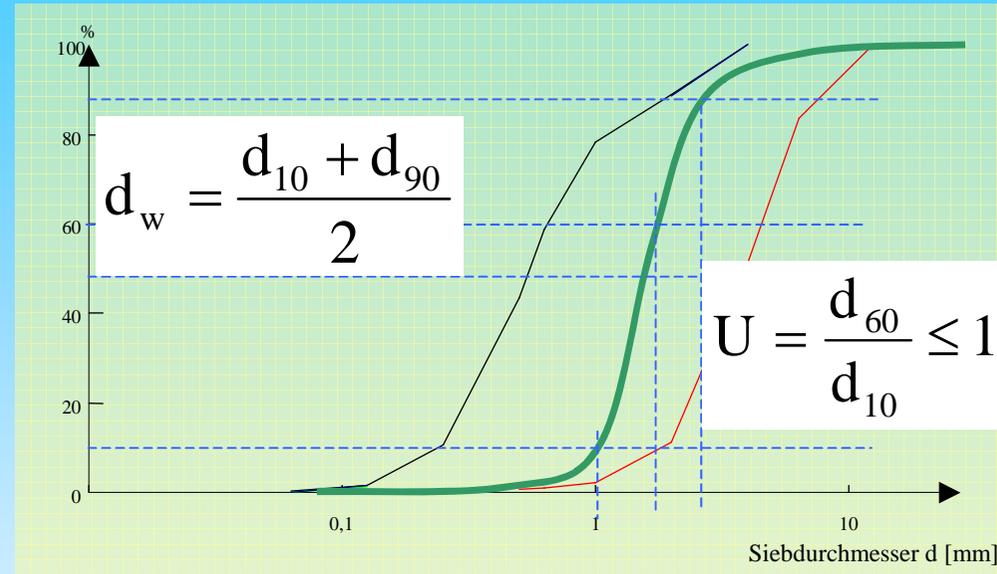
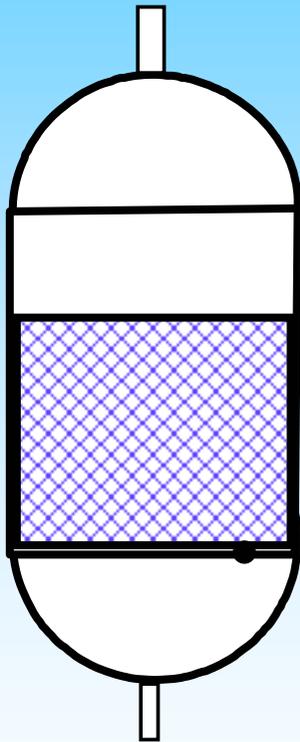
engklassierte chemisch inerte Körnungen:

- Quarzsand / -kies,
- Hydroanthrazit, Granatsand, Ilmenit
- Blähton, Bims und Kunststoffgranulate

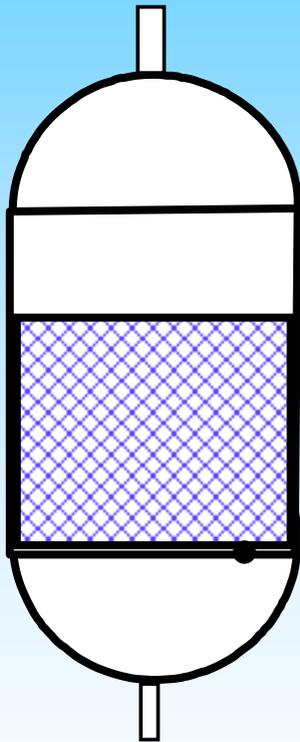
chemisch aktive Materialien :

- Calcitkörnungen
- halbgebrannte Dolomite
- Aktivkohlen,
- Ionenaustauscher

6. Reaktoren und Filter, Aufbau technischer Filter

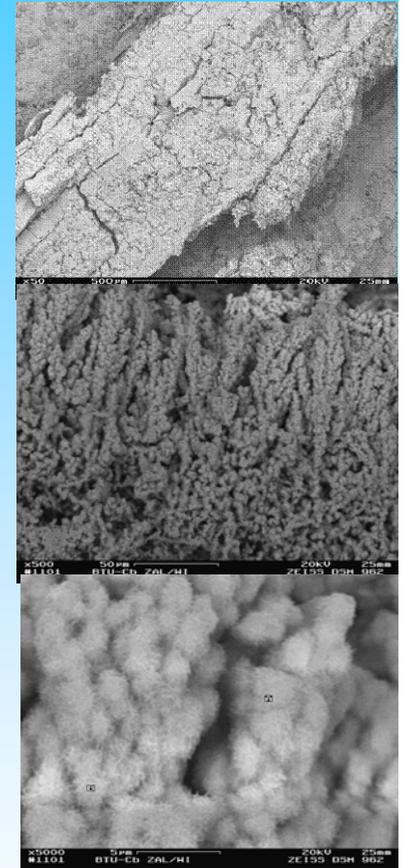
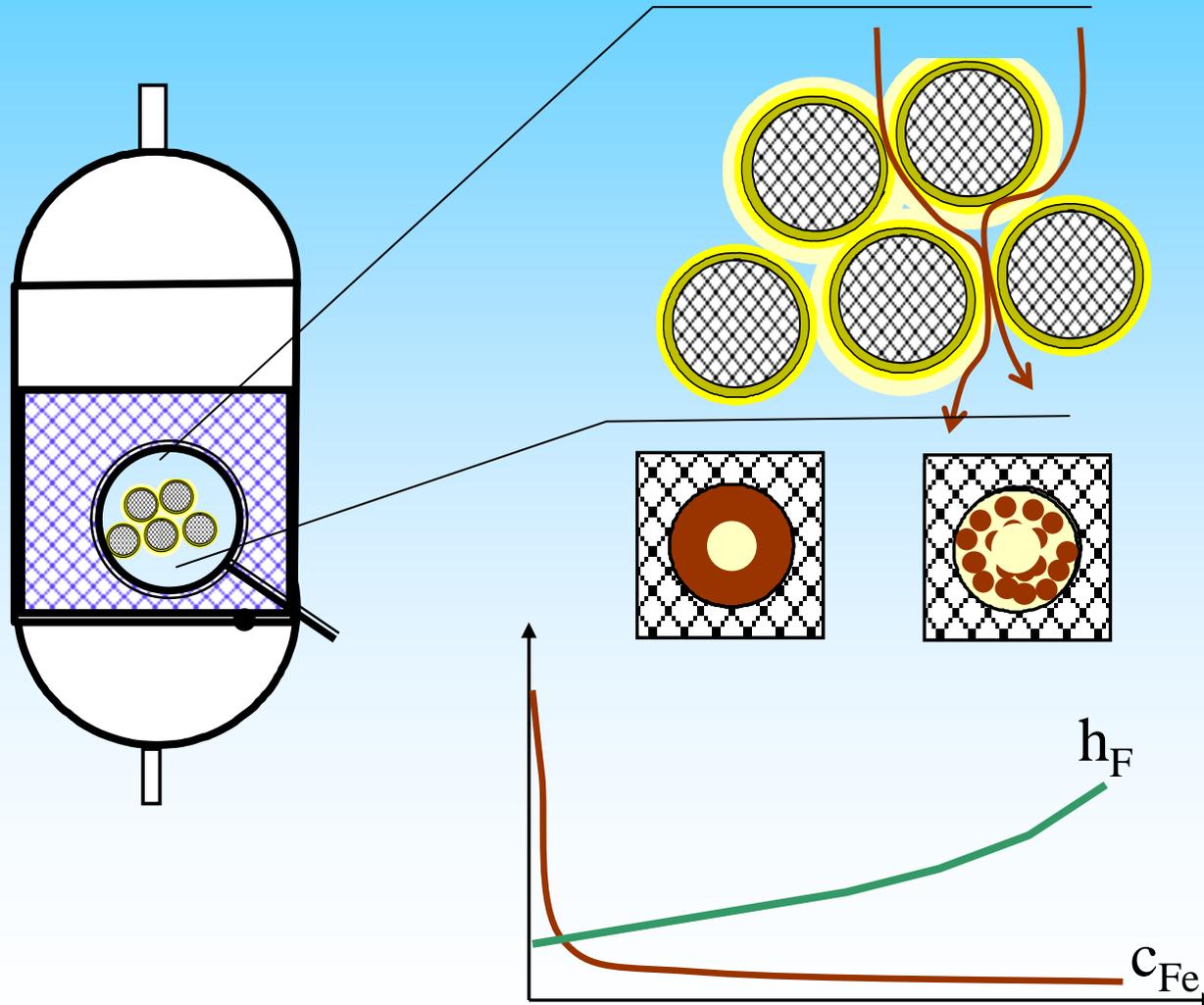


6. Reaktoren und Filter, Aufbau technischer Filter



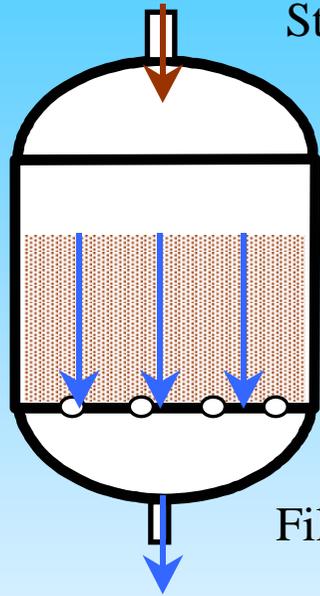
Material	Korngrenzen mm	d_w mm
Filtersande	0,4...0,63	0,52
	0,4...0,8	0,6
	0,63...0,8	0,72
	0,63...1,0	0,82
	0,71...1,25	1
	1,0...1,6	1,3
	1,0...2,0	1,5
	1,25...1,8	1,5
	1,6...2,0	1,8
Filterkiese	1,6...2,5	2,1
	2,0...3,15	2,6
	3,15...5,6	4,4

6. Reaktoren und Filter, Aufbau technischer Filter

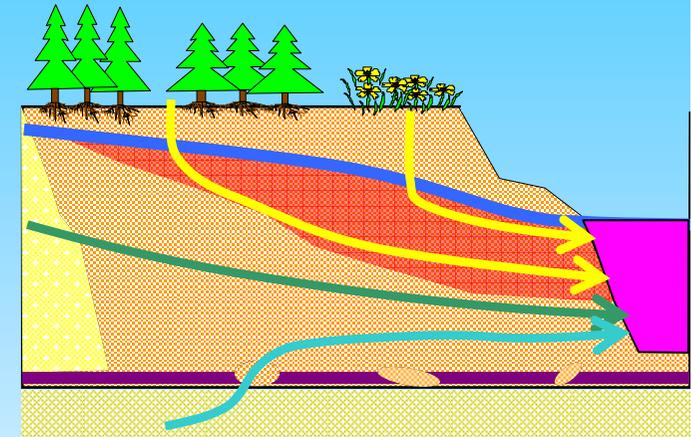
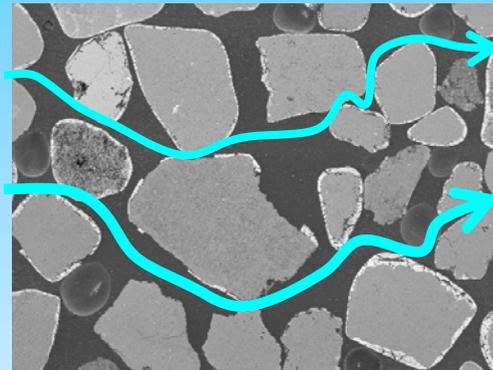


6. Reaktoren und Filter, Filtrationsvorgänge in der Umwelt

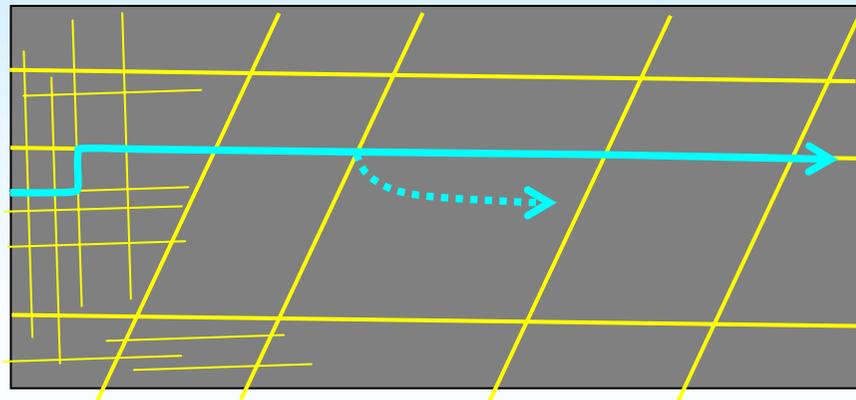
Strömung durch poröse Medien



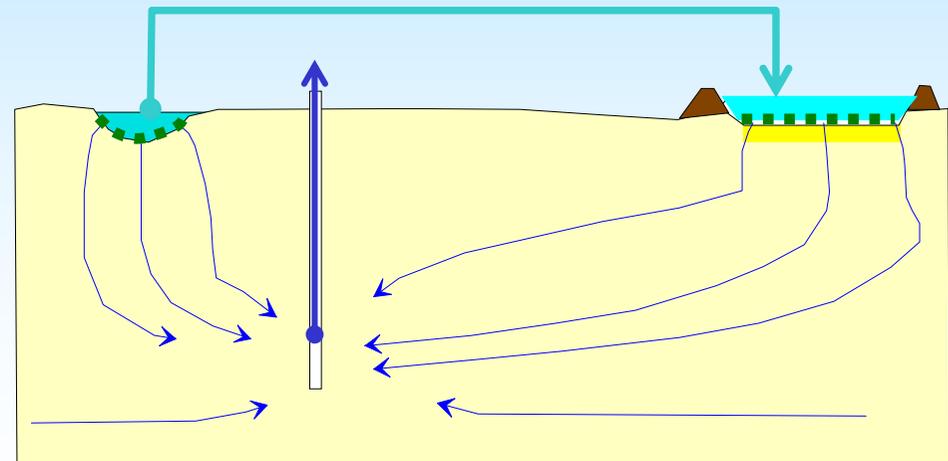
Filter



Porengrundwasserleiter



Kluftgrundwasserleiter (Festgestein)



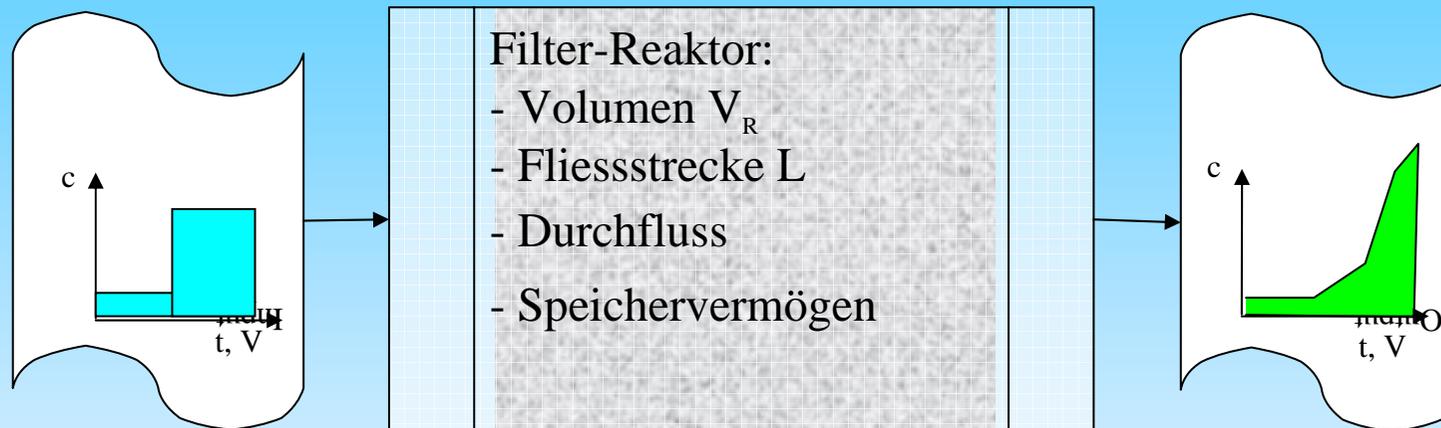
Naturnahe und technische Filtrationsvorgänge

Infiltrationsverfahren	v_f	Sättigung ¹	Evaporation/ Niederschlag	Kolmation	Infiltrationsflächen
	Richtwerte				
natürliche Grundwasserneubildung	250 mm/a	u	groß	unbedeutend	natürliche Böden und Biotope
Bodenfilter zur Regenwasserbehandlung	40 m/a	u / g	abnehmend	zunehmend	natürliche gut durchlässige Böden, aufgebrachte Filtersandschichten, bewachsen und unbewachsen
Grundwasseranreicherung mit niedriger Leistung	0,5 m/d	u / g			
(schnelle) Langsamsandfilter mit Oberflächenregenerierung	10 m/d	g	unbedeutend	verfahrensbestimmend	
Schnellfilter in der Wasseraufbereitung	15 m/h	g	keine		Filtersande
u-ungesättigte, g-gesättigte Vertikalströmung					

Maßstabsebenen von technischen und naturnahen Behandlungsprozessen

Filtergeschwindigkeit v_f

Eine als Filter definierte Fließstrecke wird als *black box* betrachtet, wobei eine Signaländerungen zwischen In- und Outputfunktion auftritt.



Der Massentransport wird aus der **allgemeinen Bilanzgleichung** abgeleitet.

Konzentrationsänderung = Konvektionsterm + Diffusionsterm + Reaktionsterm

$$\dot{c} = \left(\frac{\partial}{\partial t} c \right)_x = -\text{div}(\vec{v} \cdot c) + \text{div}(D \cdot \text{grad}(c)) + r$$

Allgemeine Bilanzgleichung:

Konzentrationsänderung = Konvektionsterm + Diffusionsterm + Reaktionsterm

$$\dot{\mathbf{c}} = \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{c} \right)_L = -\text{div}(\vec{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{c}) + \text{div}(\mathbf{D} \cdot \text{grad}(\mathbf{c})) + \mathbf{r}$$

mit

- c = Konzentration eines Stoffes
- x = Fließweg
- $\vec{\mathbf{v}}$ = Geschwindigkeitsvektor
- \mathbf{D} = Diffusionskonstante (auch als Vektor möglich)
- \mathbf{r} = Reaktionsgeschwindigkeit, Quellen, Senken
- n_p = spezifisches Porenvolumen

$$\dot{\mathbf{c}} = \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{c} \right)_L = - \frac{\partial(\mathbf{v} \cdot \mathbf{c})}{\partial L} + \frac{\partial^2(\mathbf{D} \cdot \mathbf{c})}{\partial L^2} + \mathbf{r}$$

Das Konvektionsglied bilanziert die Stoffströme als **Divergenz** der Stromvektoren, z.B. in den drei Raumdimensionen und der Konzentration am Punkt (x,y,z) als skalare Größe.

$$\operatorname{div}(\vec{v} \cdot \mathbf{c}) = \nabla(\vec{v} \cdot \mathbf{c}) = \left(\frac{\partial(\mathbf{v} \cdot \mathbf{c})}{\partial x} + \frac{\partial(\mathbf{v} \cdot \mathbf{c})}{\partial y} + \frac{\partial(\mathbf{v} \cdot \mathbf{c})}{\partial z} \right)$$

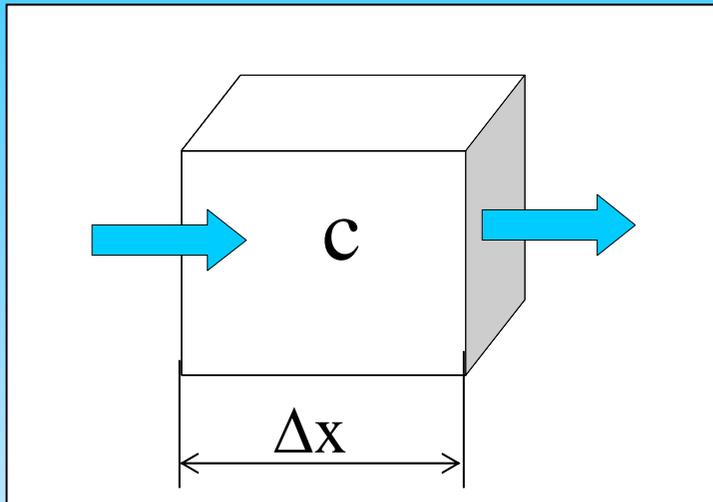
Eine positive Divergenz bedeutet eine negative Stoffbilanz, welche als negatives Vorzeichen in berücksichtigt wird.

Interpretiert man das Vektorfeld als Strömungsfeld, so gibt die Divergenz für jede Stelle an, wieviel mehr aus dieser Stelle hinausfließt als in sie hineinfließt.

Mithilfe der Divergenz lässt sich also herausfinden, ob und wo das Vektorfeld

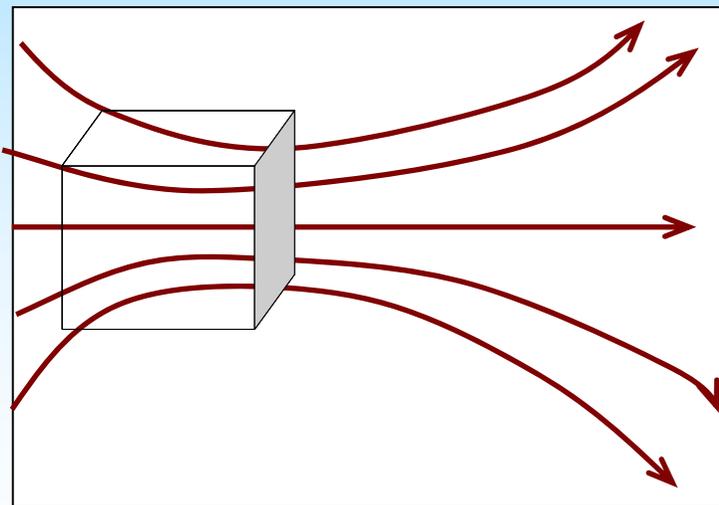
- Quellen (Divergenz größer als Null) oder
- Senken (Divergenz kleiner als Null) hat.

Ist die Divergenz überall gleich Null, so bezeichnet man das Feld als quellenfrei.



$$V_R \cdot \dot{c} = Q \cdot c_0 - Q \cdot c$$

$$\dot{c} = - \frac{v_f \cdot c - v_f \cdot c_0}{\Delta x}$$



$$\operatorname{div}(\vec{v} \cdot c) = \nabla(\vec{v} \cdot c) = \left(\frac{\partial(v \cdot c)}{\partial x} + \frac{\partial(v \cdot c)}{\partial y} + \frac{\partial(v \cdot c)}{\partial z} \right)$$

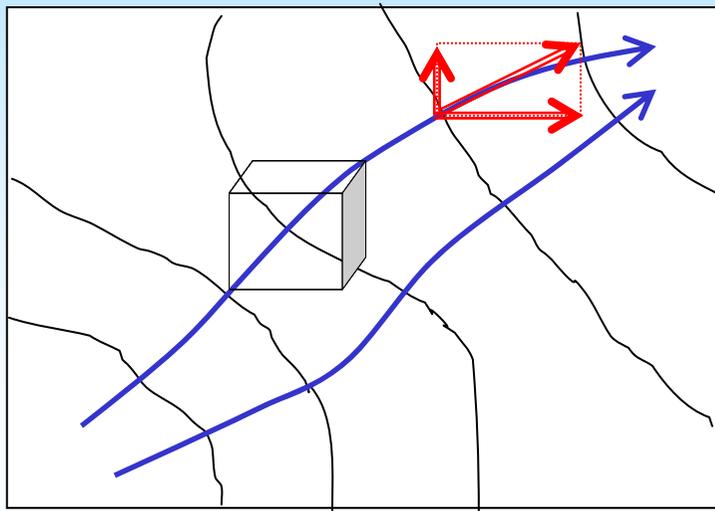
Der **Gradient** ist ein mathematischer Operator, genauer ein Differentialoperator, der auf ein Skalarfeld angewandt werden kann. Hierdurch erhält man ein Vektorfeld, das die Änderungsrate und die Richtung der größten Änderung des Skalarfeldes angibt.

$$\text{grad}(c) = \left(\frac{\partial c}{\partial x}, \frac{\partial c}{\partial y}, \frac{\partial c}{\partial z} \right)$$

Die Diffusion erfolgt in Richtung des abnehmenden Konzentrationsgradienten. Im mehrdimensionalen Raum stellt der Konzentrationsgradient einen Vektor dar und beschreibt den Gradienten für die drei Raumdimensionen.

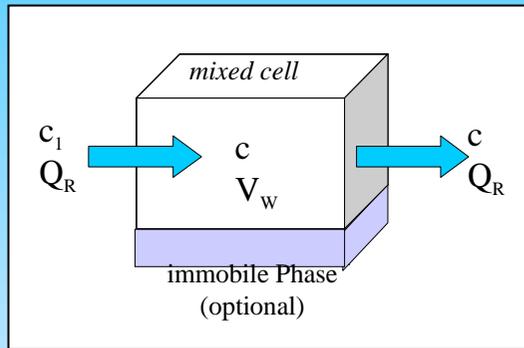
$$\text{grad}(c) = \left(\frac{\partial c}{\partial x}, \frac{\partial c}{\partial y}, \frac{\partial c}{\partial z} \right)$$

$$\xrightarrow{\hspace{10em}} \text{Diffusionsstrom} = -D \cdot \text{grad}(c)$$

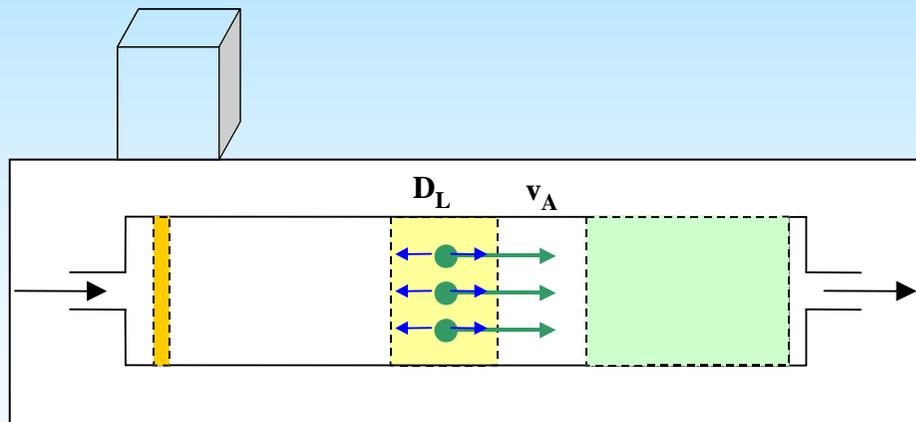


$$\dot{c} = \left(\frac{\partial}{\partial t} c \right)_x = \text{div}(D \cdot \text{grad}(c))$$

Reaktormodelle



Mischreaktor



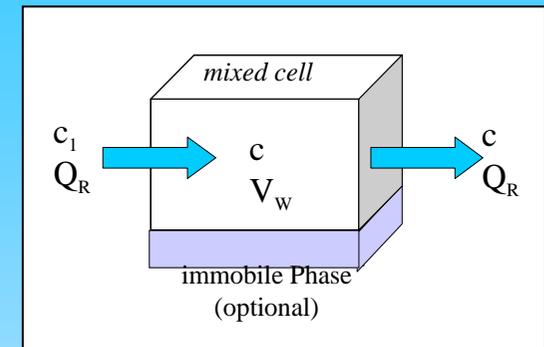
Strömungsrohr mit Pfropfenströmung

Rückvermischung

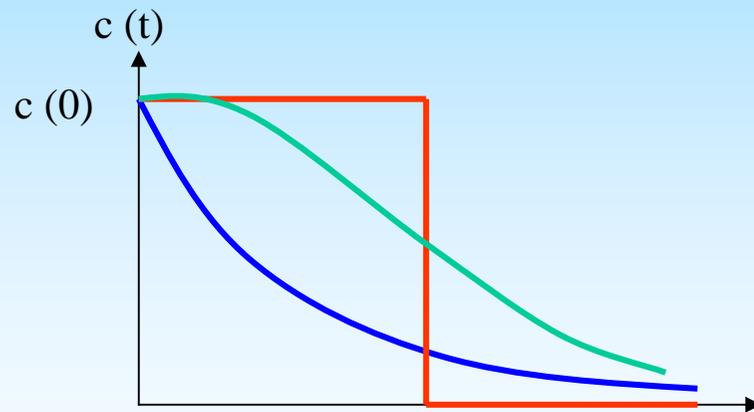
6. Reaktoren und Filter, Mischreaktor

$$\tau = \bar{t}_F = \frac{V_R}{Q_R}$$

Die mittlere theoretische Verweilzeit oder Raumzeit τ berechnet sich aus dem Reaktorvolumen V_R und dem Volumenstrom (Durchfluss) Q_R



Die mittlere Verweilzeit ist die Zeit, bei der 50% der Tracerlösung durch den Reaktor durchgeflossen sind.



idealer Mischreaktor $c = c_0 \cdot e^{-\frac{t}{\tau}}$

ideales Strömungsrohr $c = c_0$ für $t < \tau$

Strömungsrohr mit Rückvermischung oder Rührstufenkaskade

Nulldimensionale Lösung ergibt den Mischreaktor:

Konzentrationsänderung = Konvektionsterm + Diffusionsterm + Reaktionsterm

$$\dot{c} = \left(\frac{\partial}{\partial t} c \right)_{x=1} = -\frac{v}{L} \cdot (c - c_0) + 0 + r$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{v}{L} \cdot (c - c_0) + r(c) = 0 \quad \text{stationär}$$

$$c_{\text{stat}} = \frac{L}{v} \cdot r(c) - c_0$$

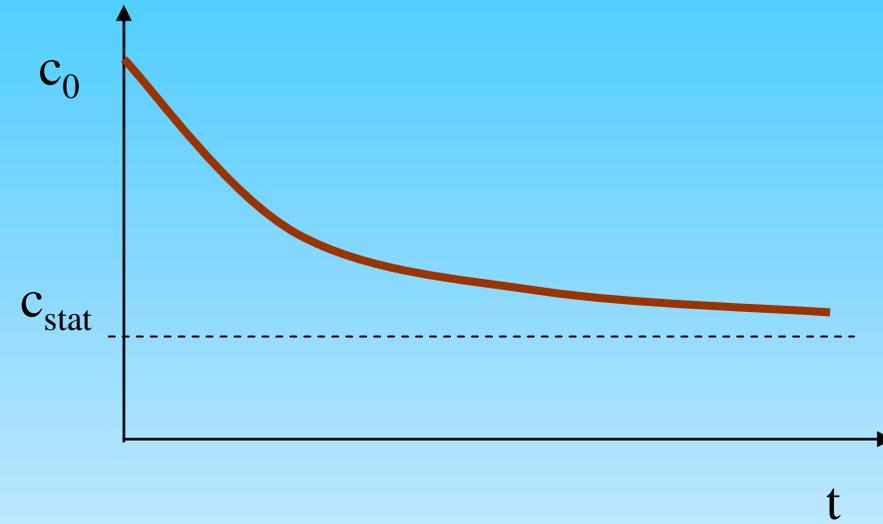
$$y = c - c_{\text{stat}}$$

$$\partial y = \partial c$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -\frac{v}{L} \cdot \left(y + c_0 + \frac{L}{v} \cdot r(c) - c_0 \right) + r(c) = -\frac{v}{L} \cdot y$$

$$\frac{\partial y}{y} = -\frac{v}{L} \cdot \partial t$$

$$\int_{y_0}^y \partial \ln(y) = - \int_{t=0}^t \frac{v}{L} \cdot \partial t$$



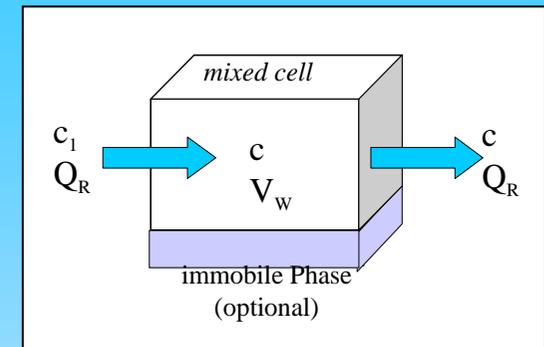
$$\frac{\ln(y)}{\ln(y_0)} = \frac{\ln(c - c_{\text{stat}})}{\ln(c_0 - c_{\text{stat}})} = -\frac{v}{L} \cdot t$$

$$c = c_{\text{stat}} + (c_0 - c_{\text{stat}}) \cdot \exp\left(-\frac{v}{L} \cdot t\right)$$

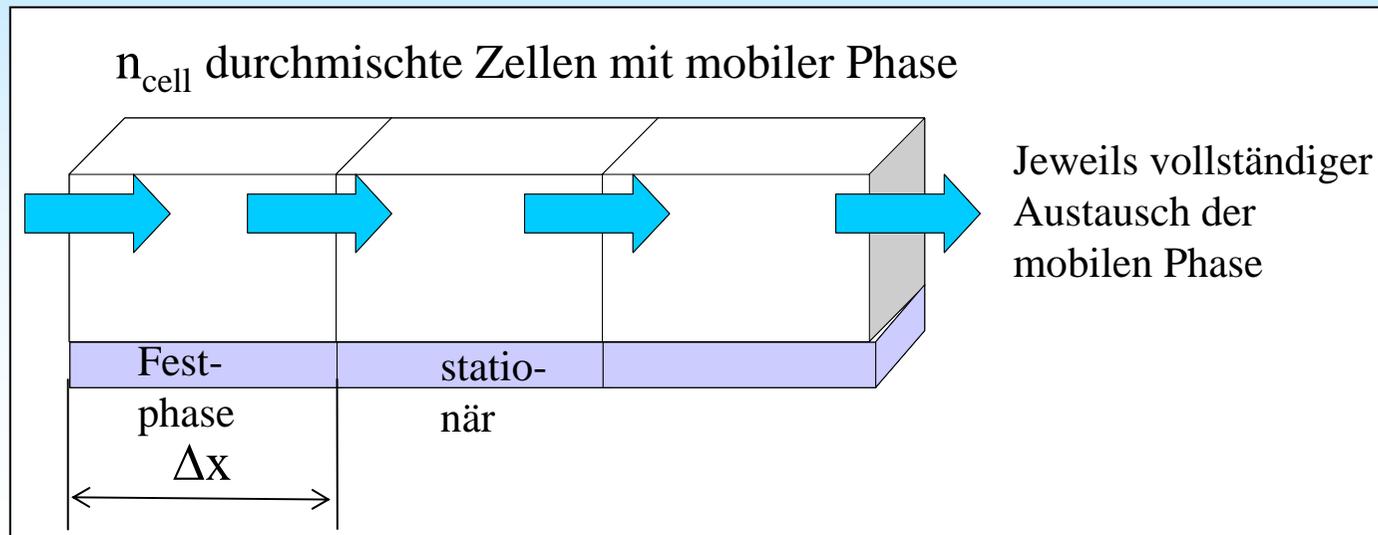
$$\frac{1}{t_F} = \frac{v}{L} = \frac{Q_R}{V_W}$$

6. Reaktoren und Filter, mixed cells, Näherungslösungen

$$\frac{\Delta c}{\Delta t} = -\frac{Q_R}{V_R} \cdot (c - c_0) + r(c)$$



$$c(x, t + \Delta t) = c(x, t) + \Delta c = c(x, t) - \frac{Q_R}{V_R} \cdot (c - c(x-1, t)) \cdot \Delta t + r(c) \cdot \Delta t$$



zB_61.xls

Für eine eindimensionale Strömung in Richtung der Fließlänge L vereinfachte Lösung:

$$-\operatorname{div}(\vec{v} \cdot \mathbf{c}) = -\frac{v_f}{n_p} \cdot \frac{\partial c}{\partial L}$$

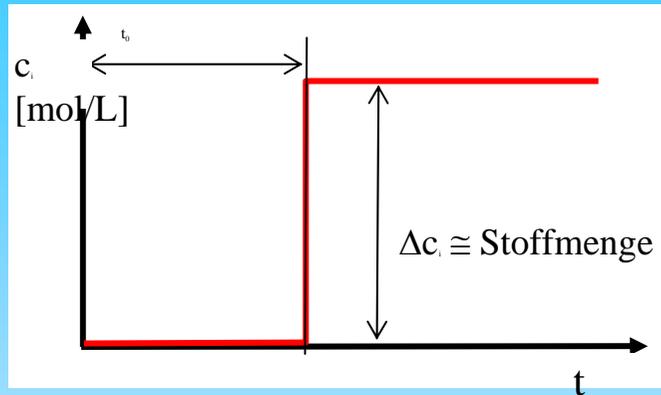
eingesetzt für eindimensionale Filterströmung in einem porösen System mit dem spezifischen Porenvolumen n_p , bzw. der Definition der Abstandsgeschwindigkeit ergibt sich die partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung:

$$\dot{\mathbf{c}} = \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{c} \right)_L = \frac{v_f}{n_p} \cdot \frac{\partial c}{\partial L} + \frac{\partial c}{\partial L} \left(D \cdot \frac{\partial c}{\partial L} (c) \right) + r = v_A \cdot \frac{\partial c}{\partial L} + D \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial L^2} + r$$

Bei Betrachtung mehrerer miteinander reagierender Stoffe, deren Wechselwirkung im Reaktionsterm (Quelle/Senke) enthalten ist, entsteht ein inhomogenes partielles Differentialgleichungssystem, für das nur unter starken Vereinfachungen analytische Lösungen gefunden werden können.

Ohne Reaktionsglied geht die Gleichung in eine homogene Differentialgleichung mit konstanten Koeffizienten über, die u. a. das Verweilzeitverhalten beschreibt:

$$\dot{\mathbf{c}} = v_A \cdot \frac{\partial c}{\partial L} + D \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial L^2}$$



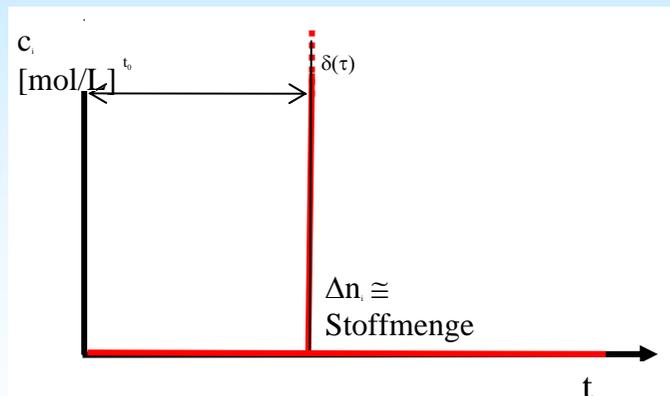
Sprungfunktion

$$c(t) = \begin{cases} c_0 & \text{für } t < t_0 \\ c_1 & \text{für } t \geq t_0 \end{cases}$$

Die integrierte Verweilzeitfunktion als System-output folgt aus dem *input* der Sprungfunktion.

$$c(L, t) = \frac{c_0}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{L - v_A \cdot (t - t_0)}{2\sqrt{D \cdot t}} \right)$$

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi$$



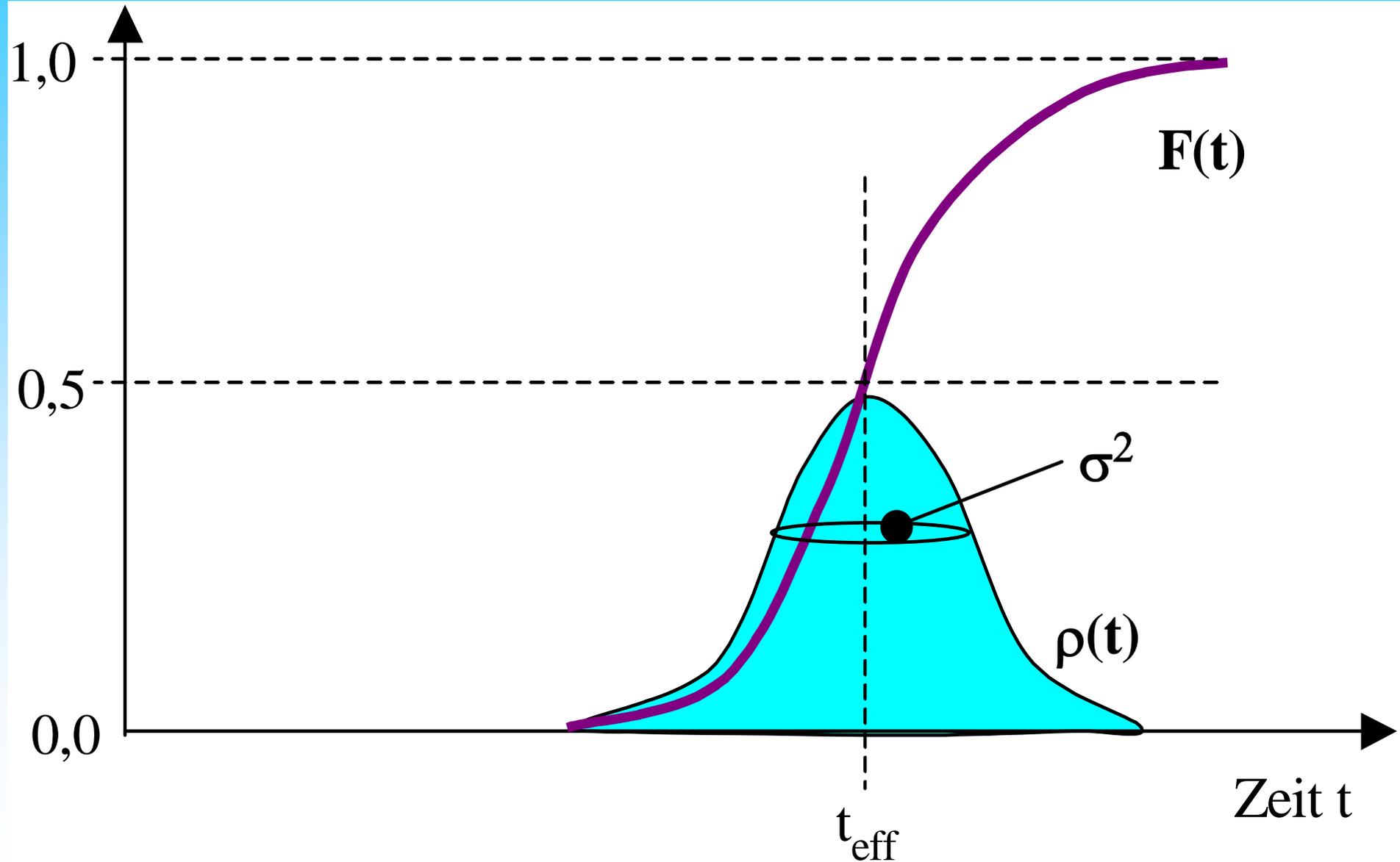
Dirac-Funktion

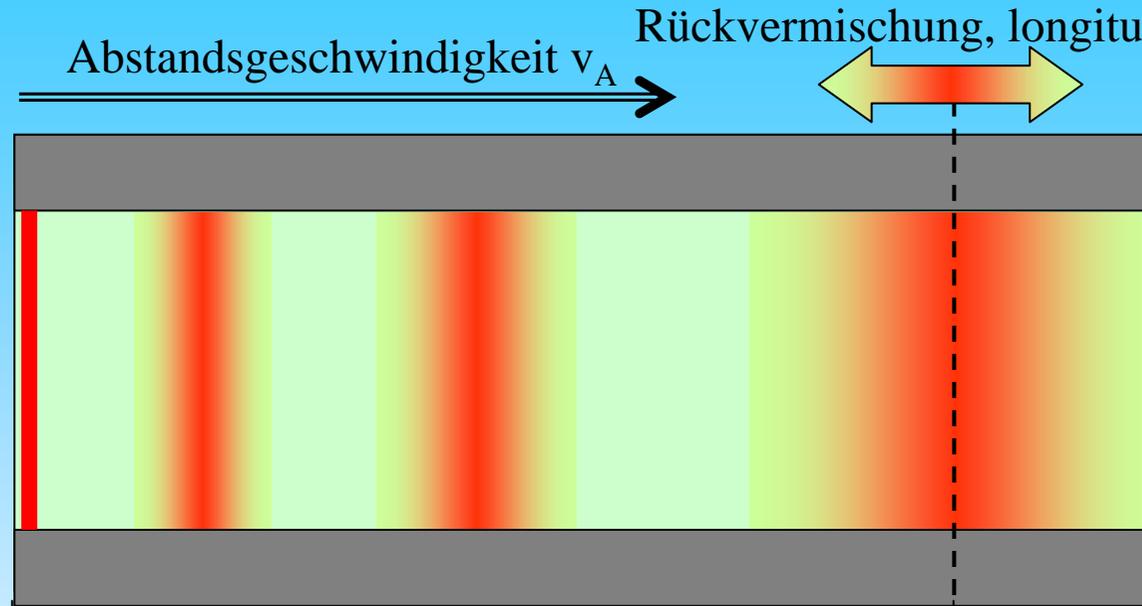
(differenzierte Sprungfunktion)

$$c(x, t = 0) = \frac{\Delta n}{A_F} \cdot \delta(x)$$

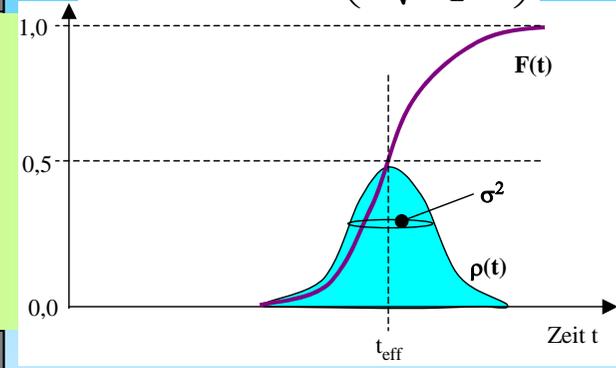
eindimensionale Lösung für die Dirac-Funktion

$$c(L, t) = \frac{\Delta n}{2 \cdot A_F \cdot \sqrt{\pi \cdot D \cdot t}} \cdot \exp \left(-\frac{(L - v_A \cdot (t - t_0))^2}{4 \cdot D \cdot t} \right)$$



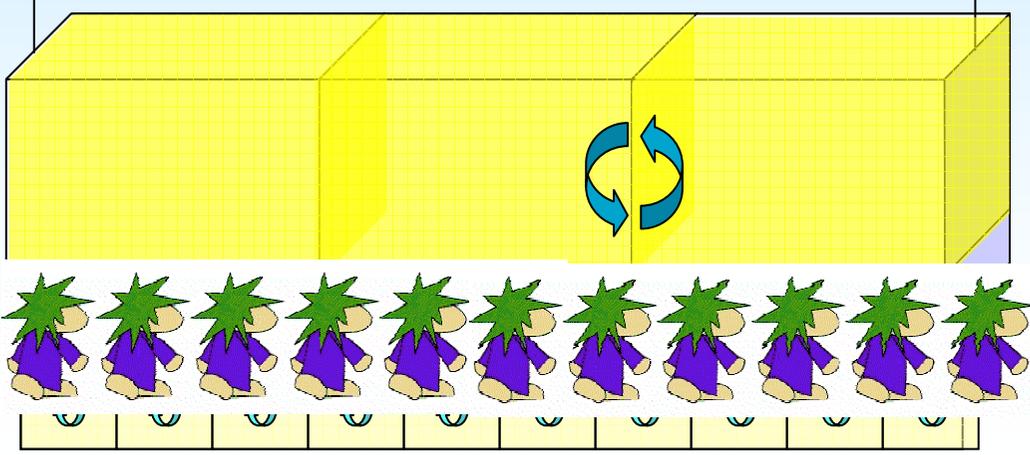


$$c(x, t) = \frac{c_0}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - v_A \cdot t}{2\sqrt{D_L \cdot t}} \right)$$



mittlere Verweilzeit VWZ

mixed cell - Modellausschnitt



longitudinale Dispersion als Mischung zwischen zwei Zellen

Jeweils vollständiger Austausch der mobilen Phase

Je mehr Rührstufen um so mehr ähnelt das Transportverhalten einem idealen Strömungsrohr.

Ausgehend von der Ansatzfunktion wird das Durchbruchverhalten eines Tracers mit der in EXCEL verfügbaren Normalverteilung beschrieben:

$$c(x, t) = c_0 \cdot \text{NORMVERT}(v_a \cdot t; x; \sqrt{D_L \cdot t}; wf)$$

$$c(L, t) = \frac{c_0}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{L - v_A \cdot (t - t_0)}{2\sqrt{D \cdot t}}\right)$$

wf = wahr

$$c(L, t) = \frac{\Delta n}{2 \cdot A_F \cdot \sqrt{\pi \cdot D \cdot t}} \cdot \exp\left(\frac{(L - v_A \cdot (t - t_0))^2}{4 \cdot D \cdot t}\right)$$

wf = falsch

6. Reaktoren und Filter, dimensionslose Kennzahlen

Als Verhältnis zwischen konvektivem Stofftransport und axialer Vermischung wird die dimensionslose

Bodenstein-Zahl Bo (Chemische Verfahrenstechnik) oder

Peclet-Zahl Pe (geochemische Transportmodellierungen)

eingeführt.

$$Pe = Bo = \frac{\text{Konvektionsstrom}}{\text{axialer Diffusionsstrom}} = \frac{v_{ax} \cdot L}{D_{ax}}$$

$Bo \rightarrow \infty, D_{ax} \rightarrow 0$ ideales Strömungsrohr (keine axiale Vermischung)

$Bo \rightarrow 0, D_{ax} \rightarrow \infty$ idealer Mischreaktor (vollständige Rückvermischung)

für $Bo = Pe > 10$

$$c(x, t) = \frac{c_0}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - v_a \cdot t}{2\sqrt{D \cdot t}} \right)$$

für $Bo = Pe > 10 \dots 50$

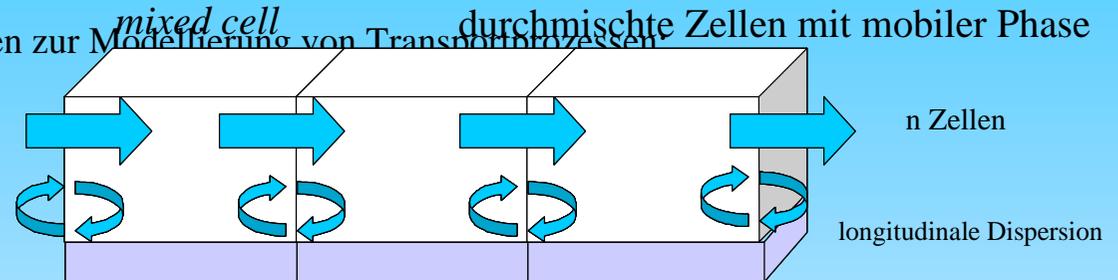
$$n_{\text{cells}} \approx \frac{Bo}{2} \approx \frac{1}{\sigma^2}$$

Zusammenhang zwischen Verweilzeitspektrum und Reaktorgestaltung hergestellt

Transportmodellierung mit PhreeqC

PHREEQC enthält verschiedene Möglichkeiten zur Modellierung von Transportprozessen

- (1) **Diffusion**,
- (2) Strömung (**Advection**)
- (3) **Advektion** und **Dispersion**, and
- (4) Advection and Dispersion mit Diffusion in eine stagnierende Zone (Totraum, dual porosity)
- Alle diese Prozesse können mit **Gleichgewichten** und chemischer **Reaktionskinetik kombiniert** werden.



Dispersion als Mischung zwischen zwei Zellen

Transport, **Advektion**, durch eine eindimensionale Säule durch eine Aufteilung in **ncells** Zellen mit der Länge Δx

$$\Delta x = \frac{L}{ncell}$$

mit den Initiallösungen gefüllt (Definition über SOLUTION 1-**ncell**).

Jeder Zelle können darüber hinaus Mineralphasen, Reaktionen, Oberflächen u.s.w. zugeordnet werden.

Die Zulaufung ist immer SOLUTION 0. Bei jedem Transportschritt **shift** wird die gesamte Lösung einer Zelle in die nächsthöhere transportiert.

PhreeqC löst das Transportproblem durch ein finite Differenz-Verfahren mit einer Weg-Zeit-Diskretisierung. Die Zeitschritte ergeben sich aus der Zellenlänge und der Abstandsgeschwindigkeit.

$$(\Delta t)_A = \frac{\Delta x}{v}$$

Die longitudinale Diffusion setzt sich aus der molekularen Diffusion D_e und der **Dispersivität** α zusammen. Die Dispersivität bestimmt den Diffusionskoeffizienten im strömenden Medium weitgehend.

$$D = D_e + \alpha_T \cdot v$$

Mit jedem Zeitschritt wird das Wasser einer Zelle völlig ausgetauscht. Wenn auch die Dispersion mit berücksichtigt werden soll ist das folgende Kriterium für die numerische Stabilität einzuhalten.

$$(\Delta t)_D \leq \frac{(\Delta x)^2}{3 \cdot D_L}$$

Die Zeitschritte für den dispersiven Transport können kleiner werden als die für den Transport. In diesem Fall wird die Rechnung mehrfach (= **mixrun**) für einen Transportschritt durchgeführt.

$$\text{mixrun} = \text{int}\left(\frac{3 \cdot \alpha_T}{\Delta x}\right) + 1$$

Die Anzahl der mixrun's ist zur Korrektur des Umsatzes beim REACTION-Block erforderlich. Andernfalls ändert sich auch der Umsatz bei Veränderung der Dispersivität, was meist auch falsch interpretiert wird.

Eine Erhöhung der Dispersivität ist nur in diskreten Schritten, die durch die Anzahl der zwischengeschalteten Mischungsschritte bestimmt wird, möglich. Die wahre Dispersivität berechnet sich

$$\alpha_T = \text{mixrun} \cdot \frac{\Delta x}{3}$$

Beispielrechnung für Freaks

TITLE Berechnung 61

SOLUTION 1-10 Porenlösung

temp 10
pH 7
pe 4
redox pe
units mg/l
density 1
Na 46
Cl 1 charge
Alkalinity 50

-water 1 # kg

SAVE solution 1-10

SOLUTION 0 Zulauf

temp 10
pH 7 charge
pe 4
redox pe
units mg/l
density 1
S(6) 240

SAVE SOLUTION 0

Rg61.pqi

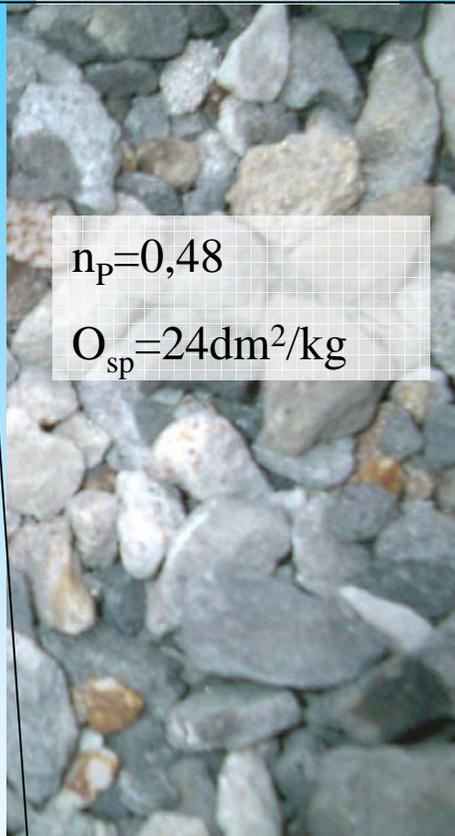
zB62.xls

USE solution 0

TRANSPORT

-cells 10
-shifts 50
-dispersivities 10*0
-lengths 10*1
-print_cells 10
-punch_cells 10

Filtermaterial



$$n_p = 0,48$$

$$O_{sp} = 24 \text{ dm}^2/\text{kg}$$

d_F

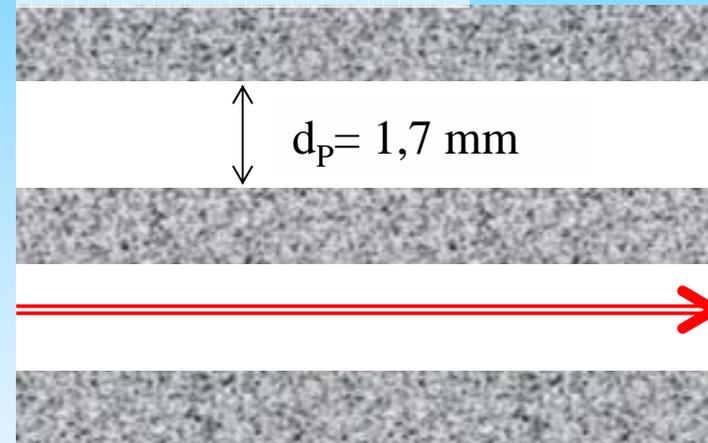
A_F

$$Q_R = 0,3 \text{ L/h}$$

$$v_A = 1,2 \text{ m/d}$$

Betrachtung einer Stromröhre als Filter
Horizontalfilter Königstein

Rohrbündelmodell



$$d_p = 1,7 \text{ mm}$$

$$\text{VWZ (theoretisch)} = 85 \text{ d}$$

0m

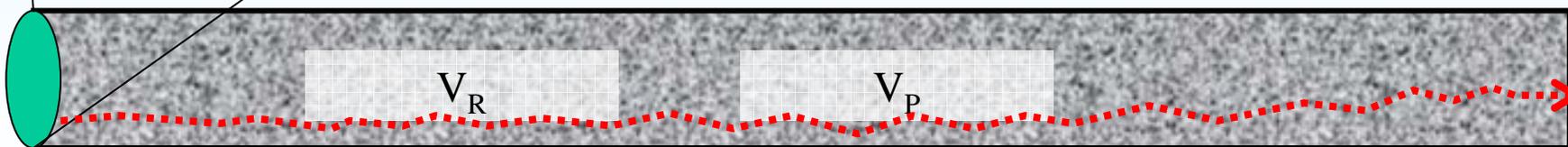
2m

4m

7 m

9 m

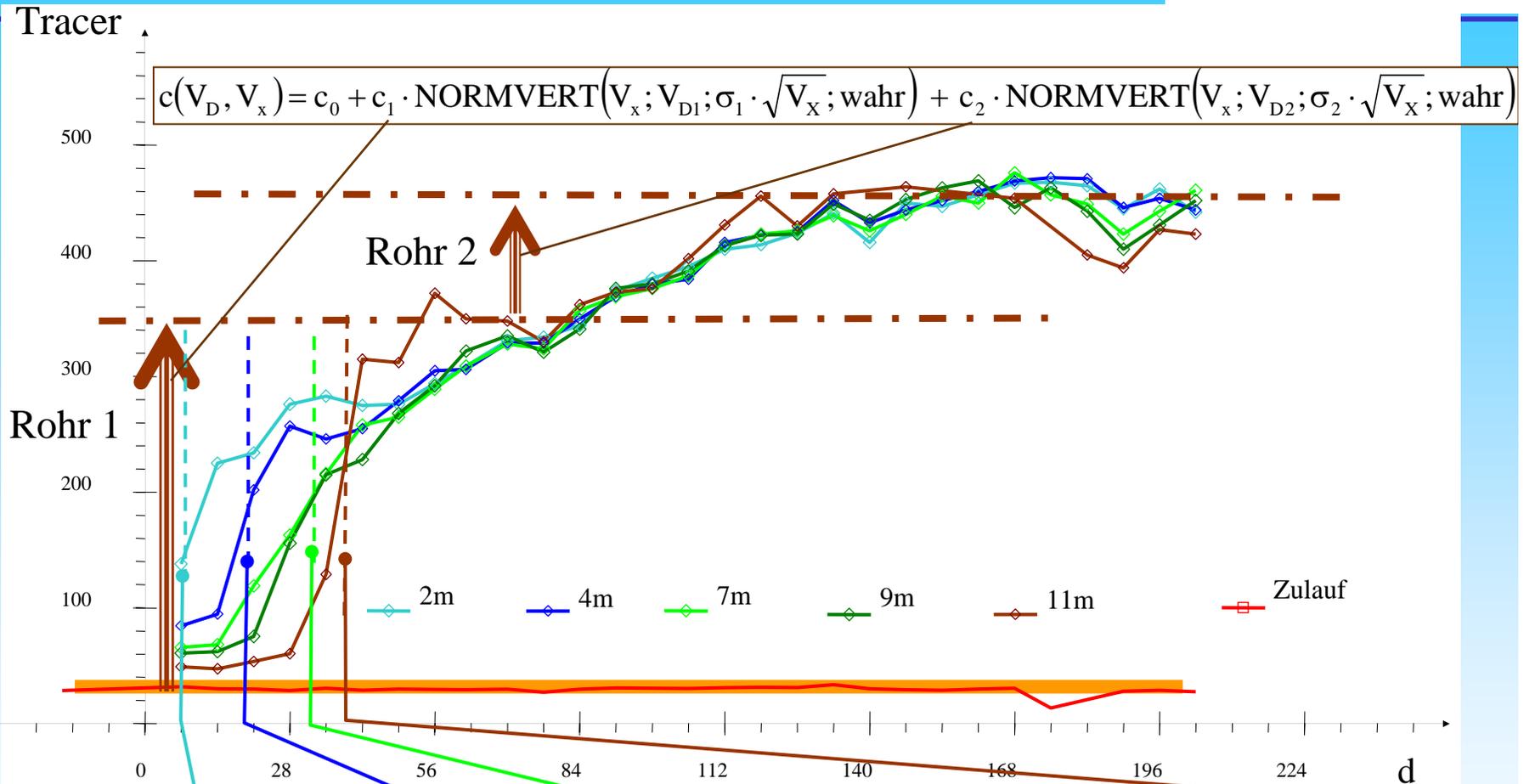
11 m



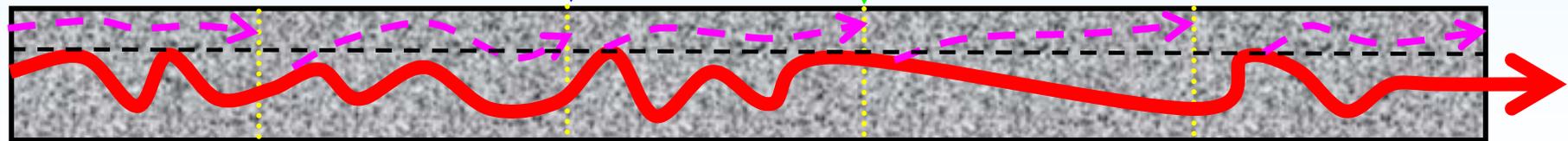
V_R

V_P

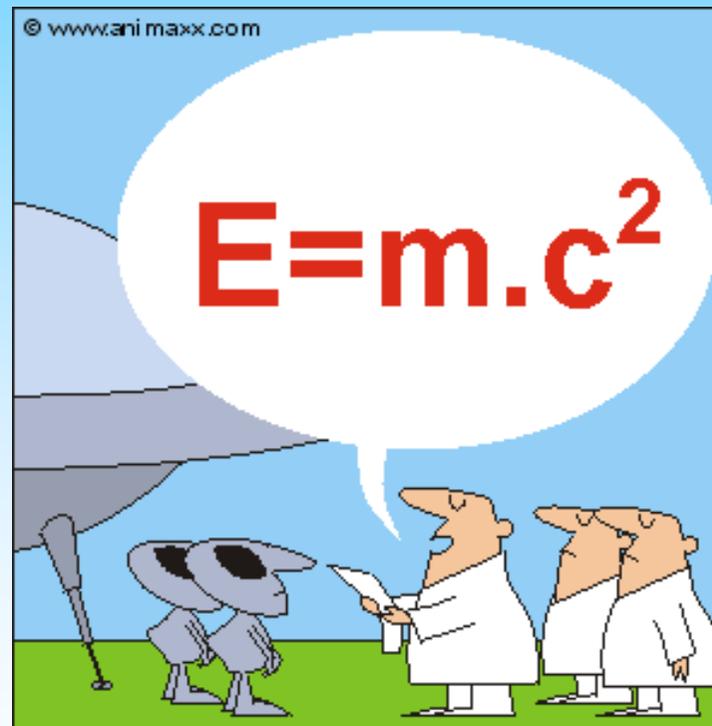
6. Reaktoren und Filter, Verweilzeiten



0m 2m 4m 7m 9m 11m



Ich danke für die Aufmerksamkeit



und hoffe auf vollständiges Verständnis