

# Entwicklung eines hybriden Simulationsmodells zur Optimierung des Betriebsverhaltens von Dekantierzentrifugen

zur Erlangung des akademischen Grades eines  
DOKTORS DER INGENIEURWISSENSCHAFTEN (Dr.-Ing.)

von der KIT-Fakultät für Chemieingenieurwesen und Verfahrenstechnik des  
Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)  
genehmigte

DISSERTATION

von  
Philipp Menesklou, M.Sc.  
aus Kandel

Tag der mündlichen Prüfung: 01. Juli 2022

Erstgutachter: Prof. Dr.-Ing. habil. Hermann Nirschl  
Zweitgutachter: Prof. Dr.-Ing. Sergiy Antonyuk



Dieses Werk ist lizenziert unter einer Creative Commons Namensnennung -  
Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International Lizenz (CC BY-SA 4.0):  
<https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.de>

Diese Arbeit ist meinem Vater Wolfgang Menesklou gewidmet.



---

# Danksagung

Diese Dissertation entstand im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik.

Mein Dank gilt Herr Prof. Dr.-Ing Hermann Nirschl, der mir viel Vertrauen entgegengebracht hat und immer offen war für neue Ideen und Diskussionen.

Ich bedanke mich herzlich bei Herr Prof. Dr.-Ing Sergiy Antonyuk, dass er sich die Zeit genommen und das Zweitgutachten dieser Arbeit übernommen hat.

Die zahlreichen Mitarbeiter\*Innen am MVM haben mir bei vielen Fragen und Problemen immer freundlich weitergeholfen. Besonders bedanken möchte ich mich bei Harald Anlauf, Verena Barth, Andreas Baum, Hans Guigas, Nadja Hafendörfer, Klaus Hirsch, Bernhard Hochstein, Olaf Jörg, Stefan Kollbach, Andreas Lumpp, Thomas Reutter, Amutha Schnepf, Kerstin Schwab, Bernhard Schweigler, Adam Tobias und Richard Ullrich.

Meine Projektpartner aus der Industrie hatten immer ein offenes Ohr für neue Ideen und unterstützen mich jederzeit. Dafür möchte ich mich herzlich bei ihnen bedanken.

Während meiner Zeit am Institut durfte ich einige Studierende bei ihren Bachelorarbeiten, Masterarbeiten und Hiwi Tätigkeiten betreuen. Der Austausch mit ihnen hat mir Freude bereitet und zu vielen Anregungen geführt. Mein Dank gilt Nicolas Claus, Vincenta Franßen, Karoline Kozubski, Jannis König, Sebastian Leopoldus, Lea Llupa, Kim Lohfink, Nikita Mironov, Rosa Frietsch Musulin, Niklas Oppel, Stefan Sagewitz, Catharina Sender und Ouwen Zhai.

Die Zusammenarbeit unter den Doktorand\*Innen hat einen großen Teil zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen. Der Austausch bei einem Kaffee war immer hilfreich und viele Ideen sind daraus entstanden. Die Dienstreisen, Konferenzen und Seminare mit ihnen werde ich nie vergessen. Dafür bedanke ich mich herzlich bei allen. Viele von ihnen wurden zu Freunden.

Mein Dank gilt dem Circle of Trust.

---

Besonders danken möchte ich meinen Bürokolleginnen und Bürokollegen Timo Dobler, Zihim Lam, Benjamin Radel, Tabea Sinn, Helene Wettich. Sie hatten immer ein offenes Ohr und Zeit für fachliche als auch überfachliche Fragen.

Weiterhin gilt mein Dank Marco Gleiß, Wolfgang Menesklou und Tabea Sinn für die Korrektur dieser Arbeit. Ihre Anmerkungen und Kommentare waren sehr wertvoll und motivierend.

Die fachlichen Diskussionen mit Marco Gleiß haben wesentlich zu dem Gelingen dieser Arbeit beigetragen. Die Dienstreisen und Konferenzen mit ihm waren immer ein Highlight. Ich bedanke mich herzlich für die gemeinsamen Zeit mit ihm.

Ich bedanke mich herzlich bei meiner Familie für den Rückhalt und die Unterstützung. Dadurch konnte ich immer meine Ziele verfolgen und meinen eigenen Weg gehen.

Ein besonderer Dank gilt meiner Freundin Kristin Wolf. Sie war immer verständnisvoll, wenn ich gemeinsam geplante Zeit zugunsten dieser Arbeit entbehren musste.

---

# Zusammenfassung

Diese Arbeit befasst sich mit der Entwicklung eines hybriden Simulationsmodells zur Optimierung des Betriebsverhaltens von Dekantierzentrifugen. Konkret umfasst dies die Erweiterung eines dynamischen Prozessmodells, die Modellierung eines Algorithmus zur Berechnung von Degritting und die Entwicklung eines Grey-Box-Modells als hybriden Modellierungsansatz. Dekantierzentrifugen (kurz Dekanter genannt) sind spezielle Zentrifugen, welche einige Vorteile bei der großtechnischen Anwendung bieten. Sie sind unter anderem häufig in der Bergbauindustrie beispielsweise bei der Verarbeitung von Mineralien wie Calciumcarbonat (Fest-Flüssig Trennung, Klassierung, Degritting) im Einsatz, da sie kontinuierlich und in kurzer Zeit hohe Durchsätze verarbeiten können. Allerdings ist der Betrieb von Dekantierzentrifugen mit einem erhöhten Energieaufwand und dadurch Kosten verbunden. Deswegen sind Methoden und Modelle zur mathematischen Beschreibung von Dekantierzentrifugen wichtig, um den optimalen Betriebspunkt zu bestimmen und dadurch sowohl den Energieaufwand als auch die Prozesskosten zu senken. Des Weiteren bilden Berechnungsmethoden eine wichtige Grundlage bei der Dimensionierung neuer Dekantierzentrifugen, um den experimentellen Aufwand zu reduzieren oder sogar zu ersetzen. Bestehende Methoden waren bisher nicht ausreichend, um das dynamische Verhalten von feindispersen Suspensionen im gesamten Apparat zu beschreiben.

Gleiss [19] präsentiert ein dynamisches Modell für die Klassierung und den Sedimentaufbau im zylindrischen Teil von Dekantierzentrifugen. Basierend auf dem Ansatz nach Gleiss [19] erfolgt in der hier vorliegenden Arbeit die Erweiterung des Modells um den konischen Teil der Zentrifuge zur ganzheitlichen Betrachtung des Dekanters. Insbesondere bei der mechanischen Entfeuchtung ist das Materialverhalten im konischen Teil von entscheidender Bedeutung für den effizienten Betrieb von Dekantierzentrifugen. Weiterhin wird im Rahmen dieser Arbeit die Kompressionsfunktion zur Sedimentkonsolidierungsfunktion erweitert. Damit lässt sich zusätzlich der Effekt der Scherverdichtung charakterisieren und in der Simulation berücksichtigen. Der Vergleich von experimentellen Ergebnissen der Validierungsversuche

---

im Labor-, Pilot- und Industriemaßstab mit Simulationen bestätigen sowohl die Scale-up Fähigkeit als auch die Übertragbarkeit des Simulationsmodells auf andere Produkte.

Darüber hinaus erfolgt die Entwicklung eines Ansatzes zur Modellierung von Degritting (Abtrennung von Überkorn wie Mahlperlen aus dem eigentlichen Wertprodukt). Mehrphasensimulationen mittels Computational Fluid Dynamics dienen zur Ableitung einer Trennbedingung der unerwünschten Überkornpartikel aus der Suspensionen. Die Ergebnisse von Experimenten aus der industriellen Praxis stimmen sehr gut mit den Ergebnissen des Degritting Algorithmus überein. Diese Studien bestätigen, dass die hier entwickelte Simulationsmethode detaillierte Einblicke in das Abscheideverhalten liefert.

In einigen praxisrelevanten Anwendungen, wie beispielsweise bei der Einstellung einer großen Teichtiefe innerhalb der Dekantierzentrifuge, können lokale Turbulenzen und Strömungen in einigen Bereichen der Zentrifuge das Abscheideverhalten der Partikel beeinflussen. Das Prozessmodell allein kann lokale Strömungseffekte auf das Abscheideverhalten bei solchen Teichtiefen nicht abbilden, da dies eine detaillierte Strömungssimulation erfordert und für diese Abhängigkeiten allgemein keine analytischen oder empirischen Gleichungen zur Verfügung stehen. Deswegen erfolgt im Rahmen dieser Arbeit die Entwicklung eines sogenannten hybriden Simulationsmodells, um zukünftig die beschriebenen Abhängigkeiten trotzdem abzubilden. Die Grey-Box-Modellierung stellt einen hybriden Modellierungsansatz dar, der aus einem parametrischen und einem nicht-parametrischen Modell besteht. Das parametrische Modell ist das zuvor entwickelte dynamische Prozessmodell, welches die physikalische Basis darstellt und als idealer Schätzer für den zu simulierenden Prozess dient. Darüber hinaus ist das nicht-parametrische Modell ein neuronales Netzwerk, das lernt die Simulationsdaten entsprechend zu korrigieren, falls im trainierten Bereich die Abweichungen zwischen Simulationsergebnissen und Trainingsdaten zu groß sind. Die Modellierung eines solchen statischen, parallelen Grey-Box-Modells für Dekantierzentrifugen ist in dieser Arbeit dargestellt. Die Ergebnisse bestätigen, dass es durch Training des neuronalen Netzwerkes möglich ist den Einfluss von lokalen Strömungseffekten auf das Abscheideverhalten von Partikeln innerhalb der Zentrifuge abzubilden. Generell ergeben sich dadurch neue Möglichkeiten das hybride Simulationsmodell zu erweitern. Zusätzliche Effekte lassen sich entweder über weitere Gleichungen in das parametrische Modell integrieren oder das neuronale Netz lernt durch gezielte Experimente die Zusammenhänge zu beschreiben.

Mit der hier entwickelten und validierten Simulationsmethode ist es zukünftig möglich, das dynamische Verhalten von feindispersen Suspensionen unter Berücksichtigung der Scherverdichtung in der gesamten Dekantierzentrifuge zu beschreiben. Darüber hinaus liefert der



---

neu entwickelte Degritting Algorithmus ein dynamisches Modell zur Berechnung für diese Anwendung. Insgesamt demonstrieren die Ergebnisse dieser Arbeit die Vorteile der Entwicklung von hybriden Simulationsmodellen bei der Optimierung des Betriebsverhaltens von Dekantierzentrifugen. Durch die gewonnenen Erkenntnisse ist es möglich, das Prozessverhalten von Dekantierzentrifugen effizienter und akkurater vorherzusagen. Dies erlaubt die Optimierung von Prozessketten und eröffnet neue Methoden in der Auslegung von Zentrifugen und deren Einsatz in der Prozesskette. Weiterhin bildet die Anwendung von hybriden Modellierungsansätzen wie hier am Beispiel der Dekantierzentrifuge eine wichtige Grundlage für die anwendungsorientierte Forschung angesichts der zunehmenden Digitalisierung.



---

# Abstract

This dissertation deals with the development of a hybrid simulation model for the optimisation of the process behaviour of decanter centrifuges. More specifically, this includes the extension of a dynamic process model, the modelling of an algorithm for the computation of degritting and the development of a grey-box model as a hybrid modelling approach. Decanter centrifuges (so-called decanters) are special centrifuges that offer several advantages in industrial-scale applications. Besides other things, they are often used in the mining industry, for example in the processing of minerals such as calcium carbonate slurries (solid-liquid separation, classification, degritting), as they can process high throughputs continuously. However, the use of decanter centrifuges is combined with increased energy consumption and thus costs. Therefore, methods and models for the mathematical description of decanter centrifuges are important in order to determine the optimal operating conditions and thus reduce both the energy consumption and the operating costs. Furthermore, calculation methods provide an important basis for the dimensioning of new decanter centrifuges in order to reduce or even replace the experimental effort. Existing methods have so far been insufficient to describe the dynamic behaviour of finely dispersed suspensions in the entire apparatus.

Gleiss [19] presents a dynamic model for the classification and sediment build-up in the cylindrical part of decanter centrifuges. Based on the approach according to Gleiss [19], the present work extends the model to include the conical part of the centrifuge for a comprehensive view of the decanter. Particularly in mechanical dewatering, the material behaviour in the conical part is decisive for operating decanter centrifuges efficiently. Furthermore, the compression function is enhanced to a sediment consolidation function as part of this work. This allows to characterise and consider additionally the effect of shear compaction. The comparison of experimental results of validation trials in laboratory, pilot and industrial scale with simulations confirm the scale-up capability as well as the transferability of the simulation model to other products.

Additionally, an approach for modelling degritting (separation of oversized particles such as grinding beads from the actual valuable product) is developed. Multiphase simulations using

---

computational fluid dynamics are used to determine a separation condition for the unwanted oversized particles from the slurry. The results of experiments from industrial applications agree very well with the observations of the degritting algorithm. These studies validate that the novel simulation method provides detailed insights into the separation behaviour.

In some practical applications, such as using a large pool depth within the decanter centrifuge, local turbulences and flow phenomena in some areas of the centrifuge can influence the separation behaviour of the particles. The process model alone cannot map local flow effects on the separation behaviour at such pool depths, as this requires a detailed flow simulation and generally no analytical or empirical equations are available for these dependencies. For this reason, a so-called hybrid simulation model is being developed within the scope of this work in order to represent the described dependencies in the future. Grey-box modelling represents a hybrid modelling approach consisting of a parametric and a non-parametric model. The parametric model is the previously developed dynamic process model, which represents the physical basis and serves as an ideal estimator for the process to be simulated. Furthermore, the non-parametric model is a neural network that learns to correct the simulation data accordingly if the deviations between simulation results and training data are too large in the trained domain. The modelling of such a static, parallel grey-box model for decanter centrifuges is presented in this work. The results confirm that it is possible to model the influence of local flow effects on the separation behaviour of particles within the centrifuge by training the neural network. In general, this opens up new possibilities for extending the hybrid simulation model. Additional effects can either be integrated into the parametric model via further equations, or the neural network learns to describe the correlations through systematic experiments.

By using the simulation method developed and validated here, it is possible to describe the dynamic behaviour of finely dispersed slurries, considering the entire decanter centrifuge and shear compaction. Furthermore, the new developed degritting algorithm provides a dynamic model for the simulation of this application. In summary, the results of this work demonstrate the advantages of developing hybrid simulation models in optimising the process behaviour of decanter centrifuges. The gained understanding allows to predict the process behaviour of decanter centrifuges more efficiently and accurately. This leads to the optimisation of process chains and opens up new methods for the design of centrifuges and their use in the process chain. Furthermore, the application of hybrid modelling approaches, as here in the example of the decanter centrifuge, is an important basis for application-oriented research in the context of increasing digitalisation.

---

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Verfahrenstechnische Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1. Funktionsweise von Dekantierzentrifugen . . . . .	5
2.2. Materialverhalten partikulärer Systeme in Zentrifugen . . . . .	10
2.2.1. Sedimentation . . . . .	10
2.2.2. Sedimentkonsolidierung . . . . .	14
2.2.3. Sedimenttransport . . . . .	16
2.3. Scale-up von Dekantierzentrifugen . . . . .	18
<b>3. Grundlagen zur mathematischen Modellierung</b>	<b>23</b>
3.1. Maschinelles Lernen . . . . .	23
3.2. Künstliche neuronale Netzwerke . . . . .	25
3.3. Grey-Box-Modellierung . . . . .	30
3.4. Computational Fluid Dynamics . . . . .	31
<b>4. Materialcharakterisierung</b>	<b>35</b>
4.1. Verwendete Materialien . . . . .	35
4.2. Sedimentationshinderungsfunktion . . . . .	37
4.3. Gelpunkt . . . . .	41
4.4. Sedimentkonsolidierungsfunktion . . . . .	43
<b>5. Modellierung und Validierung des Simulationsmodells</b>	<b>49</b>
5.1. Stand der Technik . . . . .	49
5.2. Modellierung kompressibler Produkte . . . . .	53
5.2.1. Diskretisierung . . . . .	54
5.2.2. Suspensionszone . . . . .	59
5.2.3. Sedimentzone . . . . .	60

5.3. Validierung des Simulationsmodells im Labormaßstab . . . . .	62
5.3.1. Experimentelles Vorgehen . . . . .	63
5.3.2. Validierung . . . . .	65
5.4. Scale-up Fähigkeit und Validierung im Industriemaßstab . . . . .	72
5.4.1. Experimentelles Vorgehen . . . . .	73
5.4.2. Validierung . . . . .	75
5.5. Modellierung Überströmung Zentrifugenwehr . . . . .	82
5.5.1. Analytischer Ansatz zur Implementierung in Simulationsumgebung .	82
5.5.2. Untersuchungen zur Überströmungen mittels CFD-Simulationen . . .	83
5.6. Modellierung Degritting . . . . .	87
5.7. Validierung Degritting . . . . .	91
5.7.1. Experimentelles Vorgehen . . . . .	91
5.7.2. Experimentelle Ergebnisse . . . . .	92
<b>6. Grey-Box-Modellierung von Dekantierzentrifugen</b>	<b>99</b>
6.1. Stand der Technik . . . . .	99
6.2. Modellierung . . . . .	101
6.3. Ergebnisse . . . . .	106
<b>7. Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>117</b>
<b>Symbol- und Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>123</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>131</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>137</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>139</b>
<b>A. Anhang</b>	<b>149</b>
A.1. Ergebnisse Sedimentkonsolidierungsfunktion CC1 und CC2 . . . . .	149
A.2. Ergebnisse Materialcharakterisierung CC4 . . . . .	150
A.3. Validierung Degritting: Prozess- und Materialparameter . . . . .	152







# 1. Einleitung

Die Fest-Flüssig Trennung (FFT) ist ein wichtiger Teil vieler Prozessketten bei der Aufbereitung von Suspensionen in der Prozessindustrie. Häufig sind für diese Aufgabe Filterpressen oder Zentrifugen im Einsatz. Dekantierzentrifugen (kurz Dekanter genannt) sind spezielle Zentrifugen, welche einige Vorteile bei der großtechnischen Anwendung bieten. Die Trennapparate arbeiten kontinuierlich und können hohe Durchsätze bei kurzer Prozesszeit umsetzen. Weiterhin kann die Beschaffenheit der Suspension am Zulauf von stark verdünnt bis hochviskos reichen und die Bauweise von Dekantierzentrifugen ist deutlich platzsparender im Vergleich zu Membran- oder Kammerfilterpressen. Das macht sie besonders attraktiv für die Bergbauindustrie, insbesondere bei der Verarbeitung von mineralischen Produkten wie Calciumcarbonat-Wasser Suspensionen. Typische Aufgaben sind dort die mechanische Entfeuchtung, Klassierung und das Degritting. Lange Sedimentationszeiten der Feststoffpartikeln, beispielsweise feindisperser Suspensionen, lassen sich aufgrund der zusätzlich wirkenden Zentrifugalkräfte erheblich reduzieren. Allerdings ist der Betrieb von Dekantierzentrifugen mit einem erhöhten Energieaufwand und dadurch Kosten im Gegensatz zu herkömmlichen Eindickern verbunden. Daher ist es entscheidend, die optimale Betriebsweise unter Berücksichtigung der prozessrelevanten Aspekte zu bestimmen.

Die Ansätze zur Auslegung und Optimierung von Dekantierzentrifugen reichen prinzipiell von einfachen analytischen Gleichungen über numerische Prozessmodelle bis hin zu komplexen, hochaufgelösten Simulationen. Die Annahmen in existierenden analytischen Modellen sind teilweise stark vereinfachend, was zu signifikanten Abweichungen der Berechnungen gegenüber experimentellen Beobachtungen führt und somit diese bei der Optimierung von Prozessen nur limitiert einsetzbar macht. Im Gegensatz zu diesen analytischen Modellen stehen hochaufgelöste Simulationen wie beispielsweise Computational Fluid Dynamics (CFD) Ansätze. Diese liefern prinzipiell detaillierte Einblicke in das Betriebsverhalten der Produkte und Maschinen. Allerdings ist die Modellierung von Dekantierzentrifugen mittels dieser Methoden aufwendig und die Berechnung sehr zeitintensiv, was einen Nachteil in der praxisrelevanten Anwendung darstellt. Ein Kompromiss zwischen beiden Methoden sind

physikalisch-basierte Prozessmodelle. Die Voraussetzung für die Entwicklung dieser Ansätze ist die weitere modellhafte Reduktion des Systems und eine experimentelle Materialcharakterisierung im Labormaßstab zur Beschreibung des realen Materialverhaltens. Diese Kombination liefert die benötigte Detailtiefe und ermöglicht gleichzeitig Simulationsergebnisse in Echtzeit zu generieren.

Bisher sind keine numerischen Prozessmodelle für Dekantierzentrifugen bekannt, welche das reale Materialverhalten innerhalb des gesamten Apparates (konischer und zylindrischer Bereich) berücksichtigen. Im Bereich des zylindrischen Teils einer Dekantierzentrifuge präsentiert Gleiss [19] ein dynamisches Modell für die Klassierung und den Sedimentaufbau. Basierend auf der Arbeit von Gleiss [19] ist das Modell für den zylindrischen Bereich, um den konischen Bereich zu erweitern und weitere Effekte der Sedimentkonsolidierung zu berücksichtigen. Der hier vorgestellte und im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Berechnungsansatz beschreibt nun die Sedimentation, die Sedimentkonsolidierung und den Sedimenttransport im gesamten Apparat und ermöglicht dadurch detaillierte Untersuchungen des Konsolidierungsverhaltens. Die Validierung erfolgt anhand von experimentellen Daten für Dekantierzentrifugen im Labor-, Pilot- und Industriemaßstab für verschiedene Calciumcarbonat-Wasser Suspensionen, um die Skalierbarkeit und Übertragbarkeit dieses Ansatzes zu demonstrieren. Denn das Verweilzeitverhalten der Partikel im Apparat und die Zentrifugalbeschleunigungen variieren signifikant zwischen den einzelnen Skalen.

Das Degritting bezeichnet die Abtrennung von Überkorn, wie beispielsweise Grobpartikelfraktionen oder Mahlperlen. Aktuell erfolgt die Auslegung des Degrittings mittels einfachen analytischen Gleichungen, welche häufig zu Abweichungen im Vergleich zu experimentellen Beobachtungen führen. Diese Arbeit stellt einen Modellierungsansatz zur Integration dieser Applikation in das Simulationsmodell vor. Die Abscheidebedingung der Überkornpartikel ist anhand von CFD Simulationen abgeleitet. Die Validierung erfolgt durch den Vergleich von Simulationsergebnissen mit experimentellen Daten. Dadurch ist es möglich in der Zentrifuge lokal und dynamisch das Separationsverhalten in Abhängigkeit der Material- und Prozessparameter auf der Ebene von numerischen Prozessmodellen zu untersuchen.

Insgesamt berücksichtigt das Simulationsmodell das Sedimentationsverhalten, die Sedimentkonsolidierung und den Sedimenttransport. In praxisrelevanten Anwendungen, beispielsweise bei großen Teichtiefen wie sie beim Degritting eingestellt sind, können lokale Turbulenzen und Strömungen in einigen Bereichen der Zentrifuge das Trennergebnis beeinflussen. Das Prozessmodell allein kann lokale Strömungseffekte auf das Abscheideverhalten bei solchen Teichtiefen nicht abbilden, da dies eine detaillierte Strömungssimulation erfordert und für

diese Abhängigkeiten allgemein keine analytischen oder empirischen Gleichungen zur Verfügung stehen. Deswegen erfolgt im Rahmen dieser Arbeit weiterhin die Entwicklung eines sogenannte hybriden Simulationsmodells, um die beschriebenen Abhängigkeiten trotzdem abzubilden.

Die Grey-Box-Modellierung stellt einen hybriden Modellierungsansatz dar, der aus einem parametrischen (hier dem dynamischen Prozessmodell) und einem nicht-parametrischen Modell (hier einem neuronalen Netzwerk) besteht. Das Training des neuronalen Netzwerkes erfolgt mit speziellen experimentellen Daten, um die spezifischen Strömungseffekte auf das Separationsverhalten bei Teichtiefen zu berücksichtigen, für welche die Ergebnisse nach rein numerischer Berechnung nicht zufriedenstellend genau sind. Generell ergeben sich durch diese Kombination neue Möglichkeiten, das Simulationsmodell zu erweitern, ohne dessen Vorteile einzubüßen. Zusätzliche Effekte lassen sich entweder über weitere Gleichungen in das parametrische Modell integrieren oder das neuronale Netzwerk lernt, die Zusammenhänge anhand von spezifischen Experimenten zu berücksichtigen. Die Anwendung von hybriden Modellierungsansätzen wie hier am Beispiel der statischen Grey-Box-Modellierung von Dekantierzentrifugen stellt einen wichtigen Schritt angesichts der zunehmenden Digitalisierung dar. Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines hybriden Simulationsmodells zur Optimierung des Betriebsverhaltens von Dekantierzentrifugen.

Zusammenfassend ist das Ziel dieser Arbeit die Entwicklung eines hybriden Simulationsmodells zur Optimierung des Betriebsverhaltens von Dekantierzentrifugen. Dies umfasst zum einen die Erweiterung eines dynamischen Prozessmodells zur Betrachtung des gesamten Apparates und die Entwicklung eines Modells zur Berechnung von Degritting zur Integration dieser Anwendung in das Berechnungsprogramm. Zum anderen beinhaltet dies die Modellierung eines Grey-Box-Modells, um beispielsweise den Einfluss lokaler Strömungseffekte auf das Abscheideverhalten in Dekantierzentrifugen zu berücksichtigen.



## 2. Verfahrenstechnische Grundlagen

Dieses Kapitel behandelt die verfahrenstechnischen Grundlagen zum tieferen Verständnis von Dekantierzentrifugen. Zum einen umfasst dies die Funktionsweise, prozesstechnische Auslegung, Dimensionierung und Scale-up der Apparate selbst, zum anderen die Theorie bezüglich des Materialverhaltens partikulärer Systeme in Zentrifugen.

### 2.1. Funktionsweise von Dekantierzentrifugen

Dekantierzentrifugen sind kontinuierlich arbeitende Sedimentationszentrifugen, welche häufig in der Fest-Flüssig Trennung zum Einsatz kommen. Ein großer Vorteil ist die Möglichkeit große Durchsätze verarbeiten zu können, deren Feststoffgehalt von stark verdünnt bis hochkonzentriert reichen kann. Deswegen findet die Dekantierzentrifuge häufig Anwendung in der Lebensmittelindustrie, Klärschlammaufbereitung, Bergbauindustrie und Mineralienaufbereitung. Wichtige Grundvorgänge des Apparates sind die mechanische Entfeuchtung (Flüssigkeitsabtrennung von Feststoff), Klärung (Feststoffabtrennung aus Suspension), Klassierung (Einstellung der Partikelgröße) und Degritting (Abtrennung von Überkorn) von Suspensionen. Im wesentlichen besteht die Dekantierzentrifuge aus einer Trommel und einer Schnecke, welche jeweils mit definierten Drehzahlen rotieren. Der Apparat lässt sich in einen konischen und zylindrischen Bereich einteilen. In Abbildung 2.1 ist die Prinzipskizze einer Gegenstrom-Dekantierzentrifuge dargestellt.

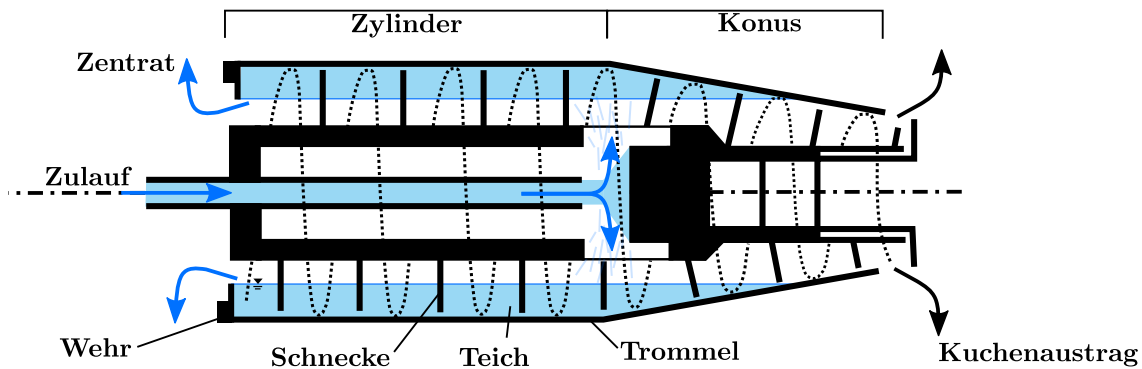


Abbildung 2.1.: Skizze zur Funktionsweise einer Gegenstrom-Dekantierzentrifuge.

Die Suspensionszufuhr in die helixförmige Prozesskammer erfolgt über ein Zulaufrohr mit Verteiler. Der Verteiler beschleunigt die Suspension vor und leitet diese in den sogenannten Teich. Dort sedimentieren die Partikel aufgrund der Zentrifugalkräfte und Dichtedifferenz zur Trommelwand hin und bilden ein Haufwerk aus. Die Schnecke rotiert mit einer definierten Differenzdrehzahl relativ zur Trommel und induziert so Scherkräfte in das Haufwerk, welche den Transport des Haufwerkes entlang des Schneckenkanals in Richtung Kuchenausstrag verursachen. Dabei konsolidiert das Sediment, taucht ab einem bestimmten Punkt im Bereich des Konus aus dem Teich auf und kann weiter entfeuchten. Der Begriff Konsolidierung umfasst bei feindispersen Haufwerken die Kompression und Scherverdichtung (siehe Kapitel 2.2.2). Bei grobdispersen Haufwerken ist die Untersättigung des Haufwerkes der dominierende Entfeuchtungsmechanismus. Die zunehmend geklärte Suspension, Zentrat genannt, fließt Richtung Zentratauslass ab und verlässt dort über ein Wehr die Zentrifuge. Da der Sedimenttransport und die Flussrichtung der Suspension für diesen Fall in unterschiedliche Richtungen erfolgt, heißt diese Bauweise Gegenstrom-Dekantierzentrifuge. Dies ist eine typische Bauweise und der Fokus dieser Arbeit liegt auf Gegenstrom-Dekantierzentrifugen, wobei weitere Bauarten existieren. Zusätzliche Informationen zu Sonderbauweisen sind in Stahl [64] zu finden. Wichtige geometrische Größen und Prozessparameter für die Auslegung und den Betrieb von Dekantierzentrifugen sind in Abbildung 2.2 dargestellt.

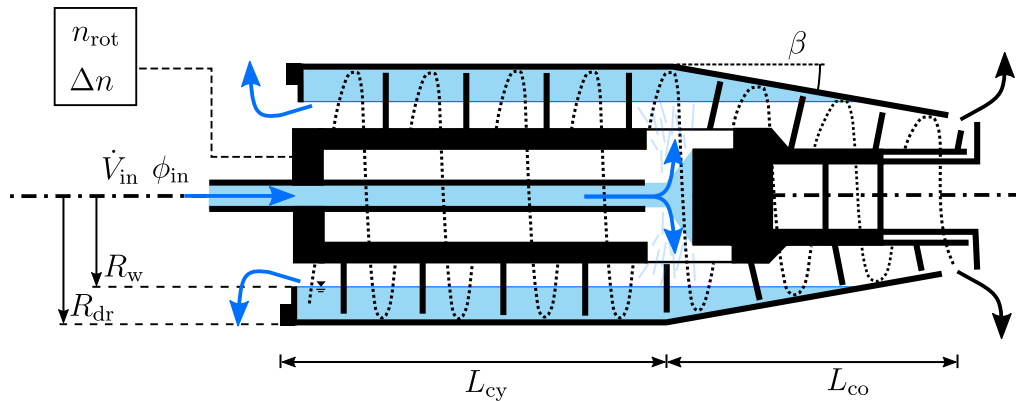


Abbildung 2.2.: Typische Geometrie- und Prozessparameter einer Dekantierzentrifuge (Gegenstrombauweise).

Die Länge des Zylinders  $L_{cy}$  und des Konus  $L_{co}$  definieren die beiden Bereiche im Dekanter. Der Konuswinkel  $\beta$  bestimmt die Steigung des Konus, den Auftauchpunkt des Sediments und in Kombination mit  $L_{co}$  die Verweilzeit des Sediments im konischen Bereich. Zur Charakterisierung des Teiches dient die Teichtiefe  $h_p$ . Sie ist definiert durch den Trommelradius  $R_{dr}$  und den Wehrradius  $R_w$  nach

$$h_p = R_{dr} - R_w. \quad (2.1)$$

Der eintretende Volumenstrom  $\dot{V}_{in}$  hat einen Feststoffvolumenanteil  $\phi_{in}$ . Der Volumenstrom in Kombination mit  $L_{cy}$  und  $h_p$  bestimmt die Verweilzeit der Partikel im zylindrischen Bereich. Ein weiterer wichtiger Prozessparameter ist die Drehzahl der Trommel  $n_{rot}$ , da sie quadratisch in die Zentrifugalbeschleunigung eingeht und dadurch die Sedimentation und Sedimentkonsolidierung maßgeblich beeinflusst. Häufig ist die Zentrifugalbeschleunigung zur besseren Vergleichbarkeit zwischen den Zentrifugen als dimensionslose, charakteristische Kennzahl, die Zentrifugenziffer  $C$ , angegeben. Sie drückt aus, um welches Vielfache die Zentrifugalbeschleunigung größer ist als die Erdbeschleunigung  $g$ :

$$C = \frac{R_c \omega^2}{g}. \quad (2.2)$$

Darin ist  $R_c$  ein charakteristischer Radius (beispielsweise der Wehrradius  $R_w$  oder der Trommelradius  $R_{dr}$ ) und  $\omega$  die Winkelgeschwindigkeit. Sie ist aus der Drehzahl  $n$  berechenbar nach:

$$\omega = 2\pi n. \quad (2.3)$$

Die Differenzdrehzahl  $\Delta n$  definiert, um wie viel schneller oder langsamer sich die Schnecke im Vergleich zur Trommel dreht. Je größer die Differenzdrehzahl ist, desto größer sind prinzipiell die Scherkräfte auf das Sediment und desto mehr Sediment fördert die Schnecke idealerweise aus der Zentrifuge. Allerdings ist zusätzlich das rheologische Verhalten des Sediments entscheidend für dessen Transport. Ist das Sediment nicht stark genug verdichtet, nimmt es die Scherkräfte der Schnecke nicht auf und ist dadurch nicht transportfähig. Des Weiteren kommt es in der Praxis durch innere Reibung im Haufwerk zu abweichendem Transportverhalten.

Für eine optimale Auslegung ist das Zusammenspiel zwischen der Verweilzeit der Suspension und der Zentrifugalbeschleunigung unter Berücksichtigung des Füllgrades der Zentrifuge entscheidend. Eine Steigerung der Drehzahl führt zu höheren Zentrifugalkräften und damit zu einer Verkürzung der Sedimentationszeit der Partikel, was prinzipiell die Abscheidung verbessert. Bei gleichbleibender Verweilzeit der Suspension führt dies typischerweise zu mehr Sediment in der Zentrifuge. Als Folge verringert sich der verfügbare Querschnitt der Strömung und damit wiederum die Verweilzeit, was sich negativ auf das Trennergebnis auswirkt oder sogar zu einem Überlaufen der Zentrifuge führt. Eine Option, dem entgegenzuwirken, ist die Differenzdrehzahl  $\Delta n$  zu erhöhen, um das Sediment schneller aus der Zentrifuge zu befördern. Allerdings ist dies nicht in beliebigem Umfang möglich, denn wenn die Scherkräfte zu hoch sind, wirkt die Schnecke wie ein Rührwerk und resuspendiert das bereits abgelagerte Sediment. Weiterhin komprimiert das Sediment durch die höhere Eigenmasse stärker. Bei der Entfeuchtung ist dies erwünscht, da der Feststoffanteil im Kuchen möglichst groß sein soll. Eine Erhöhung des Volumenstroms führt dazu, dass dieser pro Zeiteinheit mehr Masse in die Zentrifuge transportiert und somit die Verweilzeit der Suspension in der Zentrifuge verkürzt. Die Erhöhung des Feststoffvolumenanteils am Einlass  $\phi_{\text{in}}$  führt zu einem erhöhten Feststoffeintrag pro Zeiteinheit in die Zentrifuge. Beides steigert den Füllgrad der Zentrifuge und verringert dadurch die Trennleistung.

Der teilweise konträre Einfluss der zuvor genannten Parameter auf die Abscheideleistung und Sedimentkonsolidierung erschwert die theoretische Auslegung von Dekantierzentrifugen. Häufig existieren mehrere Parameterkonstellationen, um ein bestimmtes Ziel zu erreichen. Je nach Anwendung der Zentrifuge spielt neben der Partikelgrößenverteilung der Feststoffgehalt in Zentrat und Kuchen eine entscheidende Rolle zur Bewertung der oben genannten Grundvorgänge. Dazu sind in der Praxis verschiedene Kenngrößen definiert.



Kann neben dem Feststoff und der Matrixflüssigkeit ebenfalls Luft in das Bezugsvolumen  $V_{\text{ges}}$  der Probe eindringen, sind üblicherweise Porosität  $\varepsilon_{\text{p}}$ , Sättigung  $S_{\text{p}}$  und Restfeuchte  $F_{\text{R}}$  als Zielgrößen heranzuziehen. Die Porosität  $\varepsilon_{\text{p}}$  berechnet sich nach folgender Gleichung:

$$\varepsilon_{\text{p}} = \frac{V_{\text{H}}}{V_{\text{ges}}}. \quad (2.4)$$

Darin ist  $V_{\text{H}}$  das Hohlraumvolumen im gesamten Bezugsvolumen  $V_{\text{ges}}$ . Die Sättigung  $S_{\text{p}}$  beschreibt das Verhältnis aus Volumen der Matrixflüssigkeit  $V_{\text{l}}$  im Vergleich zum Hohlraumvolumen  $V_{\text{H}}$ :

$$S_{\text{p}} = \frac{V_{\text{l}}}{V_{\text{H}}}. \quad (2.5)$$

Die Restfeuchte  $F_{\text{R}}$  ist der Quotient aus Masse der Flüssigkeit  $m_{\text{l}}$  und der Gesamtmasse  $m_{\text{ges}}$ :

$$F_{\text{R}} = \frac{m_{\text{l}}}{m_{\text{ges}}}. \quad (2.6)$$

Kommt hingegen nur Feststoff und Matrixflüssigkeit im Kontrollvolumen vor, sind üblicherweise der Feststoffvolumenanteil  $\phi$  und Feststoffmassenanteil  $w$  als Zielgröße in Verwendung. Der Feststoffvolumenanteil  $\phi$  ist definiert nach:

$$\phi = \frac{V_{\text{s}}}{V_{\text{ges}}}. \quad (2.7)$$

In dieser Gleichung ist  $V_{\text{s}}$  das Feststoffvolumen und  $V_{\text{ges}}$  das gesamte Bezugsvolumen. Der Feststoffmassenanteil  $w$  ist über die Feststoffmasse  $m_{\text{s}}$  und Gesamtmasse  $m_{\text{ges}}$  folgendermaßen definiert:

$$w = \frac{m_{\text{s}}}{m_{\text{ges}}}. \quad (2.8)$$

Bei konstanter Dichte lassen sich Feststoffvolumenanteil und Feststoffmassenanteil direkt ineinander umrechnen. Der Abscheidegrad  $\eta_{\text{sep}}$  bezogen auf einen Bilanzraum ist definiert nach:

$$\eta_{\text{sep}} = \frac{w_{\text{in}} - w_{\text{ce}}}{w_{\text{in}}}. \quad (2.9)$$

Darin ist  $w_{\text{in}}$  der Feststoffmassenanteil des eintretenden Produktstroms und  $w_{\text{ce}}$  der Feststoffmassenanteil des austretenden Zentratstroms.

Eine detaillierte Beschreibung der Dimensionierung und Modellierung ist direkt in den nachfolgenden Kapiteln zu finden.

## 2.2. Materialverhalten partikulärer Systeme in Zentrifugen

Das Materialverhalten partikulärer Systeme in Zentrifugen umfasst die Sedimentationseigenschaften, die Sedimentkonsolidierung und im Falle von Dekantierzentrifugen den Sedimenttransport.

### 2.2.1. Sedimentation

Die Sedimentation spielt eine wichtige Rolle in der Fest-Flüssig-Trennung, insbesondere bei der Klärung und Klassierung partikulärer Systeme. Der Vorgang beruht auf der Dichtedifferenz zwischen Feststoffpartikel und Umgebungsflüssigkeit. Im Erdschwere- oder Zentrifugalfeld wirken dabei die Gewichts- beziehungsweise Zentrifugalkraft auf das Partikel. Dieses Kapitel beinhaltet die Grundlagen zur mathematischen Beschreibung der Sedimentation im Bereich von stark verdünnten bis hin zu konzentrierten Suspensionen.

#### Sedimentation in verdünnten Suspensionen

Die stationäre Sinkgeschwindigkeit nach Stokes [68] ist ein theoretischer Ansatz, um das Sedimentationsverhalten eines sphärischen Einzelpartikels im stationären Zustand zu beschreiben. Weiterhin liegen die Annahmen zu Grunde, dass die Matrixflüssigkeit Newtonsches Fließverhalten aufweist und sich eine schleichende Strömung um den Partikel einstellt. Stokes [68] bilanziert die Gewichts-, Auftriebs-, und Widerstandskraft eines Einzelpartikels und leitet daraus einen Ausdruck für die stationäre Sinkgeschwindigkeit,

$$u_{\text{pa}} = \sqrt{\frac{4}{3} \frac{x_{\text{pa}} g}{c_{\text{w}}(\text{Re}_{\text{pa}})} \frac{\Delta\rho}{\rho_{\text{l}}}}, \quad (2.10)$$

her. Darin enthalten ist der Partikeldurchmesser  $x_{pa}$ , die Erdbeschleunigung  $g$ , die Dichtedifferenz zwischen Feststoff und Flüssigkeit  $\Delta\rho$ , der Widerstandsbeiwert  $c_w$  in Abhängigkeit der partikelbezogenen Reynolds-Zahl  $Re_{pa}$  und die Flüssigkeitsdichte  $\rho_l$ . Die Reynolds-Zahl ist eine dimensionslose Kennzahl, welche das Verhältnis zwischen Zähigkeits- und Trägheitskräften beschreibt. Sie dient als Kenngröße zur Charakterisierung des Strömungszustandes und ist definiert als:

$$Re_{pa} = \frac{\rho_l u_{pa} x_{pa}}{\eta}. \quad (2.11)$$

Hier ist  $\eta$  die dynamische Viskosität der Flüssigphase. Nach Zierap und Bühler [75] ist der Widerstandsbeiwert für eine Kugel im Bereich der schleichenden Strömung ( $Re_{pa} < 0,8$  [64]) umgekehrt proportional zur Reynolds-Zahl:

$$c_w = \frac{24}{Re_{pa}}. \quad (2.12)$$

In Zentrifugen wirken zusätzlich zur Erdbeschleunigung Zentrifugalkräfte auf die Partikel. Die Zentrifugalbeschleunigung setzt sich aus dem Radius  $R_c$ , welcher den Abstand von Rotationsmittelpunkt zu Partikelposition definiert, und der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  im Quadrat zusammen. In sehr guter Näherung ist die Erdbeschleunigung vernachlässigbar gegenüber der Zentrifugalbeschleunigung. Einsetzen von Gleichung 2.2, 2.11 und 2.12 in Gleichung 2.10 liefert folgenden Ausdruck für die stationäre Sinkgeschwindigkeit eines Einzelpartikels im Zentrifugalfeld:

$$u_{st,C} = \frac{\Delta\rho R_c \omega^2 x_{pa}^2}{18\eta}. \quad (2.13)$$

Häufig ist der Feststoffgehalt in Suspensionen, welche im industriellen Maßstab im Einsatz sind, so hoch, dass die Annahme der Einzelpartikelsedimentation nicht mehr gültig und eine Erweiterung des Modells erforderlich ist.

### Sedimentation in konzentrierten Suspensionen

In den meisten praktischen und industriellen Prozessen sind Suspensionen im Einsatz, deren Feststoffgehalt erhöht ist, was bedeutet, dass mehrere Partikel gleichzeitig sedimentieren und sich gegenseitig in ihrem Sedimentationsverhalten beeinflussen. Dies hat zur Folge,

dass die durch Stokes getroffenen Annahmen nicht mehr zutreffend sind und das Sedimentationsverhalten von der Theorie nach Stokes [68] signifikant abweicht. Dabei können sedimentationsbegünstigende und sedimentationsbehindernde Effekte auftreten. In Abbildung 2.3 ist nach Bickert [7] der aus drei Veröffentlichungen [34, 32, 6] experimentell bestimmte Hinderungsfaktor, also die experimentell bestimmte Sinkgeschwindigkeit bezogen auf die theoretisch ermittelte Sinkgeschwindigkeit nach Stokes [68], von monodispersen Suspensionen über dem Feststoffvolumenanteil aufgetragen.

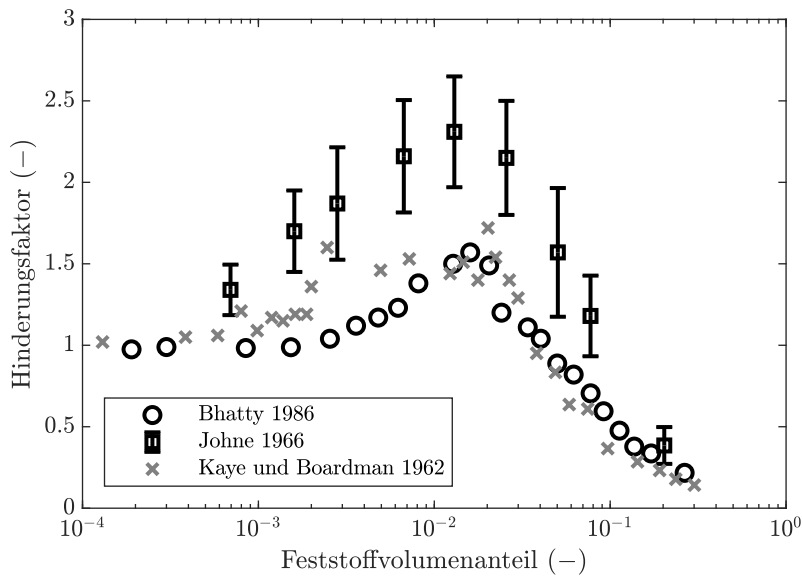


Abbildung 2.3.: Experimentell ermittelte Sinkgeschwindigkeit in technischen Suspensionen nach Bickert [7].

Dieses Verhältnis zwischen tatsächlicher Sinkgeschwindigkeit und der nach Stokes theoretisch ermittelten Sinkgeschwindigkeit ist in der Literatur häufig als Sedimentationshinderungsfaktor  $H$  bezeichnet. Mit steigendem Feststoffvolumenanteil nimmt der Hinderungsfaktor für diese drei untersuchten Systeme bis zu einem Maximum zu. Dies ist auf eine dynamische Clusterbildung der Einzelpartikel während des Sedimentationsvorgangs zurückzuführen. In diesem Bereich der sogenannten Clustersedimentation bilden die Partikel temporär und lokal Partikelcluster, was die Sedimentation aufgrund des zunehmenden Clusterdurchmessers begünstigt. Steigt der Feststoffvolumenanteil weiter, überwiegen zunehmend sedimentationsbehindernde Effekte. Dies ist auf hydrodynamische Wechselwirkungen zwischen den Einzelpartikeln zurückzuführen. Die Partikel sedimentieren als Kollektiv und es bildet sich ein Trennspegel zwischen geklärter Flüssigkeit und Sedimentationsfront aus. Bei polydispersen Suspensionen kann es zusätzlich zu Segregationseffekten kommen. Die ist stark von der

Partikelgrößenverteilung abhängig. Treten Segregationseffekte innerhalb des Partikelkollektivs auf, das heißt es bildet sich eine Sinkgeschwindigkeitsverteilung aus, trägt dieses Verhalten die Bezeichnung Schwarmsedimentation. Im Gegensatz dazu bezeichnet die Zonensedimentation den Bereich, in dem alle Partikel des Partikelkollektivs mit näherungsweise gleicher Geschwindigkeit sedimentieren. Dies beruht auf verschiedenen Effekten. Zum einen tritt in diesem Bereich ein Mitnahmeeffekt der kleineren Partikel durch die größeren Partikel auf, der dadurch die Sedimentation kleinerer Partikel begünstigt. Zum anderen bildet sich durch Verdrängung der Flüssigkeit ein Flüssigkeitsstrom entgegen der Sedimentationsrichtung aus, der die Sedimentationsgeschwindigkeit der Partikelklassen unterschiedlich stark beeinflusst. Der Übergang zwischen diesen charakteristischen Sedimentationsbereichen verläuft allerdings nicht scharf. Weiterführende Untersuchungen sind unter anderem bei Bickert [7] zu finden.

Für den Bereich der Zonensedimentation leiten Richardson und Zaki [54] einen Potenzansatz ab, um den Einfluss des Feststoffvolumenanteils  $\phi$  auf den Sedimentationshinderungsfaktor nach Richardson und Zaki [54]  $H_{RZ}$  zu bestimmen:

$$H_{RZ}(\phi) = (1 - \phi)^{n_{RZ}}. \quad (2.14)$$

Darin ist der Hinderungsfaktor nur von dem Feststoffvolumenanteil  $\phi$  der Suspension und einem Exponenten  $n_{RZ}$  abhängig. Der Exponent ist unter der Annahme monodisperser, sphärischer Partikel und schleichender Umströmung ( $Re < 0,8$  [64]) in guter Näherung  $n_{RZ} = 4,65$  [54]. Häufig weisen Suspensionen in der Praxis prozessbedingt eine Partikelgrößenverteilung und zusätzlich eine abweichende Form zur Kugel auf. Diese Abweichungen von den zuvor beschriebenen Annahmen beeinflussen das Sedimentationsverhalten maßgeblich und der Ansatz nach Richardson und Zaki [54] weicht deutlich im Vergleich zum realen Sedimentationsverhalten ab. Michaels und Bolger [47] präsentieren einen weiteren Potenzansatz zur Beschreibung des Hinderungsfaktors in Abhängigkeit des Feststoffvolumenanteils:

$$H_{MB}(\phi) = r_1 \left(1 - \frac{\phi}{r_2}\right)^{r_3}. \quad (2.15)$$

Darin sind  $r_1$ ,  $r_2$  und  $r_3$  empirische Parameter, die experimentell für ein Produktsystem zu bestimmen sind. Diese Parameter lassen sich nicht analytisch herleiten. Dafür hat dieser Ansatz den Vorteil, dass die empirischen Parameter die experimentell bestimmten Daten des zu untersuchenden Stoffsystems und dadurch das reale Sedimentationsverhalten des zu untersuchenden Produkts im Bereich der Zonensedimentation beschreiben. Die experimentelle

Materialcharakterisierung bezogen auf die Produktsysteme dieser Arbeit ist in Kapitel 4.2 aufgeführt.

### 2.2.2. Sedimentkonsolidierung

Prinzipiell erfolgt in der Literatur die Einteilung der mechanischen Entfeuchtung von Haufwerken in zwei charakteristische Mechanismen: Zum einen kompressibles Verhalten bei feindispersen Sediment (Sedimentkonsolidierung) und zum anderen inkompressibles Verhalten bei körnigem Sediment. Stahl [64] gibt als Anhaltspunkt an, dass bei Partikelgrößenverteilungen kleiner  $10\ \mu\text{m}$  tendenziell kompressibles Verhalten zu erwarten ist, da mit abnehmender Partikelgröße der Einfluss der interpartikulären Wechselwirkungen zunimmt.

#### Kompressibles Verhalten feindisperser Produktsysteme

Feindisperse Produkte weisen einen charakteristischen Porositätsgradienten entlang der Sedimenthöhe auf. Der lokale Feststoffvolumenanteil hängt vom lokalen Kompressionszustand des Sediments ab. In Abbildung 2.4 ist der prinzipielle Verlauf des Feststoffvolumenanteils  $\phi$ , welcher den Feststoffgehalt beschreibt, als Funktion der Normalspannung (auch Feststoffgerüstdruck genannt)  $p_y$ , welche den Kompressionszustand beschreibt, aufgetragen.

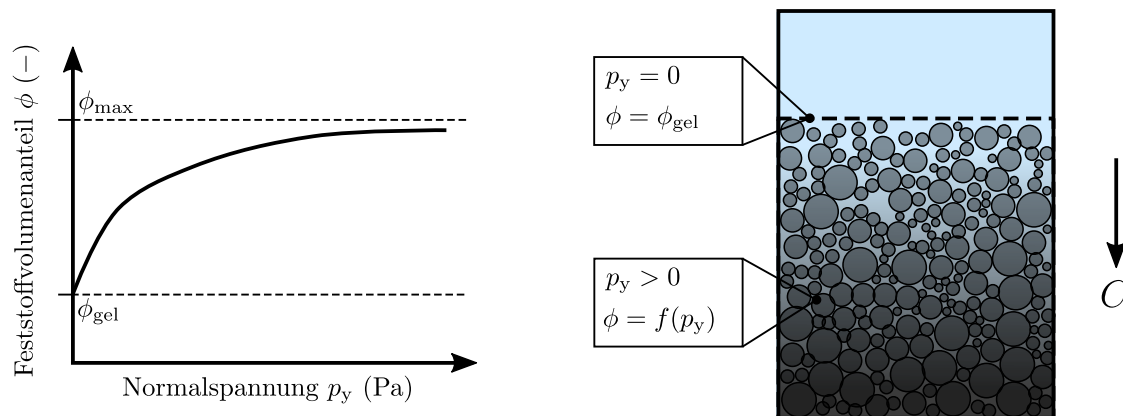


Abbildung 2.4.: Prinzipielles Kompressionsverhalten feindisperser Produktsysteme.

Mit zunehmender Normalspannung steigt der Feststoffvolumenanteil stetig. Bei einer Normalspannung von  $p_y = 0$  ist der Feststoffvolumenanteil gleich dem Gelpunkt  $\phi_{\text{gel}}$ . Es handelt sich um einen experimentell abgeleiteten Wert, der den Feststoffvolumenanteil angibt, ab

dem ein Sediment vorliegt. Bei einem Feststoffvolumenanteil oberhalb des Gelpunktes sind die Partikel ausreichend dicht gepackt, um ein Partikelnetzwerk (Sediment) zu bilden, das in der Lage ist, Normal- und Schubspannungen zu übertragen. Die Normalspannung und der Feststoffvolumenanteil nimmt in Wirkrichtung des Zentrifugalfeldes zu, da die Eigenmasse des Sediments zunimmt und dadurch mehr Kraft auf das Sediment ausübt und es somit zunehmend verdichtet. Die mechanische Entfeuchtung von feindispersen Sediment geschieht deswegen hauptsächlich über die Kompression des Sediments aufgrund seiner Eigenmasse im Zentrifugalfeld. Daraus folgt, dass für eine optimale Entfeuchtung mittels Zentrifugen eine hohe Sedimenthöhe und große Zentrifugalbeschleunigung einzustellen sind. Der Feststoffvolumenanteil nimmt dabei maximal bis zu einem bestimmten Grenzwert  $\phi_{\max}$  zu, welcher durch interpartikuläre Kräfte und die dichtest mögliche Packung des Partikelkollektivs bestimmt ist. Folglich stellt  $\phi_{\max}$  gleichzeitig die mechanische Entfeuchtungsgrenze in Dekantierzentrifugen dar. Weiterhin charakteristisch ist eine so geringe Permeabilität und ein so hoher Kapillareintrittsdruck, dass die Sättigung während des Konsolidierungsvorgangs immer größer ein ist.

Green et al. [23] liefern einen empirischen Ansatz um den Verlauf des Feststoffvolumenanteils  $\phi$  in Abhängigkeit der Normalspannung  $p_y$  für ein Produktsystem zu beschreiben:

$$\phi = \phi_{\text{gel}} \left( 1 + \frac{p_y}{p_1} \right)^{\frac{1}{p_2}} . \quad (2.16)$$

Darin sind  $p_1$  und  $p_2$  empirische Parameter, welche anhand von experimentellen Daten für ein bestimmtes Produkt zu bestimmen sind.

### Scherverdichtung feindisperser Produktsysteme

Die Schnecke der Dekantierzentrifuge dreht mit einer Differenzdrehzahl relativ zur Trommel wie in Kapitel 2.1 beschrieben. Aufgrund dieser Differenzdrehzahl induziert die Schnecke Scherkräfte in das Sediment. Flory [16] zeigt in seiner Arbeit, dass die Scherung einen Einfluss auf das Entfeuchtungsverhalten beim Prozess der Pressentfeuchtung hat. Erk [13] bestätigt, dass bei der Kompression mit überlagerter Scherung das Sediment stärker kompaktieren kann als bei rein uniaxialer Kompression. Die Bezeichnung für diesen Effekt ist Scherverdichtung, was in Abbildung 2.5 schematisch dargestellt ist.

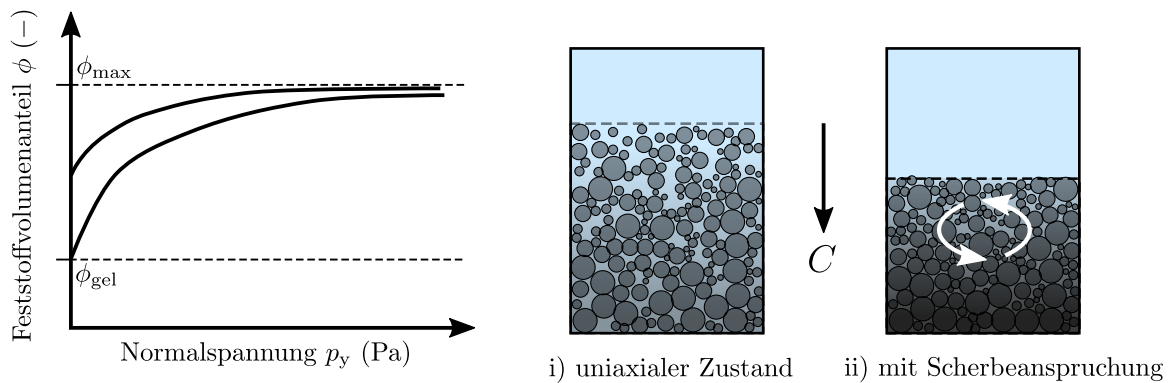


Abbildung 2.5.: Prinzipielles Kompressionsverhalten mit überlagerter Scherung feindisperser Produktsysteme.

Erk [13] führt dies auf Umlagerungsvorgänge der Partikel während der Sedimentkonsolidierung zurück. Die Partikel haben die Möglichkeit sich dadurch dichter zu repositionieren, was den Feststoffvolumenanteil in diesen Bereichen bei gleicher Normalspannung erhöht. Stahl [64] führt zusätzlich an, dass durch die Scherung vertikale Scherfugen im Sediment entstehen, welche das Abfließen der Matrixflüssigkeit aus tieferen Sedimentschichten erleichtert. Dadurch ist es erforderlich den Ansatz von Green et al. [23] zu erweitern, um die Scherverdichtung zu berücksichtigen. Die Modellierung der Sedimentkonsolidierung mit überlagerter Scherung und die experimentelle Materialcharakterisierung ist in Kapitel 4.4 detailliert beschrieben. Allgemein existieren weitere empirische Ansätze zur Beschreibung des Kompressionsverhaltens, welche unter anderem in Gleiss [19] zusammengefasst sind.

### 2.2.3. Sedimenttransport

Der Transport des Sediments ist von entscheidender Bedeutung für die Betriebsweise von Dekantierzentrifugen. Durch die kontinuierliche Fahrweise ist es erforderlich, dass das Sediment zuverlässig hangaufwärts über den Konus zum Kuchenauslass transportfähig ist. Daher muss das Sediment ausreichend verdichtet sein, damit die Kräfte der Schnecke auf das Sediment für den Transport ausreichen. Stahl [64] liefert zur Berechnung des Feststofftransportes im zylindrischen Teil von Dekantierzentrifugen einen Ansatz. In Abbildung 2.6 sind die Geschwindigkeitskomponenten der effektiven und theoretischen Transportgeschwindigkeit eines Feststoffelements skizziert.



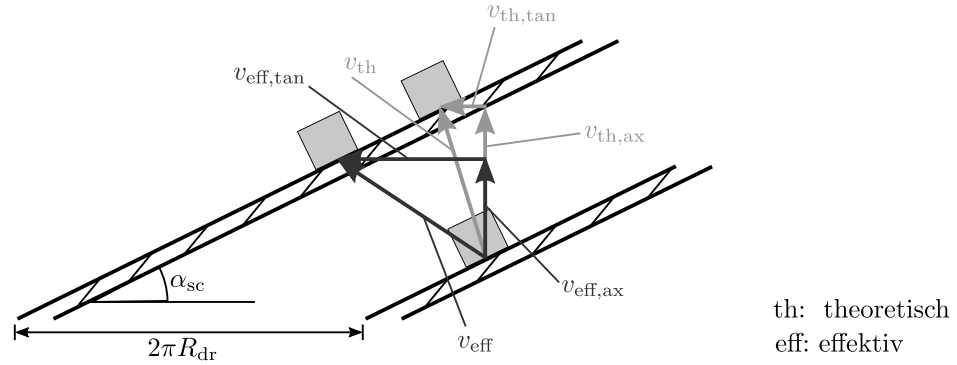


Abbildung 2.6.: Geschwindigkeitsvektoren des Sedimenttransports eines Massenelements nach Stahl [64].

Die theoretische Transportgeschwindigkeit bezeichnet den idealen reibungsfreien Transport zwischen Schnecke und Produkt. In der Realität kommt es zu Energiedissipation aufgrund von Reibung, was die theoretische Transportgeschwindigkeit  $v_{th}$  reduziert und in der effektiven Transportgeschwindigkeit  $v_{eff}$  resultiert. Die effektive axiale Transportgeschwindigkeit  $v_{eff,ax}$ , also die Geschwindigkeitskomponente parallel zur Drehachse des Dekanters, ist geometrisch über die Beziehung,

$$v_{eff,ax} = v_{eff} \cos(\alpha_{sc} + \varphi_{sc}), \quad (2.17)$$

definiert. In dieser Gleichung ist  $\alpha_{sc}$  der Schneckensteigungswinkel und  $\varphi_{sc}$  der Reibwinkel. Der Schneckensteigungswinkel  $\alpha_{sc}$  leitet sich nach folgender Gleichung aus der Geometrie des Schneckenkanals ab:

$$\alpha_{sc} = \arctan\left(\frac{W_{sc}}{2\pi R_{dr}}\right). \quad (2.18)$$

Der Reibwinkel  $\varphi_{sc}$  berechnet sich aus dem Reibwert der Schnecke  $\mu_{sc}$  nach

$$\varphi_{sc} = \arctan(\mu_{sc}). \quad (2.19)$$

Die effektive Transportgeschwindigkeit  $v_{eff}$  steht geometrisch (siehe Abbildung 2.6) in Zusammenhang mit der theoretischen Transportgeschwindigkeit  $v_{th}$  nach folgender Gleichung:

$$v_{\text{eff}} = \frac{v_{\text{th}}}{\cos(\varphi_{\text{sc}})}. \quad (2.20)$$

Bei reibungsfreiem Transport des Massenelements bewegt sich dieses aufgrund der Geometrie des Schneckenkanals und der Differenzdrehzahl der Schnecke  $\Delta n$  theoretisch mit,

$$v_{\text{th}} = 2\pi R_{\text{dr}} \Delta n \sin(\alpha_{\text{sc}}), \quad (2.21)$$

nach vorne. Gleichung 2.20 und 2.21 eingesetzt in Gleichung 2.17 führen zu folgendem Ausdruck für die effektive, axiale Transportgeschwindigkeit:

$$v_{\text{eff,ax}} = \frac{2\pi R_{\text{dr}} \Delta n \sin(\alpha_{\text{sc}}) \cos(\alpha_{\text{sc}} + \varphi_{\text{sc}})}{\cos(\varphi_{\text{sc}})}. \quad (2.22)$$

Stahl [64] definiert den Vorschubgrad  $\zeta_{\text{dec}}$  mit,

$$\zeta_{\text{dec}} = \frac{v_{\text{eff,ax}}}{v_{\text{th,ax}}}, \quad (2.23)$$

zur Beschreibung des Einflusses der Reibung im Vergleich zum idealen Transport. Die Formulierung eines Vorschubgrades, um den realen Transport zu beschreiben, ist analog zu der Transporteffizienz wie sie Gleiss [19] bei seiner Dissertation einführt.

## 2.3. Scale-up von Dekantierzentrifugen

Dieser Abschnitt gibt einen Überblick über den Scale-up von Dekantierzentrifugen mit Hilfe analytischer Gleichungen. Die Entwicklung und Spezifizierung dieser Theorien beginnt in den 1950er Jahren. Sie sind in der industriellen Anwendungen weit verbreitet [72, 38, 52].

### $\Sigma$ -Theorie

Ambler [4, 3, 2] stellt einen mathematischen Ansatz vor, um das Absetzverhalten zwischen verschiedenen Formen von Sedimentationszentrifugen zu vergleichen. Die sogenannte  $\Sigma$ -Theorie heißt auch „Theorie der äquivalenten Klärfläche“, weil der Sigma-Wert  $\Sigma$  die äquivalente Klärfläche eines Absetzbeckens ist, welches theoretisch die gleiche Abscheideleistung im

Gravitationsfeld wie die Zentrifuge hat. Sie ist definiert durch Multiplikation der relativen Zentrifugalbeschleunigung  $C$  mit der charakteristischen Fläche des Apparates  $A$ :

$$\Sigma = CA. \quad (2.24)$$

Im Falle von Dekantierzentrifugen definieren Ambler [4] und Stahl [64] die Fläche nach

$$A = 2\pi R_c L_c. \quad (2.25)$$

Dabei sind  $R_c$  als charakteristischer Radius und  $L_c$  als charakteristische Länge so zu definieren, dass die geometrischen Spezifikationen der Zentrifuge berücksichtigt sind. Oft ist der mittlere Radius,

$$R_c = \frac{1}{2}(R_w + R_{dr}) \quad (2.26)$$

als charakteristischer Radius eingesetzt. Die Methode ist jedoch nicht standardisiert. Die Definition der Parameter  $L_c$  und  $R_c$  ist bei verschiedenen Autoren und Zentrifugenherstellern unterschiedlich. Dies führt zu abweichenden Ergebnissen bei der Berechnung der  $\Sigma$ -Werte. Der Unterschied kann leicht Faktor fünf betragen und somit zu irreführenden Schlussfolgerungen führen. Loll et al. [40] haben die verschiedenen Berechnungsmethoden zusammengefasst und anhand einer beispielhaften Berechnung die zuvor beschriebenen Unterschiede veranschaulicht.

Die Grundlage dieses Ansatzes ist die Annahme der Sedimentationsgeschwindigkeit nach Stokes [68] (siehe Gleichung 2.13) in radiale Richtung zur Trommelwand hin zur Berechnung der Sedimentationszeit und einer Pfropfenströmung im Teich in axialer Richtung zum Zentratauslass hin zur Berechnung der Verweilzeit. Wenn die Verweilzeit größer oder gleich der erforderlichen Sedimentationszeit für einen bestimmten Partikel ist, wird dieser in der Zentrifuge abgetrennt. Der kritische Zentrifugendurchsatz berechnet sich aus diesem Trennkriterium nach:

$$\dot{V} = \frac{4\pi^3}{9} \frac{\Delta\rho}{\eta} x_{pa}^2 n_{rot}^2 L_c R_c^2. \quad (2.27)$$

Dabei ist  $\Delta\rho$  die Dichtedifferenz zwischen der festen und der flüssigen Phase,  $\eta$  die dynamische Viskosität der Flüssigkeit,  $x_{pa}$  der Partikeldurchmesser und  $n_{rot}$  die Drehzahl der Trommel. Zum Scale-up ist ein Skalierungskriterium erforderlich. Im Falle der Klassierung muss die

Grenzpartikelgröße  $x_{\text{cut}}$  in allen Skalen konstant bleiben. Das bedeutet, dass die gleiche Abscheideleistung theoretisch zu erwarten ist, wenn die Bedingung

$$\frac{\dot{V}_1}{\dot{V}_2} = \frac{\Sigma_1}{\Sigma_2} = \text{konst.} \quad (2.28)$$

erfüllt ist. Die Indizes stehen hier beispielhaft für Parameter im Pilotmaßstab (1) und Industriemaßstab (2). Leung [38] argumentiert, dass die Annahmen teilweise zu vereinfachend sind und nicht die entscheidenden physikalischen Effekte abdecken. Mehrere Studien (Buscall et al. [10], Ekdawi und Hunter [12], Richardson und Zaki [54] und Bickert [7]) haben gezeigt, dass die Sedimentationsgeschwindigkeit mit zunehmendem Feststoffvolumenanteil aufgrund des erhöhten Impulsaustausches zwischen den Partikeln und der kontinuierlichen Flüssigphase von der Sedimentationsgeschwindigkeit nach Stokes abweicht. Außerdem entsprechen streng genommen die  $\Sigma$ -Werte nur einer 50 % Rückgewinnung anstelle von 100 % [64, 38]. Daher verwenden verschiedene Autoren unterschiedliche Definitionen der charakteristischen Parameter, wie oben von Loll et al. [40] beschrieben, um das Scale-up empirisch anzupassen und die Annahmen zu kompensieren. Dies erfordert eine enorme Erfahrung und Expertise. Zudem berücksichtigt keiner dieser analytischen und empirischen Ansätze die Tatsache, dass Dekantierzentrifugen im Betrieb mit Sediment gefüllt sind.

### G-Volumen

Wakeman und Tarleton [72] führen einen vergleichbaren Ansatz im Sinne der  $\Sigma$ -Theorie ein. Hier muss das Produkt aus der Zentrifugalziffer  $C$  (oft im Englischen als  $G$  oder im Deutschen als  $Z$  bezeichnet) und dem Klärvolumen  $V$  geteilt durch den Volumenstrom  $\dot{V}$  für verschiedene Skalen konstant sein:

$$\frac{C_1 V_1}{\dot{V}_1} = \frac{C_2 V_2}{\dot{V}_2} = \text{konst.} \quad (2.29)$$

Da dieser Ansatz auf den gleichen Prinzipien basiert wie die  $\Sigma$ -Theorie, weist er die gleichen Einschränkungen auf, wie sie im vorigen Abschnitt diskutiert sind. Die Theorie lässt sich sogar direkt in die  $\Sigma$ -Theorie überführen.

## Leung-Zahl

Leung [38] führt die Unterschiede der  $\Sigma$ -Theorie hauptsächlich auf die Annahme eines gleichmäßig und komplett durchströmten Teichs zurück. Weiterhin nimmt Leung [38] an, dass eine sehr dünne Strömungsgrenzschicht an der Teichoberfläche in einer rotierenden Trommel existiert, insbesondere wenn die Flüssigkeitsoberfläche frei zur Atmosphäre ist [39]. Unterhalb dieser Schicht in radialer Richtung nimmt Leung [38] einen „stagnierenden Teich“ an, was bedeutet, dass die Flüssigkeit in diesem Bereich ruht. Ähnlich wie bei der  $\Sigma$ -Theorie leitet Leung [38] den Volumenstrom des geklärten Überlaufs  $\dot{V}$  als Produkt der Sedimentationsgeschwindigkeit nach Stokes, der Oberfläche des Teichs und dem quadratischen Beschleunigungswirkungsgrad des Zulaufs  $\epsilon_a^2$  ab:

$$\dot{V} = u_{\text{st}} 2\pi R_c L_c \epsilon_a^2 = \frac{4\pi^3}{9} \frac{\Delta\rho}{\eta_{\text{sus}}} x_{\text{pa}}^2 n_{\text{rot}}^2 L_{\text{cy}} R_w^2 \epsilon_a^2. \quad (2.30)$$

Der charakteristische Radius  $R_c$  ist gleich dem Wehrradius  $R_w$  und die charakteristische Länge  $L_c$  ist gleich der Länge des zylindrischen Teils  $L_{\text{cy}}$  definiert. Die Beschleunigungseffizienz  $\epsilon_a^2$  ist ein Parameter, der die Abweichung von einem perfekt vorbeschleunigten Zulauf beschreibt. Die Trennkorngröße  $x_{\text{cut}}$  bestimmt den maximalen Partikeldurchmesser, der in der Maschine separierbar ist. Nach Leung [38] ist das Abscheidekriterium wie folgt definiert:

$$\frac{x_{\text{cut}}}{x_c} = \frac{3}{\sqrt{\pi}} \text{Le}. \quad (2.31)$$

$x_c$  ist eine charakteristische Partikelgröße (z.B. mittlerer Durchmesser). Die Leung-Zahl  $\text{Le}$  ist definiert als

$$\text{Le} = \sqrt{\frac{\dot{V} \eta_{\text{sus}}}{L_{\text{cy}} \Delta\rho \omega R_w x_c \epsilon_a}}, \quad (2.32)$$

wobei  $\omega$  die Winkelgeschwindigkeit ist. Leung [38] interpretiert die Leung-Zahl als dimensionslose Kennzahl, die für das Scale-up von Klär-, Klassierungs- und Degrittingaufgaben bei Vollmantelzentrifugen anwendbar ist. Die dimensionslose Zahl sollte typischerweise in einem bestimmten Bereich liegen, der in Tabelle 2.1 dargestellt ist.

Tabelle 2.1.: Überblick über die empfohlenen Leung-Zahlen und Anwendungen nach Leung [38].

Le (–)	Partikelgrößenbereich ( $\mu\text{m}$ )	Zentrifugentyp
0,5 bis 5	1 bis 10	Hohe Drehzahl, geringer Durchsatz
5 bis 20	10 bis 45	moderate Drehzahl, moderater Durchsatz
größer 20	größer 45	geringe Drehzahl, hoher Durchsatz

## 3. Grundlagen zur mathematischen Modellierung

Dieses Kapitel beschreibt die mathematischen Grundlagen von Maschinellem Lernen (ML), Künstlichen Neuronalen Netzwerken (KNN) und der numerischen Strömungssimulation (CFD) im Rahmen ihrer Anwendung in dieser Arbeit.

### 3.1. Maschinelles Lernen

Maschinelles Lernen (engl. Machine Learning) gewinnt in den letzten Jahren zunehmend an Bedeutung in der ingenieurtechnischen Praxis. Alpaydin [1] definiert diesen Begriff folgendermaßen:

"Maschinelles Lernen heißt, Computer so zu programmieren, dass ein bestimmtes Leistungskriterium anhand von Beispieldaten oder Erfahrungswerten aus der Vergangenheit optimiert wird."

Das bedeutet, dass Computer mittels Algorithmen Muster oder Zusammenhänge zwischen bestimmten Variablen zu erkennen lernen. Ein wesentlicher Bestandteil ist dabei, dass Beispieldaten zur Verfügung stehen, anhand derer das Lernen möglich ist. Prinzipiell unterscheidet Alpaydin [1] zwischen drei Arten des Lernens: überwachtes Lernen (engl. supervised learning), unüberwachtes Lernen (engl. un-supervised learning) und bestärkendes Lernen (engl. reinforcement learning).

Beim überwachten Lernen ist die korrekte Zuordnung zwischen Ein- und Ausgabegrößen bekannt. Der Algorithmus lernt während der Trainingsphase einen funktionalen Zusammenhang zwischen diesen Paaren zu bilden, damit dieser auf unbekannte Eingabegrößen anwendbar ist. Beispielsweise erfolgt die Anpassung der Funktionsparameter so, dass die Funktion mit einem minimalen Fehler die Daten beschreibt. Beim unüberwachten Lernen sind die korrekten Ausgabewerte zu den gegebenen Eingabewerten unbekannt. Bei dieser Anwendung geht es

darum, Muster, Regelmäßigkeiten beziehungsweise Unregelmäßigkeiten oder Strukturen unter den Eingabedaten zu erkennen. Die Lernmethoden des sogenannten bestärkenden Lernens versuchen nicht einzelne Aktionen oder Zuordnungen sondern, Taktiken zu lernen. Dies ist beispielsweise bei Brettspielen vorzufinden. Hier ist das Ziel die bestmögliche Kombination aus Spielzügen zu finden, wobei der einzelne Spielzug in den Gesamtkontext einzubetten ist. Im Rahmen dieser Arbeit, wie ebenso bei klassischen, ingenieurtechnischen Anwendungen, steht das überwachte Lernen im Vordergrund, da häufig die Ein- und Ausgabeparameterkombinationen vorliegen. Deswegen wird an dieser Stelle nicht weiter auf unüberwachtes Lernen und bestärkendes Lernen eingegangen. Für weiterführende Information zu den beiden Lernmethoden sei auf Alpaydin [1] verwiesen.

Prinzipiell existieren zwei Kategorien von Problemstellungen: Klassifikation und Regression. In Abbildung 3.1 sind zur Visualisierung die zwei Grundtypen dargestellt.

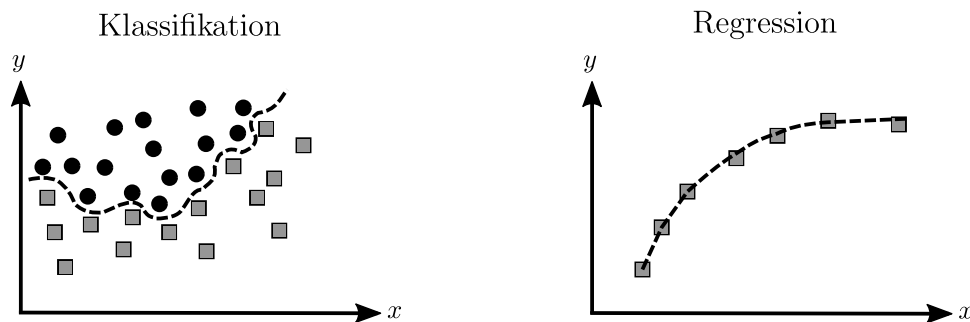


Abbildung 3.1.: Exemplarische Darstellung zur Klassifikation und Regression im Bezug auf Maschinelles Lernen.

Bei der Klassifikation ist das Ziel die Trainingsdaten in Klassen oder Gruppen einzuteilen, um neue Daten möglichst eindeutig einer der Klassen zuzuordnen. Bei der Regression liegt die Annahme zu Grunde, dass die Daten einen Trend wiedergeben. Ziel der Regression ist es den funktionalen Zusammenhang herzustellen. In der Praxis sind die Datenpunkte mit statistischen Unsicherheiten behaftet, beispielsweise aufgrund von Messfehlern und Toleranzen von Messgeräten. Das bedeutet, dass der Algorithmus diese Abhängigkeiten trotz Ungenauigkeiten im Datensatz zuverlässig beschreiben muss. Generalisierung bezeichnet, wie gut ein trainiertes Modell neue Daten vorhersagt.

Beim Trainieren anhand der Daten kann das sogenannte Underfitting und Overfitting auftreten. In Abbildung 3.2 sind schematisch die Funktionsverläufe für prinzipiell unter- und



überangepasste Daten dargestellt. Die Datenpunkte stellen die Trainingsdaten dar und die gestrichelte Linie den trainierten funktionalen Zusammenhang.

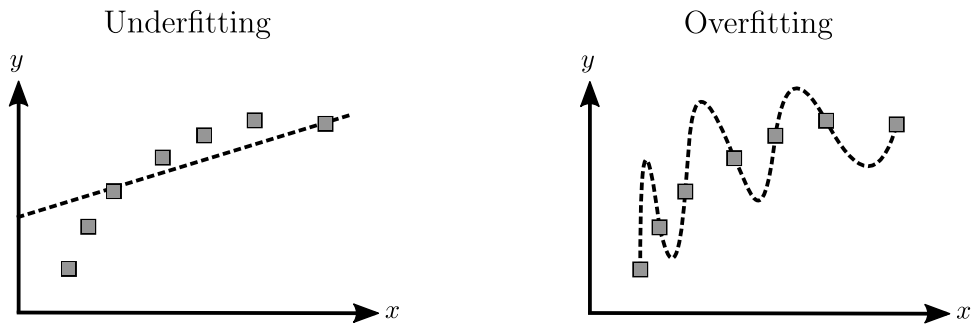


Abbildung 3.2.: Schematischer Funktionsverlauf bei Underfitting und Overfitting.

Bei Underfitting (dt. Unteranpassung) gibt das Modell den funktionalen Zusammenhang zu stark vereinfacht wieder und bildet die Daten nicht richtig ab. Das Modell ist folglich nicht komplex genug, um die Daten zu beschreiben. Im Falle des Overfittings (dt. Überanpassung) besitzt das Modell eine zu hohe Komplexität. Es gibt die einzelnen Datenpunkte nahezu perfekt wieder, allerdings ist der funktionale Zusammenhang für Interpolation und Extrapolation der Datenpunkte ungeeignet.

## 3.2. Künstliche neuronale Netzwerke

Künstliche neuronale Netzwerke (KNN) sind computergestützte und mathematische Modellsysteme, die in ihrer Struktur an das Netzwerk des neuronalen Systems von Lebewesen erinnern. Im Allgemeinen bestehen sie aus Neuronen, gewichteten Verbindungen und Aktivierungsfunktionen. Diese Elemente sind in Schichten (Hidden Layer) gruppiert. Neuronen empfangen mehrere Eingangssignale von anderen Neuronen und senden ein Ausgangssignal an mehrere andere Neuronen. Tendenziell gilt: Je mehr Neuronen eine Schicht eines neuronalen Netzwerkes hat, desto komplexere Sachverhalte kann diese prinzipiell verarbeiten. Die Gewichtung jeder Verbindung zwischen Neuronen erfolgt entsprechend ihrer Wichtigkeit. Dies ist die entscheidende Eigenschaft. Denn die Priorisierung der Verbindungen führt zur Lernfähigkeit des Netzwerkes. Die Aktivierungsfunktion berechnet die Ausgangswerte eines Neurons in Abhängigkeit von seinen Eingangswerten. Zusätzlich ist es möglich einen Bias-Vektor zur Aktivierungsfunktion hinzuzufügen. Der Bias-Vektor ist eine Art zusätzliches Gewicht oder

Schwellwert, welcher unabhängig von den Eingangswerten ist. Er ermöglicht den Ausgabewert der Schicht flexibler zu gestalten. Abbildung 3.3 zeigt beispielhaft ein neuronales Netzwerk mit Input, einer Hidden Layer und Output Layer mit Output.

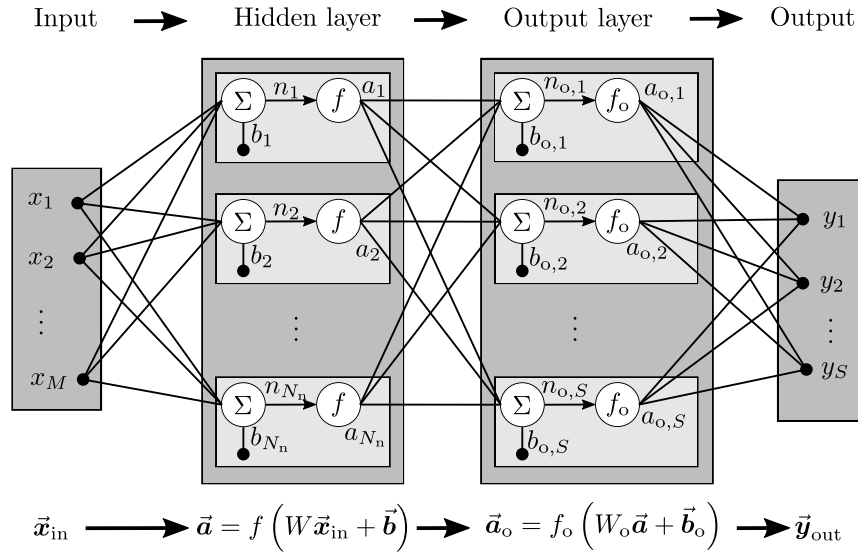


Abbildung 3.3.: Schematischer Aufbau eines neuronalen Netzwerks mit Input, einer Hidden Layer und Output Layer mit Output.

Der Vektor  $\vec{x}_{\text{in}}$  mit  $M$  vordefinierten Parametern bildet die Input Layer. Jeder Parameter sendet ein Signal an die  $N_n$  Neuronen in der Hidden Layer. Die Neuronen verarbeiten die Signale und liefern insgesamt  $N_n$  Ausgangssignale. In der Praxis ist es erforderlich die Anzahl an Eingangsgrößen eines Netzwerks  $M$ , die Anzahl an Neuronen  $N_n$  und die Anzahl an Ausgangsgrößen unabhängig wählen zu können. Daher gibt es eine Output Layer, welche aus den  $N_n$  Hidden Layer Signalen  $S$  Ausgangsgrößen liefert. Innerhalb einer Schicht von Neuronen dient das gewichtete Signal der Neuronen  $\vec{n}$  als Argument für die nichtlineare Aktivierungsfunktion  $f$  die den Ausgabewert der Schicht,

$$\vec{a} = f(\vec{n}), \quad (3.1)$$

liefert. Die Aktivierungsfunktion unterscheidet sich je nach Netzwerktypus, was im Folgenden detaillierter beschrieben ist. Die Verarbeitung der Neuronen mittels Aktivierungsfunktion bildet nach Venkatasubramanian [71] die Grundlage für die Entwicklung von bestimmten Trainingsalgorithmen. Die Output Layer stellt dabei einen Sonderfall dar. Die Aktivierungs-

funktion der Output Layer  $f_o$  ist lediglich eine lineare Funktion und dient dazu  $\vec{a}$  in  $S$  Ausgangsgrößen,

$$\vec{a}_o = f_o(\vec{n}_o), \quad (3.2)$$

zu überführen. Deswegen zählt diese nicht zu den Hidden Layers. Die Addition der gewichteten Eingangssignale mit einem Bias-Vektor  $\vec{b}$  bildet das Signal der Neuronen,

$$\vec{n} = W\vec{x}_{in} + \vec{b}. \quad (3.3)$$

Der Bias-Vektor  $\vec{b}$  ist ein zusätzliches, spezielles Neuron für jede Schicht. Er speichert einen skalaren Wert, typischerweise eins. Dies ist notwendig, um die Ausgabe der Aktivierungsfunktion flexibler zu gestalten. Die Gewichtungsmatrix,

$$W = \begin{pmatrix} w_{1,1} & w_{1,2} & \cdots & w_{1,M} \\ w_{2,1} & w_{2,2} & \cdots & w_{2,M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{N_n,1} & w_{N_n,2} & \cdots & w_{N_n,M} \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

enthält alle einzelnen Gewichtungen. Generell können die Informationen das neuronale Netzwerk auch zyklisch oder in Schleifen durchlaufen. Üblicherweise sind jedoch Feedforward-Netzwerke in Verwendung. Das heißt die Informationen bewegen sich nur in eine Richtung von den Eingangsknoten über die versteckten Knoten zu den Ausgangsknoten. Die Wahl der Aktivierungsfunktion  $f$  hängt von der Art und Verwendung des Netzwerkes ab. Zwei wichtige Typen von Feedforward-Netzwerken sind nach Alpaydin [1] Multilayer Perceptron (MLP) und Radial Basis Function (RBF) Netzwerke. MLP Netze nutzen die Sigmoid-Funktion,

$$\text{sig}(t) = \frac{1}{1 + \exp(-t)} = \frac{\exp(t)}{1 + \exp(t)} = \frac{1}{2} \left( 1 + \tanh\left(\frac{t}{2}\right) \right), \quad (3.5)$$

als Aktivierungsfunktion. RBF Netzwerke nutzen eine radiale Basisfunktion. Im Rahmen dieser Arbeit finden ausschließlich MLP Netzwerke Anwendung. Für weitere Informationen zu den unterschiedlichen Netzwerken Typen sei an dieser Stelle auf Alpaydin [1] verwiesen.

Backpropagation ist ein grundlegendes Verfahren des überwachten Lernens zum Trainieren von neuronalen Netzwerken [56]. Es beruht darauf, dass die Trainingsdaten bekannte Wer-

tepaare bilden. Ziel des Verfahrens ist es, den Fehler des neuronalen Netzwerkes, also die Abweichung zwischen den Ausgabewerten des KNN und den Trainingsdaten, zu minimieren. Dieser Fehler wird durch das Netzwerk zurückgeführt. Dabei passt der Algorithmus die Gewichte der Neuronen je nach deren Einfluss auf den Fehler an. Der Prozess wiederholt sich so lange bis der Fehler ausreichend klein ist oder ein Abbruchkriterium erreicht ist. Abschließend sind vom Trainingsdatensatz unabhängige Validierungs- und Testdaten nötig, um die Qualität des trainierten Netzwerkes zu bestimmen. Die Software Matlab bietet unter anderen zwei Trainingsalgorithmen basierend auf Backpropagation zum Training von neuronalen Netzwerken an: „trainlm“ und „trainbr“.

Der trainlm-Algorithmus basiert auf dem Levenberg-Marquardt-Algorithmus (LM) [42], welcher als Grundlage das Gauß-Newton-Verfahren nutzt. Das Gauß-Newton-Verfahren dient zur Optimierung von Problemen, bei denen das Minimum einer Summe von Fehlerquadraten zu finden ist. Es löst dabei iterativ die linearisierte Zielfunktion. Die Vorschrift für die Iteration beinhaltet eine sogenannte Koeffizientenmatrix. Ist diese Koeffizientenmatrix schlecht konditioniert, kann es zu Konvergenzproblemen beim Gauß-Newton-Verfahren kommen. Um die Konvergenz deutlich zu verbessern, erweitert Marquardt [42] die Koeffizientenmatrix um eine Diagonalmatrix und bildet dadurch den Levenberg-Marquardt-Algorithmus (LM).

Hagan und Menhaj [24] haben den LM-Algorithmus auf das Training von KNN angewendet. Beim trainlm-Algorithmus dient der Mittelwert der Summe der quadrierten Netzwerkfehler MSE während des Trainings von Feedforward-Netzwerken zur Bewertung des Netzwerkes. Der MSE ist wie folgt definiert:

$$\text{MSE} = \frac{1}{N_{\text{td}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{td}}} (e_i)^2 \quad (3.6)$$

Dabei ist  $N_{\text{td}}$  die Anzahl der Trainingsdaten und  $e_i$  der Netzwerkfehler. Für eine gegebene Anzahl von Neuronen passt das Netzwerk die Gewichte so an, dass der MSE möglichst minimal ist. Mit mehr Neuronen neigt das Netzwerk dazu, die Trainingsdaten besser zu reproduzieren, was zu Overfitting führen kann. Dies spiegelt sich darin wider, dass einzelnen Gewichte in diesem Fall relativ groß im Vergleich zu den übrigen sind. Deswegen nutzt der trainlm-Algorithmus intern Validierungsdaten, um Overfitting zu überprüfen, und abschließend Testdaten, um die Qualität des Netzwerkes zu evaluieren. Dieses Verfahren funktioniert besser, je mehr Validierungs- und Testdaten vorliegen. Speziell bei geringen Datenmengen kann es zu Problemen bezüglich der Generalisierung des Netzwerkes kommen. Venkatasubramanian

[71] beschreibt, dass in der Verfahrenstechnik häufig limitierte Datenmengen zur Verfügung stehen.

Der `trainbr`-Algorithmus erweitert den `trainlm`-Algorithmus und benutzt somit ebenfalls den Levenberg-Marquardt-Algorithmus [24]. Die Erweiterung besteht aus einer Regularisierung mit Hilfe eines Regularisierungsparameters und sorgt dadurch für gute Generalisierungsfähigkeiten [17, 41], sowie eine bessere Anwendbarkeit bei begrenztem Trainingsdatensatz. Die ursprüngliche Performance Funktion des `trainlm`-Algorithmus ist um den Mittelwert der Summe der quadrierten Netzwerkgewichte MSW erweitert. Dieser ist wie folgt definiert:

$$\text{MSW} = \frac{1}{N_n} \sum_{j=1}^{N_n} (w_j)^2. \quad (3.7)$$

Darin ist  $N_n$  die Anzahl der Neuronen und  $w_j$  die Gewichte der Neuronen. Wie bereits zuvor erwähnt ist für das Overfitting charakteristisch, dass einzelne Netzwerkgewichte entarten (im Vergleich zu den übrigen sehr groß sind) und der MSW somit insgesamt relativ groß ist, obwohl der MSE sehr klein sein kann. Der `trainlm`-Algorithmus würde das Training prinzipiell beenden und ein überangepasstes KNN liefern, da der MSE ausreichend klein ist und die Trainingskriterien erfüllt. Die Idee hinter dem `trainbr`-Algorithmus ist, nicht nur den MSE zu minimieren, sondern eine Kombination aus MSW und MSE, genannt MSEREG. Die zu minimierende regularisierte Zielfunktion des Optimierungsproblems ist somit der MSEREG. Dadurch ist sichergestellt, dass das KNN die Daten korrekt wiedergibt (Minimierung MSE), aber nicht overfittet (Minimierung MSW). Folglich führt dies zur Auswertefunktion für den `trainbr`-Algorithmus,

$$F = \text{MSEREG} = \gamma_p \text{MSW} + (1 - \gamma_p) \text{MSE}, \quad (3.8)$$

das die zuvor genannten Kriterien MSE und MSW kombiniert. Die Performance Ratio  $\gamma_p$  gleicht beide Komponenten aus und stellt den Regularisierungsparameter dar. Die Anpassung der Performance Ratio erfolgt während des Trainings automatisch [17, 41]. Deswegen berücksichtigt und bestraft der `trainbr`-Algorithmus Overfitting, was dazu führt, dass dieser Trainingsalgorithmus gute Generalisierungsfähigkeiten besitzt.

Es ist möglich, zu der hier gezeigten einen Hidden Layer eine beliebige Anzahl zusätzlicher Hidden Layers hinzuzufügen. Die Bezeichnung für diese Herangehensweise ist üblicherweise Deep Learning. Allerdings haben Henrique et al. [28] gezeigt, dass eine einzige Hidden Layer mit einer angemessenen Anzahl von Neuronen in der Lage ist, die meisten technischen Pro-

bleme zu beschreiben. Dies basiert auf dem von Hornik et al. [29] beschriebenen universellen Approximationstheorem. Darüber hinaus empfiehlt Venkatasubramanian [71] zunächst zu prüfen, ob Deep Learning für die Lösung des Problems wirklich nötig ist, und demzufolge neuronale Netzwerke mit einer Hidden Layer zu bevorzugen.

### 3.3. Grey-Box-Modellierung

White-Box, Black-Box und Grey-Box-Modelle stellen drei verschiedene Modellierungsmöglichkeiten dar. Das White-Box-Modell ist rein theoretisch und parametrisch. Das bedeutet, dass auf der Grundlage bekannter mathematischer und physikalischer Zusammenhänge und Prinzipien die unbekanntes Größen berechenbar sind. Diese Zusammenhänge reichen von einfachen analytischen Gleichungen und bestehenden empirischen Korrelationen bis hin zu komplexen Differentialgleichungen und Simulationsansätzen, die numerische Methoden zur Lösung erfordern. Obwohl das Prozessverhalten durchaus schwierig zu modellieren sein kann, sind die Berechnungen nachvollziehbar. Das White-Box-Modell trägt oft die Bezeichnung First-Principle-Modell, Glass-Box-Modell oder Clear-Box-Modell, da ein Einblick in die Physik möglich ist. Im Gegensatz dazu gibt es das sogenannte Black-Box-Modell, das für bestimmte Eingangsparameter die dazugehörigen Ausgangsparameter liefert. Das Black-Box-Modell verwendet keine Korrelationen oder Gleichungen mit physikalischem Hintergrund, um die Ausgangsparameter zu erhalten.

Das Grey-Box-Modell ist eine Kombination aus den beiden zuvor genannten Modellen. Prinzipiell können sie in der internen Struktur in Reihe oder parallel angeordnet sein. Zum Beispiel haben Psychogios und Ungar [51] eine serielle Struktur für die modellbasierte Steuerung und Prozessmodellierung der Fermentation verwendet. Pitarch et al. [49] haben darüber hinaus einen tiefer gehenden Grey-Box-Modellierungsansatz mit Submodellen benutzt, die Regressionsgleichungen zwischen internen Variablen in Gleichungen erster Ordnung integrieren. Abbildung 3.4 illustriert eine parallele Grey-Box-Modellstruktur.

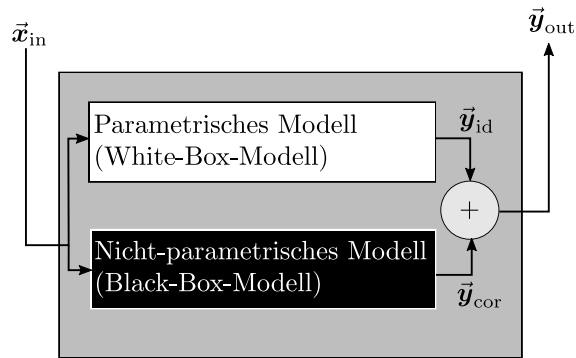


Abbildung 3.4.: Prinzipieller Aufbau eines parallelen, stationären Grey-Box-Modells.

Die Eingangsvariablen sind im Vektor  $\vec{x}_{in}$  definiert, der in das White-Box- und Black-Box-Modell übertragen wird. Das parametrische Modell dient einerseits als idealer Approximator für die betrachteten Prozessausgangsvariablen  $\vec{y}_{id}$ , der alle notwendigen Annahmen und Vereinfachungen enthält. Auf der anderen Seite wird das nicht-parametrische Modell angepasst, um Abweichungen zwischen dem idealen Modell und den tatsächlich verfügbaren Daten  $\vec{y}_{cor}$  zu ermitteln. Durch die systematische Kalibrierung des nicht-parametrischen Modells ist das resultierende Grey-Box-Modell in der Lage, das physikalische Verhalten zu berücksichtigen, welches im parametrischen Modell noch nicht enthalten ist.

### 3.4. Computational Fluid Dynamics

Computational Fluid Dynamics (CFD) ist eine Methode zur Berechnung von strömungsmechanischen Problemstellungen. Dies basiert auf numerischen Methoden und Algorithmen, welche es ermöglichen die teilweise komplexen Gleichungen der Strömungsmechanik mathematisch näherungsweise zu berechnen. Die Grundgleichungen der Strömungsmechanik sind partielle Differentialgleichungen und nur in speziellen Fällen exakt lösbar. Dieser Abschnitt zu CFD basiert im Wesentlichen auf Ferziger et al. [15] und behandelt nur einführend die Thematik. Für weiterführende Annahmen sei auf Ferziger et al. [15] oder Pozrikidis und Gartling [50] verwiesen.

Die Navier-Stokes Gleichungen sind wichtige nichtlineare, partielle Differentialgleichungen zweiter Ordnung zur Beschreibung der Strömung von Fluiden. Eine grundlegende Annahme ist die Auffassung des Fluides als Kontinuum. Das bedeutet, die Stoffeigenschaften sind für ein

infinitesimales Volumen innerhalb des Fluides konstant. Für ein inkompressibles, isothermes Fluid lautet die Massenerhaltungsgleichung:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (3.9)$$

In dieser Gleichung ist  $\vec{u}$  der Geschwindigkeitsvektor, welcher die einzelnen Geschwindigkeitskomponenten der Koordinatenrichtungen enthält, und  $\nabla \cdot$  die Divergenz. Die Annahme inkompressibel bedeutet, dass die Dichte konstant ist. Allgemein gilt dies für die meisten Flüssigkeiten und für Gase, deren Mach-Zahl kleiner 0,3 ist. Weiterhin bedeutet isotherm, dass die Viskosität bei der Bezugstemperatur konstant ist. Die Impulserhaltungsgleichung für ein inkompressibles, isothermes Fluid lautet:

$$\rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} \right) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \vec{u} + \rho \vec{g} + f_{\text{ext}}. \quad (3.10)$$

Hier ist  $\rho$  die Dichte,  $t$  die Zeit,  $\nabla$  der Gradientenoperator,  $p$  der Druck,  $\eta$  die dynamische Viskosität,  $\vec{g}$  die Erdbeschleunigung und  $f_{\text{ext}}$  können zusätzliche Kräfte sein, wie beispielsweise die Zentrifugalkraft.

Diese Gleichungen sind durch verschiedene Diskretisierungsansätze numerisch lösbar, was voraussetzt, dass das gesamte Rechengebiet in diskrete Teile aufgeteilt ist. Drei typische Methoden sind die Finite-Differenzen-Methode (FDM), Finite-Volumen-Methode (FVM) und Finite-Elemente-Methode (FEM). Im nachfolgenden liegt der Fokus nur auf der Finite-Volumen-Methode, da sie die Basis für die in dieser Arbeit verwendete Software OpenFOAM bildet. Bei der FVM wird das Rechengebiet in einzelne, zusammenhängende Kontrollvolumina unterteilt. Ein Algorithmus berechnet die gesuchten Variablen im Schwerpunkt jedes Kontrollvolumens in Abhängigkeit der benachbarten Kontrollvolumina. Dabei sind die benachbarten Kontrollvolumina über ihre Flächen im Austausch. Ist eine Fläche eines Kontrollvolumens gleichzeitig am Rand des Rechengebietes, ist die Vorgabe einer Randbedingung erforderlich. Bei der Dirichlet-Randbedingung ist der Variable ein konstanter Wert zugeordnet. Beispielsweise, dass aufgrund der Haftbedingung die Geschwindigkeit an einer Wand null ist. Bei der Neumann-Randbedingung ist dem Gradienten der Variable ein bestimmter Wert zugeordnet. Eine Kombination aus beiden Randbedingungen ist ebenfalls möglich.

Die Volume-of-Fluid-Methode (VOF) bietet die Möglichkeit zwei inkompressible, isotherme, nicht ineinander mischbare Fluide (nachfolgend beispielhaft mit 1 und 2 bezeichnet) zu simulieren. Dabei bleibt das Rechengitter bezüglich der Grenzfläche unverändert. Die Auflösung



der Grenzfläche erfolgt durch einen Schwellenwert im Volumenanteil. Bei der Berechnung ist jeder Gitterzelle ein bestimmter Volumenanteil  $\phi$  zugeordnet. Je nachdem, ob nur Fluid 1 (hier  $\phi = 0$ ), Fluid 2 ( hier  $\phi = 1$ ) oder eine Kombination aus beidem ( $0 < \phi < 1$ ) vorliegt. Der Austausch zwischen den Gitterzellen erfolgt durch die Transportgleichung:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}\phi) = 0. \quad (3.11)$$

Gitterzellen in denen nicht ausschließlich eines der beiden Fluide 1 und 2 vorliegt, werden als sogenannte Mischphase betrachtet. Abbildung 3.5 verdeutlicht schematisch die Diskretisierung eines Rechengebietes mittels der VOF-Methode und Auflösung der Phasengrenze durch die Zellen mit der Mischphase.

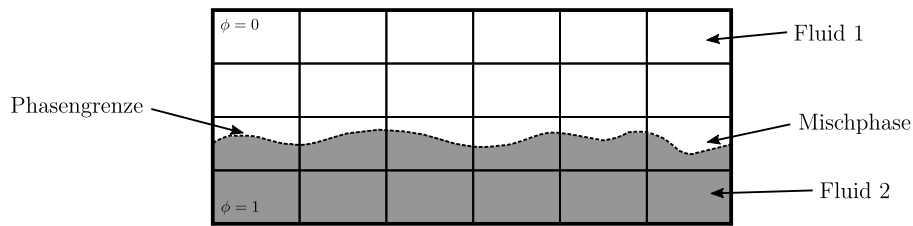


Abbildung 3.5.: Schematische Diskretisierung eine Strömung mittels VOF-Methode und Phasengrenze als Mischphase.

Deren Stoffeigenschaften setzen sich anteilig aus den Reinstoffgrößen zusammen. Die Dichte der Mischphase  $\rho_m$  ist somit definiert als:

$$\rho_m = \phi\rho_1 + (1 - \phi)\rho_2. \quad (3.12)$$

Die dynamische Viskosität der Mischphase  $\eta_m$  setzt sich zusammen nach

$$\eta_m = \phi\eta_1 + (1 - \phi)\eta_2. \quad (3.13)$$

An der Phasengrenze spielt zusätzlich die Oberflächenkraft eine Rolle. Sie wirkt nur in den Gitterzellen, in denen sich die Grenzfläche befindet. Daher wird für diese Gitterzellen in Gleichung 3.10 zusätzlich die Oberflächenkraft  $f_\sigma$  eingesetzt. Sie ist definiert als:

$$f_\sigma = \sigma \kappa \nabla \phi. \quad (3.14)$$

$\sigma$  ist die Oberflächenspannung und  $\kappa$  die Krümmung der freien Oberfläche, welche nach

$$\kappa = \nabla \cdot \vec{n}_{\text{norm}} = -\nabla \cdot \left( \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) \quad (3.15)$$

berechenbar ist.

OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) ist eine open source Software, welche numerische Löser für CFD-Berechnungen zur Verfügung stellt. Darunter befindet sich der Löser interFOAM zur Anwendung von Strömungsberechnungen bei zwei nicht mischbaren, inkompressiblen Phasen auf Basis der VOF-Methode. Diese kommt im Rahmen der CFD Simulation dieser Arbeit zum Einsatz.

## 4. Materialcharakterisierung

Dieses Kapitel beschreibt die Materialcharakterisierung, welche die Basis für die Integration des realen Materialverhaltens in die Simulationsumgebung bildet, und diskutiert direkt die experimentellen Ergebnisse für die verwendeten Materialien. Dies umfasst Experimente an Batch-Zentrifugen im Labormaßstab zur Bestimmung des Gelpunktes, der Sedimentationshinderungsfunktion und der Sedimentkonsolidierungsfunktion. Ziel ist es, das reale Materialverhalten in der Modellierung abzubilden, um dadurch vom Labormaßstab bis hin zum Industriemaßstab alle Baugrößen an Dekantierzentrifugen zu simulieren. Der Fokus in dieser Arbeit liegt ausschließlich auf Calciumcarbonat-Wasser Suspensionen als Produktsystem. Allerdings ist die Materialcharakterisierung ebenso mit anderen Materialien erfolgreich durchführbar. Gleiss [19] hat beispielsweise sowohl Calciumcarbonat-Wasser als auch Polyvinylchlorid-Wasser Suspensionen verwendet.

### 4.1. Verwendete Materialien

Calciumcarbonat lässt sich, abhängig vom Herstellungsprozess, prinzipiell in zwei Produktkategorien einteilen: PCC und GCC. Precipitated Calcium Carbonate (PCC, dt. gefälltes Calciumcarbonat) bildet sich durch Fällung eines Calciumsalzes aus einer Lösung unter definierten Bedingungen. In der Regel ist als Calciumquelle eine Lösung aus Calciumhydroxid  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  in Verwendung. Das bedeutet die gewünschten Partikel wachsen aus sehr kleinen Partikeln auf die gewünschte Größe an. Somit lassen sich Partikel im submikronen Bereich herstellen. Darüber hinaus hängt die Partikelform stark von den Fällungsbedingungen, wie beispielsweise Konzentration, lokaler Energieeintrag und Temperatur, ab. Ground Calcium Carbonate (GCC, dt. gemahlene Calciumcarbonat) wird bergmännisch abgebaut und häufig mittels Kugelmöhlen auf die gewünschte Partikelgröße gemahlen. In dieser Arbeit sind ausschließlich GCC Produkte in Verwendung. Diese sind nachfolgend als CC1, CC2, CC3, usw. bezeichnet. In Abbildung 4.1 sind Aufnahmen der getrockneten Calciumcarbonatpartikel CC1 und CC3 mit einem Laser Scanning Mikroskop (LSM, VK-X110, Keyence) zu sehen.

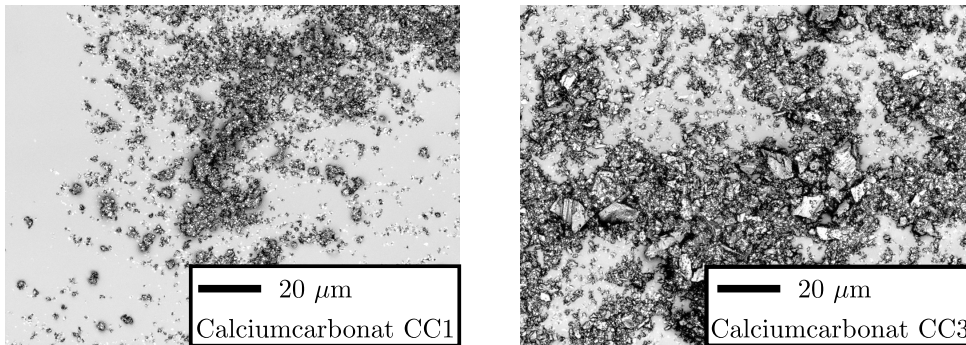


Abbildung 4.1.: Laser Scanning Mikroskop (LSM) Aufnahmen zweier Calciumcarbonatprodukte mit der Bezeichnung CC1 und CC3.

Die Aufnahmen verdeutlichen, dass aufgrund des Verarbeitungsprozesses die Partikel in der Realität eine zerklüftete Gestalt aufweisen. Stokes [68] und Richardson und Zaki [54] gehen jeweils bei der Herleitung ihrer analytischen Gleichungen von kugelförmigen Partikeln aus. Die kumulative Summenverteilung bezogen auf das Volumen  $Q_3$  der verwendeten Partikelsysteme ist in Abbildung 4.2 über dem Partikeldurchmesser  $x_p$  aufgetragen. Die Messung der Partikelgrößenverteilung von CC1, CC2 und CC3 erfolgte mit einem SediGraph III Plus (micromeritics).

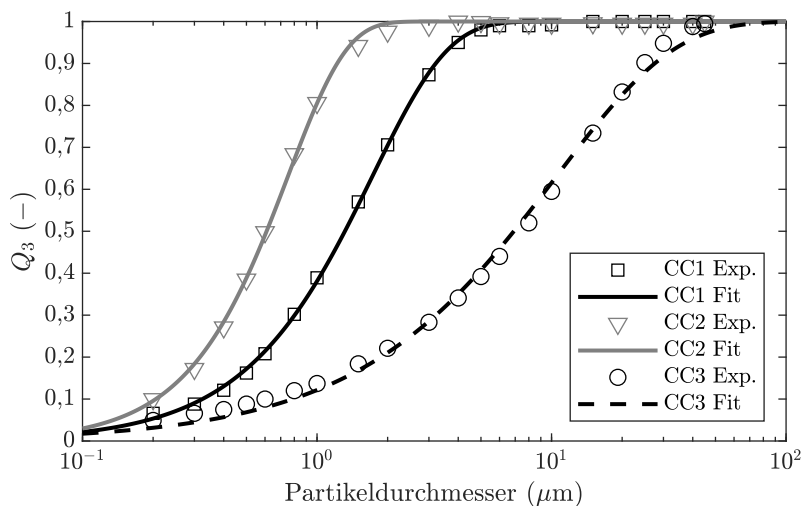


Abbildung 4.2.: Experimentell bestimmte Partikelgrößenverteilungen der Produkte CC1, CC2 und CC3 mit dazugehöriger Anpassungsfunktion.

Die gemessenen Partikelgrößenverteilungen liegen als diskrete Messwerte vor. Für die Benutzung in der Simulationsumgebung sind diese in kontinuierliche Modellverteilungen zu überführen. Dazu ist in diesem Fall die Weibull-Verteilung,

$$Q_3(x_{pa}) = 1 - \exp\left(-(\lambda_1 x_{pa})^{\lambda_2}\right), \quad (4.1)$$

geeignet, welche durch zwei Parameter  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$  definiert ist. Diese beiden Parameter sind an die Messdaten anzupassen und für jedes der Produktsysteme zu bestimmen. Die Weibull-Verteilung ist häufig zur Beschreibung von Partikelgrößenverteilungen gemahlener Produktsysteme anzutreffen. Der Vergleich zwischen Messwerten und Modellverteilung in Abbildung 4.2 bestätigt, dass die gewählte Verteilung sehr gut geeignet ist um die experimentell bestimmten diskreten Partikelgrößenverteilungen zu beschreiben.

## 4.2. Sedimentationshinderungsfunktion

Das Sedimentationsverhalten von Partikelkollektiven in technischen Suspensionen ist von unterschiedlichen Einflussgrößen, beispielsweise dem Feststoffgehalt der Suspension, abhängig (siehe Kapitel 2.2.1). Daher ist die Charakterisierung der Sedimentationseigenschaften der betrachteten Suspension, ausgedrückt durch die sogenannte Hinderungsfunktion, von zentraler Bedeutung. Sie liefert einen Hinderungsfaktor in Abhängigkeit des Feststoffvolumenanteils der beschreibt, um wie viel besser oder schlechter das reale Sedimentationsverhalten im Vergleich zur theoretisch bestimmten Einzelkornsedimentation nach Stokes [68] ist. Die Bestimmung dieser Materialfunktion erfolgt durch Experimente mittels einer diskontinuierlichen Analysezentrifuge im Labormaßstab. Die Ergebnisse sind auf andere Zentrifugentypen übertragbar und dienen als Eingangsgrößen für die Simulation von kontinuierlichen Zentrifugen. Dieser Abschnitt beschreibt das experimentelle Vorgehen zur Bestimmung der Hinderungsfunktion und die Ergebnisse für die in dieser Arbeit betrachteten Produkte. Die Materialcharakterisierung der Sedimentationshinderungsfunktion basiert auf der Arbeit von Gleiss [19].

### Experimentelles Vorgehen

Das Ziel der Experimente ist es, die Sinkgeschwindigkeit der Partikel in Abhängigkeit des Feststoffvolumenanteils zu bestimmen. Dazu kommt die Analysezentrifuge LUMiSizer (LUM GmbH, Deutschland) zum Einsatz. Die Zentrifuge besteht aus einem Zentrifugenteller, auf

dem die Probeküvetten eingespannt sind, sowie einer Messeinheit. Diese emittiert Licht einer definierten Wellenlänge durch die Küvette inklusive Probe und detektiert orts- und zeitaufgelöst auf der anderen Seite der Küvette die Extinktion beziehungsweise Transmission des Lichts. Die Transmission entlang der Probe ändert sich während des Sedimentationsvorgangs, da die ursprünglich homogen verteilten Partikel der Suspension sedimentieren und sich mit der Zeit geklärter Überstand und verdichtetes Sediment ausbildet. Somit lassen sich zeitlich aufgelöst charakteristische Transmissionsprofile messen, welche Rückschlüsse auf das Sedimentationsverhalten der Probe erlauben.

Abbildung 4.3 zeigt schematisch Transmissionsprofile zu verschiedenen Zeitpunkten während des Sedimentationsvorgangs einer idealen Zonensedimentation.

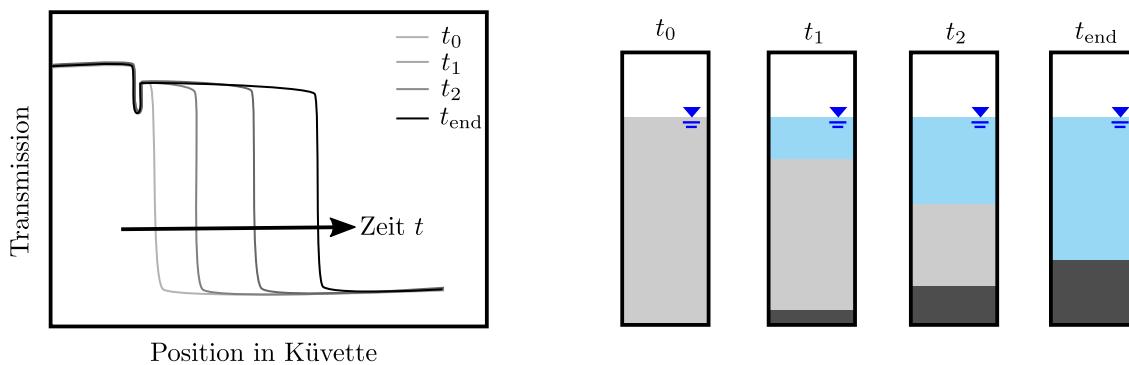


Abbildung 4.3.: Messprinzip und charakteristische Transmissionsprofile zur Bestimmung der Sinkgeschwindigkeit im Bereich der Zonensedimentation.

Die Suspension liegt zum Startzeitpunkt  $t_0$  ideal durchmischt mit einem definierten Feststoffvolumenanteil  $\phi$  vor und hat eine homogene, tendenziell geringe Transmission. Durch Sedimentation bildet sich am Boden der Küvette verdichtetes Sediment und an der Oberfläche geklärte Flüssigkeit ( $t_1$ ). Bei der idealen Zonensedimentation bleibt der Feststoffvolumenanteil in der Suspensionszone konstant und es bildet sich ein Trennspiegel, auch Sedimentationsfront genannt, zwischen geklärter Flüssigkeit und Suspension aus. Der Bereich der geklärten Flüssigkeit hat eine deutlich höhere Transmission im Vergleich zur ursprünglichen Suspension. Daher lässt sich die Sedimentationsfront in den Transmissionsprofilen über der Zeit ( $t_0$  bis  $t_{\text{end}}$ ) detektieren bis sich ein stationärer Endzustand  $t_{\text{end}}$  einstellt. Die Änderung der Position des Trennspiegels über der Zeit ist somit die Sinkgeschwindigkeit  $u_{\text{exp,C}}(\phi)$  im Bezug auf die eingestellte Zentrifugalbeschleunigung  $C_{\text{exp}}$ . Der experimentell bestimmte Sedimen-

tationshinderungsfaktor für ein bestimmten Feststoffvolumenanteil  $H_{\text{exp}}(\phi)$  berechnet sich nach

$$H_{\text{exp}}(\phi) = \frac{u_{\text{exp,C}}(\phi)}{u_{\text{st,C}}} = \frac{u_{\text{exp,g}}(\phi)}{u_{\text{st,g}}}. \quad (4.2)$$

$u_{\text{exp,c}}(\phi)$  ist die experimentell bestimmte Sinkgeschwindigkeit und  $u_{\text{st,c}}$  ist die theoretisch berechnete Sinkgeschwindigkeit nach Stokes [68] bei anliegender Zentrifugalbeschleunigung  $C_{\text{exp}}$ .

Die experimentell bestimmte Sinkgeschwindigkeit im Bezug auf die Zentrifugalbeschleunigung  $u_{\text{exp,C}}(\phi)$  ist über folgende Gleichung auf das Gravitationsfeld der Erde übertragbar  $u_{\text{exp,g}}(\phi)$ :

$$u_{\text{exp,g}}(\phi) = u_{\text{exp,C}}(\phi) \frac{g}{C_{\text{exp}}}. \quad (4.3)$$

Darin ist  $g$  die Erdbeschleunigung. Dies basiert auf der Annahme, dass die Hinderungsfunktion in verschiedene Bezugssysteme beliebig übertragbar ist.

## Ergebnisse

Die experimentell ermittelten Sinkgeschwindigkeiten und Sedimentationshinderungsfunktionen der Produkte CC1, CC2 und CC3 sind in Abbildung 4.4 dargestellt. Zur besseren Vergleichbarkeit ist die bezogene Sinkgeschwindigkeit  $u_{\text{exp,g}}$  (siehe Gleichung 4.3) bei verschiedenen Feststoffvolumenanteilen  $\phi$  in Abbildung 4.4(a) aufgetragen.

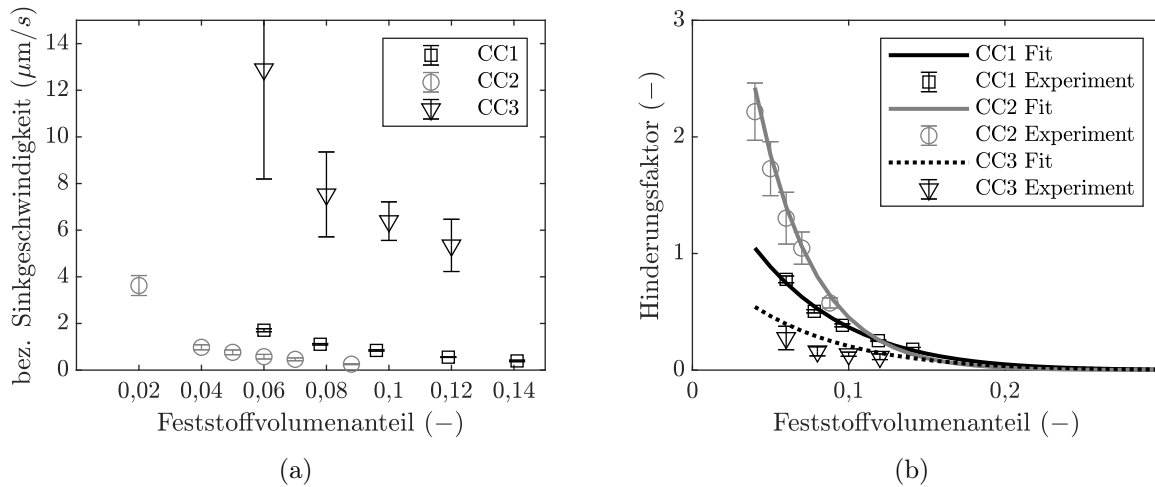


Abbildung 4.4.: Experimentelle Ergebnisse zur Materialcharakterisierung der Sinkgeschwindigkeit und des Sedimentationshinderungsfaktor in Abhängigkeit des Feststoffvolumenanteils.

Die bezogene Sinkgeschwindigkeit nimmt mit zunehmenden Feststoffvolumenanteil für alle untersuchten Produkte ab. Dies deckt sich mit Beobachtungen von Gleiss [19] und ist durch den erhöhten Impulsaustausch der Partikel bei zunehmendem Feststoffvolumenanteil zu erklären. Des Weiteren steigt die bezogene Sinkgeschwindigkeit der Partikelsysteme bei gleichem Feststoffvolumenanteil mit größer werdenden Partikelgrößenverteilungen. Der Partikeldurchmesser geht quadratisch in die Sinkgeschwindigkeit nach Stokes (siehe Gleichung 2.13) ein, was diesen Trend erklärt. Für jedes Partikelsystem ist nach Gleichung 2.13 die theoretische Sinkgeschwindigkeit nach Stokes im Zentrifugalfeld  $u_{\text{st},C}$  analytisch berechenbar. Dadurch lassen sich die experimentellen Hinderungsfaktoren  $H_{\text{exp}}$  nach Gleichung 4.2 aus den Experimenten berechnen. Die Partikel der verwendeten Produkte liegen größenverteilt vor (siehe Abbildung 4.2). Allerdings ist nur ein charakteristischer Partikeldurchmesser zur Berechnung der Sinkgeschwindigkeit nach Stokes im Zentrifugalfeld zu benutzen. Deswegen beziehen sich die in Abbildung 4.4(b) gezeigten Hinderungsfaktoren jeweils auf den Partikeldurchmesser  $x_{60,3}$  der jeweiligen Verteilung. Als Modellfunktion dient der Ansatz nach Michaels und Bolger [47] (siehe Gleichung 2.15). Anschließend erfolgt die Anpassung der Fit-Parameter  $r_1$ ,  $r_2$  und  $r_3$  an die experimentellen Daten  $H_{\text{exp}}$  für jedes Produktsystem. Abbildung 4.4(b) zeigt, dass der Ansatz nach Michaels und Bolger [47] mit den für jedes Produktsystem bestimmten Fit-Parameter  $r_1$ ,  $r_2$  und  $r_3$  geeignet ist, die experimentell ermittelten Daten wiederzugeben. Somit ergibt sich für jede Calciumcarbonat-Wasser Suspension eine



Sedimentationshinderungsfunktion mit den Parametern  $r_1$ ,  $r_2$  und  $r_3$ , welche den Einfluss des Feststoffvolumenanteils auf die Sedimentation beschreibt. Die Grundlage zur Messung der Sedimentationshinderungsfaktoren mit der zuvor beschriebenen Methode ist die Sedimentation im Bereich der Zonensedimentation, da die für diesen Bereich charakteristische Sedimentationsfront eindeutig detektierbar ist. Bei kleiner werdenden Feststoffvolumenanteilen außerhalb des gemessenen Bereichs findet bei den jeweiligen Produkten in Abbildung 4.4 der Übergang zur Schwarmsedimentation statt. Dieser Übergang ist fließend und daran erkennbar, dass die Sedimentationsfront unscharf ist, was sich an dem zunehmenden Messfehler bemerkbar macht. Dies stellt eine Limitierung der verwendeten Methode dar. Theoretisch verlaufen die Hinderungsfaktoren für sehr kleine Feststoffvolumenanteile gegen eins, da ab einem gewissen Feststoffvolumenanteil nur noch so wenige Partikel in der Suspension vorliegen, dass diese als Einzelpartikel und somit theoretisch mit der Sedimentationsgeschwindigkeit nach Stokes sedimentieren. Allerdings deckt die verwendete Methode den technisch relevanten Bereich in typischen Applikationen von Dekantierzentrifugen ab und ist somit ausreichend. Es ist nicht erforderlich diese Bereiche der Schwarmsedimentation und Sedimentation nach Stokes messtechnisch aufzulösen.

### 4.3. Gelpunkt

Der Gelpunkt  $\phi_{\text{gel}}$  ist ein theoretischer Wert und charakterisiert den Übergang zwischen Suspension und Sediment (siehe Kapitel 2.2.2 und Abbildung 2.4). Dieser Übergangspunkt ist wichtig für die Modellierung, um Suspension von Sediment zu unterscheiden. Zusätzlich ist der Gelpunkt eine Bezugsgröße bei der Ermittlung der Sedimentkonsolidierungsfunktion.

#### Experimentelles Vorgehen

Die experimentell Bestimmung des Gelpunktes erfolgt mittels Versuchen im Erdschwerefeld. Dazu sind mehrere baugleiche Messzylinder mit einer homogen durchmischten Suspension mit definiertem Feststoffvolumenanteil  $\phi_0$  zu füllen. In jeden Messzylinder ist ein jeweils anderes Ausgangsvolumen  $V_0$  einzufüllen. Aufgrund der Schwerkraft sedimentieren die Partikel und es bildet sich Sediment am Boden der Messzylinder. Abbildung 4.5 zeigt den Versuchsaufbau exemplarisch für einen Messzylinder.

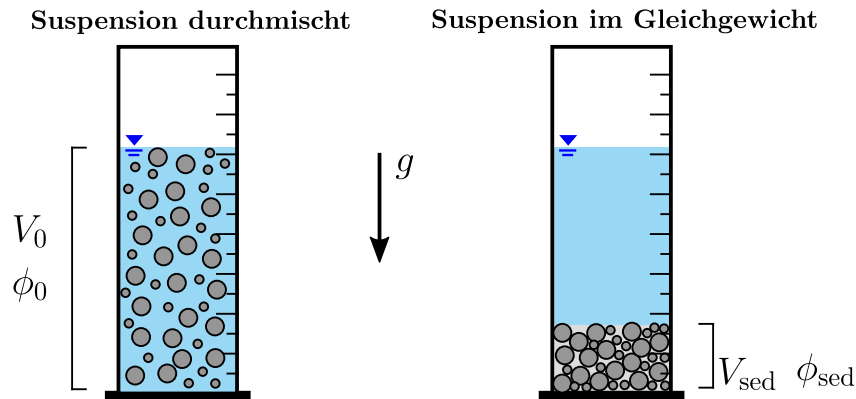


Abbildung 4.5.: Versuchsaufbau zur experimentellen Charakterisierung des Gelpunktes.

Ändert sich das Volumen des Sediments  $V_{\text{sed}}$  nicht mehr messbar, ist der stationäre Gleichgewichtszustand erreicht. Die Suspension ist entmischt und hat sich in geklärte Flüssigkeit und Sediment separiert. Der Feststoff ist jetzt vollständig im Sediment enthalten. Da  $V_{\text{sed}}$  dadurch bestimmbar ist, lässt sich aufgrund der Massenerhaltung der Feststoffvolumenanteil im Sediment  $\phi_{\text{sed}}$  nach

$$\phi_{\text{sed}} = \phi_0 \frac{V_0}{V_{\text{sed}}} \quad (4.4)$$

für die unterschiedlichen Ausgangsvolumina berechnen. Das Sedimentvolumen ist proportional zu den auf das Sediment wirkenden Massenkräften im Erdschwerefeld. Das bedeutet der Gelpunkt ist der Feststoffvolumenanteil, bei dem keine Kräfte auf das Sediment wirken, also  $V_{\text{sed}} = 0$  ist. Dies ist experimentell nicht möglich. Daher sind für unterschiedliche Ausgangsvolumina  $V_0$  das sich jeweils ergebende Volumen des Sediments im Gleichgewichtszustand  $V_{\text{sed}}$  zu bestimmen, daraus den dazugehörigen Feststoffvolumenanteil im Sediment  $\phi_{\text{sed}}$  zu berechnen und in einem Diagramm  $\phi_{\text{sed}}$  über  $V_{\text{sed}}$  aufzutragen. Durch lineare Interpolation ist der theoretische Wert für den Gelpunkt bei  $V_{\text{sed}} = 0$  ableitbar.

## Ergebnisse

Die Ergebnisse der Bestimmung des Gelpunktes für die verwendeten Produkte sind in Abbildung 4.6 dargestellt.

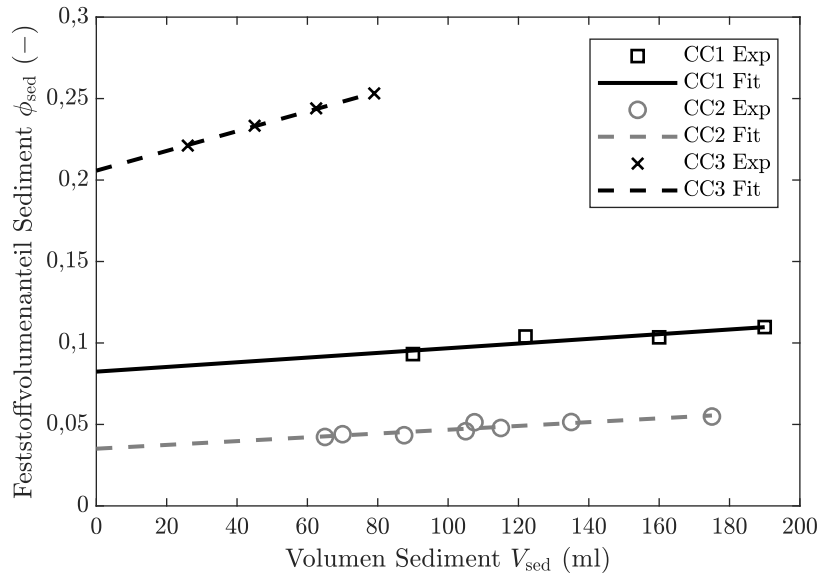


Abbildung 4.6.: Experimentelle Ergebnisse zur Materialcharakterisierung des Gelpunktes.

Mit zunehmenden Sedimentvolumen steigt der mittlere Feststoffvolumenanteil im Sediment in sehr guter Näherung linear für alle Produkte. Dies liegt an der zunehmenden Kompression aufgrund der größeren Eigenmasse des Sediments. In diesem Bereich ist die lineare Interpolation möglich, da die Kompression noch vergleichsweise gering ist. Der Gelpunkt  $\phi_{gel}$  ist bei größeren Partikelsystemen größer, was sich mit Beobachtungen von Gleiss [19] deckt. Dies liegt daran, dass bei größeren Partikelsystemen die Massenkräfte dominieren und sich zunehmend ein Haufwerk mit konstantem Feststoffvolumenanteil bildet. Bei feineren Partikelsystemen nimmt der Einfluss der interpartikulären Wechselwirkungen zu, welche den Gelpunkt beeinflussen.

#### 4.4. Sedimentkonsolidierungsfunktion

Kompressible Haufwerke zeichnen sich durch einen Gradienten des Feststoffvolumenanteils in Abhängigkeit der Kompression aus (siehe Kapitel 2.2.2). Dabei erfolgt bei der Charakterisierung die Unterscheidung zwischen zwei Mechanismen bei der Sedimentkonsolidierung: Zum einen die nachfolgend bezeichnete uniaxiale Kompression, bei der die Zentrifugalkräfte nur radial auf das Haufwerk wirken. Zum anderen die Kompression mit überlagerter Scherung, um den Einfluss der Scherverdichtung zu untersuchen.

## Experimentelles Vorgehen

Zur experimentellen Bestimmung der Sedimentkonsolidierung kommt eine Schneidapparatur nach Reinach [53] zum Einsatz. Ziel ist es, in Abhängigkeit des Feststoffgerüstdruckes den zugehörigen Feststoffvolumenanteil zu ermitteln und somit die charakteristische Konsolidierungsfunktion eines Produkts zu bestimmen. Dazu ist das Sediment in den Gleichgewichtszustand bezüglich Kompression zu bringen und anschließend mit Hilfe der Schneidapparatur in diskrete Schichten zu schneiden. In Abbildung 4.7 ist das Vorgehen dargestellt.

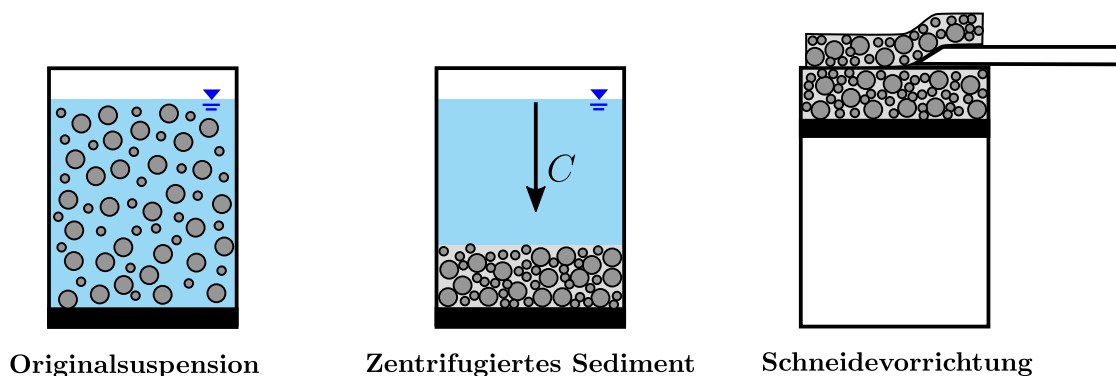


Abbildung 4.7.: Prinzipielles Vorgehen zur experimentellen Bestimmung des Konsolidierungsverhaltens kompressibler Haufwerken.

Im ersten Schritt zentrifugiert eine Laborzentrifuge die homogen verteilte Suspension unter definierten Bedingungen. Die Zentrifugationsdauer muss ausreichend lang sein, damit das Sediment im Gleichgewichtszustand vorliegt und beträgt hier 20 min, was durch Vorversuche bestimmt wurde. Die hier verwendeten Calciumcarbonat-Wasser Sedimente weisen plastisches Kompressionsverhalten auf. Dies bedeutet, dass im Gleichgewichtszustand und bei Reduktion der Zentrifugalbeschleunigung keine Rückdehnung des Haufwerkes auftritt. Dadurch behält es den Kompressionszustand bei. Dieser Zustand ist nachfolgend als uniaxiale Kompression bezeichnet, da die Kräfte nur in radialer Richtung wirken und keine überlagerte Scherung besteht. Um zusätzlich den Effekt der Scherverdichtung zu berücksichtigen, ist die Scherung des Sediments notwendig. Dies erfolgt mit einer Apparatur<sup>1</sup>, welche die Sedimentschichten innerhalb des uniaxial komprimierten Sediments durchmischt ohne das Sediment inklusive der darüberstehenden geklärten Flüssigkeit wieder komplett aufzurühren. Dies ermöglicht den

<sup>1</sup>Die Apparatur wurde basierend auf Arbeiten von Reinach [53] im Rahmen der Bachelorarbeit von Frau Catharina Sender [60] entwickelt. Die Ergebnisse dieser Arbeit liefern Erkenntnisse darüber wie das Sediment zu scheren ist, um vergleichbare Zustände wie in Dekantierzentrifugen zu erzielen.

Partikeln sich zu repositionieren, wie es bei der Scherverdichtung der Fall ist. Anschließend ist das Sediment wieder in den Gleichgewichtszustand zu zentrifugieren. Umlagerungsvorgänge der einzelnen Partikel im Haufwerk führen dazu, dass eine dichtere Packung des Haufwerkes vorliegt und für flüssigkeitsgesättigte Haufwerke somit der Flüssigkeitsanteil abnimmt. Die entwickelte Messprozedur approximiert das Verhalten in einer Dekantierzentrifuge, bei welcher zusätzlich zur Sedimentkompression eine Sedimentscherung auftritt.

Das Schneiden des konsolidierten Sediments erfolgt in einer Schneidapparatur nach Reinach [53]. Der Boden des Sedimentbechers ist beweglich und dadurch definiert auf eine bestimmte Position einstellbar. Ein Stempel schiebt das Sediment nach oben und eine Schicht mit definierter Dicke ist abtrennbar. Dies wiederholt sich bis das komplette Sediment in diskrete Schichten geschnitten ist. Die Bestimmung des Feststoffvolumenanteils jeder Schicht erfolgt gravimetrisch. Der Feststoffgerüstdruck, welcher in der Schicht  $i$  während der Zentrifugation vorhanden war, ist nach Reinach [53] über folgende Gleichung berechenbar:

$$p_{y,i} = \omega^2 \frac{\tilde{\rho}}{A} \left( \sum_{j=1}^{i-1} R_j \Delta m_{s,j} + \frac{R_i \Delta m_{s,i}}{2} \right). \quad (4.5)$$

Darin ist  $j$  eine Laufvariable zur Summation der Anteile der über Schicht  $i$  sich befindenden Schichten  $j$ ,  $\Delta m_s$  die Feststoffmasse einer Schicht,  $A$  die Grundfläche einer Schicht,  $R$  der mittlere Radius einer Schicht (Abstand Rotationszentrum zur Schicht) und  $\tilde{\rho}$  die bezogene Dichtedifferenz. Diese ist definiert als

$$\tilde{\rho} = \frac{\rho_s - \rho_l}{\rho_s}, \quad (4.6)$$

mit der Feststoffdichte  $\rho_s$  und Flüssigkeitsdichte  $\rho_l$ . Der Summationsterm beschreibt die Kompression der aktuellen Schicht  $i$  aufgrund der Masse der darüberliegenden Schichten  $j$ . Dadurch ist jedem Feststoffvolumenanteil  $\phi_i$  der dazugehörige Feststoffgerüstdruck  $p_{y,i}$  zugeordnet.

## Ergebnisse

Die Ergebnisse für die uniaxiale Kompression sind in Abbildung 4.8 exemplarisch für CC1 dargestellt. Um die Reproduzierbarkeit der Methodik für diese Anwendung zu überprüfen, ist die Drehzahl ( $n_{\text{rot}} = 3500 \text{ rpm}$  und  $n_{\text{rot}} = 5000 \text{ rpm}$ ) und Ausgangskonzentration ( $\phi_0 = 0,143$  und  $\phi_0 = 0,06$ ) variiert.

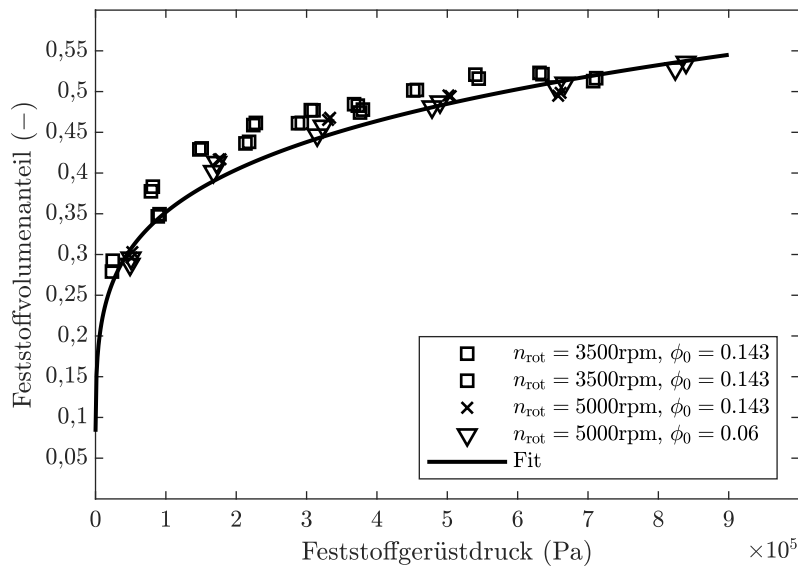


Abbildung 4.8.: Uniaxiale Kompression des Kalkstein CC1 bei verschiedenen Drehzahlen und Ausgangskonzentrationen.

Der Feststoffvolumenanteil steigt mit zunehmenden Feststoffgerüstdruck an. Folglich ist das Sediment bei höheren Feststoffgerüstdrücken stärker komprimiert. Dies ist zum einen durch ein höheres Sediment und dadurch höheren Eigenmasse erreichbar oder zum anderen durch eine größere Zentrifugalbeschleunigung. Alle Messpunkte sind Einzelmessungen. Die Wiederholungsmessungen für eine Drehzahl von  $n_{rot} = 3500$  rpm und eine Ausgangskonzentration von  $\phi_0 = 0,143$  weisen eine sehr gute Reproduzierbarkeit auf. Die Variation der Drehzahl auf  $n_{rot} = 5000$  rpm und Ausgangskonzentration auf  $\phi_0 = 0,06$  bestätigt, dass die Messmethode reproduzierbar und somit geeignet für die Materialcharakterisierung hinsichtlich der Sedimentkonsolidierung ist. Die Messwerte liegen im gesamten Messbereich innerhalb des statistischen Messfehlers. Der empirische Ansatz nach Green et al. [23] (siehe Kapitel 2.2.2) dient dazu eine kontinuierliche Materialfunktion abzuleiten. Die empirischen Parameter  $p_1$  und  $p_2$  aus Gleichung 2.16 sind an die experimentellen Daten anzupassen.

Abbildung 4.9 zeigt den experimentell bestimmten Einfluss der Scherverdichtung auf die Sedimentkonsolidierung. Hier ist exemplarisch die uniaxiale Kompressionsfunktion des Produkts CC1, die experimentellen Daten des zuvor beschriebenen Scherungsversuches und der Fit mit überlagerter Scherung aufgetragen.

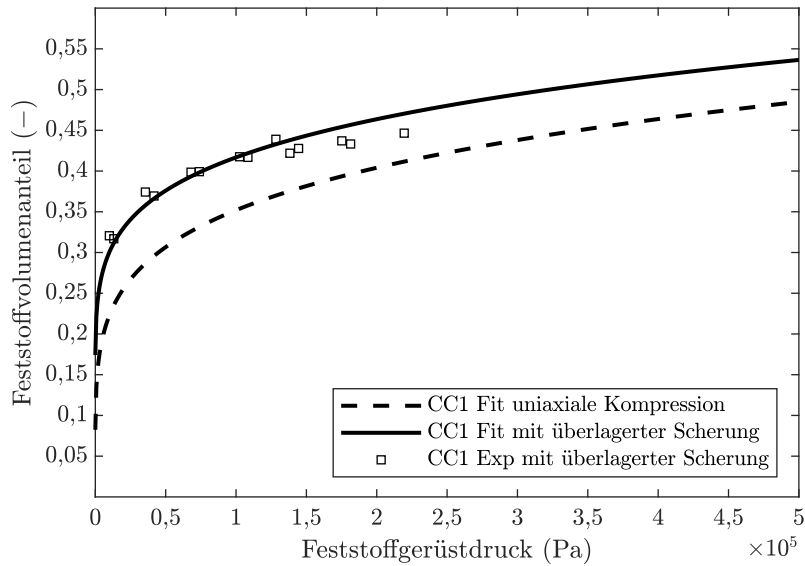


Abbildung 4.9.: Experimentell bestimmte Sedimentkonsolidierungsfunktion für CC1.

Die experimentellen Daten mit überlagerter Scherung bestätigen, dass bei sonst gleichen Bedingungen der Feststoffvolumenanteil bei gleichem Feststoffgerüstdruck im gesamten gemessenen Bereich größer ist. Der Einfluss auf die Erhöhung des Feststoffvolumenanteils beträgt absolut zwischen 0,05 und 0,1, wobei die Differenz mit steigendem Feststoffgerüstdruck abnimmt. Dies begründet sich dadurch, dass das Sediment im Bereich größerer Feststoffgerüstdrücke auch im uniaxialen Zustand bereits stärker verdichtet ist. Somit ist das Potenzial geringer, dass sich die Partikel in diesem Bereich durch Repositionierung dichter anordnen.

Die mathematische Beschreibung der Sedimentkonsolidierung inklusive Scherverdichtung erfolgt über eine Erweiterung des bereits bekannten und beschriebenen Ansatz von Green et al. [23] mit einem Proportionalitätsanteil  $K_p$  und einem Summationsterm  $K_o$ . Die Gleichung für die Sedimentkonsolidierungsfunktion, also dem Feststoffvolumenanteil mit überlagerter Scherung  $\phi_{sh}$ , lautet somit:

$$\phi_{sh} = K_p \phi_{gel} \left( 1 + \frac{p_y}{p_1} \right)^{\frac{1}{p_2}} + K_o. \quad (4.7)$$

$p_1$  und  $p_2$  sind aufgrund der uniaxialen Kompressionsversuche bereits bestimmt und enthalten die Information zur Sedimentkonsolidierung ohne Scherung.  $K_p$  und  $K_o$  sind an die experimentellen Daten anzupassen und enthalten die Informationen über den Einfluss der Scherung auf die Kompression des Sediments. Dieser Ansatz ist flexibel auf Batch oder Semi-batch

#### 4. Materialcharakterisierung

---

Zentrifugen zu übertragen, in denen keine Scherung des Sediments stattfindet. Für  $K_p = 1$  und  $K_o = 0$  reduziert sich dieser auf den Ansatz nach Green et al. [23].



## 5. Modellierung und Validierung des Simulationsmodells

### 5.1. Stand der Technik

Dieser Abschnitt gibt einen Überblick über die wichtigsten Ansätze zur Modellierung von Dekantierzentrifugen.

Ambler [4, 3, 2] führt die sogenannte  $\Sigma$ -Theorie (siehe Kapitel 2.3) ein. Dies ist eine Methode zur Berechnung einer kritischen Partikelgröße, die gerade noch in der Dekantierzentrifuge separierbar ist. Dieser Ansatz beinhaltet viele Annahmen und reduziert die Mechanismen des Abscheidvorgangs stark, was oft zu Abweichungen von experimentellen Daten führt. In den meisten Anwendungsfällen ist der Feststoffgehalt der Suspension so hoch, dass die Annahme der Einzelpartikelsedimentation nicht mehr gilt. Mehrere Studien [54, 12, 10, 7] haben gezeigt, dass die Sedimentationsgeschwindigkeit der Partikel mit steigender Feststoffkonzentration deutlich von der Sinkgeschwindigkeit nach Stokes abweicht (siehe Kapitel 2.2.1). Wakeman und Tarleton [72] präsentieren einen sehr ähnlichen Ansatz im Vergleich zur  $\Sigma$ -Theorie (siehe Kapitel 2.3) und die gleichen Nachteile aufweist.

Schnittger [58] führt die Abweichungen auf einen nicht komplett durchströmten Teich zurück und geht von einer Schichtströmung aus, in der die Partikel sedimentieren. Faust [14] bestätigt diese Annahme und modifiziert den Ansatz zur Berechnung der kritischen Partikelgröße durch Einfügen von Korrekturfaktoren. Der Ansatz von Leung [38] (siehe Kapitel 2.3) ist ähnlich zu Ambler [4] und berücksichtigt eine dünne Schichtenströmung an der Oberfläche des Teichs. Er führt eine dimensionslose Kennzahl für die Auslegung der Zentrifuge ein. Allerdings beinhaltet dieser statische Ansatz viele Annahmen und die korrekte Auswahl der Kennzahl ist nicht analytisch herleitbar.

Der Schleppkraftansatz nach Langeloh und Stahl [36][63] ist ein weiteres Modell zur Beschreibung der Abscheidung in Dekantierzentrifugen. Es geht davon aus, dass eine sogenannte

Schleppkraft die Abweichung von der zuvor genannten  $\Sigma$ -Theorie verursacht, die bei einem kritischen Durchsatz bereits abgelagerte Partikel von der Sedimentoberfläche resuspendiert. Langelohs Versuche mittels Spurstoffen bestätigen eindeutig, dass in seinem Fall der Teich komplett bis zur Trommelwand durchströmt ist.

Die Meinungen über die Strömungsform in Dekantierzentrifugen gehen in der Literatur auseinander. An dieser Stelle sei nicht näher darauf eingegangen. Eine Übersicht über die bisher beschriebenen Modelle findet sich in Stahl [64]. Alle zuvor genannten Modelle vernachlässigen den konischen Teil und die dort stattfindenden Konsolidierungs- und Transportvorgänge, sowie der Einfluss des Sediments im zylindrischen Bereich.

Karolis [33] entwickelt ein Modell, um das Transportverhalten pastöser Stoffe zu beschreiben. Er leitet aus einer zweidimensionalen Impulsgleichung ein Fließmodell zur Berechnung der Rückstauhöhe und des Rückfließens im Dekanter ab, um so die tatsächliche Sedimenthöhe zu bestimmen. Dabei ist nicht vollständig untersucht, ob es sich wirklich um Rückfließen oder um verminderten Feststofftransport handelt. Weiterhin setzt das Modell voraus, dass das komplette rheologische Verhalten in Abhängigkeit des Feststoffvolumenanteils für das jeweilige Produktsystem vollständig bekannt ist. He et al. [27] und Senapati et al. [59] weisen darauf hin, dass sich feindisperse Calciumcarbonat-Wasser Suspensionen, wie sie hier Verwendung finden, nicht-newtonsches Fließverhalten unter Ausbildung einer Fließgrenze aufweisen, welche vom Feststoffvolumenanteil abhängt. Jedoch sei an dieser Stelle angemerkt, dass die experimentelle Bestimmung des kompletten rheologischen Verhaltens einen enormen experimentellen Aufwand darstellt.

Weiterhin berücksichtigen die zuvor genannten Modelle nicht das dynamische Verhalten der Zentrifuge, wie beispielsweise An- und Abfahrvorgänge oder eine Änderung der Parameter am Einlauf, wie zum Beispiel des Volumenstroms oder des Feststoffgehalts. In diesem Fall ist ein dynamisches Modell erforderlich. In den letzten Jahren ist ein verstärktes Interesse an numerischen Modellen zu beobachten. Auf der einen Seite existieren CFD und Diskrete Elemente Methode (DEM) Modelle, welche detailliertere Einblicke in das physikalische Verhalten von Zentrifugen geben, was aber mit einer aufwendigen Modellierung und mehr Rechenaufwand verbunden ist. Auf der anderen Seite existieren dynamische Echtzeitsimulationen, bei denen der Rechenaufwand aufgrund von zusätzlichen Annahmen reduziert ist. Diese Modelle benötigen Materialfunktionen, die das reale Materialverhalten in der Simulation charakterisieren, um die für die Echtzeitsimulation notwendige Modellreduktion zu kompensieren.

Zhu et al. [74] präsentiert ein CFD Modell für eine Dreiphasen Dekantierzentrifuge, die typischerweise in der Ölindustrie zur Wasser/Öl/Sand-Trennung Anwendung findet. Die Pha-

sen sind über einen Eulerschen Mehrphasenansatz modelliert. Die Simulation berücksichtigt nur monodisperse Partikel. Sedimentaufbau, -konsolidierung und -transport sind vernachlässigt. Daher ist die vorgeschlagene Simulationsmethode nicht auf eine Dekantierzentrifuge anwendbar, die zur Entwässerung oder Klassierung von mineralischen Produkten im Einsatz ist, bei der das Sedimentverhalten eine große Rolle spielt und typischerweise polydisperse Partikelgrößenverteilungen auftreten.

Romaní Fernández und Nirschl [55] schlagen eine gekoppelte CFD-DEM-Methode zur Simulation einer Vollmantelzentrifuge vor. Die Modellierung der Strömung von Luft und Wasser erfolgt mittels CFD und die Modellierung der Partikelbewegung mittels DEM. Die Methode ist nicht direkt auf die Dekantierzentrifuge übertragbar, bei der zusätzlich eine Schnecke mit einer Differenzdrehzahl rotiert und damit Scherkräfte in das Sediment induziert, die den Sedimenttransport und das Strömungsverhalten beeinflussen. Des Weiteren verwenden Romaní Fernández und Nirschl [55] Partikel mit einem Durchmesser von  $125\ \mu\text{m}$  bis zu  $200\ \mu\text{m}$ . Hier in dieser Arbeit stehen feindisperse Produkte im Fokus, was bedeutet, dass die Partikel typischerweise kleiner als  $20\ \mu\text{m}$  sind und der lokale Feststoffgehalt in einer Dekantierzentrifuge oft zwischen nahezu geklärter Flüssigkeit und einem dicht gepackten Sediment variiert. Dies würde eine hohe Anzahl von sehr feinen Partikeln in der DEM erfordern, um die Sedimentkonsolidierung und den Transport abzubilden, was jedoch den Rechenaufwand der DEM-Berechnung enorm erhöht.

Aus diesem Grund haben Hammerich et al. [25] ein Mehrphasen-CFD-Modell für die Anwendung an einer Röhrenzentrifuge entwickelt, das die Sedimentkonsolidierung und das rheologische Verhalten berücksichtigt. Die Suspensions- und Sedimentphase sind über einen Euler-Ansatz beschrieben. Allerdings ist das Modell in dieser Form nicht auf die Dekantierzentrifuge übertragbar, da die solverinternen Algorithmen und Gleichungen nicht an die Schneckengeometrie angepasst sind und somit zusätzliche Scherkräfte im Sediment durch die Schnecke keine Berücksichtigung finden. Wie bereits erwähnt, erlauben die diskutierten Simulationsansätze eine sehr detaillierte Vorhersage des physikalischen Verhaltens von Vollmantelzentrifugen, sind aber zeitaufwendig in der Adaption und sehr rechenintensiv.

Für den Einsatz in Fließ- und Prozesssimulationen oder für die modellprädiktive Regelung ist eine deutliche Reduzierung der Rechenzeit hin zur Echtzeitsimulation unerlässlich. Stiborsky [65] führt ein numerisches Modell zur Berechnung der Entwässerung von körnigen Produkten (Partikel größer  $20\ \mu\text{m}$ ) in Dekantierzentrifugen ein. Das Entwässerungsverhalten von körnigen Produkten unterscheidet sich jedoch wesentlich von feindispersen Produkten, das heißt die Zentrifugalkräfte reichen typischerweise nicht mehr aus, um die Kapillarkräfte innerhalb des

feindispersen Sediments zu überwinden und es bleibt vollständig gesättigt (siehe Kapitel 2.2.2).

Stickland [66] beschreibt ein Modell für die Simulation von Batch-Zentrifugen, Röhrenzentrifugen und den zylindrischen Teil von Dekantierzentrifugen. Es basiert auf einem eindimensionalen numerischen Modell für diskontinuierliche Becherzentrifugen [67]. Der Autor unterteilt die Dekantierzentrifuge in definierte Bereiche um Sedimentation, Sedimentkompression und Sedimenttransport zu berechnen. Stickland [66] leitet die Erhaltungsgleichungen von Impuls und Masse sowie die Randbedingungen für den zylindrischen Teil her. Die Gleichungen sind mit der Flussdichtefunktion basierend auf der Arbeit von Kynch [35] verknüpft und erlauben dadurch eine prozessnahe Simulation unter Berücksichtigung des Materialverhaltens. Der konische Teil ist jedoch vernachlässigt, und somit sind keine Gleichungen für diesen Teil in seiner Arbeit formuliert.

Gleiss [19][20, 21] präsentiert ein dynamisches Modell für die Klassierung und den Sedimentaufbau im zylindrischen Teil einer Dekantierzentrifuge, also ebenfalls unter Vernachlässigung des konischen Bereichs. Durch die Kombination von Materialfunktionen und Massenbilanzen kann dieser Ansatz die Ergebnisse schneller vorhersagen, als der simulierte Prozess in der Realität benötigt (Echtzeitsimulationen). Insbesondere bei der mechanischen Entfeuchtung ist das Materialverhalten im konischen Teil von entscheidender Bedeutung für den effizienten Betrieb von Dekantierzentrifugen. Das flüssigkeitsgesättigte Sediment tritt aus dem Teich aus und die Schnecke fördert das Sediment zum Feststoffaustrag.

Die Anforderungen an das Simulationsmodell sind zum einen die Berücksichtigung des konischen Bereichs und somit der ganzen Dekantierzentrifuge und zum anderen die Fähigkeit Echtzeitsimulationen durchzuführen. Im Gegensatz zu Gleiss [19], der den konischen Bereich nicht berücksichtigt, befasst sich die vorliegende Arbeit in dem folgenden Kapitel mit der Erweiterung des Modells um den konischen Bereich und die Integration von Scherverdichtung. Mit der hier entwickelten Simulationsmethode ist es zukünftig möglich das dynamische Verhalten von feindispersen Suspensionen unter Berücksichtigung der Scherverdichtung in der gesamten Dekantierzentrifuge zu beschreiben. Darüber hinaus erfolgt die Entwicklung eines Ansatzes zur Modellierung von Degritting, was ein komplett neues Anwendungsfeld für das Simulationsmodell eröffnet. <sup>1</sup>

---

<sup>1</sup>Die Modellierung des konischen Bereichs ist teilweise in Menesklou et al. [44] durch den Autor selbst veröffentlicht.

## 5.2. Modellierung kompressibler Produkte

Dieser Abschnitt befasst sich mit der mathematischen Beschreibung des dynamischen Modells. Abbildung 5.1 zeigt schematisch die Dekantierzentrifuge inklusive der Diskretisierung des helixförmigen Schneckenkanals.

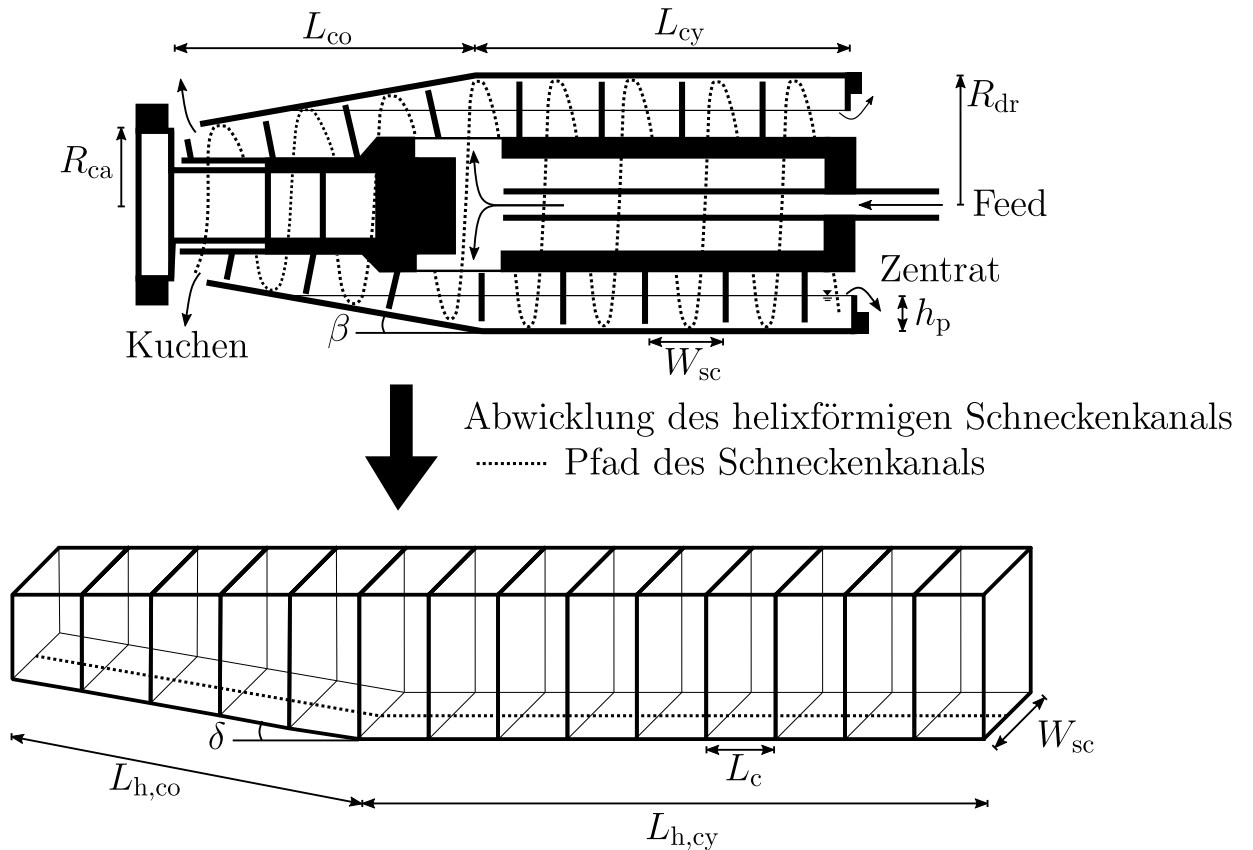


Abbildung 5.1.: Schematische Darstellung der Geometrie und Diskretisierung einer Dekantierzentrifuge entlang des abgewickelten Schneckenkanals (gepunktete Linie).

Das Einlaufrohr beschleunigt die eintretende Suspension und leitet diese in den Teich. Die Fest-Flüssig-Trennung erfolgt aufgrund der Zentrifugalkräfte und des Dichteunterschieds zwischen den beiden Phasen. Wenn die Partikel eine höhere Dichte als die Flüssigkeit haben, setzen sie sich zur Trommelwand hin ab. Infolgedessen bildet sich das Sediment und die Suspension klärt auf. Die Schnecke dreht sich mit einer kleinen Differenzdrehzahl  $\Delta n_{\text{rot}}$  schneller oder langsamer als die Drehzahl der Trommel  $n_{\text{rot}}$ . Diese Differenzdrehzahl induziert Scherkräfte in das Sediment. Unter optimalen Bedingungen bewirken die Scherkräfte einen

Sedimenttransport entlang des Schneckenkanals in Richtung der Kuchenauswurfs am Ende des konischen Teils. Das oben beschriebene Funktionsprinzip lässt sich im Allgemeinen in drei parallel ablaufende Prozesse unterteilen: Sedimentation, Sedimentkonsolidierung und Sedimenttransport. Der vorgestellte numerische Ansatz berücksichtigt alle diese drei Prozesse, die entlang des Schneckenkanals ablaufen, wie in Abbildung 5.1 dargestellt. Der helixförmige Schneckenkanal einer Dekantierzentrifuge ist deswegen in  $N_c$  einzelne Bilanzräume mit einer Länge von  $L_c$  diskretisiert.

### 5.2.1. Diskretisierung

Der helixförmige Schneckenkanal ist dazu entlang des Kanals in einzelne Bilanzräume diskretisiert, die sich im physikalischen Verhalten der Suspension und des Sediments unterscheiden, wie bei Gleiss [19] für den zylindrischen Bereich beschrieben. Eine Helix ist eine Raumkurve im 3-dimensionalen Raum und ist durch ihren Radius und ihre Steigung definiert. In diesem Fall hat sie eine konstante Kanalbreite von  $W_{sc}$ .

Die Gesamtlänge der Helix  $L_{hel}$  ist wie folgt berechenbar:

$$L_{hel} = L_{h,cy} + L_{h,co}, \quad (5.1)$$

wobei  $L_{h,cy}$  die Länge des abgerollten zylindrischen Teils und  $L_{h,co}$  die Länge des abgerollten konischen Teils der Dekantierzentrifuge ist.

Die Länge der Helix im zylindrischen Teil mit  $N_{sc,cy}$  Windungen berechnet sich mit der Annahme eines konstanten Trommelradius  $R_{dr}$  und einer konstanten Kanalbreite  $W_{sc}$ , nach:

$$L_{h,cy} = N_{sc,cy} \left( (2\pi R_{dr})^2 + W_{sc}^2 \right)^{0,5}. \quad (5.2)$$

Der Radius der Trommel im konischen Teil ist nicht mehr konstant. Er nimmt zum Kuchenauswurf hin ab, aber die Schneckensteigung bleibt konstant. Daher ist die vereinfachte Gleichung 5.2 nicht zur Berechnung anwendbar. Wie bereits erwähnt, ist die Helix im konischen Teil als räumliche Kurve durch den Vektor  $\vec{x}$  in kartesischen Koordinaten beschrieben. Die z-Achse ist die Rotationsachse der Dekantierzentrifuge.

$$\vec{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (R_{\text{dr}} - \frac{W_{\text{sc}}}{2\pi} l \tan \beta) \cos l \\ (R_{\text{dr}} - \frac{W_{\text{sc}}}{2\pi} l \tan \beta) \sin l \\ \frac{W_{\text{sc}}}{2\pi} l \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

Hier ist  $R_{\text{dr}}$  der Trommelradius und  $\beta$  der Konuswinkel. Der Parameter  $l$  definiert die Positionsvariable entlang der abgerollten Schnecke im konischen Teil des Apparates. Die Länge der Raumkurve, das heißt die Länge der Helix im konischen Teil, ist durch das Integral der euklidischen Norm der Ableitung von  $\vec{\mathbf{x}}$  nach  $l$  berechenbar:

$$L_{\text{h,co}} = \int_0^{2\pi N_{\text{sc,co}}} \|\vec{\mathbf{x}}'\| \, dl. \quad (5.4)$$

Die Grenzen beginnen bei Null (Übergang Zylinder zu Konus) und gehen bis zu  $2\pi N_{\text{sc,co}}$  (Kuchenaustrag), wobei  $N_{\text{sc,co}}$  die Anzahl der Windungen im konischen Abschnitt der Zentrifuge ist. Die Ableitung  $\vec{\mathbf{x}}'$  des Helixvektors  $\vec{\mathbf{x}}$  zu  $l$  lautet wie folgt:

$$\vec{\mathbf{x}}' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{W_{\text{sc}}}{2\pi} \tan(\beta) \cos(l) - (R_{\text{dr}} - \frac{W_{\text{sc}}}{2\pi} l \tan \beta) \sin(l) \\ -\frac{W_{\text{sc}}}{2\pi} \tan(\beta) \sin(l) + (R_{\text{dr}} - \frac{W_{\text{sc}}}{2\pi} l \tan \beta) \cos(l) \\ \frac{W_{\text{sc}}}{2\pi} \end{pmatrix}. \quad (5.5)$$

Die euklidische Norm  $\|\vec{\mathbf{x}}'\|$  ist

$$\|\vec{\mathbf{x}}'\| = \sqrt{x'^2 + y'^2 + z'^2}. \quad (5.6)$$

Wie bereits oben erwähnt, ist der abgewickelte Schneckenkanal in Bilanzräume diskretisiert. Die Länge eines einzelnen Bilanzraums ist durch deren Anzahl  $N_c$  in der folgenden Gleichung definiert:

$$L_c = \frac{L_{\text{hel}}}{N_c}. \quad (5.7)$$

Je größer  $N_c$  ist, desto feiner ist der Schneckenkanal diskretisiert, was den lokalen Fehler reduziert. Je feiner die Diskretisierung ist, desto größer ist jedoch der Rechenaufwand. Eine

optimale Diskretisierung ist durch Gitterstudien ermittelbar. Der Konuswinkel  $\beta$  gibt an, wie steil der Konus ist, über den die Schnecke das Sediment nach außen transportiert. Die Steigung des abgewickelten Schneckenkanals entlang der Helix im Konus, der sogenannte Verschneidungswinkel  $\delta$ , ist über die trigonometrische Beziehung ableitbar:

$$\delta = \arcsin \left( \frac{R_{\text{dr}} - R_{\text{ca}}}{L_{\text{h,co}}} \right). \quad (5.8)$$

Hier ist  $R_{\text{ca}}$  der Radius am Kuchenauswurf im konischen Bereich der Dekantierzentrifuge.

Abbildung 5.2 zeigt schematisch einen Bilanzraum  $i$  mit allen ein- und ausgehenden Strömen. Jeder Bilanzraum ist in Suspensions- und die Sedimentzone unterteilt. Der Übergang zwischen den Zonen findet bei einem bestimmten Feststoffvolumenanteil statt, dem so genannten Gelpunkt  $\phi_{\text{gel}}$  (siehe Kapitel 2.2.2). Die physikalischen Prozesse sind auf die entsprechende Zone bezogen. Innerhalb der Suspensionszone können sich Partikel des einströmenden Volumenstroms  $\dot{V}_{i-1}$  aus dem vorherigen Kompartiment in das Sediment absetzen und gelten als abgetrennt, wenn sie die Sedimentoberfläche erreichen. Die Sedimentzone berücksichtigt die Sedimentkonsolidierung und den Sedimenttransport, der als Folge der Differenzdrehzahl zwischen Trommel und Schnecke auftritt.

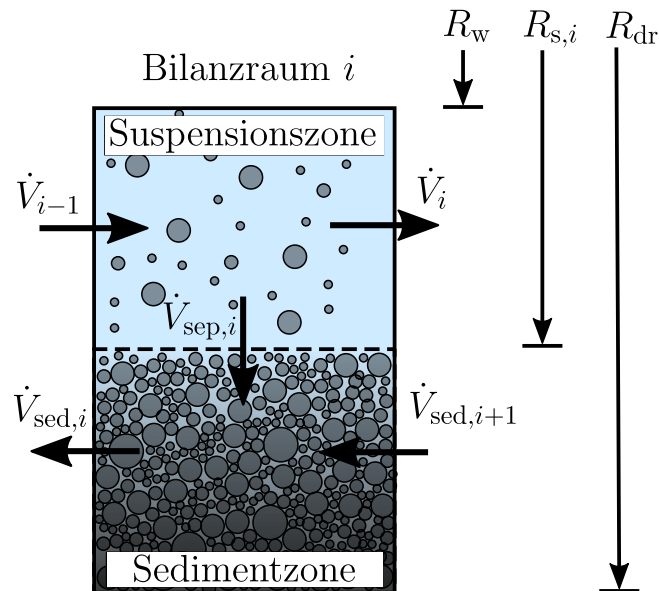


Abbildung 5.2.: Schematische Darstellung eines Bilanzraumes mit ein- und ausgehenden Strömen.



Die verschiedenen Bilanzräume sind durch die Massenströme der flüssigen und festen Phase miteinander verknüpft. Die lokale und zeitliche Änderung der Gesamtmasse  $m_{\text{sus},i}$  in der Suspensionszone eines Bilanzraumes ist wie folgt ausgedrückt:

$$\frac{dm_{\text{sus},i}}{dt} = \dot{m}_{\text{sus},i-1} - \dot{m}_{\text{sep},i} - \dot{m}_{\text{sus},i}. \quad (5.9)$$

Dabei ist  $\dot{m}_{\text{sus},i}$  der ausgehende Massenstrom, der in den nächsten Bilanzraum fließt,  $\dot{m}_{\text{sus},i-1}$  der eingehende Massenstrom des vorherigen Bilanzraumes und  $\dot{m}_{\text{sep},i}$  der abgetrennte Massenstrom, der in die Sedimentzone übergeht. Es ist zu beachten, dass die Massenbilanz für die feste Phase in der Suspensionszone (siehe Gleichung 5.9) in eine Volumenbilanz überführbar ist,

$$\frac{d(\phi_{\text{sus},i} V_{\text{sus},i})}{dt} = \phi_{\text{sus},i-1} \dot{V}_{\text{sus},i-1} - \phi_{\text{sep},i} \dot{V}_{\text{sep},i} - \phi_{\text{sus},i} \dot{V}_{\text{sus},i}, \quad (5.10)$$

unter der Annahme einer konstanten Feststoffdichte. Hier ist  $\phi_{\text{sus},i}$  der Feststoffvolumenanteil in der Suspensionszone des Bilanzraums  $i$ . Für den Bilanzraum, über den die Suspension in den Prozessraum aufgrund des Zulaufs der Zentrifuge gelangt, ist der eintretende Volumenstrom durch den Zulauf als Randbedingung  $\dot{V}_{\text{sus},i-1} = \dot{V}_{\text{in}}$  und  $\phi_{\text{sus},i-1} = \phi_{\text{in}}$  gegeben. Häufig ist der Zulauf am Übergang zwischen dem konischen und zylindrischen Bereich der Dekantierzentrifuge positioniert, wie bei den hier verwendeten Zentrifugen. Der Volumenstrom strömt in sehr guter Näherung vollständig Richtung Zentratauslass. Bei einigen Bauarten von Dekantierzentrifugen befindet sich der Einlass im konischen oder zylindrischen Bereich der Zentrifuge. Durch die Modellierung beider Bereiche und einer Adaption des Algorithmus ist es nun möglich im Simulationsprogramm den Zulauf variabel zu wählen und prinzipiell mehr Zentrifugenbauarten zu simulieren.

In Analogie zu Gleichung 5.9 ist die Massenbilanz für die Sedimentzone zu formulieren und ebenfalls in eine Volumenbilanz zu überführen:

$$\frac{d(\phi_{\text{sed},i} V_{\text{sed},i})}{dt} = \phi_{\text{sep},i} \dot{V}_{\text{sep},i} + \phi_{\text{sed},i+1} \dot{V}_{\text{sed},i+1} - \phi_{\text{sed},i} \dot{V}_{\text{sed},i}. \quad (5.11)$$

Die Diskretisierung der beiden Volumenbilanzen bezüglich der Zeit  $t$  erfolgt explizit für die Suspensionszone,

$$\phi_{\text{sus},i}^{t+1} V_{\text{sus},i}^{t+1} = \phi_{\text{sus},i}^t V_{\text{sus},i}^t + \left( \phi_{\text{sus},i-1}^t \dot{V}_{\text{sus},i-1}^t - \phi_{\text{sep},i}^t \dot{V}_{\text{sep},i}^t - \phi_{\text{sus},i}^t \dot{V}_{\text{sus},i}^t \right) \Delta t, \quad (5.12)$$

und für die Sedimentzone,

$$\phi_{\text{sed},i}^{t+1} V_{\text{sed},i}^{t+1} = \phi_{\text{sed},i}^t V_{\text{sed},i}^t + \left( \phi_{\text{sep},i}^t \dot{V}_{\text{sep},i}^t + \phi_{\text{sed},i+1}^t \dot{V}_{\text{sed},i+1}^t - \phi_{\text{sed},i}^t \dot{V}_{\text{sed},i}^t \right) \Delta t. \quad (5.13)$$

Der prinzipielle Ablauf des Algorithmus ist in Abbildung 5.3 dargestellt.

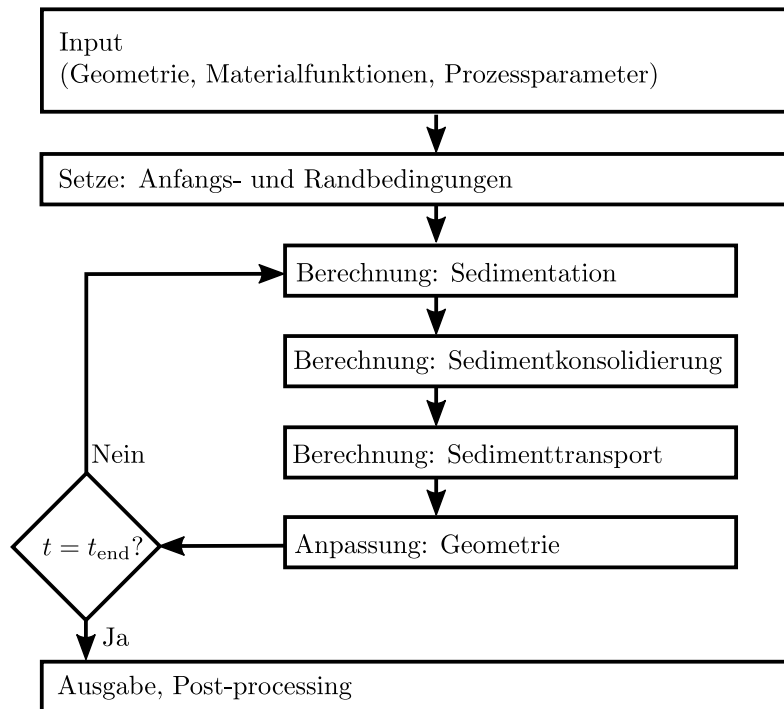


Abbildung 5.3.: Flussdiagramm des Simulationsalgorithmus.

Nach dem Einlesen der Geometrie, der Prozessparameter und der Materialfunktionen werden die Anfangs- und Randbedingungen gesetzt und die Geometrie in eine endliche Anzahl von Bilanzräumen diskretisiert. Daran schließt sich eine Berechnungsschleife an, die das Sedimentationsverhalten, die Sedimentkonsolidierung und den Sedimenttransport berechnet und die Suspensions- und Sedimentzone der Bilanzräume an die aktuelle Sedimentverteilung innerhalb der simulierten Dekantierzentrifuge anpasst. Die Simulation endet, wenn die vom Benutzer eingegebene Gesamtzeit erreicht ist oder sich ein stationärer Zustand einstellt.

In den folgenden Abschnitten sind die theoretischen Grundlagen für die Berechnung von Sedimentation, Sedimentkonsolidierung und Sedimenttransport ausführlicher diskutiert.

### 5.2.2. Suspensionszone

Die Berechnung der Sedimentationsgeschwindigkeit eines Partikels mit dem Durchmesser  $x_{\text{pa}}$  erfolgt auf Basis des Ansatzes nach Stokes [68]. Innerhalb der Zentrifuge wirkt die mittlere Zentrifugalbeschleunigung  $\omega^2(R_{\text{s},i} - R_{\text{w}})$  (siehe Abbildung 5.2) auf die Partikel in der Suspensionszone anstelle der Erdbeschleunigung  $g$ . Infolge des hohen Feststoffvolumenanteils der Suspension kommt es zu einem erhöhten Impulsaustausch zwischen Feststoff und Flüssigkeit. Folglich ist das Ansatz nach Stokes [68] für die Sedimentationsgeschwindigkeit der Partikel nicht mehr gültig. In diesem Fall ist eine Sedimentationshinderungsfunktion  $H(\phi)$  definiert, die beschreibt, um wie viel schneller oder langsamer die Partikel im Vergleich zu Stokes sedimentieren. Da das Sedimentationsverhalten von einer Vielzahl von Parametern abhängt (Partikelgröße, Partikelform, physikalisch-chemische Eigenschaften, Zentrifugalbeschleunigung usw.), erfolgt die Bestimmung der Materialfunktion experimentell in der Analysezentrifuge LUMiSizer (siehe Kapitel 4.2). Mit diesen Annahmen lautet die Gleichung für die Sedimentationsgeschwindigkeit:

$$u_{\text{set},i} = \frac{H(\phi)(\rho_{\text{s}} - \rho_{\text{l}})x_{\text{pa}}^2\omega^2(R_{\text{s},i} - R_{\text{w}})}{18\eta_{\text{l}}}. \quad (5.14)$$

In dieser Gleichung ist  $\rho_{\text{s}}$  die Dichte der dispersen festen Phase,  $\rho_{\text{l}}$  die Dichte der kontinuierlichen flüssigen Phase,  $x_{\text{pa}}$  ein charakteristischer Partikeldurchmesser und  $\eta_{\text{l}}$  die dynamische Viskosität der kontinuierlichen flüssigen Phase. Das Trennkriterium für eine Partikelklasse ergibt sich aus der Verweilzeit der Partikel in einem Bilanzraum. Dazu gehören Geometrie-, Prozess- und Materialparameter. Für die detaillierte Ableitung sei auf Gleiss [19] verwiesen. Der lokale Trenngrad  $T_i(x_{\text{pa}}, t)$  ist dadurch wie folgt beschrieben:

$$T_i(x_{\text{pa}}, t) = \frac{R_{\text{s},i}}{R_{\text{s},i} - R_{\text{w}}} \left( 1 - \exp \left\{ \left( -\frac{u_{\text{set},i} L_{\text{c}} W_{\text{sc}}}{\dot{V}_{i-1}} \right) \right\} \right). \quad (5.15)$$

In dieser Gleichung ist  $R_{\text{s},i}$  der Radius der Sedimentoberfläche. Der Abscheidegrad  $E_i(t)$  ergibt sich durch Integration des Produkts aus Trenngrad und Partikelgrößendichteverteilung  $q_{3,i-1}(x_{\text{pa}}, t)$  über alle Partikelklassen:

$$E_i(t) = \int_{x_{\text{min}}}^{x_{\text{max}}} T_i(x_{\text{pa}}, t) q_{3,i-1}(x_{\text{pa}}, t) dx_{\text{pa}}. \quad (5.16)$$

Die Berechnung des abgeschiedenen Massenstroms, der von der Suspensionszone in die Sedimentzone sedimentiert, erfolgt über den Abscheidegrad. Aufgrund der konstanten Dichte der Feststoffe ist der Massenstrom in einen Volumenstrom umformulierbar. Der abgeschiedene Volumenstrom  $\dot{V}_{\text{sep},i}$  wird berechnet als:

$$\dot{V}_{\text{sep},i} = \frac{\phi_{\text{sus},i-1}}{\phi_{\text{sep},i}} \dot{V}_{i-1} E_i(t), \quad (5.17)$$

wobei  $\phi_{\text{sus},i-1}$  der Feststoffvolumenanteil in der Suspensionszone eines Bilanzraumes und  $\dot{V}_{i-1}$  der eingehende Volumenstrom ist.

### 5.2.3. Sedimentzone

Bei feindispersen Calciumcarbonat-Wasser Suspensionen ist das Sediment kompressibel (siehe Kapitel 2.2.2). In der Sedimentzone berücksichtigt das Modell die Kompression und Scherverdichtung des feindispersen Sediments und den Sedimenttransport aufgrund der Differenzdrehzahl zwischen Schnecke und Trommel. Innerhalb des Sediments verursacht die wirkende Normalspannung einen Gradienten des Feststoffvolumenanteils in radialer Richtung. Abbildung 5.4 zeigt die Diskretisierung der Sedimentzone eines Bilanzraumes  $i$  in  $N_L$  Elemente.

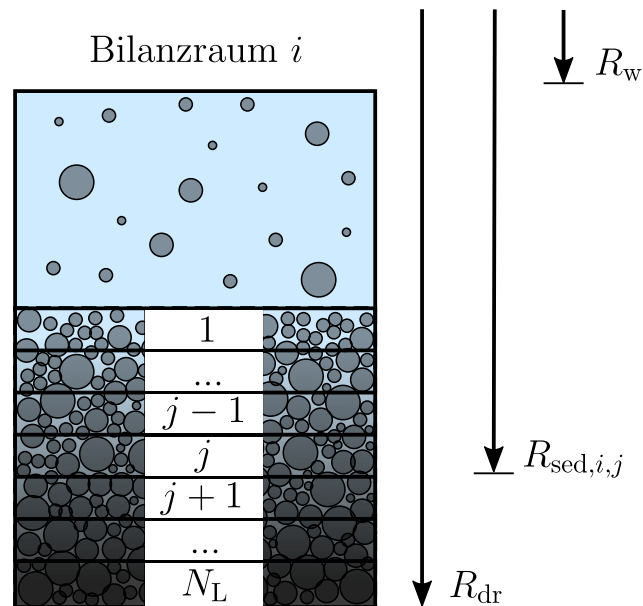


Abbildung 5.4.: Diskretisierung der Sedimentzone zur Berechnung der Kompression.

Die Normalspannung  $p_y$  in radialer Richtung  $R$  ist durch die folgende Differentialgleichung nach Sambuichi et al. [57] beschrieben:

$$\frac{dp_y}{dR} = (\rho_s - \rho_l) \phi \omega^2 R. \quad (5.18)$$

Darin ist  $p_y$  der Feststoffgerüstdruck,  $R$  der Radius,  $\rho_s$  die Feststoffdichte,  $\rho_l$  die Flüssigkeitsdichte und  $\omega$  die Winkelgeschwindigkeit. Sambuichi et al. [57] leitet die Gleichung aus dem Kräftegleichgewicht an einem differentiellen Element ab. Dies basiert auf der Annahme, dass die Relativgeschwindigkeit zwischen Feststoff und Flüssigkeit im Sediment vernachlässigbar ist und dass die Normalspannung über die gesamte Querschnittsfläche wirkt. Dies bedeutet, dass die sogenannte Lateralspannung im Vergleich zur Normalspannung vernachlässigbar klein ist. Der Einfluss von Scherkräften der Schnecke erfolgt über die Materialfunktion der Sedimentkonsolidierung und ist in Kapitel 4.4 beschrieben.

In Abbildung 5.4 ist die radiale Diskretisierung des Sediments dargestellt. Durch Trennung der Veränderlichen und Integration mit den Grenzen einer diskreten Sedimentschicht  $j$ ,

$$\int_{p_{y,j-1}}^{p_{y,j}} dp_y = (\rho_s - \rho_l) \phi_{\text{sed},j} \omega^2 \int_{R_{j-1}}^{R_j} R dR, \quad (5.19)$$

ergibt sich der folgende Ausdruck für die Berechnung des Feststoffgerüstdrucks in dieser Schicht  $j$ :

$$p_{y,j} = \frac{1}{2} (\rho_s - \rho_l) \phi_{\text{sed},j} \omega^2 (R_{\text{sed},j}^2 - R_{\text{sed},j-1}^2) + p_{y,j-1}. \quad (5.20)$$

Tritt das Sediment aus dem Teich aus, entfällt die Auftriebskraft und die Dichtedifferenz ist durch die Feststoffdichte zu ersetzen [37, 38, 64]. Der jeweilige Feststoffvolumenanteil in der entsprechenden Schicht  $j$  berechnet sich nach der Sedimentkonsolidierungsfunktion (siehe Gleichung 4.7). Diese Materialfunktion beinhaltet zusätzlich den Einfluss der Scherverdichtung.

Die Berechnung des Sedimenttransports basiert auf einem modifiziertem Modell nach Gleiss [19]. Im Gegensatz zu Gleiss [19], welcher das Sediment für den Transport als eine Sedimentschicht mit mittlerem Feststoffvolumenanteil betrachtet, erfolgt der Sedimenttransport diskretisiert für jede Sedimentschicht. Die Transportgeschwindigkeit  $v_{\text{sed},i}$  einer Sedimentschicht  $j$  eines Bilanzraumes  $i$  ist durch die folgende Gleichung beschrieben:

$$v_{\text{sed},i} = \frac{\varepsilon_{\text{T}} W_{\text{sc}} \Delta n_{\text{rot}}}{\sin(\alpha)} \quad (5.21)$$

Hier ist  $\Delta n_{\text{rot}}$  die Differenzdrehzahl,  $\varepsilon_{\text{T}}$  die Transporteffizienz und  $\alpha$  der Schneckensteigungswinkel. Im konischen Bereich ist die Transportgeschwindigkeit reduziert, da der Sedimenttransport konusaufwärts erfolgen muss. Deswegen ist die Transportgeschwindigkeit im Konus mit der Steigung des Verschneidungswinkels  $\cos \delta$  multipliziert:

$$v_{\text{sed},i} = \frac{\varepsilon_{\text{T}} W_{\text{sc}} \Delta n_{\text{rot}}}{\sin(\alpha)} \cos \delta \quad (5.22)$$

Die Transporteffizienz ist ein empirischer Parameter, welcher die Abweichung vom idealen Sedimenttransport beschreibt. Diese Abweichungen verursacht beispielsweise Reibung zwischen Schneckenkörper und Sediment. Daraus folgt für den Volumenstrom einer Sedimentschicht  $\dot{V}_{\text{sed},i,j}$ :

$$\dot{V}_{\text{sed},i,j} = W_{\text{sc}} \Delta h_{\text{sed},i,j} v_{\text{sed},i}. \quad (5.23)$$

Der Sedimentaufbau wiederum beeinflusst den Trenngrad in der dazugehörigen Suspensionszone. Mit zunehmenden Volumen der Sedimentzone sinkt der Anteil der Suspensionszone am Gesamtvolumen eines Bilanzraumes, was die Verweilzeit und somit den Abscheidegrad beeinflusst.

### 5.3. Validierung des Simulationsmodells im Labormaßstab

Die Validierung der Simulationsmethode erfolgt durch den Vergleich von experimentellen Untersuchungen an einer Dekantierzentrifuge im Labormaßstab mit den dazugehörigen Simulationen. Diese Versuchsreihe fokussiert sich auf die Variation wichtiger Prozessparameter, um deren Einfluss auf die experimentellen Ergebnisse gezielt zu untersuchen und zu überprüfen, ob die Simulationen die jeweiligen Abhängigkeiten korrekt wiedergeben. Zuerst beschreibt dieser Abschnitt das experimentelle Vorgehen und diskutiert anschließend die experimentellen und simulativen Ergebnisse.

### 5.3.1. Experimentelles Vorgehen

Die Durchführung der Versuche zur Validierung im Labormaßstab erfolgten mit einer feindispersen Calciumcarbonat-Wasser Suspension (CC4). Um Alterungseffekte durch beispielsweise Agglomeration auszuschließen, fand die Materialcharakterisierung unmittelbar vor Versuchsbeginn statt. Die experimentell ermittelten Materialfunktionen (Partikelgrößenverteilung A.1, Hinderungsfunktion A.2 und Sedimentkonsolidierungsfunktion A.3) sind dem Anhang zu entnehmen. In Abbildung 5.5 ist schematisch die Versuchsanordnung dargestellt.

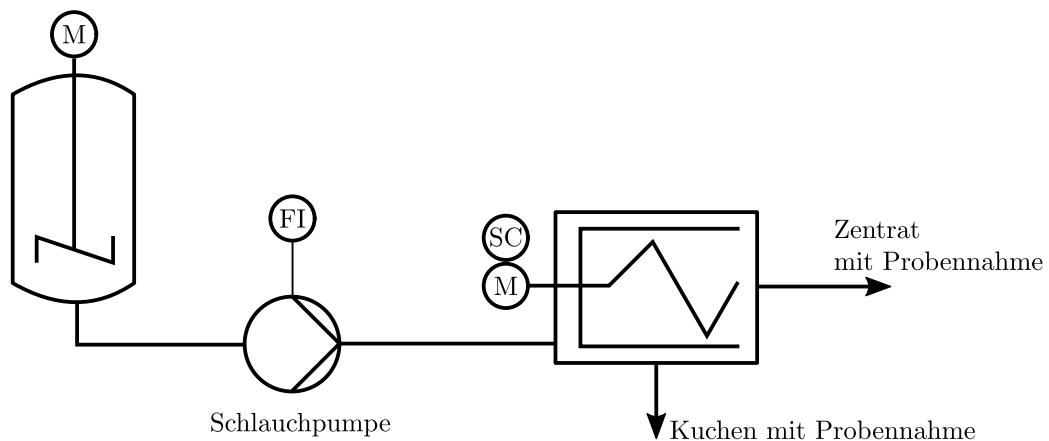


Abbildung 5.5.: Schema des experimentellen Aufbaus zur Validierung des Simulationsmodells.

Die Suspension liegt aufgerührt in einem Behälter vor. Eine Schlauchpumpe fördert bei konstantem Volumenstrom die Suspension in die Labor-Dekantierzentrifuge (Typ Lemitec MD80). Unmittelbar vor Eintritt in die Zentrifuge besteht die Möglichkeit am Zulauf Suspension abzuziehen, um den Feststoffmassenanteil zu messen. Die Drehzahl der Schnecke und Trommel der Dekantierzentrifuge lässt sich separat einstellen. Somit ist die Differenzdrehzahl entkoppelt von der Trommeldrehzahl regelbar.

Eine Messreihe bedeutet im Nachfolgenden, dass alle Prozessparameter eingestellt sind und anschließend verschiedene Drehzahlen variiert werden. Nach jeder Drehzahlvariation erfolgt die Spülung der Zentrifuge mit Wasser, um noch in der Maschine vorhandenes Sediment zu entfernen. Dadurch ist sichergestellt, dass vorherige Versuche die aktuelle Messreihe nicht beeinflussen. Die Bestimmung des Feststoffmassenanteils des ausgetragenen Kuchens und des Zentrats erfolgt gravimetrisch. Die Probenentnahme findet nach Erreichen des stationären Zustands der Maschine statt. Die Zeit bis zum Erreichen des stationären Zustands und damit den Zeitpunkt der Probenentnahme nach Änderung der Parameter wurde anhand von Vorversuchen ermittelt. Das Zeitintervall beträgt für die Labordekantierzentrifuge 5 min.

Die Probe wird im nassen Zustand und erneut nach der Trocknung in einer Trockenkammer gewogen. Durch den Vergleich beider Massen ist der durchschnittliche Feststoffmassenanteil berechenbar. Die Ermittlung der minimalen Trocknungszeit fand durch Vorversuche statt. Die Probenahme des Zentrats geschieht direkt aus dieser Leitung unmittelbar hinter dem Zentratablauf. Dies ermöglicht eine zuverlässige und repräsentative Probenahme an dieser Stelle. Der gemessene Wert für den Feststoffmassenanteil des Kuchens stellt einen Mittelwert für die gesamte ausgetragene Sedimentschicht dar. Kompressible Sedimente weisen eine Verteilung des Feststoffmassenanteils über der Sedimenthöhe auf. Typischerweise ist das komprimierte Sediment hochviskos und pastös, was dazu führt, dass die Zentrifuge das Sediment eher verteilt innerhalb des Auswurfschachts austrägt. Aus diesem Grund ist eine ausreichend große Menge des ausgeworfenen Sediments zu sammeln, um eine repräsentative Probe zu erhalten. Dies bedeutet, dass die Zusammensetzung der gesammelten Probe der Zusammensetzung des Kuchens entspricht, wie sie unmittelbar vor dem Auswurf in der Zentrifuge vorkommt. Aufgrund der Probenahme ist somit die Auswertung des Feststoffmassenanteils des Kuchens tendenziell mit einer höheren statistischen Unsicherheit behaftet als das Zentrat. In den Diagrammen im folgenden Abschnitt sind keine Fehlerbalken eingezeichnet. Die Messungen sind Einzelmessungen und dienen der Validierung der Simulationen. Im nachfolgenden ist davon auszugehen, dass aufgrund der Probenahme und Reproduzierbarkeit die experimentellen Werte des Feststoffgehalts des Zentrats um  $\pm 1$  Ma.% und für den Kuchen um  $\pm 2$  Ma.% abweichen. Dies basiert auf Vorversuchen zur Reproduzierbarkeit der Messwerte.

Typische Prozessparameter sind der über den Zulauf eintretende Feststoffstrom, der sich aus Volumenstrom und Feststoffmassenanteil zusammensetzt, Drehzahl der Trommel, Differenzdrehzahl der Schnecke und die Teichtiefe. Ziel ist es beispielsweise bei der Entwässerung möglichst viel Produktsuspension in der Zentrifuge zu prozessieren und dabei ein klares Zentrat zu erreichen bei minimaler Drehzahl. In Tabelle 5.1 sind die verwendeten Versuchsparameter der Prozessgrößen aufgetragen.



Tabelle 5.1.: Bereich der Prozessparameter der experimentellen Untersuchung zur Validierung der Simulation im Labormaßstab.

<b>Prozessvariable</b>	<b>Formelzeichen</b>	<b>Bereich</b>
Volumenstrom Zulauf	$\dot{V}_{\text{in}}$	15 l h <sup>-1</sup> bis 50 l h <sup>-1</sup>
Feststoffmassenanteil Zulauf	$w_{\text{in}}$	10,1 Ma.% bis 19 Ma.%
Drehzahl	$n_{\text{rot}}$	2000 rpm bis 6000 rpm
Differenzdrehzahl	$\Delta n$	5 rpm bis 15 rpm
Teichtiefe	$h_{\text{p}}$	6 mm bis 12 mm

Hier sind die Bereiche so gewählt, dass die Betriebspunkte der Zentrifuge außerhalb und innerhalb der optimalen Fahrweise liegen, um Abhängigkeiten der messbaren Größen in Zentrat und Kuchen experimentell abzubilden. Die maximale Drehzahl der Zentrifuge liegt bei dieser Konfiguration bei 6000 rpm. Die Teichtiefe ist zwischen 6 mm und 12 mm variabel. Folglich decken die gewählten Versuchsparameter den kompletten Bereich zwischen ungünstigen und optimalen Einstellungen ab.

### 5.3.2. Validierung

In Abbildung 5.6 ist der Feststoffmassenanteil des Kuchen über der Drehzahl für verschiedene Volumenströme aufgetragen. Der Feststoffmassenanteil am Zulauf ist konstant bei 14,7 Ma.% und die Zentrifuge arbeitet für diesen Fall mit einer konstanten Differenzdrehzahl von 15 rpm und einer Teichtiefe von 12 mm.

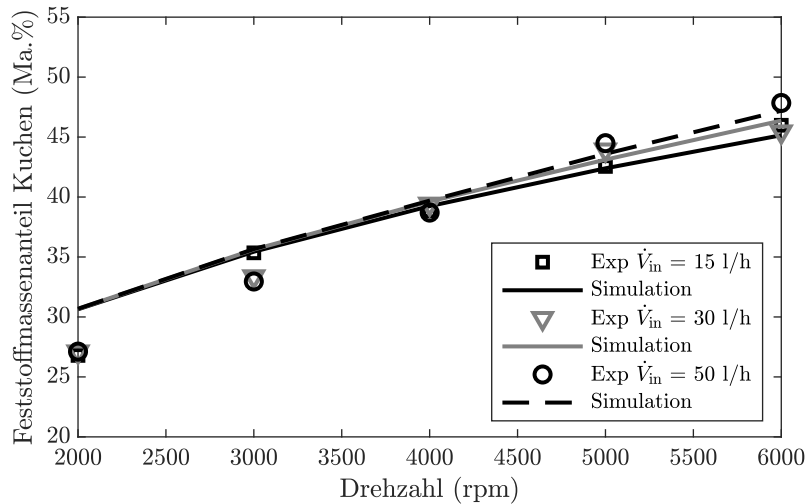


Abbildung 5.6.: Vergleich von Simulation und experimentellen Daten im Labormaßstab: Feststoffmassenanteil im Kuchen für verschiedene Drehzahlen und Volumenströme bei konstanter Teichtiefe und Zulaufkonzentration.

Mit zunehmender Drehzahl nimmt der Feststoffmassenanteil im Kuchen für alle drei Volumenströme im gesamten Drehzahlbereich zu. Dies ist zu erwarten, da die Zentrifugalbeschleunigung quadratisch von der Drehzahl abhängt (siehe Gleichung 2.2). Dadurch nehmen die Zentrifugalkräfte zu, welche auf das Sediment wirken, und das Sediment ist stärker verdichtet. Prinzipiell nimmt der absolut in die Zentrifuge eingetragene Feststoff mit zunehmenden Volumenstrom bei gleicher Zulaufkonzentration zu. Dadurch wird bei gleicher Drehzahl quantitativ gesehen mehr Feststoff abgeschieden, was zu einem höheren Sediment und somit zu einer stärkeren Kompression des Sediments führt. Die experimentellen Ergebnisse zeigen an dieser Stelle keinen nachweisbaren Einfluss des Volumenstromes für die drei untersuchten Volumenströme. Dies bedeutet, dass die Sedimenthöhe in der Zentrifuge bei allen drei Volumenströmen annähernd gleich sein muss. Die Simulation bestätigt sowohl den Einfluss der Drehzahl als auch des Volumenstroms. Im Bereich von 3000 rpm bis 6000 rpm stimmt die Simulation sehr gut mit den experimentellen Ergebnissen überein. Die Abweichungen sind kleiner als die zu erwartende Messungenauigkeiten von  $\pm 2$  Ma.% für den Kuchen. Bei gleichen Versuchseinstellungen wie in Abbildung 5.6 ist in Abbildung 5.7 der Feststoffvolumenanteil des Zentrats aufgetragen.

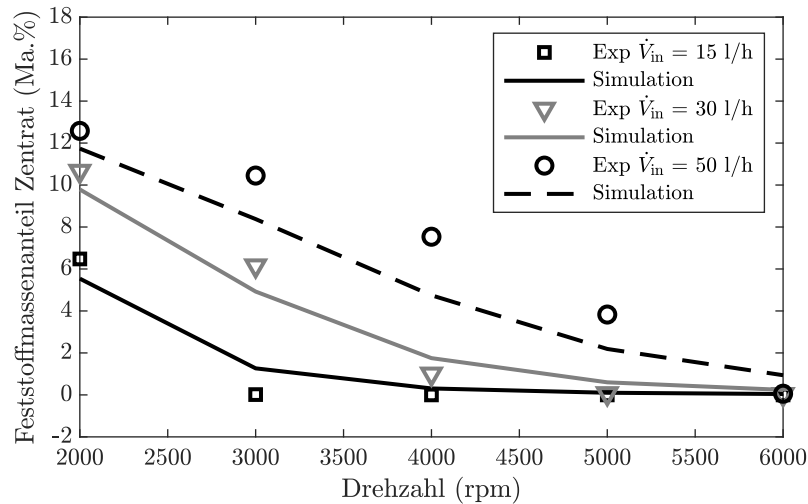


Abbildung 5.7.: Vergleich von Simulation und experimentellen Daten im Labormaßstab: Feststoffmassenanteil im Zentrat für verschiedene Drehzahlen und Volumenströme bei konstanter Teichtiefe und Zulaufkonzentration.

Der Feststoffmassenanteil im Zentrat sinkt mit zunehmender Drehzahl für alle Volumenströme. Aufgrund der zunehmenden Zentrifugalkräfte sedimentieren die Teilchen schneller bei gleicher Verweilzeit. Somit sind mehr Partikel in der Zentrifuge separierbar und der Feststoffmassenanteil im Zentrat ist geringer. Wiederum bei konstanter Drehzahl sinkt der Feststoffmassenanteil im Zentrat mit abnehmendem Volumenstrom. Durch den abnehmenden Volumenstrom erhöht sich die mittlere Verweilzeit der Partikel in der Zentrifuge. Bei gleicher Sedimentationsgeschwindigkeit haben die Partikel länger Zeit um zu sedimentieren, wodurch sich die Abscheidung verbessert. Des Weiteren wird bei einem geringeren Volumenstrom bei gleicher Zulaufkonzentration absolut weniger Feststoff in die Zentrifuge transportiert. Dadurch baut sich weniger Sediment innerhalb der Zentrifuge auf und mehr Klärfläche steht zur Verfügung, was ebenfalls die Abscheidung verbessert. Bei einem Volumenstrom von  $50 \text{ l h}^{-1}$  und einer Drehzahl von 2000 rpm findet nahezu keine Abscheidung statt. Der Feststoffmassenanteil beträgt hier 12,6 Ma.% und ist verglichen mit einem Feststoffmassenanteil im Zulauf von 14,7 Ma.% sehr hoch. Diese Parametereinstellung stellt somit ein „Worst Case“ bezüglich Klärung im Dekanter dar. Bei einer Drehzahl von 6000 rpm ist das Zentrat bei allen drei Volumenströmen vollständig geklärt, was im Falle der mechanischen Entfeuchtung das Ziel ist. Die Simulationen geben für alle drei Volumenströme den Trend wieder. Für die Volumenströme von  $15 \text{ l h}^{-1}$  und  $30 \text{ l h}^{-1}$  ist die Abweichung zwischen Experiment und Simulation kleiner  $\pm 1$  Ma.%, was innerhalb der zu erwartenden Genauigkeit von  $\pm 1$  Ma.% für

das Zentrat liegt. Im Bereich der Drehzahl zwischen 3000 rpm und 4000 rpm für den Volumenstrom liegt die Abweichung zwischen  $\pm 2 \text{ Ma.}\%$  und  $\pm 3 \text{ Ma.}\%$ . Allerdings ist dies ebenfalls akzeptabel, da die Simulation den Trend wiedergibt und den Grenzfall der vollständigen Klärung bei 6000 rpm, korrekt abbildet. Letztendlich ist dies für den Betrieb der Zentrifuge mit diesem Produkt entscheidend.

Die experimentellen und simulativen Ergebnisse unter Variation der Zulaufkonzentration sind in Abbildung 5.8 aufgetragen. Die Teichtiefe ist konstant bei  $h_p = 12 \text{ mm}$ , der Eingangsvolumenstrom bei  $\dot{V}_{in} = 301 \text{ h}^{-1}$  und die Differenzdrehzahl bei  $\Delta n = 15 \text{ rpm}$ .

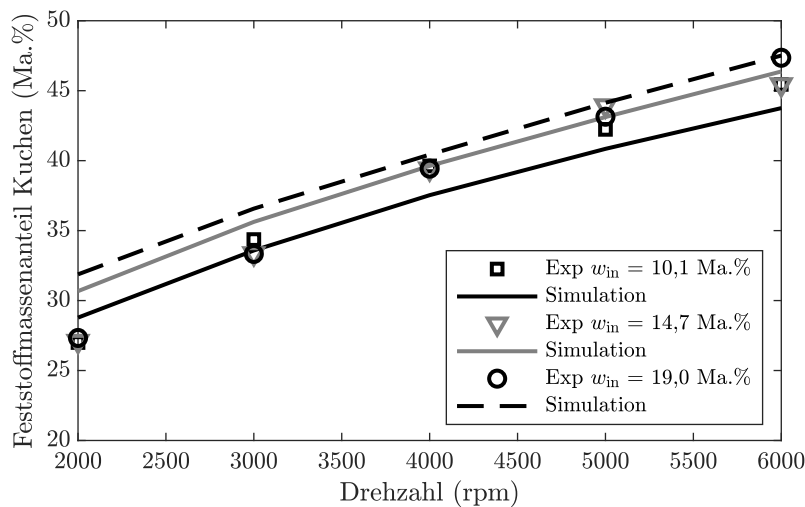


Abbildung 5.8.: Vergleich von Simulation und experimentellen Daten im Labormaßstab: Feststoffmassenanteil im Kuchen für verschiedene Drehzahlen und Zulaufkonzentrationen bei konstanter Teichtiefe und Volumenstrom.

Der Feststoffmassenanteil nimmt mit steigender Drehzahl aufgrund der zunehmenden Zentrifugalbeschleunigung zu, was bereits bei Abbildung 5.6 genauer erläutert ist. Die Experimente zeigen keinen messbaren Einfluss der Zulaufkonzentration  $w_{in}$  auf den Feststoffmassenanteil im Kuchen. Allerdings ist die experimentelle Bestimmung des Feststoffmassenanteils aufgrund der Eigenschaften des Kuchenauswurfes mit einem größeren Fehler behaftet als beim Zentrat (siehe Abschnitt 5.3.1). Der ausgeworfene Kuchen stellt einen Mittelwert des konsolidierten Sediments dar, welches in der Zentrifuge einen Konzentrationsgradienten entlang der Sedimenthöhe besitzt. Prinzipiell ist an dieser Stelle zu erwarten, dass der Feststoffmassenanteil im Kuchen mit steigender Zulaufkonzentration  $w_{in}$  bei ansonsten gleichen Prozessparametern zunimmt. Durch die höhere Zulaufkonzentration gelangt relativ gesehen mehr Feststoff in die Zentrifuge. Die Zentrifuge trennt mehr Feststoff ab, die Sedimenthöhe nimmt zu und

die zusätzliche Masse erzeugt einen Anstieg des Feststoffgerüstdrucks. Nach der Konsolidierungskinetik führt dies zu einem stärker komprimierten Sediment. Diesen Trend geben die Simulationen wieder. Es liegt die Vermutung nahe, dass dieser Trend innerhalb des Messungengenauigkeit der Experimente liegt. Die Simulationen bestätigen, dass beispielsweise der Unterschied zwischen  $w_{\text{in}} = 14,7 \text{ Ma.}\%$  und  $w_{\text{in}} = 19,0 \text{ Ma.}\%$  über dem untersuchten Drehzahlbereich bei ungefähr  $1 \text{ Ma.}\%$  liegt. Hier ist eine experimentelle Genauigkeit von  $\pm 2 \text{ Ma.}\%$  zu erwarten. Folglich zeigen die Simulationen eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen über den gesamten untersuchten Bereich. Analog zu den Einstellungen in Abbildung 5.8 ist der Feststoffmassenanteil des Zentrats über der Drehzahl in Abbildung 5.9 aufgetragen.

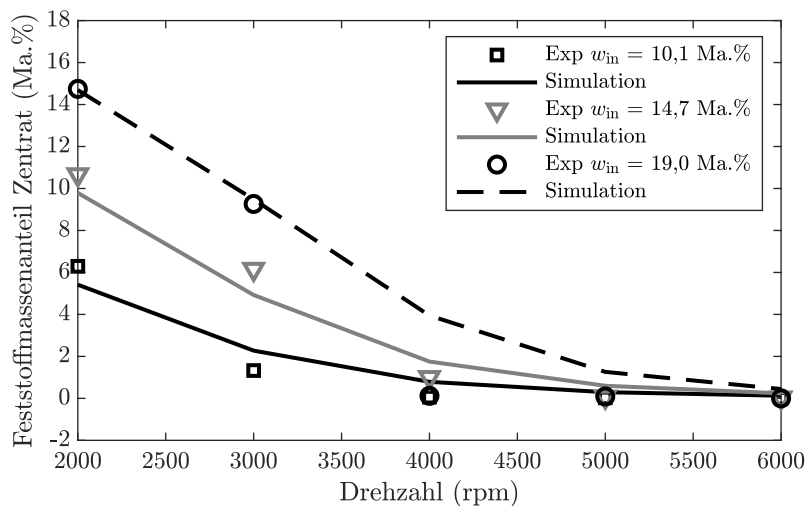


Abbildung 5.9.: Vergleich von Simulation und experimentellen Daten im Labormaßstab: Feststoffmassenanteil im Zentrat für verschiedene Drehzahlen und Zulaufkonzentrationen bei konstanter Teichtiefe und Volumenstrom.

Mit steigender Drehzahl nimmt der Feststoffmassenanteil im Zentrat für alle drei Zulaufkonzentrationen  $w_{\text{in}}$  ab, beziehungsweise die Abscheidung verbessert sich. Dies liegt wie für Abbildung 5.7 beschrieben an der zunehmenden Zentrifugalbeschleunigung. Mit zunehmender Zulaufkonzentration steigt der Feststoffmassenanteil im Zentrat bei sonst konstanten Prozessparametern an. Dies ist deutlich im Bereich zwischen  $n_{\text{rot}} = 2000 \text{ rpm}$  und  $n_{\text{rot}} = 4000 \text{ rpm}$  zu beobachten. Zum einen ist absolut gesehen die Zentrifuge mit zunehmender Zulaufkonzentration mehr gefüllt, was die Abscheidung verschlechtert. Weiterhin ist der Sedimentationshinderungsfaktor kleiner bei tendenziell größeren Feststoffkonzentrationen. Dies behindert zusätzlich die Sedimentation in der Zentrifuge. Zum anderen wäre bei einem relativ gesehen

vergleichbaren Abscheidegrad absolut gesehen mehr Sediment in der Zentrifuge. Deswegen ist der Punkt, ab dem das Zentrat vollständig geklärt ist, bereits bei einer kleineren Drehzahl erreicht. Insgesamt geben die Simulationen das zuvor beschriebene Verhalten wieder. Die Abweichungen zwischen Simulation und Experiment sind kleiner als  $\pm 1 \text{ Ma.}\%$  und liegen somit in dem zu erwartenden Bereich. Allerdings passt der experimentelle Wert bei  $n_{\text{rot}} = 4000 \text{ rpm}$  und  $w_{\text{in}} = 19,0 \text{ Ma.}\%$  nicht zu diesem Trend. Dieser ist nach der Theorie, wie zuvor beschrieben, über dem Wert von  $w_{\text{in}} = 10,1 \text{ Ma.}\%$  und  $w_{\text{in}} = 14,7 \text{ Ma.}\%$  im Bereich zwischen  $3 \text{ Ma.}\%$  und  $4 \text{ Ma.}\%$  und nicht darunter zu erwarten. Sehr wahrscheinlich ist dies auf einen Fehler bei der Probennahme zurückzuführen oder durch eine nicht festgestellte Parameterschwankung am Zulauf. Allerdings erfolgte keine weitere Untersuchung dieses Verhaltens, da die experimentellen Daten lediglich zur Validierung der Simulation dienen.

In Abbildung 5.10 ist der Feststoffmassenanteil des Kuchens über der Drehzahl für verschiedene Drehzahlen und Teichtiefen aufgetragen bei einem Eingangsvolumenstrom von  $\dot{V}_{\text{in}} = 301 \text{ h}^{-1}$  und Zulaufkonzentration von  $w_{\text{in}} = 10,1 \text{ Ma.}\%$ .

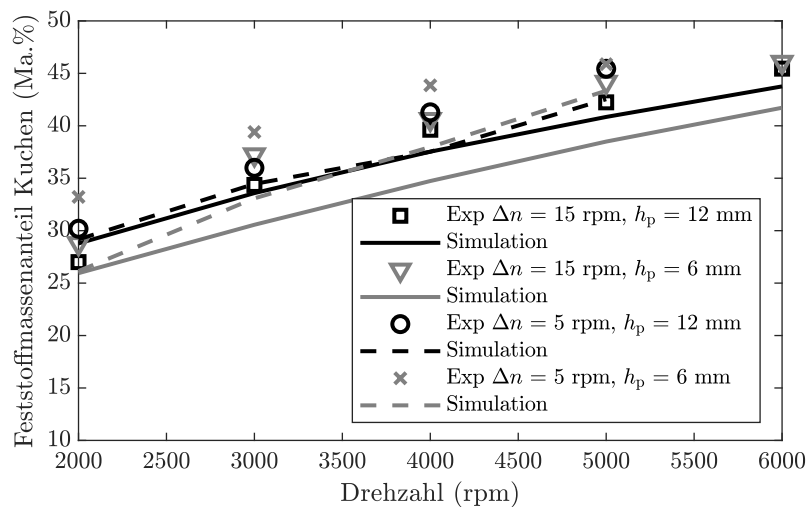


Abbildung 5.10.: Vergleich von Simulation und experimentellen Daten im Labormaßstab: Feststoffmassenanteil im Kuchen für verschiedene Drehzahlen, Differenzdrehzahlen und Teichtiefen bei konstantem Volumenstrom und Zulaufkonzentration.

Die Abhängigkeit des Feststoffmassenanteils von der Drehzahl ist analog zu Abbildungen 5.6 und 5.8. Die Experimente für eine Differenzdrehzahl von  $\Delta n = 5 \text{ rpm}$  reichen lediglich bis  $n_{\text{rot}} = 5000 \text{ rpm}$ . Ab dieser Drehzahl war das Drehmoment auf die Schnecke zu groß und der Überlastschutz hat die Zentrifuge heruntergefahren. Mit einem stärkeren Motor wäre

es prinzipiell möglich bis  $n_{\text{rot}} = 6000$  rpm zu messen. Allerdings ist das Auslösen des Überlastschutzes unter anderem ein Indiz dafür, dass die Zentrifuge an ihrem Kapazitätsmaximum läuft. Bei der geringeren Differenzdrehzahl von  $\Delta n = 5$  rpm ist die Transportgeschwindigkeit des Sediments geringer als bei  $\Delta n = 15$  rpm, wodurch das Sediment länger in der Zentrifuge verweilt. Dadurch baut sich ein höheres Sediment auf, was aufgrund der höheren Eigenmasse stärker komprimiert. Für den Sedimenttransport ist daher mehr Energie in Form von einem erhöhtem Drehmoment aufzubringen, was in diesem Fall zum Auslösen des Überlastschutzes führt. Bei größeren Teichtiefen ist absolut gesehen mehr Suspension und somit mehr Sediment in der Dekantierzentrifuge im Vergleich zu kleineren Teichtiefen zu erwarten. Durch die höhere Eigenmasse wird das Sediment stärker komprimiert, was zu leicht größeren Feststoffmassenanteilen im Kuchen führt. Dieses Verhalten bilden die Simulationen ab. Im Rahmen der bereits zuvor erwähnten Messgenauigkeit bei der Probenahme des Kuchens ist bei den Experimenten kein eindeutiger Trend feststellbar. Die Ergebnisse bestätigen eine Messgenauigkeit von  $\pm 2$  Ma.%. Das heißt der Einfluss von  $\Delta n$  und  $h_p$  ist in diesem Bereich gering. Die Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation ist in diesem Bereich aufgrund der Annahmen der Modellierung und Messgenauigkeit des Kuchens als gut zu bewerten. Bei den gleichen Versuchseinstellungen wie in Abbildung 5.10 ist in Abbildung 5.11 der Feststoffvolumenanteil des Zentrats aufgetragen.

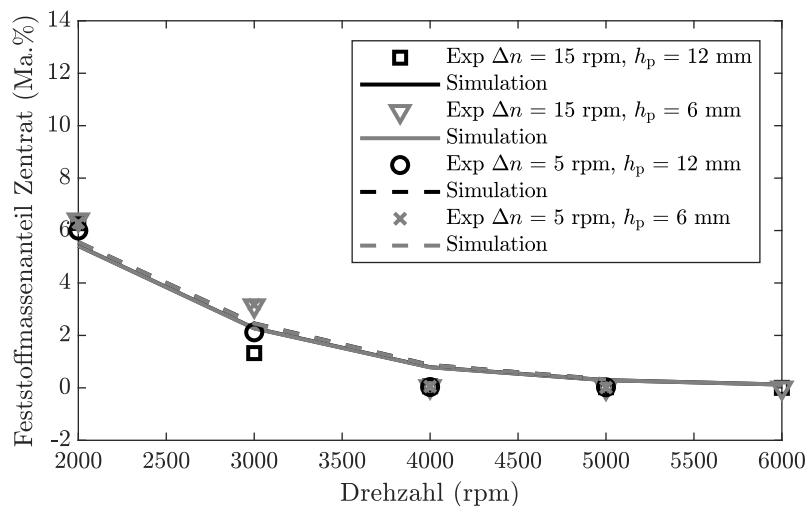


Abbildung 5.11.: Vergleich von Simulation und experimentellen Daten im Labormaßstab: Feststoffmassenanteil im Zentrat für verschiedene Drehzahlen, Differenzdrehzahlen und Teichtiefen bei konstantem Volumenstrom und Zulaufkonzentration.

Ab einer Drehzahl von  $n_{\text{rot}} = 4000$  rpm ist ein klares Zentrat erreicht. Der Einfluss der Differenzdrehzahl  $\Delta n$  und der Teichtiefe  $h_p$  ist in diesem Bereich für den Labormaßstab nicht messbar. Die Simulation zeigt ebenfalls keinen Einfluss. Die Abweichungen zwischen Simulation und Experiment sind im gesamten Bereich kleiner  $\pm 1$  Ma. %.

Insgesamt sind die Abweichungen zwischen Simulation und Experimenten innerhalb der Messgenauigkeit. Die Simulation bestätigen die experimentellen Ergebnisse und geben die zu erwartenden Trends wieder. Vielmehr kann die Simulation detailliertere Einblicke in das Verhalten der Dekantierzentrifuge liefern. Allerdings ist die im Labormaßstab verwendete Dekantierzentrifuge klein im Verhältnis zu den typischen industriell eingesetzten Maschinen. Deswegen erfolgen weiterführende Untersuchungen zur Scale-up Fähigkeit und Übertragbarkeit der Methodik im nachfolgenden Kapitel.

### 5.4. Scale-up Fähigkeit und Validierung im Industriemaßstab

Das Ziel dieses Abschnittes ist es, die Effektivität der Simulationsmethode detailliert zu bewerten, was die Übertragbarkeit der Materialcharakterisierung und die Scale-up Fähigkeit einschließt.<sup>1</sup> Um dies zu untersuchen, vergleicht und diskutiert der nachfolgende Abschnitt Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten für eine Dekantierzentrifuge jeweils im Labor-, Pilot- und Industriemaßstab auf der Basis von zwei verschiedenen feindispersen Calciumcarbonat-Wasser Suspensionen (CC1 und CC2). Es ist zu untersuchen, ob dies auf verschiedene Calciumcarbonat-Wasser Suspensionen übertragbar ist, die sich in ihrem Materialverhalten unterscheiden. Dies hätte den Vorteil, dass die Simulationsmethode gerade in der industriellen Anwendung flexibel ist, was Änderungen des verwendeten Produktes angeht. Insbesondere im Hinblick auf die Transporteffizienz des konsolidierten Sediments, die auf einer Dekantierzentrifuge im Labormaßstab kalibriert und für Simulationen im industriellen Maßstab in Verwendung ist, ist dies sehr nutzbringend. Dies führt zu der Frage, ob diese Kalibrierung auch für Zwischenskalen ausreichend ist und somit ein Scale-up und -down möglich ist, wenn die Transporteffizienz in einer der Skalen kalibrierbar ist. Das Verweilzeitverhalten und die Zentrifugalbeschleunigung können zwischen den verschiedenen Größen deutlich variieren.

---

<sup>1</sup>Die Ergebnisse dieses Abschnittes sind teilweise in Menesklou et al. [46] durch den Autor veröffentlicht.



### 5.4.1. Experimentelles Vorgehen

Die drei ausgewählten Dekantierzentrifugen stellen typische Baugrößen dar. Abbildung 5.12 visualisiert die geometrischen Abmessungen der verwendeten Dekantierzentrifugen maßstabsgetreu in Relation zueinander.

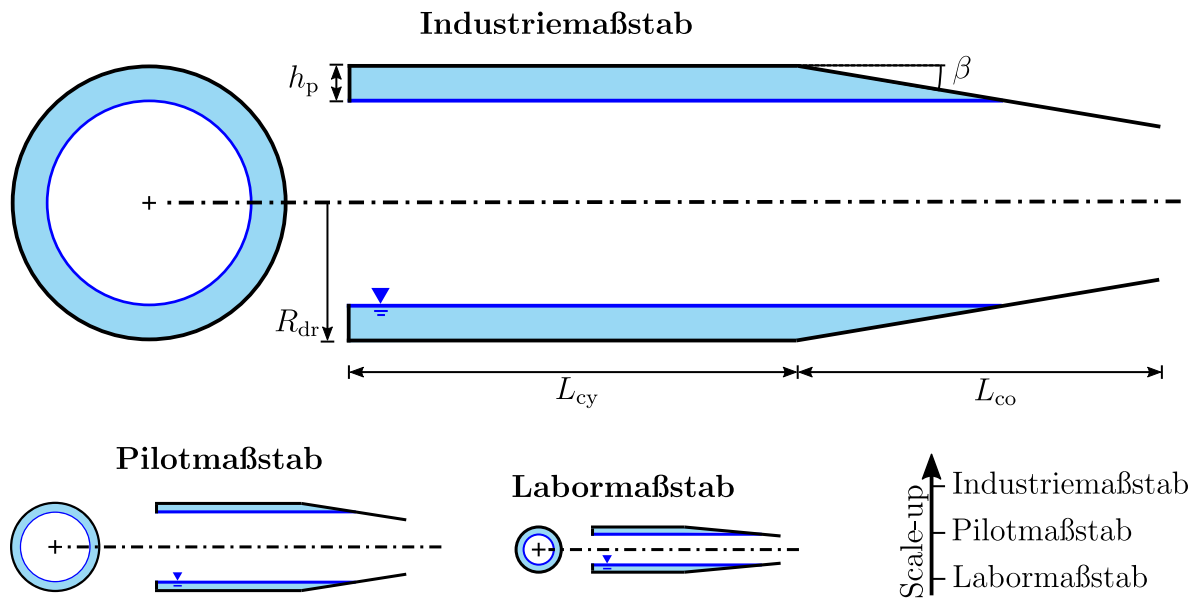


Abbildung 5.12.: Skizze mit Abmessungen der zur Untersuchung der Scale-up Fähigkeit verwendeten Dekantierzentrifugen; maßstabsgetreu relativ zueinander.

Die Laborzentrifuge ist für den Einsatz in der Forschung und für hochwertige Produkte, die nur in kleinen Stückzahlen verfügbar sind, konzipiert. Die Zentrifuge im Pilotmaßstab ist häufig in Pilotanlagen im Einsatz, um als Zwischenmaßstab die Scale-up Beziehungen zu überprüfen und grundlegende Tests zur Eignung in der Produktion durchzuführen. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass die Zentrifugen im Sinne des Buckingham-II-Theorems<sup>1</sup> streng genommen geometrisch nicht exakt vergleichbar sind, da in den verschiedenen Baugrößen die Längenverhältnisse (beispielsweise Trommelradius zu Länge des Zylinders) nicht konstant gehalten sind. Allerdings schließen die gängigen Scale-up Methoden für Dekantierzentrifugen ( $\Sigma$ -Theorie) das Buckingham-II-Theorem nicht mit ein, da diese sich über die Verweilzeit und Sedimentationsgeschwindigkeit einer Grenzkorngröße ableiten. Nachfolgende

<sup>1</sup>Das Buckingham-II-Theorem ist eine Theorie zur Bestimmung von dimensionslosen Kennzahlen aus dimensionsbehafteten Einflussgrößen. Es besagt, dass wenn die dimensionslosen Kennzahlen konstant gehalten werden, die gleichen physikalischen Ergebnisse, auch bei einem Scale-up oder Scale-down der dimensionsbehafteten Einflussgrößen, zu erwarten sind. [62]

Scale-up Versuche sind somit typische Scale-up Versuchsreihen. Die Volumenströme und der Feststoffmassenanteil am Einlass sind so gewählt, dass diese innerhalb des typischen Anwendungsbereich liegen. Die Parameter für alle drei verschiedenen Skalen sind in Tabelle 5.2 aufgeführt.

Tabelle 5.2.: Versuchsbedingungen der verschiedenen Dekantierzentrifugen zur Untersuchung der Scale-up Fähigkeit.

<b>Parameter</b>	<b>Dimension</b>	<b>Laborm.</b>	<b>Pilotm.</b>	<b>Industriem.</b>
Länge Zylinder	m	0,155	0,243	0,746
Länge Konus	m	0,16	0,174	0,604
Trommelradius	m	0,04	0,075	0,229
Konuswinkel	°	7	10	10
Teichtiefe	mm	12	14	64
Feststoffmassenanteil Zulauf CC1	Ma.%	9,4	35	35
Feststoffmassenanteil Zulauf CC2	Ma.%	3,4	20,5	18,4
Volumenstrom Zulauf CC1	l h <sup>-1</sup>	88	300	2000 bis 3000
Volumenstrom Zulauf CC2	l h <sup>-1</sup>	33 und 54	300	1000 bis 2000

Das experimentelle Vorgehen ist analog zu Abschnitt 5.3.1. Die Probenentnahme findet nach Erreichen des stationären Zustands der Maschine statt. Die Zeit bis zum Erreichen des stationären Zustands und damit den Zeitpunkt der Probenentnahme nach Änderung der Parameter wurde anhand von Vorversuchen ermittelt. Das Zeitintervall beträgt für die Pilot-Dekantierzentrifuge 5 min und für die Industrie-Dekantierzentrifuge 10 min. Die Probenahme des Zentrats erfolgt direkt aus dem Ablaufrohr unmittelbar hinter dem Zentratablauf. Der gemessene Wert für den Feststoffmassenanteil des Kuchens stellt einen Mittelwert für die gesamte ausgetragene Sedimentschicht dar. In den Diagrammen im folgenden Abschnitt sind keine Fehlerbalken eingezeichnet. Die Messungen sind Einzelmessungen und dienen der Validierung der Simulationen. Hier ist ebenfalls im nachfolgenden davon auszugehen, dass aufgrund der Probennahme und Reproduzierbarkeit die experimentellen Werte des Feststoffgehalts des Zentrats um  $\pm 1$  Ma.% und für den Kuchen um  $\pm 2$  Ma.% abweichen. Dies basiert auf Vorversuchen zur Reproduzierbarkeit der Messwerte.

### 5.4.2. Validierung

In diesem Abschnitt erfolgt der Vergleich von Simulationen mit experimentellen Daten, um die Scale-up-Fähigkeit und Übertragbarkeit dieses numerischen Ansatzes zu diskutieren. Vor- und Nachteile der beiden Scale-up-Methoden sind hervorgehoben und Gegenstand der Diskussion. Abbildung 5.13 zeigt den Feststoffmassenanteil des Kuchens in Abhängigkeit von der Drehzahl. Die Simulationen erfolgen für alle drei Skalen für CC1 und sind den experimentellen Werten gegenübergestellt.

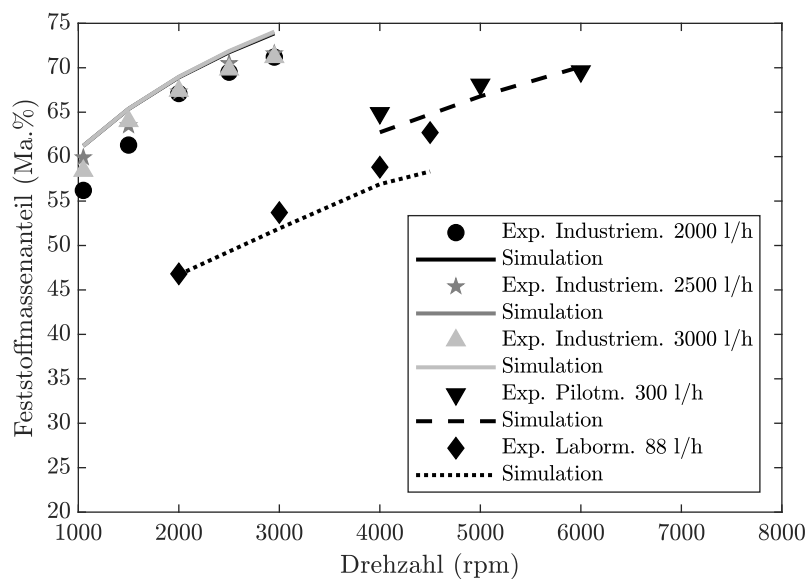


Abbildung 5.13.: Feststoffmassenanteil des Kuchens für drei Skalen der Dekantierzentrifuge unter Variation der Volumenströme und Drehzahlen: Vergleich von Simulation und Experiment für CC1.

Sowohl bei den Simulationsdaten als auch bei den experimentellen Daten nimmt der Feststoffmassenanteil zu höheren Drehzahlen hin für jeden Maßstab zu, was durch die steigende Zentrifugalbeschleunigung erklärbar ist. Die relative Abweichung zwischen Simulation und Experiment ist relativ immer kleiner als 10%. Dies liegt im Bereich der zu erwartenden Genauigkeit eines solchen Prozessmodells. Weiterhin ist hier zu erwähnen, dass der Feststofftransport eine dreidimensionale Beschreibung erfordert, das Modell aber eine vereinfachte zweidimensionale Beschreibung verwendet, was die Genauigkeit verringert. Der Feststoffmassenanteil im Kuchen variiert bei verschiedenen Skalen für eine bestimmte Drehzahl erheblich. Dies liegt daran, dass die Zentrifugalbeschleunigung proportional zum Trommelradius ist und die Höhe des Sediments einen Einfluss auf die Verdichtung hat. Der Trommelradius für die Maschine im

Labormaßstab ist wesentlich kleiner (siehe Tabelle 5.2) als der einer Maschine im Industriemaßstab. Daher wird eine wesentlich geringere Zentrifugalbeschleunigung erreicht. Außerdem ist der Durchsatz einer großtechnischen Zentrifuge grundsätzlich deutlich höher und der Teich ist prinzipiell tiefer. Dadurch baut sich im Teich ein höheres Sediment auf, was einen höheren Zentrifugaldruck auf das Sediment bewirkt und somit zu einem kompakteren Kuchen führt. Die Variation des Volumenstroms hat bei der Simulation der Industrie-Dekantierzentrifuge praktisch keinen signifikanten Einfluss auf den Feststoffmassenanteil im Kuchen. Das gleiche Verhalten ist für die experimentellen Daten zu beobachten. Dies liefert einen ersten Hinweis darauf, dass die Simulation den Einfluss des Volumenstroms auf den Feststoffgehalt des Kuchens vorhersagt. Analog zu Abbildung 5.13 ist der Feststoffmassenanteil des Zentrats in Abbildung 5.14 aufgetragen.

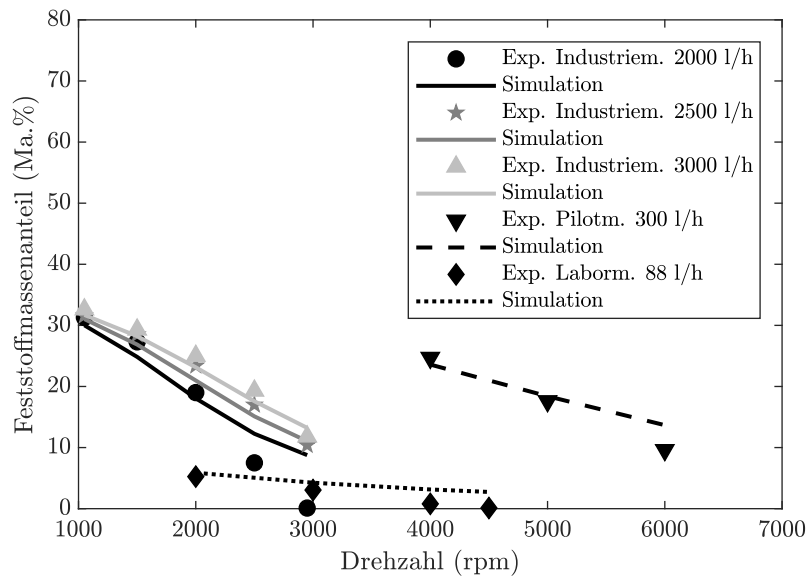


Abbildung 5.14.: Feststoffmassenanteil des Zentrats für drei Skalen der Dekantierzentrifuge unter Variation der Volumenströme und Drehzahlen: Vergleich von Simulation und Experiment für CC1.

Der Feststoffmassenanteil des Zentrats nimmt mit steigender Drehzahl ab. Im Allgemeinen zeigen die Simulationsergebnisse hier ebenfalls eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Analog zu den beiden vorherigen Abbildungen sind die Simulationen mit den experimentellen Daten für das Produkt CC2 verglichen. In Abbildung 5.15 ist der Feststoffmassenanteil des Kuchens für das Material CC2 für verschiedene Skalen aufgetragen.

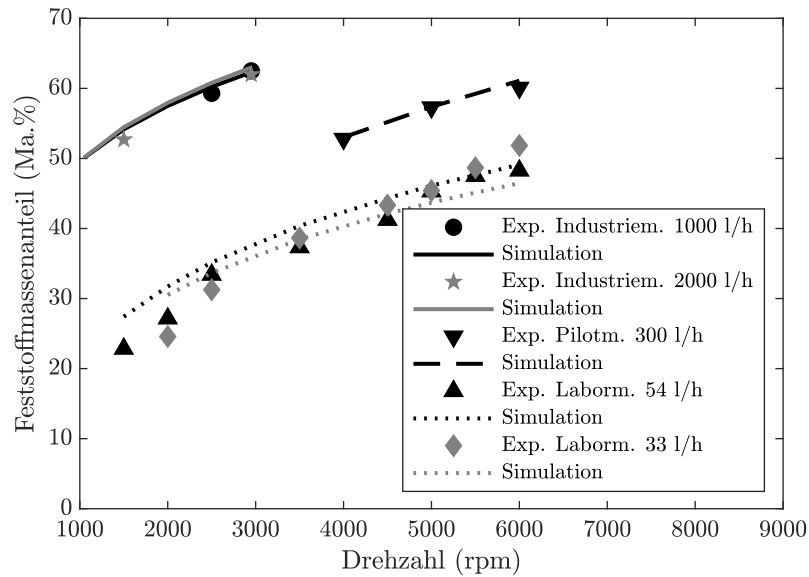


Abbildung 5.15.: Feststoffmassenanteil des Kuchens für drei Skalen der Dekantierzentrifuge unter Variation der Volumenströme und Drehzahlen: Vergleich von Simulation und Experiment für CC2.

Die Abhängigkeiten des Feststoffmassenanteils von der Drehzahl sind ähnlich wie in Abbildung 5.13 dargestellt. Die Simulationsergebnisse zeigen eine relative Abweichung von weniger als 10% im Vergleich zu den experimentellen Daten, mit Ausnahme der Daten im Labormaßstab bei  $331\text{h}^{-1}$  für 1500 rpm und 6000 rpm. Die Simulationen geben jedoch den Trend wieder und diese Werte stellen Randbereiche bei der Betriebsweise der Labor-Dekantierzentrifuge für dieses Produkt dar. Weiterhin ist zu betonen, dass alle drei Zentrifugen, die unterschiedliche Größenordnungen repräsentieren, nur auf Basis der zuvor beschriebenen Materialcharakterisierung mit entsprechender Genauigkeit simulierbar sind. Abbildung 5.16 verdeutlicht, dass der Feststoffmassenanteil des Zentrats in Analogie zu Abbildung 5.14 und entsprechend den Daten aus Abbildung 5.15 von der Drehzahl abhängig ist.

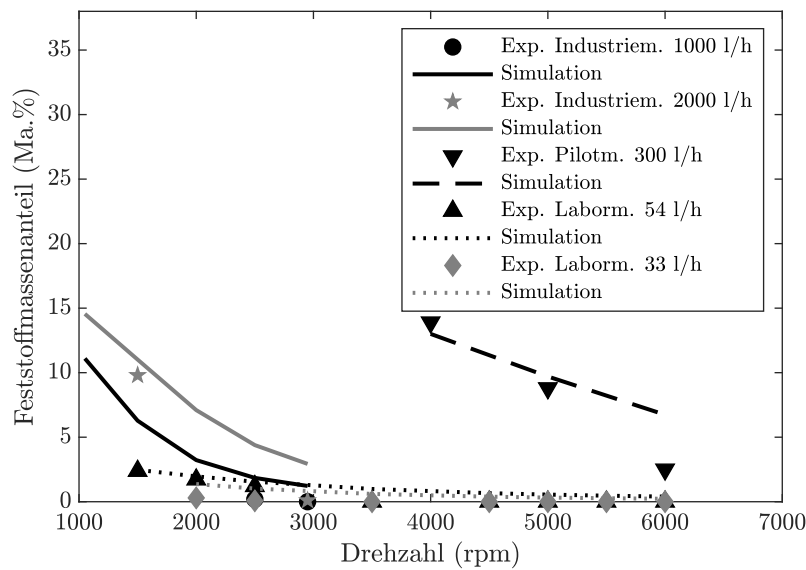


Abbildung 5.16.: Feststoffmassenanteil des Zentrats für drei Skalen der Dekantierzentrifuge, Volumenströme und Drehzahlen: Vergleich von Simulation und Experiment für CC2.

Wie zuvor diskutiert, nimmt der Feststoffmassenanteil in der Zentrifuge sowohl bei den experimentellen Daten als auch bei der Simulation mit zunehmender Drehzahl ab. Prinzipiell stimmen die Ergebnisse gut überein und die absolute Abweichung ist kleiner als 5 Ma.%. Außerdem ist das physikalische Verhalten in der Simulation abgebildet. Dies deutet darauf hin, dass der Simulationsansatz auf weitere feindisperse mineralische Produkte übertragbar ist. Abbildung 5.17 zeigt ein beispielhaftes Scale-Up mit der  $\Sigma$ -Theorie und dem numerischen Modell. Dazu ist der Abscheidegrad (siehe Gleichung 2.9) über der Drehzahl aufgetragen.

Dieses Beispiel stellt ein typisches Scale-Up Problem dar. Die Dimensionierung einer Zentrifuge im industriellen Maßstab soll auf Versuchen im Pilotmaßstab basieren. Zunächst erfolgen Versuche im Pilotmaßstab bei einem Volumenstrom von  $300 \text{ l h}^{-1}$ . Die entsprechenden  $\Sigma$ -Werte sind aus der Geometrie der Maschine und der gewählten Zentrifugalbeschleunigung nach Gleichung 2.24 berechenbar. Damit lässt sich das Skalierungskriterium (Verhältnis von Durchsatz zu  $\Sigma$ -Wert, siehe Gleichung 2.28) für jede experimentell gemessene Parameterkombination ermitteln. Der Volumendurchsatz ist in diesem Beispiel für die Dekantierzentrifuge im industriellen Maßstab auf  $3000 \text{ l h}^{-1}$  gesetzt. Unter Berücksichtigung des Skalierungskriteriums sind die entsprechenden  $\Sigma$ -Werte der Industrie-Dekantierzentrifuge berechenbar. Aus diesen entsprechenden  $\Sigma$ -Werten ergibt sich zum einen die optimale Geometrie (charakteristischer

Radius und Länge) oder zum anderen die optimale Zentrifugalbeschleunigung und damit Drehzahl. In diesem Fall ist die Geometrie der großtechnischen Maschine definiert. Deswegen erfolgt die Berechnung der für die Industrie-Dekantierzentrifuge erforderlichen Drehzahlen.

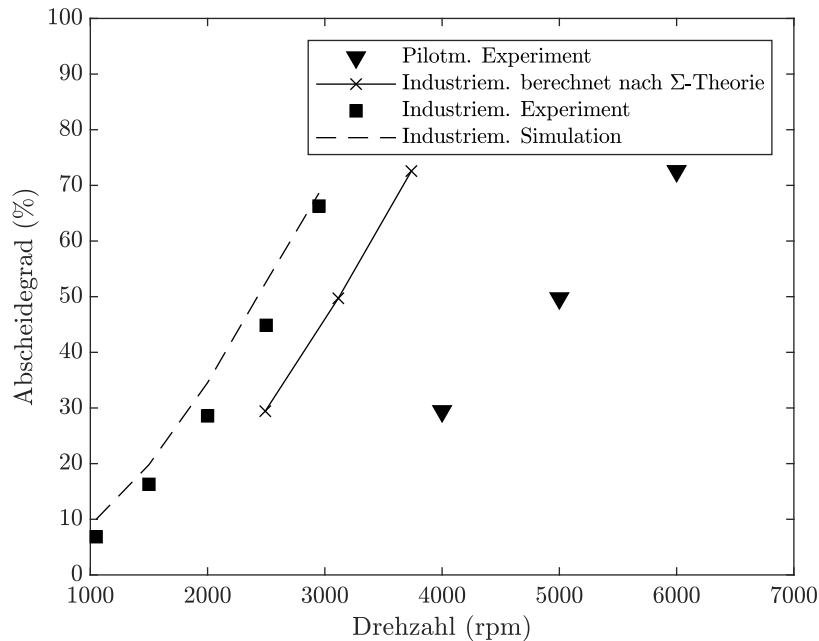


Abbildung 5.17.: Vergleich des Scale-up mittels  $\Sigma$ -Theorie und Simulation.

Das Ergebnis der  $\Sigma$ -Theorie deckt sich nicht mit den experimentellen Ergebnissen der Industrie-Dekantierzentrifuge. Die  $\Sigma$ -Theorie führt zu höheren Drehzahlen als im Experiment feststellbar ist, was normalerweise einen höheren Energieverbrauch bedeutet. Die Simulationmethode zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen, wie bereits zuvor in diesem Abschnitt diskutiert, und liefert ausreichende Ergebnisse für den Scale-up. Die  $\Sigma$ -Theorie bräuchte demzufolge einen empirischen Korrekturparameter, um in diesem Fall das korrekte Maschinenverhalten vorherzusagen. Die Materialfunktionen, die als Eingangsparameter für die Simulation dienen, sind für ein bestimmtes Produkt mit diskontinuierlichen analytischen Zentrifugen im Labormaßstab ermittelt worden. Lediglich die Kalibrierung der Transporteffizienz, die die Abweichung vom idealen Transportverhalten beschreibt, muss durch Versuche an einer Labor-Dekantierzentrifuge erfolgen. Menesklou et al. [44] haben jedoch gezeigt, dass der Einfluss dieser Größe in untersuchten großtechnischen Anwendungen einen geringen Einfluss auf das Ergebnis hat. Dies zeigt, dass ein Scale-up von Dekantierzentrifugen vom Labormaßstab mit dem vorgestellten numerischen Ansatz möglich ist.

Das Scale-up des Feststoffmassenanteils im Kuchen ist mit den vorgestellten analytischen Methoden nicht möglich. Diese Ansätze berücksichtigen keine Konsolidierungs- und Transportmodelle des Sediments innerhalb der Zentrifuge und können daher keine Vorhersage des Feststoffmassenanteils des Kuchens liefern. Im Gegensatz dazu ist im numerischen Ansatz ein Modell für die Sedimentkonsolidierung und den Transport von feindispersen Haufwerken implementiert. Damit ist die Untersuchung des Materialverhaltens des Sediments innerhalb der gesamten Zentrifuge möglich. Weiterhin sind durch die Diskretisierung der Apparatur Parameter wie Partikelgrößenverteilung, Feststoffgehalt, etc. lokal und zeitlich in der Zentrifuge aufgelöst. Diese Parameter sind sonst nicht oder nur mit hohem experimentellen Aufwand in der Apparatur messbar. Die analytische Methode liefert nur integrale Parameter der Dekantierzentrifuge. Um diese zusätzliche Eigenschaft des numerischen Ansatzes zu demonstrieren, folgt ein Beispiel für die Industrie-Dekantierzentrifuge mit dem Produkt CC1 mit einem Zulauf von  $3000\text{ l h}^{-1}$ .

In Abbildung 5.18 ist der Feststoffmassenanteil der Suspension entlang des schraubenförmigen Schneckenkanals der Zentrifuge dargestellt. Die relative Länge der Dekantierzentrifuge  $L_{\text{rel}}$  beschreibt die relative Position im zylindrischen Teil der Dekantierzentrifuge. Der Eingangsvolumenstrom tritt am Übergangspunkt zwischen konischem und zylindrischem Teil in den Apparat ein, was  $L_{\text{rel}} = 0$  entspricht. Der Zentratauslass ist bei  $L_{\text{rel}} = 1$ .

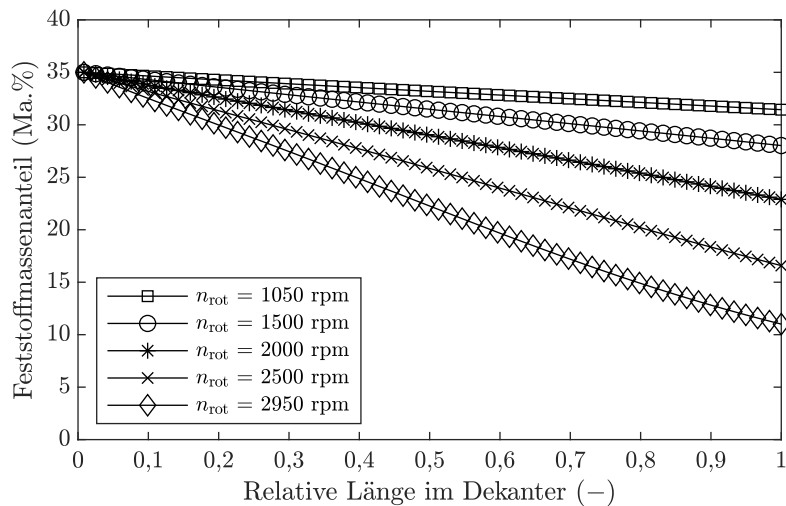


Abbildung 5.18.: Feststoffmassenanteil entlang der abgerollten Helix einer Dekantierzentrifuge im industriellen Maßstab mit CC1 für verschiedene Drehzahlen bei konstantem Eingangsvolumenstrom von  $3000\text{ l h}^{-1}$ .



Der Feststoffmassenanteil der Suspension nimmt im zylindrischen Teil annähernd linear ab. Dies zeigt, dass die gesamte Länge der Zentrifuge zur Abscheidung zur Verfügung steht und die Abscheidung gleichmäßig erfolgt. Abbildung 5.19 zeigt die Partikelgrößenverteilungen von Zulauf und Zentrat entlang der relativen Länge der Zentrifuge als Summenverteilung.

Generell verschiebt sich die Partikelgrößenverteilung vom Zulauf zum Zentrat hin zu kleineren Partikelgrößenklassen. Weiterhin ist zu erwähnen, dass sich die Steigung der Verteilung entlang der Zentrifugenlänge ändert. Auf den ersten 25 % der Länge der Zentrifuge scheiden eher die groben Partikelfractionen ab, danach eher kleinere Partikelgrößenklassen. Dies lässt sich aus der Theorie ableiten. Die Sedimentationsgeschwindigkeit nach Stokes ist proportional zum Quadrat des Partikeldurchmessers. Daraus folgt, dass bei gleicher Verweilzeit aller Partikel im Apparat die Separation kleinerer Partikel weiter hinten im Apparat erfolgt. Besonders für die Klassierung ist es hilfreich zu wissen, wo die Trennung der einzelnen Größenklassen stattfindet. Mit einem analytischen Scale-up-Ansatz ist dies in dieser Detailtiefe wenn überhaupt nur mit erheblichem Aufwand bestimmbar.

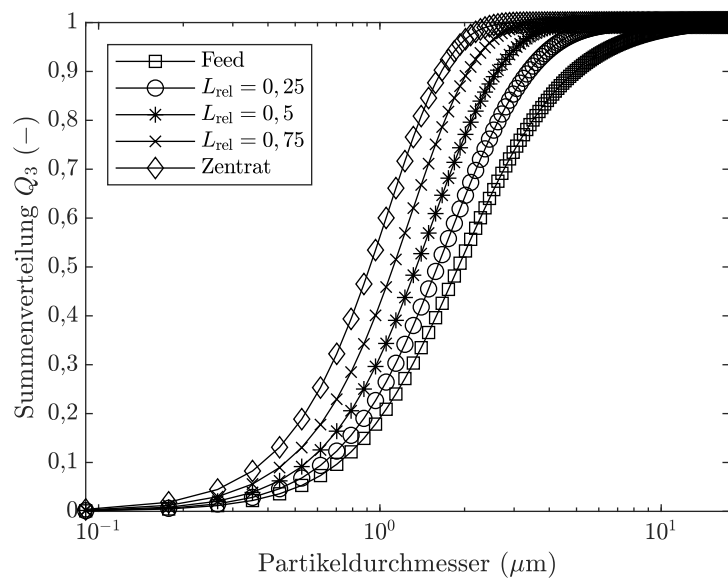


Abbildung 5.19.: Partikelgrößenverteilung in der Suspension entlang der abgerollten Helix für eine Dekantierzentrifuge im industriellen Maßstab mit CC1 bei konstantem Eingangsvolumenstrom von  $3000 \text{ l h}^{-1}$  und Drehzahl von  $2950 \text{ rpm}$ .

## 5.5. Modellierung Überströmung Zentrifugenwehr

### 5.5.1. Analytischer Ansatz zur Implementierung in Simulationsumgebung

Am Zentratauslass des Dekanters befindet sich das Wehr. Dort findet eine Umlenkung des Volumenstroms aufgrund der geometrischen Verhältnisse der Zentrifuge statt. Dies ist im Erdschwerefeld aus der Gerinnehydraulik bei der Überströmung von Wehren bekannt. Dadurch stellt sich eine sogenannte Überfallhöhe ein, die vom Volumenstrom und der Wehrgeometrie abhängt. Abbildung 5.20 illustriert dieses Verhalten der Strömung am Wehr.

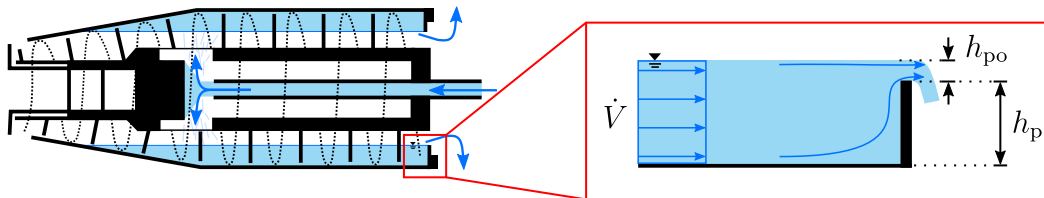


Abbildung 5.20.: Überströmung und Überfallhöhe am Wehr in Dekantierzentrifugen.

Aufgrund der Umlenkung des ankommenden Fluides mit dem Volumenstroms  $\dot{V}$  bildet sich die Überfallhöhe  $h_{po}$  über der eigentlichen Wehrhöhe  $h_p$  aus. Dies hat Auswirkungen auf die Betriebsweise von Zentrifugen. Die Erhöhung des Teichs mit zunehmendem Volumenstrom verkürzt die Länge oberhalb des Flüssigkeitsteichs im konischen Bereich. Das ist besonders für Tiefteichgeometrien und relativ großen Volumenströmen im Bezug auf die Auslegung des Dekanters zu berücksichtigen. Weiterhin spielt diese Überhöhung bei der Modellierung des sogenannten Degrittings (siehe Kapitel 5.6) eine Rolle. In der Gerinnehydraulik findet zur Berechnung der Überfallhöhe im Erdschwerefeld unter anderem die Poleni Gleichung [8] Anwendung. Diese ist aus der Bernoulli Gleichung abgeleitet. Die genaue Herleitung ist in Bollrich [8] zu finden. Für einen rechteckförmigen Strömungskanal im Erdschwerefeld lautet die Gleichung für die Überfallhöhe nach Poleni:

$$h_{po,g} = \left( \frac{3}{2} \frac{\dot{V}}{\mu_{po} \sqrt{2gB}} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (5.24)$$

Darin ist  $\dot{V}$  der Volumenstrom im Kanal,  $B$  die Breite des Wehres,  $g$  die Erdbeschleunigung und  $\mu_{\text{po}}$  der Überfallbeiwert. Dieser ist ein empirischer Wert und berücksichtigt Reibungsverluste und die Wehrgeometrie (beispielsweise runde oder scharfkantige Wehrkrone). Bollrich [8] gibt für  $\mu_{\text{po}}$  Werte im Bereich zwischen 0,5 und 0,8 an. In Dekantierzentrifugen strömt die Suspension entlang des helixförmigen Schneckenkanals mit rechteckigem Querschnitt der Breite  $W_{\text{sc}}$  und Teichtiefe  $h_{\text{p}}$ . Zusätzlich wirken Zentrifugalkräfte. Angepasst auf diese Randbedingungen lautet die adaptierte Poleni Gleichung:

$$h_{\text{po}} = \left( \frac{3}{2} \frac{\dot{V}}{\mu_{\text{po}} \sqrt{2R_{\text{m}} \omega^2 W_{\text{sc}}}} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (5.25)$$

In dieser Gleichung ist  $R_{\text{m}}$  der mittlere Radius (Länge Drehachse bis mittlere Teichtiefe),  $\omega$  die Winkelgeschwindigkeit und  $W_{\text{sc}}$  die Gangbreite. Stahl [64] gibt an, dass bei den meist schmalen Überlaufwehren in Dekantierzentrifugen und unter Berücksichtigung des Zentrifugalfeldes die Werte aus der Literatur für den Überfallbeiwert nicht mehr sinnvoll sind. Die Ermittlung des Überfallbeiwerts muss empirisch für diese Bedingungen erfolgen. Im Rahmen dieser Arbeit erfolgt die Kalibrierung des Überfallbeiwerts anhand von aufgelösten CFD Simulationen des Schneckenkanals. Das Vorgehen ist im nächsten Kapitel beschrieben.

### 5.5.2. Untersuchungen zur Überströmungen mittels CFD-Simulationen

Die CFD Software OpenFOAM bietet die Möglichkeit mit dem Löser interFOAM Mehrphasensimulationen mittels der VOF-Methode für zwei inkompressible, isotherme Fluide durchzuführen. Dies erfüllt die Anforderungen zur Simulation der Überströmung des Wehres zur Kalibrierung des Überfallbeiwerts nach Poleni im Schneckenkanal von Dekantierzentrifugen. Die Suspensionsphase wird in den Dekanter eingeleitet und strömt Richtung Überlaufwehr, wo die Suspensionsphase das Wehr überströmt und den Dekanter verlässt. Zusätzlich ist oberhalb des Teiches Luft. Die vorgestellte Simulationsumgebung basiert auf der Diskretisierung des abgewickelten Schneckenkanals. Deswegen besteht die Geometrie der CFD Simulation aus eben diesem. Zwar stellt dies eine Vereinfachung dar, allerdings ist das Ziel dieser Simulation den Überfallbeiwert zu kalibrieren, um die Erhöhung des Teichs in das Simulationsmodell zu integrieren. Die verwendete Geometrie mit Einlass, Auslass und Abmessungen ist in Abbildung 5.21 schematisch dargestellt.

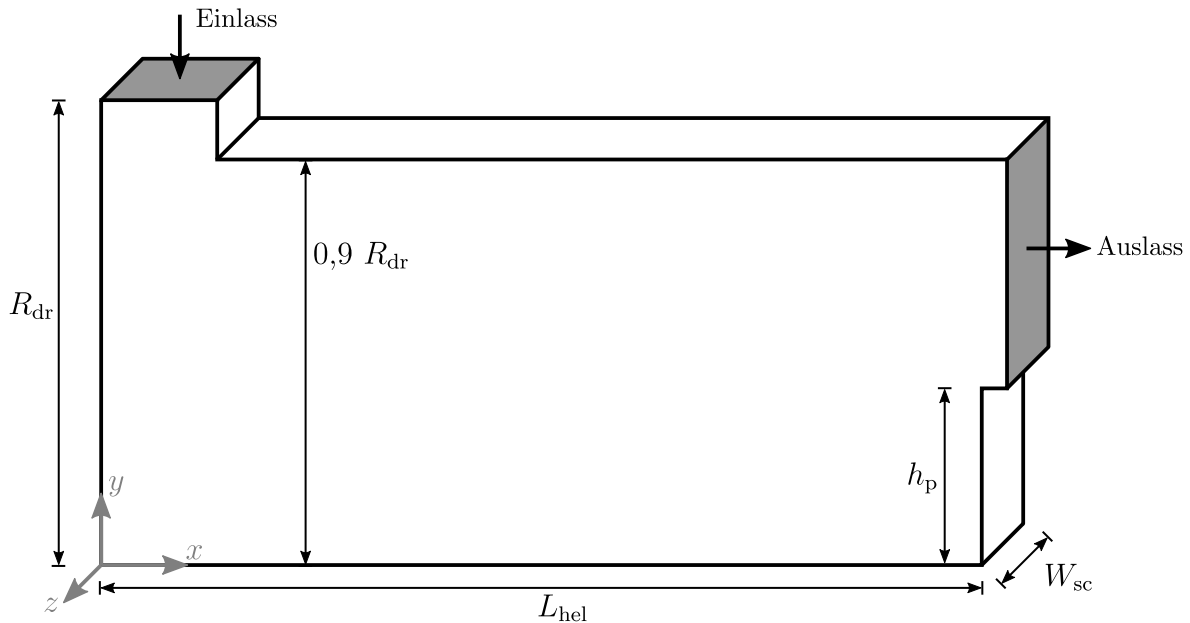


Abbildung 5.21.: Strömungsgeometrie für die Simulation der Überströmung im abgewickelten Schneckenkanal.

Der Einlass ist parallel zur Trommelwand und der Abstand entspricht dem Trommelradius  $R_{dr}$ . Die Vorbeschleunigung der Suspension erfolgt in Richtung der Teichoberfläche und bildet dadurch vereinfacht die Vorbeschleunigung der Füllverteilergeometrie in einer Dekantierzentrifuge ab. Die Flüssigkeit strömt in  $x$ -Richtung zum Wehr hin, überströmt die Wehrkante und verlässt das Rechengebiet über den Auslass. Dabei stellt sich die Überströmhöhe ein. Der zu erwartende Flüssigkeitsspiegel liegt tendenziell leicht über der Wehrhöhe. Um Wandeinflüsse auf die Flüssigkeitsoberfläche zu vermeiden ist die obere Wand in  $y$ -Richtung  $0,9R_{dr}$  von der Trommelwand entfernt. Das Zentrifugalfeld hat eine konstante Zentrifugalbeschleunigung  $a_C = R_m\omega^2$  in negative  $y$ -Richtung im gesamten Rechengebiet, die sich aus der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  und dem mittleren Radius im Teich  $R_m = R_{dr} - 0,5h_p$  berechnet. Aufgrund der Symmetrie des Kanals in  $z$ -Richtung wird die Simulation von dreidimensional auf zweidimensional bezüglich  $z$ -Richtung reduziert. Die Randbedingungen an den einzelnen Grenzflächen des Strömungsgebietes sind in Tabelle 5.3 gelistet.

Tabelle 5.3.: Randbedingungen der CFD Simulation zur Überströmung des Wehres.

Patch	Geschwindigkeit	Druck	Phasenanteil
Einlass	$u_{in}$	<i>zeroGradient</i>	1
Auslass	<i>zeroGradient</i>	0	<i>zeroGradient</i>
Wand	0	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>
Front- und Rückseite	<i>empty</i>	<i>empty</i>	<i>empty</i>

Die Geschwindigkeit am Einlass  $u_{in}$  entspricht dem eintretenden Volumenstrom bezogen auf die Fläche des Einlasses. Die Diskretisierung erfolgt mit *blockMesh* und hexaederförmigen Gitterzellen. Insgesamt ist die Geometrie in 12320 Gitterzellen aufgeteilt. Zwischen  $x = 0$  und  $x = L_{hel}$  erfolgt die Unterteilung in 410 Gitterzellen, zwischen  $y = 0$  und  $y = 0,9R_{dr}$  in 30 Gitterzellen. Aufgrund von vorgelagerten Diskretisierungsstudien ist sichergestellt, dass die Diskretisierung ausreichend ist. Die Turbulenz ist durch ein  $k-\omega_t$ -SST Modell abgebildet. Dies ist ein Zweigleichungsmodell, welches jeweils eine Gleichung für die turbulente kinetische Energie  $k$  und die spezifische Dissipationsrate  $\omega_t$  bereit stellt. Die beiden Phasen sind Wasser und Luft und nutzen die Stoffdaten aus der OpenFOAM Datenbank. Diese sind in Tabelle 5.4 gelistet.

Tabelle 5.4.: Stoffdaten der CFD-Simulation zur Modellierung der Überströmhöhe.

Parameter	Wert
kinematische Viskosität Wasser (20 °C)	$1 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
kinematische Viskosität Luft (20 °C)	$1,48 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
Dichte Wasser (20 °C)	$1000 \text{ kg m}^{-3}$
Dichte Luft (20 °C)	$1 \text{ kg m}^{-3}$
Oberflächenspannung Wasser/Luft (20 °C)	$0,07 \text{ kg s}^{-2}$

Zum Startzeitpunkt der Simulation ist der Teich mit ruhendem Wasser gefüllt. Nach Erreichen des stationären Zustandes in der Simulation wird die Überfallhöhe am Wehr ausgewertet. Wie bereits beschrieben, löst die VOF-Methode die Grenzfläche nicht exakt, sondern über Phasenanteile in Gitterzellen, auf. Daher sind in den nachfolgenden Abbildungen jeweils nach oben und unten eine Viertel Gitterzelle als Fehler aufgrund der Unschärfe der Phasengrenze für jeden Messpunkt angegeben. Die nachfolgenden Simulationen basieren exemplarisch auf der Schneckenkanalgeometrie der Industrie-Dekantierzentrifuge aus Kapitel 5.4. Die Maße sind

Tabelle 5.2 zu entnehmen. In Abbildung 5.22 ist die Überströmhöhe gegen den Volumenstrom für eine Drehzahl von  $n_{\text{rot}} = 2950$  rpm aufgetragen.

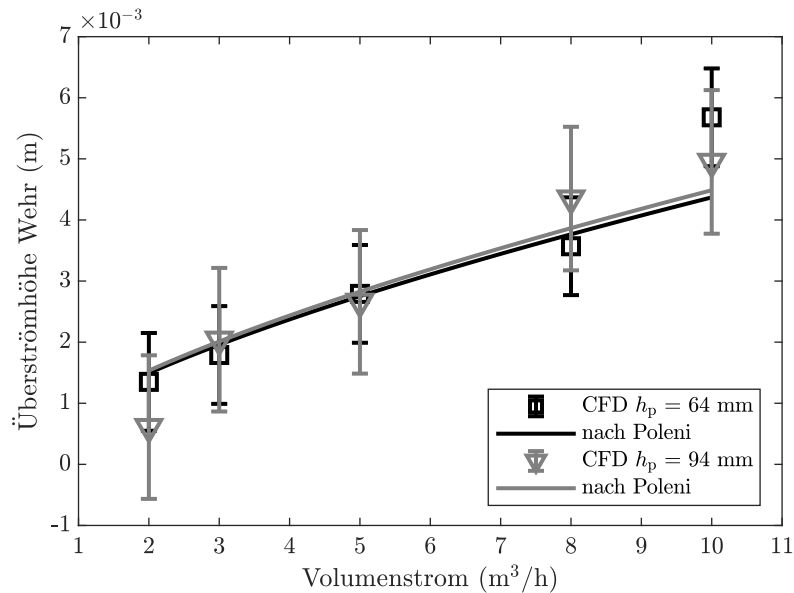


Abbildung 5.22.: Vergleich der Überströmhöhe aus Simulation und modifizierte Poleni Gleichung (siehe Gleichung 5.25) in Abhängigkeit des Volumenstroms.

Die aus der Strömungssimulation bestimmte Überströmhöhe nimmt mit steigendem Volumenstrom zu und liegt im Bereich zwischen 1 mm und 6 mm. Aufgrund des zunehmenden Volumenstroms muss mehr Flüssigkeit über die gleiche Wehrgeometrie überströmen und somit die Überfallhöhe ansteigen. Die Kalibrierung des Überfallbeiwerts erfolgt anhand dieser Ergebnisse auf  $\mu_{\text{po}} = 0,6$ . Die Abhängigkeit deckt sich mit der angepassten Formel nach Poleni (Gleichung 5.25), bei der  $h_{\text{Po}} \propto V_{\text{in}}^{2/3}$  ist. Die Teichtiefe zeigt für diese Parameterkonstellation einen vernachlässigbaren Einfluss, was ebenfalls nach Gleichung 5.25 zu erwarten ist. In Abbildung 5.23 ist die Überströmhöhe in Abhängigkeit der Drehzahl für einen konstanten Volumenstrom von  $\dot{V}_{\text{in}} = 3 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1}$  dargestellt.

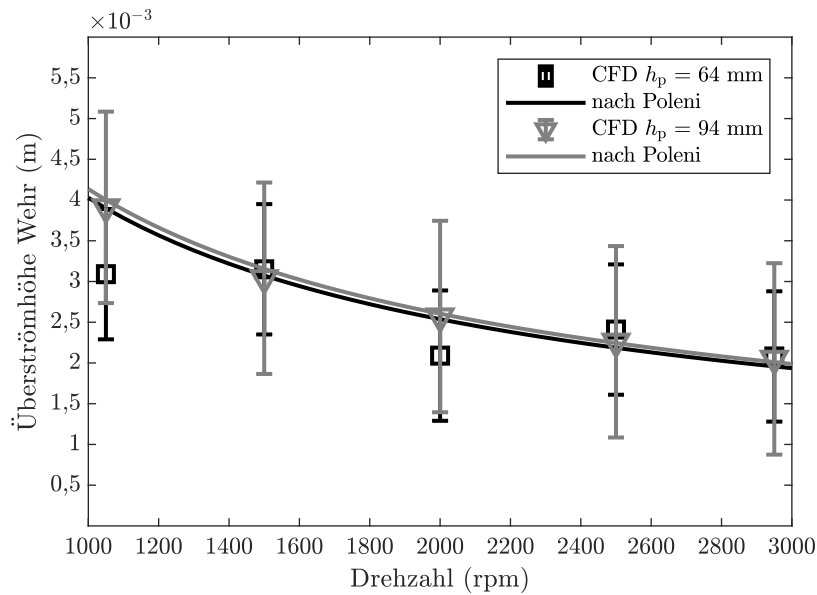


Abbildung 5.23.: Vergleich der Überströmhöhe aus Simulation und modifizierte Poleni Gleichung (siehe Gleichung 5.25) in Abhängigkeit der Drehzahl.

Die Abnahme der Überströmhöhe mit zunehmender Drehzahl begründet sich durch die zunehmenden Zentrifugalkräfte. Der Trend der Simulationsergebnisse entspricht hier ebenfalls der Abhängigkeit nach Poleni mit  $h_{Po} \propto n_{rot}^{-2/3}$  und die Poleni Gleichung mit  $\mu_{po} = 0,6$  stimmt sehr gut mit den CFD Ergebnissen überein. Stahl [64] gibt an, dass bei kleinen schnelllaufenden Dekantern die Größenordnung der Überströmhöhe bei wenigen Zehntel Millimeter und bei großen Langsamläufern mit entsprechenden Flüssigkeitsdurchsätzen bis zu 25 mm betragen. Dies deckt sich mit den zuvor beschriebenen Ergebnissen.

## 5.6. Modellierung Degritting

Degritting bezeichnet die Abtrennung von Überkorn, unerwünschten Partikeln (engl. grit), aus dem eigentlichen Produkt. Dies ist ein Qualitätsmerkmal für die Produktreinheit und unter anderem erforderlich, da in weiterführenden Prozessschritten das Überkorn die Apparate beschädigen kann. Die Überkornpartikel sind unterschiedlichen Ursprungs. Bei Mahlprozessen durchlaufen teilweise Partikel des Ausgangsmaterials die Mühle ohne ausreichend lange darin zu verweilen, was eine ungenügende Zerkleinerung zur Folge hat. Weiterhin können beispielsweise Mahlperlen den Ausgang der Mühle passieren. Ebenso andere Verunreinigungen wie Verschleißelemente der Apparate und Rohre (Gummidichtungen, etc.) gelangen durch

Abrasion in das Produkt. All diese unerwünschten Partikel sind abzutrennen. Die Partikelgrößenverteilungen der Produktsuspensionen liegen typischerweise im Bereich zwischen  $0,5\ \mu\text{m}$  und  $5\ \mu\text{m}$ . Wichtige Kenngrößen für Überkornpartikel ist die Anzahl an Partikeln  $x_{\text{de}} > 20\ \mu\text{m}$  und  $x_{\text{de}} > 45\ \mu\text{m}$ . Da diese in relativ geringer Konzentration vorkommen, ist die Anzahl in ppm (engl. parts per million) angegeben. Die Abtrennung des Überkorns erfolgt häufig mit Dekantierzentrifugen. Ziel ist es, möglichst viele Überkornpartikel abzutrennen, um eine definierte Akzeptanzgrenze zu erreichen und dabei möglichst wenig von dem eigentlich Produkt abzutrennen. In der Praxis findet zur Stabilisierung der Suspension eine Zudosierung von Dispergiermittel statt, um die Sedimentation des Wertprodukts zu behindern. Weiterhin ist der Feststoffgehalt am Zulauf der Zentrifuge relativ hoch eingestellt, um durch die höhere Suspensionsviskosität die Sedimentation des Wertprodukts zu reduzieren. Zusätzlich laufen die Degritting-Dekantierzentrifugen mit vergleichsweise geringen Drehzahlen, um die Zentrifugalkräfte vergleichsweise niedrig zu halten. Aus wirtschaftlicher Sicht ist ein möglichst großer Volumenstrom in die Zentrifuge zu leiten. Unter optimalen Bedingungen sedimentieren die Überkornpartikel, setzen sich an der Trommelwand ab und die Schnecke transportiert diese zum Kuchenauslass und aus dem Apparat. Die Überkornpartikel können prinzipiell in die vorgeschaltete Mühle zurückgeführt werden. Das überkornfreie Produkt verlässt als Zentrat die Zentrifuge. [64, 37, 72]

Stahl [64] beschreibt, dass die Feststoffpartikel aufgrund der Zonensedimentation bei diesen Anwendungen gemeinsam sedimentieren. Allerdings können sich unter gewissen Voraussetzungen die Überkornpartikel aus der Matrixsuspension lösen und sich schneller als die Partikel der Matrixsuspension absetzen. Des weiteren beschreibt er das Phänomen, dass die oberen Schichten der Suspension bereits frei von Überkorn sind. Somit müssen die Partikel nicht zwangsläufig bis zur Trommelwand sedimentieren, um als abgeschieden zu gelten. Daraus folgt der im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Modellierungsansatz zum Degritting, der im Folgenden beschrieben ist.

Das Überkorn liegt in sehr geringer Konzentration vor (typischerweise  $\nu_{\text{de,in}} < 1000\ \text{ppm}$  beziehungsweise  $w_{\text{de,in}} < 0,1\ \text{Ma.}\%$ ). Des Weiteren ist das Überkorn deutlich größer als die Partikel der Matrixsuspension. Daraus folgt die begründete Annahme, dass die Überkornpartikel wie Einzelkornpartikel nach Stokes [68] in der Matrixsuspension sedimentieren. Die Matrixsuspension bezeichnet eine kontinuierliche Phase mit der Suspensionsdichte  $\rho_{\text{sus}}$  und dynamischen Suspensionsviskosität  $\eta_{\text{sus}}$ . Der Abscheideprozess erfolgt entlang des helixförmigen Schneckenkanals und die Diskretisierung ist daher analog wie in Abschnitt 5.2 beschrieben.



Abbildung 5.24 veranschaulicht die Abscheidebedingung für die Überkornpartikel in einem Bilanzraum  $i$ .

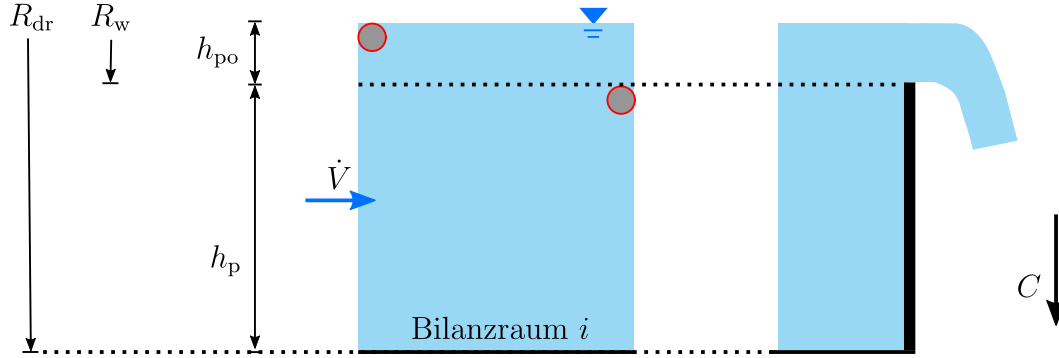


Abbildung 5.24.: Schematische Darstellung des Abscheidekriteriums eines Überkornpartikels.

Ein Überkornpartikel gilt als abgeschieden, wenn es aus der Schicht, welche aufgrund der Teicherhöhung entsteht, sedimentiert. Diese Bedingung ist aufgrund der zuvor beschriebenen Beobachtungen nach Stahl [64] formuliert. Unter Berücksichtigung der Verweilzeit (analog zur Herleitung in Gleichung 5.15) lautet der lokale Trenngrad für ein Überkornpartikel der Klasse  $k$  im Bilanzraum  $i$ :

$$T_{de,i,k}(x_{de}, t) = \frac{R_w}{R_w - h_{po}} \left( 1 - \exp \left( - \frac{u_{de,i,k} L_c W_{sc}}{\dot{V}_{i-1}} \right) \right). \quad (5.26)$$

Darin ist  $x_{de}$  der Partikeldurchmesser,  $R_w$  der Wehrradius,  $h_{po}$  die Überstromhöhe,  $L_c$  die Länge eines Bilanzraumes,  $W_{sc}$  die Schneckenkanalbreite,  $\dot{V}_{i-1}$  der Volumenstrom und  $u_{de,i,k}$  die Sinkgeschwindigkeit. Die Sedimentationsgeschwindigkeit eines Überkornpartikels  $u_{de,i,k}$  nach Stokes [68] berechnet sich nach folgender Gleichung:

$$u_{de,i,k} = \frac{(\rho_s - \rho_{sus,i}) x_{de,k}^2 R_m \omega^2}{\eta_{sus,i}}. \quad (5.27)$$

Die Partikel haben die Feststoffdichte  $\rho_s$  und sedimentieren in der Matrixflüssigkeit (Suspension) mit der Mischdichte (bzw. Suspensionsdichte)  $\rho_{sus,i}$  und der Viskosität  $\eta_{sus,i}$ . Die Suspensionsdichte berechnet sich volumenanteilmittelt nach

$$\rho_{sus,i} = \phi_{sus,i} \rho_s + (1 - \phi_{sus,i}) \rho_l. \quad (5.28)$$

Tseng und Chen [70] geben eine Modellgleichung zur Beschreibung des Einflusses der Suspensionsviskosität in Abhängigkeit des Feststoffvolumenanteils an:

$$\eta_{\text{sus},i} = \eta_l (1 - a_{\text{de}} \phi_{\text{sus},i} + b_{\text{de}})^{-n_{\text{de}}} . \quad (5.29)$$

$a_{\text{de}}$  und  $b_{\text{de}}$  sind empirische Parameter, welche durch Experimente zu bestimmen sind.  $n_{\text{de}}$  ist ein Exponent der nach Tseng und Chen [70] für eher geringfügig gescherte Suspensionen bei 4 liegt. Der Feststoffvolumenanteil  $\phi_{\text{in}}$  und die Suspensionsviskosität  $\eta_{\text{sus},\text{in}}$  am Einlass sind bekannt. Weiterhin entspricht die Suspensionsviskosität der von reiner Flüssigkeit  $\eta_{\text{sus},i} = \eta_l$ , wenn der Feststoffvolumenanteil  $\phi_{\text{sus},i} = 0$  ist. Unter diesen Randbedingungen ist  $b_{\text{de}} = 0$  und

$$a_{\text{de}} = \frac{1}{\phi_{\text{in}}} \left( 1 - \frac{\eta_{\text{sus},\text{in}}}{\eta_l} \right)^{-1/n_{\text{de}}} . \quad (5.30)$$

Allerdings ist das Ziel von Degritting so wenig wie möglich Feststoff aus der Suspension abzutrennen. Optimal ist, dass der Feststoffvolumenanteil am Zentratauslass gleich dem zugeführten Feststoffvolumenanteil ist. Somit ändert sich im praktischen Betrieb der Zentrifuge für diese Anwendung die Suspensionsviskosität  $\eta_{\text{sus},i}$  nur minimal und entspricht im gesamten Dekanter näherungsweise der Suspensionsviskosität am Einlass. Der Abscheidegrad aller Überkornpartikel im Bereich zwischen  $x_{\text{min}}$  und  $x_{\text{max}}$  innerhalb eines Bilanzraums  $E_{\text{de},i}(t)$  berechnet sich durch Integration des Produkts aus Trenngrad  $T_i(x_{\text{de}}, t)$  und Dichteverteilung der in den Bilanzraum eintretenden Partikelgrößenverteilung  $q_{3,i-1}(x_{\text{de}}, t)$ :

$$E_{\text{de},i}(t) = \int_{x_{\text{min}}}^{x_{\text{max}}} T_i(x_{\text{de}}, t) q_{3,i-1}(x_{\text{de}}, t) dx_{\text{de}} . \quad (5.31)$$

Dadurch lässt sich in jedem Bilanzraum lokal die Menge der jeweiligen Überkornfraktion  $k$  berechnen. Der Gesamttrenngrad  $T_{\text{de,ges},k}(x_{\text{de}}, t)$  der Fraktion  $k$  berechnet sich aus der Partikelgrößenverteilung am Zentratauslass  $q_{3,\text{de},\text{out}}$  im Vergleich zu den eintretenden Partikeln am Zulauf  $q_{3,\text{de},\text{in}}$ :

$$T_{\text{de,ges},k}(x_{\text{de},k}, t) = \frac{1 - \frac{q_{3,\text{de},\text{sep},k}}{q_{3,\text{de},\text{in},k}}}{1 - \frac{q_{3,\text{de},\text{sep},k}}{q_{3,\text{de},\text{out},k}}} . \quad (5.32)$$

Analog zu Gleichung 5.31 ist der Gesamtabseidegrad der Dekantierzentrifuge bezüglich Überkornpartikel  $E_{\text{de,ges}}(t)$  definiert als:

$$E_{\text{de,ges}}(t) = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} T_{\text{de,ges}} q_{3,\text{de,in}} dx_p. \quad (5.33)$$

Somit enthalten der Trenngrad und Abscheidegrad die Material-, Geometrie-, und Prozessparameter. Die dynamische Viskosität hat einen entscheidenden Einfluss auf das Separationsverhalten der Überkornpartikel (siehe Gleichung 5.27). Feindisperse Calciumcarbonat-Wasser Suspensionen zeichnen sich durch nicht-Newtonsches Fließverhalten [59, 27] aus. Die dynamische Viskosität ist eine Funktion der Scherrate. Daher ist es nötig eine mittlere Scherrate im helixförmigen Schneckenkanal zu definieren, um näherungsweise die Viskosität innerhalb der Zentrifuge berechnen zu können.

Pahl et al. [48] leitet die Schergeschwindigkeit  $\dot{\gamma}_{s,w}$  an der Wand einer laminaren Strömung eines Newton-Fluides im geschlossenen Rechteckkanal mit der Breite  $B$  und Höhe  $h$  her:

$$\dot{\gamma}_{s,w} = \frac{6\dot{V}}{h^2 B}. \quad (5.34)$$

Die Strömung fließt im helixförmigen Schneckenkanal mit der Breite  $W_{sc}$  und Höhe  $(h_p + h_{po})$ . Zusätzlich ist die Strömung zur Höhe hin offen. Analog zu vorheriger Herleitung unter Berücksichtigung der Randbedingung berechnet sich die Scherrate  $\dot{\gamma}_{s,he}$  im Schneckenkanal nach

$$\dot{\gamma}_{s,he} = \frac{24\dot{V}}{(h_p + h_{po})^2 W_{sc}}. \quad (5.35)$$

## 5.7. Validierung Degritting

Die Validierung der Degritting Modellierung erfolgt durch den Vergleich von Simulationsergebnissen mit experimentellen Daten aus der industriellen Praxis.

### 5.7.1. Experimentelles Vorgehen

Die verwendete Zentrifuge (Abmessungen siehe Tabelle A.2) ist in der Produktion zum Degritting im Einsatz. Sensoren messen den eingehenden Volumenstrom und die Temperatur der Suspension, sowie die Drehzahl inklusive Differenzdrehzahl der Zentrifuge. Die Bestimmung

des Feststoffmassenanteils erfolgt gravimetrisch anhand einer Probe aus dem Zulauf. Die Anzahl an Überkornpartikel  $x_{de} > 20 \mu\text{m}$  wird durch Siebung im Zulauf und Zentrat ermittelt. Das verwendete Produkt CC5 ist eine feindisperse Calciumcarbonat-Wasser Suspension, welche Dispergiermittel zur Stabilisierung enthält. Die Materialcharakterisierung erfolgt nach der in Kapitel 4 beschriebenen Vorgehensweise. Die Ergebnisse sind im Anhang (Abbildung A.4 und A.5) zusammengefasst. Die Messung der Viskositätsfunktion erfolgt mit einem MARS der Firma Thermo Fisher Scientific mittels Spannversuch<sup>1</sup>, das heißt einer Scherratenvorgabe. Die Scherraten liegen im Bereich zwischen  $0,5 \text{ s}^{-1}$  bis  $10 \text{ s}^{-1}$ . Somit sind die Stoffeigenschaften des Produktes ausreichend zur Simulation charakterisiert. In Tabelle 5.5 sind die Prozessparameter vier verschiedener Einstellungen gelistet.

Tabelle 5.5.: Prozessparameter der Validierungsversuche für Degritting.

Messung	Volumenstrom	Feststoffmassenanteil Zulauf	Drehzahl
1	$21,5 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1}$	75,6 Ma. %	1306 rpm
2	$18,9 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1}$	76,1 Ma. %	1192 rpm
3	$21,2 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1}$	75,7 Ma. %	1223 rpm
4	$19,3 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1}$	76,0 Ma. %	1094 rpm

### 5.7.2. Experimentelle Ergebnisse

In Abbildung 5.25 ist die gemessene Anzahl an Überkornpartikel ( $x_{de} > 20 \mu\text{m}$ ) für den Zulauf und das Zentrat und die Simulationsergebnisse aufgetragen.

---

<sup>1</sup>Als Messgeometrie kommt ein Aufbau nach Z 20 DIN zum Einsatz.

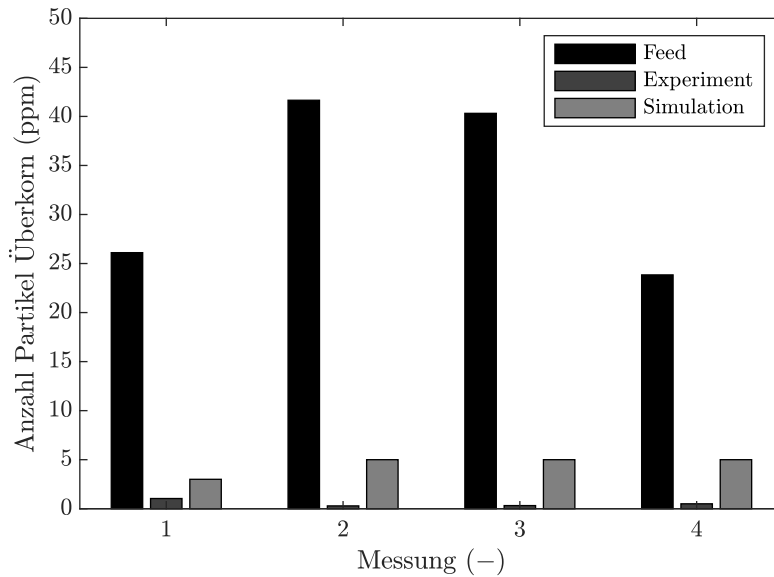


Abbildung 5.25.: Vergleich Simulation und Experiment: Abscheidung von Partikel mit einem Durchmesser  $x_{de} = 20 \mu\text{m}$ .

Die Konzentration an Überkornpartikel liegt für alle vier Messungen im Bereich zwischen 25 ppm und 45 ppm. Das Ziel für dieses Produkt ist die Reduktion auf kleiner 5 ppm, was die experimentellen Ergebnisse bestätigen. Die Simulation weist eine Anzahl zwischen 5 ppm und 10 ppm auf, was leicht über der Akzeptanzgrenze liegt. Allerdings liegt bei den Simulationsergebnissen in dieser Abbildung die Annahme zu Grunde, dass alle eintretenden Überkornpartikel  $20 \mu\text{m}$  groß sind und aus Calciumcarbonat bestehen. Dies stellt somit eine Worst Case Abschätzung dar. Die experimentellen Ergebnisse umfassen alle Partikel die größer  $20 \mu\text{m}$  sind, also auch durchaus Partikel größer  $45 \mu\text{m}$ . Deswegen ist in Abbildung 5.26 der Trenngrad für Überkornpartikel aus Calciumcarbonat im Bereich zwischen  $20 \mu\text{m}$  und  $45 \mu\text{m}$  exemplarisch für Messung 4 aufgetragen.

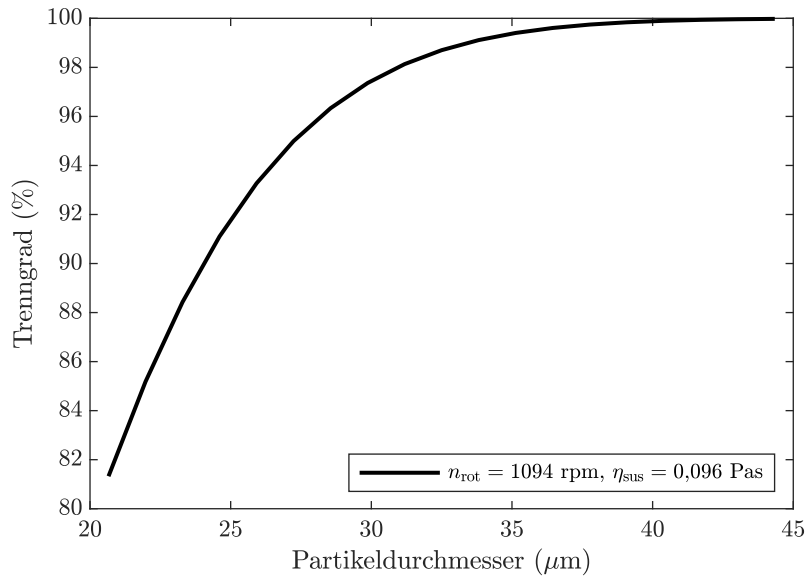


Abbildung 5.26.: Simulierter Trenngrad als Funktion des Partikeldurchmessers (Messung 4).

Der Trenngrad nimmt mit größer werdenden Partikeln zu und läuft asymptotisch gegen 100 %. Ab einem Durchmesser von  $x_{de} = 33 \mu\text{m}$  ist der Trenngrad größer 99 %. Ab diesem Wert ist davon auszugehen, dass alle größeren Partikel abgetrennt sind. Das bedeutet, dass die Simulation als Worst Case Szenario nur in einem beschränkten Maß die Realität wiedergibt. Folglich muss der charakteristische Bereich zwischen  $20 \mu\text{m}$  und  $45 \mu\text{m}$  Berücksichtigung finden, um detailliertere Erkenntnisse über das gesamte Abscheideverhalten zu erlangen. Unter der Annahme, dass die Überkornpartikel gleichverteilt im Bereich zwischen  $20 \mu\text{m}$  und  $45 \mu\text{m}$  vorliegen, lässt sich der Gesamtabscheidegrad dieser Partikel innerhalb des Apparates berechnen (siehe Gleichung 5.33). Die Ergebnisse, basierend auf dem Gesamtabscheidegrad analog zu Abbildung 5.25, sind in Abbildung 5.27 dargestellt.

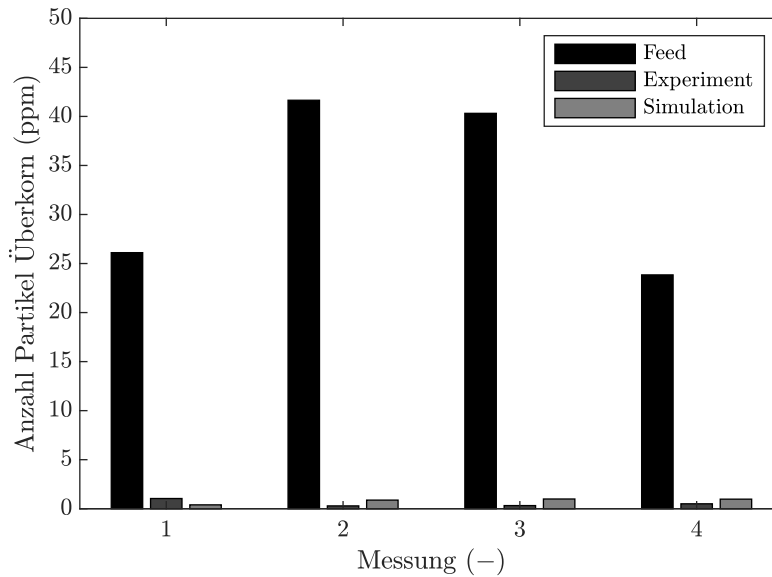


Abbildung 5.27.: Vergleich Simulation und Experiment: Abscheidung von Überkornpartikel unter der Annahme der Gleichverteilung von Partikel mit einem Durchmesser  $20 \mu\text{m} \leq x_{\text{de}} \leq 45 \mu\text{m}$ .

Bei allen vier Simulationsergebnissen ist die Anzahl der Überkornpartikel kleiner 2 ppm und somit innerhalb der Akzeptanzgrenze von 5 ppm. Dies deckt sich mit den experimentellen Beobachtungen. Das Modell zur Validierung beruht aktuell auf der Annahme, dass alle Partikel in der Simulation die Stoffeigenschaften von Calciumcarbonat aufweisen. Allerdings kann es vorkommen, dass andere Verunreinigungen wie beispielsweise Teile von verschlissenen Dichtungen, Mahlperlen aus einer vorgeschalteten Mühle oder Verunreinigungen anderer Minerale des abgebauten Gesteins sich als Überkornpartikel im Zulauf der Zentrifuge befinden. Diese variieren in der Dichte und ihren physiko-chemischen Eigenschaften im Vergleich zu Calciumcarbonat und weisen daher ein abweichendes Sedimentationsverhalten auf. Allerdings ist in der praktischen Anwendung häufig nur von Interesse, dass nahezu keine Partikel größer  $20 \mu\text{m}$  oder größer  $45 \mu\text{m}$  vorkommen und nicht welche Beschaffenheit diese aufweisen und aus welchem Material die Partikel bestehen. Zur Bestimmung des Materials müssten prinzipiell weitere Analysemethoden wie Elementaranalysen durchgeführt werden. Der Vorteil der Simulationsmethode ist, dass wichtige Größen lokal vorliegen, Parametervariationen mit wenig Aufwand möglich sind und zusätzliche Kenngrößen vorliegen. Zur Demonstration dieser Vorteile ist in Abbildung 5.28 der Trenngrad über dem Partikeldurchmesser für verschiedene Drehzahlen bei sonst konstanten Bedingungen verglichen mit Messung 4 aufgetragen.

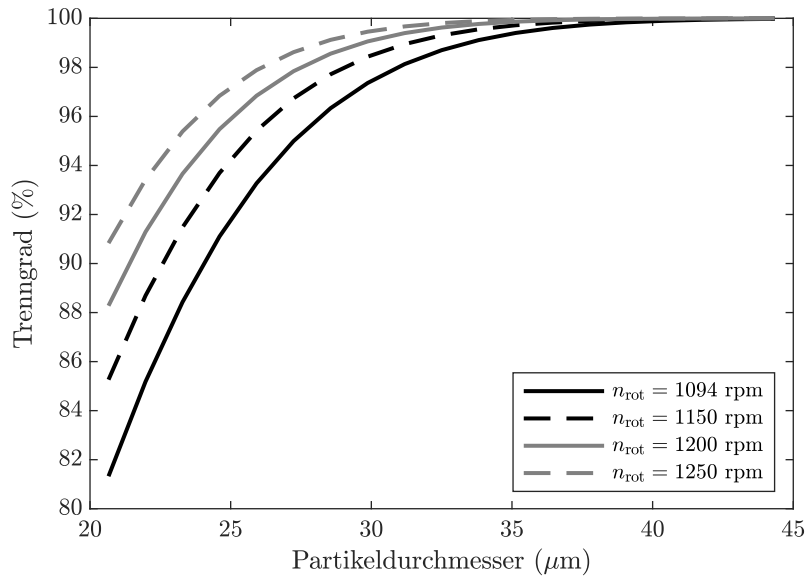


Abbildung 5.28.: Simulierter Trenngrad der Überkornpartikel in Abhängigkeit der Drehzahl.

Insgesamt verbessert sich der Trenngrad mit zunehmender Drehzahl der Zentrifuge für einen konstanten Partikeldurchmesser aufgrund der zunehmenden Zentrifugalbeschleunigung. Allerdings ist der Einfluss der Drehzahl bei Partikel größer  $33\ \mu\text{m}$  kleiner 1% und somit vernachlässigbar klein. Prinzipiell wäre ein Trenngrad von 100% für alle Überkornpartikel optimal. Allerdings ist eine Erhöhung der Drehzahl gleichzeitig mit einem größeren Verlust an Produkt der feindispersen Calciumcarbonat-Wasser Suspension und einem erhöhten Energieverbrauch bei sonst konstanten Bedingungen verbunden.

Die Menge an zugegebenem Dispergiermittel beeinflusst die Viskosität der Suspension. Ziel ist es, die Produktsuspension möglichst stabil zu halten und dennoch das Abtrennen der Überkornpartikel zu ermöglichen. Der Einfluss der Viskosität auf den Trenngrad der Überkornpartikel bei sonst konstanten Bedingungen wie bei Messung 4 ist in Abbildung 5.29 dargestellt.



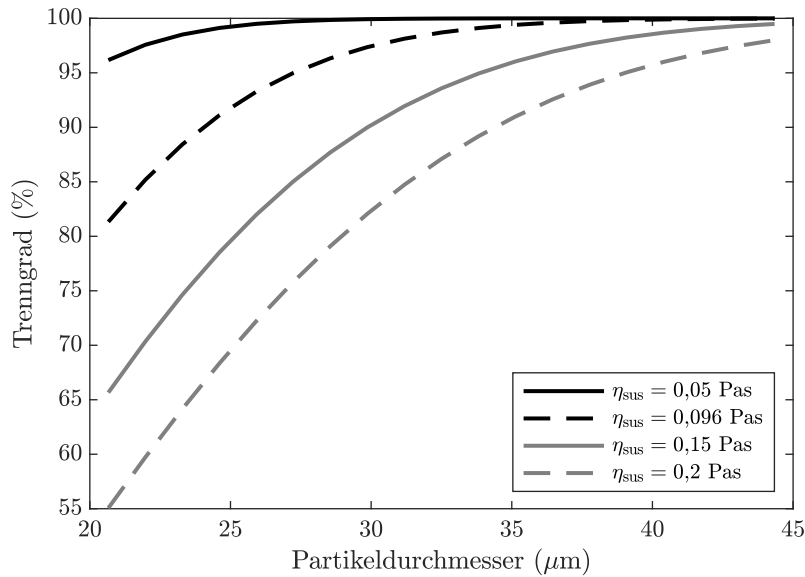


Abbildung 5.29.: Simulierter Trenngrad der Überkornpartikel in Abhängigkeit der Viskosität.

Die Viskosität hat im Bereich zwischen 0,05 Pas und 0,2 Pas einen entscheidenden Einfluss auf die Abscheidung der Überkornpartikel. Bei einer Viskosität von 0,05 Pas gelten mehr als 95 % der 20  $\mu\text{m}$  Partikel als abgetrennt, wohingegen der Trenngrad bei 0,2 Pas auf 55 % sinkt. Prinzipiell bedeutet eine Erhöhung der Viskosität eine Abnahme des Trenngrads; sowohl für das Wertprodukt als auch für die Überkornpartikel. Für die Prozessauslegung des Degritttings ist es entscheidend, das technische und betriebswirtschaftliche Optimum zwischen überkornfreiem Produkt und Wertproduktverlust zu bestimmen. Diese Studien bestätigen, dass die hier entwickelte Simulationsmethode detaillierte Einblicke in das Abscheideverhalten liefert. Üblicherweise sind in der Praxis nur die Kenngrößen der Partikel größer 20  $\mu\text{m}$  oder größer 45  $\mu\text{m}$  relevant. Die Simulationsmethode bietet daher die Vorteile zur Optimierung des Prozesses durch eine detaillierte Beschreibung des Separationsverhaltens der Partikel.



## 6. Grey-Box-Modellierung von Dekantierzentrifugen

Die Verwendung von künstlichen neuronalen Netzwerken (KNN) als nicht-parametrische Modelle zur Lösung ingenieurtechnischer Aufgaben hat in den letzten Jahren an Bedeutung zugenommen [71, 43, 11, 73]. Diese Modelle dienen als universelle Funktionsapproximatoren. Das heißt sie sind in der Lage, beliebig definierte Modellfunktionen abzubilden. Der Vorteil eines KNN-basierten Modells ist, dass es Modelle erstellt und verwendet ohne über a-priori Wissen der physikalischen Zusammenhänge des eigentlichen Prozesses zu verfügen. Der Aufbau eines KNN erfordert jedoch Wissen und Erfahrung darüber, wie ein solches Modell zu gestalten ist. Weiterhin ist die Qualität und Quantität der Daten, die für das Training zur Verfügung stehen, entscheidend. Wenn die Daten mit Rauschen behaftet sind, sinkt die Zuverlässigkeit des KNN. Andererseits sind oft relevante Parameter vorhanden und es existieren bereits mathematisch-physikalische Grundgleichungen, empirische Korrelationen oder numerische Ansätze als parametrische Modelle zur Untersuchung technischer Prozesse. Allerdings sind solche Modelle oft mit bestimmten Annahmen verbunden, die dazu führen, dass die daraus resultierenden Aussagen zum Teil erheblich von der Realität abweichen können. Die Grey-Box-Modellierung stellt einen Modellierungsansatz dar, der aus parametrischen und nicht-parametrischen Modellen besteht. Die Kombination der beiden Methoden hat mehrere Vorteile gegenüber den einzelnen Ansätzen. Das folgende Kapitel behandelt die Grey-Box-Modellierung am Beispiel von Dekantierzentrifugen.

### 6.1. Stand der Technik

Gonzalez-Fernandez et al. [22] geben einen Überblick über Veröffentlichungen zum Einsatz von künstlicher Intelligenz bei der Modellierung von Zentrifugen in der Olivenölindustrie. Funes et al. [18] stellen ein KNN vor, das Qualitätsparameter von Olivenöl während der Verarbeitung in einem Tellerseparator vorhersagt. Prozessparameter, wie die Temperatur

und der Zufluss von Olivenmost und Wasser sowie die Temperatur und der Durchfluss von Öl am Auslass, dienen als Eingangsparameter für das KNN. Nahinfrarotsensoren am Auslass messen spezifische Qualitätsparameter, welche die Ausgabeparameter des KNN darstellen. Das Feedforward-, Backpropagation-KNN dient dazu die Qualitätsparameter als eine Funktion der Prozessvariablen darzustellen, um das Maschinen- und Produktverhalten für die Prozessregelung und Optimierung vorherzusagen.

Jiménez et al. [30], [31] entwickeln ein KNN zur Optimierung eines Olivenölherstellungsprozesses in einer Dekantierzentrifuge. Als Input dienen Qualitätsparameter, wie der Frucht- und Fettgehalt, sowie die Feuchtigkeit, und Prozessparameter des Zulaufs, wie Temperatur, Volumenstrom und Verdünnungsverhältnis. Ziel ist es, den Fettgehalt des Oliventresters und die Ölfeuchte mit Hilfe eines KNN vorherzusagen. Die Autoren haben gezeigt, dass dieser Ansatz vernünftige Vorhersagen für diese spezielle Anwendung ermöglicht. Jedoch stellen die Autoren klar, dass der Einfluss weiterer wesentlicher Prozessparameter der Maschine, wie zum Beispiel die Teichtiefe, Drehzahl und Differenzdrehzahl, mit dem neuronalen Netzwerk auf der Grundlage des verwendeten Trainingsdatensatzes nicht bestimmbar ist. Dies erfordert entweder eine Erweiterung der Trainingsdaten um die nicht beschriebenen physikalischen Vorgänge zu berücksichtigen oder mathematische Modelle, welche die Korrelationen beschreiben.

In der Regel sind reine KNN-Modellierungsansätze für ihren Zweck sehr spezialisiert. Die Übertragung auf andere Anwendungen oder die Erweiterung von Variablen erfordern daher weitere Überlegungen und weiteres Training des Systems. Zusätzlich ist die Generalisierung solcher Ansätze oft eine große Herausforderung.

Thompson und Kramer [69] stellen eine Methode zur Entwicklung eines Grey-Box-Modells für chemische Prozesse vor. Sie verwenden ein einfaches Prozessmodell, vorher bekannte Randbedingungen und Gleichungen um ein neuronales Netzwerk zu erweitern. Das Prozessmodell unterstützt das KNN dabei, den Mangel und die geringe Qualität der Daten zu kompensieren, und erweitert so den Anwendungsbereich. Als eine beispielhafte Fallstudie beschreiben die Autoren die Synthese eines Grey-Box-Modells für eine Fed-Batch-Fermentation von Penicillin.

In vorangegangenen Kapiteln dieser Arbeit ist die Modellierung und Validierung eines dynamischen Prozessmodells für Dekantierzentrifugen beschrieben. Dieser mechanistische Ansatz berücksichtigt Sedimentationsverhalten, Sedimentkonsolidierung und Sedimenttransport. Zusätzlich ist das Modell mit Experimenten unter Verwendung verschiedener Calciumcarbonat-Wasser-Suspensionen und Dekantierzentrifugen vom Labor- bis zum Industriemaßstab validiert. Faust [14] hat in seiner Dissertation unter anderem den Einfluss der Wehrhöhe auf das Trennergebnis untersucht und dabei experimentell festgestellt, dass bei großen Teichtiefen

lokale Wirbel im Bereich des Wehres entstehen, welche das Trennergebnis beeinflussen. Daher ist die Annahme einer Pfropfenströmung in diesen Bereichen nicht mehr zutreffend. Dieser Effekt ist im bisherigen Modellierungsansatz nicht berücksichtigt. Eine Möglichkeit, dieses Verhalten zu charakterisieren, ist eine komplexe Strömungssimulation mittels CFD ähnlich wie bei Hammerich et al. [26] für Röhrenzentrifugen gezeigt. Eine alternative Möglichkeit ist die Verwendung eines hybriden Ansatzes wie der Grey-Box-Modellierung. Die bisher beschriebenen Forschungsarbeiten haben gezeigt, dass es durchaus möglich ist, technische Prozesse und insbesondere Zentrifugen mit KNN zu modellieren. Allerdings sind diese Fälle oft sehr spezifisch und typischerweise auf ihre speziellen Anwendungen beschränkt. Die Kombination des numerischen Prozessmodells mit einem KNN erweitert den Anwendungsbereich, hat eine physikalische Basis und lernt durch das Training physikalische Effekte, welche nicht in der Modellierung enthalten sind, zu berücksichtigen. Zu diesem Zweck kombiniert das hier vorgestellte Grey-Box-Modell das parametrische Modell mit einem KNN, dessen Training speziell mit experimentellen Daten erfolgt, um solche spezifischen Strömungseffekte auf das Abscheideverhalten bei relativ großen Teichtiefen zu berücksichtigen. Dies erweitert den Anwendungsbereich des numerischen Prozessmodells, ohne die Vorteile eines Prozessmodells zu verlieren.

## 6.2. Modellierung

Venkatasubramanian [71] beschreibt den Einsatz von KI-Techniken im Bereich des Chemieingenieurwesens und teilt die Anwendung in verschiedene Phasen ein. Er empfiehlt ausdrücklich hybride Modelle (hier als Grey-Box-Modelle bezeichnet) zu verwenden und dabei eher grundlegende KI-Techniken (KNN mit einer Hidden Layer) zu benutzen. Das hier verwendete Grey-Box-Modell ist ein stationäres Modell und hat eine parallele Struktur, die in Abbildung 6.1 schematisch dargestellt ist.<sup>1</sup>

---

<sup>1</sup>Die Ergebnisse sind teilweise in Menesklou et al. [45] durch den Autor selbst veröffentlicht.

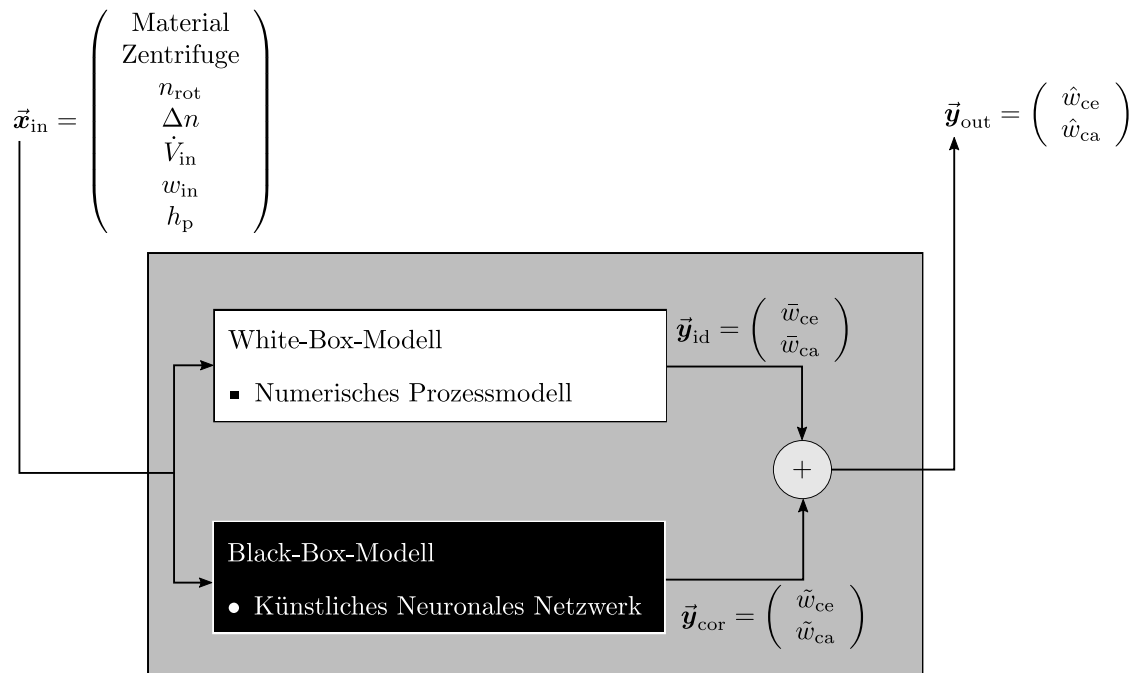


Abbildung 6.1.: Struktur des verwendeten Grey-Box-Modells mit Ein- und Ausgangsgrößen.

Die Eingangsgrößen sind die Drehzahl  $n_{\text{rot}}$ , die Differenzdrehzahl  $\Delta n$ , der Volumenstrom  $\dot{V}_{\text{in}}$ , der Feststoffmassenanteil am Zulauf  $w_{\text{in}}$  und die Teichtiefe  $h_{\text{p}}$ . Diese stellen typische Prozessgrößen dar, die für den Einsatz von Dekantierzentrifugen im eigentlichen Produktionsprozess wesentlich sind. Die Eingangsvariablen werden jeweils an das White- und Black-Box-Modell übergeben. Für das White-Box-Modell ist ein numerisches Prozessmodell, wie in Kapitel 5 beschrieben, implementiert. Damit stellt dieser Teil die physikalische Basis dar und dient als idealer Schätzer für den zu simulierenden Prozess. Der simulierte Ausgabevektor  $\vec{y}_{\text{id}}$  besteht aus dem Feststoffmassenanteil des Zentrats  $\bar{w}_{\text{ce}}$  und des Kuchens  $\bar{w}_{\text{ca}}$ . Darüber hinaus ist die Black-Box ein KNN, das lernt die Simulationsdaten entsprechend den Eingangsgrößen zu korrigieren, falls im trainierten Bereich die Abweichung zwischen den Simulationsergebnissen und den Trainingsdaten zu groß war. Die Addition des idealen Simulationsergebnisses  $\vec{y}_{\text{id}}$  mit dem Korrekturwert  $\vec{y}_{\text{cor}}$  aus dem neuronalen Netzwerk,

$$\vec{y}_{\text{out}} = \vec{y}_{\text{cor}} + \vec{y}_{\text{id}}, \quad (6.1)$$

führt zur Gesamtausgabe  $\vec{y}_{\text{out}}$ . In diesem Fall soll das Black-Box-Modell das White-Box-Modell im trainierten Bereich korrigieren. Daher erfolgt hier die Addition beider Ausgabekomponenten. Außerhalb des trainierten Bereichs verwendet das Grey-Box-Modell nur die Ergebnisse des White-Box-Modells. An dieser Stelle sei angemerkt, dass das Grey-Box-Modell prinzipiell auch in Bereichen einsetzbar ist, in denen das White-Box-Modell völlig versagen würde. Allerdings steht hier die Erweiterung des White-Box-Modells zur Berücksichtigung des Einflusses lokaler Strömungseffekte am Wehr auf die Abscheidung in praxisrelevanten Bereichen im Vordergrund. Eine Korrektur bedeutet jedoch nicht, dass die Simulationsergebnisse unzuverlässig sind und in jedem Fall zu korrigieren sind. Vorangegangene experimentelle Untersuchungen (siehe Kapitel 5.4) bestätigen, dass die Methode durchaus valide ist. Das Grey-Box-Modell dient dazu eine Erweiterung zu schaffen, um physikalisches Verhalten zu berücksichtigen, das bisher nicht implementiert ist oder um Fälle abzudecken, in denen keine physikalischen Gleichungen bekannt sind.

Das verwendete KNN ist ein Multilayer-Perceptron (eine Unterkategorie der Feedforward-Netzwerke) mit einer Eingabe- und Ausgabeschicht und einer versteckten Schicht, die als Aktivierungsfunktion eine Sigmoidfunktion verwendet. Die Bestimmung der optimalen Anzahl an Neuronen erfolgt über eine bayessche Optimierung ( $N_{N,\text{opt}} = 42$ ). Diese ist ein Optimierungsalgorithmus, um das Minimum einer Zielfunktion mit beschränkten Grenzen zu suchen. In diesem Fall die Anzahl an Neuronen eines regularisierten KNN, welches die minimalen Abweichungen zu den Trainingsdaten besitzt. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass die bayessche Optimierung nicht mit der Regularisierung im Rahmen des trainbr-Algorithmus (siehe Kapitel 3.2) zu verwechseln ist. Die bayessche Optimierung [61, 9] unterscheidet sich von anderen Optimierungsalgorithmen dadurch, dass sie ein probabilistisches Modell für die zu optimierende Zielfunktion konstruiert und dieses Modell dann nutzt, um Entscheidungen darüber zu treffen, an welcher Stelle die Funktion als nächstes auszuwerten ist. Die Idee besteht darin, alle verfügbaren Informationen aus früheren Bewertungen der Zielfunktion zu nutzen und sich nicht nur auf lokale Gradienten zu verlassen. Dies führt zu einem Verfahren, mit welchem das Minimum schwieriger nicht-konvexer Funktionen mit relativ wenigen Auswertungen bestimmbar ist. Allerdings benötigt dies zusätzliche Berechnungszeit zur Bestimmung des nächsten Auswertungspunktes im Algorithmus. Wenn die Auswertung der Zielfunktion aufwendig ist, beispielsweise wenn wie hier ein Algorithmus für maschinelles Lernen mit einer definierten Anzahl an Neuronen für die Auswertung zu trainieren ist, dann bietet sich speziell dieser Algorithmus an, um insgesamt schneller die optimale Anzahl an Neuronen zu finden, als bei herkömmlichen Verfahren.

Der nachfolgende Abschnitt diskutiert die Variation der Anzahl der Neuronen zwischen 3 und 50. Das trainierte Modell kann prinzipiell die Daten unter- und überanpassen (Under- und Overfitting), da keine physikalische Gleichung als Grundlage gegeben ist, welche die prinzipiellen Eigenschaften und Trends der Daten bestimmt. Underfitting bedeutet, dass das Modell den Trend der Daten nicht adäquat beschreibt. Overfitting bedeutet, dass das Modell fast alle Abhängigkeiten erfasst, einschließlich Messungenauigkeiten, was keine sinnvolle Interpretation der Daten darstellt. Daher kommt der trainbr-Algorithmus zum Einsatz, um das neuronale Netzwerk zu trainieren. Diese Technik beinhaltet eine bayessche Regularisierung im Rahmen des Levenberg-Marquardt-Algorithmus [24]. Dieser Algorithmus ist speziell dafür entwickelt, um gute Eigenschaften zur Generalisierung von Modellen zu besitzen [17, 41] und für limitierte Trainingsdaten praktikabel zu sein. (siehe Kapitel 3.2)

Aufgrund von Toleranzen der Analytik, der Messgeräte und der Probenahme enthalten die experimentellen Daten einen systematischen Fehler. Ebenso enthalten die Simulationen eine Art Vertrauensintervall, das die Genauigkeit durch Annahmen bei der Modellierung beeinflusst. Je mehr Annahmen ein Modell enthält, desto weniger akkurat ist es möglicherweise. Daher ist ein sogenanntes Modellierungsintervall für die Abweichung zwischen Simulation und Experiment definiert, welches Abbildung 6.2 veranschaulicht.

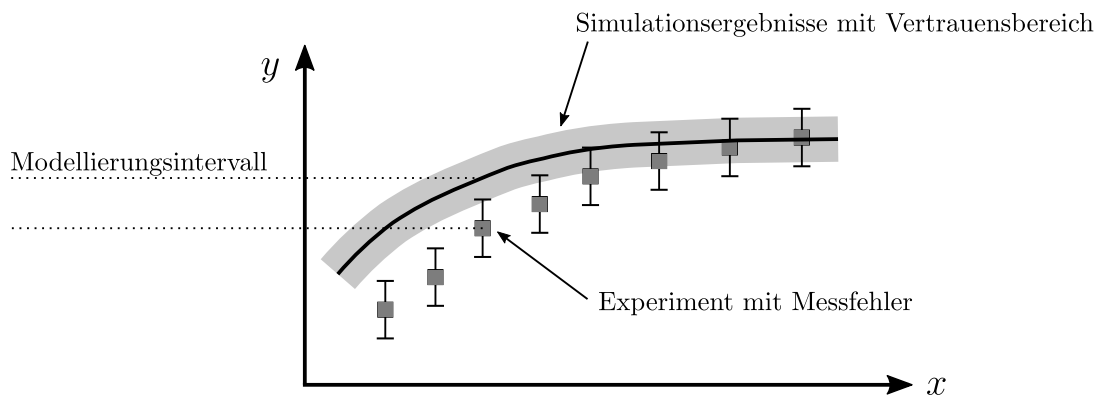


Abbildung 6.2.: Definition des Modellierungsintervalls zwischen Simulations- und Trainingsdaten bei der Grey-Box-Modellierung.

Wenn die Abweichung innerhalb dieses Modellierungsintervalls liegt, berücksichtigt das neuronale Netzwerk diese Abweichung nicht. Dadurch ist die Empfindlichkeit für Under- und Overfitting zusätzlich reduziert. Das Modellierungsintervall ist  $\pm 2 \text{ Ma.}\%$  absolut gesehen für die Abweichung vom Feststoffmassenanteil im Kuchen und  $\pm 1 \text{ Ma.}\%$  absolut gesehen für das Zentrat. Diese Modellierungsintervalle entsprechen den experimentell ermittelten



Abweichungen aufgrund der Probenahme und Reproduzierbarkeit, welche in Kapitel 5.3.1 und 5.4.1 beschrieben sind. Eine Variation des Modellierungsintervalls ist später im Abschnitt Ergebnisse dargestellt und diskutiert. Tabelle 6.1 listet den Bereich und die Größenordnung der Eingangsgrößen mit Einheiten auf.

Tabelle 6.1.: Wertebereich und Größenordnung des verwendeten Datensatzes.

Variable	Wertebereich	Größenordnung
Drehzahl	1000 rpm bis 3000 rpm	$10^3$
Differenzdrehzahl	15 rpm bis 36 rpm	$10^1$
Volumenstrom Feed	$500 \text{ l h}^{-1}$ bis $3000 \text{ l h}^{-1}$	$10^2$ to $10^3$
Feststoffmassenanteil Feed	20 Ma.% bis 30 Ma.%	$10^1$
Teichtiefe	0,054 m bis 0,094 m	$10^{-2}$
Feststoffmassengehalt Zentrat	0 Ma.% bis 30 Ma.%	$10^0$ to $10^1$
Feststoffmassengehalt Kuchen	50 Ma.% bis 75 Ma.%	$10^1$

Für das Training, das bedeutet die Gewichtung der einzelnen Knoten, ist es vorteilhaft, dass alle Daten in der gleichen Größenordnung vorliegen. Deshalb sind die dimensionsbehafteten Daten auf den entsprechenden Maximalwert normiert. Als Ergebnis liegen die Eingabegrößen immer zwischen Null und Eins vor. Der Korrekturparameter  $\vec{y}_{\text{cor}}$  hat die Einheit Ma.% und kann somit prinzipiell zwischen 0 Ma.% und 100 Ma.% variieren. Die Variable, die nachfolgend als relativer Korrekturparameter bezeichnet wird, ist der Korrekturparameter  $\vec{y}_{\text{cor}}$  bezogen auf 100 Ma.%.

In diesem Fall besteht der Datensatz aus 62 einzelnen Datenpunkten. Jeder Datenpunkt repräsentiert eine Parameterkonstellation zwischen Ein- und Ausgangsgröße. Zusätzlich sind die einzelnen Datenpunkte repräsentativ und informativ. Das heißt, die Datenpunkte sind so bestimmt, dass aussagekräftige Datenpunkte den gewünschten Anwendungsbereich abdecken. In diesem Fall ist die Anzahl der Datenpunkte für den typischen Einsatz von neuronalen Netzwerken gering. Die Messung der Datenpunkte ist allerdings mit einem erheblichen experimentellen und zeitlichen Aufwand verbunden. Daher sind Messdaten für Parametervariationen, wie in diesem Fall, nur in begrenztem Umfang aus der industriellen Praxis verfügbar. Die limitierte Verfügbarkeit von Daten ist nach Venkatasubramanian [71] typisch für Anwendungen im Bereich Chemieingenieurwesen. Die Flexibilität von neuronalen Netzwerken ist jedoch ein großer Vorteil, weshalb die Methodik hier Anwendung findet. Das neuronale Netzwerk soll ein physikalisch basiertes White-Box-Modell als Black-Box-Modell

im Konzept der Grey-Box-Modellierung unterstützen. Der Datensatz lässt sich außerdem leicht um zusätzliche Datenpunkte erweitern und das KNN neu trainieren. Dadurch ist es möglich den Anwendungsbereich flexibel zu erweitern. Typischerweise erfolgt die Einteilung der Daten für neuronale Netzwerke in Trainings-, Test- und Validierungsdaten, um die richtige Anzahl der Neuronen zu ermitteln und Under- oder Overfitting zu vermeiden. In diesem Fall sind 50 Datenpunkte (80%) zum Trainieren, sechs Datenpunkte (10%) zum Testen und sechs Datenpunkte (10%) zur Validierung in Verwendung. Das Ziel ist es, dass das neuronale Netzwerk in der Lage ist, die verwendeten Daten zu reproduzieren.

### 6.3. Ergebnisse

Dieser Abschnitt beschreibt die Einstellungen des neuronalen Netzwerkes und die Validierung der Trainingsdaten. Die Abbildungen 6.3 und 6.4 basieren auf einem neuronalen Netzwerk mit 42 Neuronen. Der Einfluss der Anzahl der Neuronen ist später diskutiert (siehe Abbildung 6.5). In Abbildung 6.3 ist der Feststoffmassenanteil des Kuchens gegen die Drehzahl für eine konstante Teichtiefe  $h_p = 64$  mm, konstanten Volumenstrom am Zulauf  $\dot{V}_{in} = 2000$  l h<sup>-1</sup> und Feststoffmassenanteil am Zulauf  $w_{in} = 30$  Ma.% aufgetragen.

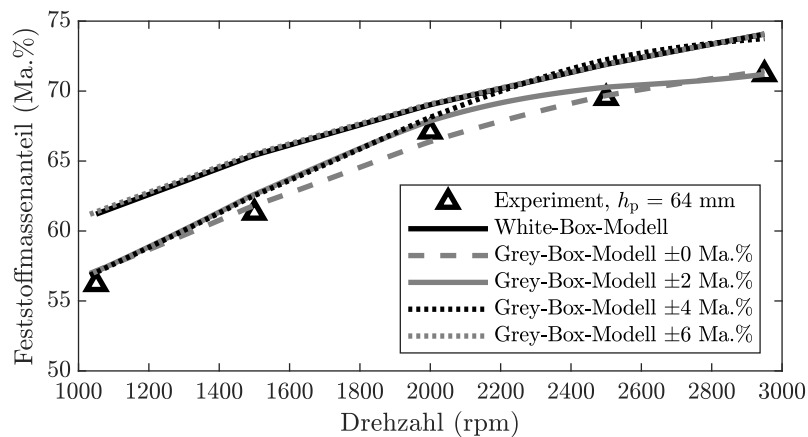


Abbildung 6.3.: Feststoffmassenanteil des Kuchens für verschiedene Drehzahlen und Variation des Modellierungsintervalls bei einem konstanten Volumenstrom von  $\dot{V}_{in} = 2000$  l h<sup>-1</sup> für CC1.

Das Modellierungsintervall variiert zwischen 0 Ma.% und  $\pm 6$  Ma.%. Wie bereits beschrieben, berücksichtigt das KNN Abweichungen zwischen Simulation und Experiment, wenn diese größer als das Modellierungsintervall sind. Der Ausgabewert beim Kuchenaustrag stellt einen

Mittelwert über die gesamte Sedimenthöhe dar. Vorversuche ergaben ein Modellierungsintervall von  $\pm 2$  Ma.%. Das bedeutet, dass der experimentelle Teil der Trainingsdaten für das neuronale Netzwerk mit dieser Genauigkeit messbar ist. Ein Modellierungsintervall von 0 Ma.% bedeutet, dass die Daten perfekt und ohne Fehler messbar sind, was nicht realistisch und daher nicht angemessen ist. Obwohl in diesem Fall das Grey-Box-Modell mit einem Modellierungsintervall von 0 Ma.% die Ergebnisse am besten beschreiben würde. Das neuronale Netzwerk modelliert in diesem Fall alle Messungenauigkeiten, was nicht zielführend ist. Das Gegenteil zeigt sich für ein Modellierungsintervall von  $\pm 6$  Ma.% oder noch höher, was bedeutet, dass existierende Abweichungen zwischen Simulation und Experiment bereits von der Modellierung ausgeschlossen sind. Abbildung 6.4 stellt den Feststoffmassenanteil des Zentrats als Funktion des Volumenstroms am Einlass für eine konstante Drehzahl von  $n_{\text{rot}} = 2950$  rpm dar. Das Modellierungsintervall variiert zwischen 0 Ma.% und  $\pm 3$  Ma.%.

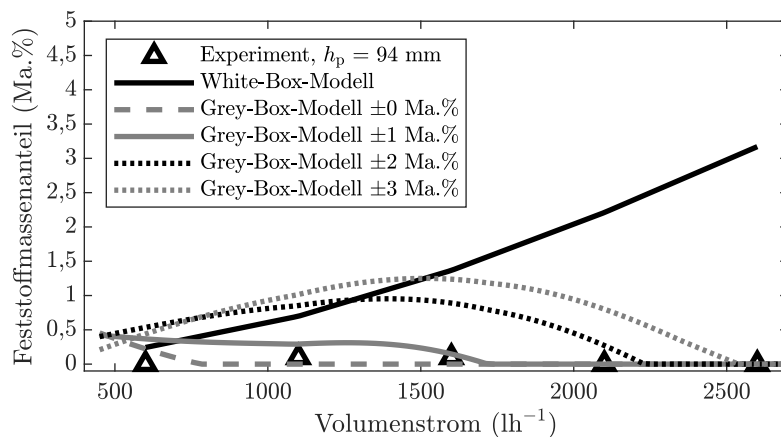


Abbildung 6.4.: Feststoffmassenanteil des Zentrats für verschiedene Volumenströme und Variation des Modellierungsintervalls bei einer konstanten Drehzahl von  $n_{\text{rot}} = 2950$  rpm für CC2.

Die Probenahme für eine repräsentative Probe ist beim Zentrat einfacher als beim Kuchen, da das Zentrat typischerweise flüssiger und homogener verteilt ist. Daher ist das Modellierungsintervall für das Zentrat kleiner und auf  $\pm 1$  Ma.% festgelegt. Wie bereits erwähnt, ist ein Modellierungsintervall von 0 Ma.% nicht angemessen, weil die experimentellen Trainingsdaten nicht mit dieser Genauigkeit bestimmbar sind. Alle Ungenauigkeiten würden modelliert. Es gibt jedoch keine allgemeine Regel oder Methodik zur Berechnung des Modellierungsintervalls. Es ist eine Kombination aus dem experimentellen Fehler, der bestimmbar ist, und der Qualität der Simulationen, die im Detail schwer zu quantifizieren ist. Dabei geht es darum, wie sehr

die bei der Modellierung getroffenen Vereinfachungen und Annahmen die Genauigkeit des Simulationsergebnisses beeinflussen.

Die Analyse einer Variation der Anzahl der Neuronen in der Hidden Layer des neuronalen Netzwerkes ist in Abbildung 6.5 dargestellt. Der relative Korrekturparameter für den Feststoffmassenanteil des Zentrats ist über der relativen Drehzahl dargestellt.

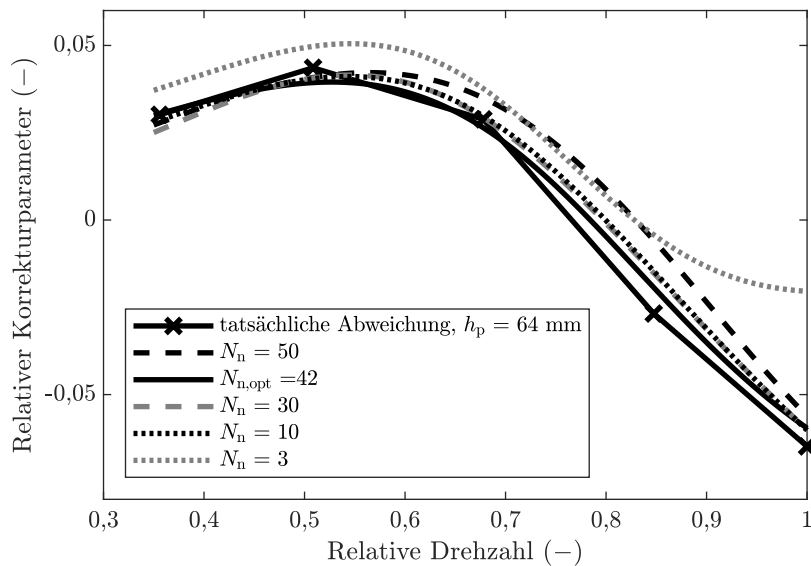


Abbildung 6.5.: Variation der Anzahl an Neuronen für den relativen Korrekturparameter des Zentrats bei einem konstanten Volumenstrom von  $\dot{V}_{in} = 2000 \text{ l h}^{-1}$  für das Produkt CC1.

Hier sind die experimentell ermittelten, tatsächlichen Abweichungen mit dem trainierten neuronalen Netzwerk verglichen. Diese Auswahl stellt nur einen Teil der gesamten Datenmenge dar. Dennoch lässt sich beispielhaft das prinzipielle Verhalten dieses KNN darlegen. Alle neuronalen Netzwerke mit zehn oder mehr Neuronen sind in der Lage die Abweichung in der Tendenz zu modellieren. In bestimmten Abschnitten sind jedoch Unterschiede in der Genauigkeit zu erkennen. Zwischen relativen Drehzahlen von  $n_{rot,r} = 0,8$  und  $n_{rot,r} = 1,0$  weicht der Graph für  $N_n = 3$  deutlich von den experimentell ermittelten Daten ab, welche die tatsächliche Abweichungen darstellen. Für dieses Netzwerk ist der Trend in diesem Abschnitt unzureichend wiedergegeben. Dies deutet auf ein Underfitting für  $N_n = 3$  hin. Typischerweise ist  $N_n = 3$  ein extrem niedriger Wert für die Anzahl der Neuronen. Alle anderen hier gezeigten neuronalen Netzwerke bilden die Trainingsdaten sehr gut ab. Außerdem zeigen die Kurven kein Overfitting. Dies ist auf den speziell für diesen Zweck entwickelten trainbr-

Algorithmus zurückzuführen, bei dem die Anzahl der Neuronen in einem weiten Bereich nur einen geringen Einfluss auf die Qualität und das Overfitting des neuronalen Netzwerkes hat. Folglich ist das Modell flexibler in der Anwendung, wenn beispielsweise zusätzliche Daten zur Verfügung stehen und das neuronale Netzwerk neu zu trainieren ist. Dies ist ein großer Vorteil bei technischen, praxisnahen Anwendungen. Durch die Verwendung der bayessche Optimierung mit neuronalen Netzwerken [61] ist die optimale Anzahl der Neuronen durch die Optimierung automatisch ermittelbar. Dieser Optimierungsalgorithmus vergleicht den RMSE aller Netzwerke und wählt dasjenige mit dem minimalen RMSE aus.

Der vorherige Abschnitt bestätigt, dass der regulierte Trainingsalgorithmus trainbr sehr gut geeignet ist, um Overfitting zu vermeiden. Um dies zu verdeutlichen ist in Abbildung 6.6 der gleiche Ausschnitt wie in Abbildung 6.5 aufgetragen. Allerdings erfolgte hier das Training des neuronalen Netzes auf Basis des trainlm-Algorithmus.

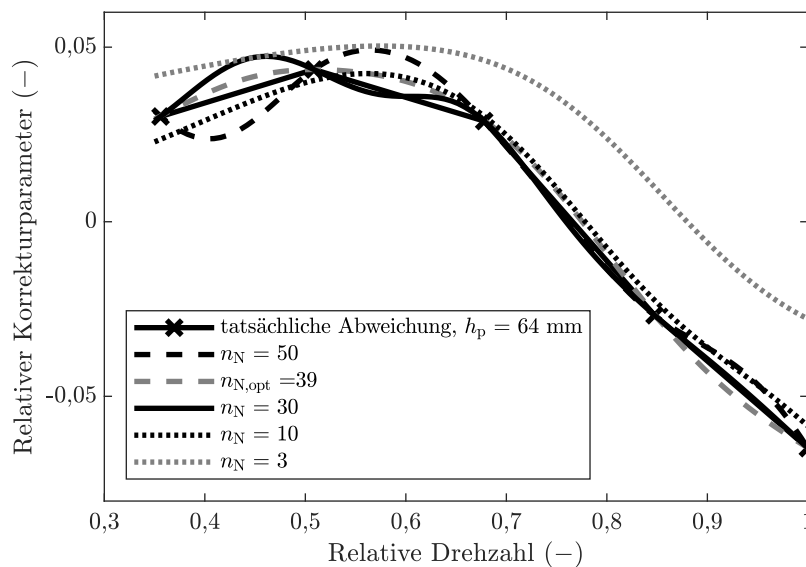


Abbildung 6.6.: Variation der Anzahl an Neuronen für den relativen Korrekturparameter des Zentrats bei einem konstanten Volumenstrom von  $\dot{V}_{\text{in}} = 2000 \text{ l h}^{-1}$  für das Produkt CC1 unter Verwendung des nicht regulierten trainlm-Algorithmus.

Hier weist das Netzwerk mit  $N_n = 3$  deutlich Underfitting in diesem Bereich auf. Zwar zeigt es hier den prinzipiellen Trend der Daten, allerdings sind die Abweichungen nicht korrekt modelliert und somit nicht verwendbar. Die Netzwerke für  $N_n = 10$ ,  $N_n = 30$ ,  $N_n = 39$  und  $N_n = 50$  modellieren die Abweichungen in diesem Bereich sehr gut. Dies gilt aber nur für die zu modellierenden Abweichungen. Die neuronalen Netzwerke mit  $N_n = 30$ ,  $N_n = 39$  und

$N_n = 50$  Neuronen zeigen Overfitting im Bereich zwischen  $n_{\text{rot,r}} = 0,3$  und  $n_{\text{rot,r}} = 0,7$ . Die Interpolation zwischen den Werten weisen ein unphysikalisches Verhalten auf und sind somit nicht verwendbar. Der Vergleich der Trainingsalgorithmen bestätigt, dass der regularisierte Trainingsalgorithmus trainiert sich sehr gut für den Einsatz in der Grey-Box-Modellierung von technischen Systemen eignet.

Basierend auf diesen Ergebnissen erfolgt die Validierung mit  $N_{n,\text{opt}} = 42$  und einem Modellierungsintervall von  $\pm 1 \text{ Ma.}\%$  für das Zentrat und  $\pm 2 \text{ Ma.}\%$  für den Kuchen. Im Folgenden ist die relative Ausgabe des Black-Box-Modells in den oberen Graphen (a) dargestellt. Die absolute Ausgabe des Black-Box-Modells ist die Differenz zwischen dem White- und Grey-Box-Modell und ist daher direkt aus den unteren Graphen (b) ableitbar.

In Abbildung 6.7a ist der relative Korrekturparameter über der relativen Rotationsgeschwindigkeit für den Feststoffmassenanteil des Kuchens aufgetragen. Auf dieser Basis erfolgt die Anpassung der Simulation des White-Box-Modells und ergibt somit das Grey-Box-Modell. In Abbildung 6.7b ist das entsprechende Ergebnis zwischen dem experimentellen Wert, dem Ergebnis des reinen White-Box-Modells und dem Grey-Box-Modells verglichen.

Die Abweichungsfunktion zeigt, dass das neuronale Netzwerk die tatsächliche Abweichung für diese Kombination von Parametern modelliert. Für eine Teichtiefe von  $h_p = 54 \text{ mm}$  liegen die Abweichungen im Bereich des Modellierungsintervalls von  $\pm 2 \text{ Ma.}\%$  und sind daher nicht modelliert. Somit sind die Ergebnisse des White- und Grey-Box-Modells für eine Teichtiefe von  $h_p = 54 \text{ mm}$  in Abbildung 6.7b ähnlich. Im Fall einer Teichtiefe von  $h_p = 64 \text{ mm}$  gibt es kleine Abweichungen zwischen White-Box-Modell und experimentellen Daten, die das Modellierungsintervall überschreiten. Mit der Abweichungsfunktion beschreibt das neuronale Netzwerk diese Diskrepanzen, um das White-Box-Modell zu korrigieren. Infolgedessen unterscheiden sich die Ausgabewerte des Grey-Box-Modells und des White-Box-Modells in Abbildung 6.7b. Jetzt stellt das Grey-Box-Modell die experimentellen Daten besser dar als das White-Box-Modell. Die Festlegung des Modellierungsintervalls findet jedoch durch den Benutzer statt und hängt somit von dessen Präferenz ab. Der Messfehler der Experimente ist in diesem Fall relativ einfach zu bestimmen, aber es ist schwierig, die Genauigkeit der Simulation zu bewerten.

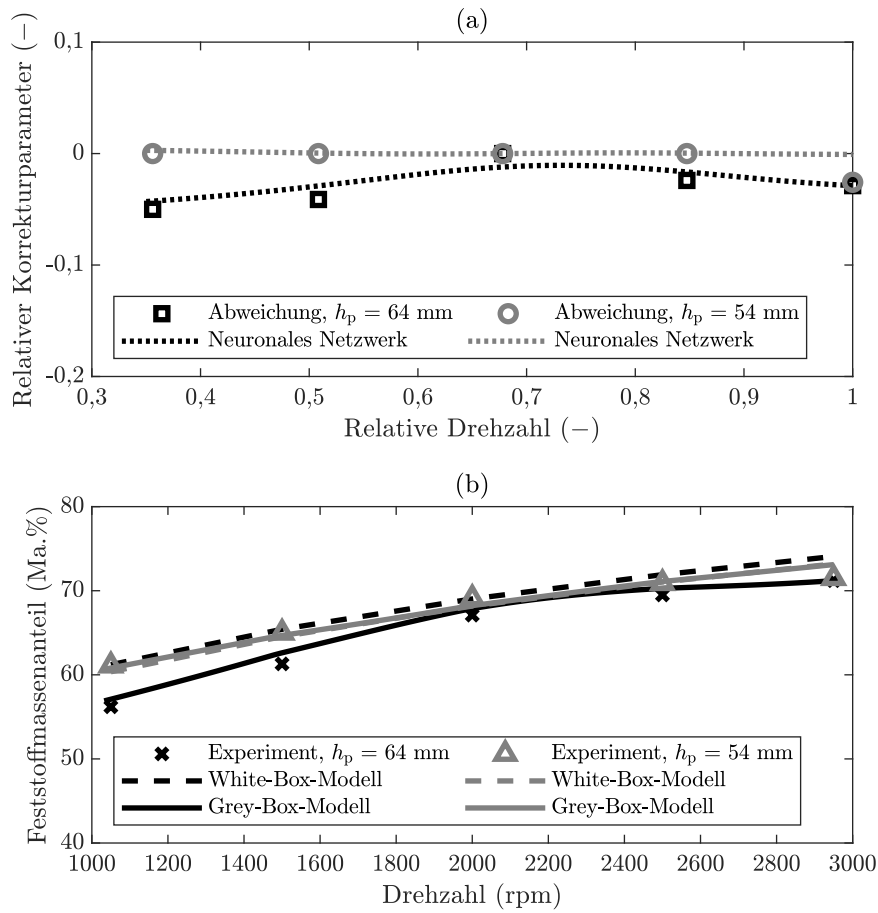


Abbildung 6.7.: Feststoffmassenanteil des Kuchens bei einem konstanten Volumenstrom von  $\dot{V}_{in} = 2000 \text{ l h}^{-1}$  für das Produkt CC1: (a) relativer Output des Black-Box-Modells, (b) Vergleich der Ergebnisse aus Experiment, White- und Grey-Box-Modell.

Für die gleichen Parameter wie in Abbildung 6.7 ist der Feststoffmassenanteil im Zentrat in Abbildung 6.8 dargestellt.

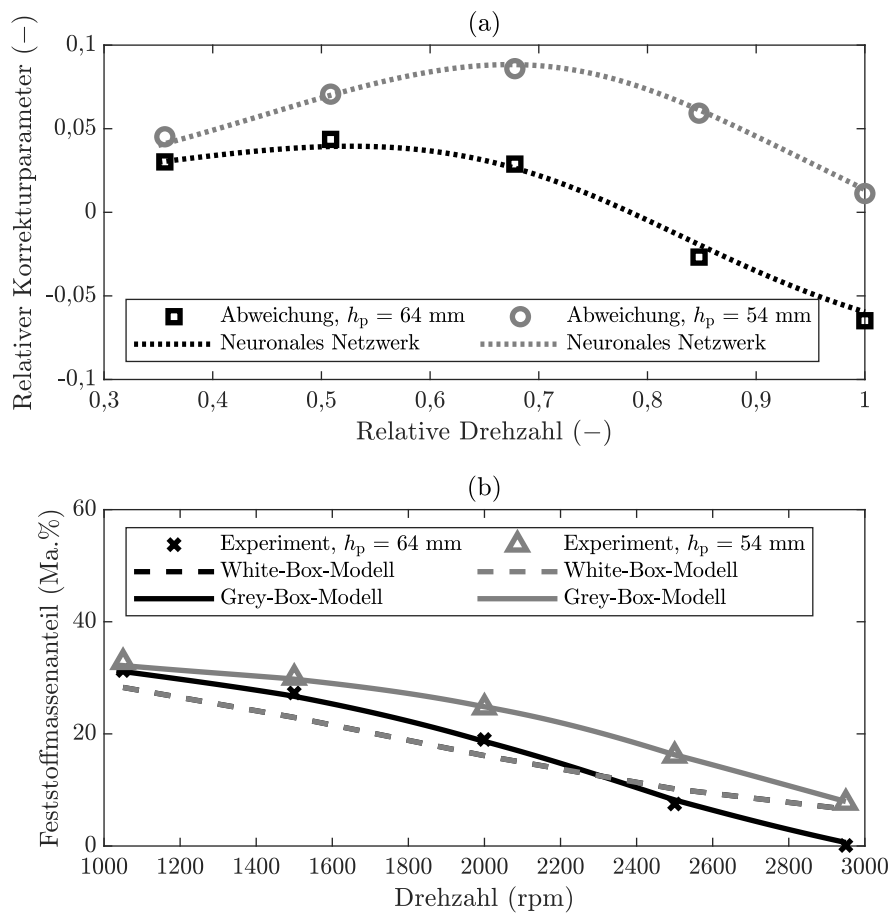


Abbildung 6.8.: Feststoffmassenanteil des Zentrats bei einem konstanten Volumenstrom von  $\dot{V}_{in} = 2000 \text{ l h}^{-1}$  für das Produkt CC1: (a) relativer Output des Black-Box-Modells, (b) Vergleich der Ergebnisse aus Experiment, White- und Grey-Box-Modell.

Auch hier zeigt das obere Diagramm in Abbildung 6.8a, dass das neuronale Netzwerk die Abweichung beschreibt. Für beide Teichtiefen folgt das White-Box-Modell dem allgemeinen Trend, dass der Feststoffmassenanteil mit zunehmender Rotationsgeschwindigkeit abnimmt, und die beiden White-Box-Modelle sind im Grunde gleichwertig, da das White-Box-Modell nicht empfindlich genug auf diesen Unterschied in der Teichtiefe reagiert. Die experimentellen Ergebnisse zeigen, dass bei gleicher Drehzahl der Feststoffmassenanteil bei der kleineren Teichtiefe höher ist. Somit ist die Abtrennung mit zunehmender Teichtiefe besser. Die Simulation zeigt jedoch keinen signifikanten Unterschied bei der Variation der Teichtiefe. Hierfür gibt es mehrere Gründe. Dies liegt an strömungstechnischen Effekten, wie beispielsweise



der Art der Strömung, der effektiv durchströmten Teichtiefe, lokalen Turbulenzen und der Kanalgeometrie aufgrund der Zentrifugegeometrie [5]. Es ergibt sich einen verstärkten Einfluss, wenn der Teich tief ist und die Zentrifuge einen geringen Füllgrad hat. Das heißt wenn der frei fließende Strömungsquerschnitt größer ist. Diese Vermutung bestätigt Faust [14] in seiner Forschung. Leung [39] geht davon aus, dass sich an der Teichoberfläche eine sogenannte stagnierende Schicht bildet. Das bedeutet, dass ein Teilchen als abgeschieden gilt, wenn es aus der stagnierenden Schicht sedimentiert. Über die Bedingungen, unter denen sich diese stagnierende Schicht ausbildet, gibt es in der Literatur jedoch konträre Meinungen. Strömungsphänomene dieser Art beeinflussen das Verweilzeitverhalten der Partikel. Aus diesem Grund ist die Annahme einer entwickelten Pfropfenströmung entlang der gesamten Teichtiefe bis zur Sedimentoberfläche für die Berechnung des Abscheidegrades nicht immer gültig. Hier reduziert sich in diesem Bereich der mittlere quadratische Fehler (RMSE) für eine Teichtiefe von 54 mm von 6 Ma.% (White-Box-Modell) auf 0,33 Ma.% (Grey-Box-Modell). Für die Teichtiefe von 64 mm beträgt die Reduktion von 4,14 Ma.% auf 0,51 Ma.%, was in beiden Fällen eine deutliche Verbesserung darstellt.

In Abbildung 6.9a ist der relative Korrekturparameter über dem relativen Volumenstrom für eine Drehzahl von  $n_{\text{rot}} = 2950$  rpm aufgetragen. In Abbildung 6.9b wird das entsprechende Ergebnis mit dem experimentellen Wert, dem Ergebnis des reinen White-Box-Modells und des Grey-Box-Modells verglichen.

Die Abweichungsfunktion zeigt, dass das neuronale Netzwerk die tatsächliche Abweichung für diese Kombination von Parametern modelliert. Der Einfluss des Volumenstroms auf den Feststoffmassenanteil des Kuchens bei einer Drehzahl von  $n_{\text{rot}} = 2950$  rpm ist minimal. Auch der Einfluss der Teichtiefe ist in diesem Bereich vernachlässigbar. Das White-Box-Modell spiegelt dieses Verhalten wider. Hier modelliert das neuronale Netzwerk nur kleine Abweichungen zwischen Experiment und White-Box-Modell, da diese größer als das zuvor definierte Modellierungsintervall sind. Der Feststoffmassenanteil für einen Volumenstrom zwischen  $\dot{V}_{\text{in}} = 1000 \text{ l h}^{-1}$  und  $\dot{V}_{\text{in}} = 2600 \text{ l h}^{-1}$  ist annähernd konstant für eine Teichtiefe von  $h_p = 94$  mm. Daher korrigiert das Black-Box-Modell das White-Box-Modell für diesen Bereich mit einem Faktor, der annähernd konstant ist. Der Feststoffmassenanteil bei  $\dot{V}_{\text{in}} = 600 \text{ l h}^{-1}$  beträgt 60 Ma.%, was für eine Teichtiefe von  $h_p = 94$  mm etwas niedriger ist als die anderen Werte. Aufgrund der Regularisierung ist das Black-Box-Modell ein Kompromiss zwischen der perfekten Wiedergabe aller Trainingsdaten und dem Overfitting. Infolgedessen ist der Trend, in besonderem Hinblick auf diesen Punkt, nicht perfekt wiedergegeben, da die anderen Daten bei Volumenströmen größer als  $\dot{V}_{\text{in}} = 1000 \text{ l h}^{-1}$  annähernd konstant sind. Wenn sich bei-

spielsweise der Trend des abnehmenden Feststoffmassenanteils bei kleineren Volumenströmen ( $\dot{V}_{in} < 600 \text{ l h}^{-1}$ ) fortsetzt, könnte dies vom neuronalen Netzwerk modelliert werden, wenn der Einfluss auf den Prozess im Trainingsdatensatz enthalten ist.

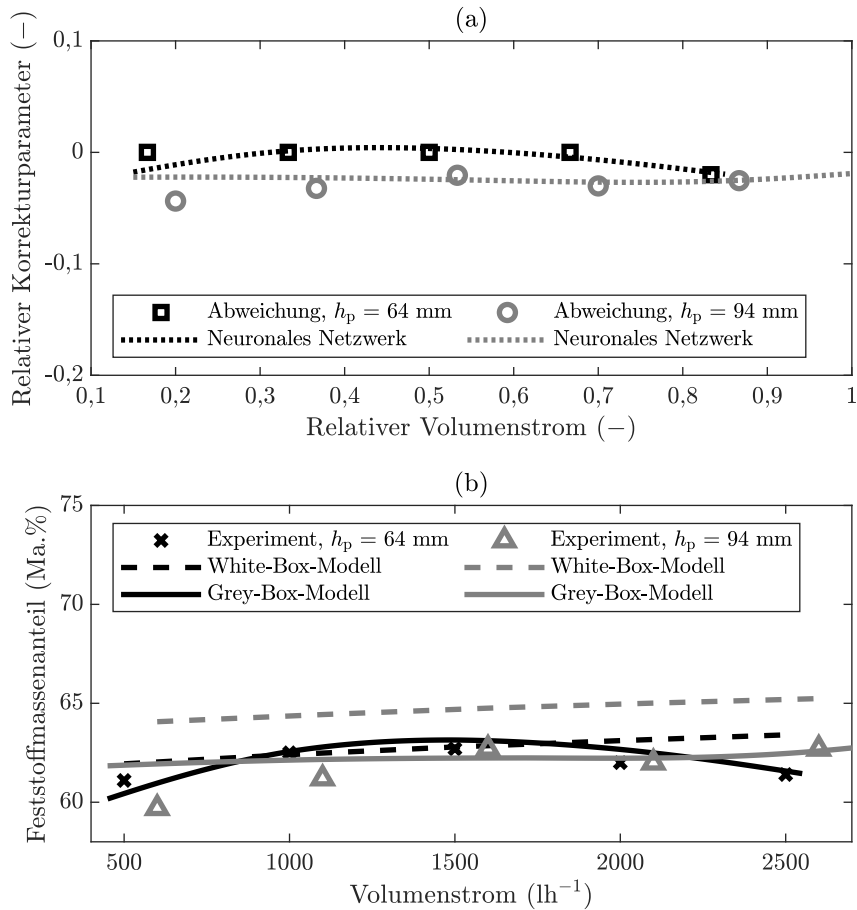


Abbildung 6.9.: Feststoffmassenanteil des Kuchens bei einer konstanten Drehzahl von  $n_{rot} = 2950 \text{ rpm}$  für das Produkt CC2: (a) relativer Ausgabe des Black-Box-Modells, (b) Vergleich der Ergebnisse aus Experiment, White- und Grey-Box-Modell.

Für die gleichen Parameter wie in Abbildung 6.9 sind die Ergebnisse für das Zentrat in Abbildung 6.10 dargestellt.

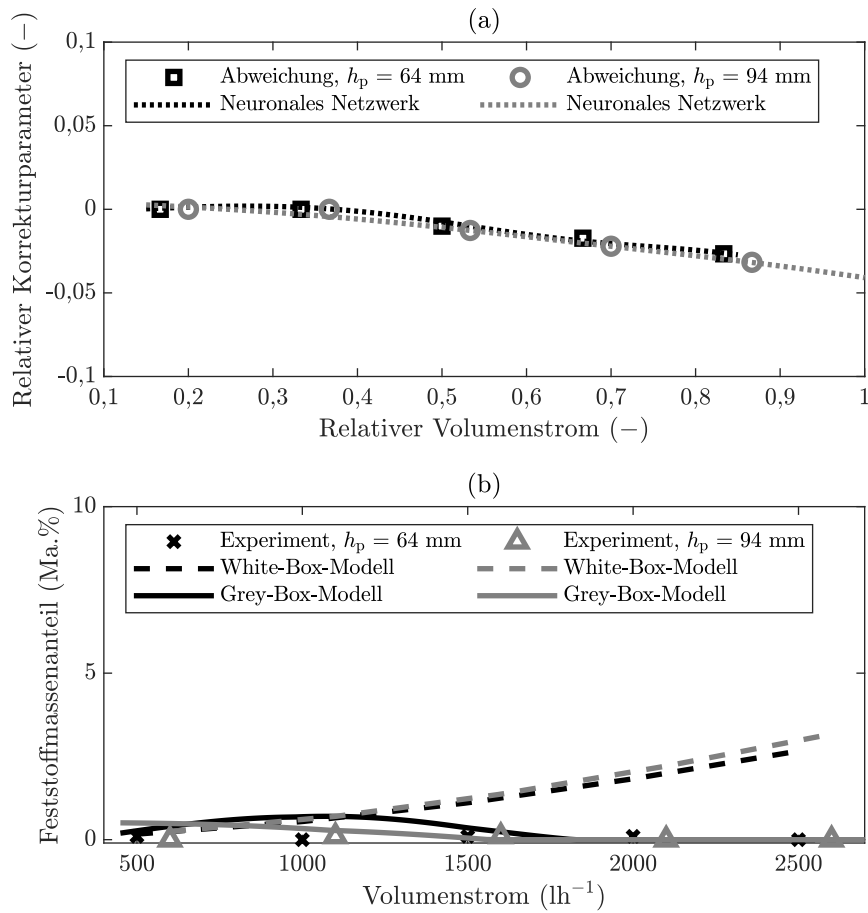


Abbildung 6.10.: Feststoffmassenanteil des Zentrats bei einer konstanten Drehzahl von  $n_{\text{rot}} = 2950$  rpm für das Produkt CC2: (a) relativer Output des Black-Box-Modells, (b) Vergleich der Ergebnisse aus Experiment, White- und Grey-Box-Modell.

Die experimentellen Ergebnisse zeigen, dass der Volumenstrom in diesem Bereich zwischen  $\dot{V}_{\text{in}} = 500 l h^{-1}$  und  $\dot{V}_{\text{in}} = 2600 l h^{-1}$  keinen Einfluss auf den Feststoffmassenanteil im Zentrat hat. In jedem Fall ist das Zentrat nahezu klar, was einem Feststoffmassenanteil kleiner als 0,1 Ma.% entspricht. Dies bedeutet, dass die Zentrifuge nicht bis zur maximalen Kapazität gefüllt ist und noch genügend Volumen für die Klärung zur Verfügung steht. Wenn der Volumenstrom weiter ansteigt, erreicht die Dekantierzentrifuge ab einem bestimmten Niveau ihre maximale Kapazität und das Zentrat trübt sich ein. Die Simulationsergebnisse des White-Box-Modells zeigen bereits ab einem Volumenstrom von  $\dot{V}_{\text{in}} = 1500 l h^{-1}$  eine wesentliche Abnahme der Abscheideleistung, d.h. einen wesentlichen Anstieg des Feststoffmassenanteils

im Zentrat. Daher muss das neuronale Netzwerk das White-Box-Modell korrigieren. In diesem Fall reduziert sich der RMSE für die Teichtiefe von 64 mm von 1,51 Ma.% (White-Box-Modell) auf 0,34 Ma.% (Grey-Box-Modell). Für die Teichtiefe von 94 mm verbessert sich das Ergebnis von 1,84 Ma.% auf 0,24 Ma.%. Gerade in diesem Fall ist dies von praktischer Relevanz, da hieraus ersichtlich ist, dass die Kapazität der Zentrifuge noch nicht erreicht ist, obwohl es das White-Box-Modell vorhersagt, und dass der Volumenstrom weiter steuerbar ist. In dieser Studie wurde experimentell nicht untersucht, ab welchem Volumenstrom die maximale Kapazität erreicht ist. Die Verwendung des Grey-Box-Modells ist in dieser Arbeit rein interpolativ. Außerhalb des trainierten Bereichs gilt das White-Box-Modell. Die Intention ist es, genau die Bereiche zu verbessern, in denen das White-Box-Modell ungenau ist. Dennoch ist die Kombination von White- und Black-Box-Modell bei der Extrapolation außerhalb des trainierten Bereichs zukünftig interessant. Wie bereits oben beschrieben, basiert das White-Box-Modell auf der Annahme, dass das Strömungsregime eine Pfropfenströmung ist und direkt auf das Wehr zufließt. Die Berechnung des lokalen Abscheidegrads erfolgt durch Gleichsetzen der Verweilzeit mit der Sedimentationszeit. Bei relativ großen Teichtiefen sind in der Realität lokale Wirbel in der Strömung möglich [14]. Dies beeinflusst die Verweilzeit und würde sie typischerweise erhöhen, weil die Partikel im Teich zirkulieren können. Bei gleicher Sedimentationszeit steigt der Abscheidegrad mit zunehmender Verweilzeit. Das White-Box-Modell ist nicht in der Lage, dieses Verhalten abzubilden. Die Ergebnisse des Grey-Box-Modells zeigen jedoch, dass es durch Training des neuronalen Netzwerkes diese Abweichungen beschreiben und damit diesen Effekt abbilden kann. Generell ergeben sich dadurch neue Möglichkeiten, die Simulationsumgebung zu erweitern. Zusätzliche Effekte sind entweder über weitere Gleichungen in das parametrische Modell integrierbar oder das neuronale Netzwerk lernt durch gezielte Experimente, die Zusammenhänge abzubilden. Die Grey-Box-Modellierung ist eindeutig eine sehr nützliche Anwendung im Kontext der zunehmenden Digitalisierung.

# 7. Zusammenfassung und Ausblick

## Zusammenfassung

Diese Arbeit befasst sich mit der Entwicklung eines hybriden Simulationsmodells zur Optimierung des Betriebsverhaltens von Dekantierzentrifugen. Dies umfasst allgemein die Erweiterung eines dynamischen Prozessmodells, die Entwicklung eines Modells zur Berechnung von Degritting und die Modellierung eines Grey-Box-Modells als hybriden Modellierungsansatz. Bestehende Methoden waren bisher nicht ausreichend, um das dynamische Verhalten von feindispersen Suspensionen im gesamten Apparat zu beschreiben. Das hier vorgestellte Modell ist echtzeitfähig und simuliert das dynamische Verhalten der gesamten Dekantierzentrifuge.

Im ersten Schritt erweitert diese Arbeit das dynamische Prozessmodell von Gleiss [19]. Das Simulationsmodell basiert auf der Diskretisierung des helixförmigen Schneckenkanals, welcher den Prozessraum darstellt. In den einzelnen Bilanzräumen erfolgt die Berechnung der Sedimentation, Sedimentkonsolidierung und des Sedimenttransports. Es umfasst jetzt den gesamten Apparat (konischer und zylindrischer Bereich). Weiterhin erfolgt die Erweiterung der Kompressionsfunktion zur Sedimentkonsolidierungsfunktion. Damit lässt sich zusätzlich der Effekt der Scherverdichtung charakterisieren und berücksichtigen. Experimentelle Ergebnisse an einer Dekantierzentrifuge im Labormaßstab dienen als erste Validierung. Dabei zeigt der Vergleich zwischen Simulation und Experiment eine sehr gute Übereinstimmung. Allerdings variieren das Verweilzeitverhalten und die Zentrifugalbeschleunigungen hin zu größeren Skalen. Zur Untersuchung der Scale-up Fähigkeit und Übertragbarkeit auf andere Produkte erfolgten Validierungsversuche im Labor-, Pilot- und Industriemaßstab für zwei Calciumcarbonat-Wasser-Suspensionen, welche sich in ihrem Materialverhalten deutlich unterscheiden. Die Ergebnisse bestätigen sowohl die Scale-up Fähigkeit als auch die Übertragbarkeit auf andere Produkte. Mit diesem mathematischen Modell lassen sich bei erfolgreicher Materialcharakterisierung verschiedene Zentrifugengrößen vom Labor- bis zum Industriemaßstab umfassend simulieren. Darüber hinaus sind Parameter, die während des Betriebs der Maschine optisch und räumlich nicht zugänglich sind, aufgrund der Diskretisierung lokal und zeitaufgelöst

verfügbar. Dies macht es zu einem nützlichen und effizienten Werkzeug bei der Optimierung von Dekantierzentrifugen.

Die Entwicklung und Integration eines Algorithmus für Degritting erfolgt im nächsten Schritt. Stahl [64] beschreibt, dass die Überkornpartikel sich aus der Matrixsuspension lösen und dadurch schneller als die Partikel der Matrixsuspension absetzen. Somit müssen die Überkornpartikel nicht zwangsläufig bis zur Trommelwand sedimentieren, um als abgeschieden zu gelten. Dies erfordert die Modellierung der Überströmung des Wehres am Zentratauslass der Zentrifuge. Die physikalische Beschreibung der Überströmhöhe basiert auf der Erweiterung der Gleichung nach Poleni [8]. Die Mehrphasensimulation des Schneckenkanals dient zur Kalibrierung des Überfallbeiwertes. Somit erfolgt die Ableitung einer empirischen Gleichung für die Abscheidebedingung der Überkornpartikel beim Degritting aus CFD-Simulationen. Die Ergebnisse von Experimenten aus der industriellen Praxis mit den Ergebnissen des Degritting Algorithmus stimmen sehr gut überein. Diese Studien bestätigen, dass die hier entwickelte Simulationsmethode ein tieferes Verständnis in das Abscheideverhalten liefert. Das Simulationsmodell bietet daher die Vorteile zur Optimierung des Degrittings durch einen detaillierteren Einblick in das Separationsverhalten der Überkornpartikel.

In einigen praxisrelevanten Anwendungen, wie beispielsweise bei großen Teichtiefen, können lokale Turbulenzen und Strömungen in bestimmten Bereichen der Zentrifuge das Abscheideverhalten beeinflussen. Dem eigentlichen Prozessmodell liegt die Annahme einer gleichmäßigen Durchströmung des Teichs zu Grunde. Die Berechnung lokaler Strömungseffekte auf das Abscheideverhalten bei großen Teichtiefen erfordert detaillierte Strömungssimulationen, da für diese Abhängigkeiten keine analytischen oder empirischen Gleichungen zur Verfügung stehen. Die Grey-Box-Modellierung stellt einen Modellierungsansatz dar, der aus einem parametrischen und einem nicht-parametrischen Modell besteht. Die Kombination der beiden Methoden hat mehrere Vorteile gegenüber den einzelnen Ansätzen. Für das parametrische Modell ist das numerische Prozessmodell, wie im vorherigen Abschnitt beschrieben, implementiert. Damit stellt dieser Teil die physikalische Basis dar und dient als idealer Schätzer für den zu simulierenden Prozess. Darüber hinaus ist das nicht-parametrische Modell ein neuronales Netzwerk, das lernt die Simulationsdaten entsprechend zu korrigieren, falls im trainierten Bereich die Abweichung zwischen Simulationsergebnis und Trainingsdaten zu groß war. Das Training des neuronalen Netzwerkes erfolgt mit experimentellen Daten, um spezifische Strömungsbedingungen auf das Separationsverhalten bei großen Teichtiefen zu berücksichtigen.

Die Modellierung eines statischen, parallelen Grey-Box-Modells ist in dieser Arbeit dargestellt und anhand von Ergebnissen diskutiert. Es ist speziell dafür entwickelt, um gute Eigenschaften zur Generalisierung von Modellen zu besitzen und für limitierte Trainingsdaten praktikabel zu sein. Dies setzt die korrekte Auswahl des Trainingsalgorithmus voraus. Zusätzlich erfolgt die Einführung eines Modellierungsintervalles. Wenn die Abweichung beispielsweise aufgrund von Messungenauigkeiten innerhalb dieser Toleranz liegt, wird die verbleibende Abweichung nicht durch das neuronale Netz modelliert. Dadurch ist die Empfindlichkeit gegenüber Under- und Overfitting zusätzlich reduziert. Die Ergebnisse dieser Arbeit bestätigen, dass es durch Training des neuronalen Netzwerkes möglich ist diese Effekte zu integrieren. Dadurch ergeben sich neue Möglichkeiten, das hybride Simulationsmodell zu erweitern. Bisher nicht beschriebenes physikalisches Verhalten kann entweder über weitere Gleichungen in das parametrische Modell integriert werden oder das neuronale Netzwerk lernt durch gezielte Experimente die Zusammenhänge abzubilden. Diese Untersuchungen bestätigen, dass Grey-Box-Modellierung eindeutig eine sehr nützliche Anwendung im Kontext der zunehmenden Digitalisierung ist.

### **Ausblick**

Dekantierzentrifugen finden ebenfalls Anwendung in der Verarbeitung von biologischen Suspensionen, welche Zellkulturen enthalten. In diesem Fall ist ein wichtiges Kriterium, dass die bei der Vorbeschleunigung der Suspension wirkenden Kräfte die Zellen nicht zerstören. Die Adaption des Simulationsmodells für die Anwendung bei biologischen Suspensionen erfolgt durch die Erweiterung des bestehenden Modells, beispielsweise um eine Vorbeschleunigungszone. Hier ist es denkbar, die Zellen in repräsentative Zellklassen einzuteilen und über Impulserhaltungsgleichungen die jeweilige Beschleunigung und repräsentative Scherrate für jede Zellklasse zu berechnen. Überschreitet die vorliegende Scherrate einen kritischen Wert, werden die Zellen beschädigt. Die kritische Scherrate stellt einen weiteren Materialparameter dar und ist anhand einer experimentellen Charakterisierung im Labormaßstab abzuleiten.

Die Anwendung von künstlichen neuronalen Netzwerken in hybriden Modellierungsansätzen, wie der Grey-Box-Modellierung, eröffnet weiterführende Möglichkeiten bei der Berechnung von Zentrifugen. Beispielsweise ist es denkbar, die Trainingsdaten für das KNN teilweise oder vollständig mittels detaillierten CFD-Simulationen anstatt durch spezifische Experimente zu erzeugen. Dies reduziert den experimentellen Aufwand erheblich. Die CFD-Simulationen bilden beispielsweise die lokalen Strömungsbedingungen innerhalb der Zentrifuge und deren Einfluss auf die Partikelabscheidung ab. Allerdings setzt dies ein validiertes CFD-Modell voraus und vollaufgelöste Simulationen benötigen typischerweise eine hohe Rechenzeit. Dieser

Nachteil lässt sich durch eine automatisierte Auswertung der CFD-Simulationen und wiederholtes Training des KNN kompensieren. Dadurch lernt das hybride Simulationsmodell in definierten Zeitintervallen automatisiert und erhöht so seine Zuverlässigkeit mit zunehmenden Lernfortschritt. Als Ergebnis hat das Grey-Box-Modell den Vorteil eines dynamischen Prozessmodells im Bezug auf die Rechenzeit, aber ebenfalls eine deutlich erhöhte Genauigkeit im Vergleich zu dem reinen Prozessmodell.

Die Voraussetzung für ein kontinuierliches Training des KNN ist ein dynamisches Grey-Box-Modell. Im nächsten Schritt ist die Adaption des hier vorgestellten statischen Grey-Box-Modells auf ein dynamisches denkbar. In der industriellen Praxis sind die einzelnen Prozessschritte häufig mit Sensoren ausgestattet, welche kontinuierlich potenzielle Trainingsdaten liefern. Prinzipiell können die Sensordaten als zusätzliche Grundlage für ein kontinuierliches Training dienen. Dies ermöglicht es, während dem Zentrifugenbetrieb das Modell zu trainieren und somit die Genauigkeit des Modells zu steigern. Eine Voraussetzung für das zuverlässige Training ist, dass die Sensordaten vertrauenswürdig, repräsentativ und informativ sind. Allerdings haben nicht alle eingehenden Daten die gleiche Qualität. Die Herausforderung besteht darin, zu bestimmen, wie die Sensordaten untereinander zu gewichten sind, um beispielsweise Messfehler zu erkennen und diese unerwünschten Daten aus dem Trainingsdatensatz zu entfernen. Für diesen Zweck sind beispielsweise KNN einsetzbar, welche darauf trainiert sind Cluster oder Messfehler innerhalb der Sensordaten zu detektieren. Generell ist es denkbar, die interne Struktur des Grey-Box-Modells zu verändern und andere Typen von KNN zu benutzen. Durch eine serielle Anordnung von KNN und Prozessmodell lassen sich beispielsweise experimentell nicht messbare Materialparameter, welche die Simulation als Eingabeparameter benötigt, durch gezieltes Training bestimmen. Das vorgeschaltete KNN ist in diesem Fall mittels experimentell zugänglichen Daten so zu trainieren, dass es die zur Simulation korrespondierenden Materialparameter bestimmt. Allgemein ist das übergeordnete Ziel die Entwicklung eines digitalen Zwillings von Dekantierzentrifugen, was bedeutet, dass die Dekantierzentrifuge komplett digital und im Prozess eingebettet abbildbar ist.







# Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

## Lateinische Symbole

Symbol	Bedeutung	Einheit
$a_C$	Zentrifugalbeschleunigung	$\text{m s}^{-2}$
$a_{\text{de}}$	Parameter Viskositätsfunktion Degritting	—
$\vec{a}$	Ausgabevektor Hidden Layer	
$A$	Fläche	$\text{m}^2$
$b_{\text{de}}$	Parameter Viskositätsfunktion Degritting	—
$\vec{b}$	Bias-Vektor	
$B$	Breite	m
$C$	Zentrifugenziffer	—
$c_w$	Widerstandsbeiwert	—
$e_i$	Netzwerkfehler	
$f_{\text{ext}}$	Kraft	N
$f_\sigma$	Oberflächenkraft	N
$F_R$	Restfeuchte	—
$E$	Abscheidegrad	—
$g$	Erdbeschleunigung	$9,81 \text{ m s}^{-2}$
$h$	Höhe/Tiefe	m
$h_p$	Teichtiefe	m
$h_{\text{po}}$	Überfallhöhe nach Poleni	m
$H$	Hinderungsfaktor	—

## 7. Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

---

Symbol	Bedeutung	Einheit
$i$	Laufvariable	
$j$	Laufvariable	
$k$	Laufvariable	
$K_p, K_o$	Fit Parameter Sedimentkonsolidierungsfunktion	–
$l$	Positionsvariable entlang abgerollter Helix	m
$L$	Länge	m
$m$	Masse	kg
$M$	Anzahl Variablen Eingabevektor	
$\dot{m}$	Massenstrom	kg s <sup>-1</sup>
$n$	Drehzahl	rpm
$n_{de}$	Exponent Viskositätsfunktion Degritting	–
$n_{RZ}$	Exponent nach Richardson und Zaki [54]	–
$\Delta n$	Differenzdrehzahl	rpm
$\vec{n}$	Neuronenvektor	
$\vec{n}_{norm}$	Normalenvektor	
$N_c$	Anzahl an Bilanzräumen	
$N_n$	Anzahl an Neuronen	
$N_{td}$	Anzahl an Trainingsdaten	
$p$	Druck	Pa
$p_1, p_2$	Fit-Parameter Sedimentkonsolidierungsfunktion	Pa, –
$p_y$	Feststoffgerüstdruck	Pa
$q_3$	Partikelgrößenverteilung Dichteverteilung	kg <sup>-1</sup>
$Q_3$	Partikelgrößenverteilung kumulative Summenverteilung	–
$r_1, r_2, r_3$	Fit-Parameter Sedimentationshinderungsfunktion	–
$R$	Radius	m
$R_{dr}$	Trommelradius	m
$R_w$	Wehrradius	m
$S_p$	Sättigung	–

Symbol	Bedeutung	Einheit
$S$	Anzahl Variablen Ausgabevektor	—
$t$	Zeit	s
$T$	Trenngrad	—
$u$	Geschwindigkeit	$\text{m s}^{-1}$
$v$	Geschwindigkeit	$\text{m s}^{-1}$
$V$	Volumen	$\text{m}^3$
$\dot{V}$	Volumenstrom	$\text{m}^3 \text{s}^{-1}$
$w$	Feststoffmassenanteil	— bzw. Ma.%
$w_j$	Netzwerkgewichte	
$W$	Gewichtungsmatrix	
$W_{\text{sc}}$	Schneckenkanalbreite	m
$x_{\text{cut}}$	Trennkorndurchmesser	m
$x_{\text{pa}}$	Partikeldurchmesser	m
$\vec{x}_{\text{in}}$	Eingabevektor	
$\vec{y}_{\text{cor}}$	Ausgabevektor Nicht-parametrisches Modell	
$\vec{y}_{\text{in}}$	Ausgabevektor parametrisches Modell	

## Griechische Symbole

Symbol	Bedeutung	Einheit
$\alpha_{\text{sc}}$	Schneckensteigungswinkel	°
$\beta$	Konuswinkel	°
$\delta$	Verschneidungswinkel	°
$\epsilon_{\text{p}}$	Porosität	—
$\epsilon_{\text{a}}$	Beschleunigungsgrad des Zulaufs	—
$\epsilon_{\text{T}}$	Transporteffizienz	—
$\gamma_{\text{p}}$	Performance Ratio	—

## 7. Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

Symbol	Bedeutung	Einheit
$\dot{\gamma}_s$	Scherrate	$s^{-1}$
$\kappa$	Kurvatur der freien Oberfläche	—
$\lambda_1, \lambda_2$	Fit-Parameter Weibull-Verteilung	$m^{-1}, -$
$\phi$	Feststoffvolumenanteil	—
$\phi_{sc}$	Reibwinkel	°
$\pi$	Kreiszahl Pi	—
$\eta_{sep}$	Abscheidegrad	—
$\eta$	dynamische Viskosität	Pa·s
$\mu_{po}$	Überfallbeiwert nach Poleni	—
$\mu_{sc}$	Schneckenreibwert	—
$\rho$	Dichte	$kg\ m^{-3}$
$\tilde{\rho}$	bezogene Dichtedifferenz	—
$\omega$	Winkelgeschwindigkeit	$s^{-1}$
$\sigma$	Oberflächenspannung	$N\ m^{-1}$
$\Sigma$	Sigma-Wert	$m^2$
$\zeta_{dec}$	Vorschubgrad Schnecke Dekantierzentrifuge	—

## Indizes

Index	Bedeutung	Kommentar
0	Ausgangszustand	
ax	axial	
c	charakteristisch	
C	auf Zentrifugalfeld bezogen	
ce	Zentrat (engl. centrate)	
co	Konus (engl. cone)	
cor	Korrektur	

<b>Index</b>	<b>Bedeutung</b>	<b>Kommentar</b>
cut	Trennung, Grenze	
cy	Zylinder (engl. cylinder)	
de	degritting	
dr	Trommel (engl. drum)	
eff	effektiv	
end	Ende	
exp	experimentell	
ext	extern	
g	auf Erdschwerefeld bezogen	
gel	Gel	
ges	gesamt	
h	Helix	
hel	Helix	
H	Hohlraum	
id	ideal	
in	eintretend	Parameter am Zulauf
l	Flüssigkeit (engl. liquid)	
m	mittlere	
max	maximal	
min	minimal	
MB	Michaels und Bolger	Michaels und Bolger [47]
opt	optimal	
out	austretend	
O	Output Layer	
p	Teich (engl. pool)	Zusammenhang beachten
pa	Partikel	
po	nach Poleni	
r	relativ	

<b>Index</b>	<b>Bedeutung</b>	<b>Kommentar</b>
rel	relativ	
rot	rotation	
RZ	Richardson und Zaki	Richardson und Zaki [54]
s	Feststoff (engl. solid)	
sc	Schnecke (engl. screw)	
sed	Sediment	
sep	Abtrennung (engl. separation)	
st	Stokes	
sus	Suspension	
tan	tangential	
th	theoretisch	
w	Wehr	

---

## Abkürzungen

<b>Abkürzung</b>	<b>Bedeutung</b>
CC	Calciumcarbonat
CFD	Computational Fluid Dynamics
DEM	Diskrete Elemente Methode
FDM	Finite-Differenzen-Methode
FEM	Finite-Elemente-Methode
FVM	Finite-Volumen-Methode
GCC	Ground Calcium Carbonate
KI	Künstliche Intelligenz
KNN	Künstliches neuronales Netzwerk
Le	Leung-Zahl
LM	Levenberg-Marquardt-Algorithmus



Abkürzung	Bedeutung
LSM	Laser Scanning Mikroskop
ML	Maschinelles Lernen
MLP	Multilayer Perceptron
MSE	Summe der quadrierten Netzwerkfehler
MSEREG	Regularisierte Performance Funktion
MSW	Summe der quadrierten Netzwerkgewichte
PCC	Precipitated Calcium Carbonate
RBF	Radial Basis Function
Re	Reynolds-Zahl
VOF	Volume-of-Fluid-Methode

## Mathematische Symbole

Operator	Bedeutung
$f()$	Funktion von
$\dot{V}$	zeitliche Ableitung der Größe $V$
$\vec{x}$	Variable ist Vektor
$\Sigma$	Summe
$\nabla \cdot$	Divergenz
$\frac{\partial}{\partial}$	partielle Ableitung
$\ $	Betrag/Norm
$\nabla$	Gradient
$\ \vec{x}'\ $	euklidischen Norm der Ableitung von $\vec{x}$ nach $l$



# Abbildungsverzeichnis

2.1. Skizze zur Funktionsweise einer Gegenstrom-Dekantierzentrifuge. . . . .	6
2.2. Typische Geometrie- und Prozessparameter einer Dekantierzentrifuge (Gegenstrombauweise). . . . .	7
2.3. Experimentell ermittelte Sinkgeschwindigkeit in technischen Suspensionen nach Bickert [7]. . . . .	12
2.4. Prinzipielles Kompressionsverhalten feindisperser Produktsysteme. . . . .	14
2.5. Prinzipielles Kompressionsverhalten mit überlagerter Scherung feindisperser Produktsysteme. . . . .	16
2.6. Geschwindigkeitsvektoren des Sedimenttransports eines Massenelements nach Stahl [64]. . . . .	17
3.1. Exemplarische Darstellung zur Klassifikation und Regression im Bezug auf Maschinelles Lernen. . . . .	24
3.2. Schematischer Funktionsverlauf bei Underfitting und Overfitting. . . . .	25
3.3. Schematischer Aufbau eines neuronalen Netzwerks mit Input, einer Hidden Layer und Output Layer mit Output. . . . .	26
3.4. Prinzipieller Aufbau eines parallelen, stationären Grey-Box-Modells. . . . .	31
3.5. Schematische Diskretisierung eine Strömung mittels VOF-Methode und Phasengrenze als Mischphase. . . . .	33
4.1. Laser Scanning Mikroskop (LSM) Aufnahmen zweier Calciumcarbonatprodukte mit der Bezeichnung CC1 und CC3. . . . .	36
4.2. Experimentell bestimmte Partikelgrößenverteilungen der Produkte CC1, CC2 und CC3 mit dazugehöriger Anpassungsfunktion. . . . .	36
4.3. Messprinzip und charakteristische Transmissionsprofile zur Bestimmung der Sinkgeschwindigkeit im Bereich der Zonensedimentation. . . . .	38

4.4. Experimentelle Ergebnisse zur Materialcharakterisierung der Sinkgeschwindigkeit und des Sedimentationshinderungsfaktor in Abhängigkeit des Feststoffvolumenanteils. . . . .	40
4.5. Versuchsaufbau zur experimentellen Charakterisierung des Gelpunktes. . . .	42
4.6. Experimentelle Ergebnisse zur Materialcharakterisierung des Gelpunktes. . .	43
4.7. Prinzipielles Vorgehen zur experimentellen Bestimmung des Konsolidierungsverhaltens kompressibler Haufwerken. . . . .	44
4.8. Uniaxiale Kompression des Kalkstein CC1 bei verschiedenen Drehzahlen und Ausgangskonzentrationen. . . . .	46
4.9. Experimentell bestimmte Sedimentkonsolidierungsfunktion für CC1. . . . .	47
5.1. Schematische Darstellung der Geometrie und Diskretisierung einer Dekantierzentrifuge entlang des abgewickelten Schneckenkanals (gepunktete Linie). . .	53
5.2. Schematische Darstellung eines Bilanzraumes mit ein- und ausgehenden Strömen.	56
5.3. Flussdiagramm des Simulationsalgorithmus. . . . .	58
5.4. Diskretisierung der Sedimentzone zur Berechnung der Kompression. . . . .	60
5.5. Schema des experimentellen Aufbaus zur Validierung des Simulationsmodells.	63
5.6. Vergleich von Simulation und experimentellen Daten im Labormaßstab: Feststoffmassenanteil im Kuchen für verschiedene Drehzahlen und Volumenströme bei konstanter Teichtiefe und Zulaufkonzentration. . . . .	66
5.7. Vergleich von Simulation und experimentellen Daten im Labormaßstab: Feststoffmassenanteil im Zentrat für verschiedene Drehzahlen und Volumenströme bei konstanter Teichtiefe und Zulaufkonzentration. . . . .	67
5.8. Vergleich von Simulation und experimentellen Daten im Labormaßstab: Feststoffmassenanteil im Kuchen für verschiedene Drehzahlen und Zulaufkonzentrationen bei konstanter Teichtiefe und Volumenstrom. . . . .	68
5.9. Vergleich von Simulation und experimentellen Daten im Labormaßstab: Feststoffmassenanteil im Zentrat für verschiedene Drehzahlen und Zulaufkonzentrationen bei konstanter Teichtiefe und Volumenstrom. . . . .	69
5.10. Vergleich von Simulation und experimentellen Daten im Labormaßstab: Feststoffmassenanteil im Kuchen für verschiedene Drehzahlen, Differenzdrehzahlen und Teichtiefen bei konstantem Volumenstrom und Zulaufkonzentration. . .	70
5.11. Vergleich von Simulation und experimentellen Daten im Labormaßstab: Feststoffmassenanteil im Zentrat für verschiedene Drehzahlen, Differenzdrehzahlen und Teichtiefen bei konstantem Volumenstrom und Zulaufkonzentration. . .	71

5.12. Skizze mit Abmessungen der zur Untersuchung der Scale-up Fähigkeit verwendeten Dekantierzentrifuge; maßstabsgetreu relativ zueinander. . . . .	73
5.13. Feststoffmassenanteil des Kuchens für drei Skalen der Dekantierzentrifuge unter Variation der Volumenströme und Drehzahlen: Vergleich von Simulation und Experiment für CC1. . . . .	75
5.14. Feststoffmassenanteil des Zentrats für drei Skalen der Dekantierzentrifuge unter Variation der Volumenströme und Drehzahlen: Vergleich von Simulation und Experiment für CC1. . . . .	76
5.15. Feststoffmassenanteil des Kuchens für drei Skalen der Dekantierzentrifuge unter Variation der Volumenströme und Drehzahlen: Vergleich von Simulation und Experiment für CC2. . . . .	77
5.16. Feststoffmassenanteil des Zentrats für drei Skalen der Dekantierzentrifuge, Volumenströme und Drehzahlen: Vergleich von Simulation und Experiment für CC2. . . . .	78
5.17. Vergleich des Scale-up mittels $\Sigma$ -Theorie und Simulation. . . . .	79
5.18. Feststoffmassenanteil entlang der abgerollten Helix einer Dekantierzentrifuge im industriellen Maßstab mit CC1 für verschiedene Drehzahlen bei konstantem Eingangsvolumenstrom von $3000 \text{ l h}^{-1}$ . . . . .	80
5.19. Partikelgrößenverteilung in der Suspension entlang der abgerollten Helix für eine Dekantierzentrifuge im industriellen Maßstab mit CC1 bei konstantem Eingangsvolumenstrom von $3000 \text{ l h}^{-1}$ und Drehzahl von $2950 \text{ rpm}$ . . . . .	81
5.20. Überströmung und Überfallhöhe am Wehr in Dekantierzentrifugen. . . . .	82
5.21. Strömungsgeometrie für die Simulation der Überströmung im abgewickelten Schneckenkanal. . . . .	84
5.22. Vergleich der Überströmhöhe aus Simulation und modifizierte Poleni Gleichung (siehe Gleichung 5.25) in Abhängigkeit des Volumenstroms. . . . .	86
5.23. Vergleich der Überströmhöhe aus Simulation und modifizierte Poleni Gleichung (siehe Gleichung 5.25) in Abhängigkeit der Drehzahl. . . . .	87
5.24. Schematische Darstellung des Abscheidekriteriums eines Überkornpartikels. .	89
5.25. Vergleich Simulation und Experiment: Abscheidung von Partikel mit einem Durchmesser $x_{de} = 20 \mu\text{m}$ . . . . .	93
5.26. Simulierter Trenngrad als Funktion des Partikeldurchmessers (Messung 4). .	94
5.27. Vergleich Simulation und Experiment: Abscheidung von Überkornpartikel unter der Annahme der Gleichverteilung von Partikel mit einem Durchmesser $20 \mu\text{m} \leq x_{de} \leq 45 \mu\text{m}$ . . . . .	95

5.28. Simulierter Trenngrad der Überkornpartikel in Abhängigkeit der Drehzahl. . . . .	96
5.29. Simulierter Trenngrad der Überkornpartikel in Abhängigkeit der Viskosität. . . . .	97
6.1. Struktur des verwendeten Grey-Box-Modells mit Ein- und Ausgangsgrößen. . . . .	102
6.2. Definition des Modellierungsintervalls zwischen Simulations- und Trainingsdaten bei der Grey-Box-Modellierung. . . . .	104
6.3. Feststoffmassenanteil des Kuchens für verschiedene Drehzahlen und Variation des Modellierungsintervalls bei einem konstanten Volumenstrom von $\dot{V}_{in} = 2000\text{ l h}^{-1}$ für CC1. . . . .	106
6.4. Feststoffmassenanteil des Zentrats für verschiedene Volumenströme und Variation des Modellierungsintervalls bei einer konstanten Drehzahl von $n_{rot} = 2950\text{ rpm}$ für CC2. . . . .	107
6.5. Variation der Anzahl an Neuronen für den relativen Korrekturparameter des Zentrats bei einem konstanten Volumenstrom von $\dot{V}_{in} = 2000\text{ l h}^{-1}$ für das Produkt CC1. . . . .	108
6.6. Variation der Anzahl an Neuronen für den relativen Korrekturparameter des Zentrats bei einem konstanten Volumenstrom von $\dot{V}_{in} = 2000\text{ l h}^{-1}$ für das Produkt CC1 unter Verwendung des nicht regularisierten trainlm-Algorithmus. . . . .	109
6.7. Feststoffmassenanteil des Kuchens bei einem konstanten Volumenstrom von $\dot{V}_{in} = 2000\text{ l h}^{-1}$ für das Produkt CC1: (a) relativer Output des Black-Box-Modells, (b) Vergleich der Ergebnisse aus Experiment, White- und Grey-Box-Modell. . . . .	111
6.8. Feststoffmassenanteil des Zentrats bei einem konstanten Volumenstrom von $\dot{V}_{in} = 2000\text{ l h}^{-1}$ für das Produkt CC1: (a) relativer Output des Black-Box-Modells, (b) Vergleich der Ergebnisse aus Experiment, White- und Grey-Box-Modell. . . . .	112
6.9. Feststoffmassenanteil des Kuchens bei einer konstanten Drehzahl von $n_{rot} = 2950\text{ rpm}$ für das Produkt CC2: (a) relativer Ausgabe des Black-Box-Modells, (b) Vergleich der Ergebnisse aus Experiment, White- und Grey-Box-Modell. . . . .	114
6.10. Feststoffmassenanteil des Zentrats bei einer konstanten Drehzahl von $n_{rot} = 2950\text{ rpm}$ für das Produkt CC2: (a) relativer Output des Black-Box-Modells, (b) Vergleich der Ergebnisse aus Experiment, White- und Grey-Box-Modell. . . . .	115
A.1. Experimentell bestimmte Partikelgrößenverteilung CC4 mit dazugehöriger Anpassungsfunktion. . . . .	150

---

A.2. Experimentelle Ergebnisse CC4 zur Materialcharakterisierung der Sinkgeschwindigkeit und des Sedimentationshinderungsfaktor in Abhängigkeit des Feststoffvolumenanteils. . . . .	150
A.3. Experimentell bestimmte Sedimentkonsolidierungsfunktion für CC4. . . . .	151
A.4. Experimentell bestimmte Partikelgrößenverteilung CC5 mit dazugehöriger Anpassungsfunktion. . . . .	152
A.5. Experimentelle Ergebnisse CC5 zur Materialcharakterisierung der Sinkgeschwindigkeit und des Sedimentationshinderungsfaktor in Abhängigkeit des Feststoffvolumenanteils. . . . .	153
A.6. Dynamische Viskosität von CC5 als Funktion der Scherrate. . . . .	153





# Tabellenverzeichnis

2.1. Überblick über die empfohlenen Leung-Zahlen und Anwendungen nach Leung [38]. . . . .	22
5.1. Bereich der Prozessparameter der experimentellen Untersuchung zur Validierung der Simulation im Labormaßstab. . . . .	65
5.2. Versuchsbedingungen der verschiedenen Dekantierzentrifugen zur Untersuchung der Scale-up Fähigkeit. . . . .	74
5.3. Randbedingungen der CFD Simulation zur Überströmung des Wehres. . . .	85
5.4. Stoffdaten der CFD-Simulation zur Modellierung der Überströmhöhe. . . .	85
5.5. Prozessparameter der Validierungsversuche für Degritting. . . . .	92
6.1. Wertebereich und Größenordnung des verwendeten Datensatzes. . . . .	105
A.1. Übersicht experimentell bestimmte Sedimentkonsolidierungsfunktion CC1 und CC2. . . . .	149
A.2. Geometrie der Dekantierzentrifuge zur experimentellen Untersuchung beim Degritting. . . . .	152



# Literaturverzeichnis

- [1] Ethem Alpaydin. *Maschinelles Lernen*. de. De Gruyter Oldenbourg, Mai 2019. ISBN: 978-3-11-061789-4. URL: <https://www.degruyter.com/document/doi/10.1515/9783110617894/html>.
- [2] Charles Ambler. „Theory of centrifugation“. en. In: *Industrial & Engineering Chemistry* 53.6 (Juni 1961), S. 430–433. ISSN: 0019-7866, 1541-5724. DOI: 10.1021/ie50618a022. URL: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ie50618a022>.
- [3] Charles M. Ambler. „The theory of scaling up laboratory data for the sedimentation type centrifuge“. en. In: *Journal of Biochemical and Microbiological Technology and Engineering* 1.2 (1959), S. 185–205. ISSN: 1547-173X. DOI: 10.1002/jbmte.390010206. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/jbmte.390010206>.
- [4] C.M. Ambler. „The evaluation of centrifuge performance“. In: *Chemical Engineering Progress* 48.3 (1952), S. 150–158.
- [5] Marc Beiser. „Sedimentationsverhalten submikroner Partikeln in Abhängigkeit physikalisch-chemischer Einflüsse und ihr Separationsverhalten in Dekantierzentrifugen“. ger. Dissertation. Aachen: Shaker, 2006.
- [6] Javed I. Bhatti. „Clusters Formation during Sedimentation of Dilute Suspensions“. en. In: *Separation Science and Technology* 21.9 (Nov. 1986), S. 953–967. ISSN: 0149-6395, 1520-5754. DOI: 10.1080/01496398608058389. URL: <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/01496398608058389>.
- [7] Götz Bickert. „Sedimentation feinsten suspendierter Partikeln im Zentrifugalfeld“. ger. Dissertation. 1997.
- [8] Gerhard Bollrich. *Technische Hydromechanik 1: Grundlagen*. de. Beuth Verlag, Mai 2013. ISBN: 978-3-410-23481-4.

- [9] Eric Brochu, Vlad M. Cora und Nando de Freitas. „A Tutorial on Bayesian Optimization of Expensive Cost Functions, with Application to Active User Modeling and Hierarchical Reinforcement Learning“. In: *CoRR* abs/1012.2599 (2010). arXiv: 1012.2599. URL: <http://arxiv.org/abs/1012.2599>.
- [10] R. Buscall et al. „The settling of particles through Newtonian and non-Newtonian media“. en. In: *Journal of Colloid and Interface Science* 85.1 (Jan. 1982), S. 78–86. ISSN: 00219797. DOI: 10.1016/0021-9797(82)90237-5. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0021979782902375>.
- [11] Włodzisław Duch und Geerd H. F. Diercksen. „Neural networks as tools to solve problems in physics and chemistry“. en. In: *Computer Physics Communications* 82.2 (Sep. 1994), S. 91–103. ISSN: 0010-4655. DOI: 10.1016/0010-4655(94)90158-9. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0010465594901589>.
- [12] Nagi Ekdawi und Robert J. Hunter. „Sedimentation of disperse and coagulated suspensions at high particle concentrations“. In: *Colloids and Surfaces* 15 (Jan. 1985), S. 147–159. ISSN: 0166-6622. DOI: 10.1016/0166-6622(85)80062-7. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0166662285800627>.
- [13] Ates Erk. „Rheologische Eigenschaften feindisperser Suspensionen in Filtern und Zentrifugen“. de. Dissertation. Universität Karlsruhe (TH), 2006.
- [14] T. Faust. „Untersuchungen über die Strömungen und Absetzvorgänge in Dekantierzentrifugen Dissertation“. Dissertation. Universität Stuttgart, 1983.
- [15] Joel H. Ferziger, Milovan Perić und Robert L. Street. *Numerische Strömungsmechanik*. de. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2020. ISBN: 978-3-662-46543-1 978-3-662-46544-8. DOI: 10.1007/978-3-662-46544-8. URL: <http://link.springer.com/10.1007/978-3-662-46544-8>.
- [16] Wilfried W. Flory. „Zur Entwicklung der Scherzentrifuge : e. Beitrag zur Schlammentfeuchtung“. Dissertation. 1989.
- [17] F. D. Foresee und M.T. Hagan. „Gauss-Newton approximation to Bayesian learning“. In: *Proceedings of International Conference on Neural Networks (ICNN'97)*. Bd. 3. Juni 1997, 1930–1935 vol.3. DOI: 10.1109/ICNN.1997.614194.
- [18] Estrella Funes et al. „Predictive ANN models for the optimization of extra virgin olive oil clarification by means of vertical centrifugation“. en. In: *Journal of Food Process Engineering* 41.1 (2018), e12593. ISSN: 1745-4530. DOI: 10.1111/jfpe.12593. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/jfpe.12593>.

- 
- [19] Marco Gleiss. „Dynamische Simulation der Mechanischen Flüssigkeitsabtrennung in Vollmantelzentrifugen“. de. Dissertation. Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2018.
- [20] Marco Gleiss et al. „Application of the dynamic flow sheet simulation concept to the solid-liquid separation: Separation of stabilized slurries in continuous centrifuges“. en. In: *Chemical Engineering Science* 163 (Mai 2017), S. 167–178. ISSN: 00092509. DOI: 10.1016/j.ces.2017.01.046. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0009250917300647>.
- [21] Marco Gleiss et al. „Development of a dynamic process model for the mechanical fluid separation in decanter centrifuges“. en. In: *Chemical Engineering & Technology* 41.1 (Jan. 2018), S. 19–26. ISSN: 09307516. DOI: 10.1002/ceat.201700113. URL: <http://doi.wiley.com/10.1002/ceat.201700113>.
- [22] I. Gonzalez-Fernandez et al. „A critical review on the use of artificial neural networks in olive oil production, characterization and authentication“. en. In: *Critical Reviews in Food Science and Nutrition* 59.12 (Juli 2019), S. 1913–1926. ISSN: 1040-8398, 1549-7852. DOI: 10.1080/10408398.2018.1433628. URL: <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/10408398.2018.1433628>.
- [23] Matthew D. Green, Maria Eberl und Kerry A. Landman. „Compressive yield stress of flocculated suspensions: Determination via experiment“. en. In: *AIChE Journal* 42.8 (Aug. 1996), S. 2308–2318. ISSN: 0001-1541, 1547-5905. DOI: 10.1002/aic.690420820. URL: <http://doi.wiley.com/10.1002/aic.690420820>.
- [24] M.T. Hagan und M.B. Menhaj. „Training feedforward networks with the Marquardt algorithm“. In: *IEEE Transactions on Neural Networks* 5.6 (Nov. 1994), S. 989–993. ISSN: 1941-0093. DOI: 10.1109/72.329697.
- [25] Simon Hammerich et al. „A computationally-efficient method for modelling the transient consolidation behavior of saturated compressive particulate networks“. en. In: *Separation and Purification Technology* 220 (Aug. 2019), S. 222–230. ISSN: 13835866. DOI: 10.1016/j.seppur.2019.03.060. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1383586618330910>.
- [26] Simon Hammerich, Marco Gleiß und Hermann Nirschl. „Modeling and simulation of solid-bowl centrifuges as an aspect of the advancing digitization in solid-liquid separation“. en. In: *ChemBioEng Reviews* 6.4 (2019), S. 108–118. ISSN: 2196-9744. DOI:

- 10.1002/cben.201900011. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cben.201900011>.
- [27] Mingzhao He, Yanmin Wang und Eric Forssberg. „Parameter studies on the rheology of limestone slurries“. en. In: *International Journal of Mineral Processing* 78.2 (Jan. 2006), S. 63–77. ISSN: 03017516. DOI: 10.1016/j.minpro.2005.07.006. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0301751605001092>.
- [28] Humberto M. Henrique, Enrique L. Lima und Dale E. Seborg. „Model structure determination in neural network models“. en. In: *Chemical Engineering Science* 55.22 (Nov. 2000), S. 5457–5469. ISSN: 00092509. DOI: 10.1016/S0009-2509(00)00170-6. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0009250900001706>.
- [29] Kurt Hornik, Maxwell Stinchcombe und Halbert White. „Multilayer feedforward networks are universal approximators“. en. In: *Neural Networks* 2.5 (Jan. 1989), S. 359–366. ISSN: 08936080. DOI: 10.1016/0893-6080(89)90020-8. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0893608089900208>.
- [30] A. Jiménez et al. „A sensor-software based on artificial neural network for the optimization of olive oil elaboration process“. en. In: *Sensors and Actuators B: Chemical* 129.2 (Feb. 2008), S. 985–990. ISSN: 0925-4005. DOI: 10.1016/j.snb.2007.09.030. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925400507007678>.
- [31] A. Jiménez Marquez et al. „Neural network as tool for virgin olive oil elaboration process optimization“. en. In: *Journal of Food Engineering* 95.1 (Nov. 2009), S. 135–141. ISSN: 02608774. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2009.04.021. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0260877409002088>.
- [32] R. Johne. „Einfluß der Konzentration einer monodispersen Suspension auf die Sinkgeschwindigkeit ihrer Teilchen“. de. In: *Chemie Ingenieur Technik* 38.4 (1966), S. 428–430. ISSN: 1522-2640. DOI: <https://doi.org/10.1002/cite.330380407>. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cite.330380407>.
- [33] Andreas Karolis. „Probleme der Feststoffförderung in Dekantierzentrifugen bei pastösen Sedimenten“. Dissertation. Universität Karlsruhe (TH), 1986.
- [34] B.H. Kaye und R.P. Boardman. „Cluster formation in dilute suspensions“. In: *Proc. Symp. on the Interaction between Fluids and Particles, Institution of Chemical Engineers London*. 1962, S. 17–21.

- 
- [35] G. J. Kynch. „A theory of sedimentation“. en. In: *Transactions of the Faraday Society* 48 (1952), S. 166. ISSN: 0014-7672. DOI: 10.1039/tf9524800166. URL: <http://xlink.rsc.org/?DOI=tf9524800166>.
- [36] Thomas Langeloh und W. Stahl. „Der Einfluss des Schleppeffektes auf die Klärung in Dekantierzentrifugen“. In: *Aufbereitungs-Technik* 30.6 (1989), S. 331–337.
- [37] Wallace W. F. Leung und Ascher H. Shapiro. „Dewatering of fine-particle slurries using a compound-beach decanter with cake-flow control“. In: *Filtration & Separation* 36.10 (Dez. 1999), S. 49–56. ISSN: 0015-1882. DOI: 10.1016/S0015-1882(99)90087-3. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0015188299900873>.
- [38] Wallace Woon-Fong Leung. *Industrial Centrifugation Technology*. eng. New York: McGraw-Hill, 1998. ISBN: 978-0-07-037191-0.
- [39] Wallace Woon-Fong Leung. „Inferring in-situ floc size, predicting solids recovery, and scaling-up using the Leung number in separating flocculated suspension in decanter centrifuges“. en. In: *Separation and Purification Technology* 171 (Okt. 2016), S. 69–79. ISSN: 13835866. DOI: 10.1016/j.seppur.2016.07.010. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1383586616310188>.
- [40] Ulrich Loll, Karl J. Thomé-Kozmiensky und Internationaler Recycling-Congress, Hrsg. *Recycling von Klärschlamm. 3: Klärschlammaufbereitung und -behandlung*. ger eng. Technik, Wirtschaft, Umweltschutz. Berlin: EF-Verlag für Energie- und Umwelttechnik GmbH, 1992. ISBN: 978-3-924511-63-0.
- [41] David J. C. MacKay. „Bayesian Interpolation“. In: *Neural Computation* 4.3 (Mai 1992), S. 415–447. ISSN: 0899-7667. DOI: 10.1162/neco.1992.4.3.415. URL: <https://doi.org/10.1162/neco.1992.4.3.415>.
- [42] Donald W. Marquardt. „An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters“. en. In: *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics* 11.2 (Juni 1963), S. 431–441. ISSN: 0368-4245, 2168-3484. DOI: 10.1137/0111030. URL: <http://epubs.siam.org/doi/10.1137/0111030>.
- [43] J.T. McCoy und L. Auret. „Machine learning applications in minerals processing: A review“. en. In: *Minerals Engineering* 132 (März 2019), S. 95–109. ISSN: 08926875. DOI: 10.1016/j.mineng.2018.12.004. (Besucht am 24.06.2021).

- [44] Philipp Menesklou, Hermann Nirschl und Marco Gleiss. „Dewatering of finely dispersed calcium carbonate-water slurries in decanter centrifuges: About modelling of a dynamic simulation tool“. en. In: *Separation and Purification Technology* 251 (Nov. 2020), S. 117287. ISSN: 13835866. DOI: 10.1016/j.seppur.2020.117287. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1383586620317615>.
- [45] Philipp Menesklou et al. „Grey Box Modelling of Decanter Centrifuges by Coupling a Numerical Process Model with a Neural Network“. en. In: *Minerals* 11.7 (Juli 2021), S. 755. DOI: 10.3390/min11070755. URL: <https://www.mdpi.com/2075-163X/11/7/755>.
- [46] Philipp Menesklou et al. „Scale-Up of Decanter Centrifuges for The Particle Separation and Mechanical Dewatering in The Minerals Processing Industry by Means of A Numerical Process Model“. en. In: *Minerals* 11.2 (Feb. 2021), S. 229. DOI: 10.3390/min11020229. URL: <https://www.mdpi.com/2075-163X/11/2/229>.
- [47] A. S. Michaels und J. C. Bolger. „Settling Rates and Sediment Volumes of Flocculated Kaolin Suspensions“. en. In: *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 1.1 (Feb. 1962), S. 24–33. ISSN: 0196-4313, 1541-4833. DOI: 10.1021/i160001a004. URL: <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/i160001a004>.
- [48] Manfred H. Pahl et al. *Praktische Rheologie der Kunststoffe und Elastomere / Manfred Pahl ; Wolfgang Gleißle ; Hans-Martin Laun. Hrsg.: Verein Deutscher Ingenieure, VDI-Gesellschaft Kunststofftechnik*. ger. 1995. ISBN: 978-3-18-234192-5.
- [49] José Luis Pitarch, Antonio Sala und César de Prada. „A Systematic Grey-Box Modeling Methodology via Data Reconciliation and SOS Constrained Regression“. en. In: *Processes* 7.3 (März 2019), S. 170. DOI: 10.3390/pr7030170. URL: <https://www.mdpi.com/2227-9717/7/3/170>.
- [50] C Pozrikidis und Dk Gartling. „Fluid Dynamics: Theory, Computation, and Numerical Simulation“. en. In: *Applied Mechanics Reviews* 55.3 (2002), B55. ISSN: 00036900. DOI: 10.1115/1.1470683. URL: <http://AppliedMechanicsReviews.asmedigitalcollection.asme.org/article.aspx?articleid=1397145>.
- [51] Dimitris C. Psychogios und Lyle H. Ungar. „Direct and indirect model based control using artificial neural networks“. en. In: *Industrial & Engineering Chemistry Research* 30.12 (Dez. 1991), S. 2564–2573. ISSN: 0888-5885, 1520-5045. DOI: 10.1021/ie00060a009. URL: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ie00060a009>.



- [52] Alan Records und Ken Sutherland. *Decanter Centrifuge Handbook*. en. Oxford: Elsevier, 2001. ISBN: 978-1-85617-369-8. DOI: 10.1016/B978-1-856173-69-8.X5000-X. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9781856173698X5000X>.
- [53] Harald Reinach. „Gleichgewicht und Kinetik der Pressentfeuchtung im Zentrifugalfeld einer Becherzentrifuge und in einer Stempelpresse, dargestellt an einem stark kompressiblem Schlamm“. Dissertation. Universität Karlsruhe (TH), 1992.
- [54] J. F. Richardson und W. N. Zaki. „The sedimentation of a suspension of uniform spheres under conditions of viscous flow“. In: *Chemical Engineering Science* 3.2 (Apr. 1954), S. 65–73. ISSN: 0009-2509. DOI: 10.1016/0009-2509(54)85015-9. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009250954850159>.
- [55] Xiana Romani Fernández und Hermann Nirschl. „Simulation of particles and sediment behaviour in centrifugal field by coupling CFD and DEM“. en. In: *Chemical Engineering Science* 94 (Mai 2013), S. 7–19. ISSN: 00092509. DOI: 10.1016/j.ces.2013.02.039. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0009250913001401>.
- [56] David E. Rumelhart, Geoffrey E. Hinton und Ronald J. Williams. „Learning representations by back-propagating errors“. en. In: *Nature* 323.6088 (Okt. 1986), S. 533–536. ISSN: 1476-4687. DOI: 10.1038/323533a0. URL: <https://www.nature.com/articles/323533a0>.
- [57] Masao Sambuichi, Hideo Nakakura und Kuniyoshi Osasa. „Zone Settling of Concentrated Slurries in a Centrifugal Field“. en. In: *JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING OF JAPAN* 24.4 (1991), S. 489–494. ISSN: 0021-9592. DOI: 10.1252/jcej.24.489. URL: [https://www.jstage.jst.go.jp/article/jcej/24/4/24\\_4\\_489/\\_article/-char/ja/](https://www.jstage.jst.go.jp/article/jcej/24/4/24_4_489/_article/-char/ja/).
- [58] Jan R. Schnittger. „Integrated Theory of Separation for Bulk Centrifuges“. en. In: *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development* 9.3 (Juli 1970), S. 407–413. ISSN: 0196-4305, 1541-5716. DOI: 10.1021/i260035a008. URL: <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/i260035a008>.
- [59] Pradipta Kumar Senapati, Dibakar Panda und Ashutosh Parida. „Predicting Viscosity of Limestone–Water Slurry“. en. In: *Journal of Minerals and Materials Characterization and Engineering* 08.03 (2009), S. 203–221. ISSN: 2327-4077, 2327-4085. DOI: 10.4236/jmmce.2009.83018. URL: <http://www.scirp.org/journal/PaperDownload.aspx?DOI=10.4236/jmmce.2009.83018>.

- [60] Catharina Sender. „Experimentelle Untersuchung der Scherverdichtung von feindispersen, kompressiblen Calciumcarbonat-Wasser Haufwerken“. Bachelorarbeit. Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik: Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Nov. 2020.
- [61] Jasper Snoek, Hugo Larochelle und Ryan P. Adams. *Practical Bayesian Optimization of Machine Learning Algorithms*. \_eprint: 1206.2944. 2012.
- [62] Joseph H. Spurk. *Dimensionsanalyse in der Strömungslehre*. Berlin ; New York: Springer-Verlag, 1992. ISBN: 978-3-540-54959-8 978-0-387-54959-0.
- [63] W. Stahl und T. Langeloh. „Improvement of clarification in decanting centrifuges“. In: *Chemie Ingenieur Technik* 55.4 (1983), S. 324–325.
- [64] Werner Helmut Stahl. *Fest-Flüssig-Trennung. 2, Industrie-Zentrifugen. Maschinen- & Verfahrenstechnik*. CH-Maennedorf: DrM Press, 2004.
- [65] Mark Stiborsky. „Numerische Simulation der Entfeuchtung körniger Feststoffe in Dekantierzentrifugen“. de. Dissertation. Aachen: Shaker, 2004.
- [66] Anthony D Stickland. „Solid-Liquid Separation in the Water and Wastewater Industries“. en. Dissertation. Melbourne: University of Melbourne, 2005.
- [67] Anthony D. Stickland, Lee R. White und Peter J. Scales. „Modeling of solid-bowl batch centrifugation of flocculated suspensions“. en. In: *AIChE Journal* 52.4 (Apr. 2006), S. 1351–1362. ISSN: 0001-1541, 1547-5905. DOI: 10.1002/aic.10746. URL: <http://doi.wiley.com/10.1002/aic.10746>.
- [68] George Gabriel Stokes. *Mathematical and Physical Papers*. en. Cambridge: Cambridge University Press, 2009. ISBN: 978-0-511-70226-6. DOI: 10.1017/CB09780511702266. URL: <http://ebooks.cambridge.org/ref/id/CB09780511702266>.
- [69] Michael L. Thompson und Mark A. Kramer. „Modeling chemical processes using prior knowledge and neural networks“. en. In: *AIChE Journal* 40.8 (1994), S. 1328–1340. ISSN: 1547-5905. DOI: 10.1002/aic.690400806. URL: <https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.690400806>.
- [70] Wenjea J Tseng und Chun-Nan Chen. „Effect of polymeric dispersant on rheological behavior of nickel terpeneol suspensions“. en. In: *Materials Science and Engineering A* (2003), S. 9.

- [71] Venkat Venkatasubramanian. „The promise of artificial intelligence in chemical engineering: Is it here, finally?“ en. In: *AIChE Journal* 65.2 (2019), S. 466–478. ISSN: 1547-5905. DOI: <https://doi.org/10.1002/aic.16489>. URL: <https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.16489>.
- [72] Richard J. Wakeman und Stephen Tarleton. *Solid/liquid Separation: Scale-up of Industrial Equipment*. eng. 1. Aufl. Oxford: Elsevier, 2005. ISBN: 978-1-85617-420-6.
- [73] M J Willis und C Di Massimo. „Artificial neural networks in process engineering“. en. In: *M A Y* 138 (1991), S. 12.
- [74] Mingjun Zhu et al. „Design and computational fluid dynamics analysis of a three-phase decanter centrifuge for oil-water-solid separation“. en. In: *Chemical Engineering & Technology* 43.5 (2020), S. 1005–1015. ISSN: 1521-4125. DOI: [10.1002/ceat.201900245](https://doi.org/10.1002/ceat.201900245). URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/ceat.201900245>.
- [75] Jürgen Zierep und Karl Bühler. *Grundzüge der Strömungslehre: Grundlagen, Statik und Dynamik der Fluide / von Jürgen Zierep, Karl Bühler*. ger. 2018. ISBN: 978-3-658-20473-0.



# A. Anhang

## A.1. Ergebnisse Sedimentkonsolidierungsfunktion CC1 und CC2

Tabelle A.1.: Übersicht experimentell bestimmte Sedimentkonsolidierungsfunktion CC1 und CC2.

<b>Produkt</b>	<b>CC1</b>	<b>CC2</b>
$\phi_{\text{gel}}$	19,54 Ma. %	9,8 Ma. %
$p_1$	68,2 Pa	0,15 Pa
$p_2$	5,0	6,2
$K_p$	0,9	1,05
$K_o$	0,1	0

## A.2. Ergebnisse Materialcharakterisierung CC4

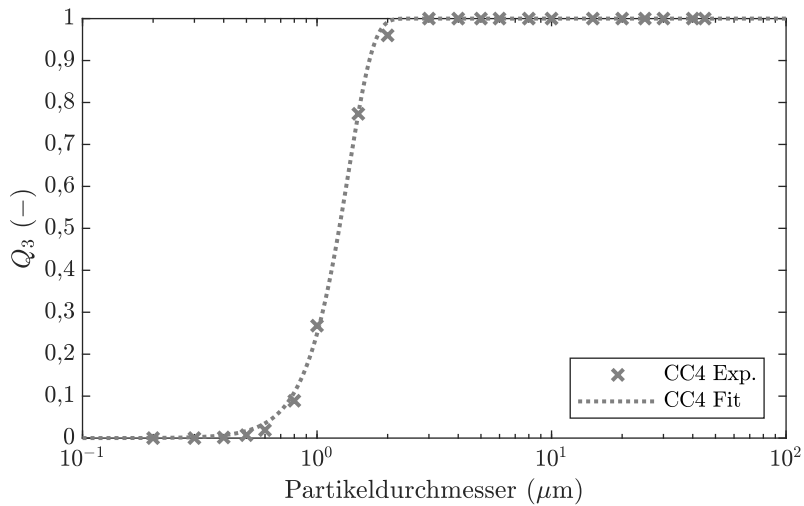


Abbildung A.1.: Experimentell bestimmte Partikelgrößenverteilung CC4 mit dazugehöriger Anpassungsfunktion.

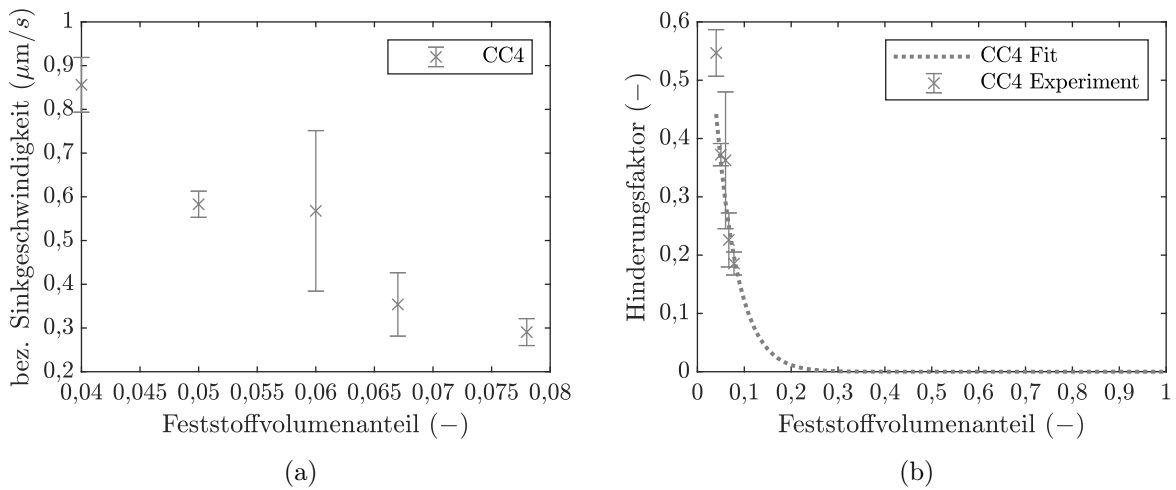


Abbildung A.2.: Experimentelle Ergebnisse CC4 zur Materialcharakterisierung der Sinkgeschwindigkeit und des Sedimentationshinderungsfaktor in Abhängigkeit des Feststoffvolumenanteils.

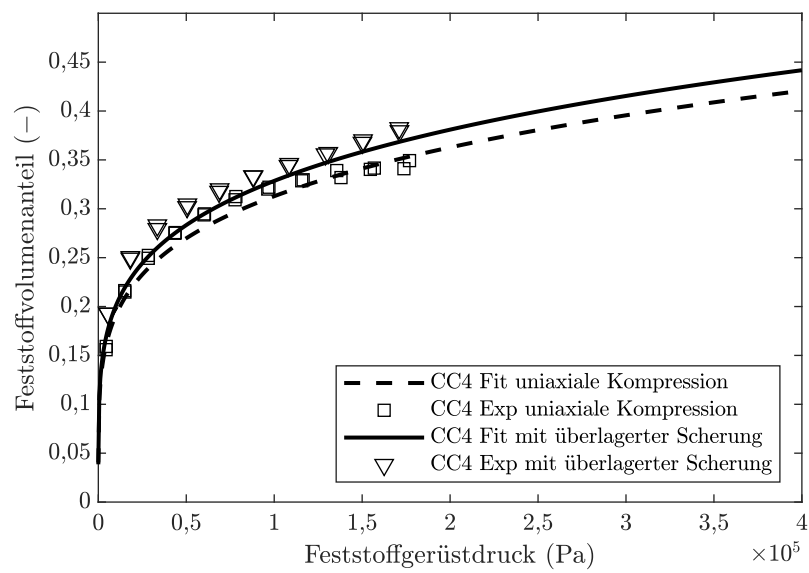


Abbildung A.3.: Experimentell bestimmte Sedimentkonsolidierungsfunktion für CC4.

### A.3. Validierung Degritting: Prozess- und Materialparameter

Tabelle A.2.: Geometrie der Dekantierzentrifuge zur experimentellen Untersuchung beim Degritting.

Parameter	Dimension
Länge Zylinder	1,196 m
Länge Konus	0,627 m
Trommelradius	0,305 m
Konuswinkel	10°
Teichtiefe	89 mm

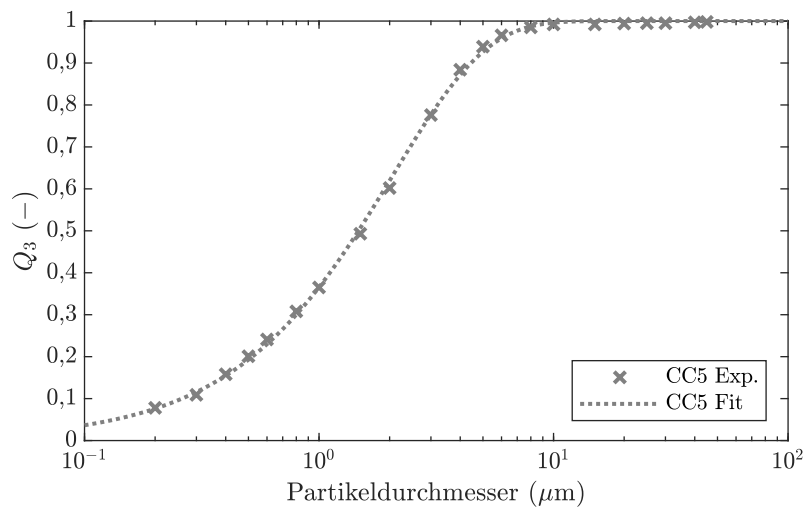


Abbildung A.4.: Experimentell bestimmte Partikelgrößenverteilung CC5 mit dazugehöriger Anpassungsfunktion.



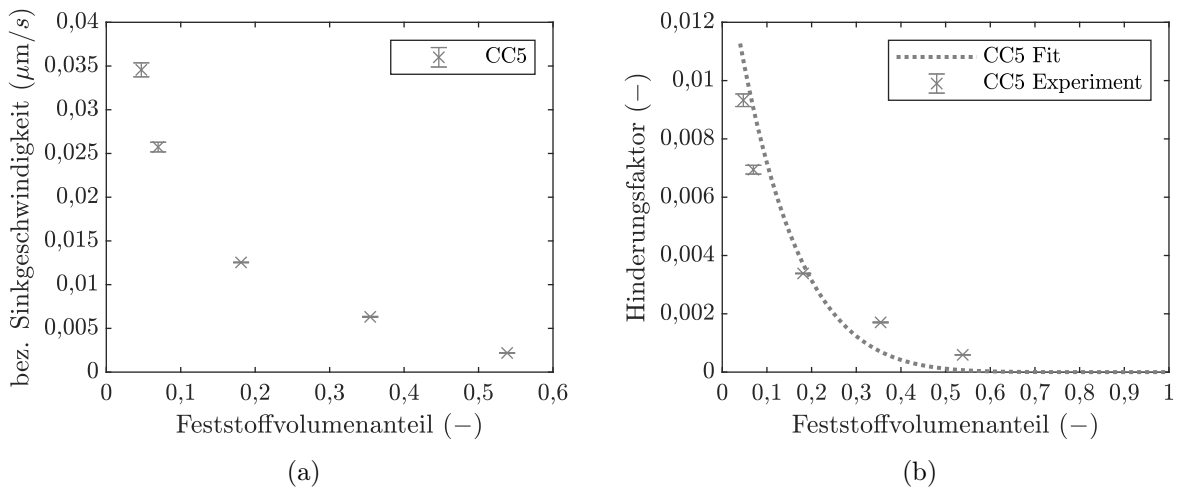


Abbildung A.5.: Experimentelle Ergebnisse CC5 zur Materialcharakterisierung der Sinkgeschwindigkeit und des Sedimentationshinderungsfaktor in Abhängigkeit des Feststoffvolumenanteils.

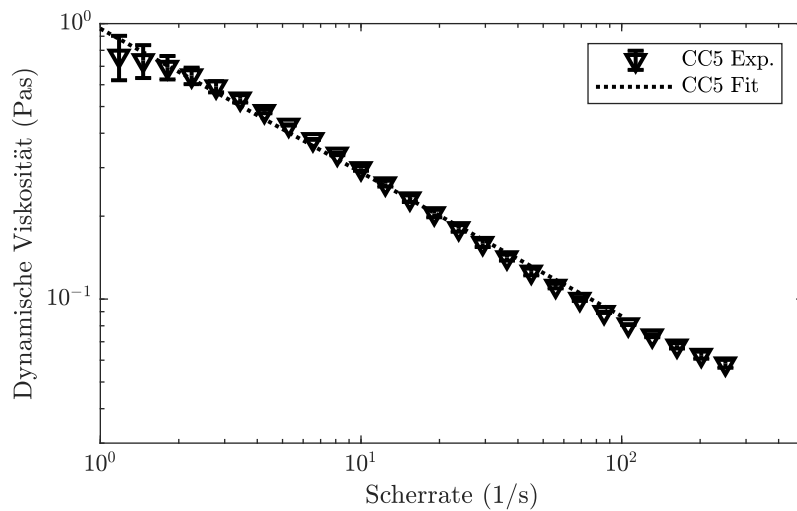


Abbildung A.6.: Dynamische Viskosität von CC5 als Funktion der Scherrate.