

Modellierung und Simulation eines Biogasreaktors

Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades  
der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich 12  
der Johann Wolfgang Goethe-Universität  
in Frankfurt am Main

von

Ivo Muha

aus Ljubljana (Slowenien)

Frankfurt 2012

D30

vom Fachbereich 12 der

Johann Wolfgang Goethe-Universität als Dissertation angenommen.

Dekan: Prof. Dr. Tobias Weth

Gutachter: Prof. Dr. Gabriel Wittum  
Zweitgutachter: Prof. Dr. Gillian Queisser

Datum der Disputation: 22.11.2012

# **MODELLIERUNG UND SIMULATION EINES BIOGASREAKTORS**

## **Danksagung**

Für die Betreuung und die Förderung dieser Arbeit möchte ich mich ganz besonders bei meinem Betreuer Prof. Dr. Gabriel Wittum bedanken. Ohne Ihn wäre diese Arbeit in dieser Form nicht möglich gewesen.

Für zahlreiche Diskussionen zu diversen Themen möchte ich mich vor allem bei Dr. Arne Nägel, Dr. Alfio Grillo, Dr. Michael Heisig, Dr. Dmitriy Logashenko, Alexander Heusel, Mandy Schönberg, Antje Rademacher und Simon Zielonka bedanken.

Von ganzem Herzen danke ich Sabine Stichel für ihre außerordentliche Unterstützung sowohl bei der Korrektur der Arbeit als auch bei der Diskussion zu diversen Problemen.

Weiterhin bedanke ich mich bei der gesamten Arbeitsgruppe des Goethe-Zentrums für Wissenschaftliches Rechnen für die angenehme Arbeitsatmosphäre.

Schließlich danke ich noch dem Bundesministerium für Forschung und Bildung für die Finanzierung meiner Arbeit (Fördernummer: 03SF0349D).

## **Abstrakt**

Die anaerobe Fermentation beschreibt den Abbau organischen Materials unter Ausschluss von Sauerstoff und setzt sich aus vier Prozessphasen (Hydrolyse, Acidogenese, Acetogenese und Methanogenese) zusammen. Im Rahmen dieser Arbeit konnte die Aufteilung dieser vier Prozessphasen auf die beiden Stufen eines zweistufigen zweiphasigen Biogas-Reaktors genau bestimmt werden. Die Aufteilung ist von entscheidender Bedeutung für zukünftige Arbeiten, da dadurch genau festgelegt werden kann, welche Stoffe bei den Messungen und bei der Modellierung berücksichtigt werden müssen.

Im Jahre 2002 wurde von der IWA Taskgroup das ADM1-Modell, welches alle vier Prozessphasen der anaeroben Fermentation berücksichtigt, veröffentlicht. In der vorliegenden Arbeit wird ein räumlich aufgelöstes Modell für die anaerobe Fermentation erarbeitet, in dem das ADM1-Modell mit einem Strömungsmodell gekoppelt wird. Anschließend wird ein reduziertes Simulationsmodell für acetoklastische Methanogenese in einem zweistufigen zweiphasigen Biogasreaktor erstellt. Anhand von Messdaten wird gezeigt, dass der Abbau von Essigsäure zu Methan innerhalb des Reaktors durch das Simulationsmodell gut wiedergegeben werden kann. Anschließend wird das validierte Modell verwendet um Regeln für eine optimale Steuerung des Reaktors herzuleiten und weiterhin wird mit Hilfe der lokalen Methanproduktion die Effektivität des Reaktors bestimmt. Die erlangten Informationen können verwendet werden, um den Biogas-Reaktor zu optimieren.

## **Stichworte**

Mathematische Modellierung, Methanogenese, zweiphasen Biogasreaktor, zweistufen Biogasreaktor, anaerobe Fermentation, ADM1

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>9</b>
<b>2</b>	<b>Mathematische Grundlagen</b>	<b>11</b>
2.1	Diskretisierung im Ort . . . . .	12
2.1.1	Variationsformulierung . . . . .	12
2.1.2	Ritz-Galerkin-Verfahren . . . . .	18
2.1.3	Finite-Elemente Verfahren . . . . .	20
2.1.4	Finite-Volumen Methode . . . . .	22
2.2	Diskretisierung in der Zeit . . . . .	25
2.3	Numerische Lösung von nichtlinearen Gleichungssystemen . . . . .	27
2.3.1	Newtonverfahren . . . . .	28
2.3.2	Linienuche . . . . .	29
2.4	Numerische Lösung von großen linearen Gleichungssystemen mit Mehrgitterverfahren . . . . .	29
2.4.1	Iterative Verfahren . . . . .	31
2.4.2	Mehrgitterverfahren . . . . .	33
2.5	Verfahren zur Parameterschätzung . . . . .	38
2.5.1	Fitnessfunktion . . . . .	38
2.5.2	Minimierungsproblem mit Nebenbedingungen . . . . .	39
2.5.3	Numerische Optimierung . . . . .	39
<b>3</b>	<b>Erneuerbare Energien</b>	<b>41</b>
3.1	Politische Förderung erneuerbarer Energien in Deutschland . . . . .	44
3.2	Biogasanlagen in Deutschland . . . . .	46
3.3	Pathogene Krankheitserreger in Biogasanlagen . . . . .	47
3.4	Biogasanlage Semd . . . . .	48
<b>4</b>	<b>Grundlagen der Biogaserzeugung</b>	<b>52</b>
4.1	Eigenschaften von Biogas . . . . .	52
4.2	Anaerobe Fermentation . . . . .	53
4.3	Einflussfaktoren auf die anaerobe Fermentation . . . . .	56
4.4	Einheiten und Schreibweisen . . . . .	60
4.5	Gasausbeuten . . . . .	61

4.6	Verfahrenstechniken . . . . .	63
4.6.1	Einphasige Verfahren . . . . .	63
4.6.2	Zweiphasige Verfahren . . . . .	64
<b>5</b>	<b>Modell</b>	<b>68</b>
5.1	Notation . . . . .	68
5.2	Strömungsmodell . . . . .	71
5.2.1	Drei-Phasen-Strömungsmodell für zusammengesetzte Stoffe . . . . .	72
5.2.2	Zwei-Phasen-Strömungsmodell für zusammengesetzte Stoffe . . . . .	75
5.3	Modell für den anaeroben Abbau . . . . .	78
5.3.1	ADM1-Modell . . . . .	79
5.3.2	Hemmterme im ADM1-Modell . . . . .	90
5.3.3	Schwächen und Verbesserungen des ADM1-Modells . . . . .	92
5.4	Löslichkeit von Gasen . . . . .	95
5.5	Kopplung des Strömungsmodells mit dem ADM1-Modell . . . . .	96
5.6	Simulationsmodelle . . . . .	99
5.6.1	CST-Reaktor . . . . .	99
5.6.2	Zwei-Phasen-Strömungsmodell für acetoklastische Methanogenese im Downflow-Methanreaktor . . . . .	99
<b>6</b>	<b>Simulationssoftware</b>	<b>103</b>
6.1	UG . . . . .	103
6.2	Erweiterung der Numproc „CPLDISC“ . . . . .	104
6.3	Implementierung eines Quasi-Newtonverfahrens mit Liniensuche zur Parameteridentifizierung . . . . .	111
<b>7</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>113</b>
7.1	Einteilung der biologischen Phasen auf die Reaktorteile . . . . .	113
7.1.1	Aufbau der Versuchsanlagen . . . . .	114
7.1.2	Ergebnisse . . . . .	115
7.1.3	Diskussion . . . . .	118
7.2	Simulation der Strömung und der acetoklastischen Methanogenese im Downflow-Methanreaktor . . . . .	118
7.2.1	Versuchsaufbau und Versuchsführung . . . . .	119
7.2.2	Simulationsmodell . . . . .	119
7.2.3	Rechengebiet, Anfangs- und Randbedingungen des Simulationsmodells	121
7.2.4	Koordinatentransformation . . . . .	122
7.2.5	Parameterbestimmung . . . . .	122
7.2.6	Ergebnisse . . . . .	123
7.2.7	Diskussion . . . . .	130
<b>8</b>	<b>Diskussion und Ausblick</b>	<b>132</b>

<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>I</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>II</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>IV</b>



# Kapitel 1

## Einleitung

Weltweit stammt der größte Anteil der vom Menschen nutzbaren Energie aus fossilen Energiequellen. Dabei hat die Nutzung fossiler Energieträger viele Nachteile: Beispielsweise werden bei der Verbrennung von fossilen Energieträgern (z.B. Öl oder Kohle) klimaschädliche Gase, wie Kohlendioxid, in großen Mengen freigesetzt. Weiterhin werden viele fossile Rohstoffe neben der Verwertung in Kraftwerken auch von der Industrie zu anderen Zwecken verwendet. Momentan wird weltweit täglich in etwa die Menge Erdöl verbraucht, welche erdgeschichtlich in 1000 Jahren gebildet wurde und somit ist absehbar, dass der Energieträger Erdöl irgendwann erschöpft sein wird. Die Nutzung von fossilen Energieträgern in dieser Größenordnung kann demnach weder nachhaltig noch klimafreundlich sein [Maaß, 2009].

Um die Energieversorgung langfristig zu gewährleisten, muss eine nachhaltige Nutzung verschiedener Energiequellen aufgebaut werden. In diesem Zusammenhang sind die Erforschung und der Aufbau von erneuerbaren Energiequellen essentiell. In [Chynoweth et al., 2001] wurde gezeigt, dass dabei insbesondere Biogasanlagen eine wichtige Rolle spielen. In Biogasanlagen entsteht aus Biomasse durch anaerobe Fermentation nach insgesamt vier Prozessschritten der Energieträger Biogas, dessen Hauptbestandteile Methan und Kohlendioxid sind. Bei der Verbrennung von Biogas wird die gleiche Menge Kohlendioxid freigesetzt, welche während des Wachstums der Biomasse gebunden wurde. In diesem Zusammenhang spricht man von klimafreundlicher Gewinnung eines Energieträgers.

Aktuelles Ziel der Forschung ist es, die Biogausausbeute zu optimieren. Neben der Biogasanlage selbst spielen dabei viele andere Faktoren eine Rolle. In [Amon et al., 2006b] wurde beispielsweise die Auswirkung der Zusammensetzung der Biomasse auf die Biogausausbeute untersucht. Weiterhin wurden geeignete Fruchtfolgen zur nachhaltigen Gewinnung von Energiepflanzen in [Amon et al., 2006a] untersucht. Typischerweise wird die Biomasse nur an wenigen Tagen im Jahr geerntet und muss deshalb meist über einen längeren Zeitraum im Silo gelagert werden. In [Muha et al., 2009] wurde ein Softwaretool vorgestellt, welches die Einlagerung der Energiepflanzen in Horizontalsilos erleichtert.

Um ein besseres Verständnis der anaeroben Fermentation zu erwerben wurde im Jahre 2002 ein umfangreiches Modell (ADM1), welches die wesentlichen Schritte der anaeroben Fermentation umfasst, veröffentlicht [Batstone et al., 2002]. Seither wurde das ADM1 Modell

verwendet, um die anaerobe Fermentation in Biogasanlagen zu untersuchen und zu optimieren [Blumensaat und Keller, 2005]. In [Wett et al., 2007] wurden Simulationsergebnisse verwendet, um den Aufbau der Biogasanlage zu optimieren. Die Co-Fermentation von Abwasser einer Olivenölfabrik und der festen organischen Abfälle wurde in [Boubaker und Ridha, 2008] untersucht. Weiterhin haben [Wichern et al., 2009] und [Thamsiroj und Murphy, 2011] mit Hilfe des ADM1 Modells die Fermentation von Grassilage in einer zweistufigen Biogasanlage modelliert. Ein wesentliches Problem des ADM1 Modells ist jedoch, dass weder die Strömung der Prozessflüssigkeit noch räumliche Variabilitäten der Substanzen innerhalb des Reaktors modelliert werden (das ADM1 Modell ist ein rein dynamisches Modell).

Das Augenmerk dieser Arbeit liegt auf der Entwicklung eines mathematischen Modells, welches nicht nur den anaeroben Abbau, sondern gleichzeitig auch die Strömung der Prozessflüssigkeit und die räumlichen Variabilitäten der wichtigsten Substanzen berücksichtigt. Das entwickelte Simulationsmodell wird dann verwendet, um die Methanbildung aus Essigsäure in der zweiten Stufe einer Biogasanlage zu simulieren. Die erzielten Ergebnisse können schließlich interpretiert werden, um eine Aussage über die Effektivität des Reaktors und über die Verteilung der vier Prozessphasen der anaeroben Fermentation auf die beiden Stufen der betrachteten Biogasanlagen zu treffen. Weiterhin werden die erzielten Simulationsdaten verwendet, um eine optimale hydraulische Verweilzeit für die Prozessflüssigkeit in Abhängigkeit von ihrer Zusammensetzung zu bestimmen und damit eine optimale Steuerung des Reaktors zu ermöglichen.

Der Aufbau dieser Arbeit ist wie folgt: In Kapitel 2 werden mathematische Grundlagen erläutert. Sollten beim Leser auf diesem Gebiet bereits ausreichende Kenntnisse vorhanden sein, kann dieses Kapitel bei der Lektüre übersprungen werden. In Kapitel 3 werden erneuerbare Energien mit fossilen Energien verglichen, sowie die Förderung erneuerbarer Energien mit speziellem Fokus auf Biogasanlagen in Deutschland erörtert. Kapitel 4 befasst sich mit den wesentlichen Grundlagen der anaeroben Fermentation und der Biogaserzeugung. Schließlich wird in Kapitel 5 das ADM1 Modell ausführlich erläutert und mit einem Zwei- bzw. Drei-Phasen-Strömungsmodell gekoppelt. Weiterhin wird das Simulationsmodell, welches als Grundlage für alle Berechnungen verwendet wurde, eingeführt. Kapitel 6 befasst sich mit den Softwaretools, welche zur Simulation verwendet wurden. Dabei wird ebenfalls erläutert, welche Tools im Rahmen dieser Arbeit implementiert bzw. erweitert wurden. Schließlich werden in Kapitel 7 die erzielten Ergebnisse dargestellt und diskutiert. Zum Schluss wird in Kapitel 8 ein Ausblick über zukünftige Arbeiten gegeben.

# Kapitel 2

## Mathematische Grundlagen

Dieses Kapitel behandelt die wichtigsten Verfahren, um die Modellgleichungen aus Kapitel 5 zu lösen. Die dargestellten mathematischen Grundlagen sind in großen Teilen an die Werke [Hackbusch, 1986], [Hackbusch, 1989], [Reinhardt, 2008], [Deuflhard und Bornemann, 2002], [Deuflhard und Hohmann, 1991] [Ortega und Rheinboldt, 1987], [Hackbusch, 1991], [Kanzow, 2005] und [Schäfer, 2004] angelehnt.

Sei  $r$  die Anzahl der Gleichungen,  $\mathbf{u} := (u^1, u^2, \dots, u^r)$  der Lösungsvektor und  $\Omega$  das Gebiet auf dem  $\mathbf{u}$  gesucht wird. Dann sieht die allgemeine Differentialgleichung zweiter Ordnung im Ort und erster Ordnung in der Zeit mit Dirichlet-Randbedingungen folgendermaßen aus

$$\begin{aligned} \mathbf{L}\mathbf{u}(\mathbf{x}) &= \mathbf{f}(\mathbf{x}) && \text{für } \mathbf{x} \in \Omega \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}) &= \mathbf{g}(\mathbf{x}) && \text{für } \mathbf{x} \in \partial\Omega. \end{aligned} \quad (2.0.1)$$

Jede Zeile  $i$  der Gleichung 2.0.1 hat dabei die Gestalt

$$L^i u^i(\mathbf{x}) = f^i(t, \mathbf{u}, \mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \Omega,$$

mit

$$L^i = \frac{\partial(m_p^i(\mathbf{u}) \cdot u^i)}{\partial t} + \sum_{\alpha \leq |2|} a_\alpha^i(t, \mathbf{u}, \mathbf{x}) \frac{\partial^\alpha}{\partial x_\alpha}. \quad (2.0.2)$$

Die Funktion  $m_p^i$  hängt hierbei von der Phase des Stoffes  $u^i$  ab (vgl. Kapitel 5). Da das Problem (2.0.1) im Allgemeinen analytisch nicht lösbar ist, wird es diskretisiert, d.h. das Problem wird zu einem endlich dimensional Problem vereinfacht. Ausgehend von einem Gitter mit  $n$  inneren Punkten hat das diskrete Problem in jedem Zeitschritt insgesamt  $N = n \cdot r$  Unbekannte. Die Diskretisierung im Ort wird in Abschnitt 2.1 behandelt. Die Diskretisierung in der Zeit in Abschnitt 2.2. Löser für das diskrete Problem werden in den Abschnitten 2.3 und 2.4 erläutert. Weiterhin kann es notwendig sein zusätzlich zu der Lösung  $\mathbf{u}$  einige Prozessparameter zu bestimmen (vgl. Kapitel 5). Methoden zur Bestimmung der Prozessparameter werden in Abschnitt 2.5 beschrieben.

## 2.1 Diskretisierung im Ort

Das Ziel der Diskretisierung im Ort ist es, einen kontinuierlichen Differentialoperator  $L$  mit einem diskreten Differentialoperator  $L_N$  anzunähern. Im Prinzip wird dabei ein unendlich dimensionales Problem durch ein endlich dimensionales Problem approximiert. Das neue vereinfachte Problem lässt sich anschließend mit den in Kapitel 2.3 und 2.4 vorgestellten Verfahren lösen. Wir betrachten Gleichung (2.0.1) mit nur einer unbekanntem Funktion  $u$  ( $r = 1$ ) und Dirichlet Randbedingungen auf  $\Omega$ , d.h. die Anzahl der Unbekannten des diskreten Problems entspricht gerade der Anzahl der inneren Gitterpunkte ( $N = n$ ). Die Gleichung hat folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} Lu(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega \\ u(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \partial\Omega \end{aligned} \quad (2.1.1)$$

mit

$$L = \sum_{\alpha \leq |2|} a_\alpha(\mathbf{x}) D^\alpha. \quad (2.1.2)$$

Hierbei ist  $\alpha$  ein Multiindex und  $D^\alpha := \partial^\alpha / \partial x_\alpha$ .

Wir nehmen stets an, dass  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  ein beschränktes Gebiet ist. Weiterhin nehmen wir an, dass  $a_\alpha, g \in C^\infty(\overline{\Omega})$  und  $a_{1,1}(\mathbf{x}) > 0 \forall \mathbf{x} \in \Omega$ . Da  $\Omega$  beschränkt ist, folgt, dass  $a_\alpha$  und  $g$  auf  $\overline{\Omega}$  beschränkt sind.

In diesem Abschnitt betrachten wir Konvektions-Diffusions Gleichungen, dabei beschreibt der Hauptteil von  $L$

$$\sum_{\alpha=|2|} a_\alpha(x) D^\alpha \quad (2.1.3)$$

die Diffusion, der Teil mit Ableitungen erster Ordnung

$$\sum_{\alpha=1} a_\alpha(x) D^\alpha \quad (2.1.4)$$

beschreibt die Konvektion und die linearen Terme in  $u$  beschreiben Reaktionsterme. Die rechte Seite  $f$  kann als Quelle bzw. Senke interpretiert werden.

Im Folgenden werden die zwei wichtigen Diskretisierungsverfahren, das Finite-Elemente Verfahren und das Finite-Volumen Verfahren, welche sich aus der Variationsformulierung ergeben, genauer erläutert. Beide Verfahren liefern ausgehend von einem kontinuierlichen Differentialoperator  $L$  einen diskreten Differentialoperator  $L_N$ . Weitere Verfahren sowie weitere Informationen können beispielsweise in [Hackbusch, 1986], [Gilbarg und Trudinger, 1998], [Gilbert, 1974], [Gilbert und Weinacht, 1976], [Michev, 1996], [Bey, 1997], [Hackbusch, 1989] und [Dziuk, 2010] nachgeschlagen werden.

### 2.1.1 Variationsformulierung

Klassische Verfahren, wie z.B. das Differenzen Verfahren, lösen die Gleichung  $Lu = f$  punktweise. Das kann schon bei einfachen Problemen dazu führen, dass eine klassische Lösung

nicht existiert. Betrachten wir beispielsweise ein Gebiet  $\Omega$  (vgl. Abbildung 2.1.1) mit einer einspringenden Ecke. Der Eckpunkt von  $\Omega$  hat die Koordinaten  $(0,0)$  und der  $3/4$  Kreis hat einen Radius von 1. Wir suchen eine Lösung der Poisson-Gleichung (in Polarkoordinaten)

$$-\Delta u = 0 \tag{2.1.5}$$

mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} u(r, \phi) &= 0 & \forall (r, \phi) \in \partial\Omega_2 \\ \frac{\partial u(r, \phi)}{\partial r} &= \frac{2}{3} \sin(2/3 \cdot \phi) & \forall (r, \phi) \in \partial\Omega_1. \end{aligned} \tag{2.1.6}$$

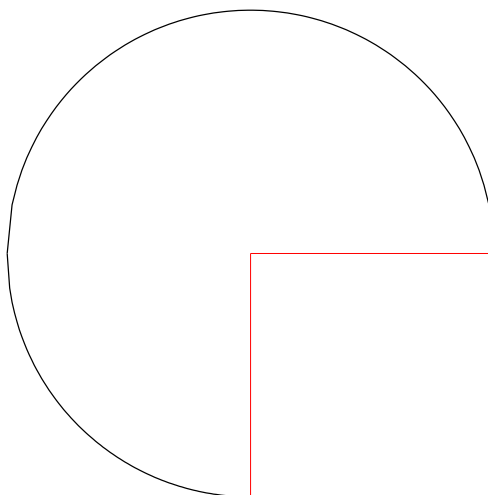
Mit dem Ansatz

$$u(r, \phi) = r^a \cdot \sin(b\phi) \tag{2.1.7}$$

folgt sofort, dass  $a = b = 2/3$  gelten muss. Die Lösung lautet schließlich

$$u(r, \phi) = r^{2/3} \sin((2/3 \cdot \phi)). \tag{2.1.8}$$

Der Gradient von  $u$  hat demnach eine Singularität im Ursprung. Deshalb ist  $u$  keine zulässige klassische Lösung des Problems. Das Beispiel zeigt, dass es schon einfache Probleme gibt, in



$\partial\Omega_1$  ———  $\partial\Omega_2$  ———

Abbildung 2.1.1: Gebiet  $\Omega$  mit einspringender Ecke.

denen eine klassische Lösung nicht existiert. Um dieses Problem zu lösen, sucht man stattdessen nach der sogenannten schwachen Lösung. Die schwache Lösung löst die Differentialgleichung nicht in der Maximumsnorm (punktweise) sondern in der  $W^{0,2}$ -Norm.

In diesem Abschnitt betrachten wir die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} Lu(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega \\ u(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \partial\Omega \end{aligned} \tag{2.1.9}$$

auf  $\Omega$ . Wir nehmen stets an, dass  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  ein beschränktes Gebiet ist. Der Differentialoperator  $L$  hat folgende Gestalt

$$L = \sum_{|\alpha| \leq 1} \sum_{|\beta| \leq 1} (-1)^{|\beta|} D^\beta a_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) D^\alpha. \quad (2.1.10)$$

Hierbei sind  $\alpha$  und  $\beta$  Multiindizes. Die Ordnung von  $L$  ist 2.

Zunächst wollen wir die Variationsformulierung herleiten, dafür benötigen wir die Definition des Sobolew-Raums.

**Definition 2.1.1. Sobolew-Raum** Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  offen, dann ist der **Sobolew-Raum**  $W^{k,2}(\Omega)$  ein vollständiger normierter Vektorraum (Banachraum) mit

$$W^{k,2}(\Omega) = \{u : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid \|u\|_{W^{k,2}} < \infty\}, \quad (2.1.11)$$

hierbei ist die Norm  $\|\cdot\|_{W^{k,2}}$  definiert durch

$$\|u\|_{W^{k,2}} = \sqrt{\sum_{|\alpha| \leq k} \|D^\alpha u\|_{W^{0,2}}^2}. \quad (2.1.12)$$

Weiterhin ist die  $W^{0,2}$ -Norm  $\|\cdot\|_{W^{0,2}}$  definiert durch

$$\|u\|_{W^{0,2}} = \sqrt{\int_{\Omega} |u(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}}. \quad (2.1.13)$$

Der Sobolew-Raum  $W^{k,2}(\Omega)$  beinhaltet alle  $k$ -mal schwach differenzierbaren Funktionen auf  $\Omega$ .  $W^{k,2}(\Omega)$  wird durch folgendes Skalarprodukt zum Hilbertraum.

**Definition 2.1.2.** Sei  $u, v \in W^{k,2}(\Omega)$  dann ist das Skalarprodukt  $\langle \cdot, \cdot \rangle_k$  definiert durch

$$\langle u, v \rangle_k = \sum_{|\alpha| \leq k} \langle D^\alpha u, D^\alpha v \rangle_0, \quad (2.1.14)$$

hierbei ist  $\langle \cdot, \cdot \rangle_0$  gegeben durch

$$\langle u, v \rangle_0 = \int_{\Omega} u \cdot v \, d\mathbf{x}. \quad (2.1.15)$$

*Bemerkung 2.1.1.* Die Norm (2.1.12) wird durch das Skalarprodukt (2.1.14) induziert, d.h. es gilt

$$\|u\|_{W^{k,2}} = \sqrt{\langle u, u \rangle_k}. \quad (2.1.16)$$

Der Raum  $W^{0,2}$  kann auch mit  $L^2$  abgekürzt werden und enthält alle quadrat-integrierbaren Funktionen.

Eine Beziehung zwischen  $W^{k,2}(\Omega)$  und  $C^{s,2}(\Omega)$  stellt das Lemma von Sobolew her.

**Satz 2.1.1. Lemma von Sobolew** Es gilt  $W^{k,2}(\mathbb{R}^d) \subset C^{s,2}(\mathbb{R}^d)$  für  $s \in \mathbb{N}_0$ , falls  $k > s + d/2$ .

*Beweis.* Siehe [Hackbusch, 1986] Abschnitt 6.2. □

Bevor wir die Variationsformulierung aufschreiben können, benötigen wir noch den Sobolew-Raum mit homogenen Dirichlet-Randwerten:

**Definition 2.1.3.** Der Sobolew-Raum  $W_0^{k,2}(\Omega)$  mit homogenen Dirichlet-Randwerten ist gegeben durch

$$W_0^{k,2} := \{u \in W^{k,2}(\Omega) \mid D^\alpha u(\mathbf{x}) = 0 \ \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega\}. \quad (2.1.17)$$

Hierbei ist  $\alpha$  ein Multiindex und  $D^\alpha := \partial^\alpha / \partial x_\alpha$ .

Um die Notation zu vereinfachen, schreiben wir  $H^k(\Omega)$  für  $W^{k,2}(\Omega)$  bzw.  $H_0^k(\Omega)$  für  $W_0^{k,2}(\Omega)$  mit  $k \in \mathbb{N}$ .

Sei  $u \in C_0^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$  eine klassische Lösung von (2.1.9) mit homogenen Dirichlet Randbedingungen. Wir bilden das Skalarprodukt von  $u$  mit einem beliebigen  $v \in C_0^\infty(\Omega)$

$$\langle Lu, v \rangle_0 = \int_\Omega Lu \cdot v \, d\mathbf{x} = \int_\Omega \sum_{|\alpha| \leq 1} \sum_{|\beta| \leq 1} (-1)^{|\beta|} D^\beta a_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) D^\alpha u \cdot v \, d\mathbf{x}. \quad (2.1.18)$$

Nun wird partiell integriert, dabei fällt das Randintegral wegen  $v \in C_0^\infty(\Omega)$  weg

$$\int_\Omega \sum_{|\alpha| \leq 1} \sum_{|\beta| \leq 1} (-1)^{|\beta|} D^\beta a_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) D^\alpha u \cdot v \, d\mathbf{x} = \int_\Omega \sum_{|\alpha| \leq 1} \sum_{|\beta| \leq 1} a_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) D^\alpha u \cdot D^\beta v \, d\mathbf{x}. \quad (2.1.19)$$

Schließlich kommen wir auf folgende Gleichung

$$\int_\Omega \sum_{|\alpha| \leq 1} \sum_{|\beta| \leq 1} a_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) D^\alpha u \cdot D^\beta v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_\Omega f(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad \forall v \in C_0^\infty(\Omega). \quad (2.1.20)$$

Jetzt definieren wir die Bilinearform

$$l(u, v) := \int_\Omega \sum_{|\alpha| \leq 1} \sum_{|\beta| \leq 1} a_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) D^\alpha u \cdot D^\beta v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad (2.1.21)$$

und das Funktional

$$F(v) := \int_\Omega f(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad (2.1.22)$$

und schließlich lautet die „schwache Formulierung“ oder Variationsformulierung wie folgt

$$\text{Suche } u \in H_0^1(\Omega) \quad \text{mit} \quad l(u, v) = F(v) \quad \forall v \in C_0^\infty(\Omega). \quad (2.1.23)$$

Betrachten wir nun das Problem (2.1.1) mit inhomogenen Dirichletrandbedingungen. Durch eine Umskalierung der rechten Seite kann das Problem auf ein Problem mit homogenen Dirichletrandbedingungen umgewandelt werden.

Sei  $u_0 \in H^1(\Omega)$ , so dass  $u_0|_{\partial\Omega} = g$ . Anschließend lautet die „schwache Formulierung“ oder Variationsformulierung wie folgt

$$\text{Suche } u_1 \in H_0^1(\Omega) \quad \text{mit} \quad l(u_1, v) = \tilde{F}(v) = F(v) - l(u_0, v) \quad \forall v \in C_0^\infty(\Omega). \quad (2.1.24)$$

Für die Lösung  $u$  gilt dann

$$u = u_1 + u_0. \quad (2.1.25)$$

*Bemerkung 2.1.2.* Ist  $u \in C^2(\Omega)$  eine klassische Lösung des Problems (2.1.1), so ist  $u$  auch Lösung der Variationsformulierung.

Wenn eine Lösung  $u$  existiert, mit  $u \in H_0^1(\Omega)$  aber  $u \notin C^2(\Omega)$ , dann heißt  $u$  „schwache“ Lösung. Durch die Variationsformulierung wird der Raum, aus dem die Lösungen stammen dürfen, um die „schwach“ differenzierbaren Funktionen erweitert.

*Bemerkung 2.1.3.* Da  $C_0^\infty(\Omega)$  dicht in  $H_0^1(\Omega)$  liegt, ist die Variationsformulierung äquivalent zu

$$\text{Suche } u \in H_0^1(\Omega) \quad \text{mit} \quad l(u, v) = \tilde{F}(v) = F(v) - l(u_0, v) \quad \forall v \in H_0^1(\Omega). \quad (2.1.26)$$

Nun wollen wir die Existenz und Eindeutigkeit untersuchen. Dafür muss die Bilinearform  $l$  näher untersucht werden. Sei  $V$  ein Hilbertraum. Wir betrachten allgemeiner das Problem

$$\text{Suche } u \in V \quad \text{mit} \quad l(u, v) = F(v) \quad \forall v \in V. \quad (2.1.27)$$

**Definition 2.1.4.** Eine Bilinearform  $l$  heißt **stetig** oder **beschränkt**, wenn

$$|l(u, v)| \leq C_S \|u\|_V \|v\|_V \quad \forall u, v \in V. \quad (2.1.28)$$

**Definition 2.1.5.** Eine Bilinearform  $l$  heißt **V-Elliptisch**, wenn sie auf  $V \times V$  stetig ist und

$$l(u, u) \geq C_E \|u\|_V^2 \quad \forall u \in V \text{ mit } C_E > 0. \quad (2.1.29)$$

**Satz 2.1.2.** Zu einer stetigen Bilinearform  $l$  gehört ein eindeutiger Operator  $L_G : V \rightarrow V'$ , so dass

$$l(u, v) = \langle L_G u, v \rangle_{V' \times V}. \quad (2.1.30)$$

*Beweis.* Siehe [Hackbusch, 1986] Abschnitt 6.5. □

**Definition 2.1.6.** Eine Bilinearform  $l$  heißt **symmetrisch**, wenn gilt

$$l(u, v) = l(v, u) \quad \forall v, u \in V. \quad (2.1.31)$$

*Bemerkung 2.1.4.* Ist die Bilinearform  $l$  symmetrisch, so ist auch der zugehörige Operator  $L_G$  symmetrisch.

**Definition 2.1.7.** Das lineare Funktional  $F_v \in V'$  ist für jedes  $v \in V$  definiert durch

$$F_v(u) := \langle u, v \rangle_V. \quad (2.1.32)$$



Die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung  $u$  des Variationsproblems (2.1.27) zeigt der folgende Satz.

**Satz 2.1.3. Lemma von Lax-Milgram** Sei die Bilinearform  $l$   $V$ -elliptisch und  $F \in V'$  beschränkt. Dann ist der zu  $l$  eindeutig zugehörige Operator  $L_G$  invertierbar und das Variationsproblem (2.1.27) hat genau eine Lösung  $u := L_G^{-1}F$  mit

$$\|u\|_V \leq \frac{1}{C_E} \|F\|_{V'}. \quad (2.1.33)$$

Sei weiterhin die Bilinearform  $l$  symmetrisch, dann ist  $u$  die eindeutige Lösung des Minimierungsproblems

$$\text{Suche } u \in V \quad \text{mit} \quad J(u) \leq J(v) \quad \forall v \in V, \quad (2.1.34)$$

wobei

$$J(v) := l(v, v) - 2F(v). \quad (2.1.35)$$

*Beweis.* Siehe [Hackbusch, 1986] Abschnitt 6.5. □

Satz 2.1.3 zeigt, dass das Problem (2.1.27) unter bestimmten Voraussetzungen äquivalent zum Minimierungsproblem ist.

Nun wollen wir Satz 2.1.3 beispielhaft auf folgendes Problem anwenden

$$\begin{aligned} Lu(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega \\ u(\mathbf{x}) &= 0 & \mathbf{x} \in \partial\Omega \end{aligned} \quad (2.1.36)$$

mit  $\Omega = (0, 1)^2$ . Der Differentialoperator  $L$  hat dabei die Gestalt

$$L = \sum_{|\alpha|=1} \sum_{|\beta|=1} (-1)^{|\beta|} D^\beta a_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) D^\alpha. \quad (2.1.37)$$

Unter folgenden Voraussetzungen

- $a_{\alpha\beta} \in L^\infty(\Omega)$
- $a_{\alpha\beta} = a_{\beta\alpha}$
- $f \in L^2(\Omega)$

sind alle Bedingungen von Satz 2.1.3 erfüllt und damit hat das zum Problem (2.1.36) gehörige Variationsproblem

$$\text{Suche } u \in H_0^1(\Omega) \quad \text{mit} \quad l(u, v) = F(v) \quad \forall v \in H_0^1(\Omega) \quad (2.1.38)$$

mit

$$l(u, v) = \int_{\Omega} \sum_{|\alpha|=1} \sum_{|\beta|=1} a_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) D^\alpha u \cdot D^\beta v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad (2.1.39)$$

und

$$F(v) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x})v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad (2.1.40)$$

genau eine Lösung.

*Bemerkung 2.1.5.* Für  $a_{\alpha\beta} = 1$  entspricht das Problem (2.1.36) der Poissongleichung.

## 2.1.2 Ritz-Galerkin-Verfahren

Die Variationsformulierung

$$\text{Suche } u \in H_0^1(\Omega) \quad \text{mit} \quad l(u, v) = F(v) \quad \forall v \in H_0^1(\Omega) \quad (2.1.41)$$

ist ein unendlich dimensionales Problem und deshalb numerisch nicht lösbar. Beim Ritz-Galerkin-Verfahren wird dieses Problem in ein endlich dimensionales Problem vereinfacht. Die Idee dabei ist den unendlich dimensionalen Raum  $H_0^1(\Omega)$  durch einen endlich dimensionalen Vektorraum  $V_{N,G} \subset H_0^1(\Omega)$  zu ersetzen, wobei  $\dim(V_{N,G}) = N$  gilt. Die vereinfachte Variationsformulierung lautet nun

$$\text{Suche } u_{N,G} \in V_{N,G} \quad \text{mit} \quad l(u_{N,G}, v) = F(v) \quad \forall v \in V_{N,G}. \quad (2.1.42)$$

Sei  $\{b_{1,G}, \dots, b_{N,G}\}$  die Basis von  $V_{N,G}$ . Da  $u_{N,G} \in V_{N,G}$  kann  $u_{N,G}$  mit Hilfe der Basisvektoren linear kombiniert werden, d.h. wir können ansetzen

$$u_{N,G} = \sum_{i=1}^N x_{N,G}^i b_{i,G} \quad (2.1.43)$$

mit  $x_{N,G}^i \in \mathbb{R}$  für  $i \in [1, \dots, N]$  und  $x_{N,G} = (x_{N,G}^1, \dots, x_{N,G}^N)^T$ .

Da  $V_{N,G}$  ein Vektorraum ist, kann jedes  $v \in V_{N,G}$  mit Hilfe der Basisvektoren linear kombiniert werden. Deshalb ist es hinreichend die Variationsformulierung nur für die Basisvektoren zu prüfen, d.h. die Variationsformulierung wird weiter vereinfacht zu

$$\text{Suche } u_{N,G} \in V_{N,G} \quad \text{mit} \quad l(u_{N,G}, b_{i,G}) = F(b_{i,G}) \quad \forall i \in [1, \dots, N]. \quad (2.1.44)$$

Jetzt betrachten wir die Bilinearform  $l$  und setzen für  $u_{N,G}$  die Darstellung (2.1.43) ein

$$\begin{aligned} l(u_{N,G}, b_{i,G}) &= l\left(\sum_{j=1}^N x_{N,G}^j b_{j,G}, b_{i,G}\right) \\ &= \sum_{j=1}^N l(x_{N,G}^j b_{j,G}, b_{i,G}) \\ &= \sum_{j=1}^N x_{N,G}^j l(b_{j,G}, b_{i,G}). \end{aligned} \quad (2.1.45)$$

Nun setzen wir  $L_{N,G}^{ij} = l(b_{j,G}, b_{i,G})$  und  $f_{N,G}^i = F(b_{i,G})$  und können schließlich folgendes lineares Gleichungssystem für den Unbekannten Vektor  $x_{N,G}$  schreiben

$$L_{N,G}x_{N,G} = f_{N,G}. \quad (2.1.46)$$

In diesem Zusammenhang heißt  $L_{N,G}$  Steifigkeitsmatrix und  $u_{N,G}$  Ritz-Galerkin-Lösung. Es stellt sich die Frage, inwiefern  $L_{N,G}$  invertierbar ist. Dazu können wir folgende Sätze formulieren.

**Satz 2.1.4.** Die Bilinearform  $l$  sei  $H_0^1$ -elliptisch mit  $l(u, u) \geq C_E \|u\|_{H_0^1}$  für alle  $u \in H_0^1$  mit  $C_E > 0$ . Dann ist die Matrix  $L_{N,G}$  invertierbar und die Ritz-Galerkin-Lösung  $u_{N,G}$  erfüllt

$$\|u_{N,G}\|_{V_{N,G}} \leq \frac{1}{C_E} \|F\|_{V'_{N,G}} \leq \frac{1}{C_E} \|F\|_{V'}. \quad (2.1.47)$$

*Beweis.* Siehe [Hackbusch, 1986] Abschnitt 8.1. □

**Satz 2.1.5.** Die Bilinearform  $l$  sei  $H_0^1$ -elliptisch und symmetrisch. Dann ist die Matrix  $L_{N,G}$  symmetrisch und positiv definit.

*Beweis.* Sei  $x_{N,G} \neq 0$ . Wir betrachten das Skalarprodukt

$$\begin{aligned} x_{N,G}^T L_{N,G} x_{N,G} &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_{N,G}^i L_{N,G}^{ij} x_{N,G}^j \\ &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_{N,G}^i l(b_{j,G}, b_{i,G}) x_{N,G}^j \\ &= l\left(\sum_{j=1}^N x_{N,G}^j b_{j,G}, \sum_{i=1}^N x_{N,G}^i b_{i,G}\right) \\ &= l(u_{N,G}, u_{N,G}) \geq C_E \|u_{N,G}\|^2 > 0. \end{aligned} \quad (2.1.48)$$

Damit ist gezeigt, dass  $L_{N,G}$  positiv definit ist. Weiterhin gilt

$$L_{N,G}^{ij} = l(b_{j,G}, b_{i,G}) = l(b_{i,G}, b_{j,G}) = L_{N,G}^{ji}. \quad (2.1.49)$$

Das zeigt, dass  $L_{N,G}$  symmetrisch ist. □

Zu untersuchen bleibt, inwiefern eine Ritz-Galerkin-Lösung  $u_{N,G}$  eine geeignete Approximation an die Lösung  $u$  darstellt. Da  $u_{N,G} \in V_{N,G}$  und  $V_{N,G} \subset H_0^1$ , kann die Ritz-Galerkin-Lösung  $u_{N,G}$  direkt mit  $u$  verglichen werden.

Der Diskretisierungsfehler kann mit der Norm  $\|u_{N,G} - u\|_{H_0^1}$  gemessen werden. Liegt beispielsweise  $u \in V_{N,G}$  so ist aufgrund der Eindeutigkeit der Lösung  $u_{N,G} = u$  und damit der Fehler null. Genauer, der Diskretisierungsfehler hängt von der Entfernung von  $u$  zu  $V_{N,G}$  ab. Da die optimale Lösung in  $V_{N,G}$  gefunden wird, spricht man in diesem Sinne von einer "Best Approximation".

**Satz 2.1.6. Lemma von Cea** Die Bilinearform  $l$  sei symmetrisch, beschränkt und  $H_0^1$ -elliptisch. Weiterhin sei  $u$  die Lösung des Problems (2.1.27) und  $u_{N,G}$  die zugehörige Ritz-Galerkin-Lösung. Dann gilt

$$\|u_{N,G} - u\|_{H_0^1} \leq (1 + C_S/C_B) \inf_{w \in V_{N,G}} \|u - w\|_{H_0^1}. \quad (2.1.50)$$

Dabei ist  $\inf_{w \in V_{N,G}} \|u - w\|_{H_0^1}$  der Abstand von  $u$  zu  $V_{N,G}$ .

*Beweis.* Siehe [Hackbusch, 1986] Abschnitt 8.2. □

### 2.1.3 Finite-Elemente Verfahren

In diesem Abschnitt wird das Finite-Elemente Verfahren erläutert. Die Einträge der Matrix  $L_{N,G}$  sind durch das Ritz-Galerkin-Verfahren gegeben durch

$$L_{N,G}^{ij} = l(b_{j,G}, b_{i,G}) = \int_{\Omega} \sum_{|\alpha| \leq 1} \sum_{|\beta| \leq 1} a_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) D^\alpha b_{j,G} \cdot D^\beta b_{i,G}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}. \quad (2.1.51)$$

Demnach ist  $L_{N,G}$  im Allgemeinen vollbesetzt. Ist  $\dim V_{N,G}$  groß, ist der Rechenaufwand zur Bestimmung der Ritz-Galerkin-Lösung  $u_N$  zu hoch. Das Finite-Elemente Verfahren ist ein spezielles Ritz-Galerkin-Verfahren, welches durch eine geeignete Wahl von  $V_{N,G}$ , auf eine dünnbesetzte Matrix  $L_{N,G}$  führt.

Gleichung (2.1.51) zeigt, dass  $L_{N,G}^{ij} = 0$ , wenn die Träger  $\text{Tr}(b_{i,G})$  und  $\text{Tr}(b_{j,G})$  der Funktionen  $b_{i,G}$  und  $b_{j,G}$  disjunkt sind. Hierbei ist der Träger einer Funktion folgendermaßen definiert:

**Definition 2.1.8. Träger** Sei  $u \in H^0(\Omega)$ . Der Träger  $\text{Tr}(u)$  wird gegeben durch

$$\text{Tr}(u) = \{\mathbf{x} \in \Omega \mid u(\mathbf{x}) \neq 0\}. \quad (2.1.52)$$

Da bei der Finite-Element Methode ein spezieller Ansatz- und Testraum verwendet wird, nennen wir diesen Raum  $V_{N,FE}$  mit den zugehörigen Basisvektoren  $b_{i,FE}$  mit  $i \in [0, \dots, N]$ . Die Idee der Finite-Element Methode ist es die Basisvektoren  $b_{i,FE}$  mit  $i \in [0, \dots, N]$  so zu wählen, dass diese möglichst disjunkte Träger haben.

In diesem Abschnitt nehmen wir erneut an, dass  $\Omega$  ein beschränktes Gebiet ist mit  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ . Die Fälle  $\Omega \subset \mathbb{R}$  und  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  sowie weitere Informationen zu  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  können in [Hackbusch, 1986] nachgeschlagen werden.

Wir zerlegen  $\Omega$  in  $\mathcal{N}$  Dreiecke  $T_1 \dots T_{\mathcal{N}}$  und definieren den Begriff Triangulierung.

**Definition 2.1.9. Triangulierung** Die Menge  $T = \{T_1 \dots T_{\mathcal{N}}\}$  heißt **Triangulierung** von  $\Omega$  wenn

- $T_i$  offene Dreiecke für alle  $i \in [1, \dots, \mathcal{N}]$
- $T_i \cap T_j = \emptyset$  für  $i \neq j$
- $\bigcup_{1 \leq i \leq \mathcal{N}} \bar{T}_i = \bar{\Omega}$

- für  $i \neq j$  ist  $\bar{T}_i \cap \bar{T}_j$  eine der drei folgenden Möglichkeiten:
  1. leer
  2. eine gemeinsame Seite der Dreiecke  $T_i$  und  $T_j$
  3. eine gemeinsame Ecke der Dreiecke  $T_i$  und  $T_j$

*Bemerkung 2.1.6.* Sei  $T$  eine Triangulierung von  $\Omega$ . Die Anzahl der inneren Knoten von  $\Omega$  sei  $N$ . Dann unterscheidet sich  $N$  von der Anzahl der Dreiecke  $\mathcal{N}$ .

Nun können wir die Basisvektoren von  $V_{N,FE}$ , die sogenannten Hutfunktionen, definieren.

**Definition 2.1.10. Hutfunktion** Gegeben sei eine Triangulierung  $T$  von  $\Omega$ . Die zum  $i$ -ten Knotenpunkt gehörende **Hutfunktion**  $b_{i,FE}$  ist, eingeschränkt auf ein Dreieck  $T_j \in T$ , linear, d.h.

$$b_{i,FE}(x^1, x^2) = a_{i,j}^1 x^1 + a_{i,j}^2 x^2 + a_{i,j}^3 \quad \text{für } (x^1, x^2) \in T_j. \quad (2.1.53)$$

Seien  $\mathbf{t}_{j,1}, \mathbf{t}_{j,2}$  und  $\mathbf{t}_{j,3}$  die Eckpunkte des Dreiecks  $T_j$ . Der  $i$ -te Knotenpunkt habe die Koordinaten  $\mathbf{k}_i$ . Dann sind die Koeffizienten  $a_{i,j}^1, a_{i,j}^2, a_{i,j}^3$  eindeutig durch die drei Bedingungen

$$\text{für } l \in [1, 2, 3] \text{ sei } b_{i,FE}(\mathbf{t}_{j,l}) = \begin{cases} 1, & \text{falls } \mathbf{t}_{j,l} = \mathbf{k}_i \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.1.54)$$

bestimmt.

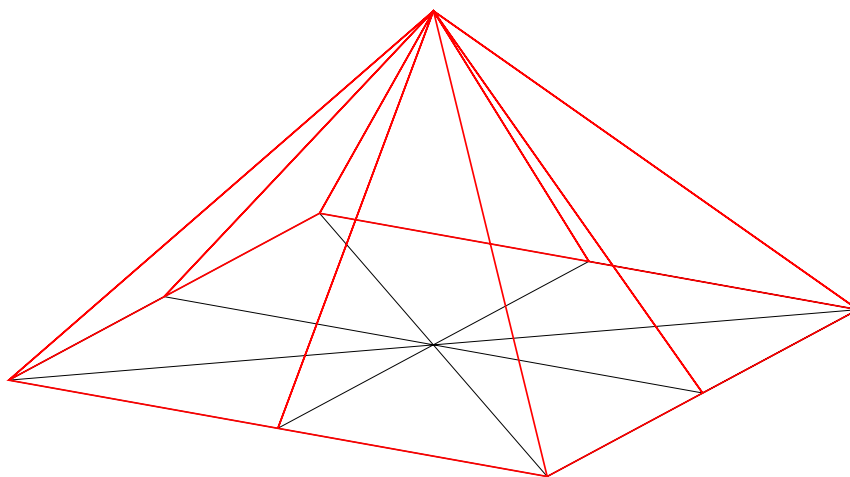


Abbildung 2.1.2: Illustration einer Hutfunktion

*Bemerkung 2.1.7.* Der Abschluss des Trägers  $\text{Tr}(b_{i,FE})$  der Hutfunktion  $b_{i,FE}$  ist gegeben durch

$$\overline{\text{Tr}}(b_{i,FE}) = \bigcup_{T_j \in T \text{ mit } \mathbf{k}_i \in \bar{T}_j} \bar{T}_j. \quad (2.1.55)$$

Damit sind die Träger zweier Hutfunktionen  $\text{Tr}(b_{i,FE})$  und  $\text{Tr}(b_{j,FE})$  nur dann nicht disjunkt, falls es ein Dreieck  $T_l \in T$  gibt, so dass

$$\mathbf{k}_i \text{ und } \mathbf{k}_j \in \overline{T}_l. \quad (2.1.56)$$

Der Vektorraum  $V_{N,FE}$  wird nun durch die Hutfunktionen  $\{b_{1,FE}, \dots, b_{N,FE}\}$  aufgespannt. Die Bemerkung 2.1.7 zeigt, dass die durch die Finite-Element Methode entstandene Matrix  $L_{N,FE}$  dünn besetzt ist. In dem Lemma von Cea (2.1.6) wurde der Fehler von einer Ritz-Galerkin-Lösung  $u_N$  zur Lösung  $u$  des Problems (2.1.27), durch den Abstand von  $V_N$  zu  $H_0^1$  abgeschätzt. Der Abstand von  $V_{N,FE}$  zu  $H_0^1$  hängt von der Triangulierung  $T$  ab. Eine konkrete Aussage liefert der folgende Satz.

**Satz 2.1.7.** *Sei  $T$  eine Triangulierung von  $\Omega$ . Weiterhin sei  $\alpha_0 > 0$  der kleinste Innenwinkel aller  $T_i \in T$  und  $h$  die maximale Seitenlänge aller  $T_i \in T$ . Dann ist*

$$\inf_{w \in V_{N,FE}} \|u - w\|_{H_0^k} \leq C(\alpha_0) h^{2-k} \|u\|_{H_0^2} \quad \text{für } k = 0, 1 \text{ und } \forall u \in H_0^2(\Omega). \quad (2.1.57)$$

*Beweis.* Siehe [Hackbusch, 1986] Abschnitt 8.4. □

Insgesamt ergibt sich das lineare Gleichungssystem

$$L_{N,FE} x_{N,FE} = f_{N,FE}, \quad (2.1.58)$$

wobei

$$L_{N,FE}^{ij} = l(b_{j,FE}, b_{i,FE}) = \int_{\Omega} \sum_{|\alpha| \leq 1} \sum_{|\beta| \leq 1} a_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) D^{\alpha} b_{j,FE} \cdot D^{\beta} b_{i,FE}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad (2.1.59)$$

$$f_{N,FE}^i = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) b_{i,FE}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad (2.1.60)$$

$$u_{N,FE} = \sum_{i=1}^N x_{N,FE}^i b_{i,FE} \quad (2.1.61)$$

gilt.

### 2.1.4 Finite-Volumen Methode

Das Finite-Volumen Verfahren (oder auch Box Verfahren) kann als ein Petrov-Galerkin-Verfahren verstanden werden. Im Gegensatz zum Ritz-Galerkin-Verfahren unterscheidet sich beim Petrov-Galerkin-Verfahren der Vektorraum für die Ansatzfunktionen  $V_N$  von dem Vektorraum für die Testfunktionen  $W_N$ .

Es ergibt sich folgende Problemstellung

$$\text{Suche } u_N \in V_N \quad \text{mit} \quad l(u_N, v) = f(v) \quad \forall v \in W_N. \quad (2.1.62)$$

Hierbei gilt  $V_N \subset H_0^1(\Omega)$  und  $W_N \subset H_0^1(\Omega)$ . Beim Finite-Volumen Verfahren hat der Vektorraum  $V_N$  die Dimension  $N$  und wird ausgehend von einer Triangulierung  $T$  von  $\Omega$ , analog zum Finite-Elemente Verfahren, durch die Hutfunktionen  $\{b_{1,FE}, \dots, b_{N,FE}\}$  aufgespannt, d.h. es gilt  $V_N = V_{N,FE}$ . Die Lösung  $u_{N,FV}$  ist eine Linearkombination der Hutfunktionen

$$u_{N,FV} = \sum_{i=1}^N x_{N,FV}^i b_{N,FE}^i. \quad (2.1.63)$$

Für die Konstruktion des Testraums  $W_{N,FV}$  müssen wir zunächst das Duale Gitter definieren.

**Definition 2.1.11. Duales Gitter** Das Gitter  $B$  heißt **Dual** zu einer Triangulierung  $T$  von  $\Omega$ , wenn gilt:

- In jeder Box  $B_p \in B$  ist nur ein Knoten des Gitters enthalten.
- Für jede Box  $B_p \in B$  ist der zur Box gehörende Knoten Ecke eines Dreiecks  $T_i \in T$ .
- Für  $p \neq q$  sind  $B_p \in B$  und  $B_q \in B$  entweder disjunkt oder schneiden sich höchstens an ihren Rändern.
- $\bigcup_{1 \leq p \leq N} \bar{B}_p = \bar{\Omega}$
- Sei  $T_i \in T$  dann gilt für jede Box  $B_p \in B$  entweder
  1.  $|B_p \cap T_i| = 1/3|T_i|$  oder
  2.  $|B_p \cap T_i| = 0$ .

Zu jedem Knoten  $p$  muss demnach eine Box  $B_p$  bestimmt werden, dabei sind die Boxen  $B_p$  Polygone.

$B_p$  wird folgendermaßen eindeutig festgelegt:

Ausgehend vom  $p$ -ten Knoten, betrachten wir die Menge aller Dreiecke  $T^p$ , welche  $p$  als Eckpunkt haben und in der Triangulierung enthalten sind. Es gilt offenbar  $T^p \subset T$ . Die Eckpunkte des Polygons  $B_p$  bestehen nun aus:

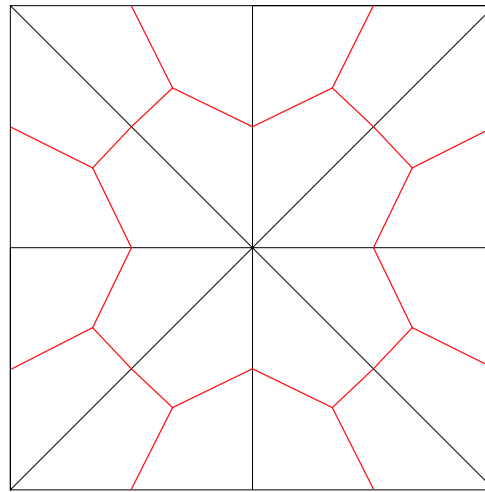
1. Schwerpunkt jedes Dreiecks  $T_i \in T^p$  und
2. Mittelpunkte aller gemeinsamer Kanten von je zwei Dreiecken  $T_i$  und  $T_j \in T^p$ .

Schließlich werden die Eckpunkte so verbunden, dass die Box  $B_p$  ein Polygon ist. Die Basis des Testraums  $W_{N,FV}$  lautet schließlich

$$\{b_{1,FV}, \dots, b_{N,FV}\} \quad (2.1.64)$$

wobei

$$b_{p,FV}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{falls } \mathbf{x} \in B_p \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \text{ für } 1 \leq p \leq N. \quad (2.1.65)$$



Gitter ——— Duales Gitter ———

Abbildung 2.1.3: Illustration des Dualen Gitters.

Schließlich lautet die Variationsformulierung für die Finite-Volumen Methode

$$\text{Suche } u_N \in V_{N,FE} \quad \text{mit} \quad l(u_N, b_{p,FV}) = F(b_{p,FV}) \quad 1 \leq p \leq N. \quad (2.1.66)$$

Um die Bilinearform  $l$  zu bestimmen betrachten wir  $\langle Lu_{N,FV}, b_{p,FV} \rangle$  für  $b_{p,FV} \in W_{N,FV}$  und integrieren partiell. Dabei nehmen wir an, dass der Differentialoperator  $L$  folgendermaßen aussieht

$$L = -\text{div } a(\mathbf{x})\nabla. \quad (2.1.67)$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} -\text{div } a(\mathbf{x})\nabla u_{N,FV} \cdot b_{p,FV} \, d\mathbf{x} &= \int_{B_p} -\text{div } a(\mathbf{x})\nabla u_{N,FV} \cdot b_{p,FV} \, d\mathbf{x} \\ &= \int_{\partial B_p} -a(\mathbf{x})\nabla(u_{N,FV}b_{p,FV}) \cdot \mathbf{n} \, d\sigma \end{aligned} \quad (2.1.68)$$

Hierbei fällt das Integral über  $B_p$  weg, da  $\nabla b_{p,FV} = 0$  fast überall gilt. Damit ergibt sich die Bilinearform  $l$  zu

$$l(u_{N,FV}, b_{p,FV}) = \int_{\partial B_p} -a(\mathbf{x})\nabla(u_{N,FV}b_{p,FV}) \cdot \mathbf{n} \, d\sigma, \quad (2.1.69)$$

wobei  $\mathbf{n}$  der äußere Normalenvektor ist.

Nun betrachten wir die Bilinearform für die Basisvektoren und erhalten die Matrix  $L_{N,FV}$

$$L_{N,FV}^{pi} = l(b_{i,FE}, b_{p,FV}) = \int_{\partial B_p} -a(\mathbf{x})\nabla(b_{i,FE}b_{p,FV}) \cdot \mathbf{n} \, d\sigma, \quad (2.1.70)$$



hierbei wurde ausgenutzt das  $\overline{Tr}(b_{p,FV}) = B_p$  gilt. Für die rechte Seite ergibt sich

$$f_{N,FV}^p = F(b_{p,FV}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x})b_p(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_{B_p} f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}. \quad (2.1.71)$$

Insgesamt erhält man schließlich folgendes lineares Gleichungssystem

$$L_{N,FV}x_{N,FV} = f_{N,FV}. \quad (2.1.72)$$

Das Randintegral über eine Box  $B_p$ , kann als lokale Massenerhaltung verstanden werden. Ist die rechte Seite  $f_{N,FV}^p$  null, so muss die Menge der in die Box geflossenen Masse der Menge der hinausgeflossenen Masse entsprechen. Solche Verfahren nennt man konservativ.

*Bemerkung 2.1.8.* Aufgrund der lokalen Massenerhaltung ist das Finite-Volumen Verfahren für Konvektions-Diffusions Probleme am besten geeignet.

Folgender Satz liefert eine Fehlerabschätzung für das Finite Volumen Verfahren.

**Satz 2.1.8.** *Der Differentialoperator  $L$  sei elliptisch, weiterhin sei  $f \in H^1(\Omega)$ . Dann gilt*

$$\|u_{N,G} - u_{N,FV}\|_{H^1} \leq C_1 h^2 \|f\|_{H^1}, \quad (2.1.73)$$

und damit wegen Satz 2.1.6 und Satz 2.1.7

$$\|u_{N,FV} - u\|_{H^k} = C_2 h^{2-k} \quad \text{für } k = 0, 1. \quad (2.1.74)$$

*Beweis.* Siehe [Hackbusch, 1989]. □

Weitere Informationen zu der Fehlerabschätzung sowie eine allgemeinere Betrachtung kann in [Hackbusch, 1989] und [Bank und Rose, 1987] nachgeschlagen werden.

## 2.2 Diskretisierung in der Zeit

In diesem Abschnitt gehen wir davon aus, dass Gleichung (2.0.1) bereits im Ort diskretisiert wurde. Weiterhin nehmen wir an, dass  $r = 1$  und  $m_p^1 = 1$ . Typischerweise erhält man dann folgendes Anfangswertproblem.

**Definition 2.2.1. Anfangswertproblem (AWP)** Sei  $A : D \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$  dann heißt

$$\frac{\partial u}{\partial t} = A(t, u(t)) \quad t \in [T_0, T] \quad (2.2.1)$$

$$u(T_0) = u_0 \quad (2.2.2)$$

**Anfangswertproblem.** Hierbei sind  $u_0$  die **Anfangsbedingungen**.

$A$  ist ein Operator, welcher beispielsweise aus der Ortsdiskretisierung hervorgegangen ist,  $N$  beschreibt die Anzahl der Unbekannten zu jedem Zeitpunkt  $t$  und hängt von der Anzahl der Knoten, der Anzahl der Gleichungen sowie den gewählten Randbedingungen ab.

Um das AWP zu lösen, muss eine Diskretisierung in der Zeit vorgenommen werden. Es gibt verschiedene Verfahren, um diese Diskretisierung durchzuführen. Zu den einfachsten Verfahren zählen die sogenannten Einschrittverfahren, auf welche in diesem Kapitel eingegangen wird. Einschrittverfahren nutzen nur die Lösung im vorangegangenen Zeitschritt, um die Lösung im nächsten Zeitschritt zu bestimmen. Im Unterschied dazu nutzen Mehrschrittverfahren Lösungen aus mehreren vorangegangenen Zeitschritten. Weitere Informationen können in [Reinhardt, 2008, Deuflhard und Bornemann, 2002, Hairer et al., 1993] nachgeschlagen werden.

Die beiden einfachsten Einschrittverfahren sind das explizite und das implizite Eulerverfahren. In beiden Verfahren wird folgende Approximation verwendet

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx D_{\Delta t} u(t) := \frac{u(t + \Delta t) - u(t)}{\Delta t}. \quad (2.2.3)$$

Der Unterschied zwischen dem expliziten und dem impliziten Eulerverfahren ist die Stelle, an der  $A$  ausgewertet wird.

Beim expliziten Eulerverfahren wird  $A$  an der Stelle  $t$  ausgewertet und wir erhalten direkt  $u(t + \Delta t)$  durch folgende Gleichung

$$u_{\Delta t}(t + \Delta t) = A(t, u_{\Delta t}(t)) \cdot \Delta t + u_{\Delta t}(t). \quad (2.2.4)$$

Mit Hilfe der Anfangsbedingungen und einem korrekt gewählten  $\Delta t$  kann nun  $u_{\Delta t}$  an jeder beliebigen Stelle  $t > T_0$  iterativ bestimmt werden.  $u_{\Delta t}(t)$  approximiert hierbei  $u(t)$ .

Beim impliziten Eulerverfahren wird  $A$  an der Stelle  $t + \Delta t$  ausgewertet und man erhält folgende Gleichung

$$u_{\Delta t}(t + \Delta t) - A(t + \Delta t, u_{\Delta t}(t + \Delta t)) \cdot \Delta t = u_{\Delta t}(t). \quad (2.2.5)$$

In diesem Fall, kann  $u_{\Delta t}(t + \Delta t)$  nicht trivial berechnet werden. Stattdessen muss Gleichung (2.2.5) nach  $u_{\Delta t}(t + \Delta t)$  aufgelöst werden. Sollte  $A(t, u)$  eine lineare Funktion bezüglich  $u$  sein, d.h. wir können  $A$  schreiben als

$$A(t + \Delta t, u) = M(t + \Delta t)u + c(t + \Delta t) \quad (2.2.6)$$

mit  $M \in \mathbb{R}^{N \times N}$  und  $c \in \mathbb{R}^N$  und ist zusätzlich  $(1 - \Delta t \cdot M(t))$  invertierbar, kann Gleichung (2.2.5) aufgelöst werden und man erhält

$$u_{\Delta t}(t + \Delta t) = (1 - \Delta t \cdot M)^{-1}(u_{\Delta t}(t) + \Delta t \cdot c(t + \Delta t)). \quad (2.2.7)$$

Der Fall, in dem  $A$  nicht-linear bezüglich  $u$  ist, wird in Abschnitt 2.3 erläutert.

*Bemerkung 2.2.1.* Um eine möglichst freie Wahl des Zeitschritts zu ermöglichen, sollten aus Stabilitätsgründen Quellterme immer explizit und Senken immer implizit diskretisiert werden.

## 2.3 Numerische Lösung von nichtlinearen Gleichungssystemen

Nach der Diskretisierung in Zeit und Ort von Gleichung (2.0.1) hat man ein unendlich dimensionales Problem durch ein endlich dimensionales Problem approximiert. Die Dimension berechnet sich aus der Summe der Unbekannten, welche bei der Ortsdiskretisierung entstehen, über alle Zeitschritte. Wir unterteilen dieses Problem, wie in Abschnitt 2.2 beschrieben, in einzelne Probleme, in denen jeweils nur aus einer bereits berechneten Lösung  $u_{\Delta t, N}(t)$  die Lösung im darauffolgenden Zeitschritt  $u_{\Delta t, N}(t + \Delta t)$  berechnet wird. Die Dimension dieser einzelnen Probleme entspricht nun gerade der Anzahl der bei der Ortsdiskretisierung innerhalb des betrachteten Zeitschritts entstandenen Unbekannten. Jedes einzelne dieser Probleme kann auf folgende Form gebracht werden

$$F(t, u_{\Delta t, N}(t), u_{\Delta t, N}(t + \Delta t)) = 0. \quad (2.3.1)$$

Im Allgemeinen hängt  $F$  nicht-linear von  $u_{\Delta t, N}(t + \Delta t)$  ab und die Lösung von (2.3.1) ist in dem Fall weder eindeutig noch zwangsläufig existent.

Man kann jedoch versuchen zum Beispiel mit Hilfe des Fixpunktverfahrens oder des Newtonverfahrens iterativ eine Approximation an die Lösung zu bestimmen. Das Newtonverfahren wird im Folgenden genauer erläutert. Weitere Details können zum Beispiel in [Deuflhard und Hohmann, 1991, Ortega und Rheinboldt, 1987] nachgeschlagen werden.

Zunächst definieren wir die Konvergenzordnung einer Folge.

**Definition 2.3.1. Konvergenz einer Folge** Eine Folge  $\{x^k\}$ ,  $x^k \in \mathbb{R}^N$  konvergiert mit der Ordnung  $p \geq 1$  gegen einen Grenzwert  $x^* \in \mathbb{R}^N$ , falls es eine Konstante  $C$  gibt, so dass

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq C \|x^k - x^*\|^p. \quad (2.3.2)$$

Gilt  $p = 1$ , muss zusätzlich  $C < 1$  gelten.

Im Fall  $p = 1$  spricht man von **linearer** Konvergenz, im Fall  $p = 2$  von **quadratischer** Konvergenz (usw.). Zusätzlich heißt die Folge  $\{x^k\}$  **superlinear** konvergent, wenn es eine Nullfolge  $\{C_k\}$  gibt, so dass

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq C_k \|x^k - x^*\|. \quad (2.3.3)$$

Da Iterationsverfahren im Allgemeinen nur eine Näherung an die Lösung berechnen, wird  $F(t, u_{\Delta t, N}(t), u_{\Delta t, N}(t + \Delta t))$  nicht zwangsläufig exakt null. Stattdessen müssen Abbruchbedingungen eingeführt werden, um die Iteration zu stoppen. Geeignete Abbruchbedingungen sind zum Beispiel

$$\|F(t, u_{\Delta t, N}(t), x^k)\| < \epsilon_1 \quad (2.3.4)$$

$$\frac{\|F(t, u_{\Delta t, N}(t), x^k)\|}{\|F(t, u_{\Delta t, N}(t), x^0)\|} < \epsilon_2 \quad (2.3.5)$$

$$k > \max \text{ iterations.} \quad (2.3.6)$$

Die ersten beiden Abbruchbedingungen beschreiben den Fall, dass das Verfahren ausreichend (absolut bzw. relativ) konvergiert ist. Bricht das Iterationsverfahren aufgrund der dritten Abbruchbedingung ab, konnte die Lösung nicht innerhalb der gewählten maximalen Anzahl an Iterationen ausreichend approximiert werden.

### 2.3.1 Newtonverfahren

Das Newtonverfahren ist ein iteratives Verfahren zur Lösung von nicht-linearen Gleichungen. Die Iterationsvorschrift lautet folgendermaßen

$$x^{k+1} = x^k - J_{x^k}(F(t, u_{\Delta t, N}(t), x^k))^{-1} \cdot F(t, u_{\Delta t, N}(t), x^k) \quad (2.3.7)$$

$$x^0 = u_{\Delta t, N}(t). \quad (2.3.8)$$

hierbei ist  $J_{x^k}(F(t, u_{\Delta t, N}(t), x^k))$  die Jacobimatrix von  $F(t, u_{\Delta t, N}(t), x^k)$  bezüglich  $x^k$ .

*Bemerkung 2.3.1.* Setzt man in der Newtoniteration  $J_{x^n}(F(t, u_{\Delta t, N}(t), x^n))^{-1} = \mathbb{1}$ , entspricht die neue Iterationsvorschrift gerade der Fixpunktiteration.

Nun wollen wir die Konvergenz des Newtonverfahrens genauer betrachten:

**Satz 2.3.1.** Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^N$  offen und konvex und  $F(t, u_{\Delta t, N}(t), x) = F(x) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^N$  eine stetig differenzierbare Funktion mit invertierbarer Jacobimatrix  $J_x(x) \forall x \in \Omega$ . Weiterhin gelte für ein  $\omega \geq 0$  die Lipschitz-Bedingung:

$$\|J_x(x)^{-1}(J_x(x + sv) - J_x(x))v\| \leq s\omega\|v\|^2 \quad (2.3.9)$$

für alle  $s \in [0, 1]$ ,  $x \in \Omega$  und  $v \in \mathbb{R}^N$ , so dass  $x + v \in \Omega$ . Weiterhin existiere eine Lösung  $x^* \in \Omega$  und ein Startwert  $x^0 \in \Omega$  derart, dass

$$\rho := \|x^* - x^0\| < \frac{2}{\omega} \quad \text{und} \quad B_\rho(x^*) \subseteq \Omega. \quad (2.3.10)$$

Dann bleibt die durch das Newton-Verfahren definierte Folge  $\{x^k\}$  für  $k > 0$  in der offenen Kugel  $B_\rho(x^*)$  und konvergiert gegen die eindeutige Lösung  $x^*$ . Die Ordnung der Konvergenz ist 2 und für den Fehler gilt

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq \frac{\omega}{2} \|x^k - x^*\|^2. \quad (2.3.11)$$

*Beweis.* Siehe [Deuffhard und Hohmann, 1991] Abschnitt 4.2. □

Aus Satz 2.3.1 folgern wir direkt:

*Bemerkung 2.3.2.* Falls  $F(t, u_{\Delta t, N}(t), u_{\Delta t, N}(t + \Delta t))$  linear bezüglich  $u_{\Delta t, N}(t + \Delta t)$  ist, konvergiert das Newtonverfahren nach einem Schritt, die Lösung ist eindeutig und exakt.

### 2.3.2 Liniensuche

Die Liniensuche ist eine Methode, um bei iterativen Lösern für nichtlineare Probleme die Konvergenz zu verbessern. Zunächst wird eine Suchrichtung berechnet, z.B. mit dem in Abschnitt 2.3.1 vorgestellten Verfahren. Anschließend wird entlang der Suchrichtung an diskreten Stellen die betrachtete Funktion ausgewertet. Die Stelle, an der die Abweichung der betrachteten Funktion vom gewünschten Wert am geringsten ist, ergibt gerade die neue Iterierte. Betrachten wir das allgemeine Beispiel aus Gleichung (2.3.1).

**Definition 2.3.2. Suchrichtung** Sei  $x^k$  die Iterierte nach  $k$  Schritten und  $x^{k+1}$  berechnet durch eine beliebige Methode (z.B. Fixpunktiteration oder Newtonverfahren), dann heißt

$$d^k := x^{k+1} - x^k \quad (2.3.12)$$

Suchrichtung im  $k$ -ten Schritt.

Als nächstes wählen wir uns eine Menge  $\Lambda$ , welche uns die Punkte entlang der Suchrichtung definiert, an denen  $F$  ausgewertet wird. Typischerweise ist  $|\Lambda| < 20$  und für  $\lambda \in \Lambda$  gilt  $\lambda \in (0, 2]$ .

Nun suchen wir entlang der Suchrichtung nach dem kleinsten Fehler und wählen die entsprechenden Suchrichtungen aus, d.h.

$$F_{min}^k := \min_{\lambda \in \Lambda} |F(t, u_{\Delta t, N}(t), x^k + \lambda d^k)| \quad (2.3.13)$$

$$V := \{x^k + \lambda d^k, \lambda \in \Lambda \mid F(t, u_{\Delta t, N}(t), x^k + \lambda d^k) = F_{min}^k\}. \quad (2.3.14)$$

Die Menge  $V$  enthält die Stellen entlang der Suchrichtung an denen  $|F|$  minimal ist, d. h. der Fehler am geringsten ist. Hat  $V$  genau ein Element, so setzt man

$$x^{k+1} := x^k + \lambda d^k \quad \text{mit } x^k + \lambda d^k \in V. \quad (2.3.15)$$

Hat  $V$  mehr als ein Element, kann ein beliebiges Element aus  $V$  als nächste Iterierte ausgewählt werden. Ist  $V$  leer, bedeutet dies, dass entweder die Menge  $\Lambda$  nicht korrekt gewählt wurde, die Suchrichtung  $d^k$  falsch berechnet wurde, oder dass  $F$  an der Stelle  $x^k$  ein lokales Minimum besitzt.

*Bemerkung 2.3.3.* Wenn keine Liniensuche ausgeführt wird, so ist dies äquivalent zu  $\Lambda = \{1\}$ .

## 2.4 Numerische Lösung von großen linearen Gleichungssystemen mit Mehrgitterverfahren

In Kapitel 2.3.1 muss  $J_{x^n}(F(t, u_{\Delta t, N}(t), x^k))^{-1} \cdot F(t, u_{\Delta t, N}(t), x^k)$  berechnet werden, um einen Newtonschritt auszuführen. In Kapitel 2.2 muss  $(1 - \Delta t \cdot M)^{-1}(u_{\Delta t, N}(t) + \Delta t \cdot c(t + \Delta t))$  berechnet werden, um mit dem impliziten Eulerverfahren einen Zeitschritt durchzuführen. Beides sind Matrizen, welche aus der Diskretisierung hervorgegangen sind. Die Größe einer solchen

Matrix wird durch die örtliche Auflösung, also die Anzahl der Gitterpunkte, und durch die Anzahl an Unbekannten pro Gitterpunkt bestimmt. Typischerweise wird der Diskretisierungsfehler kleiner, je höher die örtliche Auflösung ist. Um den Diskretisierungsfehler klein zu halten, wird demnach die räumliche Auflösung erhöht und man erhält eine große zu invertierende Matrix. Die aus diesem Verfahren entstehenden Matrizen sind in der Regel dünnbesetzte M-Matrizen. In diesem Kapitel betrachten wir ganz allgemein große dünnbesetzte M-Matrizen  $K$ .

*Bemerkung 2.4.1.* Um  $K^{-1}y$  zu berechnen muss folgendes Gleichungssystem gelöst werden

$$Kx = y. \quad (2.4.1)$$

Es gilt dann  $K^{-1}y = x$ .

**Definition 2.4.1. Dünnbesetzte Matrix** Eine Matrix  $K \in \mathbb{R}^{N \times N}$  heißt **dünnbesetzt**, wenn die Anzahl der nicht-null Einträge in jeder Zeile kleiner ist als  $C$  mit  $C \ll N$ .

**Definition 2.4.2. M-Matrix**  $K = (K_{ij})_{i,j=0}^{N-1} \in \mathbb{R}^{N \times N}$  heißt **M-Matrix**, wenn  $K$  invertierbar ist und

$$K_{ii} > 0 \quad \forall i \in \{0, \dots, N-1\} \quad (2.4.2)$$

$$K_{ij} \leq 0 \quad \forall i, j \in \{0, \dots, N-1\} \text{ und } i \neq j \quad (2.4.3)$$

$$K_{ij}^{-1} \geq 0 \quad \forall i, j \in \{0, \dots, N-1\} \quad (2.4.4)$$

gilt. Die beiden Bedingungen (2.4.2) und (2.4.3) heißen Vorzeichenbedingung.

Die Vorzeichenbedingungen (2.4.2) und (2.4.3) sind einfach zu überprüfen. Die dritte Bedingung (2.4.4) hingegen ist schwieriger nachzuweisen. Um ein Kriterium für M-Matrizen aufzustellen, wird die Irreduzibilität und Diagonaldominanz von Matrizen benötigt.

**Definition 2.4.3. Diagonaldominanz** Eine Matrix  $K \in \mathbb{R}^{N \times N}$  heißt **schwach diagonaldominant**, wenn gilt

$$\sum_{j \in J_i} |K_{ij}| \leq |K_{ii}| \quad \forall i \in [0, \dots, N-1] \text{ und } J_i = [0, \dots, i-1, i+1, \dots, N-1]. \quad (2.4.5)$$

Weiterhin heißt eine Matrix  $K \in \mathbb{R}^{N \times N}$  **strikt diagonaldominant**, wenn sogar gilt

$$\sum_{j \in J_i} |K_{ij}| < |K_{ii}| \quad \forall i \in [0, \dots, N-1] \text{ und } J_i = [0, \dots, i-1, i+1, \dots, N-1]. \quad (2.4.6)$$

**Definition 2.4.4. Irreduzibilität** Ein Index  $i$  heißt mit Index  $j$  verbunden, wenn es Indizes  $i_0 = i, \dots, i_k = j$  gibt, so dass  $K_{i_\nu i_{\nu+1}} \neq 0 \quad \forall \nu \in [0, \dots, k-1]$ .

Eine Matrix  $K \in \mathbb{R}^{N \times N}$  heißt **irreduzibel**, wenn jeder Index  $i \in [0, \dots, N-1]$  mit jedem Index  $j \in [0, \dots, N-1]$  verbunden ist.

**Definition 2.4.5.** Eine Matrix  $K \in \mathbb{R}^{N \times N}$  heißt **irreduzibel diagonaldominant**, wenn die Matrix irreduzibel und schwach diagonaldominant ist und weiterhin für mindestens ein  $i \in [0, \dots, N - 1]$  gilt

$$\sum_{j \in J_i} |K_{ij}| < |K_{ii}| \quad \text{mit } J_i = [0, \dots, i - 1, i + 1, \dots, N - 1]. \quad (2.4.7)$$

Nun können wir folgendes Kriterium für M-Matrizen festhalten.

**Satz 2.4.1.** Für  $K \in \mathbb{R}^{N \times N}$  gilt die Vorzeichenbedingung (2.4.2) und (2.4.3), weiterhin sei  $K$  strikt diagonaldominant oder irreduzibel diagonaldominant, dann ist  $K$  eine M-Matrix.

*Beweis.* Siehe [Hackbusch, 1986] Abschnitt 4.3. □

**Satz 2.4.2. Vergleich von M-Matrizen** Sei  $K \in \mathbb{R}^{N \times N}$  eine M-Matrix, weiterhin sei  $K' \in \mathbb{R}^{N \times N}$  eine Matrix, welche aus  $K$  hervorgegangen ist, indem beliebige Nebendiagonal-Einträge von  $K$  auf null gesetzt wurden. Dann ist  $K'$  ebenfalls eine M-Matrix.

*Beweis.* Siehe [Varga, 1962] Abschnitt 3.5. □

Gleichungssysteme können direkt beispielsweise per Gaußelimination, LU Zerlegung, Cholesky Zerlegung oder Givensrotation gelöst werden. Der Rechenaufwand für diese Verfahren ist jeweils  $\propto N^3$ . Ist  $N$  sehr groß, steigt die Rechenzeit überproportional schnell an und das Gleichungssystem kann nicht in einer akzeptablen Zeit gelöst werden. Es gibt iterative Verfahren (z.B. Gauß-Seidel Verfahren, CG-Verfahren und Mehrgitterverfahren), bei denen der Rechenaufwand für jede Iteration  $\propto N$  ist. Ist weiterhin die Anzahl der Iterationen unabhängig von  $N$ , hat das Verfahren einen optimalen Rechenaufwand  $\propto N$ . Im Folgenden wird auf iterative Verfahren, insbesondere auf das Mehrgitterverfahren, näher eingegangen. Weitere Informationen zu direkten und iterativen Lösern für lineare Gleichungssysteme können in [Hackbusch, 1991], [Hackbusch, 1985], [Kanzow, 2005] und [Wesseling, 2004] nachgeschlagen werden.

## 2.4.1 Iterative Verfahren

**Definition 2.4.6. Iteratives Verfahren** Ein iteratives Verfahren zur Lösung von  $Kx = y$  ist gegeben durch einen Startvektor  $x^0$  und folgende Iterationsvorschrift

$$x^{k+1} = Sx^k := x^k - M^{-1}(Kx^k - y). \quad (2.4.8)$$

Damit jeder Iterationsschritt einen Rechenaufwand  $\propto N$  hat, muss  $M$  mit einem Aufwand  $\mathcal{O}(N)$  invertierbar sein. Weiterhin sollte  $M$  eine Approximation an  $K$  darstellen, damit die Iteration sinnvoll ist.

*Bemerkung 2.4.2.* Für  $M = K$  erhält man nach einer Iteration das exakte Ergebnis.

*Bemerkung 2.4.3.* Konvergiert die Folge  $\{x^k\}$ , so ist der Grenzwert  $x := \lim_{k \rightarrow \infty} x^k$  die eindeutige Lösung der Gleichung  $Kx = y$ .

Sei  $L$  eine echte untere Dreiecksmatrix und  $U$  eine echte obere Dreiecksmatrix, dann können wir  $K$  aufspalten in  $K = L + D + U$ , wobei  $D$  eine Diagonalmatrix ist und  $L, D, U$  eindeutig bestimmt sind. Zu den bekanntesten und einfachsten Iterationsverfahren zählen:

- Jacobi Verfahren  $M = D$
- Gauß-Seidel Verfahren  $M = L + D$
- ILU-Zerlegung  $M = L'U'$

Bei der ILU-Zerlegung wird eine unvollständige LU Zerlegung von  $K$  durchgeführt. Man erhält  $K = L'U' - N$ .  $N$  beinhaltet die Einträge, welche bei der unvollständigen Zerlegung nicht berücksichtigt wurden.

Um eine Aussage über die Konvergenz von iterativen Verfahren treffen zu können, muss noch die reguläre Aufspaltung definiert werden.

**Definition 2.4.7. Reguläre Aufspaltung** Sei  $K$  eine M-Matrix, dann heißt die Aufspaltung  $K = M - N$  **regulär**, genau dann, wenn gilt

$$M_{ij}^{-1} \geq 0 \quad \forall i, j \in [0, \dots, N-1] \quad (2.4.9)$$

$$N_{ij} \geq 0 \quad \forall i, j \in [0, \dots, N-1]. \quad (2.4.10)$$

Schließlich können wir folgenden Satz über die Konvergenz von Iterationsverfahren formulieren.

**Satz 2.4.3.** Sei  $K$  eine M-Matrix und die Aufspaltung  $K = M - N$  sei regulär. Dann konvergiert das Iterationsverfahren

$$x^{k+1} = x^k - M^{-1}(Kx^k - y). \quad (2.4.11)$$

*Beweis.* Siehe [Hackbusch, 1991] Abschnitt 6.5. □

*Bemerkung 2.4.4.* Sei  $K$  eine M-Matrix, dann sind die durch das Jacobi Verfahren und das Gauß-Seidel Verfahren induzierten Aufspaltungen regulär.

*Beweis.* i) Jacobi Verfahren: Da  $K$  M-Matrix und  $M = D$  ist  $M_{ij}^{-1} > 0 \quad \forall i, j \in [0, \dots, N-1]$ . Weiterhin, da  $K$  die Vorzeichenbedingung erfüllt, ist  $N_{ij} \geq 0 \quad \forall i, j \in [0, \dots, N-1]$ . Also ist die Aufspaltung regulär.

ii) Gauß-Seidel Verfahren: Mit  $M = L + D$  ist  $M$  ebenfalls M-Matrix (vgl. Satz 2.4.2). Daraus folgt  $M_{ij}^{-1} > 0 \quad \forall i, j \in [0, \dots, N-1]$ . Weiterhin ist  $N = -R$  und damit gilt  $N_{ij} \geq 0 \quad \forall i, j \in [0, \dots, N-1]$ . Demnach folgt, dass die Aufspaltung regulär ist. □

Mit Satz 2.4.3 konnte eine Aussage über die Konvergenz getroffen werden, nicht jedoch über die Anzahl der nötigen Iterationsschritte. Dazu betrachten wir noch einmal die Iterationsvorschrift (2.4.8).



Sei  $x$  die Lösung des linearen Gleichungssystems  $Kx = y$  und das Iterationsverfahren  $x^{k+1} = Sx^k$  konvergent mit  $\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = x$ , dann gilt:

$$\begin{aligned} \|x - x^k\| &= \|S^k x - S^k x^0\| \\ &\leq \|S\|^k \|x - x^0\| \end{aligned} \tag{2.4.12}$$

Hinreichend für die Konvergenz des Iterationsverfahrens ist demnach  $\|S\| < 1$ . In der Spektralnorm ist das äquivalent zu  $\rho(S) < 1$ , wobei  $\rho(S)$  den Spektralradius von  $S$  darstellt. Die Anzahl der nötigen Iterationsschritte wird demnach durch den Abstand von  $\|S\|$  zu 1 bestimmt. Ist  $\|S\| \approx 1$  werden sehr viele Iterationsschritte benötigt, ist hingegen  $\|S\| \approx 0$  konvergiert das Iterationsverfahren sehr schnell.

*Bemerkung 2.4.5.* Die Verfahren, Jacobi, Gauß-Seidel und ILU, reduzieren den hochfrequenten Anteil des Fehlers gut. Allerdings sind die Verfahren nicht in der Lage den niederfrequenten Anteil des Fehlers zu reduzieren, d.h. das Verfahren konvergiert insgesamt nur sehr langsam. Aus diesem Grund sind diese Verfahren Glätter.

## 2.4.2 Mehrgitterverfahren

Das Mehrgitterverfahren ist ein iteratives Verfahren, welches aus zwei Komponenten besteht. Die erste Komponente ist der Glätter (z.B. Jacobi, Gauß-Seidel, ILU), der den hochfrequenten Anteil des Fehlers reduziert. Die zweite Komponente ist die Grobgitterkorrektur. Hierbei wird zunächst der geglättete Defekt auf ein gröberes Gitter restringiert und dort wird durch Lösen der Defektgleichung und anschließender Prolongation auf das feinere Gitter eine Korrektur berechnet. Die alte Iterierte wird anschließend mit der berechneten Korrektur verbessert. Die Grobgitterkorrektur reduziert den niederfrequenten Anteil des Fehlers. Damit beim Lösen eines großen linearen Gleichungssystems mit dem Mehrgitterverfahren der Rechenaufwand  $\propto N$  ist, müssen die beiden Komponenten, Glätter und Grobgitterkorrektur, bestimmte Bedingungen erfüllen. Zum einen muss der Glätter die Glättungseigenschaft erfüllen und zum anderen muss das lineare Gleichungssystem auf den gröberen Gittern in gewisser Weise dem linearen Gleichungssystem auf dem feinen Gitter ähneln. Dies wird durch die sogenannte Approximationseigenschaft sichergestellt.

Sei (2.0.1) gegeben. Weiterhin bilden  $\Omega_1 \dots \Omega_{n_{lv1}}$  eine Gitterhierarchie, welche  $\Omega$  approximiert.  $\Omega_1$  sei hierbei das feinste Gitter, d.h.  $\Omega_1$  approximiert  $\Omega$  am besten.  $K_1, \dots, K_{n_{lv1}}$  seien die diskreten Operatoren von  $L$  auf dem jeweiligen Level.

**Definition 2.4.8.** Ein **Restriktionsoperator**  $r_l$  bildet einen Vektor  $x_l \in \Omega_l$  auf einen Vektor  $x_{l+1} \in \Omega_{l+1}$  ab.

**Definition 2.4.9.** Ein **Prolongationsoperator**  $p_l$  bildet einen Vektor  $x_{l+1} \in \Omega_{l+1}$  auf einen Vektor  $x_l \in \Omega_l$  ab.

Für den Fall, dass die Gitterhierarchie nur aus 2 Leveln besteht ( $n_{lv1} = 2$ ), lautet der Zweigitteroperator

$$T_2(\nu_1, \nu_2) = S_1^{\nu_2} (\mathbb{1} - p_1 K_2^{-1} r_1 K_1) S_1^{\nu_1}. \tag{2.4.13}$$

Hierbei ist  $S_1$  ein iteratives Verfahren, welches als Glätter auf  $\Omega_1$  eingesetzt wird, beispielsweise das Jacobi Verfahren. An dem Operator können die einzelnen Schritte im Zweigitterverfahren abgelesen werden

- wende Glätter  $S_1$   $\nu_1$  mal an ( $S_1^{\nu_1}$ )
- berechne Defekt ( $K_1$ )
- restringiere Defekt ( $r_1$ )
- Löse Defektgleichung ( $K_2^{-1}$ )
- prolongiere die Lösung der Defektgleichung ( $p_1$ )
- korrigiere die aktuelle Lösung ( $\mathbb{1} - p_1 K_2^{-1} r_1 K_1$ )
- wende Glätter  $S_1$   $\nu_2$  mal an ( $S_1^{\nu_2}$ ).

Besteht die Gitterhierarchie aus mehr als zwei Gittern sieht der Algorithmus für eine Mehrgitteriteration folgendermaßen aus

$\text{MGV}(x_1, y_1, 1)$ ;

wobei gilt

$\text{MGV}(x, y, l)$

```

{
  if( $l = n_{lv1}$ )
    return  $x_{n_{lv1}} = K_{n_{lv1}}^{-1} y_{n_{lv1}}$ 
  else
    {
       $x_l = S_l^{\nu_1}(x_l, y_l)$ 
       $v_{l+1} = r_l(y_l - K_l x_l)$ 
       $w_{l+1} = 0$ 
      for( $j = 0; j < \gamma; j++$ )
         $v_{l+1} = \text{MGV}(w_{l+1}, v_{l+1}, l + 1)$ 
       $x_l = x_l + p(v_{l+1})$ 
      return  $x_l = S_l^{\nu_2}(x_l, y_l)$ 
    }
}

```

In einem Mehrgitterverfahren gibt es drei Parameter:  $\nu_1, \nu_2$  und  $\gamma$ .  $\nu_1$  und  $\nu_2$  stehen für die Anzahl der Vor- bzw. Nachglättungsschritte, dabei gilt normalerweise  $\nu_1, \nu_2 \in [2, \dots, 5]$ . Müssen  $\nu_1$  oder  $\nu_2$  sehr hoch gewählt werden, steigt der Rechenaufwand an und es sollte versucht werden einen anderen besseren Glätter zu verwenden.  $\gamma$  bestimmt die Art des Mehrgitterzyklus. Für  $\gamma = 1$  beschreibt eine Mehrgitteriteration einen V-Zyklus, für  $\gamma = 2$

einen W-Zyklus (siehe Abbildungen 2.4.1 und 2.4.2). Andere Werte für  $\gamma$  werden praktisch nicht verwendet.

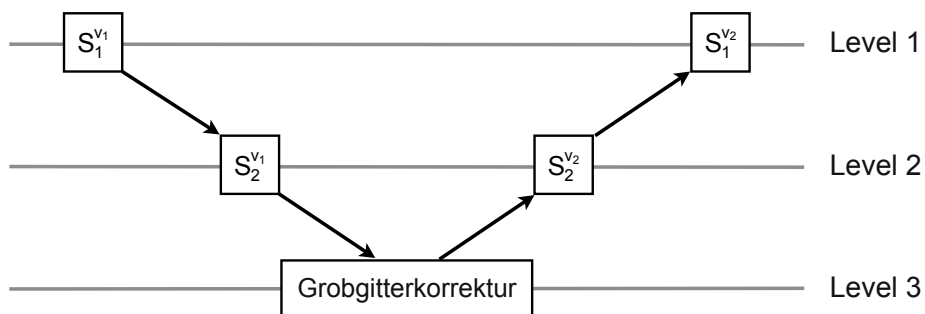


Abbildung 2.4.1: Illustration des Mehrgitterverfahrens (V-Zyklus)

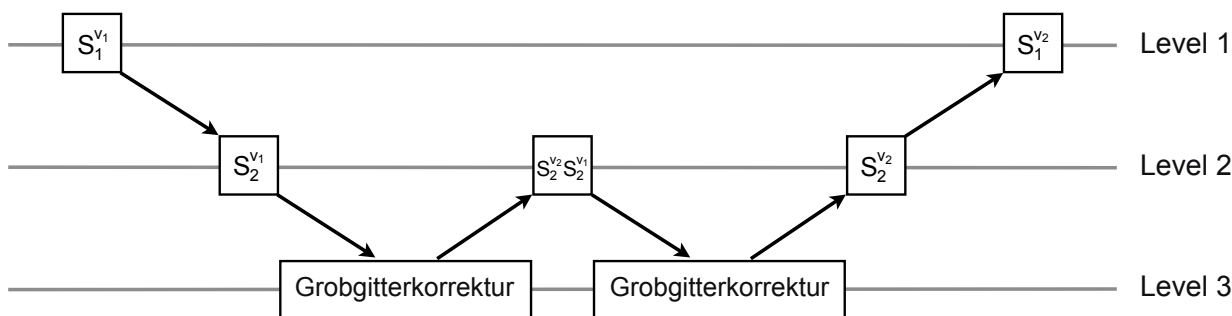


Abbildung 2.4.2: Illustration des Mehrgitterverfahrens (W-Zyklus)

Um die Konvergenz des Mehrgitterverfahrens zu untersuchen, müssen zunächst die Glättungseigenschaft und die Approximationseigenschaft definiert und untersucht werden.

**Definition 2.4.10. Glättungseigenschaft** Ein Iterationsverfahren erfüllt die Glättungseigenschaft, wenn folgendes gilt

$$\|K_l S_l^\nu\| \leq \eta(\nu) \|K_l\| \quad \text{für } 0 \leq \nu \text{ und } l \in [1, \dots, n_{l|v} - 1] \quad (2.4.14)$$

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} \eta(\nu) = 0. \quad (2.4.15)$$

**Satz 2.4.4.** Seien  $K_l$  und  $M$  symmetrisch und positiv definit, weiterhin gelte

$$\|M\|_2 \leq C_M \|K_l\|_2.$$

Dann erfüllt die Iterationsvorschrift

$$x^{i+1} = Sx^i := x^i - M^{-1}(Kx^i - y) \quad (2.4.16)$$

die Glättungseigenschaft in der Spektralnorm.

*Beweis.* Wir betrachten

$$\begin{aligned}
 KS^\nu &= K(\mathbb{1} - M^{-1}K)^\nu = (M - N)(M^{-1}(M - K))^\nu \\
 &= (M - N)(M^{-1}N) = (M - N)M^{-\frac{1}{2}}X^\nu M^{-\frac{1}{2}} \\
 &= M^{\frac{1}{2}}(\mathbb{1} - X)X^\nu M^{\frac{1}{2}},
 \end{aligned} \tag{2.4.17}$$

wobei  $X = M^{-\frac{1}{2}}NM^{-\frac{1}{2}}$  gilt. Daraus folgt

$$\|KS^\nu\|_2 \leq \|M\|_2 \|(\mathbb{1} - X)X^\nu\|_2 \leq \|K_l\|_2 \cdot C_M \cdot \|(\mathbb{1} - X)X^\nu\|_2. \tag{2.4.18}$$

Nun setzt man  $\eta(\nu) = C_M \cdot \|(\mathbb{1} - X)X^\nu\|_2$  und sieht, dass  $\eta(\nu) \rightarrow 0$  für  $\nu \rightarrow \infty$ . Weitere Details können in [Hackbusch, 1991] Abschnitt 10.7.3 nachgeschlagen werden.  $\square$

**Definition 2.4.11. Approximationseigenschaft** Sei  $K_l$  die Matrix auf dem  $l$ -Level der Gitterhierarchie und  $K_{l-1}$  die Matrix auf dem  $(l - 1)$ -Level, dann ist die Approximationseigenschaft erfüllt, wenn gilt

$$\|K_l^{-1} - pK_{l-1}^{-1}r\| \leq C_K / \|K_l\| \quad \text{für } l \in [2, \dots, n_{lv}]. \tag{2.4.19}$$

Mit Hilfe der beiden Eigenschaften formulieren wir den Satz über die Konvergenz des Zweigitterverfahrens.

**Satz 2.4.5.** *Es gelte die Approximationseigenschaft und die Glättungseigenschaft. Dann existiert ein  $\tilde{\nu} > 0$ , so dass*

$$\|T_2(\tilde{\nu}, 0)\| = \|(\mathbb{1} - p_1K_2^{-1}r_1K_1)S_1^{\tilde{\nu}}\| \leq \zeta < 1 \tag{2.4.20}$$

*gilt. Damit konvergiert das Zweigitterverfahren mit einer Konvergenzrate unabhängig von  $N$  und der Rechenaufwand zum Lösen eines linearen Gleichungssystems mit dem Zweigitterverfahren  $T_2(\tilde{\nu}, 0)$  ist  $\propto N$ .*

*Beweis.*

$$\begin{aligned}
 \|(\mathbb{1} - p_1K_2^{-1}r_1K_1)S_1^\nu\| &= \|(K_1^{-1} - p_1K_2^{-1}r_1)K_1S_1^\nu\| \\
 &\leq \|(K_1^{-1} - p_1K_2^{-1}r_1)\| \|K_1S_1^\nu\| \\
 &\leq C_K / \|K_1\| \cdot \eta(\nu) \|K_1\| \\
 &= C_K \cdot \eta(\nu)
 \end{aligned} \tag{2.4.21}$$

Da  $\eta(\nu) \rightarrow 0$  für  $\nu \rightarrow \infty$ , gibt es ein  $\tilde{\nu}$ , so dass  $C_K \cdot \eta(\nu) < 1$  für alle  $\nu \geq \tilde{\nu}$ .  $\square$

Konvergenzuntersuchungen zu allgemeineren Mehrgitterverfahren, also Verfahren mit mehr als zwei Leveln in der Gitterhierarchie, sowie weiterführende Untersuchungen zum V- bzw. W-Zyklus können in [Hackbusch, 1991] nachgeschlagen werden.

Die Wahl der Prolongation, der Restriktion, des Glätters sowie des diskreten Differential Operators  $K_l$  auf den verschiedenen Leveln der Gitterhierarchie beeinflussen die Konvergenz

des Verfahrens stark. Im Folgenden werden geeignete Operatoren vorgestellt.

Eine Prolongation bildet einen Vektor  $x_{l+1}$  von einem gröberen Gitter  $\Omega_{l+1}$  auf ein feineres Gitter  $\Omega_l$  ab. Üblicherweise wird in jedem Gitterpunkt aus  $\Omega_l$  der Vektor  $x_l$  berechnet, indem ausgehend von den Gitterpunkten von  $\Omega_{l+1}$  und dem Vektor  $x_{l+1}$  eine Interpolation durchgeführt wird. Der Prolongationsoperator ergibt sich dann aus der Gleichung  $x_l = p_l x_{l+1}$ . In einer Dimension auf einem äquidistanten Gitter sieht solch ein Prolongationsoperator wie folgt aus

$$p = \left[ \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \right]. \tag{2.4.22}$$

In zwei Dimensionen bekommt man folgenden Stern

$$p = \begin{bmatrix} 1/4 & 1/2 & 1/4 \\ 1/2 & 1 & 1/2 \\ 1/4 & 1/2 & 1/4 \end{bmatrix}. \tag{2.4.23}$$

Die Abhängigkeiten des eindimensionalen Prolongationsoperators sind in Abbildung 2.4.3 illustriert. Ausgehend von einem Prolongationsoperator  $p_l$  kann der Restriktionsoperator  $r_l$  direkt als Adjungierte des Prolongationsoperators  $r_l = p_l^T$  bestimmt werden. Die Ordnung der Restriktion entspricht in dem Fall der Ordnung der Prolongation.

*Bemerkung 2.4.6.* Die Ordnungen der Restriktion und der Prolongation zusammen sollten stets größer sein als die Ordnung des Differentialoperators, anderenfalls ist die Approximationseigenschaft nicht erfüllt.

Die diskreten Differentialoperatoren  $K_l$  erhält man beispielsweise durch Ausführen des selben Diskretisierungsschemas auf jedem Gitter  $\Omega_l$ . Alternativ kann man mit Hilfe eines Diskretisierungsschemas nur  $K_1$  bestimmen. Die Differentialoperatoren auf den gröberen Leveln bekommt man schließlich iterativ mit Hilfe des Galerkinprodukts

$$K_{l+1} = r_l K_l p_l. \tag{2.4.24}$$

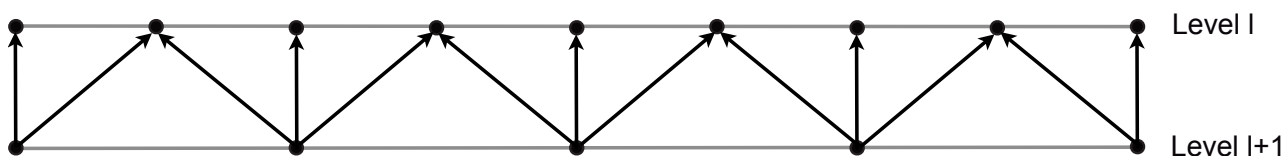


Abbildung 2.4.3: Illustration der Abhängigkeiten zwischen Knoten auf verschiedenen Gitterleveln gegeben durch einen Prolongationsoperator, welcher linear interpoliert.

Betrachten wir abschließend das Modellproblem

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}(\nabla u(x, y)) &= f & (x, y) \in \Omega &= [0, 0] \times [1, 1] \\ u(x, y) &= g & (x, y) \in \partial\Omega. \end{aligned} \tag{2.4.25}$$

Für ein gleichmäßiges Gitter mit Gitterweite  $h$  in  $x$ - und  $y$ - Richtung erhalten wir den diskreten Operator  $K_h = L_{N,FV}$ . Wendet man das gedämpfte Jacobi Verfahren mit  $\omega = 0.5$  an, sind alle Voraussetzungen des Satzes 2.4.4 erfüllt. Daraus folgt, dass das Jacobi Verfahren in diesem Fall die Glättungseigenschaft erfüllt.

Verwendet man eine Prolongation, welche linear Interpoliert, und eine Restriktion, welche sich aus der adjungierten der Prolongation ergibt, ist ebenfalls die Approximationseigenschaft erfüllt. Aus Satz 2.4.5 folgern wir, dass der Rechenaufwand zum Lösen des Modellproblems mit dem Zweigitterverfahren einen optimalen Aufwand  $\propto N$  hat.

Insgesamt können wir festhalten, dass Mehrgitterverfahren gut geeignet sind, um große lineare Gleichungssysteme effizient zu lösen.

## 2.5 Verfahren zur Parameterschätzung

Ein komplexes mathematisches Modell, etwa das in Kapitel 5 vorgestellte Modell für Biogasreaktoren, hat üblicherweise eine Vielzahl von Parametern (z.B. Permeabilität, Viskosität, Sterberate, Aufnahme rate usw.). Um Simulationsrechnungen durchzuführen, müssen sinnvolle Werte für alle Parameter eingesetzt werden. Zunächst wird versucht in der Literatur passende Werte für die anfallenden Parameter zu finden. Allerdings schwanken Literaturangaben zu vielen Parametern oft um mehrere Größenordnungen. Aus diesem Grund muss versucht werden die Parameter richtig zu schätzen. Dies geschieht typischerweise, indem zunächst eine Fitnessfunktion definiert wird und anschließend die Parameter mit einem geeigneten Verfahren so eingestellt werden, dass die Fitnessfunktion in einer kleinen Umgebung minimal wird. Solche Verfahren heißen Optimierungsverfahren. Weitere Informationen können in [Schäfer, 2004], [Box et al., 1969], [Stoer und Witzgall, 1970] und [Nocedal und Wright, 2006] nachgeschlagen werden.

### 2.5.1 Fitnessfunktion

Der Sinn einer Fitnessfunktion  $f$  ist es, ein Maß für die Abweichung der Simulationsergebnisse zur Realität darzustellen. Dabei hängt  $f$  von den Modellparametern  $(p_1, \dots, p_n)$  ab. Die Fitnessfunktion  $f$  kann als eine Kombination von verschiedenen Funktionen  $\tilde{f}_i$  geschrieben werden. Dabei steht jedes  $\tilde{f}_i$  für ein bestimmtes Phänomen, welches in der Realität entweder gemessen wurde oder erwartet werden kann. Stehen experimentelle Daten zur Verfügung können diese beispielsweise auf folgende Art und Weise in die Fitnessfunktion einfließen:

$$\tilde{f}(p_1, \dots, p_n) = \frac{1}{n_{\text{exp}}} \sum_{i=0}^{n_{\text{exp}}-1} (\text{Modell}_i(p_1, \dots, p_n) - \text{Experiment}_i)^2 \quad (2.5.1)$$

Nun können wir die Fitnessfunktion  $f$  folgendermaßen definieren

$$\begin{aligned} f(p_1, \dots, p_n) &:= \tilde{f}(p_1, \dots, p_n) + \sum_j C_j \tilde{f}_j(p_1, \dots, p_n) \cdot \tilde{f}(p_1, \dots, p_n) \\ &= \left( 1 + \sum_j C_j \tilde{f}_j(p_1, \dots, p_n) \right) \cdot \tilde{f}(p_1, \dots, p_n), \end{aligned} \quad (2.5.2)$$

dabei sind  $C_j$  Gewichtungsfaktoren.

Sollen ausschließlich experimentelle Daten in die Fitnessfunktion einfließen, fällt der zweite Teil der Summe in Gleichung (2.5.2) weg. Es ist offensichtlich, dass die Wahl der Fitnessfunktion das Ergebnis der Parameterschätzung beeinflusst. Aus diesem Grund ist es wichtig, die Fitnessfunktion  $f$  sorgfältig auszuwählen.

### 2.5.2 Minimierungsproblem mit Nebenbedingungen

Die meisten Parameter haben obere und/oder untere Schranken, welche beim Minimieren der Fitnessfunktion  $f$  nicht über- bzw. unterschritten werden dürfen. Läuft ein Parameter aus seinem zugehörigen Bereich, ist das Modell meist nicht mehr sinnvoll. Beispielsweise kann ein Parameter, welcher einen Anteil beschreibt, nur im Intervall  $[0, 1]$  liegen. Verlässt solch ein Parameter das Einheitsintervall ist z.B. die Massenerhaltung verletzt und das Modell wird unphysikalisch. Sei  $n_{\text{nbd}}$  die Anzahl der Bedingungen an die Parameter, dann können wir im Allgemeinen Funktionen  $G_i$  definieren, welche diese Bedingungen beinhalten

$$G_i(p_1, \dots, p_n) \leq 0 \quad i \in [1, \dots, n_{\text{nbd}}]. \quad (2.5.3)$$

Das Minimierungsproblem lautet schließlich

$$\min_{(p_1, \dots, p_n)} f \quad \text{so dass} \quad G_i(p_1, \dots, p_n) \leq 0 \quad \forall i \in [1, \dots, n_{\text{nbd}}]. \quad (2.5.4)$$

Die Bedingungen  $G_i$  an die Parameter heißen in diesem Zusammenhang Nebenbedingungen.

### 2.5.3 Numerische Optimierung

Ist die Fitnessfunktion  $f$  aus einem komplexen mathematischen Modell hervorgegangen, kann nichts weiteres über  $f$  ausgesagt werden. Die ersten und zweiten Ableitungen von  $f$  können, sofern sie existieren, nur numerisch berechnet werden. In diesem Zusammenhang ist die Berechnung der Ableitungen sehr aufwendig. Weiterhin kann man nicht davon ausgehen, dass  $f$  linear von den Parametern  $(p_1, \dots, p_n)$  abhängt. Dies sollte bei der Auswahl eines geeigneten Verfahrens berücksichtigt werden. Außerdem kann nicht festgestellt werden, ob das Verfahren, im Falle einer Konvergenz, gegen ein lokales oder globales Minimum konvergiert ist.

Zu den bekanntesten Optimierungsverfahren zählen Trust-Region Verfahren, SQP Verfahren und Liniensuche Verfahren. Alle Verfahren sind iterativ, d.h. ausgehend von einem anfänglichen Parametervektor  $(p_1^0, \dots, p_n^0)$ , welcher als Schätzung dem Verfahren übergeben werden muss,

wird, im Falle einer Konvergenz des Verfahrens, ein Parametervektor  $(p_1, \dots, p_n)$  bestimmt, in dem  $f$  ein lokales Minimum besitzt.

In Kapitel 7 wird ein Quasi-Newtonverfahren mit Liniensuche zur Schätzung der Reaktionsparameter verwendet. Auf dieses Verfahren wird im Folgenden kurz eingegangen. Details zur Implementierung können in Kapitel 6 gefunden werden.

Bei der Liniensuche wird entlang einer Suchrichtung ähnlich wie in Kapitel 2.3.2 das Minimum der Funktion  $f$  gesucht. Ausgehend von einem Parametervektor  $(p_1^k, \dots, p_n^k)$  wird die Suchrichtung im  $(k + 1)$ -ten Schritt durch folgende Gleichung bestimmt

$$d^k := -B_k^{-1} \nabla f(p_1^k, \dots, p_n^k). \quad (2.5.5)$$

Hierbei ist  $B_k$  eine symmetrische invertierbare Matrix. Wird  $B_k$  als Einheitsmatrix gewählt, erhält man die Gradientenabstiegsmethode, für  $B_k = \nabla^2 f(p_1^k, \dots, p_n^k)$  erhält man das Newtonverfahren (vgl. 2.3.1). Stellt  $B_k$  eine Approximation an  $\nabla^2 f(p_1^k, \dots, p_n^k)$  dar, spricht man von einem Quasi-Newtonverfahren.

Anschließend wird entlang der bestimmten Suchrichtung eine Liniensuche durchgeführt, wobei die Nebenbedingungen beachtet werden müssen. Sind nicht mehr alle Nebenbedingungen erfüllt, sollten die entsprechenden Parameter so korrigiert werden, dass für die jeweiligen Nebenbedingungen  $G_i = 0$  gilt.

Der neue Parametervektor  $(p_1^{k+1}, \dots, p_n^{k+1})$  ist schließlich der Vektor, bei dem  $f$  innerhalb der Liniensuche minimal wird.



# Kapitel 3

## Erneuerbare Energien

In diesem Kapitel werden zunächst erneuerbare und fossile Energien definiert und anschließend miteinander verglichen. In Abschnitt 3.1 wird die politische Förderung erneuerbarer Energien in Deutschland erörtert. Abschnitt 3.2 befasst sich mit der Entwicklung von Biogasanlagen in Deutschland und in Abschnitt 3.3 wird die Problematik der in Biogasanlagen auftretenden pathogenen Krankheitserregern erläutert. Abschließend wird in Abschnitt 3.4 als lokales Beispiel die Biogasanlage in Semd vorgestellt.

Unter erneuerbarer Energie, versteht man für den Menschen nutzbare Energie, welche aus einer Quelle stammt, die sich kurzfristig erneuert oder deren Nutzung nicht zum Erschöpfen der Quelle beiträgt. Unter erneuerbare Energien fallen z.B. Hydroenergie, Windenergie, Solarenergie, Geothermie, Gezeitenenergie, Wellenenergie und Energie aus Biomasse. Bei der Energie aus Biomasse kann die Quelle, nämlich die Rohstoffe selbst (z.B. Holz, Mais oder andere nachwachsende Rohstoffe (NaWaRo)), kurzfristig durch erneuten Anbau wiederhergestellt werden. Biomasse kann thermisch verwertet werden oder alternativ in Biogasanlagen zu Biogas abgebaut werden.

Bei den übrigen genannten erneuerbaren Energien, etwa Windenergie und Solarenergie, geht man davon aus, dass die Nutzung der Quelle nicht zum Erschöpfen beiträgt.

Weiterführende Informationen können beispielsweise in [Bührke und Wengenmayr, 2009] nachgeschlagen werden.

Gegenüber den erneuerbaren Energien stehen die fossilen Energien. Unter fossiler Energie versteht man für den Menschen nutzbare Energie aus fossilen Energiequellen. Zu den fossilen Energieträgern zählen z.B. Erdöl, Kohle, Erdgas und Uran. Im Gegensatz zu erneuerbaren Energiequellen sind fossile Energiequellen bei anhaltender Nutzung irgendwann erschöpft.

Beispielsweise wird laut der International Energy Agency im Jahre 2020 das Peak Oil (globales Ölfördermaximum) erreicht werden. Nach dem Peak Oil kann die Fördermenge von Erdöl nicht weiter gesteigert werden und bei gleichzeitig wachsendem Bedarf wird der Preis merklich steigen und damit eine günstige Versorgung mit diesem Energieträger verhindern.

Der Unterschied zwischen fossilen und erneuerbaren Energien wurde bereits 1949 untersucht

[Hubbert, 1949]. Bei der Nutzung von fossilen Energieträgern steigt die Förderrate des Rohstoffes zunächst bis zu einem Maximum an. Danach nimmt die Verfügbarkeit des Rohstoffes ab, während gleichzeitig die Förderrate sinkt. Die eingeschränkte Menge des Rohstoffes sorgt zum einen für steigende Preise und somit zu einer verminderten Verfügbarkeit des Energieträgers. Letztendlich ist der fossile Energieträger erschöpft.

Bei erneuerbaren Energien hingegen zeigt sich ein anderes Bild. In [Hubbert, 1949] wird unter anderem das Beispiel der Stromerzeugung aus Wasserkraft untersucht. Anfangs steigt die installierte elektrische Leistung an, weil immer mehr und effizientere Wasserkraftwerke gebaut werden können. Im Verlauf konvergiert die installierte elektrische Leistung gegen ein asymptotisches Maximum, welches den Fall beschreibt, dass die gesamte globale Wasserkraft effizient genutzt wird. Folglich ist der wesentliche Unterschied zwischen der fossilen und der erneuerbaren Energie, dass langfristig nur bei erneuerbaren Energien die Energiequellen nicht erschöpft sein werden.

In Abbildung 3.0.1 ist der globale Energieverbrauch seit 1880 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass der größte Teil der Energie aus fossilen Energiequellen stammt. Aufgrund der gerade erörterten Problematik kann eine weitere Nutzung fossiler Energiequellen in der aktuellen Größenordnung nicht nachhaltig sein.

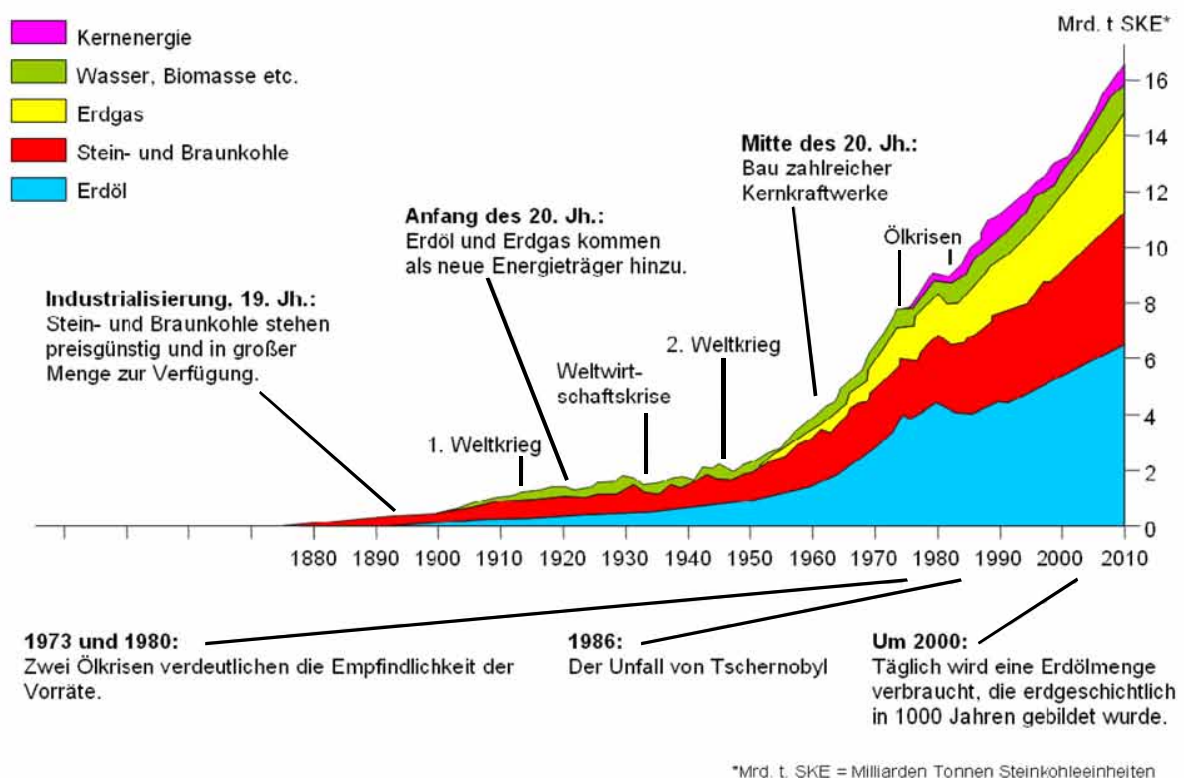


Abbildung 3.0.1: Weltweiter Energieverbrauch seit 1880 aus [Maaß, 2009].

Momentan konkurrieren erneuerbare Energien mit fossilen Energien, wobei fossile Energien zur Zeit noch preiswerter sind. Betrachtet man hingegen den Zeitraum bis 2030, so haben Untersuchungen ergeben, dass eine weltweite Umstellung auf erneuerbare Energien rund 100.000 Mrd. US \$ kosten würde [Jacobson und DeLucchi, 2009]. Würden jedoch weiterhin fossile Energieträger genutzt werden und die Rohstoffpreise sich, aufgrund der reduzierten Verfügbarkeit, um 20 % erhöhen, würden ca. 200.000 Mrd. US \$ an Investitionskosten anfallen [Zittel, 2010]. Eine Umstellung auf erneuerbare Energien würde im betrachteten Szenario innerhalb der nächsten 20 Jahre zu Kosteneinsparungen in Höhe von 100.000 Mrd. US \$ führen.

Ein weiterer Aspekt ist der Ausstoß von Treibhausgasen. Typischerweise werden alle Treibhausgase in der Einheit CO<sub>2</sub>-Äquivalente zusammengefasst. CO<sub>2</sub>-Äquivalente gibt die Menge CO<sub>2</sub> (in Gramm) an, die den gleichen Treibhauseffekt hat, wie alle emittierten Gase zusammen.

Die folgenden Emissionswerte beziehen sich jeweils auf einen kompletten Lebenszyklus eines Kraftwerks. Strom aus einem mit Erdgas betriebenen BHKW emittiert etwa 420 CO<sub>2</sub>-Äquivalente/KWh, Kernkraftwerke emittieren etwa 30 CO<sub>2</sub>-Äquivalente/KWh, Windkraftanlagen etwa 23 CO<sub>2</sub>-Äquivalente/KWh, Solaranlagen etwa 130 CO<sub>2</sub>-Äquivalente/KWh und Biogasanlagen etwa 150 CO<sub>2</sub>-Äquivalente/KWh. Wird die Abwärme des mit Erdgas befeuerten BHKWs genutzt, sinkt der Wert auf etwa 170 CO<sub>2</sub>-Äquivalente/KWh, für Biogasanlagen sinkt der Wert sogar auf -400 CO<sub>2</sub>-Äquivalente/KWh. Die Höhe der Gutschrift wird berechnet, indem der CO<sub>2</sub> Ausstoß, welcher nötig wäre, um die entsprechende Wärmeenergie bereitzustellen, abgezogen wird [Fritsche, 2006].

Erneuerbare Energien emittieren im Vergleich zu fossilen Energien (außer Kernenergie) sehr wenig Treibhausgase. Dies geht bereits aus der anfänglichen Definition hervor, da die Menge Kohlendioxid, die bei der Nutzung des Energieträgers Biomasse freigesetzt wird, beim Wachstum der Biomasse gebunden worden sein muss. Erneuerbare Energien sind im Vergleich zu fossilen Energien in diesem Sinne klimafreundlicher.

Ein weiterer wichtiger Aspekt ist die Verfügbarkeit fossiler Energieträger für die Industrie. Der Ausbau erneuerbarer Energien würde den Verbrauch fossiler Energieträger vermindern und damit auch die Verfügbarkeit dieser Rohstoffe für die Industrie über einen längeren Zeitraum sichern. Gleichzeitig würde die Abhängigkeit von Importen fossiler Energieträger abnehmen. Beispielsweise sorgt ein Streit zwischen der Ukraine und Russland um Gaspreise schon seit einiger Zeit immer wieder für Lieferschwankungen in vielen europäischen Staaten.

Unter den erneuerbaren Energien spielt Energie aus Biomasse eine wichtige Rolle. Biomasse kann thermisch verwertet werden oder in Biogasanlagen zum Energieträger Biogas umgewandelt werden. Dabei ist die Produktion des Energieträgers Biogas unabhängig von äußeren Einflüssen (z.B. Sonneneinstrahlung oder Windstärke). Gespeichertes Biogas kann gezielt (etwa zu Spitzenlastzeiten) in einem angeschlossenen BHKW zur Stromerzeugung genutzt werden.

Ein weiterer Vorteil ist, dass Biogas, nach einer Aufbereitung, direkt in das Erdgas-Netz

eingespeist werden kann und somit eine bereits ausgebaute Infrastruktur dafür zur Verfügung steht. Über das Erdgas-Netz können dann beispielsweise Haushalte oder PKWs mit dem aufbereiteten Biogas versorgt werden.

Weiterhin würde sich durch den Ausbau von Biogasanlagen die momentan zentralisierte (wenige Kraftwerke pro Fläche) in eine dezentralisierte Stromversorgung ändern. Durch die größere Zahl und die gleichmäßigere Verteilung der Kraftwerke wird die Stabilität der Stromversorgung sowie die Effektivität der Kraftwerke erhöht. Beispielsweise kann die entstehende Wärmeenergie in den BHKWs deutlich effizienter, z.B. als Fernwärme, genutzt werden.

### 3.1 Politische Förderung erneuerbarer Energien in Deutschland

Strom aus erneuerbaren Energien wurde in der Vergangenheit meist dezentral von kleineren Unternehmen oder privaten Haushalten in sehr kleinen Mengen produziert. Die Netzbetreiber untersagten oder erschwerten meist die Einspeisung. Um dieses Problem zu beheben, trat 1991 das StromEinspG (Stromeinspeisungsgesetz) in Kraft. Es regelt die Abnahme und die Vergütung des aus erneuerbaren Energien erzeugten Stroms. Vor allem wurden die lokalen Netzbetreiber verpflichtet den erzeugten Strom abzunehmen. Die Vergütung war allerdings an den Marktpreis des Stroms gekoppelt und damit nicht hoch genug, um einen wirtschaftlichen Betrieb zu ermöglichen. Um erneuerbare Energien stärker zu fördern trat im Jahre 2000 das EEG (Erneuerbare Energien Gesetz) in Kraft. Der Zweck und das Ziel des Gesetzes lauten wie folgt:

- „Zweck dieses Gesetzes ist es, insbesondere im Interesse des Klima- und Umweltschutzes eine nachhaltige Entwicklung der Energieversorgung zu ermöglichen, die volkswirtschaftlichen Kosten der Energieversorgung auch durch die Einbeziehung langfristiger externer Effekte zu verringern, fossile Energieressourcen zu schonen und die Weiterentwicklung von Technologien zur Erzeugung von Strom aus Erneuerbaren Energien zu fördern.“
- „Um den Zweck des Absatzes 1 zu erreichen, verfolgt dieses Gesetz das Ziel, den Anteil Erneuerbarer Energien an der Stromversorgung bis zum Jahr 2020 auf mindestens 30 Prozent und danach kontinuierlich weiter zu erhöhen.“

Durch das EEG soll ein dauerhaft wirtschaftlicher Betrieb von Anlagen, welche Strom aus erneuerbaren Energien erzeugen, sichergestellt werden. Dies wird erreicht, indem zum einen die Netzbetreiber verpflichtet werden den Strom abzunehmen und zum anderen den Anlagenbetreibern eine festgelegte Vergütung über 15 bis 20 Jahre zugesichert wird. Die Höhe der Vergütung variiert abhängig von der zugrundeliegenden erneuerbaren Energiequelle. Die bundesweit anfallenden Mehrkosten, die Differenz zwischen Vergütung und Marktpreis des Stroms, werden anteilig unter den Übertragungsnetzbetreibern aufgeteilt. Diese geben die anfallenden Kosten schließlich an die Endverbraucher weiter. Dadurch werden Mehrkosten, die durch regionale Unterschiede in der Stromerzeugung anfallen, ausgeglichen. Das EEG

fördert auch die Steigerung der Effizienz, indem die Vergütung für neu-installierte Anlagen jährlich reduziert wird. Durch eine feste und ausreichend hohe Vergütung, unabhängig vom Marktpreis des Stroms, löste das EEG einen Boom in der Branche der erneuerbaren Energien aus.

In Abbildung 3.1.1 wird die Entwicklung des Anteils der erneuerbaren Energien am Primärenergieverbrauch und Endenergieverbrauch in Deutschland dargestellt. An der Abbildung kann man erkennen, dass der Anstieg im Zeitraum des StromEinspG nur moderat war. Ab dem Inkrafttreten des EEG erhöhte sich der Anteil der erneuerbaren Energien am Primärenergieverbrauch stark [BMU, 2010]. Im Jahre 2009 belief sich dieser Anteil auf 10,1 %, wobei sich der Anteil an der Stromversorgung im selben Jahr auf 16,4 % belief.

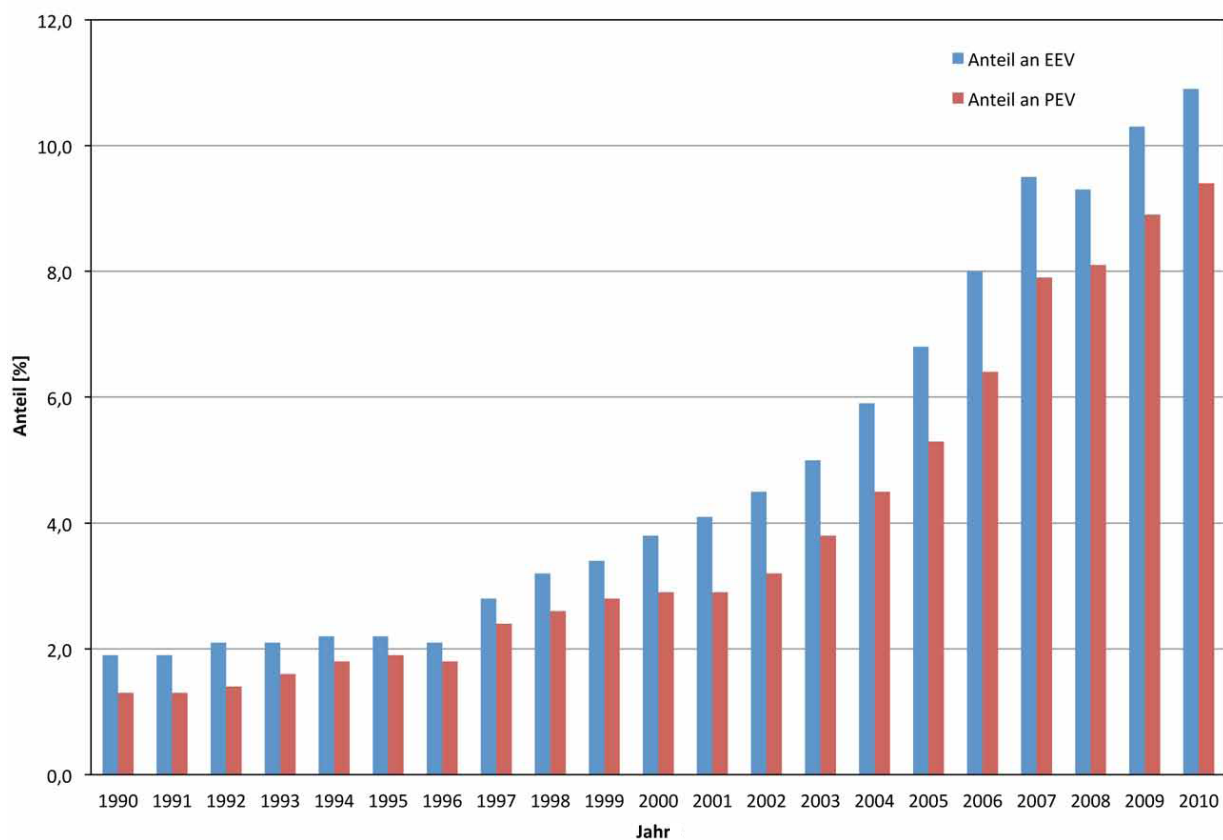


Abbildung 3.1.1: Anteil der erneuerbaren Energien am EEV (Endenergieverbrauch) und am PEV (Primärenergieverbrauch) in Deutschland (aus [BMU, 2010]).

## 3.2 Biogasanlagen in Deutschland

Erst durch das Inkrafttreten des EEG im Jahre 2000 konnten Biogasanlagen wirtschaftlich betrieben werden. Die Einspeisevergütung war allerdings nicht besonders hoch und somit wurden im Gegensatz zu den übrigen erneuerbaren Energien in den Jahren 2000 bis 2004 nur wenige neue Biogasanlagen gebaut. Insbesondere war ein wirtschaftlicher Betrieb nur möglich, wenn kostenfreie bzw. kostengünstige Substrate eingesetzt wurden. Deshalb wurden in diesem Zeitraum vermehrt Gülle und pflanzliche Nebenprodukte (z.B. aussortiertes Obst und Gemüse, Gemüseabputz, Kartoffelschalen, Biertreber oder Rapsextraktionsschrot) als Substrate eingesetzt.

Im Jahre 2004 wurde das EEG novelliert. Unter anderem wurde der sogenannte NaWaRo-Bonus, sowie der Technologie-Bonus für die Trockenfermentation eingeführt. Der NaWaRo-Bonus sorgte dafür, dass nun auch NawaRo, z.B. Mais, wirtschaftlich als Substrat eingesetzt werden konnten. Der Technologie-Bonus für Trockenfermentation wurde gezahlt, wenn der Wasseranteil im Substrat 70 % nicht überstieg.

Diese beiden Boni zusammen sorgten dafür, dass viele neue Biogasanlagen entstanden. Ein Problem der Novellierung war jedoch, dass der Technologie-Bonus für Trockenfermentation zu einer verminderten Nutzung von Gülle als Substrat führte und durch den Fäulnisprozess der Gülle viele klimaschädliche Gase wieder in die Atmosphäre gelangten. Ebenfalls ein Problem der Novellierung war das Ausschließungsprinzip. Es besagte, dass der NaWaRo-Bonus nur gewährt würde, wenn ausschließlich NawaRo, Gülle von Nutztieren und Schlempe von einer landwirtschaftlichen Brennerei als Substrat in dem Biogasreaktor eingesetzt würden. Eine Nutzung von pflanzlichen Nebenprodukten war also wirtschaftlich nicht sinnvoll.

Im Jahre 2009 wurde daraufhin das EEG erneut novelliert. Der Technologiebonus Trockenfermentation fiel weg ebenso wie das Ausschließungsprinzip. Gefördert wurde die Nutzung von Gülle (Gülle-Bonus) und NawaRo (NaWaRo-Bonus). Zusätzlich wurde die Nutzung der im BHKW entstehenden Abwärme gefördert (KWK-Bonus). Durch den Wegfall des Ausschließungsprinzips konnten wieder vermehrt pflanzliche Nebenprodukte eingesetzt werden. Dadurch sollte eine Konkurrenz zwischen Nahrungsmittelproduktion und Produktion von Biomasse als Energieträger vermindert werden.

Schließlich wurde im Jahre 2012 das EEG erneut novelliert, dabei wurden die Boni für NawaRo und Gülle sowie der KWK-Bonus grundlegend überarbeitet. Die Vergütung hängt nun von den verwendeten Substraten ab und ist in zwei Klassen (Einsatzstoffvergütungsklasse I und II) eingeteilt. Der KWK-Bonus ist in die Grundvergütung eingearbeitet. Deshalb ist die Grundvoraussetzung für eine EEG Vergütung eine Verwertung von mindestens 60 % der im BHKW entstehenden Abwärme. Dadurch sollen vor allem effiziente und klimafreundliche Biogasanlagen gefördert werden.

Abbildung 3.2.1 zeigt die Entwicklung der installierten elektrischen Leistung von Biogasanlagen. Es ist zu erkennen, dass insbesondere seit dem Jahr 2004 die installierte elektrische Leistung stark ausgebaut wird. Weitere Informationen zu diesen Themen können in [BMU, 2010] und [Köhler et al., 2009] nachgeschlagen werden.

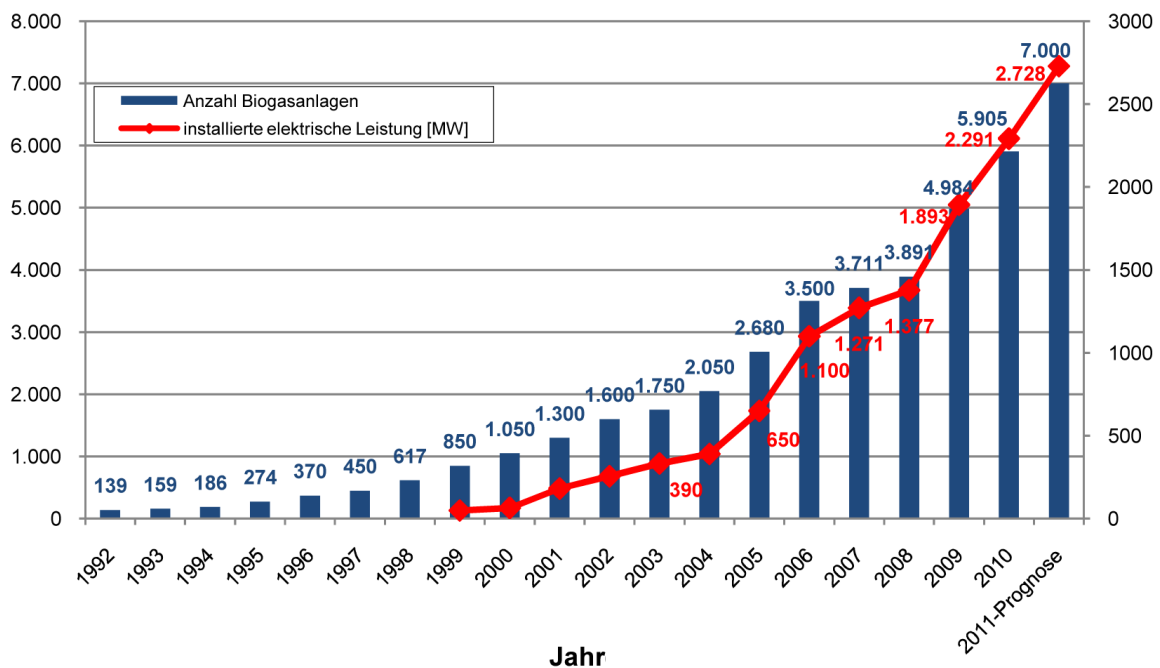


Abbildung 3.2.1: Anzahl der Biogasanlagen in Deutschland und ihre installierte elektrische Leistung (aus [Fachverband Biogas, 2010]).

### 3.3 Pathogene Krankheitserreger in Biogasanlagen

Im Jahr 2011 kam es in Deutschland zu einer EHEC-Epidemie. In diesem Zusammenhang stellte sich die Frage, inwiefern sich pathogene Krankheitserreger in Biogasanlagen vermehren können. Pathogene Krankheitserreger, welche durch das Substrat in den Biogasreaktor eingeführt werden, sind den bereits etablierten Mikroorganismen aufgrund ihrer geringen Menge unterlegen und werden, sofern die Verweilzeit im Biogasreaktor lang genug ist, abgebaut. In der Praxis gibt es in den Reaktoren oft Kurzschlussströmungen, so dass pathogene Krankheitserreger durchaus in den Reststoff gelangen könnten. Allerdings kann im Vergleich zu intensiver Tierhaltung keine erhöhte Gefährdung festgestellt werden. Im Gegenteil, bei entsprechender Betriebsweise werden pathogene Krankheitserreger im Reaktor reduziert (vgl. [Schwarz et al., 2011] und [Kaltschmitt et al., 2009]).

### 3.4 Biogasanlage Semd

In diesem Abschnitt wird die Funktionsweise der Biogasanlage in Semd (in der Nähe von Darmstadt) erläutert. Die Anlage wird von der HSE AG, welche auch alle aufgeführten Daten zur Verfügung gestellt hat, betrieben. Die Biogasanlage wurde im Zeitraum Juni 2009 bis Mai 2010 für rund 5,5 Mio. € gebaut. Die Anlage besteht aus einem Silo, einem Fermenter, einem Nachgärer, einem Gärrestelager und einer Anlage zur Biogasaufbereitung.

Einmal im Jahr werden etwa 15000t Biomasse (gehäckselter Mais) angeliefert und im Silo eingelagert (Abbildung 3.4.1 a). Um aeroben Abbau zu vermeiden, muss die Biomasse durch Überfahren mit schweren Fahrzeugen zunächst verdichtet und anschließend abgedeckt werden (siehe auch [Muha et al., 2009]).

Täglich werden ca. 40t Biomasse mit einem Teleskoplader dem Silo entnommen und in den Feststoffdosierer geladen. Von dort wird die Biomasse über eine Förderschnecke in den Fermenter gegeben (Abbildung 3.4.1 b-d). Im Fermenter wird die eingeführte Biomasse durch Rühren mit dem Fermenterinhalt vermischt (Abbildung 3.4.2 a). Danach gelangt ein Teil des Fermenterinhalt über ein Verbindungsrohr in den Nachgärer, in dem das meiste Biogas entsteht. Im Falle eines Überdrucks kann das überschüssige Biogas klimafreundlich mit Hilfe einer Notfackel verbrannt werden (Abbildung 3.4.2 b-c). Nachdem die Biomasse im Nachgärer größtenteils abgebaut wurde, fließt sie über den Separator in das Gärrestelager. Der Separator trennt dabei die Feststoffe von der Prozessflüssigkeit. Die Flüssigkeit im Gärrestelager steht ebenso wie der Feststoff des Separators den Landwirten als Dünger zur Verfügung (siehe Abbildung 3.4.2 d und Abbildung 3.4.3 a-b). Schließlich wird das produzierte Biogas (ca. 8500 Nm<sup>3</sup> pro Tag) in der Gasaufbereitungsanlage auf Erdgasqualität veredelt und in das Erdgasnetz eingespeist (siehe Abbildung 3.4.3 c).





Abbildung 3.4.1: Bilder der Biogasanlage Semd (Teil 1): a) Silo b) Teleskoplader im Silo c) Silage im Silo d) Feststoffdosierer mit Förderschnecke am Fermenter (Quelle: HSE AG).



Abbildung 3.4.2: Bilder der Biogasanlage Semd (Teil 2): a) Rührwerk am Fermenter b) Verbindungsrohr zwischen Fermenter und Nachgärer, Notfackel c) Nachgärer d) Separator (Quelle: HSE AG).



Abbildung 3.4.3: Bilder der Biogasanlage Semd (Teil 3): a) Gärrestlager b) Abfüllanlage für Gärreste c) Gasaufbereitungsanlage d) Biogasanlage Semd (Quelle: HSE AG).

# Kapitel 4

## Grundlagen der Biogaserzeugung

In Anlehnung an [Mudrack und Kunst, 1985, Kaltschmitt et al., 2009] [Bischofsberger et al., 2005] und [Mumme, 2007] werden in diesem Kapitel grob die Grundlagen der Biogaserzeugung erläutert. Im Prinzip kann aus jedem organischen Material, welches sich anaerob abbauen lässt, Biogas gewonnen werden. Für ausführlichere Informationen sei auf die zitierten Werke verwiesen.

Abschnitt 4.1 beschäftigt sich mit den Eigenschaften von Biogas, in Abschnitt 4.2 werden kurz die entscheidenden Abbauschritte der anaeroben Fermentation dargestellt. Abschnitt 4.3 beschäftigt sich mit den wichtigsten Einflussfaktoren auf die anaerobe Fermentation, während in Abschnitt 4.4 spezielle Einheiten und Schreibweisen aus dem Biogasbereich erläutert werden. Abschnitt 4.5 beschäftigt sich mit theoretischen und praktischen Biogausausbeuten aus diversen Substraten und abschließend werden in Abschnitt 4.6 die am weitesten verbreiteten Verfahrenstechniken dargestellt.

### 4.1 Eigenschaften von Biogas

Biogas ist ein Gasgemisch, welches größtenteils aus den beiden Gasen Methan (etwa 60 %) und Kohlendioxid (etwa 35 %) besteht. Da Methan mit Luft ab einer Konzentration von 5 Vol.-% ein explosives Gasgemisch bilden kann, müssen bei der Biogasproduktion (vor allem in geschlossenen Räumen) Sicherheitsvorschriften eingehalten werden.

Neben dem brennbaren Methan befinden sich im Biogas meist noch unerwünschte Gase, wie etwa Kohlendioxid, Ammoniak, Schwefelwasserstoff oder Wasserdampf. Je nach Art der Verwertung von Biogas, ist es nötig das Gas zunächst auf eine entsprechende Qualität aufzubereiten, d.h. die störenden Gase zu eliminieren. Eine durchschnittliche Zusammensetzung von Biogas ist in Tabelle 4.1.1 dargestellt.

Biogas kann in verschiedenen Bereichen eingesetzt werden, etwa als Kraftstoff in Fahrzeugen, als Kraftstoff in Blockheizkraftwerken, in denen Strom und Wärme entsteht, oder es kann nach einer Aufbereitung in das bestehende Erdgasnetz eingespeist werden. Weiterführende Informationen zu den Eigenschaften und Nutzungsmöglichkeiten von Biogas können in [Kaltschmitt et al., 2009] nachgeschlagen werden.

Gas	Schwankungsbreite im Biogas	Durchschnitt
Methan	45 – 70 %	60 %
Kohlendioxid	25 – 55 %	35 %
Stickstoff	0,01 – 5 %	1 %
Schwefelwasserstoff	0,0 – 1,8 %	0,03 %
Sauerstoff	0,01 – 2 %	0,3 %
Wasserdampf (bei 25°C und 1013mbar)	3,1 %	3,1 %

Tabelle 4.1.1: Biogaszusammensetzung und Schwankungsbreite (vgl. [IE Leipzig, 2005])

## 4.2 Anaerobe Fermentation

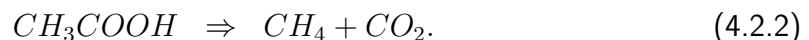
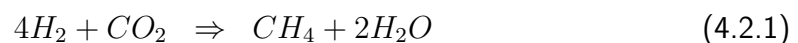
Unter Fermentation versteht man die Umsetzung von organischen Substanzen mit Hilfe von Mikroorganismen (z.B. Bakterien-, Pilz- und Zellkulturen) oder Enzymen. Man unterscheidet zwischen der aeroben Fermentation, in der für die Umsetzung des Substrats Sauerstoff notwendig ist, der anoxischen Fermentation, bei der gebundener Sauerstoff ( $NO_3^-$ ) als Oxidationsmittel dient, und der anaeroben Fermentation, welche unter Ausschluss von Sauerstoff abläuft.

Fermentationen, sowohl anaerob als auch aerob, werden in vielen verschiedenen Bereichen eingesetzt, so sind etwa Gärungen anaerobe Fermentationen. Beispielsweise kommt die Milchsäuregärung bei der Herstellung von Sauermilchprodukten (z.B. Joghurt und Kefir) zum Einsatz. Weiterhin wird die Milchsäuregärung zur Erzeugung von Sauerkraut aus Weißkohl verwendet. Dabei hat die Gärung eine konservierende Wirkung auf den Weißkohl. Die Ethanolgärung wird bei der Weinherstellung verwendet, um Zucker in Ethanol und Kohlendioxid abzubauen. Ein weiteres Beispiel ist die Herstellung von Tabak. Dieser wird durch eine Gärung aus getrocknetem Rohtabak gewonnen. Des Weiteren macht sich die Industrie einzelne Fermentationsprozesse zunutze, um gezielt Fermentationsprodukte zu erzeugen. Penicillin wird beispielsweise durch Pilze der Gattung *Penicillium*, vor allem durch Fermentation von Maisquellwasser, gewonnen. Ein anderes Anwendungsgebiet ist die Abwasserreinigung bei der durch Fermentationen organische Stoffe im Abwasser abgebaut werden. Weitere Informationen zu Fermentationen können in [Mudrack und Kunst, 1985, Kaltschmitt et al., 2009, Bryant, 1979, Bischofsberger et al., 2005] und [Mumme, 2007] nachgeschlagen werden.

Bei der aeroben Fermentation kann das organische Substrat in mehreren Schritten bis zu den wesentlichen Endprodukten Kohlendioxid und Wasser „veratmet“ werden. Beide Endprodukte können nicht weiter oxidiert werden, weil die im Substrat „gespeicherte“ Energie vollständig von den Mikroorganismen verbraucht wurde. Beim vollständigen anaeroben Abbau entsteht nach insgesamt vier Schritten ein brennbares Gasgemisch (Biogas), welches sich im wesentlichen aus brennbarem Methan und Kohlendioxid zusammensetzt. Das Verhältnis von Kohlendioxid zu Methan ist ein entscheidendes Qualitätsmerkmal, da die beiden Gase den

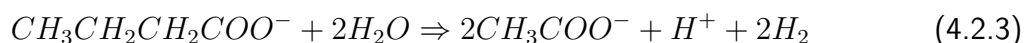
Heizwert des Biogases am stärksten beeinflussen. Eine typische Zusammensetzung von Biogas ist in Tabelle 4.1.1 dargestellt. Der vollständige anaerobe Abbau kann nach [Bryant, 1979] in vier Prozessphasen eingeteilt werden (vgl. Abbildung 4.2.1).

1. **Hydrolyse:** In der Hydrolyse-Phase werden langkettige ungelöste Moleküle, sogenannte Polymere, mit Hilfe der gebildeten Enzyme von hydrolytischen Mikroorganismen in kürzere Moleküle gespalten. Zu den Ausgangsprodukten zählen Kohlenhydrate, Fette und Proteine und zu den Endprodukten gehören beispielsweise Aminosäuren, Einfachzucker und LCFA (langkettige Fettsäuren). Entscheidend ist, dass die Endprodukte im Wasser lösbar sind und deshalb den Mikroorganismen in der Prozessflüssigkeit zur Verfügung stehen.
2. **Acidogenese:** In der Acidogenese-Phase (deutsch Versäuerungs-Phase) werden die Endprodukte der Hydrolyse von fermentativen Mikroorganismen weiter zu kurzkettigen organischen Säuren (etwa Essigsäure, Buttersäure, Propionsäure, Milchsäure, Valeriansäure, Capronsäure), Alkoholen (etwa Ethanol), Wasserstoff und Kohlendioxid abgebaut. Die Acidogenese läuft parallel zur Hydrolyse ab und die Mikroorganismen gewinnen dabei erstmals Energie. Die Endprodukte der Acidogenese hängen stark vom Wasserstoffpartialdruck ab. Bei hohem Wasserstoffpartialdruck werden vermehrt Propion-, Butter- und Milchsäure sowie Ethanol erzeugt. Bei niedrigem Wasserstoffpartialdruck hingegen entsteht vermehrt Essigsäure. Weitere Informationen zur Wirkung des Wasserstoffpartialdrucks auf die Acidogenese können in [Stams, 1994] und [Mosey, 1981] nachgeschlagen werden.
3. **Acetogenese:** In der Acetogenese werden die flüssigen Endprodukte der Acidogenese (organ. Säuren und Alkohole) weiter zu Essigsäure abgebaut. Der Wasserstoffpartialdruck spielt auch hier eine entscheidende Rolle, nur bei sehr niedrigem Wasserstoffpartialdruck können manche Säuren, bspw. Propion- und Buttersäure, in Essigsäure umgewandelt werden (vgl. [Thauer et al., 1977]).
4. **Methanogenese:** In der Methanogenese wird mit Hilfe von Archaeen, methanogenen Mikroorganismen, Methan gebildet. Methan kann dabei entweder aus Essigsäure oder aus Wasserstoff und Kohlendioxid gebildet werden:



Die Mikroorganismen jeder einzelnen Phase hängen in gewissem Sinne von der Aktivität der übrigen Phasen ab. Beispielsweise sorgen die in der Acidogenese und Acetogenese erzeugten Säuren für ein Abfallen des pH-Wertes. Wenn die Säuren schließlich in der Methanogenese nicht schnell genug abgebaut werden, kann der pH-Wert so weit absinken, dass eine Hemmung eintritt und der gesamte Prozess zum Erliegen kommt.

In [Thauer et al., 1977] wurde untersucht, dass bei der Umsetzung von Buttersäure zu Essigsäure bei pH 7



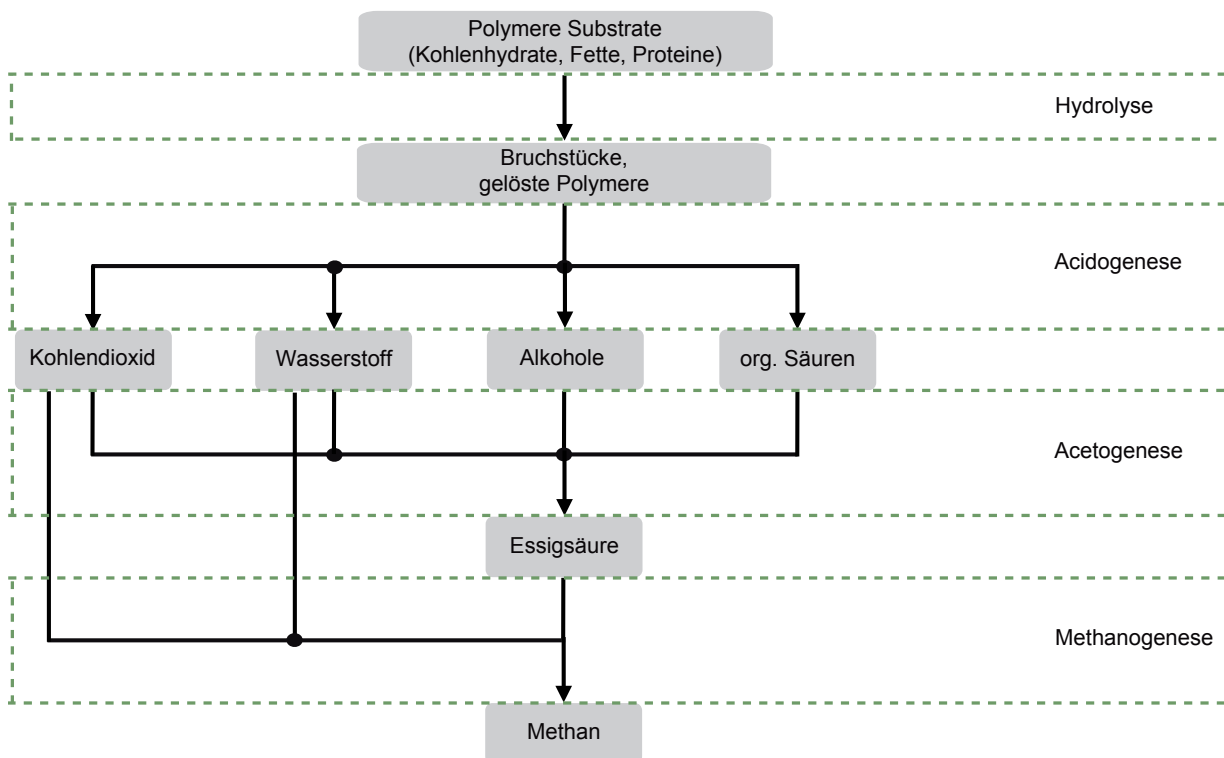


Abbildung 4.2.1: Illustration der anaeroben Fermentation: In den grauen Kästen ist mit Pfeilen der Abbauweg des Substrates dargestellt. In den grünen gestreiften Kästen sind die zugehörigen Prozessphasen illustriert (Abbildung aus [Mudrack und Kunst, 1985]).

eine Gesamtenergie von 48,2 kJ investiert werden muss. Acetogene Mikroorganismen hätten von der Umsetzung von Buttersäure zu Essigsäure keinen Nutzen. Aus diesem Grund leben diese acetogenen Mikroorganismen in Symbiose mit methanogenen Mikroorganismen, welche durch die Umsetzung des entstandenen Wasserstoffs und der gelösten Kohlensäure zu Methan



eine Gesamtenergie von 135,6 kJ gewinnen und einen Teil davon an die symbiotischen acetogenen Mikroorganismen abgeben. In dieser Symbiose ist die Umsetzung von Buttersäure zu Essigsäure und Wasserstoff für die acetogenen Mikroorganismen lohnenswert. Weiterhin sind viele acetogene Mikroorganismen nur in einer Umgebung mit niedrigem Wasserstoffpartialdruck lebensfähig. Durch eine Symbiose von acetogenen und methanogenen Mikroorganismen kann der erzeugte Wasserstoff direkt verbraucht werden und der Wasserstoffpartialdruck steigt nicht so stark an. Aufgrund der Symbiose ist eine räumliche Nähe zwischen acetogenen und methanogenen Mikroorganismen nötig. Deshalb darf in einem durchmischten Reaktor nicht zu stark gerührt werden (vgl. [Mudrack und Kunst, 1985]). Dieses Beispiel zeigt, dass ein reibungsloses Zusammenspiel der verschiedenen Phasen nötig ist, damit die vollständige anaerobe Fermentation funktionieren kann.

Die Abbau-Geschwindigkeit wird durch die langsamste Prozessphase bestimmt. Bei schwer abbaubaren Substraten (z.B. Stroh) ist typischerweise die Hydrolyse die geschwindigkeitslimitierende Phase, wohingegen bei leicht abbaubaren Substraten (z.B. Zucker) die Methanogenese die geschwindigkeitslimitierende Phase ist. In diesem Fall darf die Raumbelastung im Reaktor nicht zu hoch gewählt werden, weil sonst die schnell ablaufenden Phasen (Hydrolyse und Acidogenese) dafür sorgen, dass der pH-Wert zu weit absinkt und der ganze Prozess zum Erliegen kommt.

### 4.3 Einflussfaktoren auf die anaerobe Fermentation

In diesem Abschnitt werden grob die wichtigsten Einflussfaktoren auf die anaerobe Fermentation erläutert. Weitere Informationen sowie weitere Einflussfaktoren können in [Bischofsberger et al., 2005] nachgeschlagen werden.

- **Trockensubstanz/Wassergehalt**

Gleichung (4.5.1) in Abschnitt 4.5 zeigt, dass bei der anaeroben Fermentation von organischen Materialien zu Biogas Wasser benötigt wird. Deshalb muss entweder das eingesetzte Substrat feucht genug sein, oder es muss zusätzlich Wasser zugeführt werden. Für einen ungehemmten Prozess sollte der TS-Gehalt, der Anteil der Trockensubstanz, aller eingeführten Stoffe nicht über 34 % liegen, das entspricht einem Wassergehalt von mindestens 66 %.

Es gibt in der Verfahrenstechnik eine Aufteilung in trockene/feste und flüssige Substrate. Flüssige Substrate haben typischerweise einen TS-Gehalt von unter 6 %. Substrate mit einem TS-Gehalt zwischen 6 % und 15 % heißen halbfest. Ab einem TS-Gehalt von 15 % spricht man von festen Substraten. Im Gegensatz zu festen Substraten sind flüssige Substrat leichter rühr- und pumpbar (vgl. [Mumme, 2007]).

- **Temperatur**

Die Geschwindigkeit von chemischen Reaktionen nimmt generell mit steigender Temperatur zu. Für die bei der anaeroben Fermentation auftretenden Prozesse gilt das nur eingeschränkt. Das liegt vor allem daran, dass Mikroorganismen, die jeweils ein bestimmtes Temperaturoptimum haben, in den Prozess involviert sind.

Im Biogasbereich unterscheidet man zwischen drei verschiedenen Temperaturbereichen: Psychrophile (unter 20 °C), mesophile (zwischen 20 °C und 40 °C) und thermophile (über 40 °C). Mesophile Mikroorganismen haben ein Temperaturoptimum bei etwa 37 °C, während thermophile Mikroorganismen ihr Optimum bei ca. 55 °C haben.

Psychrophil betriebene Reaktoren kommen in der Praxis meist nicht vor.

Die meisten methanogenen Mikroorganismen sind mesophil. Eine mesophile Methanogenese erhöht also aufgrund der Artenvielfalt die Stabilität des Prozesses. Auf der anderen Seite kann bei einem thermophilen Betrieb eine Erhöhung der Abbaugeschwindigkeit um etwa 25-50 % im Vergleich zum mesophilen Betrieb erreicht werden (vgl. [Mumme, 2007]). Zusätzlich werden bei thermophil betriebenen Reaktoren pathogene Keime effektiver inaktiviert. Bei der Wahl der Temperatur sollte auch der



Feststoffgehalt/Wassergehalt des Substrats berücksichtigt werden. Bei der anaeroben Fermentation entsteht relativ wenig Abwärme. Deswegen ist bei nassen Substraten eine mesophile Fahrweise energetisch günstiger, da im Vergleich zu einer thermophilen Fahrweise weniger Energie für die Erwärmung des Wassers verwendet werden muss. Ob einstufige Biogasanlagen (vgl. Kapitel 4.6) mesophil oder thermophil betrieben werden sollten, muss also im einzelnen entschieden werden. In einem zweiphasigen zweistufigen Verfahren (vgl. Kapitel 4.6.2) kann es von Vorteil sein, die erste Stufe (Hydrolyse) thermophil und die zweite Stufe (Methanreaktor) mesophil zu betreiben. Dadurch hat man zum einen in der Methanogenese eine größere Artenvielfalt und gleichzeitig werden pathogene Keime in der thermophilen Hydrolyse effektiv inaktiviert. Ein weiterer Vorteil ist, dass mesophile methanogene Mikroorganismen in einer thermophilen Hydrolyse weitestgehend inaktiv sind und deshalb der überwiegende Teil des Methans in der zweiten Stufe (Methanreaktor) gebildet wird.

Eine Temperaturumstellung ist ohne größeren Aufwand nicht möglich, da die Stoffwechselaktivität der Mikroorganismen jeweils nur in einem Temperaturbereich effektiv ist. In Tabelle 4.3.1 sind die Vorteile der beiden meist verwendeten Fahrweisen noch einmal aufgelistet. Weitere Informationen können in [Batstone et al., 2002, Mumme, 2007, Bischofsberger et al., 2005] nachgeschlagen werden.

mesophile Vergärung	thermophile Vergärung
- geringerer Wasserdampfgehalt des Gases - weniger $CO_2$ im Gas (da $CO_2$ besser in der Flüssigkeit gelöst bleibt) - in der Regel bessere Energiebilanz - größere Vielfalt der Organismen und daher größere Stabilität des Abbaus	- schnellere Wachstumsraten - kürzere Verweilzeit, durch höheren Abbaugrad des Substrats - bessere Abtötung von pathogenen Keimen

Tabelle 4.3.1: Vorteile der mesophilen und thermophilen Vergärung (aus [Kaltschmitt et al., 2009])

• **Durchflussrate/Verweilzeit**

Es wird zwischen der sogenannten hydraulischen Verweilzeit (HRT, engl. **H**draulic **R**etention **T**ime) und der Verweilzeit der nicht gelösten Feststoffe (SRT, engl. **S**olid **R**etention **T**ime) unterschieden. Die hydraulische Verweilzeit gibt an, wie lange gelöste Substanzen durchschnittlich benötigen, um durch den Reaktor zu fließen. Es gilt folgender Zusammenhang

$$HRT = \frac{V_{\text{nutz}}}{Q_{\text{in}}} \tag{4.3.1}$$

Hierbei ist  $V_{\text{nutz}}$  das effektiv nutzbare Reaktor-Volumen (also der Porenraum) und  $Q_{\text{in}}$  ist der in den Reaktor fließende Volumenstrom. Die Durchflussrate ist reziprok zur HRT

$$D = \frac{1}{HRT} \tag{4.3.2}$$

Durch die aus dem Reaktor strömende Flüssigkeit werden Mikroorganismen ausgeschwemmt. Entsprechend muss in einem stabil laufenden Reaktor die Menge der ausgeschwemmten Mikroorganismen ähnlich sein zu der Menge der nachgewachsenen Mikroorganismen. Erniedrigt man die HRT zu stark, werden zu viele Mikroorganismen ausgeschwemmt und der gesamte Prozess kommt nach einiger Zeit zum Erliegen. Um trotzdem Reaktoren mit kurzer HRT zu betreiben, müssen die Mikroorganismen immobilisiert werden. Dies kann z.B. durch Füllkörper, auf denen Mikroorganismen haften können (z.B. in Festbettreaktoren), oder durch ein Schlammbett (z.B. UASB Reaktoren) erfolgen. Durch die Immobilisierung wird die Menge der ausgeschwemmten Mikroorganismen stark reduziert und so das Gleichgewicht wieder hergestellt.

Die durchschnittliche Verweilzeit des Substrats (SRT) sollte abhängig von der Temperatur und dem Substrat gewählt werden. Im Prinzip gilt der Zusammenhang je höher die Temperatur und je leichter das Substrat sich abbauen lässt, desto kürzer kann die SRT gewählt werden. An der Methansummenkurve aus Abbildung 4.5.1 kann man erkennen, dass die Gasproduktionsrate mit der Zeit abnimmt. Aus ökonomischen Gründen ist es deshalb sinnvoll die SRT so zu wählen, dass etwa 75 % des theoretisch abbaubaren CSBs (siehe Abschnitt 4.4) abgebaut werden (vgl. [Kaltschmitt et al., 2009]).

- **Kontakt zwischen Mikroorganismen und Substrat**

Um einen Reaktor effektiv zu betreiben, muss sichergestellt werden, dass der Kontakt zwischen Mikroorganismen und Substrat reibungslos funktioniert. In zweiphasigen Anlagen wird dies durch die Prozessflüssigkeit gewährleistet (siehe Abschnitt 4.6). In einphasigen Anlagen gibt es keine Trennung zwischen Feststoff und Flüssigkeit. Aus diesem Grund werden einphasige Anlagen gerührt. Die Rührgeschwindigkeit muss dabei so eingestellt sein, dass zum einen der Reaktorinhalt möglichst homogen ist, d.h. Sink- und Schwimmschichten vermieden werden, um einen optimalen Kontakt zwischen Mikroorganismen und Substrat zu gewährleisten. Zum anderen muss sichergestellt werden, dass durch die bei der Durchmischung auftretenden Kräfte Symbiosen zwischen Mikroorganismen nicht gestört werden (siehe Abschnitt 4.2). Weitere Informationen können in [Mumme, 2007, Bischofsberger et al., 2005] nachgeschlagen werden.

- **pH-Wert**

Wie bereits in Abschnitt 4.2 beschrieben, werden für einen vollständigen anaeroben Abbau verschiedene Gruppen von Mikroorganismen benötigt. Die Aktivität jeder einzelnen Gruppe wird dabei stark durch den pH-Wert beeinflusst. Der optimale pH-Wert für methanogene Mikroorganismen liegt zwischen 7,0 und 7,5. Säurebildende Bakterien hingegen haben ihren optimalen Bereich zwischen 5,0 und 6,5 (vgl. [Kaltschmitt et al., 2009]). Da methanogene Mikroorganismen sehr empfindlich auf ein Abfallen des pH-Wertes reagieren, stellt sich bei einstufigen Anlagen meist ein pH-Wert im neutralen Bereich ein. Sinkt der pH-Wert ab, funktioniert die Methanogenese nicht mehr und die neu produzierten Säuren führen zu einem weiteren Abfallen des pH-Wertes. Um den pH-Wert wieder anzuheben, kann entweder die Substratzufuhr

kurzfristig unterbrochen werden, um den methanogenen Mikroorganismen genügend Zeit zu geben die organischen Säuren abzubauen, oder alternativ können dem Reaktor Neutralisationsmittel, wie etwa Kalziumoxid, zugegeben werden. In zweistufigen Anlagen (vgl. Abschnitt 4.6.2) kann der pH-Wert für jede Stufe optimal gewählt werden. Üblicherweise wird für die Hydrolyse ein pH-Wert im Bereich 5,0-6,5 gewählt. Weitere Informationen können in [Kaltschmitt et al., 2009] nachgeschlagen werden.

- **Redoxpotential**

Methanogene Mikroorganismen benötigen für ein optimales Wachstum niedrige Redoxpotentiale (-300mV - -330mV) (vgl. [Kaltschmitt et al., 2009]). Niedrige Redoxpotentiale können erreicht werden, indem möglichst wenige Oxidationsmittel, wie Sauerstoff, Sulfate, Nitrate und Nitrite, zugeführt werden.

- **Nährstoffe**

Die dem Reaktor beigeführten Substrate sollten für einen optimalen Prozess genügend Nährstoffe und Spurenelemente enthalten. Das Nährstoffverhältnis C:N:P:S sollte näherungsweise 450:15:5:3 betragen, wobei das C:N Verhältnis zwischen 20:1 und 30:1 liegen kann (vgl. [Mumme, 2007]). Zuviel Stickstoff fördert die Bildung von Ammoniak, welcher sich hemmend auf den Prozess auswirkt, während bei einer Unterversorgung mit Stickstoff der Kohlenstoff nicht vollständig abgebaut werden kann. Die Methanogenese hat einen hohen Bedarf an Spurenelementen, etwa Nickel und Kobalt, so dass es bei der Vergärung von Monosubstraten leicht zu Mangelerscheinungen und damit zu einer Hemmung des Prozesses kommen kann. Weitere Informationen können in [Kaltschmitt et al., 2009, Mumme, 2007] nachgeschlagen werden.

- **Hemmende Stoffe**

Es gibt eine große Vielfalt an Stoffen, welche sich hemmend auf den Gärungsprozess auswirken. Die meisten Stoffe wirken dabei auf Mikroorganismen. Einige Hemmstoffe reduzieren die Stoffwechselaktivität der Mikroorganismen nur kurzfristig, während andere Hemmstoffe die Mikroorganismen komplett inaktivieren können. In Tabelle 4.3.2 werden die wichtigsten Stoffe aufgelistet. Weitere Informationen zu hemmenden Stoffen können in [Batstone et al., 2002, Bischofsberger et al., 2005, Kaltschmitt et al., 2009, Mumme, 2007] nachgeschlagen werden.

Hemmstoffe	Hemmkonzentration [mg/l]	Anmerkung
Sauerstoff	> 0,1	Hemmung der obligat anaeroben Organismen
Schwefelwasserstoff	> 50	Hemmung steigt mit sinkendem pH-Wert
Ammoniumstickstoff	> 3500 (pH= 7,0)	Hemmung steigt mit höherem pH-Wert, hohe Adaptionfähigkeit der Mikroorganismen
flüchtige Fettsäuren	> 2000* (pH= 7,0)	Hemmung steigt mit sinkendem pH-Wert
Desinfektionsmittel Antibiotika	stoffspezifisch	Hemmung ist wirkstoffabhängig

Tabelle 4.3.2: Typische Hemmstoffe des Gärprozesses (aus [Mumme, 2007])

\*) Konzentration als Essigsäureäquivalent in ppm

## 4.4 Einheiten und Schreibweisen

In diesem Abschnitt werden die speziell im Biogasbereich häufig verwendeten Einheiten und Schreibweisen erklärt. Auf allgemein bekannte Größen (z.B. Durchflussrate) wird nicht weiter eingegangen.

- **TS** oder **TM** steht für Trockensubstanz bzw. Trockenmasse und beschreibt den Anteil einer Substanz, welcher nach Abzug von Rohwasser übrig bleibt.
- **oTS** oder **oTM** steht für organische Trockensubstanz bzw. organische Trockenmasse und beschreibt den Anteil einer Substanz, welcher nach Abzug von Rohwasser und aller mineralischer Bestandteile übrig bleibt.
- **BSB** (engl. BOD) steht für den biologischen Sauerstoffbedarf und gibt an, wie viel Sauerstoff benötigt wird, um ein vorliegendes Substrat unter bestimmten Bedingungen biologisch abzubauen.
- **CSB** (engl. COD) steht für den chemischen Sauerstoffbedarf und gibt an, wie viel Sauerstoff benötigt wird, um ein vorliegendes Substrat vollständig mit Kaliumdichromat ( $K_2Cr_2O_7$ ) zu oxidieren. Der CSB beinhaltet im Gegensatz zum BSB auch die biologisch nicht abbaubaren Stoffe und ist daher meist größer als der BSB. Wenn für das Verhältnis von BSB zu CSB folgendes gilt

$$\frac{BSB}{CSB} \approx 1, \quad (4.4.1)$$

ist das Substrat biologisch gut abbaubar.

Der CSB  $\nu_{O_2}$  eines Moleküls der Form  $C_nH_aO_bN_c$  ist gegeben durch

$$\nu_{O_2} = n + \frac{1}{4}a - \frac{1}{2}b - \frac{3}{4}c \quad (4.4.2)$$

- **Nm<sup>3</sup>** oder **NI** steht für Normkubikmeter bzw. für Normliter und beschreibt das Volumen eines trockenen Gases bei Normbedingungen (Temperatur: 273,15 K, Druck: 1 atm).

- Die **Verweilzeit** wird in Tagen gemessen und gibt die durchschnittliche Aufenthaltsdauer eines Partikels in einem Reaktorteil an.
- **Raumbelastung** wird in der Einheit  $\text{kg oTS}/(\text{m}^3 \cdot \text{d})$  angegeben und gibt an, wie viel organische Trockensubstanz dem Reaktor pro Tag zugeführt wird.
- **Gasausbeute** wird in der Einheit  $\text{Nm}^3/\text{kg oTS}$  angegeben und beschreibt die Menge des produzierten Gases bezogen auf die zugeführte Menge an organischer Trockensubstanz.

## 4.5 Gasausbeuten

Die maximale Biogas- bzw. Methanausbeute wird durch die Zusammensetzung des Substrats beeinflusst. Das Substrat wiederum ist bei der Produktion und bei der Lagerung vielen äußeren Einflüssen ausgesetzt. Beispielsweise ist es bei der Einlagerung von NawaRo wichtig, dass im Silo der Fäulnisprozess nicht einsetzt (siehe [Muha et al., 2009]). Ebenso zählt etwa das Wetter während der Wachstumsphase der NawaRo zu den äußeren Einflüssen. Ein weiterer wichtiger Punkt bei den realen Gasausbeuten ist die Verweilzeit des Substrats im Reaktor. Typischerweise wird das Substrat am Anfang schneller abgebaut, während gegen Ende des Abbauprozesses die Abbaugeschwindigkeit stark stagniert. Deshalb wird in den meisten Biogasanlagen die Verweilzeit nicht so hoch gewählt, dass das Substrat vollständig abgebaut wird. In Abbildung 4.5.1 ist eine typische Methansummenkurve dargestellt. Man kann erkennen, dass für  $t > 15$  d die Methanbildungsrate im Vergleich zu  $t < 5$  d sehr gering ist.

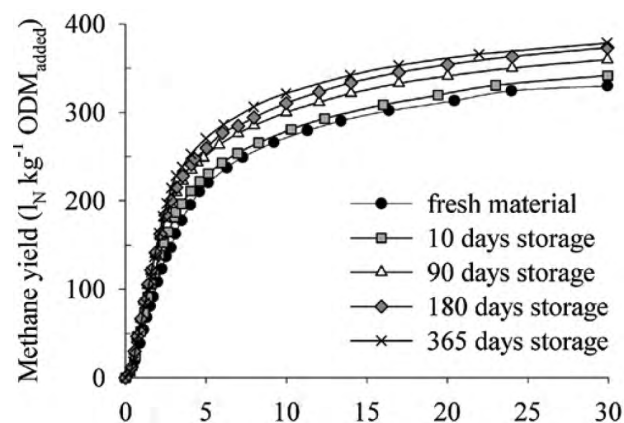


Abbildung 4.5.1: Typische Methansummenkurve aus verschiedenen Versuchsreihen mit dem Standardgärverfahren nach VDI 4630 (aus [Herrmann et al., 2011]).

In den Tabellen 4.5.1 und 4.5.2 sind maximale Biogasausbeuten für verschiedene Substrate und Stoffe angegeben. Aus dem gerade erklärten Sachverhalt können diese Angaben aber nur als grobe Richtwerte verstanden werden.

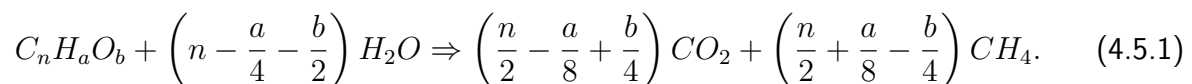
Stoffgruppe	Methangehalt (Vol.-%)	Biogasausbeute (Nm <sup>3</sup> /(kg oTS))
Kohlenhydrate	50 – 55	0,7 – 0,8
Proteine	70 – 75	0,6 – 0,7
Fette	68 – 73	1,00 – 1,25
Bioabfall	55 – 68	0,35 – 0,50
NawaRo	50 – 62	0,5 – 0,7

Tabelle 4.5.1: Biogasausbeuten verschiedener Stoffe (siehe [Mumme, 2007])

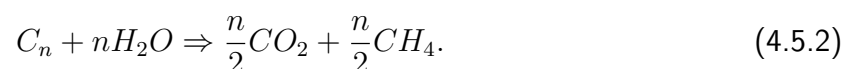
Substrat	Biogasausbeute (Nm <sup>3</sup> /(kg oTS))
Rinderkot	0,315
Schweinekot	0,415
Stroh 2mm lg,	0,423
Stroh 30mm lg,	0,383
Kartoffelkraut	0,606
Gras	0,557
Zuckerrübenblätter	0,501

Tabelle 4.5.2: Biogasausbeuten verschiedener Substrate (siehe [Mudrack und Kunst, 1985])

In [Buswell und Mueller, 1952] wurde die Biogasausbeute für allgemeine organische Moleküle der Form  $C_nH_aO_b$  untersucht. Dabei wurde folgende Summenformel aufgestellt:



Aus Gleichung (4.5.1) kann die maximal mögliche Biogas- bzw. Methanausbeute bestimmt werden, indem man annimmt, dass  $n \gg a$  und  $n \gg b$ . Dann können alle Terme mit  $a$  und  $b$  vernachlässigt werden ( $a = b = 0$ ) und es ergibt sich die Summenformel



Auf der linken Seite der Gleichung (4.5.2) wird aus  $n \cdot 12$ g oTS insgesamt  $n \cdot \text{mol}$  Biogas bzw.  $n/2 \cdot \text{mol}$  Methan erzeugt. Das entspricht  $n \cdot 22,4$  NI Biogas bzw.  $n \cdot 11,2$  NI Methan. Die maximale Biogasausbeute beträgt demnach  $1,866 \text{ Nm}^3/\text{kg oTS}$ . Für die maximale Methanausbeute ergibt sich entsprechend  $0,933 \text{ Nm}^3/\text{kg oTS}$ . Gleichung (4.5.2) hat keine weitere Bedeutung und dient lediglich der Bestimmung der maximal möglichen Gasausbeuten. Weitere Informationen zu Gasausbeuten können in [Mumme, 2007] und [Mudrack und Kunst, 1985] nachgeschlagen werden.

## 4.6 Verfahrenstechniken

Es gibt verschiedene Reaktortypen zur Vergärung von Biomasse. Zunächst unterscheidet man zwischen den einphasigen und den zweiphasigen Verfahren. Während einphasige Verfahren einen gemeinsamen Zu- und Ablauf für das Substrat und das Perkolat (Prozessflüssigkeit) haben, besitzen zweiphasige Verfahren einen separaten Kreislauf für das Perkolat. Die Anlagen werden nach der Einteilung in einphasig bzw. zweiphasig weiter unterteilt. Abbildung 4.6.1 illustriert die Einteilung der verschiedenen Anlagen, wie sie in diesem Abschnitt genauer erläutert werden.

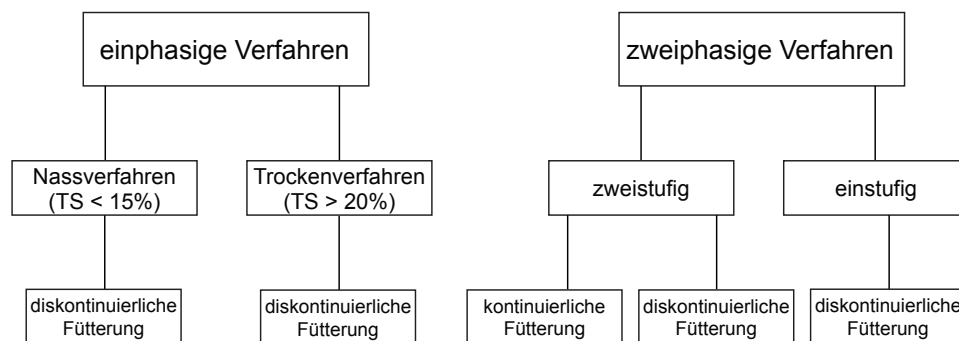


Abbildung 4.6.1: Illustration der verschiedenen Verfahrenstypen zur Biogasproduktion (aus [Mumme, 2007]).

### 4.6.1 Einphasige Verfahren

In Abbildung 4.6.1 ist zu erkennen, dass einphasige Verfahren in Nass- und Trockenverfahren unterteilt werden. Während nasse Substrate mit einem TS-Gehalt  $< 15\%$  noch relativ leicht gerührt und eventuell sogar gepumpt werden können, ist das Rühren trockener Substrate ( $TS > 20\%$ ) schwieriger. Aus diesem Grund müssen verschiedene Verfahrenstechniken angewandt werden.

Abbildung 4.6.2 zeigt einen typischen Reaktor (einphasig, Nassverfahren). Durch die Feststoffzuführung gelangt der Feststoff in den Reaktor und je nach TS-Gehalt des Feststoffs muss noch Flüssigkeit zugeführt werden, damit der Reaktorinhalt mit Hilfe des Durchmischungsaggregats voll durchmischt werden kann. Solche Reaktoren werden mit CSTR (continuous stirred-tank reactor) abgekürzt.

Abbildung 4.6.3 zeigt einen Reaktor (einphasig, Trockenverfahren), welcher nach dem Pfropfenstromprinzip arbeitet. Auf der linken Seite wird das Substrat eingetragen und durch den Rührer nur in der Rotationsebene durchmischt. Durch das Eintragen von Substrat wird am Austrag eine ähnliche Menge an Substrat herausgedrückt. Im Gegensatz zum CSTR ist der Pfropfenstromreaktor nicht gleichmäßig durchmischt. Je länger das Substrat im Reaktor ist, desto näher rückt es dem Austrag.

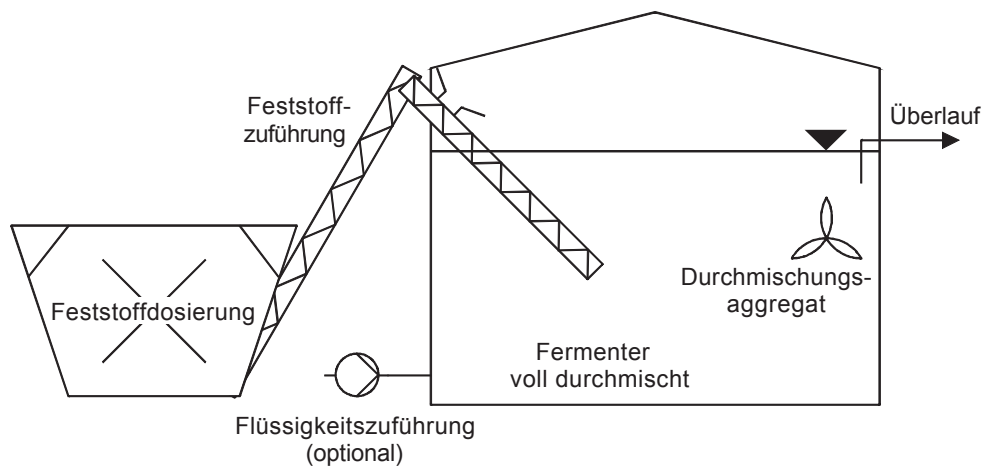


Abbildung 4.6.2: Schema einer Nassvergärung (aus [Kaltschmitt et al., 2009]), Beispiel für ein einphasiges Verfahren (Nassverfahren).

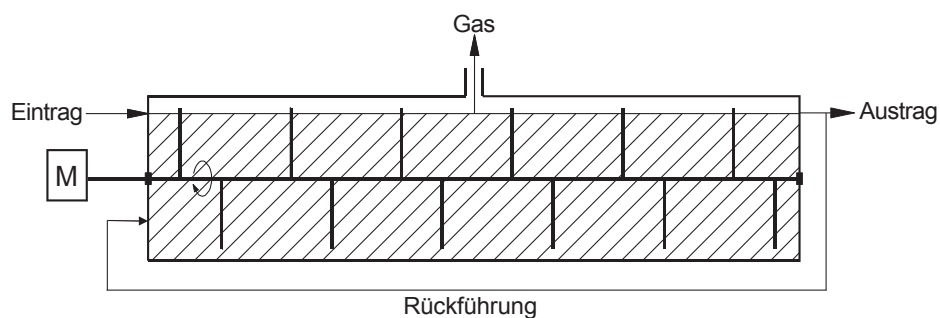


Abbildung 4.6.3: Schema eines Pfropfenstromreaktors (M Motorantrieb) (aus [Kaltschmitt et al., 2009]), Beispiel für ein einphasiges Verfahren (Trockenverfahren).

## 4.6.2 Zweiphasige Verfahren

Wie bereits erwähnt, unterscheiden sich zweiphasige Verfahren von einphasigen durch einen separaten Kreislauf für das Perkolat. Zu den einfachsten zweiphasigen Verfahren gehört das einstufige Verfahren aus Abbildung 4.6.4. Bei dem dargestellten Verfahren wird das Substrat durch eine Tür in den Reaktor geschoben und anschließend während der gesamten Aufenthaltszeit mit Perkolat beregnet. Das Beregnen ist nötig, da bei zweiphasigen Verfahren der Kontakt zwischen Mikroorganismen und Substrat durch die Prozessflüssigkeit hergestellt wird. Ein Rühren, wie es bei einphasigen Verfahren nötig ist, entfällt.

Im Gegensatz zu einstufigen Verfahren besteht der Reaktor in zweistufigen Anlagen aus mindestens zwei Teilen (Stufen). Wichtig dabei ist, dass in beiden Stufen verschiedene biologische Prozesse ablaufen. Üblicherweise findet in der ersten Stufe hauptsächlich die



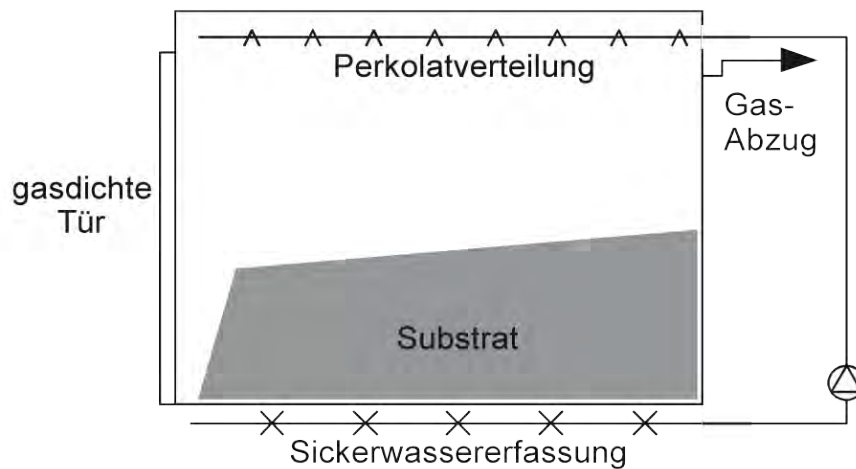


Abbildung 4.6.4: Schematische Darstellung einer Feststoffvergärung (aus [Kaltschmitt et al., 2009]), Beispiel für ein zweiphasiges einstufiges Verfahren.

Hydrolyse statt, während in der zweiten Stufe hauptsächlich die Methanogenese abläuft. Die Acido- und die Acetogenese finden in beiden Reaktorteilen statt. Die Übertragung der Nährstoffe aus der einen in die andere Stufe wird durch die Prozessflüssigkeit gewährleistet. Durch die räumliche Trennung der verschiedenen Prozessschritte der anaeroben Fermentation (vgl. Abschnitt 4.2), können die Prozessparameter (z.B. Temperatur oder pH-Wert) in den jeweiligen Reaktorteilen an die Prozessschritte angepasst werden. Dadurch kann insgesamt das Substrat effektiver abgebaut werden. In Abbildung 4.6.5 ist ein zweiphasiger zweistufiger Reaktor dargestellt. Der Reaktor besteht zwar aus vier Teilen, aber in den ersten drei Teilen laufen die gleichen biologischen Prozesse ab und deshalb zählen diese drei Teile als eine Stufe. Es werden mehrere Teile für die Hydrolysestufe benötigt, da den abgebildeten Reaktoren nur diskontinuierlich Substrat zugegeben werden kann und sonst die Bedingungen für die Methanstufe zu stark variieren würden. Durch eine zeitversetzte Befüllung der drei Reaktorteile können konstantere Bedingungen für die Methanstufe erreicht werden. Abbildung 4.6.6 zeigt einen weiteren zweiphasigen zweistufigen Reaktor. Durch eine Änderung in der Hydrolysestufe kann diesem Reaktor das Substrat kontinuierlich zugegeben werden.

Für den Aufbau der Methanstufe gibt es verschiedene Möglichkeiten. In Abbildung 4.6.7 sind die drei häufigsten Realisierungen dargestellt. Da die Verweilzeit in der Methanstufe sehr niedrig ist, wird in allen drei Varianten Trägermaterial eingesetzt. Auf dem Trägermaterial können die Mikroorganismen haften bleiben und werden nicht ausgespült. Je nach Typ der Methanstufe kommt unterschiedliches Trägermaterial zum Einsatz. Beim sogenannten Downflow-Filter werden üblicherweise Füllkörper eingesetzt. Beim Upflow-Filter kann auch Granulat, welches durch die Strömung in Schwebelage gehalten wird, zum Einsatz kommen.

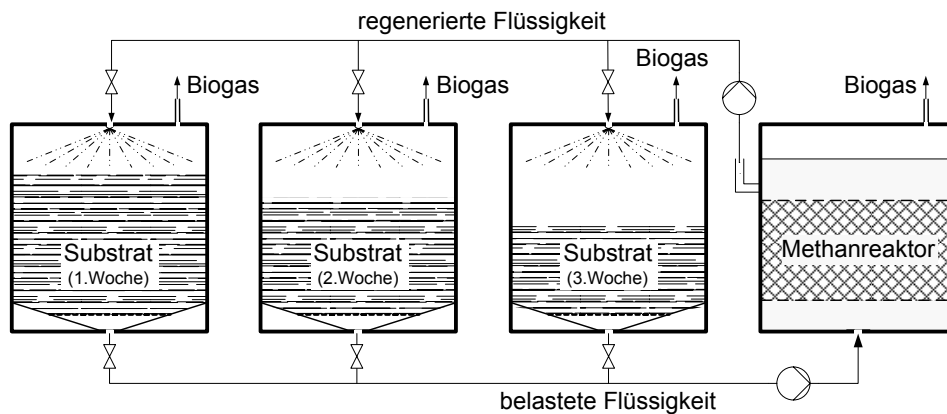


Abbildung 4.6.5: Zweistufiges Bioleaching-System mit drei zeitversetzt befüllten Feststoffreaktoren und einem Methanreaktor (aus [Mumme, 2007]), Beispiel für ein zweiphasiges zweistufiges Verfahren mit diskontinuierlicher Zugabe von Substrat.

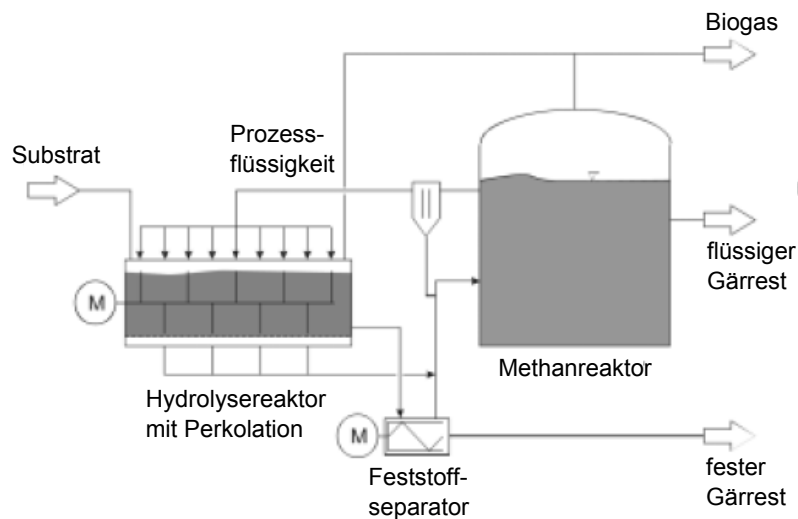


Abbildung 4.6.6: Zweistufiges Bioleaching-System mit kontinuierlicher Fütterung (aus [Mumme, 2007]), Beispiel für ein zweiphasiges zweistufiges Verfahren mit kontinuierlicher Zugabe von Substrat.

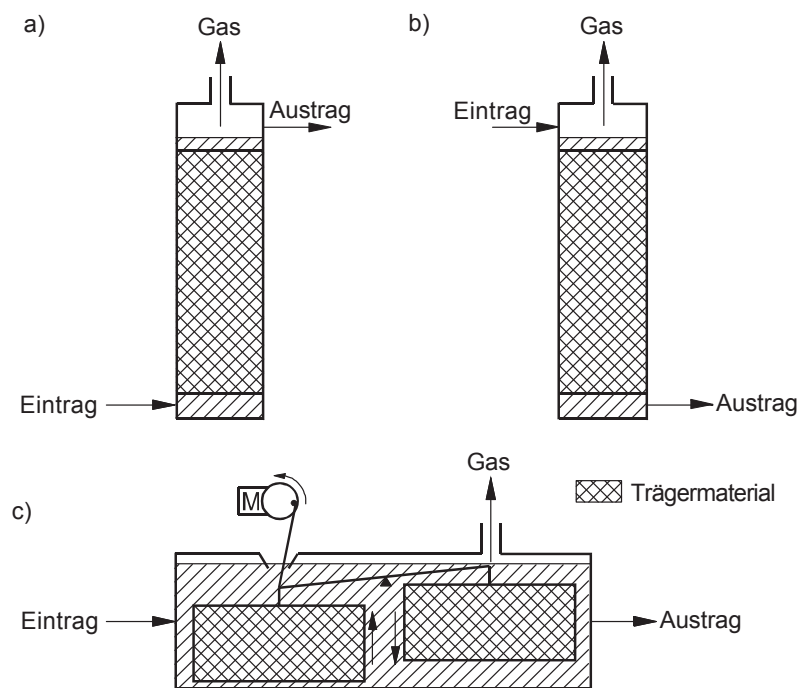


Abbildung 4.6.7: Schematische Darstellung von Methanreaktoren (Anaerobfiltern); a) Upflow-Filter, b) Downflow-Filter, c) liegender pulsierender dynamischer Anaerobfilter (M Motorantrieb) (aus [Kaltschmitt et al., 2009]).

# Kapitel 5

## Modell

In diesem Kapitel wird das mathematische Modell für einige der in Abschnitt 4.6 vorgestellten Reaktoren erklärt. In Abschnitt 5.1 werden die grundlegenden Notationen, welche im Verlauf bei der Erläuterung der Zwei- bzw. Drei-Phasen-Strömungsmodelle (Abschnitt 5.2) und des Modells für die Anaerobe Fermentation (Abschnitt 5.3) verwendet werden, eingeführt. Abschnitt 5.4 befasst sich mit der Modellierung der Löslichkeit von Gasen. In Abschnitt 5.5 wird detailliert erläutert, wie das Strömungsmodell mit dem Modell für den anaeroben Abbau gekoppelt werden kann, und in Abschnitt 5.6 werden Simulationsmodelle vorgestellt, welche in Kapitel 7 zur Simulation verwendet werden.

### 5.1 Notation

Sowohl das Drei- als auch das Zwei-Phasen-Strömungsmodell für mehrere Komponenten sind sehr komplex. Deshalb wird in diesem Abschnitt zunächst die grundlegendste Notation erläutert. Am Ende des Abschnitts ist eine Tabelle mit den verwendeten Notationen abgebildet (Tabelle 5.1.1).

Wir betrachten zunächst ein repräsentatives Volumen Element (RVE). Dieses wird aufgeteilt in die Feststoffmatrix, die aus allen festen Stoffen gebildet wird, und den Porenraum (siehe Abb. 5.1.1). Der Volumenanteil des Porenraums, die Porosität, wird mit  $\phi$  bezeichnet. Entsprechend ist der Volumenanteil der Feststoffmatrix  $(1 - \phi)$ . Im Drei-Phasen-Strömungsmodell wird der Porenraum weiterhin aufgeteilt in die gasförmige Phase und die flüssige Phase (vgl. Abb. 5.1.2). Der Volumenanteil der flüssigen Phase wird mit  $S^l$  bezeichnet und der Volumenanteil der gasförmigen Phase mit  $S^g$ .

Es gilt der Zusammenhang

$$S^l + S^g = \phi. \quad (5.1.1)$$

Jede einzelne Phase setzt sich aus verschiedenen Komponenten (Stoffen) zusammen. Sei  $n_j$  die Anzahl der Komponenten in der  $j$ -ten Phase mit  $j \in \{s, l, g\}$ , wobei  $s$  für die feste,

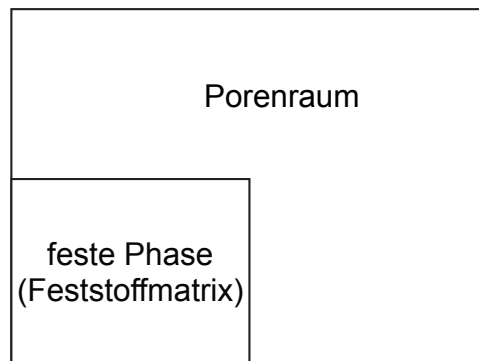


Abbildung 5.1.1: Aufteilung eines Volumens im Zwei-Phasen-Strömungsmodell in Feststoffmatrix und Porenraum.

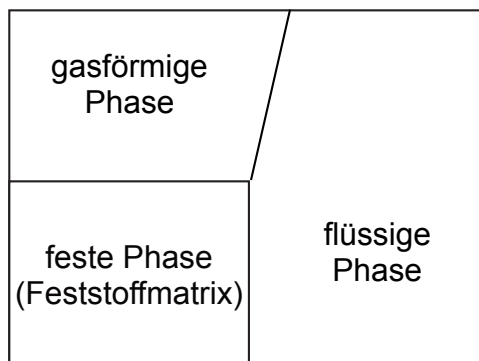


Abbildung 5.1.2: Aufteilung eines Volumens im Drei-Phasen-Strömungsmodell in Feststoffmatrix, flüssige Phase und gasförmige Phase.

$l$  für die flüssige und  $g$  für die gasförmige Phase steht. Dann bezeichnet

$$\omega_i^j \quad \text{mit } j \in \{s, l, g\} \text{ und } i \in \{1 \dots n_j\} \quad (5.1.2)$$

den Massenbruch der  $i$ -ten Komponente in der  $j$ -ten Phase. Analog zum Massenbruch führen wir folgende Notation für die reinen Dichten der  $i$ -ten Komponente in der  $j$ -ten Phase ein

$$\rho_i^j \quad \text{mit } j \in \{s, l, g\} \text{ und } i \in \{1 \dots n_j\}. \quad (5.1.3)$$

Für die Massenbrüche gilt

$$\sum_{i=1}^{n_j} \omega_i^j = 1 \quad \text{mit } j \in \{s, l, g\}. \quad (5.1.4)$$

Die Dichte der  $j$ -ten Phase ergibt sich dann folgendermaßen

$$\rho^j = \sum_{i=1}^{n_j} \omega_i^j \rho_i^j \quad \text{mit } j \in \{s, l, g\}. \quad (5.1.5)$$

Weiterhin benötigen wir noch die lokalen Konzentration der einzelnen Stoffe. Mit  $C_i^j$  wird die Konzentration der  $i$ -ten Komponente in der  $j$ -ten Phase im RVE bezeichnet. Aufgrund der unterschiedlichen Volumenanteile gilt ein unterschiedlicher Zusammenhang für  $C_i^j$  in den verschiedenen Phasen. Genauer gilt in einem Drei-Phasen-Strömungsmodell

$$C_i^s = (1 - \phi)\rho^s\omega_i^s \quad (5.1.6)$$

$$C_i^l = S^l\rho^l\omega_i^l \quad (5.1.7)$$

$$C_i^g = S^g\rho^g\omega_i^g \quad (5.1.8)$$

und in einem Zwei-Phasen-Strömungsmodell

$$C_i^s = (1 - \phi)\rho^s\omega_i^s \quad (5.1.9)$$

$$C_i^l = \phi\rho^l\omega_i^l. \quad (5.1.10)$$

Zum Schluss wird die Definition von Reaktionstermen festgelegt. Reaktionsterme beschreiben den Massenaustausch zwischen zwei verschiedenen Stoffen, welche sich im Allgemeinen auch in unterschiedlichen Phasen befinden können.

Mit  $R_{i_1 \rightarrow i_2}^{j_1 \rightarrow j_2}$  wird der Massenverlust der  $i_1$ -ten Komponente aus der  $j_1$ -ten-Phase zu Gunsten der  $i_2$ -ten Komponente in der  $j_2$ -ten Phase beschrieben.

*Bemerkung* 5.1.1. Es ist zu beachten, dass die beiden Terme  $R_{i_1 \rightarrow i_2}^{j_1 \rightarrow j_2}$  und  $R_{i_2 \rightarrow i_1}^{j_2 \rightarrow j_1}$  zwei verschiedene Sachverhalte beschreiben und deshalb im Allgemeinen nicht gleich sind.

Ferner beschreibt  $R_i^j$  alle Reaktionsterme der  $i$ -ten Komponente in der  $j$ -ten Phase. Es gilt der Zusammenhang

$$R_i^j = \sum_{k_1 \in \{s, l, g\}} \sum_{k_2=1}^{n_{k_1}} R_{i \rightarrow k_2}^{j \rightarrow k_1} + R_{k_2 \rightarrow i}^{k_1 \rightarrow j}. \quad (5.1.11)$$

Weiterhin beschreibt  $R^{j_1 \rightarrow j_2}$  den Massenverlust der  $j_1$ -ten Phase zu Gunsten der  $j_2$ -ten Phase. Es gilt

$$R^{j_1 \rightarrow j_2} = \sum_{i_2=1}^{n_{j_2}} \sum_{i_1=1}^{n_{j_1}} R_{i_1 \rightarrow i_2}^{j_1 \rightarrow j_2} \quad (5.1.12)$$

*Bemerkung* 5.1.2. Damit die Masse erhalten bleibt, ist es notwendig, dass

$$R^{j \rightarrow j} = 0 \quad \text{mit } j \in \{s, l, g\} \quad (5.1.13)$$

$$R_{i \rightarrow i}^{j \rightarrow j} = 0 \quad \text{mit } j \in \{s, l, g\} \text{ und } i \in \{1, \dots, n_j\} \quad (5.1.14)$$

gilt.

*Bemerkung* 5.1.3. Wenn die Masse erhalten ist, gilt

$$\sum_{j_1 \in \{s, l, g\}} \sum_{j_2 \in \{s, l, g\}} \sum_{i_1=1}^{n_{j_1}} \sum_{i_2=1}^{n_{j_2}} R_{i_1 \rightarrow i_2}^{j_1 \rightarrow j_2} = 0 \quad (5.1.15)$$

Mit  $R^j$  werden alle Reaktionsterme der  $j$ -ten Phase bezeichnet. Diese sind bestimmt durch

$$R^j = \sum_{j_1 \in \{s, l, g\}} R^{j_1 \rightarrow j} + R^{j \rightarrow j_1}. \tag{5.1.16}$$

Größe	Bedeutung
$\phi$	Volumenanteil des Porenraums
$S^l$	Volumenanteil der flüssigen Phase
$S^g$	Volumenanteil der gasförmigen Phase
$\omega_{i_s}^s$	Massenanteil der $i_s$ -ten Komponente in der festen Phase
$\omega_{i_l}^l$	Massenanteil der $i_l$ -ten Komponente in der flüssigen Phase
$\omega_{i_g}^g$	Massenanteil der $i_g$ -ten Komponente in der gasförmigen Phase
$\rho_{i_s}^s$	reine Dichte der $i_s$ -ten Komponente in der festen Phase
$\rho_{i_l}^l$	reine Dichte der $i_l$ -ten Komponente in der flüssigen Phase
$\rho_{i_g}^g$	reine Dichte der $i_g$ -ten Komponente in der gasförmigen Phase
$\rho^s$	Dichte der festen Phase
$\rho^l$	Dichte der flüssigen Phase
$\rho^g$	Dichte der gasförmigen Phase
$C_{i_s}^s$	Konzentration der $i_s$ -ten Komponente der festen Phase
$C_{i_l}^l$	Konzentration der $i_l$ -ten Komponente der flüssigen Phase
$C_{i_g}^g$	Konzentration der $i_g$ -ten Komponente der gasförmigen Phase
$R_{i_1 \rightarrow i_2}^{j_1 \rightarrow j_2}$	Massenverlust der $i_1$ -ten Komponente in der $j_1$ -ten Phase zu Gunsten der $i_2$ -ten Komponente in der $j_2$ -ten Phase
$R^{j_1 \rightarrow j_2}$	Massenverlust der $j_1$ -ten Phase zu Gunsten der $j_2$ -ten Phase
$R_i^j$	Reaktionsterme der $i$ -ten Komponente in der $j$ -ten Phase
$R^j$	Reaktionsterme der $j$ -ten Phase

Tabelle 5.1.1: Notationen der wichtigsten Größen im mathematischen Modell, mit  $i_s \in [1, \dots, n_s]$ ,  $i_l \in [1, \dots, n_l]$ ,  $i_g \in [1, \dots, n_g]$ ,  $j_1, j_2, j \in \{s, l, g\}$  und  $i_1 \in [1, \dots, n_{j_1}]$ ,  $i_2 \in [1, \dots, n_{j_2}]$ ,  $i \in [1, \dots, n_j]$ .

## 5.2 Strömungsmodell

Im Allgemeinen sollte ein Strömungsmodell für einen Biogasreaktor drei Aggregatzustände (fest, flüssig und gasförmig) beinhalten. Dabei bildet die feste Phase die Feststoffmatrix (oder Feststoffskelett). Die flüssige und die gasförmige Phase befinden sich im sogenannten Porenraum. Jede Phase setzt sich aus unterschiedlichen Komponenten (Stoffen) zusammen. Zu den wichtigsten Komponenten der festen Phase zählen beispielsweise die Füllkörper mit

den darauf wachsenden Mikroorganismen, in der flüssigen Phase sind Wasser und diverse organische Säuren zu berücksichtigen und in der gasförmigen Phase die Gase Kohlendioxid und Methan. Für eine genaue Liste der zu betrachtenden Substanzen mit der Einteilung in die unterschiedlichen Phasen sei auf Abschnitt 5.3 verwiesen. Jede einzelne Komponente beeinflusst das gesamte System auf unterschiedliche Art und Weise und wird deshalb innerhalb des Modells mit einer Bilanzgleichung beschrieben.

Das in Abschnitt 5.2.1 erläuterte Drei-Phasen-Strömungsmodell für zusammengesetzte Stoffe erfüllt alle aufgezählten Anforderungen. Die Verwendung von dreiphasigen Modellen führt jedoch bei der Simulation zu einem enormen Rechenaufwand. Das liegt vor allem daran, dass die Strömung des Gases im Vergleich zu allen anderen Vorgängen auf einer sehr kleinen Zeitskala abläuft und deshalb der Zeitschritt etwa in der Größenordnung  $\approx 1$  s gewählt werden muss, damit die Strömung des Gases ausreichend aufgelöst werden kann.

Um den Rechenaufwand zu reduzieren kann man mit der Annahme, dass das Volumen der gasförmigen Phase sehr klein ist im Vergleich zu dem Volumen der flüssigen und der festen Phase, die Strömung des Gases vernachlässigen. Die Annahme impliziert dann weiterhin, dass die Beeinflussung der Strömung der flüssigen Phase durch das Gas vernachlässigbar ist und dass die gasförmige Phase einen vernachlässigbaren Einfluss auf die Reaktionsterme hat. Das Drei-Phasen-Strömungsmodell vereinfacht sich dann zu einem Zwei-Phasen-Strömungsmodell für zusammengesetzte Stoffe (vgl. Abschnitt 5.2.2). Der Zeitschritt in der Simulation kann dann deutlich größer, etwa in der Größenordnung  $\approx 1$  h, gewählt werden. Die Menge des produzierten Gases erhält man in dem reduzierten Modell durch Integration der entsprechenden Reaktionsterme über die Zeit.

Sowohl in dem Zwei- als auch in dem Drei-Phasen-Strömungsmodell wird die Strömung als Sickerströmung durch poröse Medien modelliert. Poröse Medien werden in vielen verschiedenen Bereichen eingesetzt, beispielsweise wird in [Nägel et al., 2008] die Diffusion von Medikamenten durch die Haut beschrieben. Dabei wird die Haut als poröses Medium modelliert. Ein weiteres Beispiel ist der Bereich Geowissenschaften, dort wird zur Berechnung der Grundwasserströmung durch einen Aquifer angenommen, dass der Aquifer ein poröses Medium ist [Grillo et al., 2010].

Für laminare Strömungen durch poröse Medien wird die Konvektion üblicherweise mit dem Darcy-Gesetz beschrieben. Details zu den Gleichungen sind in den Abschnitten 5.2.1 und 5.2.2 erläutert. Für Grundlagen zum Darcy-Gesetz und porösen Medien sei auf [Bear, 1972, Bear und Bachmat, 1990, Hassanizadeh und Gray, 1979a] und [Hassanizadeh und Gray, 1979b, Hassanizadeh und Gray, 1980] verwiesen.

### 5.2.1 Drei-Phasen-Strömungsmodell für zusammengesetzte Stoffe

Wie bereits am Anfang dieses Kapitels erwähnt, werden im Drei-Phasen-Strömungsmodell für zusammengesetzte Stoffe die drei Aggregatzustände fest, flüssig und gasförmig berücksichtigt. Jede dieser Phasen setzt sich aus mehreren Komponenten zusammen. In diesem Abschnitt



werden für jede Phase und jede Komponente die entsprechenden Bilanzgleichungen beschrieben.

### Massenbilanz feste Phase

Die Massenbilanz der festen Phase wird durch folgende Gleichung beschrieben

$$\frac{\partial((1 - \phi)\rho^s)}{\partial t} = R^s. \quad (5.2.1)$$

### Massenbilanz für jede Komponenten der festen Phase

Die Massenbilanz für die einzelnen Komponenten der festen Phase ist gegeben durch

$$\frac{\partial((1 - \phi)\rho^s\omega_i^s)}{\partial t} = R_i^s \quad \text{mit } i \in [1 \dots n_s]. \quad (5.2.2)$$

### Massenbilanz der flüssigen Phase

Für die Bilanzgleichung der flüssigen Phase muss zusätzlich zu den Reaktionstermen auch die Strömung berücksichtigt werden. Wie bereits erwähnt, nehmen wir eine Sickerströmung durch ein poröses Medium an

$$\frac{\partial(\rho^l S^l)}{\partial t} = -\nabla(\rho^l \mathbf{q}_l) + R^l. \quad (5.2.3)$$

Hierbei ist  $\mathbf{q}_l$  die Darcygeschwindigkeit, welche die Strömungsgeschwindigkeit im porösen Medium angibt. Die Darcygeschwindigkeit ist gegeben durch

$$\mathbf{q}_l = -\frac{\mathbb{K}_l}{\mu_l}(\nabla p_l - \rho^l \mathbf{g}), \quad (5.2.4)$$

wobei  $\mathbb{K}_l$  die Permeabilität,  $\mu_l$  die Viskosität,  $p_l$  der Druck und  $\mathbf{g}$  die Gravitationsbeschleunigung ist. Wir nehmen stets an, dass die Permeabilität und die Viskosität konstant sind.

### Massenbilanz für jede Komponente der flüssigen Phase

Analog zu Gleichung (5.2.3) wird die Darcygeschwindigkeit auch für die Massenbilanz jeder Komponente in der flüssigen Phase benötigt. Zusätzlich diffundieren die unterschiedlichen Komponenten innerhalb der flüssigen Phase. Aus diesem Grund wird ein Term für Diffusion benötigt. Die Bilanzgleichung lautet

$$\frac{\partial(\rho^l S^l \omega_i^l)}{\partial t} = -\nabla(\rho^l \mathbf{q}_l \omega_i^l - \rho^l \mathbb{D}_i^l \nabla \omega_i^l) + R_i^l \quad \text{mit } i \in [1 \dots n_l]. \quad (5.2.5)$$

Hierbei ist  $\mathbb{D}_i^l$  der Diffusionstensor der  $i$ -ten Komponente in der flüssigen Phase.

### Massenbilanz der gasförmigen Phase

Die Bilanzgleichung für die gasförmige Phase erhält man analog zu der Bilanzgleichung für die flüssige Phase

$$\frac{\partial(\rho^g S^g)}{\partial t} = -\nabla(\rho^g \mathbf{q}_g) + R^g \quad (5.2.6)$$

mit

$$\mathbf{q}_g = -\frac{\mathbb{K}_g}{\mu_g}(\nabla p^g - \rho^g \mathbf{g}). \quad (5.2.7)$$

Typischerweise gilt dabei

$$p^g = p^g(p^l, S^l). \quad (5.2.8)$$

### Massenbilanz für jede Komponente in der gasförmigen Phase

Analog zu Gleichung 5.2.5 sind die Bilanzgleichungen gegeben durch

$$\frac{\partial(\rho^g S^g \omega_i^g)}{\partial t} = -\nabla(\rho^g \mathbf{q}_g \omega_i^g - \rho^g \mathbb{D}_i^g \nabla \omega_i^g) + R_i^g \quad \text{mit } i \in [1 \dots n_g], \quad (5.2.9)$$

wobei  $\mathbb{D}_i^g$  der Diffusionstensor der  $i$ -ten Komponente in der gasförmigen Phase ist.

### Gleichungen und Parameter

Je nach Anzahl der Komponenten in den unterschiedlichen Phasen erhält man ein Modell mit unterschiedlich vielen Unbekannten. Damit eine problemlose Lösung der Modellgleichungen möglich ist, werden im Folgenden zunächst die Modellparameter und anschließend alle Unbekannten mit den zugehörigen Gleichungen aufgelistet (siehe Tabellen 5.2.1 und 5.2.2). Man beachte, dass die Reaktionsterme  $R^i$  und  $R_j^i$  für  $i \in \{s, l, g\}$  und  $j \in [1, \dots, n_i]$  in Abschnitt 5.3 beschrieben werden und deshalb in der Auflistung nicht vorkommen. Zunächst benötigen wir jedoch einige Gleichungen aus dem Abschnitt 5.1

$$\rho^j = \sum_{i=1}^{n_j} \omega_i^j \rho_i^j \quad \text{mit } j \in \{s, l, g\} \quad (5.2.10)$$

$$S^l + S^g = \phi \quad (5.2.11)$$

$$\sum_{i=1}^{n_j} \omega_i^j = 1 \quad \text{mit } j \in \{s, l, g\}. \quad (5.2.12)$$

Aus den Tabellen 5.2.1 und 5.2.2 kann man entnehmen, dass es im vorgestellten Modell insgesamt  $5 + n_s + 2(n_l + n_g)$  Parameter, 8 algebraische Gleichungen und  $n_s + n_l + n_g$  Differentialgleichungen gibt.

Parameter	Bezeichnung
$\rho_{i_s}^s$	reine Dichten der verschiedenen Komponenten in der festen Phase
$\rho_{i_l}^l$	reine Dichten der verschiedenen Komponenten in der flüssigen Phase
$\rho_{i_g}^g$	reine Dichten der verschiedenen Komponenten in der gasförmigen Phase
$\mathbb{K}_l$	Permeabilität der flüssigen Phase
$\mathbb{K}_g$	Permeabilität der gasförmigen Phase
$\mu_l$	Viskosität der flüssigen Phase
$\mu_g$	Viskosität der gasförmigen Phase
$\mathbb{D}_{i_l}^l$	Diffusionstensor der $i_l$ -ten Komponente in der flüssigen Phase
$\mathbb{D}_{i_g}^g$	Diffusionstensor der $i_g$ -ten Komponente in der gasförmigen Phase
$\mathbf{g}$	Gravitationsbeschleunigung

Tabelle 5.2.1: Modellparameter im Drei-Phasen-Strömungsmodell, mit  $i_s \in [1, \dots, n_s]$ ,  $i_l \in [1, \dots, n_l]$ ,  $i_g \in [1, \dots, n_g]$ .

Unbekannte	Zugehörige Gleichung	Gleichungstyp
Feste Phase		
$\phi$	(5.2.1)	D
$\omega_{i_s}^s$	(5.2.2)	D
$\omega_{n_s}^s$	(5.2.12)	A
Flüssige Phase		
$S^l$	(5.2.11)	A
$p_l$	(5.2.3)	D
$\omega_{i_l}^l$	(5.2.5)	D
$\omega_{n_s}^l$	(5.2.12)	A
Gasförmige Phase		
$S^g$	(5.2.6)	D
$p_g$	(5.2.8)	A
$\omega_{i_g}^g$	(5.2.9)	D
$\omega_{n_s}^g$	(5.2.12)	A
Dichten		
$\rho^j$	(5.2.10)	A

Tabelle 5.2.2: Unbekannte im Drei-Phasen-Strömungsmodell mit den zugehörigen Gleichungen, mit  $j \in \{s, l, g\}$  und  $i_s \in [1, \dots, n_s - 1]$ ,  $i_l \in [1, \dots, n_l - 1]$ ,  $i_g \in [1, \dots, n_g - 1]$ . Gleichungstyp: A algebraische Gleichung, D Differentialgleichung.

### 5.2.2 Zwei-Phasen-Strömungsmodell für zusammengesetzte Stoffe

Wie bereits am Anfang dieses Kapitels erklärt, wird der Rechenaufwand stark reduziert, wenn die Strömung der gasförmigen Phase vernachlässigt wird. Man erhält dann ein reduziertes Modell

mit zwei Phasen (fest und flüssig). Analog zum Abschnitt 5.2.1 müssen Bilanzgleichungen für jede Phase und jede Komponente aufgestellt werden.

### Massenbilanz feste Phase

Die Massenbilanz der festen Phase wird durch folgende Gleichung beschrieben

$$\frac{\partial((1 - \phi)\rho^s)}{\partial t} = R^s. \quad (5.2.13)$$

### Massenbilanz für jede Komponente der festen Phase

Die Massenbilanz für die einzelnen Komponenten der festen Phase ist gegeben durch

$$\frac{\partial((1 - \phi)\rho^s\omega_i^s)}{\partial t} = R_i^s \quad \text{mit } i \in [1, \dots, n_s]. \quad (5.2.14)$$

### Massenbilanz der flüssigen Phase

Analog zu (5.2.3) lautet die Massenbilanz für die flüssige Phase

$$\frac{\partial(\phi\rho^l)}{\partial t} = -\nabla(\rho^l\mathbf{q}_l) + R^l. \quad (5.2.15)$$

Hierbei ist  $\mathbf{q}_l$  die Darcygeschwindigkeit, welche die Strömungsgeschwindigkeit im porösen Medium angibt. Die Darcygeschwindigkeit ist gegeben durch

$$\mathbf{q}_l = -\frac{\mathbb{K}_l}{\mu_l}(\nabla p_l - \rho^l\mathbf{g}), \quad (5.2.16)$$

wobei  $\mathbb{K}_l$  die Permeabilität,  $\mu_l$  die Viskosität,  $p_l$  der Druck und  $\mathbf{g}$  die Gravitationsbeschleunigung ist. Wir nehmen stets an, dass die Permeabilität und die Viskosität konstant sind.

Im Unterschied zu (5.2.3) wird  $S^l$  nicht benötigt, weil die Gas-Phase vernachlässigt wird. Stattdessen muss  $\phi$  verwendet werden.

### Massenbilanz für jede Komponente der flüssigen Phase

Analog zu Gleichung (5.2.3) lautet die Bilanzgleichung

$$\frac{\partial(\phi\rho^l\omega_i^l)}{\partial t} = -\nabla(\rho^l\mathbf{q}_l\omega_i^l - \rho^l\mathbb{D}_i^l(\phi)\nabla\omega_i^l) + R_i^l \quad \text{mit } i \in [1 \dots n_l]. \quad (5.2.17)$$

Hierbei ist  $\mathbb{D}_i^l$  der Diffusionstensor der  $i$ -ten Komponente in der flüssigen Phase. Im Gegensatz zu (5.2.3) wird  $S^l$  nicht benötigt, da die Gas-Phase vernachlässigt wird. Analog zu 5.2.15 muss  $\phi$  verwendet werden.

## Gas Produktion

Obwohl die Strömung der gasförmigen Phase vernachlässigt wird, kann es sinnvoll sein die lokale Gas Produktion zu ermitteln. Man erhält die lokale akkumulierte Produktion der  $i$ -ten Komponente in der gasförmigen Phase durch

$$P_i^g(t) = \int_{T_0}^t R_i^g(\hat{t}) d\hat{t} \quad (5.2.18)$$

## Parameter und Gleichungen

Analog zum Abschnitt 5.2.1 sind alle Modellparameter sowie alle Unbekannten mit den zugehörigen Gleichungen in den Tabellen 5.2.3 und 5.2.4 dargestellt. An den Tabellen kann man erkennen, dass es insgesamt  $n_s + 2n_l + 3$  Parameter,  $5 + n_g$  algebraische bzw. Integralgleichungen und  $n_s + n_l$  Differentialgleichungen gibt. Im Gegensatz zum Drei-Phasen-Strömungsmodell hat man die Anzahl der Differentialgleichungen um  $n_g$  reduziert.

Parameter	Bezeichnung
$\rho_{i_s}^s$	reine Dichten der verschiedenen Komponenten in der festen Phase
$\rho_{i_l}^l$	reine Dichten der verschiedenen Komponenten in der flüssigen Phase
$\mathbb{K}_l$	Permeabilität der flüssigen Phase
$\mu_l$	Viskosität der flüssigen Phase
$\mathbb{D}_{i_l}^l$	Diffusionstensor der $i_l$ -ten Komponente in der flüssigen Phase
$\mathbf{g}$	Gravitationsbeschleunigung

Tabelle 5.2.3: Modellparameter im Zwei-Phasen-Strömungsmodell, mit  $i_s \in [1, \dots, n_s]$  und  $i_l \in [1, \dots, n_l]$ .

Unbekannte	Zugehörige Gleichung	Gleichungstyp
Feste Phase		
$\phi$	(5.2.13)	D
$\omega_{i_s}^s$	(5.2.14)	D
$\omega_{n_s}^s$	(5.2.12)	A
Flüssige Phase		
$p_l$	(5.2.15)	D
$\omega_{i_l}^l$	(5.2.17)	D
$\omega_{n_s}^l$	(5.2.12)	A
Gasförmige Phase		
$P_{i_g}^g$	(5.2.18)	I
Dichten		
$\rho^j$	(5.2.10)	A

Tabelle 5.2.4: Unbekannte im Zwei-Phasen-Strömungsmodell mit den zugehörigen Gleichungen, mit  $j \in \{s, l\}$ ,  $i_s \in [1, \dots, n_s - 1]$ ,  $i_l \in [1, \dots, n_l - 1]$  und  $i_g \in [1, \dots, n_g]$ . Gleichungstyp: A algebraische Gleichung, D Differentialgleichung, I Integralgleichung.

### 5.3 Modell für den anaeroben Abbau

In diesem Abschnitt wird ein Modell für den anaeroben Abbau organischer Substanzen vorgestellt. Dabei müssen die vier wesentlichen Abbauschritte Hydrolyse, Acetogenese, Acidogenese und Methanogenese (vgl. Abschnitt 4.2) modelliert werden. Im Jahre 2002 wurde von der IWA Task Group das ADM1-Modell veröffentlicht (siehe [Batstone et al., 2002]). Das Ziel war es ein vollständiges Modell für den anaeroben Abbau zu erstellen. Seither wurde das ADM1-Modell sowohl in der Abwassertechnik als auch im Biogasbereich regelmäßig verwendet. In [Blumensaat und Keller, 2005] wurde das ADM1-Modell eingesetzt, um den anaeroben Abbau in einer zweistufigen Biogasanlage zu modellieren und in [Wett et al., 2007] um die Verfahrenstechnik einer Biogasanlage zu optimieren. In [Wichern et al., 2009] wird die Monovergärung von Grassilage unter mesophilen Bedingungen untersucht und in [Thamsiriroj und Murphy, 2011] wird die Monovergärung von Grassilage in einem zweistufigen CSTR mit Hilfe des ADM1-Modells untersucht. Für einen weiteren Überblick zu Weiterentwicklungen und Applikationen des ADM1-Modells sei auf [Batstone, 2006] verwiesen.

Das ADM1-Modell wird ausführlich in Abschnitt 5.3.1 erläutert. Abschnitt 5.3.2 befasst sich mit den Hemmtermen im ADM1-Modell, während in Abschnitt 5.3.3 die wichtigsten Schwachstellen des ADM1-Modells diskutiert werden.

### 5.3.1 ADM1-Modell

Bevor das ADM1-Modell ausführlich erläutert werden kann, müssen zunächst alle zu berücksichtigenden Stoffe definiert werden. Die Stoffe sind in Tabelle 5.3.1 dargestellt. Weiterhin ist in der Tabelle dargestellt, ob der jeweilige Stoff ein Anfangsprodukt einer der vier Phasen (Hydrolyse, Acetogenese, Acidogenese, Methanogenese) ist. Die genauen Abbauewege der Stoffe sind in Abbildung 5.3.1 dargestellt. Alle auftretenden Parameter sind in den Tabellen 5.3.2, 5.3.3 und 5.3.4 aufgelistet.

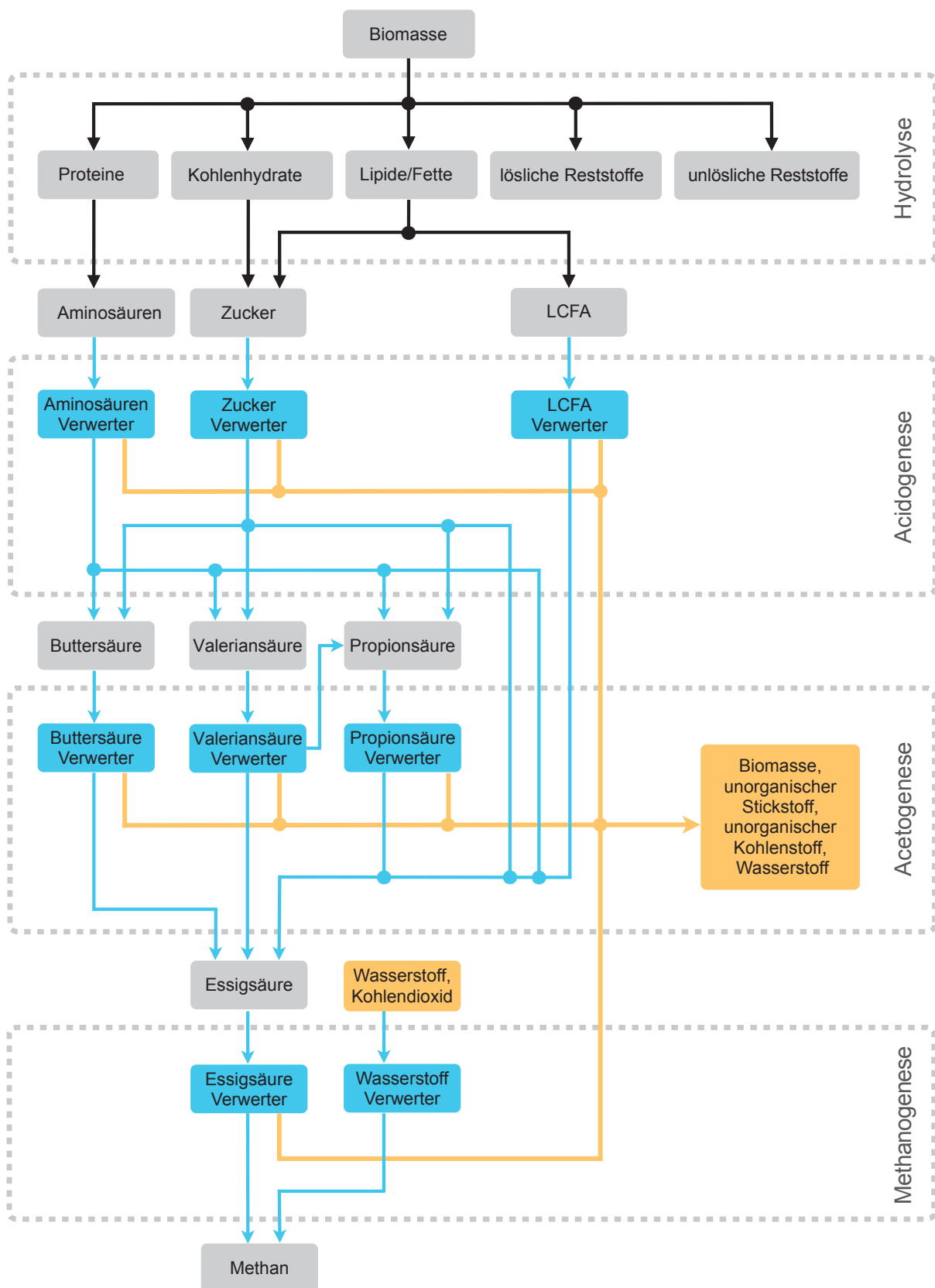


Abbildung 5.3.1: Abbauwege im ADM1-Modell; graue Kästen: Stoffe, blaue Kästen: Mikroorganismen, gelbe Kästen: Nebenprodukte, graue gestrichelte Kästen: biologische Phasen, schwarze Pfeile: Prozesse ohne Mikroorganismen, blaue Pfeile: Prozesse mit Mikroorganismen, gelbe Pfeile: Prozesse mit Mikroorganismen und Nebenprodukten.



Stoff	Symbol	Ausgangsstoff zu Phase	Gleichung	Einheit
Biomasse	$C_c$	Hydrolyse	(5.3.1)	kgCSB/m <sup>3</sup>
Kohlenhydrate	$C_{ch}$	Hydrolyse	(5.3.2)	kgCSB/m <sup>3</sup>
Proteine	$C_{pr}$	Hydrolyse	(5.3.3)	kgCSB/m <sup>3</sup>
Lipide/Fette	$C_{li}$	Hydrolyse	(5.3.4)	kgCSB/m <sup>3</sup>
unlösliche Reststoffe	$C_{pi}$	NV	(5.3.5)	kgCSB/m <sup>3</sup>
lösliche Reststoffe	$C_{si}$	NV	(5.3.6)	kgCSB/m <sup>3</sup>
Einfachzucker	$C_{su}$	Acidogenese	(5.3.8)	kgCSB/m <sup>3</sup>
Aminosäuren	$C_{aa}$	Acidogenese	(5.3.9)	kgCSB/m <sup>3</sup>
Langkettige Fettsäuren (LCFA)	$C_{fa}$	Acidogenese	(5.3.10)	kgCSB/m <sup>3</sup>
Valeriansäure	$C_{va}$	Acetogenese	(5.3.16)	kgCSB/m <sup>3</sup>
Buttersäure	$C_{bu}$	Acetogenese	(5.3.17)	kgCSB/m <sup>3</sup>
Propionsäure	$C_{pro}$	Acetogenese	(5.3.18)	kgCSB/m <sup>3</sup>
Essigsäure	$C_{ac}$	Methanogenese	(5.3.22)	kgCSB/m <sup>3</sup>
Wasserstoff	$C_{h2}$	Methanogenese	(5.3.21)	kgCSB/m <sup>3</sup>
anorganischer Kohlenstoff	$C_{IC}$	Methanogenese	(5.3.26)	kmolC/kgCSB
Methan	$C_{ch4}$	NV	(5.3.25)	kgCSB/m <sup>3</sup>
anorganischer Stickstoff	$C_{IN}$	NV	(5.3.27)	kmolN/kgCSB
Zucker Verwerter	$C_{sud}$	NV	(5.3.11)	kgCSB/m <sup>3</sup>
Aminosäuren Verwerter	$C_{aad}$	NV	(5.3.12)	kgCSB/m <sup>3</sup>
LCFA Verwerter	$C_{fad}$	NV	(5.3.13)	kgCSB/m <sup>3</sup>
Valerian- und Buttersäure Verwerter	$C_{cAd}$	NV	(5.3.19)	kgCSB/m <sup>3</sup>
Propionsäure Verwerter	$C_{prod}$	NV	(5.3.20)	kgCSB/m <sup>3</sup>
Essigsäure Verwerter	$C_{acd}$	NV	(5.3.24)	kgCSB/m <sup>3</sup>
Wasserstoff Verwerter	$C_{h2d}$	NV	(5.3.23)	kgCSB/m <sup>3</sup>

Tabelle 5.3.1: Berücksichtigte Stoffe im ADM1-Modell mit deren Auftreten als Ausgangsprodukt in einer der vier Prozessphasen sowie die zugehörigen Gleichungen und Einheiten; NV: Stoff ist kein Ausgangsprodukt einer biologischen Phase.

Für jeden Stoff wird eine gewöhnliche Differentialgleichung aufgestellt. Da im ADM1-Modell für die meisten Stoffe die Einheit  $\text{kgCSB}/\text{m}^3$  verwendet wird, beschreiben die gewöhnlichen Differentialgleichungen eine Energiebilanz. Wir fangen zunächst mit den Ausgangsprodukten der vier Phasen an. Später werden dann die Stoffe, welche keine Ausgangsstoffe sind, betrachtet.

## Hydrolyse

In der Hydrolyse wird die Biomasse zunächst zu Kohlenhydraten, Proteinen, Fetten und Reststoffen abgebaut. Anschließend werden die genannten Stoffe weiter abgebaut zu den Ausgangsstoffen der Acidogenese (vgl. Abbildung 5.3.1). Für die Biomasse erhält man die Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_c}{\partial t} = & -k_{dis}C_c + k_{dec,C_{sud}}C_{sud} + k_{dec,C_{aad}}C_{aad} + k_{dec,C_{fad}}C_{fad} \\ & + k_{dec,C_{c4d}}C_{c4d} + k_{dec,C_{prod}}C_{prod} + k_{dec,C_{acd}}C_{acd} + k_{dec,C_{h2d}}C_{h2d}. \end{aligned} \quad (5.3.1)$$

Hierbei beschreibt  $k_{dis}C_c$  den Abbau der Biomasse und die  $k_{dec,C_*d}C_*d$  Terme beschreiben den Zugewinn an Biomasse durch das Sterben der Mikroorganismen.  $*d$  ist hierbei ein Platzhalter für alle berücksichtigten Mikroorganismen und  $*$  für alle berücksichtigten Stoffe. Für Kohlenhydrate, Proteine, Fette und Reststoffe ergeben sich die folgenden Gleichungen

$$\frac{\partial C_{ch}}{\partial t} = f_{ch,xc}k_{dis}C_c - k_{hyd,ch}C_{ch} \quad (5.3.2)$$

$$\frac{\partial C_{pr}}{\partial t} = f_{ch,pr}k_{dis}C_c - k_{hyd,pr}C_{pr} \quad (5.3.3)$$

$$\frac{\partial C_{li}}{\partial t} = f_{ch,li}k_{dis}C_c - k_{hyd,li}C_{li} \quad (5.3.4)$$

$$\frac{\partial C_{pi}}{\partial t} = f_{ch,pi}k_{dis}C_c \quad (5.3.5)$$

$$\frac{\partial C_{si}}{\partial t} = f_{ch,si}k_{dis}C_c. \quad (5.3.6)$$

Der positive Term beschreibt jeweils den Massenzugewinn der verschiedenen Stoff durch Abbau der Biomasse, während der negative Term den weiteren Abbau beschreibt.

## Acidogenese

Ab der Acidogenese-Phase, wird in dem Modell davon ausgegangen, dass Mikroorganismen die Stoffe weiter abbauen. Dabei wird die Michaelis-Menten Kinetik verwendet. Für die Aufnahme rate  $q^{*d}$  gilt

$$q^{*d} = k_{m,*d} \frac{C_*}{K_{s,*} + C_*} C_* I_{*d}, \quad (5.3.7)$$

wobei  $*$  ein Platzhalter für den betrachteten Stoff und  $I_{*d}$  ein Hemmterm ist. Die Hemmterme sind in Abschnitt 5.3.2 erläutert. In Gleichung (5.3.7) ist  $k_{m,*d}$  die maximale Aufnahme rate

und  $K_{s,*}$  die Michaelis-Menten Konstante. Die Michaelis-Menten Konstante gibt an, bei welcher Konzentration des Stoffes \* die Aufnahmerate halbiert wird. Ist die Konzentration  $C_* \ll K_{s,*}$ , tritt eine starke Hemmung ein. Ist hingegen die Konzentration  $C_* \gg K_{s,*}$ , hat der Michaelis-Menten Term keine Auswirkung auf die Kinetik, es tritt also keine Hemmung ein. Mit dieser Vorbetrachtung können wir nun die gewöhnlichen Differentialgleichungen für die Ausgangsstoffe der Acidogenese formulieren

$$\frac{\partial C_{su}}{\partial t} = -q^{su} + k_{hyd,ch}C_{ch} + (1 - f_{fa,li})k_{hyd,li}C_{li} \quad (5.3.8)$$

$$\frac{\partial C_{aa}}{\partial t} = -q^{aa} + k_{hyd,pr}C_{pr} \quad (5.3.9)$$

$$\frac{\partial C_{fa}}{\partial t} = -q^{fa} + f_{fa,li}k_{hyd,li}C_{li}. \quad (5.3.10)$$

Hierbei beschreibt  $q^*$  den Abbau des jeweiligen Stoffes durch Mikroorganismen, während die Quellterme den Abbau in der Hydrolyse-Phase gutschreiben. An den Gleichungen (5.3.8), (5.3.9) und (5.3.10) kann man erkennen, dass Zucker Abbauprodukt sowohl von Kohlenhydraten als auch von Lipiden ist. Aminosäuren sind Abbauprodukte von Proteinen und LCFA sind Abbauprodukte von Fetten (vgl. Abbildung 5.3.1).

Für die an der Acidogenese beteiligten Mikroorganismen ergeben sich die Gleichungen

$$\frac{\partial C_{sud}}{\partial t} = Y_{su}q^{su} - k_{dec,C_{sud}}C_{sud} \quad (5.3.11)$$

$$\frac{\partial C_{aad}}{\partial t} = Y_{aa}q^{aa} - k_{dec,C_{aad}}C_{aad} \quad (5.3.12)$$

$$\frac{\partial C_{fad}}{\partial t} = Y_{fa}q^{fa} - k_{dec,C_{fad}}C_{fad}. \quad (5.3.13)$$

Hierbei gibt  $Y_*$  den Anteil des aufgenommenen Stoffes wieder, welcher zum Wachstum verwendet wird. Die Senke beschreibt den Tod der Mikroorganismen.

## Acetogenese

In der Acetogenese werden Valeriansäure und Buttersäure von der gleichen Gruppe Mikroorganismen abgebaut. Welche der beiden Säuren konsumiert wird, hängt von dem Verhältnis der Konzentrationen ab. Konkret ergeben sich folgende Aufnahmeraten

$$\hat{q}^{va} = k_{m,c^4} \frac{C_{va}}{K_{s,va} + C_{va}} \cdot \frac{1}{1 + C_{bu}/C_{va}} C_{cAd} I_{cAd} \quad (5.3.14)$$

$$\hat{q}^{bu} = k_{m,c^4} \frac{C_{bu}}{K_{s,bu} + C_{bu}} \cdot \frac{1}{1 + C_{va}/C_{bu}} C_{cAd} I_{cAd}. \quad (5.3.15)$$

Für die Ausgangsstoffe der Acetogenese ergeben sich schließlich folgende Gleichungen

$$\frac{\partial C_{va}}{\partial t} = -\hat{q}^{va} + (1 - Y_{aa})f_{va,aa}q^{aa} \quad (5.3.16)$$

$$\frac{\partial C_{bu}}{\partial t} = -\hat{q}^{bu} + (1 - Y_{aa})f_{bu,aa}q^{aa} + (1 - Y_{su})f_{bu,su}q^{su} \quad (5.3.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{pro}}{\partial t} = & -q^{pro} + (1 - Y_{aa})f_{pro,aa}q^{aa} + (1 - Y_{su})f_{pro,su}q^{su} \\ & + (1 - Y_{c4})f_{pro,va}\hat{q}^{va}. \end{aligned} \quad (5.3.18)$$

Valeriansäure ist Abbauprodukt von Aminosäuren, Buttersäure entsteht durch Abbau von Aminosäuren und Zucker. Propionsäure entsteht durch Abbau von Aminosäuren, Zucker und Valeriansäure (vgl. Abbildung 5.3.1).

Für die beteiligten Mikroorganismen ergeben sich folgende Gleichungen

$$\frac{\partial C_{c4d}}{\partial t} = Y_{c4}(\hat{q}^{va} + \hat{q}^{bu}) - k_{dec,C_{c4d}}C_{c4d} \quad (5.3.19)$$

$$\frac{\partial C_{prod}}{\partial t} = Y_{pro}q^{pro} - k_{dec,C_{prod}}C_{prod}. \quad (5.3.20)$$

An Gleichung (5.3.19) kann man erkennen, dass es nur eine Gruppe Mikroorganismen gibt, welche Valerian- und Buttersäure verwerten.

## Methanogenese

In der Methanogenese entsteht Methan durch zwei verschiedene Prozesse. Im ersten Prozess werden Kohlendioxid und Wasserstoff zu Methan umgesetzt während im zweiten Prozess Essigsäure zu Methan und Kohlendioxid abgebaut wird. Es ergeben sich folgende Gleichungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{h2}}{\partial t} = & -q^{h2} + (1 - Y_{su})f_{h2,su}q^{su} + (1 - Y_{aa})f_{h2,aa}q^{aa} + (1 - Y_{fa})f_{h2,fa}q^{fa} \\ & + (1 - Y_{c4})f_{h2,va}\hat{q}^{va} + (1 - Y_{c4})f_{h2,bu}\hat{q}^{bu} + (1 - Y_{pro})f_{h2,pro}q^{pro} \end{aligned} \quad (5.3.21)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{ac}}{\partial t} = & -q^{ac} + (1 - Y_{su})f_{ac,su}q^{su} + (1 - Y_{aa})f_{ac,aa}q^{aa} + (1 - Y_{fa})f_{ac,fa}q^{fa} \\ & + (1 - Y_{c4})f_{ac,va}\hat{q}^{va} + (1 - Y_{c4})f_{ac,bu}\hat{q}^{bu} + (1 - Y_{pro})f_{ac,pro}q^{pro}. \end{aligned} \quad (5.3.22)$$

Hierbei sind Essigsäure und Wasserstoff Abbauprodukte von Zucker, Aminosäuren, LCFA, Valerian-, Butter- und Propionsäure (vgl. Abbildung 5.3.1).

Für die beteiligten Mikroorganismen ergeben sich folgende Gleichungen

$$\frac{\partial C_{h2d}}{\partial t} = Y_{h2}q^{h2} - k_{dec,C_{h2d}}C_{h2d} \quad (5.3.23)$$

$$\frac{\partial C_{acd}}{\partial t} = Y_{ac}q^{ac} - k_{dec,C_{acd}}C_{acd}. \quad (5.3.24)$$

### Übrige Gleichungen

Zu den Stoffen, welche nicht unmittelbar an den Reaktionen beteiligt sind und ebenfalls keine Ausgangsstoffe der vier biologischen Phasen sind, gehören Methan, unorganischer Kohlenstoff und unorganischer Stickstoff. Die Gleichungen lauten

$$\frac{\partial C_{ch4}}{\partial t} = (1 - Y_{ac})q^{ac} + (1 - Y_{h2})q^{h2} \quad (5.3.25)$$

$$\frac{\partial C_{IC}}{\partial t} = \hat{Q}^{IC} \quad (5.3.26)$$

$$\frac{\partial C_{IN}}{\partial t} = \hat{Q}^{IN}. \quad (5.3.27)$$

Für den unorganischen Kohlenstoff ergibt sich ein anderer Typ Gleichung. Das liegt daran, dass der unorganische Kohlenstoff nicht in CSB gemessen werden kann, stattdessen wird die Einheit kmol C / kg CSB (vgl. Tabelle 5.3.1) verwendet. Bei den gewöhnlichen Differentialgleichungen muss entsprechend immer umgerechnet werden. Dies geschieht mit dem Parameter  $IC_*$ , dem sogenannten Kohlenstoffgehalt. Das \* ist hier wieder ein Platzhalter für verschiedene Stoffe. Da in den meisten Prozessen unorganischer Kohlenstoff frei wird, gibt es entsprechend viele Quellen und Senken, die zu der Bilanzierung beitragen. Es ergibt sich folgende Gleichung

$$\hat{Q}^{IC} = \sum_{i \neq IC} \frac{\partial C_i}{\partial t} IN_i, \quad (5.3.28)$$

wobei die Summe über alle im Modell betrachteten Stoffe (außer über unorganischen Kohlenstoff) läuft.

Ähnlich wie bei Gleichung (5.3.26) muss auch für den unorganischen Stickstoff zwischen Einheiten umgerechnet werden. Analog wird das über den Parameter  $IN_*$  realisiert. Da die meisten betrachteten Stoffe keinen Stickstoff enthalten, genügt im ADM1-Modell die Betrachtung von  $IN_{*d}$ , dem Stickstoffinhalt der verschiedenen Mikroorganismen, sowie  $IN_{aa}$ , dem Stickstoff Inhalt der Aminosäuren. Damit ergibt sich für  $\hat{Q}^{IN}$  folgende Gleichung

$$\begin{aligned} \hat{Q}^{IN} = & (N_{aa} - Y_{aa}IN_{aad})q^{aa} - Y_{su}IN_{sud}q^{su} - Y_{fa}IN_{fad}q^{fa} \\ & - Y_{c4}IN_{c4d}(\hat{q}^{va} + \hat{q}^{bu}) - Y_{pro}IN_{pro}q^{pro} - Y_{ac}IN_{acd}q^{ac} - Y_{h2}IN_{h2d}q^{h2}. \end{aligned} \quad (5.3.29)$$

### Energieerhaltung

Wie bereits am Anfang dieses Abschnitts erklärt, wird im ADM1 Modell durch die gewöhnlichen Differentialgleichungen der CSB bilanziert. Damit der Gesamt-CSB erhalten ist (und damit

auch die Energie), muss folgendes gelten

$$f_{ch,xc} = 1 - f_{pr,xc} - f_{li,xc} - f_{pi,xc} - f_{si,xc} \quad (5.3.30)$$

$$f_{fa,li} = 1 - f_{su,li} \quad (5.3.31)$$

$$f_{va,aa} = 1 - f_{bu,aa} - f_{pro,aa} - f_{h2,aa} - f_{ac,aa} \quad (5.3.32)$$

$$f_{bu,su} = 1 - f_{pro,su} - f_{h2,su} - f_{ac,su} \quad (5.3.33)$$

$$f_{h2,fa} = 1 - f_{ac,fa} \quad (5.3.34)$$

$$f_{pro,va} = 1 - f_{ac,va} - f_{h2,va} \quad (5.3.35)$$

$$f_{ac,bu} = 1 - f_{h2,fa} \quad (5.3.36)$$

$$f_{ac,pro} = 1 - f_{h2,pro}. \quad (5.3.37)$$

Abschließend sind in den Tabellen 5.3.2, 5.3.3 und 5.3.4 alle Parameter des ADM1-Modells aufgelistet. Die Literaturwerte können z.T. stark variieren (abhängig von äußeren Einflüssen) und sind deshalb hier nicht aufgeführt. Für verschiedene Szenarien können die Literaturwerte beispielsweise in [Batstone et al., 2002] nachgeschlagen werden.

Parameter	Bedeutung
$k_{dis}$	Abbaurrate der Biomasse
$k_{dec,C_{sud}}$	Sterberate Zucker Verwerter
$k_{dec,C_{aad}}$	Sterberate Aminosäuren Verwerter
$k_{dec,C_{fad}}$	Sterberate LCFA Verwerter
$k_{dec,C_{c4d}}$	Sterberate Valerian- und Buttersäure Verwerter
$k_{dec,C_{prod}}$	Sterberate Propionsäure Verwerter
$k_{dec,C_{acd}}$	Sterberate Essigsäure Verwerter
$k_{dec,C_{h2d}}$	Sterberate Wasserstoff Verwerter
$k_{hyd,ch}$	Abbaurrate der Kohlenhydrate
$k_{pro,ch}$	Abbaurrate der Proteine
$k_{li,ch}$	Abbaurrate der Lipide
$k_{m,sud}$	maximale Aufnahme­rate Zuckerverwerter
$k_{m,aad}$	maximale Aufnahme­rate Aminosäuren Verwerter
$k_{m,fad}$	maximale Aufnahme­rate LCFA Verwerter
$k_{m,c4}$	maximale Aufnahme­rate Valerian- und Buttersäure Verwerter
$k_{m,pro}$	maximale Aufnahme­rate Propionsäure Verwerter
$k_{m,ac}$	maximale Aufnahme­rate Essigsäure Verwerter
$k_{m,h2}$	maximale Aufnahme­rate Wasserstoff Verwerter
$K_{s,su}$	Michaelis-Menten Konstante für Zucker Verwerter
$K_{s,aa}$	Michaelis-Menten Konstante für Aminosäuren Verwerter
$K_{s,fa}$	Michaelis-Menten Konstante für LCFA Verwerter
$K_{s,va}$	Michaelis-Menten Konstante für Valerian- und Buttersäure Verwerter
$K_{s,bu}$	Michaelis-Menten Konstante für Valerian- und Buttersäure Verwerter
$K_{s,pro}$	Michaelis-Menten Konstante für Propionsäure Verwerter
$K_{s,ac}$	Michaelis-Menten Konstante für Essigsäure Verwerter
$K_{s,h2}$	Michaelis-Menten Konstante für Wasserstoff Verwerter
$Y_{su}$	Anteil des aufgenommenen Einfachzuckers, welcher zum Wachstum verwendet wird
$Y_{aa}$	Anteil der aufgenommenen Aminosäuren, welche zum Wachstum verwendet werden
$Y_{fa}$	Anteil der aufgenommenen LCFA, welche zum Wachstum verwendet werden
$Y_{c4}$	Anteil der aufgenommenen Valerian- bzw. Buttersäure, welche zum Wachstum verwendet werden
$Y_{pro}$	Anteil der aufgenommenen Propionsäure, welche zum Wachstum verwendet wird
$Y_{ac}$	Anteil der aufgenommenen Essigsäure, welche zum Wachstum verwendet wird
$Y_{h2}$	Anteil des aufgenommenen Wasserstoffs, welcher zum Wachstum verwendet wird

Tabelle 5.3.2: Parameter des ADM1-Modells, Teil 1.

Parameter	Bedeutung
$f_{ch,xc}$	Anteil an Biomasse, welche zu Kohlenhydraten abgebaut wird
$f_{pr,xc}$	Anteil an Biomasse, welche zu Proteinen abgebaut wird
$f_{li,xc}$	Anteil an Biomasse, welche zu Fetten abgebaut wird
$f_{pi,xc}$	Anteil an Biomasse, welche zu unlöslichen Reststoffen abgebaut wird
$f_{si,xc}$	Anteil an Biomasse, welche zu löslichen Reststoffen abgebaut wird
$f_{fa,li}$	Anteil an Lipiden, welche zu LCFA abgebaut werden
$f_{su,li}$	Anteil an Lipiden, welche zu Einfachzucker abgebaut werden
$f_{va,aa}$	Anteil an Aminosäuren, welche zu Valeriansäure abgebaut werden
$f_{bu,aa}$	Anteil an Aminosäuren, welche zu Buttersäure abgebaut werden
$f_{pro,aa}$	Anteil an Aminosäuren, welche zu Propionsäure abgebaut werden
$f_{h2,aa}$	Anteil an Aminosäuren, welche zu Wasserstoff abgebaut werden
$f_{ac,aa}$	Anteil an Aminosäuren, welche zu Essigsäure abgebaut werden
$f_{bu,su}$	Anteil an Zucker, welcher zu Buttersäure abgebaut wird
$f_{pro,su}$	Anteil an Zucker, welcher zu Propionsäure abgebaut wird
$f_{h2,su}$	Anteil an Zucker, welcher zu Wasserstoff abgebaut wird
$f_{ac,su}$	Anteil an Zucker, welcher zu Essigsäure abgebaut wird
$f_{h2,fa}$	Anteil an LCFA, welche zu Wasserstoff abgebaut werden
$f_{ac,fa}$	Anteil an LCFA, welche zu Essigsäure abgebaut werden
$f_{pro,va}$	Anteil an Valeriansäure, welche zu Propionsäure abgebaut wird
$f_{ac,va}$	Anteil an Valeriansäure, welche zu Essigsäure abgebaut wird
$f_{h2,va}$	Anteil an Valeriansäure, welche zu Wasserstoff abgebaut wird
$f_{ac,bu}$	Anteil an Buttersäure, welche zu Essigsäure abgebaut wird
$f_{h2,bu}$	Anteil an Buttersäure, welche zu Wasserstoff abgebaut wird
$f_{ac,pro}$	Anteil an Propionsäure, welche zu Essigsäure abgebaut wird
$f_{h2,pro}$	Anteil an Propionsäure, welche zu Wasserstoff abgebaut wird
$IN_{aa}$	Stickstoffgehalt von Aminosäuren
$IN_{sud}$	Stickstoffgehalt von Zucker Verwertern
$IN_{aad}$	Stickstoffgehalt von Aminosäure Verwertern
$IN_{fad}$	Stickstoffgehalt von LCFA Verwertern
$IN_{cAd}$	Stickstoffgehalt von Valerian- und Buttersäure Verwertern
$IN_{prod}$	Stickstoffgehalt von Propionsäure Verwertern
$IN_{acd}$	Stickstoffgehalt von Essigsäure Verwertern
$IN_{h2d}$	Stickstoffgehalt von Wasserstoff Verwertern

Tabelle 5.3.3: Parameter des ADM1-Modells, Teil 2.



Parameter	Bedeutung
$IC_c$	Kohlenstoffgehalt Biomasse
$IC_{ch}$	Kohlenstoffgehalt Kohlenhydrate
$IC_{pr}$	Kohlenstoffgehalt Proteine
$IC_{li}$	Kohlenstoffgehalt Lipide
$IC_{pi}$	Kohlenstoffgehalt unlösliche Reststoffe
$IC_{si}$	Kohlenstoffgehalt lösliche Reststoffe
$IC_{su}$	Kohlenstoffgehalt Einfachzucker
$IC_{aa}$	Kohlenstoffgehalt Aminosäuren
$IC_{fa}$	Kohlenstoffgehalt LCFA
$IC_{va}$	Kohlenstoffgehalt Valerian Säure
$IC_{bu}$	Kohlenstoffgehalt Buttersäure
$IC_{pro}$	Kohlenstoffgehalt Propionsäure
$IC_{ac}$	Kohlenstoffgehalt Essigsäure
$IC_{h2}$	Kohlenstoffgehalt Wasserstoff
$IC_{IC}$	Kohlenstoffgehalt unorganischer Kohlenstoff
$IC_{IN}$	Kohlenstoffgehalt unorganischer Stickstoff
$IC_{ch4}$	Kohlenstoffgehalt Methan
$IC_{sud}$	Kohlenstoffgehalt Zucker Verwerter
$IC_{aad}$	Kohlenstoffgehalt Aminosäuren Verwerter
$IC_{fad}$	Kohlenstoffgehalt LCFA Verwerter
$IC_{cAd}$	Kohlenstoffgehalt Methan Verwerter
$IC_{prod}$	Kohlenstoffgehalt Propionsäure Verwerter
$IC_{acd}$	Kohlenstoffgehalt Essigsäure Verwerter
$IC_{h2d}$	Kohlenstoffgehalt Wasserstoff Verwerter

Tabelle 5.3.4: Parameter des ADM1-Modells, Teil 3.

### 5.3.2 Hemmterme im ADM1-Modell

In diesem Abschnitt werden die Hemmterme im ADM1-Modell detailliert betrachtet. Hemmterme verringern im Fall ungünstiger Lebensbedingungen die Aufnahmerate der Mikroorganismen. Es werden insgesamt drei verschiedene Typen von Hemmungen unterschieden. Der erste Typ ist die Hemmung aufgrund des pH-Wertes, der zweite Typ die Hemmung durch Wasserstoff und der dritte Typ ist die Hemmung durch Stickstoff. Der gesamte Hemmterm  $I_{*d}$  ergibt sich durch Kombination der verschiedenen Hemmterme

$$I_{*d} = I_{*d}^{pH} \cdot I_{*d}^{H_2} \cdot I_{*d}^N \quad (5.3.38)$$

Dabei ist  $*d$  ein Platzhalter für die im ADM1-Modell verwendeten Mikroorganismen.

#### Hemmung durch den pH-Wert

Für die Hemmung durch den pH-Wert werden im ADM1-Modell zwei verschiedene empirische Terme verwendet. Beim ersten Term tritt eine Hemmung ein, wenn der pH-Wert geringer ist als der Grenzwert  $pH^U$ . Die Gleichung lautet

$$I_{*d}^{pH^L}(pH) = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \text{falls } pH > pH_{*d}^U, \\ \exp\left(-3\left(\frac{pH - pH_{*d}^L}{pH_{*d}^U - pH_{*d}^L}\right)^2\right) & \text{sonst} \end{array} \right\}. \quad (5.3.39)$$

Der Parameter  $pH_{*d}^L$  gibt dabei an, wie stark die Hemmung bei Unterschreitung des Grenzwertes ist.

Der zweite Term beschreibt eine Hemmung, die auftritt wenn der Grenzwert nach oben,  $pH^U$ , oder nach unten,  $pH_{*d}^L$ , durchbrochen wird. Die Gleichung lautet

$$I_{*d}^{pH^{UL}}(pH) = \frac{1 + 2 \cdot 10^{0,5(pH_{*d}^L - pH_{*d}^U)}}{1 + 10^{(pH - pH_{*d}^U)} + 10^{(pH_{*d}^L - pH)}}. \quad (5.3.40)$$

In Tabelle 5.3.5 sind die Hemmungen für die verschiedenen Mikroorganismen des ADM1-Modells dargestellt. Für jede Gruppe an Mikroorganismen werden die beiden Parameter  $pH^U$  und  $pH^L$  benötigt, deren Werte von vielen äußeren Einflüssen abhängen. Für verschiedene Szenarien können die Werte in [Batstone et al., 2002] nachgeschlagen werden.

#### Berechnung des pH-Werts

Um Hemmungen durch den pH-Wert im Modell verwenden zu können, muss zunächst der pH-Wert berechnet werden. Dieser ergibt sich aus der Konzentration an  $H_3O^+$  Ionen in der Lösung

$$pH = -\log_{10}\left(C_{H_3O^+} \cdot \frac{l}{mol}\right). \quad (5.3.41)$$

Die Konzentration der  $H_3O^+$  Ionen hingegen hängt von den verschiedenen Stoffen in der flüssigen Phase ab. Jede Säure und Base steht dabei im Dissoziationsgleichgewicht mit ihrem

Anion bzw. Kation. Die verschiedenen Stoffe, welche in Tabelle 5.3.1 dargestellt sind, stellen immer die Gesamtmenge des jeweiligen Stoffes dar, d.h. der gelöste Stoff und die zugehörigen Anionen bzw. Kationen. Im Folgenden bezeichne  $C_{*,l}$  die Konzentration des gelösten Stoffes und  $C_{*,\pm}$  das zugehörige Anion bzw. Kation. Dann gilt

$$C_* = C_{*,l} + C_{*,\pm} \quad (5.3.42)$$

Im ADM1-Modell werden bei der Berechnung des pH-Wertes organische Säuren, unorganischer Kohlenstoff und unorganischer Stickstoff berücksichtigt. Nun können wir für jeden Stoff die Gleichung, welche das Dissoziationsgleichgewicht beschreibt, aufstellen

$$C_{IN,\pm} = \frac{C_{H_3O^+} \cdot C_{IN}}{K_{a,NH_4} + C_{H_3O^+}} \quad (5.3.43)$$

$$C_{IC,\pm} = \frac{K_{a,CO_2} \cdot C_{IC}}{K_{a,CO_2} + C_{H_3O^+}} \quad (5.3.44)$$

$$C_{ac,\pm} = \frac{K_{a,ac} \cdot C_{ac}}{K_{a,ac} + C_{H_3O^+}} \quad (5.3.45)$$

$$C_{pro,\pm} = \frac{K_{a,pro} \cdot C_{pro}}{K_{a,pro} + C_{H_3O^+}} \quad (5.3.46)$$

$$C_{bu,\pm} = \frac{K_{a,bu} \cdot C_{bu}}{K_{a,bu} + C_{H_3O^+}} \quad (5.3.47)$$

$$C_{va,\pm} = \frac{K_{a,va} \cdot C_{va}}{K_{a,va} + C_{H_3O^+}} \quad (5.3.48)$$

$$C_{OH^-} = \frac{K_{a,H_2O}}{C_{H_3O^+}} \quad (5.3.49)$$

Hierbei sind  $K_{a,*}$  Dissoziationskonstanten zu den verschiedenen Stoffen. Die Dissoziationskonstanten können beispielsweise in [Batstone et al., 2002] nachgeschlagen werden.

Die gerade beschriebenen Gleichungen reichen noch nicht aus, um  $C_{H_3O^+}$  zu bestimmen. Insgesamt wurden acht neue Unbekannte eingeführt  $\{C_{*,\pm}, C_{OH^-}, C_{H_3O^+}\}$ , aber nur sieben Gleichungen. Die letzte Gleichung beschreibt die Ladungserhaltung

$$C_+ + C_{IN,\pm} + C_{H_3O^+} - C_{IC,\pm} - \frac{C_{ac,\pm}}{64} - \frac{C_{pro,\pm}}{112} - \frac{C_{bu,\pm}}{160} - \frac{C_{va,\pm}}{208} - C_{OH^-} - C_- = 0. \quad (5.3.50)$$

Die Terme  $C_+$  und  $C_-$  beschreiben die Konzentration der sonstigen Anionen bzw. der sonstigen Kationen und sind als Parameter zu verstehen. Die Nenner in den Brüchen sind notwendig, um die Einheiten umzurechnen, und stellen gCSB pro Ladung des jeweiligen Stoffes dar. Der pH-Wert kann nun durch Lösen der acht Gleichungen mit den acht Unbekannten berechnet werden. Alle übrigen Stoffe, welche ebenfalls einen Einfluss auf den pH-Wert haben (z.B. LCFA, Aminosäuren etc.), werden im ADM1-Modell bei der Berechnung des pH-Wertes vernachlässigt.

### Hemmung durch Wasserstoff

Die Hemmung durch Wasserstoff wird wie folgt berechnet

$$I_{*d}^{h2} = \frac{1}{1 + C_{h2}/K_{*d}^{h2}} \tag{5.3.51}$$

Die Parameter  $K_{*d}^{h2}$  hängen von den jeweiligen Mikroorganismen ab. Ist die Wasserstoffkonzentration zu hoch, tritt eine Hemmung ein. Die Parameter können in [Batstone et al., 2002] nachgeschlagen werden.

### Hemmung durch Stickstoff

Die Hemmung durch Stickstoff erfolgt auf zwei verschiedene Arten. Wenn die Konzentration des gesamten unorganischen Stickstoffs  $C_{IN}$  sehr gering ist, tritt eine Hemmung ein. Dies wird durch die Gleichung

$$I_{*d}^{IN} = \frac{1}{1 + K_{*d}^{IN}/C_{IN}} \tag{5.3.52}$$

beschrieben.

Die zweite Hemmung durch Stickstoff beschreibt eine Hemmung durch Ammoniak. Die Hemmung tritt ein, wenn die Konzentration an Ammoniak zu hoch wird. Die Gleichung lautet

$$I_{*d}^{NH3} = \frac{1}{1 + C_{NH3}/K_{*d}^{NH3}} \tag{5.3.53}$$

Die Parameter  $K_{*d}^{NH3}$  und  $K_{*d}^{IN}$  können in [Batstone et al., 2002] nachgeschlagen werden.

Mikroorganismen	$I_{*d}^{pH}$	$I_{*d}^{h2}$	$I_{*d}^{IN}$	Parameter
Zucker Verwerter	$I_{sud}^{pH_{UL}}$	-	$I_{sud}^{IN}$	$\{pH_U, pH_L, K_{sud}^{IN}\}$
Aminosäuren Verwerter	$I_{aad}^{pH_{UL}}$	-	$I_{aad}^{IN}$	$\{pH_U, pH_L, K_{aad}^{IN}\}$
LCFA Verwerter	$I_{fad}^{pH_{UL}}$	$I_{fad}^{h2}$	$I_{fad}^{IN}$	$\{pH_U, pH_L, K_{fad}^{h2}, K_{fad}^{IN}\}$
Valerian- und Buttersäure Verwerter	$I_{cAd}^{pH_{UL}}$	$I_{cAd}^{h2}$	$I_{cAd}^{IN}$	$\{pH_U, pH_L, K_{cAd}^{h2}, K_{cAd}^{IN}\}$
Propionsäure Verwerter	$I_{prod}^{pH_{UL}}$	$I_{prod}^{h2}$	$I_{prod}^{IN}$	$\{pH_U, pH_L, K_{prod}^{h2}, K_{prod}^{IN}\}$
Essigsäure Verwerter	$I_{acd}^{pH_L}$	$I_{acd}^{h2}$	$I_{acd}^{IN} \cdot I_{acd}^{NH3}$	$\{pH_U, pH_L, K_{acd}^{h2}, K_{acd}^{IN}, K_{acd}^{NH3}\}$
Wasserstoff Verwerter	$I_{h2d}^{pH_{UL}}$	$I_{h2d}^{h2}$	$I_{h2d}^{IN}$	$\{pH_U, pH_L\}$

Tabelle 5.3.5: Hemmterme im ADM1-Modell und die benötigten Parameter.

### 5.3.3 Schwächen und Verbesserungen des ADM1-Modells

In diesem Abschnitt werden die wichtigsten Schwächen sowie einige Verbesserungen des ADM1-Modells erläutert, ein Anspruch auf Vollständigkeit besteht jedoch nicht.

### Anzahl der Parameter

Die größte Schwäche des ADM1-Modells ist gegeben durch die große Anzahl an Parametern. In den Tabellen 5.3.2, 5.3.3, 5.3.4 und 5.3.5 sind alle Parameter aufgelistet. Insgesamt werden 114 Parameter verwendet. Die meisten Parameter sind stark Temperatur- und pH-Wert-abhängig. Weiterhin variieren die meisten Parameter in der Literatur um mehrere Größenordnungen. Unter diesen Umständen muss eine große Menge an Messdaten zu möglichst vielen Intermediaten vorhanden sein, um das ADM1-Modell zu validieren. In den Experimenten können jedoch meist nur wenige Stoffe detailliert gemessen (vgl. Kapitel 7), eine korrekte Validierung des kompletten ADM1-Modells ist mit aktuellen Messmethoden daher unmöglich.

### Abbauwege

In einem Modell sollten Stoffe, die durch Mikroorganismen konsumiert werden, in einem konsistenten Verhältnis zu den Stoffen stehen, welche beim Absterben der Mikroorganismen entstehen. Im ADM1-Modell ist das nicht der Fall. Beispielsweise wird von Zuckerverwertern ausschließlich Einfachzucker konsumiert. Durch das Absterben entsteht allerdings Biomasse aus der dann im weiteren Verlauf unter anderem Reststoffe entstehen. Es gibt also im ADM1-Modell einen Abbauweg von Zucker zu Reststoffen. Dies sollte nicht der Fall sein, da Zucker im Gegensatz zu Reststoffen anaerob abbaubar ist.

Es gibt zwei Möglichkeiten dieses Problem zu beheben. Beim ersten Ansatz entsteht durch das Absterben der Mikroorganismen wieder Einfachzucker. Bei der zweiten Möglichkeit müssen Mikroorganismen zusätzlich zum Einfachzucker auch andere anaerob unverwertbare Stoffe konsumieren.

### Füllkörper

Im ADM1-Modell gibt es keine eingebaute Schranke für die maximale Menge an Mikroorganismen, d.h. Mikroorganismen vermehren sich bei ausreichender Versorgung mit Nährstoffen viel zu stark. In vielen Reaktoren werden Füllkörper verwendet (vgl. Abschnitt 4.6), deren Beschaffenheit einen entscheidenden Einfluss auf die maximal mögliche Konzentration der Mikroorganismen hat. Dieses Problem kann durch einen weiteren Füllkörper-spezifischen Hemmterm  $I_{*d}^{MAX}$  behoben werden

$$I_{*d}^{MAX} = 1 - \frac{C_{*d}}{MO_{MAX,*d}}. \quad (5.3.54)$$

Hierbei gibt  $MO_{MAX,*d}$  die maximal mögliche Konzentration der Mikroorganismen  $*d$  im Reaktor an. Der Parameter  $MO_{MAX,*d}$  muss als Füllkörper-spezifischer Parameter aufgefasst werden. Es gilt: Je größer die volumenbezogene spezifische Oberfläche desto größer ist  $MO_{MAX,*d}$ .

Der Fall  $C_{*d} \rightarrow MO_{MAX,*d}$  beschreibt Füllkörper, welche bereits durch Mikroorganismen überbevölkert sind. Die inneren Schichten des Biofilms können dann nicht mehr ausreichend

mit Nährstoffen versorgt werden und sterben ab. Der Hemmterm  $I_{*d}^{MAX}$  beschreibt genau dieses Verhalten. Im Falle einer Überbevölkerung wird der Konsum der Nährstoffe gehemmt.

### Gibbssche freie Energie

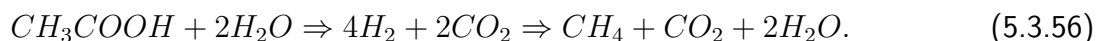
Die Änderung der Gibbsschen freien Energie gibt die Energie an, welche ein Mikroorganismus erhält oder investieren muss, wenn eine Reaktion durchgeführt wird. Wenn die Änderung der Gibbsschen freien Energie negativ ist, wird bei der zugehörigen Reaktion Energie freigesetzt. Bei positiver Änderung der Gibbsschen freien Energie muss Energie investiert werden. Damit eine Reaktion stattfinden kann, muss der beteiligte Mikroorganismus ATP produzieren können. Dazu muss eine bestimmte Menge Energie pro Reaktion frei werden, es ist also nicht hinreichend, dass die Änderung der Gibbsschen freien Energie negativ ist. Obwohl im ADM1-Modell viele Hemmterme berücksichtigt sind, gibt es keine explizite Berücksichtigung der Gibbsschen freien Energie. Deshalb kann es vorkommen, dass Reaktionen im Modell stattfinden, obwohl die beteiligten Mikroorganismen keinen Energiegewinn erzielen können. Weitere Informationen zur Gibbsschen freien Energie sowie zur thermodynamischen Modellierung der Reaktionsterme können in [Rodriguez et al., 2008], [Sorribas et al., 2007], [Thauer et al., 1977] und [de Poorter et al., 2007] nachgeschlagen werden.

### Syntrophe Mikroorganismen

Viele Abbauschritte können auf verschiedene Arten erfolgen. Insbesondere gibt es innerhalb der Methanogenese und Acetogenese oft zwei verschiedene Abbauege. Der eine Weg beschreibt den direkten Abbauege, so wie es in Abbildung 5.3.1 dargestellt ist, der andere Abbauege wird durch eine symbiotische Lebensgemeinschaft von mindestens zwei Mikroorganismen durchgeführt (vgl. Abschnitt 4.2). In den symbiotischen Lebensgemeinschaften kostet die erste Reaktion Energie und produziert Wasserstoff. Der produzierte Wasserstoff wird dann an den zweiten Mikroorganismus weitergereicht und verwertet. Der zweite Mikroorganismus gibt dann einen Teil der gewonnenen Energie an den symbiotischen Partner ab. Weil Wasserstoff energiereich ist, ist es entscheidend, dass der Wasserstoff nicht verloren geht. Dieses Phänomen tritt beispielsweise beim Abbau von Essigsäure auf. Der direkte Abbau ist durch die Reaktion



gegeben. Hierbei werden unter Normalbedingungen 31kJ/mol frei. Der Abbau durch die symbiotische Lebensgemeinschaft sieht folgendermaßen aus



Die erste Reaktion kostet den beteiligten Mikroorganismus unter Normalbedingungen 104kJ/mol, die zweite Reaktion bringt unter Normalbedingungen einen Energiegewinn von 135kJ/mol (vgl. [Batstone et al., 2002]). Solche symbiotischen Lebensgemeinschaften sind im ADM1-Modell ebenfalls nicht berücksichtigt.

## 5.4 Löslichkeit von Gasen

In Tabelle 5.3.1 sind alle im ADM1-Modell berücksichtigten Stoffe aufgeführt. Zu den Gasen gehören Kohlendioxid, Methan, Wasserstoff und Ammoniak. Methan und Wasserstoff sind nur schwer löslich in Wasser. Deshalb können die Lösungsprozesse für diese beiden Gase vernachlässigt werden. Kohlendioxid und Ammoniak sind hingegen sehr gut löslich in Wasser und sollten betrachtet werden. In diesem Abschnitt betrachten wir insbesondere die Löslichkeit von Kohlendioxid in Wasser.

Lösungsprozesse werden mit dem Henry-Gas-Gesetz beschrieben, es beschreibt einen linearen Zusammenhang zwischen der Konzentration in der Flüssigkeit und dem Partialdruck. Die Formel lautet

$$C_{CO_2}^l = p_{CO_2} / H_{CO_2}(T, pH), \quad (5.4.1)$$

wobei  $C_{CO_2}^l$  die Konzentration von Kohlendioxid in Wasser angibt.  $p_{CO_2}$  ist der Partialdruck von Kohlendioxid in der Gasphase und  $H_{CO_2}(T, pH)$  ist die Henry-Konstante. Die Henry-Konstante hängt immer von der Temperatur ab. Da Kohlendioxid in Wasser zu Kohlensäure und Hydrogencarbonaten reagiert, ist der Einfluss des pH-Wertes auf die Henrykonstante entscheidend. In [Wonneberger et al., 2011] wurde folgender Zusammenhang gefunden

$$H_{CO_2}(T, pH) = \frac{1}{1 + \frac{K_{a,CO_2}(T)}{10^{-pH}}} H_{CO_2}^*(T), \quad (5.4.2)$$

wobei  $K_{a,CO_2}(T)$  die Dissoziationskonstante von Kohlendioxid ist und  $H_{CO_2}^*(T)$  die Henry-Konstante ohne Berücksichtigung des pH-Wertes. Beide Konstanten hängen weiterhin von der Temperatur ab. In [Edwards et al., 1978] wurde für  $0^\circ\text{C} < T < 225^\circ\text{C}$  die Temperaturabhängigkeit der beiden Konstanten untersucht und folgender empirischer Zusammenhang gefunden

$$\ln(H_{CO_2}^*(T)) = A_1/T + A_2 \ln T + A_3 + A_4 \quad (5.4.3)$$

$$\ln(K_{a,CO_2}(T)) = B_1/T + B_2 \ln T + B_3 + B_4 \quad (5.4.4)$$

mit den Konstanten  $A_1, \dots, A_4$  und  $B_1, \dots, B_4$ . Die Konstanten sind in der Tabelle 5.4.1 dargestellt.

Konstante	A1	A2	A3	A4	B1	B2	B3	B4
Wert	-12092,1	-36,7816	0	235,482	-6789,04	-11,4519	-0,010454	94,4914

Tabelle 5.4.1: Konstanten zur Berechnung der Henry-Konstante und der Dissoziationskonstante, Gültigkeitsbereich:  $0^\circ\text{C}$  bis  $225^\circ\text{C}$ .

## 5.5 Kopplung des Strömungsmodells mit dem ADM1-Modell

Dieser Abschnitt befasst sich mit der Kopplung des ADM1-Modells mit dem Strömungsmodell. Dafür müssen drei wichtige Schritte durchgeführt werden. Im ersten Schritt müssen die Reaktionsterme im Strömungsmodell festgelegt werden, im zweiten Schritt müssen die Stoffe verschiedenen Phasen zugeordnet werden und im dritten Schritt müssen die Einheiten im ADM1-Modell in kg/l umgerechnet werden.

### Bestimmung der Reaktionsterme

Die Reaktionsterme  $R_{i_1 \rightarrow i_2}^{j_1 \rightarrow j_2}$  werden im Strömungsmodell (vgl. Abschnitt 5.2) benötigt und beschreiben den Abbauweg der Stoffe. Die Terme ergeben sich aus dem ADM1-Modell (vgl. Abschnitt 5.3.1) sowie der Berücksichtigung der zu den beteiligten Stoffen gehörenden Phasen (vgl. Tabelle 5.5.1). Betrachten wir beispielsweise die Reaktionsterme welche mit Buttersäure zusammenhängen. Aus Abbildung 5.3.1 entnehmen wir, dass Buttersäure aus Aminosäuren und Einfachzucker entsteht, d.h.

$$R_{aa \rightarrow bu}^{l \rightarrow l} = (1 - Y_{aa}) f_{aa, bu} q^{aad} \quad (5.5.1)$$

$$R_{su \rightarrow bu}^{l \rightarrow l} = (1 - Y_{su}) f_{su, bu} q^{sud}. \quad (5.5.2)$$

Weiterhin entnehmen wir aus Abbildung 5.3.1, dass Buttersäure-Verwerter Buttersäure aufnehmen, einen Teil zu Essigsäure und Nebenprodukten verarbeiten und den anderen Teil zum Wachstum verwenden, d.h.

$$R_{bu \rightarrow bud}^{l \rightarrow s} = Y_{c4} \hat{q}^{bu} \quad (5.5.3)$$

$$R_{bu \rightarrow ac}^{l \rightarrow l} = (1 - Y_{c4}) f_{bu, ac} \hat{q}^{bu} \quad (5.5.4)$$

$$R_{bu \rightarrow h2}^{l \rightarrow g} = (1 - Y_{c4}) f_{bu, ac} \hat{q}^{bu} \quad (5.5.5)$$

$$R_{bu \rightarrow IC}^{l \rightarrow l} = Y_{c4} \cdot IN_{c4d} \cdot \hat{q}^{bu}. \quad (5.5.6)$$

Da Buttersäure mit keinem anderen Stoff in Verbindung steht gilt für alle übrigen Buttersäure betreffenden Reaktionsterme

$$R_{bu \rightarrow i_1}^{l \rightarrow j_1} = 0 \quad (5.5.7)$$

$$R_{i_2 \rightarrow bu}^{j_2 \rightarrow l} = 0. \quad (5.5.8)$$

### Einteilung der Stoffe in Phasen

Im zweiten Schritt müssen die Stoffe aus dem ADM1-Modell in die zugehörigen Phasen (fest, flüssig und gasförmig) eingestuft werden. Dies ist notwendig, damit sichergestellt ist, dass die Strömung der Stoffe korrekt modelliert wird. Die Einteilung der Stoffe in die Phasen ist in Tabelle 5.5.1 dargestellt. Es gibt einige Stoffe, welche in mehreren Phasen verfügbar sind.



Die Mikroorganismen in der festen Phase unterscheiden sich von denen in der flüssigen Phase und sollten getrennt voneinander in das Modell einfließen. Für alle anderen Stoffe, welche in mehreren Phasen vorkommen können, gilt: Der Abbau durch Mikroorganismen läuft immer in der flüssigen Phase ab. Die Konzentration des entsprechenden Stoffes in der Gas-Phase kann dann mit einer algebraischen Gleichung gemäß Abschnitt 5.4 bestimmt werden.

Stoff	feste Phase	flüssige Phase	gasförmige Phase
Biomasse	x		
Kohlenhydrate	x		
Proteine	x		
Lipide/Fette	x		
unlösliche Reststoffe	x		
lösliche Reststoffe		x	
Einfachzucker		x	
Aminosäuren		x	
Langkettige Fettsäuren (LCFA)		x	
Valeriansäure		x	
Buttersäure		x	
Propionsäure		x	
Essigsäure		x	
Wasserstoff			x
anorganischer Kohlenstoff		x	x
Methan			x
anorganischer Stickstoff		x	x
Zucker Verwerter	x	x	
Aminosäuren Verwerter	x	x	
LCFA Verwerter	x	x	
Valerian- und Buttersäure Verwerter	x	x	
Propionsäure Verwerter	x	x	
Essigsäure Verwerter	x	x	
Wasserstoff Verwerter	x	x	

Tabelle 5.5.1: Einteilung der Stoffe in die Phasen des Strömungsmodells.

### Umrechnung der Einheiten

Die Umrechnung der Einheiten in kg/l ist nicht sonderlich kompliziert, wenn man den CSB-Gehalt und die molekulare Masse des jeweiligen Stoffes kennt. Der CSB-Gehalt eines beliebigen Stoffes kann gemäß Gleichung (4.4.2) berechnet werden, die molekulare Masse ergibt sich als Summe der Massen der einzelnen Atome im Molekül. Für Stoffgruppen müssen entsprechende Durchschnittswerte für den CSB-Gehalt und die molekulare Masse bestimmt

werden. Die Umrechnung ergibt sich dann wie folgt

$$C_*^{kg/l} = C_*^{kgCSB/m^3} \cdot 1/Co_*^{CSB} \cdot M_* \cdot \frac{m^3}{1000l}. \quad (5.5.9)$$

Hierbei beschreibt  $Co_*^{CSB}$  den CSB-Gehalt mit  $[Co_*^{CSB}] = \text{kgCSB/mol}$  des Stoffes \* und  $M_*$  die molekulare Masse mit  $[M_*] = \text{kg/mol}$ .

Analog müssen alle Parameter des ADM1-Modells geprüft und gegebenenfalls umgerechnet werden.

## 5.6 Simulationsmodelle

In diesem Abschnitt werden Simulationsmodelle für einen CST-Reaktor und einen Downflow-Methanreaktor erläutert. Das Simulationsmodell für den Downflow-Methanreaktor wird in Abschnitt 7 zur Simulation einer zweistufigen zweiphasigen Biogasanlage im Labormaßstab verwendet.

### 5.6.1 CST-Reaktor

Der CST-Reaktor ist ein einstufiger einphasiger Reaktor, welcher als gleichmäßig durchmischt angenommen werden kann (vgl. Abschnitt 4.6). In einem CSTR laufen alle vier biologischen Phasen gleichzeitig ab, deshalb werden typischerweise beim Simulationsmodell alle gewöhnlichen Differentialgleichungen aus dem ADM1-Modell verwendet. Weil der CSTR als gleichmäßig durchmischt angenommen wird, ist die Berücksichtigung der Strömung mit Hilfe eines Strömungsmodells nicht erforderlich. Als Simulationsmodell kann das ADM1-Modell verwendet werden (siehe auch [Batstone et al., 2002]).

### 5.6.2 Zwei-Phasen-Strömungsmodell für acetoklastische Methanogenese im Downflow-Methanreaktor

Der Downflow-Methanreaktor ist die zweite Stufe einer zweistufigen zweiphasigen Biogasanlage (vgl. Abschnitt 4.6.2). Die Prozessflüssigkeit fließt oben in den Reaktor hinein, fließt durch den Reaktor hindurch und schließlich unten wieder heraus. Die Strömung der Prozessflüssigkeit darf nicht vernachlässigt werden. In Abschnitt 5.2 wurde das Strömungsmodell im Detail erläutert. Um das Strömungsmodell mit einem Teil des ADM1-Modells zu koppeln, muss zunächst festgelegt werden, welche Stoffe in welchen Phasen berücksichtigt werden sollen. Damit wird die Anzahl der Stoffe in jeder Phase  $n_s$ ,  $n_l$ , und  $n_g$  festgelegt. In Kapitel 7 wurde gezeigt, dass nicht alle Stoffe in allen Reaktorteilen verfügbar sind. Deshalb ist es nicht sinnvoll in einem gekoppelten Modell alle Stoffe aus dem ADM1-Modell zu berücksichtigen. Es ist ausreichend nur bestimmte biologische Phasen zu berücksichtigen.

In diesem Abschnitt wird ein Zwei-Phasen-Strömungsmodell für acetoklastische Methanogenese in einem Downflow-Methanreaktor erläutert (vgl. Abschnitt 4.6), wobei der Methanreaktor mit Füllkörpern befüllt ist. Das vorgestellte Modell wird schließlich in Kapitel 7 als Simulationsmodell verwendet.

Bei der acetoklastischen Methanogenese steht die Bildung von Methan aus Essigsäure im Vordergrund. Die Füllkörper dienen als Aufwuchskörper für die Essigsäure-Verwerter. Insgesamt müssen folgende Stoffe berücksichtigt werden: Füllkörper, Essigsäure-Verwerter, Essigsäure, Wasser, Methan und Kohlendioxid.

Aus Tabelle 5.5.1 kann die Zugehörigkeit der Stoffe zu den unterschiedlichen Phasen abgelesen werden. In einem Downflow-Methanreaktor mit Füllkörpern befindet sich der größte Teil der Mikroorganismen auf den Füllkörpern, so dass die Essigsäure-Verwerter in der flüssigen Phase vernachlässigt werden können.

Die Komponenten in der festen Phase sind demnach Essigsäureverwerter ( $acd$ ) und Füllkörper (engl. plastic-tower packings  $PTP$ ).

$$\mathcal{P}_s := \{acd, PTP\}. \quad (5.6.1)$$

Die Komponenten der flüssigen Phase sind Wasser ( $H_2O$ ) und Essigsäure ( $ac$ ):

$$\mathcal{P}_l := \{H_2O, ac\}. \quad (5.6.2)$$

In der Gas-Phase betrachten wir nur Methan ( $CH_4$ ) und Kohlendioxid ( $CO_2$ ):

$$\mathcal{P}_g := \{CH_4, CO_2\}. \quad (5.6.3)$$

Damit gilt  $n_s = n_l = n_g = 2$ . Die benötigten Parameter für das Strömungsmodell sind in Tabelle 5.6.1 (siehe auch Tabelle 5.2.3) aufgelistet. Die Gleichungen für dieses Modell lauten analog zu Abschnitt 5.2.2

$$\frac{\partial((1-\phi)\rho^s)}{\partial t} = R^s \quad (5.6.4)$$

$$\frac{\partial((1-\phi)\rho^s\omega_{acd}^s)}{\partial t} = R_{acd}^s \quad (5.6.5)$$

$$\frac{\partial(\phi\rho^l)}{\partial t} = -\nabla(\rho^l\mathbf{q}_l) + R^l \quad (5.6.6)$$

$$\frac{\partial(\phi\rho^l\omega_{ac}^l)}{\partial t} = -\nabla(\rho^l\mathbf{q}_l\omega_{ac}^l - \rho^l\mathbb{D}_{ac}^l(\phi)\nabla\omega_{ac}^l) + R_{ac}^l \quad (5.6.7)$$

$$P_{CH_4}^g(t) = \int_{T_0}^t R_{CH_4}^g(\hat{t})d\hat{t} \quad (5.6.8)$$

$$P_{CO_2}^g(t) = \int_{T_0}^t R_{CO_2}^g(\hat{t})d\hat{t} \quad (5.6.9)$$

mit (analog zu Abschnitt 5.1 und 5.2.2)

$$\mathbf{q}_l = -\frac{\mathbb{K}_l}{\mu_l}(\nabla p_l - \rho^l\mathbf{g}) \quad (5.6.10)$$

$$\rho^s = \rho_{acd}^s\omega_{acd}^s + (1-\omega_{acd}^s)\rho_{PTP}^s \quad (5.6.11)$$

$$\rho^l = \rho_{ac}^l\omega_{ac}^l + (1-\omega_{ac}^l)\rho_{H_2O}^s \quad (5.6.12)$$

$$R_{acd}^s = R_{ac\rightarrow acd}^{l\rightarrow s} - R_{acd\rightarrow ac}^{s\rightarrow l} - R_{acd\rightarrow H_2O}^{s\rightarrow l} \quad (5.6.13)$$

$$R_{ac}^l = R_{acd\rightarrow ac}^{s\rightarrow l} - R_{ac\rightarrow acd}^{l\rightarrow s} - R_{ac\rightarrow CH_4}^{l\rightarrow g} - R_{ac\rightarrow CO_2}^{l\rightarrow g} \quad (5.6.14)$$

$$R_{CH_4}^g = R_{ac\rightarrow CH_4}^{l\rightarrow g} \quad (5.6.15)$$

$$R_{CO_2}^g = R_{ac\rightarrow CO_2}^{l\rightarrow g} \quad (5.6.16)$$

$$R^s = R_{acd}^s \quad (5.6.17)$$

$$R^l = -R_{acd}^s - R_{CH_4}^g - R_{CO_2}^g. \quad (5.6.18)$$

Nun müssen die auftretenden Reaktionsterme  $R_{i_1 \rightarrow i_2}^{j_1 \rightarrow j_2}$  festgelegt werden. Diese werden analog zum Abschnitt 5.3.1 festgelegt. Die verwendeten Parameter sind in Tabelle 5.6.2 dargestellt.

### Wachstum der Mikroorganismen durch Konsum von Essigsäure

$$R_{ac \rightarrow acd}^{l \rightarrow s} = k_{m,acd} Y_{acd} \frac{C_{ac}^l}{K_{s,ac} + C_{ac}^l} C_{acd}^s I_{acd} \quad (5.6.19)$$

### Produktion von Methan durch Verstoffwechslung von Essigsäure

$$R_{ac \rightarrow CH_4}^{l \rightarrow g} = \frac{4}{15} k_{m,acd} (1 - Y_{acd}) \frac{C_{ac}^l}{K_{s,ac} + C_{ac}^l} C_{acd}^s I_{acd} \quad (5.6.20)$$

### Produktion von Kohlendioxid durch Verstoffwechslung von Essigsäure

$$R_{ac \rightarrow CO_2}^{l \rightarrow g} = \frac{11}{15} k_{m,acd} (1 - Y_{acd}) \frac{C_{ac}^l}{K_{s,ac} + C_{ac}^l} C_{acd}^s I_{acd} \quad (5.6.21)$$

Die beiden Brüche  $4/15$  und  $11/15$  entstehen aufgrund der Umrechnung der Einheiten in kg/l (vgl. Abschnitt 5.5).

### Tod von Mikroorganismen

$$R_{acd \rightarrow ac}^{s \rightarrow l} = k_{dec,acd} f_{ac,acd} C_{acd}^s \quad (5.6.22)$$

$$R_{acd \rightarrow H_2O}^{s \rightarrow l} = k_{dec,acd} (1 - f_{ac,acd}) C_{acd}^s \quad (5.6.23)$$

Hierbei beschreibt  $C_{ac}^l$  die Konzentration der Essigsäure und  $C_{acd}^s$  die Konzentration der Mikroorganismen. Die beiden Konzentrationen ergeben sich analog zu Abschnitt 5.1

$$C_{ac}^l = \phi \rho_l \omega_{ac}^l \quad (5.6.24)$$

$$C_{acd}^s = (1 - \phi) \rho_s \omega_{acd}^s. \quad (5.6.25)$$

Da im Modell Wasserstoff, Stickstoff und der pH-Wert nicht berechnet werden, können keine entsprechenden Hemmungen berücksichtigt werden. Stattdessen wird der Füllkörper-spezifische Hemmterm analog zu Abschnitt 5.3.3

$$I_{acd} = I_{acd}^{MAX} = 1 - \frac{C_{acd}^s}{MO_{MAX,acd}} \quad (5.6.26)$$

verwendet.

Die hier vorgestellten Gleichungen beseitigen einige Schwächen des ADM1-Modells. Die Anzahl der Parameter ist durch die Berücksichtigung von nur einer biologischen Phase deutlich geringer, durch die Verwendung von  $I^{MAX}$  wird die Problematik mit den Füllkörpern adressiert und durch  $f_{*,*d}$  wird die Problematik mit den Abbauegen verhindert (vgl. Abschnitt 5.3.3).

Parameter	Bezeichnung	Wert	Einheit
$\rho_{PTP}^s$	reine Dichte Füllkörper	0,95	kg/l
$\rho_{acd}^s$	reine Dichte Mikroorganismen	1,09	kg/l
$\rho_{H_2O}^l$	reine Dichte Wasser	1,00	kg/l
$\rho_{ac}^l$	reine Dichte Essigsäure	1,05	kg/l
$K_l$	Permeabilität der flüssigen Phase	NV	
$\mu_l$	Viskosität der flüssigen Phase	NV	
$D_{ac}^l$	Diffusionstensor von Essigsäure in Wasser	$1,210 \cdot 10^{-9} \cdot \mathbb{1}$	$m^2/s$
$g$	Gravitationsbeschleunigung	$(0, -9,806)$	$m/s^2$

Tabelle 5.6.1: Strömungsparameter des Zwei-Phasen-Strömungsmodells für acetoklastische Methanogenese in einem Downflow Methanreaktor mit Füllkörpern. NV: nicht verfügbar

Parameter	Bezeichnung
$k_{m,ac}$	Aufnahmerate der Essigsäure Verwerter
$Y_{ac}$	Anteil der aufgenommenen Essigsäure, welche zum Wachstum verwendet wird
$K_{s,ac}$	Michaelis-Menten Konstante für Essigsäure Verwerter
$f_{ac,acd}$	Anteil der toten Mikroorganismen, welche zu Essigsäure umgewandelt werden
$k_{dec,acd}$	Sterberate der Essigsäure Verwerter
$MO_{MAX,acd}$	Maximale Konzentration der Essigsäure Verwerter im Modell

Tabelle 5.6.2: Reaktionsparameter des Zwei-Phasen-Strömungsmodells für acetoklastische Methanogenese in einem Downflow Methanreaktor mit Füllkörpern.

# Kapitel 6

## Simulationssoftware

In diesem Kapitel werden die eingesetzten Softwaretools erläutert. Abschnitt 6.1 befasst sich mit dem Simulationstool UG, welches zur Lösung des Simulationsmodells verwendet wurde (vgl. Abschnitt 5.6.2). Dabei ist die Darstellung der grundlegenden Funktionen von UG an [Bastian und Wittum, 1994] angelehnt. Die im Rahmen dieser Arbeit implementierten Erweiterungen der Numproc „CPLDISC“ sind in Abschnitt 6.2 detailliert erläutert. Schließlich befasst sich Abschnitt 6.3 mit der Implementierung des Tools zur Parameterschätzung.

### 6.1 UG

UG steht für „unstrukturierte Gitter“ und ist ein flexibles Softwaretool, welches zur numerischen Lösung von partiellen Differentialgleichungen eingesetzt wird. Bei der Entwicklung wurde vor allem Wert auf die folgenden Punkte gelegt:

- Adaptivität auf unstrukturierten, lokal verfeinerten Gittern in zwei und drei Raumdimensionen
- Mehrgitterverfahren zur schnellen Lösung der entstehenden Gleichungssysteme
- Parallelität zur zuverlässigen und schnellen Berechnung großer Probleme auf Parallelrechnern

Der Aufbau von UG ist in Abbildung 6.1.1 dargestellt und besteht aus den drei Schichten „UG Library“, „Problem Class Library“ und „Application Level“. Die unterste Schicht „UG Library“ beinhaltet alle von der zu lösenden partiellen Differentialgleichung unabhängigen Komponenten, wie z.B. den Gittermanager oder die Benutzeroberfläche.

Die mittlere Schicht „Problem Class Library“ setzt sich zusammen aus allen Komponenten, welche auf eine bestimmte Klasse von partiellen Differentialgleichungen, z.B. Konvektions-Diffusions Probleme, angewendet werden können. In dieser Schicht befindet sich auch die Numproc „CPLDISC“, welche in Abschnitt 6.2 detailliert erläutert wird.

Die oberste Schicht „Application Level“ beinhaltet alle Problem-spezifischen Komponenten, wie z.B. die Randbedingungen, Anfangsbedingungen und die Geometrie.

Durch diesen Aufbau kann UG sehr flexibel für viele Problemklassen eingesetzt werden. Weitere Informationen zu UG können in [Bastian et al., 2000], [Lang und Wittum, 2005] [Lemke et al., 2012] und [Bastian und Wittum, 1994] oder unter <http://atlas.gcsc.uni-frankfurt.de/~ug/> nachgeschlagen werden.

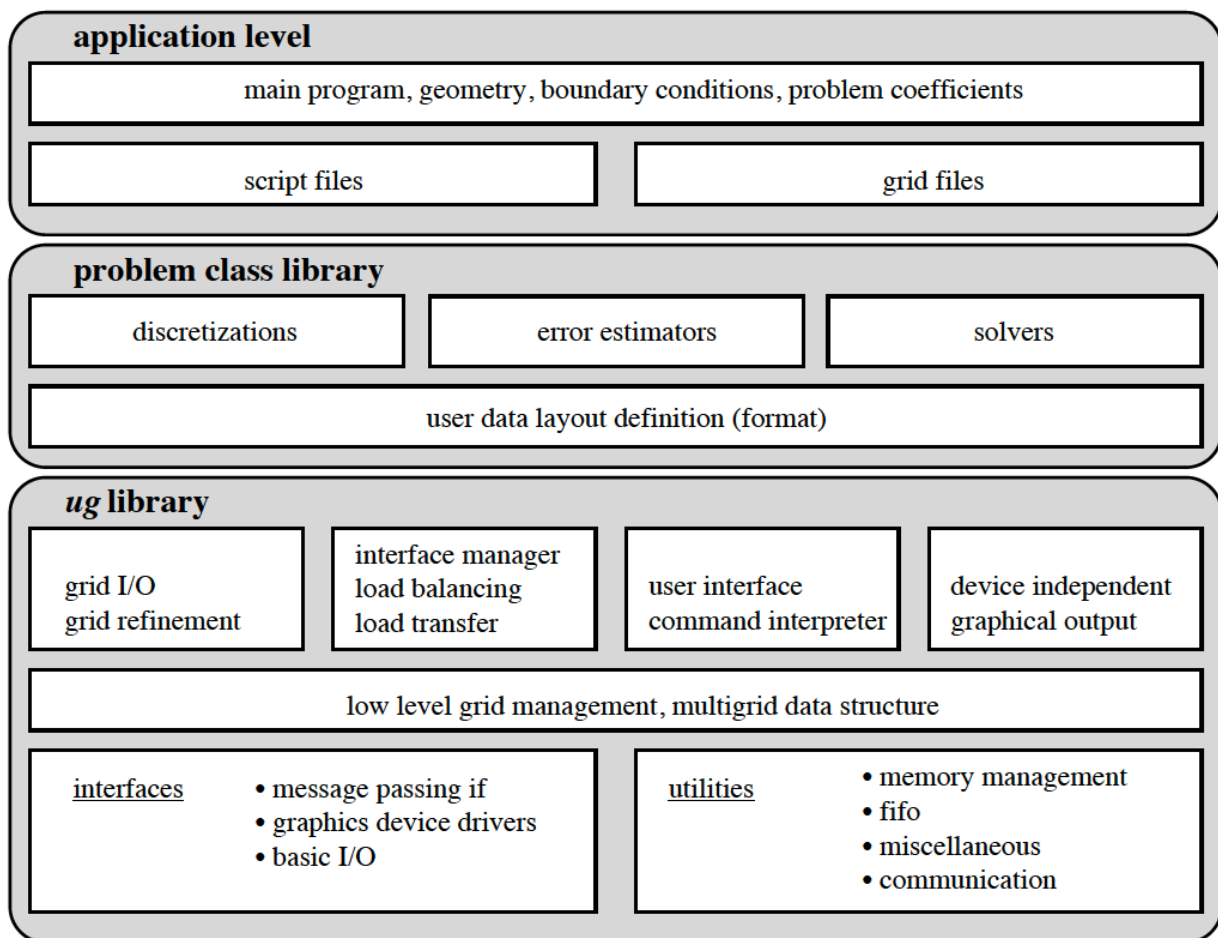


Abbildung 6.1.1: Aufbau des Softwaretools UG (aus [Bastian und Wittum, 1994]).

## 6.2 Erweiterung der Numproc „CPLDISC“

CPLDISC ist eine in der Software UG enthaltene Numproc. Diese wurde entwickelt, um die Implementierung der Diskretisierung mehrerer gekoppelter partieller Differentialgleichungen auf möglichst einfache Weise zu ermöglichen.

Zum Beispiel wurde die Implementierung der Diskretisierung des Zwei-Phasen Strömungsmodells für acetoklastische Methanogenese im Downflow-Methanreaktor mit CPLDISC durchgeführt (siehe Kapitel 7, Abschnitt 5.6.2 und [Muha et al., 2012a]). Dabei



wurden insgesamt vier partielle Differentialgleichungen gekoppelt.

In diesem Abschnitt wird nun die Funktionalität von CPLDISC ausführlich erläutert [Lemke et al., 2012]. Grundlegend ist die Unterscheidung zwischen lokalen und globalen Objekten. Lokale Objekte beziehen sich dabei immer auf die gerade betrachtete partielle Differentialgleichung und globale Objekte auf das komplette Gleichungssystem.

CPLDISC setzt sich aus zwei sub-Numprocs zusammen. Die erste Numproc beschreibt lokale Diskretisierungen und die zweite beschreibt den Linker. Die Erweiterung von CPLDISC um den Linker wurde im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt. Die Ideen zur Erweiterung basieren auf dem Linker in UG 4 [Vogel et al., 2012]. Dabei ist die Hauptaufgabe des Linkers, lokale Diskretisierungen miteinander zu verbinden.

Der Benutzer muss alle lokalen Diskretisierungen und alle Linker implementieren. Diese werden dann mit CPLDISC zu einer globalen Diskretisierung zusammengefügt, indem alle notwendigen Informationen von den implementierten sub-Numprocs gesammelt und verarbeitet werden.

### **Numproc „lokale Diskretisierung“**

In Abbildung 6.2.1 sind die wichtigsten Interfaces für die Numproc „lokale Diskretisierung“ dargestellt. Insgesamt gibt es zwei verschiedene Input-Typen, von denen jeweils beliebig viele verwendet werden können:

1. „Export Parameter“: Dieser Typ wird direkt mit dem Output „Export Parameter“ von anderen lokalen Diskretisierungen verbunden.
2. „Linker Output“: Der Linker Output wird mit dem ersten Output eines Linkers verbunden.

Jede lokale Diskretisierungs-Numproc hat insgesamt vier verschiedene Outputs:

1. „Export Parameter“: Der Exportparameter stellt typischerweise lokale Unbekannte wie  $u_i$  oder  $\nabla u_i$  zur Verfügung. Dieser Output kann entweder mit einem Linker Input verbunden werden oder direkt mit einer anderen lokalen Diskretisierung.
2. Jacobimatrix 1: Die Jacobimatrix beinhaltet alle Ableitungen des Export Parameters nach den lokalen Unbekannten. Dieser Output wird von CPLDISC gebraucht, um die globale Jacobimatrix korrekt zu bestimmen.
3. Defekt: Im Allgemeinen kann der lokale Defekt von den lokalen Unbekannten  $u_i$  und sämtlichen Inputs abhängen. Dieser Output wird von CPLDISC verwendet, um den globalen Defekt zu berechnen.
4. Jacobimatrix 2: Diese Jacobimatrix beinhaltet alle Ableitungen des lokalen Defekts nach den lokalen Unbekannten  $u_i$  sowie nach sämtlichen Inputs. Dieser Output wird ebenfalls von CPLDISC benötigt, um die globale Jacobimatrix zu bestimmen.

### Numproc „Linker“

In Abbildung 6.2.2 werden die wichtigsten Interfaces der Linker-Numproc dargestellt. Die Linker-Numproc ist prinzipiell sehr ähnlich zu der lokalen Diskretisierungs-Numproc. Beide Numprocs haben identische Inputs, allerdings hat der Linker nur zwei Outputs:

1. Dieser Output ist eine Funktion aller Inputs (Export Parameter und Linker) und kann mit anderen Linkern oder mit lokalen Diskretisierungen verbunden werden.
2. Jacobimatrix: Diese Jacobimatrix beinhaltet alle Ableitungen des ersten Outputs nach allen Inputs. Dieser Output wird von CPLDISC zur Berechnung der globalen Jacobimatrix gebraucht.

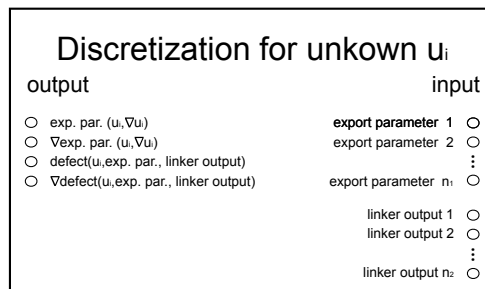


Abbildung 6.2.1: Interfaces, welche von der lokalen Diskretisierungs-Numproc, zur Verfügung gestellt werden (aus [Lemke et al., 2012]).

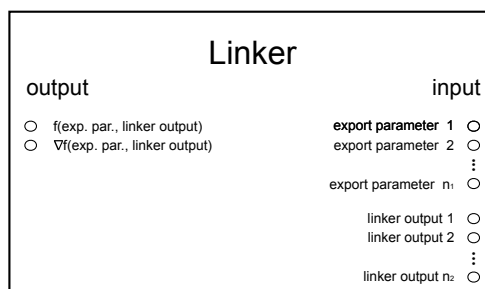


Abbildung 6.2.2: Interfaces, welche von der Linker-Numproc, zur Verfügung gestellt werden (aus [Lemke et al., 2012]).

### Globale Diskretisierung

Sobald alle Linker und lokalen Diskretisierungs-Numprocs erstellt und initialisiert sind, muss zunächst die CPLDISC innerhalb der Benutzeroberfläche von UG erstellt werden. Im zweiten Schritt werden dann alle Verbindungen zwischen Linkern und lokalen Diskretisierungs-Numprocs

an CPLDISC mitgeteilt. Während der Assemblierung kann CPLDISC den globalen Defekt und die globale Jacobimatrix bestimmen. Die globale Jacobimatrix wird dabei bestimmt, indem alle lokalen Jacobimatrizen gesammelt werden und anschließend die Kettenregel angewendet wird. Durch diese Vorgehensweise müssen nur Ableitungen der verschiedenen Outputs nach den jeweiligen Inputs implementiert werden. Da sich diese „lokalen“ Ableitungen sehr leicht bestimmen lassen, werden Fehler bei der Implementierung eines Gleichungssystems stark reduziert.

**Beispiel**

Um die Funktionsweise von CPLDISC zu illustrieren, betrachten wir folgendes Beispiel:

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} - \Delta u_1 = f(g(u_1, u_2)) \tag{6.2.1}$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} - \Delta u_2 - \mathbf{v} \cdot \nabla g(u_1, u_2) = g(u_1, u_2) \tag{6.2.2}$$

Insgesamt sind in dem Beispiel zwei verschiedene partielle Differentialgleichungen vorhanden, entsprechend werden zwei lokale Diskretisierungen gebraucht. Diese sind in den Abbildungen 6.2.3 und 6.2.4 dargestellt. Um die beiden lokalen Diskretisierungen zu verbinden, werden zwei

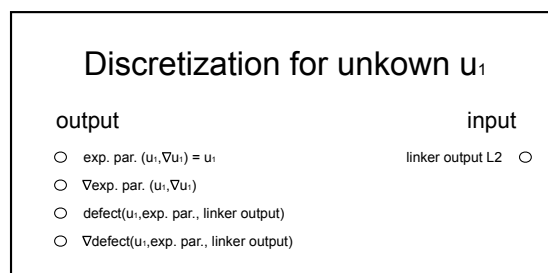


Abbildung 6.2.3: Lokale Diskretisierungs-Numproc für Gleichung 6.2.1 (aus [Lemke et al., 2012]).

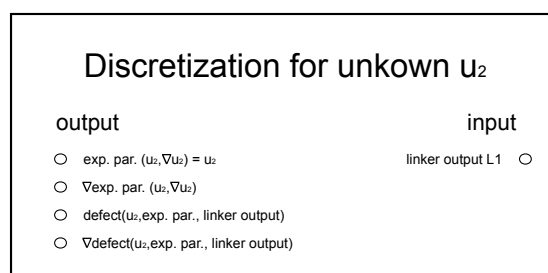


Abbildung 6.2.4: Lokale Diskretisierungs-Numproc für Gleichung 6.2.2 (aus [Lemke et al., 2012]).

Linker benötigt. Diese sind in den Abbildungen 6.2.5 und 6.2.6 dargestellt.

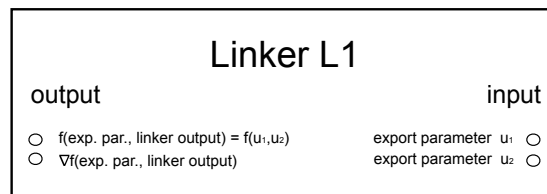


Abbildung 6.2.5: Linker L1 wird für die Gleichungen 6.2.1 und 6.2.2 benötigt (aus [Lemke et al., 2012]).

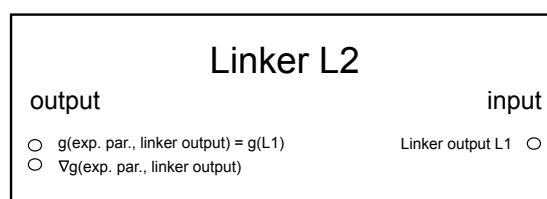


Abbildung 6.2.6: Linker L2 wird für die Gleichungen 6.2.1 und 6.2.2 benötigt (aus [Lemke et al., 2012]).

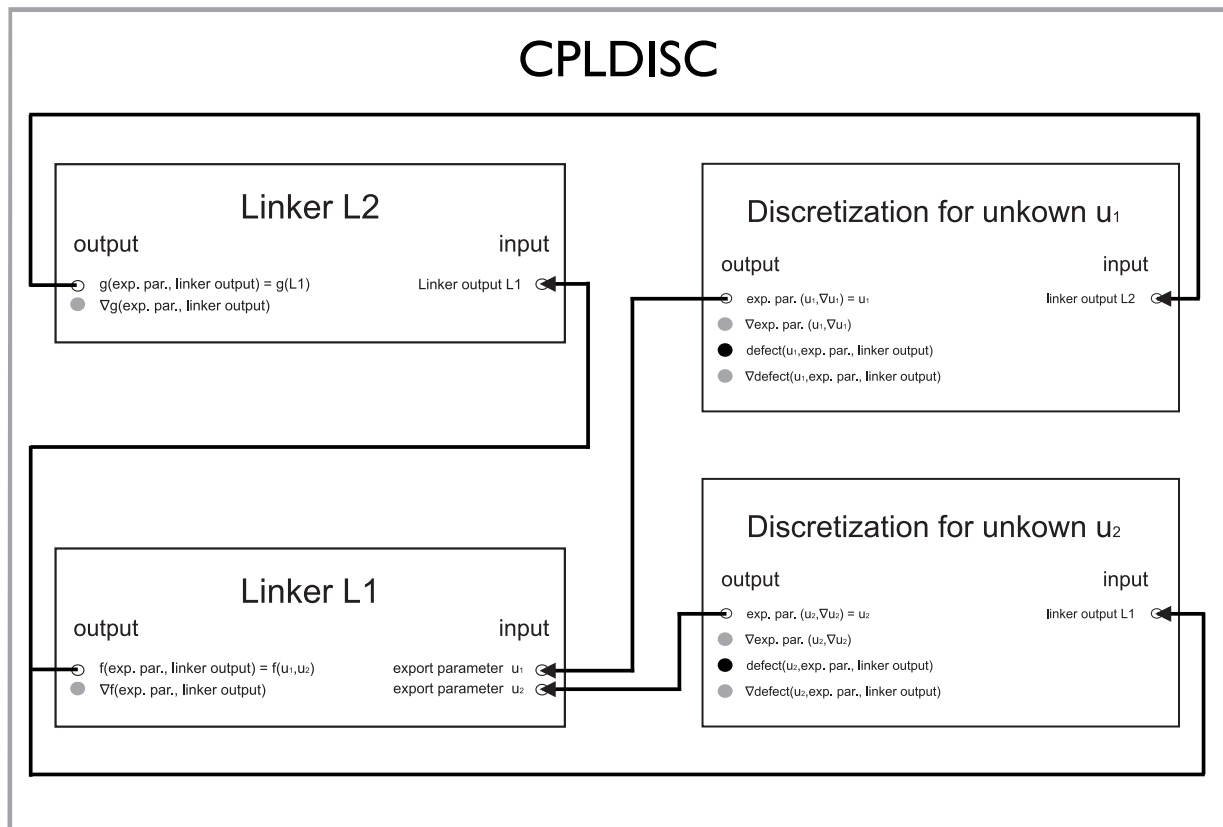


Abbildung 6.2.7: Endgültige Konfiguration in CPLDISC zur Diskretisierung der Gleichungen 6.2.1 und 6.2.2. Schwarze Pfeile repräsentieren die erstellten Verbindungen. Schwarze Punkte stellen die Informationen dar, welche gesammelt werden müssen, um den globalen Defekt zu berechnen und graue Punkte die Informationen, welche zur Berechnung der Jacobimatrix gesammelt werden müssen (aus [Lemke et al., 2012]).

Nach der Implementierung der Linker und der lokalen Diskretisierungen müssen diese in der CPLDISC Numproc miteinander verbunden werden. Dies geschieht mit den folgenden Befehlen innerhalb der Benutzeroberfläche von UG 3.

```
#Diskretisierungen werden erstellt.
npcreate disc_1 $c disc_1;
npcreate disc_2 $c disc_2;

#Linker werden erstellt.
npcreate L1 $c L1;
npcreate L2 $c L2;

#CPLDISC wird erstellt.
npcreate CPLDISC $c globaldisc;

npinit CPLDISC
#Diskretisierungen werden bei CPLDISC angemeldet.
$disc1 disc_1
$disc2 disc_2

#Verbindungen für Linker L1 werden erstellt.
$bylink L1 2:linker_output_L1
          1:export_u1 2:export_u2

#Verbindungen für Linker L2 werden erstellt.
$bylink L2 1:linker_output_L2
          x:L1;
```

Die endgültige Konfiguration von CPLDISC zur Diskretisierung der Gleichungen 6.2.1 und 6.2.2 ist in Abbildung 6.2.7 dargestellt. Mit dieser Konfiguration stellt CPLDISC den globalen Defekt und die globale Jacobimatrix zur Verfügung. In der globalen Jacobimatrix sind alle Ableitungen des globalen Defekts nach allen Unbekannten aller lokalen Diskretisierungen gespeichert. Insgesamt kann man festhalten, dass CPLDISC eine Numproc ist, mit der auf einfache Weise die Implementierung der Diskretisierung von mehreren gekoppelten partiellen Differentialgleichungen durchgeführt werden kann.

## 6.3 Implementierung eines Quasi-Newtonverfahrens mit Liniensuche zur Parameteridentifizierung

Um die Parameter in Kapitel 7 zu schätzen, wurde ein Quasi-Newtonverfahren mit Liniensuche implementiert und verwendet. Die wesentlichen Schritte des Algorithmus sind in Abbildung 6.3.1 dargestellt.

Ausgehend von einem Anfangs-Parametervektor werden zunächst alle Variationen des Parametervektors, welche nötig sind, um numerisch  $\nabla f$  und  $\partial^2 f / \partial p_i^2$  mit Hilfe der zentralen Differenzen zu berechnen, bestimmt. Anschließend werden innerhalb des Hauptprozesses alle nötigen Vorarbeiten geleistet, bevor für jede einzelne Variation ein eigenständiger Unterprozess gestartet wird, in dem die Fitnessfunktion für die jeweilige Variation berechnet wird. Durch die Aufteilung in eigenständige Unterprozesse ist der gesamte Algorithmus optimal parallelisiert.

Nach Abschluss der Unterprozesse melden diese dem Hauptprozess, dass die Berechnung abgeschlossen ist. Der Hauptprozess sammelt alle Ergebnisse ein und berechnet die optimale Suchrichtung. Anschließend werden Parametervektoren, welche innerhalb der Liniensuche berücksichtigt werden sollen, festgelegt. Dabei muss darauf geachtet werden, dass die Nebenbedingungen (vgl. Abschnitt 2.5.3) nicht verletzt werden.

Der Hauptprozess leistet wieder alle nötigen Vorarbeiten und startet für jeden Parametervektor einen eigenständigen Unterprozess. Die Unterprozesse berechnen anschließend die Fitnessfunktion und teilen schließlich dem Hauptprozess mit, dass die Berechnung abgeschlossen ist.

Danach sammelt der Hauptprozess alle Ergebnisse ein und wählt den in diesem Schritt besten Parametervektor aus. Schließlich wird überprüft, ob ein Abbruchkriterium erfüllt ist. Ist das nicht der Fall, wird der ganze Algorithmus mit dem gewählten Parametervektor neu gestartet.

Solche Abstiegsverfahren sind immer monoton, d.h. kann in einem Schritt kein besserer Parametervektor berechnet werden, ist das Verfahren auskonvergiert. Um sicherzustellen, dass das Verfahren tatsächlich an einem Minimum der Fitnessfunktion angelangt ist, muss zum Schluss der Parametervektor innerhalb der Nebenbedingungen variiert werden. Dabei wird überprüft ob in einer lokalen Umgebung die Fitnessfunktion weiter vermindert werden kann. Ist dies nicht der Fall, hat das Verfahren ein lokales Minimum der Fitnessfunktion gefunden und der im Algorithmus gefundene Parametervektor ist gültig. Konnte hingegen die Fitnessfunktion weiter vermindert werden, wird der gefundene Parametervektor durch den besseren Parametervektor ersetzt und das Quasi-Newtonverfahren mit Liniensuche wird erneut mit dem neuen Parametervektor gestartet.

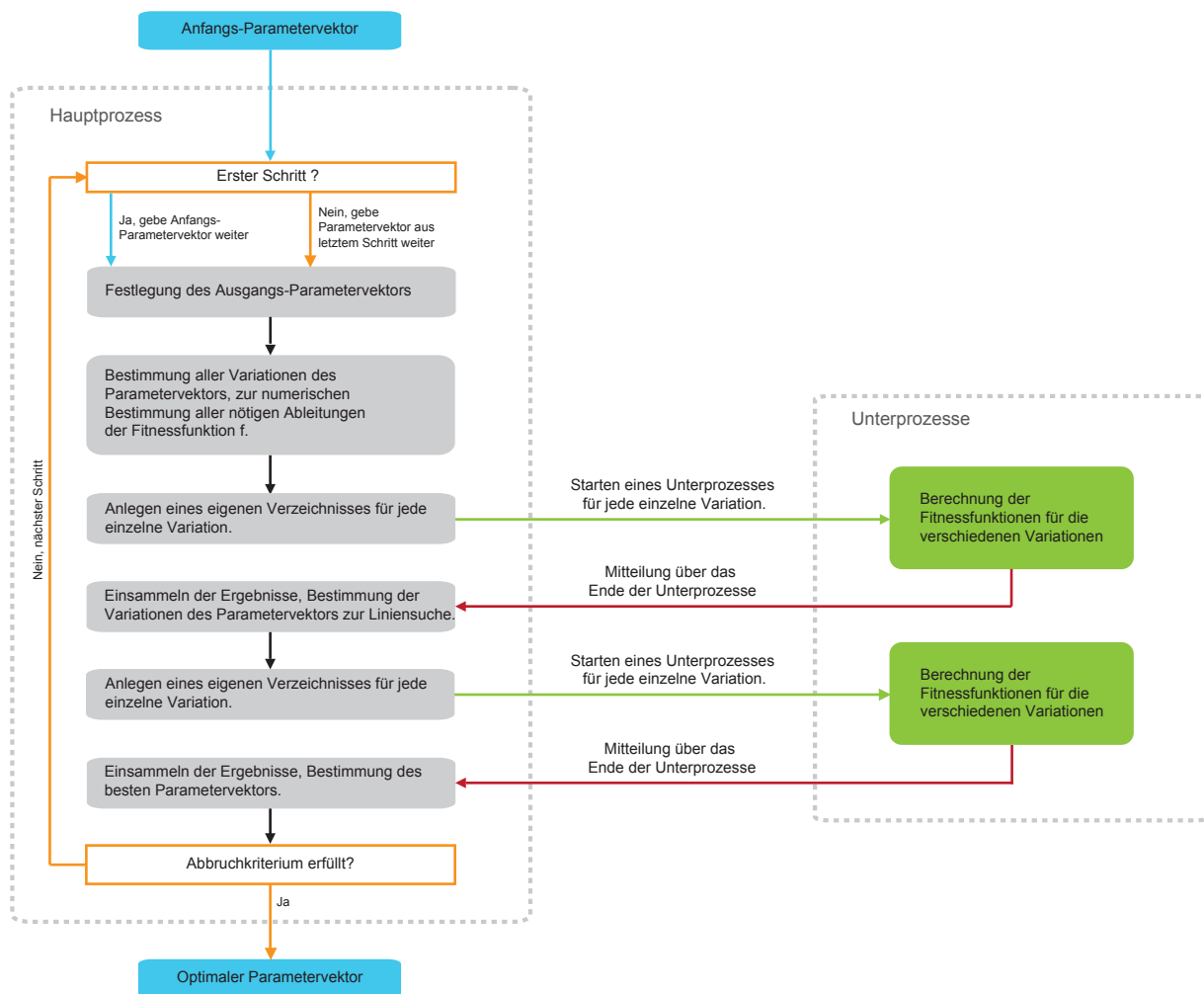


Abbildung 6.3.1: Wesentliche Schritte des Algorithmus zum Schätzen der Parameter: blaue Kästen: Ausgangsdaten bzw. Enddaten, orangene Kästen: Fallunterscheidungen, graue Kästen: wesentliche Schritte des Hauptprozesses, grüne Kästen: eigenständige Unterprozesse.



# Kapitel 7

## Ergebnisse

In diesem Kapitel werden Ergebnisse, welche durch Simulationen erzielt wurden, dargestellt. Im Abschnitt 7.1 geht es dabei um die Einteilung der vier biologischen Phasen, welche beim anaeroben Abbau auftreten, auf die Reaktorstufen einer zweistufigen zweiphasigen Laboranlage. Abschnitt 7.2 handelt von der Simulation der Strömung der Prozessflüssigkeit und der acetoklastischen Methanogenese im Methanreaktor (Anaerobfilter) einer zweistufigen zweiphasigen Laboranlage.

### 7.1 Einteilung der biologischen Phasen auf die Reaktorteile

Dieser Abschnitt befasst sich mit der Einteilung der vier biologischen Phasen der anaeroben Fermentation auf die beiden Stufen eines zweiphasigen zweistufigen Reaktors (vgl. Kapitel 4). Insgesamt werden zwei verschiedene Versuchsanlagen im Labormaßstab untersucht. Diese sind in Abschnitt 7.1.1 erläutert.

Die Idee von zweistufigen Biogasreaktoren ist durch unterschiedliche Temperaturen oder pH-Werte in den beiden Stufen derart verschiedene Lebensbedingungen zu schaffen, dass die vier biologischen Phasen jeweils in einer einzigen Stufe ablaufen. Messdaten haben ergeben, dass dies für die Hydrolyse und die Methanogenese weitestgehend zutrifft. Aus diesem Grund heißt die erste Stufe Hydrolysestufe und die zweite Stufe Methanstufe [Zielonka et al., 2010]. Eine genauere Einteilung, welche neben der Hydrolyse und Methanogenese auch die Acidogenese und die Acetogenese einschließt, wird in Abschnitt 7.1.2 vorgenommen.

Weitere Informationen zur Einteilung der biologischen Phasen auf die Stufen einer Biogasanlage können in [Muha et al., 2012b] nachgeschlagen werden.

Um die Einteilung der biologischen Phasen vornehmen zu können, ist es wichtig, dass die Endprodukte oder Ausgangsstoffe jeder Phase genauestens erfasst werden. Für die Hydrolyse und die Methanogenese ist das meistens kein Problem. Das Substrat ist der Ausgangsstoff der Hydrolyse und wird üblicherweise genau analysiert. Ebenso werden die in den

beiden Stufen gebildeten Gase (Endprodukte der Methanogenese) gesondert analysiert. Zu den wichtigsten Endprodukten der Acidogenese zählen organische Säuren. Diese sind gleichzeitig Ausgangsstoffe der Acetogenese. Demnach ist es für eine Einteilung der Acidogenese und der Acetogenese erforderlich genau zu wissen, wie viel organische Säuren in den einzelnen Stufen abgebaut werden.

### 7.1.1 Aufbau der Versuchsanlagen

Die erste Versuchsanlage wurde am Institut für Agrartechnik Bornim e.V. (ATB) in Potsdam aufgebaut und ist in Abbildung 7.1.1 dargestellt. In der Abbildung ist der Bereich [1] die erste Stufe (Hydrolysestufe) und [3] die zweite Stufe (Methanreaktor). Die Prozessflüssigkeit wird zwischen [2] und [3] auf organische Säuren untersucht. Da die hydraulische Verweilzeit der Prozessflüssigkeit im Methanreaktor etwa ein Tag ist, kann man nicht davon ausgehen, dass alle gemessenen organischen Säuren in [3] komplett abgebaut werden. Leider werden organische Säuren in der Prozessflüssigkeit am Ablauf des Methanreaktors (zwischen [3] und [1]) nicht gemessen, so dass keine Aussage darüber getroffen werden kann, wo genau die organischen Säuren abgebaut werden. Die produzierten Gase der beiden Stufen werden gesondert analysiert. Mit diesem experimentellen Aufbau kann nur die Verteilung der Hydrolyse und der Methanogenese auf die beiden Stufen untersucht werden. Weitere Informationen zur ersten Versuchsanlage können in [Schönberg und Linke, 2009] nachgeschlagen werden.

Die zweite Versuchsanlage wurde an der Universität Hohenheim (UHO) aufgebaut und ist in Abbildung 7.1.2 dargestellt. Die erste Stufe ist die Hydrolysestufe, welche in der Abbildung mit Substrat gefüllt ist. Die zweite Stufe ist der Methanreaktor (Festbett-Reaktor). Ähnlich wie bei der ersten Versuchsanlage, wird die Prozessflüssigkeit, welche von der Hydrolysestufe zum Methanreaktor fließt, auf organische Säuren untersucht. Die hydraulische Verweilzeit im Methanreaktor beträgt etwa 13 Tage, so dass davon ausgegangen werden kann, dass alle organischen Säuren, welche im Zulauf des Methanreaktors gemessen wurden, in der zweiten Stufe abgebaut werden. Tatsächlich können in der Prozessflüssigkeit am Ablauf des Methanreaktors keine organischen Säuren mehr gemessen werden. Analog zum ersten Aufbau, werden die produzierten Gase der beiden Stufen gesondert analysiert. Weitere Informationen zur zweiten Versuchsanlage können in [Zielonka et al., 2010] nachgeschlagen werden.

In beiden Versuchsanlagen wird die Hydrolysestufe thermophil (55°C) und der Methanreaktor mesophil (38°C) betrieben.

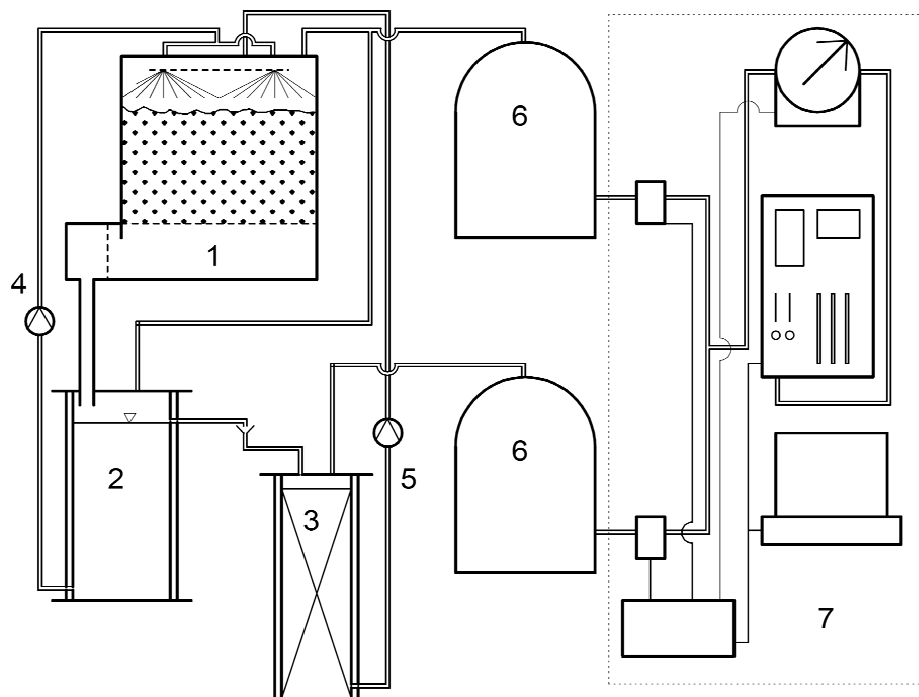


Abbildung 7.1.1: Schema einer zweistufigen zweiphasigen Versuchsanlage am Institut für Agrartechnik Bornim e.V. in Potsdam bestehend aus: [1] Hydrolyse-Reaktor (100 l), [2] Reservoir für die Prozessflüssigkeit (60 l), [3] Downflow-Methanreaktor (32, 12 l), [4] kleiner Prozessflüssigkeitskreislauf ( $60 \text{ l h}^{-1}$ ), [5] Prozessflüssigkeitskreislauf ( $1 \text{ l h}^{-1}$ ) [6] Biogas-Sammelvorrichtung und [7] automatisches Gasanalyse System. (aus [Schönberg und Linke, 2009])

## 7.1.2 Ergebnisse

In diesem Abschnitt wird die Einteilung der vier biologischen Phasen (Hydrolyse, Acidogenese, Acetogenese und Methanogenese) auf die beiden Stufen des Reaktors (Hydrolysestufe, Methanreaktor) vorgenommen. Hierbei werden die biologischen Phasen mit  $S_1, \dots, S_4$  abgekürzt.  $S_i(AF)$  beschreibt den Anteil der  $i$ -ten Phase, welcher im Methanreaktor abläuft. Entsprechend beschreibt  $S_i(H)$  den Anteil, welcher in der Hydrolysestufe abläuft. Mit dieser Schreibweise gilt offensichtlich

$$S_i(AF) + S_i(H) = 1 \quad \text{für } i \in [1, \dots, 4]. \quad (7.1.1)$$

Da die Ausgangsstoffe der Hydrolyse sich nicht in der Prozessflüssigkeit lösen können, können diese auch nicht in den Methanreaktor gelangen, deshalb gilt

$$S_1(H) = 1 \quad (7.1.2)$$

$$S_1(AF) = 0. \quad (7.1.3)$$

Wie bereits in Abschnitt 7.1.1 erwähnt, ist die hydraulische Verweilzeit der Prozessflüssigkeit im Methanreaktor der Versuchsanlage UHO ausreichend hoch, dass man annehmen kann, dass

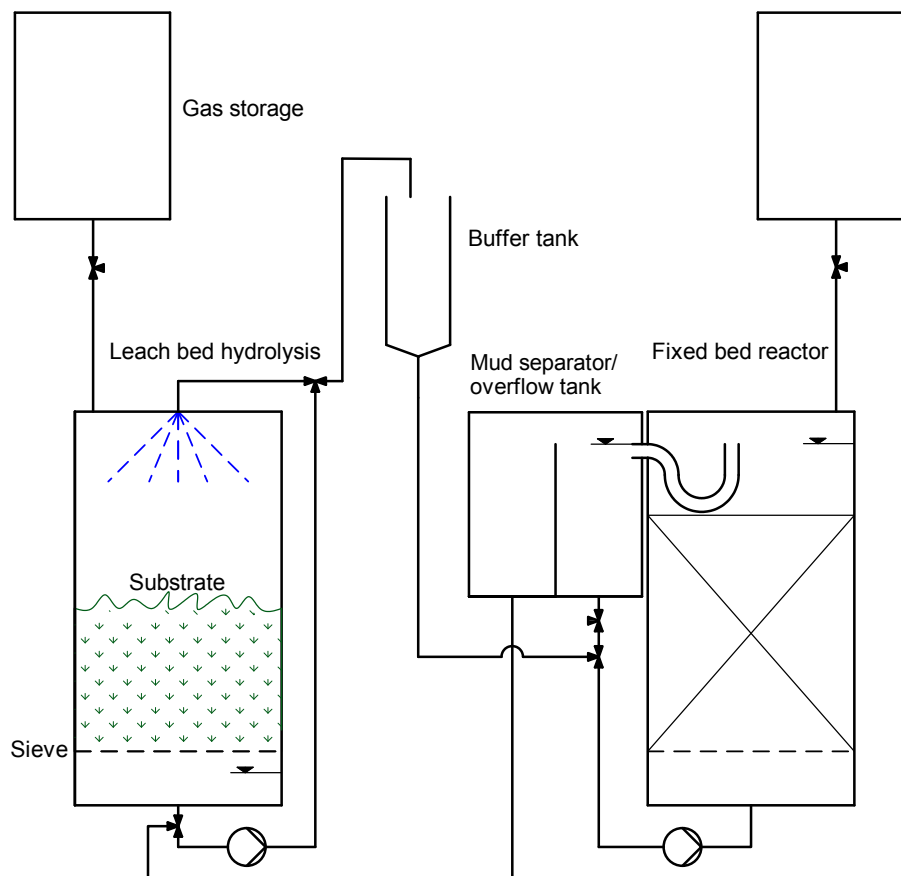


Abbildung 7.1.2: Schema einer zweistufigen zweiphasigen Versuchsanlage an der Universität Hohenheim (aus [Zielonka et al., 2010])

alle organischen Substanzen in der einfließenden Prozessflüssigkeit im Methanreaktor abgebaut werden. Der Anteil der Acidogenese ergibt sich also zum einen aus der Methanproduktion in der Hydrolyse. Denn bevor Methan entstehen kann, müssen die Stoffe durch die Acidogenese gegangen sein. Zum zweiten ergibt sich der Anteil aus der Methanproduktion im Methanreaktor, welche sich auf die im Zulauf gemessenen organischen Säuren zurückführen lässt. Organische Säuren sind Endprodukte der Acidogenese, d.h. dass die Acidogenese bereits im Hydrolyse-Reaktor abgelaufen sein muss. Entsprechend ergibt sich der Anteil für die Acidogenese in der Hydrolysestufe

$$S_2(H) = M(H) + M(AF) \cdot M_{OS}(AF), \quad (7.1.4)$$

wobei  $M(H)$  die Methanproduktion in der Hydrolysestufe und  $M(AF)$  die Methanproduktion im Methanreaktor beschreibt.  $M_{OS}(AF)$  beschreibt den Anteil der Methanproduktion im Methanreaktor, welcher durch organische Säuren zustande kommt. Entsprechend gilt

$$S_2(AF) = 1 - S_2(H) = 1 - (M(H) + M(AF) \cdot M_{OS}(AF)). \quad (7.1.5)$$

Analog zu Gleichung (7.1.4) ist der Anteil der Acetogenese in der Hydrolysestufe und im Methanreaktor gegeben durch

$$S_3(H) = M(H) + M(AF) \cdot M_{ES}(AF) \quad (7.1.6)$$

$$S_3(AF) = 1 - (M(H) + M(AF) \cdot M_{ES}(AF)), \quad (7.1.7)$$

wobei  $M_{ES}(AF)$  den Anteil der Methanproduktion im Methanreaktor, welcher durch Essigsäure zustande kommt, beschreibt.

Der Anteil der Methanogenese in den beiden Stufen ( $S_4(H)$ ,  $S_4(AF)$ ) kann direkt aus der gemessenen Gasproduktion berechnet werden.

Die Mittelwerte und Standardabweichungen der Einteilung der biologischen Phasen auf die beiden Stufen (Hydrolysestufe und Methanreaktor) sind in Tabelle 7.1.3 dargestellt und beruhen auf den experimentellen Daten aus den Tabellen 7.1.1 und 7.1.2. Die Anteile für die Acidogenese und für die Acetogenese wurden nur mit Daten aus Tabelle 7.1.2 berechnet, da die hydraulische Verweilzeit im Methanreaktor des Reaktors am ATB nicht hoch genug war.

Experiment Nummer	Methan Produktion Hydrolysestufe [%]	Methan Produktion Methanreaktor [%]	Methan Produktion aus org. Säuren im Methanreaktor [%]
1	9,22	90,78	64,89
2	9,70	90,30	48,54
3	12,04	87,96	64,55
4	11,88	88,12	59,00
Durchschnitt	10,71	89,29	61,74

Tabelle 7.1.1: Experimentelle Daten der Versuchsanlage am ATB.

Experiment Nummer	Methan Produktion Hydrolysestufe [%]	Methan Produktion Methanreaktor [%]	Methan Produktion aus org. Säuren im Methanreaktor [%]	Methan Produktion aus Essigsäuren im Methanreaktor [%]
1	39,35	60,65	51,56	28,12
2	25,96	74,04	54,61	17,53
3	40,26	59,74	51,21	27,64
4	33,70	66,30	49,17	14,46
5	46,43	53,57	38,46	15,38
6	20,00	80,00	61,48	36,48
7	11,15	88,85	69,00	33,95
8	11,15	88,85	64,52	34,05
9	19,74	80,26	63,11	39,75
10	28,71	71,29	60,63	35,75
Durchschnitt	27,64	72,36	56,38	28,31

Tabelle 7.1.2: Experimentelle Daten der Versuchsanlage an der UHO.

Biologische phase	Hydrolyse [%]	Methanreaktor [%]
$S_1$	100	0
$S_2$	$69 \pm 2$	$31 \pm 2$
$S_3$	$49 \pm 7$	$51 \pm 7$
$S_4$	$23 \pm 13$	$77 \pm 13$

Tabelle 7.1.3: Einteilung der vier biologischen Phasen des anaeroben Abbaus auf die erste Stufe (Hydrolysestufe) und die zweite Stufe (Methanreaktor),  $S_1$ : Hydrolyse,  $S_2$  Acidogenese,  $S_3$  Acetogenese und  $S_4$  Methanogenese. Angegeben sind Mittelwerte und Standardabweichungen.

### 7.1.3 Diskussion

In Abschnitt 7.1.2 wurde gezeigt, dass in den betrachteten zweistufigen zweiphasigen Versuchsanlagen nur die Hydrolyse in einer separaten Stufe abläuft. Alle übrigen biologischen Phasen laufen zu einem großen Anteil in beiden Stufen ab. Die Prozessflüssigkeit wird zwischen der Hydrolysestufe und dem Methanreaktor meist auf die wesentlichen Endprodukte der Acidogenese (organische Säuren wie Essigsäure, Propionsäure, Valeriansäure, Buttersäure und Capronsäure) untersucht. Dadurch, dass ein großer Teil der Acidogenese ( $> 30\%$ ) erst im Methanreaktor abläuft, ist es nicht ausreichend die Prozessflüssigkeit nur auf die Endprodukte der Acidogenese zu untersuchen. Um ein besseres Verständnis des Prozesses zu erlangen, sollten ebenfalls die Ausgangsstoffe der Acidogenese in die Analyse der Prozessflüssigkeit aufgenommen werden. Dazu zählen z.B. Zucker, Fettsäuren und Aminosäuren.

## 7.2 Simulation der Strömung und der acetoklastischen Methanogenese im Downflow-Methanreaktor

In diesem Abschnitt werden Ergebnisse zur Simulation der acetoklastischen Methanogenese im Downflow-Methanreaktor des Reaktors am ATB vorgestellt (siehe Bereich [3] in Abbildung 7.1.1). Bei der acetoklastischen Methanogenese entsteht Kohlendioxid und Methan aus Essigsäure. Dabei erfolgt die Umsetzung durch Mikroorganismen, sogenannte Acetat Verwerter. Für Grundlagen zu den Reaktionstermen sei auf Kapitel 4 und 5 verwiesen. Weitere Informationen können ebenfalls in [Muha et al., 2012a] nachgeschlagen werden.

In Abschnitt 7.2.1 wird der Versuchsaufbau detailliert beschrieben, Abschnitt 7.2.2 erläutert knapp das verwendete Simulationsmodell und in Abschnitt 7.2.3 wird das verwendete Rechengebiet mit den Anfangs- und Randbedingungen beschrieben. Abschnitt 7.2.5 befasst sich mit der Bestimmung der Reaktionsparameter, in Abschnitt 7.2.6 werden die wichtigsten Ergebnisse dargestellt. Schließlich werden die erzielten Ergebnisse in Abschnitt 7.2.7 diskutiert.

### 7.2.1 Versuchsaufbau und Versuchsführung

Der Reaktor am ATB (Abbildung 7.1.1) besteht aus zwei wesentlichen Teilen. Der erste Teil, der Hydrolyse-Reaktor [1], hat ein nutzbares Volumen von 100 l. Zu Beginn jedes Experiments wird der Hydrolyse Reaktor mit 10 kg Substrat befüllt und anschließend für die Dauer des gesamten Experiments (21 Tage) luftdicht verschlossen. Der Hydrolyse Reaktor wird thermophil betrieben (55°C). Durch den kleinen Prozessflüssigkeitskreislauf [4] werden Nährstoffe aus dem Substrat in die Prozessflüssigkeit gewaschen. Der große Prozessflüssigkeitskreislauf [5] transportiert anschließend die mit Nährstoffen angereicherte Prozessflüssigkeit aus dem Hydrolysatspeicher [2] in den Downflow-Methanreaktor [3]. Der Methanreaktor hat die Form eines Zylinders mit einer Höhe von 0,71 m und einem Radius von 0,12 m. Es ergibt sich ein Volumen von 0,032 m<sup>3</sup>. Die Prozessflüssigkeit strömt mit einem Fluss von 1 l/h durch den Deckel in den Reaktor und durch den Boden wieder hinaus. Vor dem Einströmen in den Reaktor wird die Prozessflüssigkeit auf organische Säuren, pH-Wert und Essigsäureäquivalent untersucht. Die ausströmende Flüssigkeit wird nur auf Essigsäureäquivalent und pH-Wert analysiert.

Der Methanreaktor ist gefüllt mit Füllkörpern des Typs „Bioflow 40“ (Rauschert, Judenbach-Heiersdorf, Deutschland) und wird mesophil betrieben (38°C).

Die Gasproduktion der Hydrolyse, des Hydrolysatspeichers und des Methanreaktors werden separat im Gasanalyse System [6] [7] analysiert.

### 7.2.2 Simulationsmodell

Das Simulationsmodell wurde bereits in Abschnitt 5.6.2 ausführlich hergeleitet und diskutiert. In diesem Abschnitt werden daher in aller Kürze die verwendeten Gleichungen aufgelistet und die im Vorfeld festgelegten (Strömungs-) Parameter diskutiert.

Die Gleichungen lauten

$$\frac{\partial((1-\phi)\rho^s)}{\partial t} = R^s \quad (7.2.1)$$

$$\frac{\partial((1-\phi)\rho^s\omega_{acd}^s)}{\partial t} = R_{acd}^s \quad (7.2.2)$$

$$\frac{\partial(\phi\rho^l)}{\partial t} = -\nabla(\rho^l\mathbf{q}_l) + R^l \quad (7.2.3)$$

$$\frac{\partial(\phi\rho^l\omega_{ac}^l)}{\partial t} = -\nabla(\rho^l\mathbf{q}_l\omega_{ac}^l - \rho^l\mathbb{D}_{ac}^l\nabla\omega_{ac}^l) + R_{ac}^l \quad (7.2.4)$$

$$P_{CH_4}^g(t) = \int_{T_0}^t R_{CH_4}^g(\mathbf{x}, \hat{t}) d\hat{t} \quad (7.2.5)$$

$$P_{CO_2}^g(t) = \int_{T_0}^t R_{CO_2}^g(\mathbf{x}, \hat{t}) d\hat{t} \quad (7.2.6)$$

mit

$$\mathbf{q}_l = -\frac{\mathbb{K}_l}{\mu_l}(\nabla p_l - \rho^l \mathbf{g}) \quad (7.2.7)$$

$$\rho^s = \rho_{acd}^s \omega_{acd}^s + (1 - \omega_{acd}^s) \rho_{PTP}^s \quad (7.2.8)$$

$$\rho^l = \rho_{ac}^l \omega_{ac}^l + (1 - \omega_{ac}^l) \rho_{H_2O}^s \quad (7.2.9)$$

$$R_{acd}^s = R_{ac \rightarrow acd}^{l \rightarrow s} - R_{acd \rightarrow ac}^{s \rightarrow l} - R_{acd \rightarrow H_2O}^{s \rightarrow l} \quad (7.2.10)$$

$$R_{ac}^l = R_{acd \rightarrow ac}^{s \rightarrow l} - R_{ac \rightarrow acd}^{l \rightarrow s} - R_{ac \rightarrow CH_4}^{l \rightarrow g} - R_{ac \rightarrow CO_2}^{l \rightarrow g} \quad (7.2.11)$$

$$R_{CH_4}^g = R_{ac \rightarrow CH_4}^{l \rightarrow g} \quad (7.2.12)$$

$$R_{CO_2}^g = R_{ac \rightarrow CO_2}^{l \rightarrow g} \quad (7.2.13)$$

$$R^s = R_{acd}^s \quad (7.2.14)$$

$$R^l = -R_{acd}^s - R_{CH_4}^g - R_{CO_2}^g \quad (7.2.15)$$

und

$$R_{ac \rightarrow acd}^{l \rightarrow s} = k_{m,acd} Y_{acd} \frac{C_{ac}^l}{K_{s,ac} + C_{ac}^l} C_{acd}^s I_{acd} \quad (7.2.16)$$

$$R_{ac \rightarrow CH_4}^{l \rightarrow g} = \frac{4}{15} k_{m,acd} (1 - Y_{acd}) \frac{C_{ac}^l}{K_{s,ac} + C_{ac}^l} C_{acd}^s I_{acd} \quad (7.2.17)$$

$$R_{ac \rightarrow CO_2}^{l \rightarrow g} = \frac{11}{15} k_{m,acd} (1 - Y_{acd}) \frac{C_{ac}^l}{K_{s,ac} + C_{ac}^l} C_{acd}^s I_{acd} \quad (7.2.18)$$

$$R_{acd \rightarrow ac}^{s \rightarrow l} = k_{dec,acd} f_{ac,acd} C_{acd}^s \quad (7.2.19)$$

$$R_{acd \rightarrow H_2O}^{s \rightarrow l} = k_{dec,acd} (1 - f_{ac,acd}) C_{acd}^s \quad (7.2.20)$$

und

$$C_{acd}^s = (1 - \phi) \rho^s \omega_{acd}^s \quad (7.2.21)$$

$$C_{ac}^l = \phi \rho^l \omega_{ac}^l \quad (7.2.22)$$

$$I_{acd} = 1 - \frac{C_{acd}^s}{MO_{MAX,acd}}. \quad (7.2.23)$$

Die verwendeten Strömungsparameter wurden im Vorfeld festgelegt und sind in Tabelle 5.6.1 aufgelistet. Hierbei wurden für die reinen Dichten von Essigsäure und Wasser sowie für die Gravitationsbeschleunigung übliche Werte verwendet. Die reine Dichte der Mikroorganismen  $\rho_{acd}^s$  wurde bestimmt, indem angenommen wurde, dass ein Organismus, welcher eine zylindrische Form aufweist (mit einer Länge von  $0,764 \cdot 10^{-6}$  m und einem Radius von  $1 \cdot 10^{-6}$  m), ein durchschnittliches Gewicht von  $6,5510^{-16}$  kg hat. Diese Werte stammen aus [Garrity et al., 2001]) beziehungsweise wurden experimentell ermittelt. Die reine Dichte der Füllkörper wurde dem technischen Datenblatt des Herstellers entnommen und die Diffusivität von Essigsäure in Wasser wurde aus [Cussler, 1997] entnommen. Die Viskosität und die Permeabilität mussten nicht bestimmt werden, da aufgrund der verwendeten Randbedingungen



eine Änderung dieser Werte keinen Einfluss auf die Lösung des Simulationsmodells hat. Weiterhin kann die Hemmung durch den pH-Wert vernachlässigt werden, da im Experiment der pH-Wert konstant 7,9 betrug.

Die Modellgleichungen wurden im Ort mit dem Finite Volumen Verfahren (Abschnitt 2.1.4) und in der Zeit mit dem impliziten Euler Verfahren (Abschnitt 2.2) diskretisiert. Die daraus resultierenden nicht-linearen Gleichungen wurden in jedem Zeitschritt mit dem Newton-Verfahren (Abschnitt 2.3.1) gelöst, dabei wurde die Jacobimatrix mit dem Mehrgitterverfahren (Abschnitt 2.4) invertiert. Der ganze Lösungsprozess wurde mit Hilfe des Softwaretools UG (Abschnitt 6.1) durchgeführt, dabei wurden in jedem Zeitschritt etwa 331000 Freiheitsgrade verwendet.

### 7.2.3 Rechengebiet, Anfangs- und Randbedingungen des Simulationsmodells

Als Rechengebiet wurde der zylindrische Methanreaktor mit den in Abschnitt 7.2.1 definierten Maßen verwendet. Nimmt man an, dass sowohl der Zulauf als auch der Ablauf der Prozessflüssigkeit durch den Reaktordeckel bzw. den Reaktorboden gleichmäßig verteilt sind und die Füllkörper zufällig im Reaktor angeordnet sind, ist die Lösung rotationssymmetrisch und es ist hinreichend ein 2D Rechengebiet mit den Koordinaten  $r$  für Radius und  $z$  für Höhe zu verwenden. Ein 3D-Rechengebiet kann verwendet werden, sofern Informationen über die Anordnung der Füllkörper vorhanden sind, oder der Zulauf bzw. der Ablauf der Prozessflüssigkeit nicht gleichmäßig verteilt ist.

Um den Zulauf der Prozessflüssigkeit mit 1 l/h zu berücksichtigen ist die Darcy-Geschwindigkeit am Deckel des Reaktors folgendermaßen festgelegt

$$\mathbf{q}_l \cdot \mathbf{n} = \frac{1\text{l}}{1\text{h}(0.12\text{ m})^2\pi}. \quad (7.2.24)$$

Hierbei ist  $\mathbf{n}$  der Normalenvektor auf den Reaktordeckel.

Die gemessenen Konzentrationen des Acetats im Zulauf wurden im Modell berücksichtigt, indem entsprechende Dirichlet-Randbedingungen am Deckel verwendet wurden. Auf dem Reaktorboden wurde die Konzentration des Acetats auf Null gesetzt. Mit diesen Randbedingungen ist es möglich, den Ablauf des Acetats über den Reaktorboden im Modell zu bestimmen und mit den gemessenen Daten zu vergleichen. Am Reaktormantel wurden für alle Komponenten der flüssigen Phase Neumann-null Randbedingungen verwendet. Für die Gase und für die Stoffe in der festen Phase werden keine Randbedingungen benötigt.

Für alle Komponenten wurden lineare Anfangsbedingungen verwendet. Beim Druck wurden die Anfangsbedingungen und die Randbedingungen so gewählt, dass der hydrostatische Druck berücksichtigt ist.

### 7.2.4 Koordinatentransformation

Wie bereits erwähnt, werden im Simulationsmodell nicht kartesische Koordinaten sondern Zylinderkoordinaten  $(r, \psi, z)$  verwendet. In diesem Abschnitt wird knapp die dafür nötige Koordinaten-Transformation erläutert. Die kartesischen Koordinaten  $(x, y, z)$  werden durch Zylinderkoordinaten  $(r, \psi, z)$  ersetzt. Dabei gelten die folgenden Gleichungen

$$x = r \cos \psi \quad (7.2.25)$$

$$y = r \sin \psi \quad (7.2.26)$$

$$z = z. \quad (7.2.27)$$

Weiterhin benötigen wir noch den Gradienten und die Divergenz einer Funktion  $f(r, \psi, z)$  bzw. eines Vektorfeldes  $F(r, \psi, z)$  in den neuen Koordinaten

$$\nabla f = \left( \frac{\partial f}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \psi}, \frac{\partial f}{\partial z} \right)^T \quad (7.2.28)$$

$$\nabla \cdot F = \frac{1}{r} \frac{\partial(r F_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial F_\psi}{\partial \psi} + \frac{\partial(F_z)}{\partial z}. \quad (7.2.29)$$

*Bemerkung 7.2.1.* Für eine rotationssymmetrische Funktion  $f$  gilt

$$\frac{\partial f}{\partial \psi} = 0. \quad (7.2.30)$$

Mit den gegebenen Gleichungen können die Modellgleichungen problemlos in Zylinderkoordinaten umgeschrieben werden. Da das Problem rotationssymmetrisch ist, fallen alle Ableitungen nach  $\psi$  weg.

### 7.2.5 Parameterbestimmung

Im Gegensatz zu den Strömungsparametern in Tabelle 5.6.1 ist es nicht möglich die im Modell verwendeten Reaktionsparameter (Tabelle 7.2.1) im Vorfeld festzulegen. Das liegt daran, dass für einige Reaktionsparameter, wie z.B.  $MO_{MAX,acd}$  und  $f_{ac,acd}$ , keine Literaturwerte existieren und für die übrigen Reaktionsparameter die Literaturwerte um einige Größenordnungen schwanken. Deshalb werden diese Parameter mit der in Abschnitt 2.5 vorgestellten Methode bestimmt.

Zunächst muss der erste Teil  $\tilde{f}$  der Fitnessfunktion bestimmt werden

$$\tilde{f}(k_{m,ac}, Y_{ac}, k_{dec,acd}, K_{Sac}, MO_{max,acd}, f_{ac,acd}) := \frac{1}{44} \sum_{i=0}^{43} \left( Ac_{out,i}^{Exp} - Ac_{out,i}^{Mod} \right)^2. \quad (7.2.31)$$

Hierbei werden in  $\tilde{f}$  experimentelle Daten der Acetat-Konzentration im Ablauf mit den entsprechenden im Modell bestimmten Größen verglichen. Es werden insgesamt vier aufeinander folgende Experimente (siehe Abbildung 7.2.2 a-d) untersucht, wobei jedes dieser Experimente

21 Tage dauert und 11 Messpunkte hat. Insgesamt erhält man also 44 Messpunkte. Durch Minimierung von  $f$  erhält man einen Satz Reaktionsparameter, mit dem die Ablaufkonzentration des Acetats im Modell und Experiment gut übereinstimmt. Schaut man sich jedoch die Gesamtmasse der Mikroorganismen im Reaktor an, stellt man fest, dass diese über 44 Tage monoton wächst. Das ist jedoch ein Phänomen, welches man in der Realität nicht erwarten würde. Wenn der Reaktor schon eine lange Zeit in Betrieb ist, würde man erwarten, dass die Gesamtmasse der Mikroorganismen eine Periodizität von etwa 21 Tagen aufweist, d.h. die Gesamtmasse der Mikroorganismen sollte an den Tagen 0, 21, 42, 63 und 84 gleich sein (21 Tage entspricht gerade der Versuchsdauer eines Experiments).

Dieses Phänomen kann folgendermaßen in die Parameterbestimmung eingebaut werden

$$\text{acd}(t) = \int C_{acd}^s(t, x) dx \quad (7.2.32)$$

$$\overline{\text{acd}} = \frac{1}{3} (\text{acd}(0) + \text{acd}(42) + \text{acd}(63)) \quad (7.2.33)$$

$$\Delta_{\text{acd}}^2 = \frac{1}{3} \left[ \left( \frac{\text{acd}(0)}{\overline{\text{acd}}} - 1 \right)^2 + \left( \frac{\text{acd}(42)}{\overline{\text{acd}}} - 1 \right)^2 + \left( \frac{\text{acd}(63)}{\overline{\text{acd}}} - 1 \right)^2 \right]. \quad (7.2.34)$$

Hierbei beschreibt  $\text{acd}(t)$  die Gesamtmasse der Mikroorganismen zum Zeitpunkt  $t$ ,  $\overline{\text{acd}}$  den Durchschnitt von  $\text{acd}(t)$  für  $t = 0$  d,  $t = 42$  d und  $t = 63$  d. Der Term  $\Delta_{\text{acd}}^2$  ist ein relatives Maß für die Abweichung von  $\text{acd}(t)$  zu den Zeitpunkten  $t = 0$  d,  $t = 42$  d und  $t = 63$  d vom Durchschnitt  $\overline{\text{acd}}$ .

Wenn die Gesamtmasse der Mikroorganismen zu den Zeitpunkten  $t = 0$  d,  $t = 42$  d und  $t = 63$  d gleich ist, gilt  $\Delta_{\text{acd}}^2 = 0$ . Wie in Abschnitt 2.5 beschrieben, können wir die Fitnessfunktion  $f$  nun schreiben als

$$f(k_{m,ac}, Y_{ac}, k_{dec,acd}, K_{S_{ac}}, MO_{max,acd}, f_{ac,acd}) = \tilde{f} + \Delta_{MO}^2 \tilde{f} \cdot 10^3 = (1 + 10^3 \cdot \Delta_{MO}^2) \tilde{f}. \quad (7.2.35)$$

Die Reaktionsparameter können nun bestimmt werden, indem die Fitnessfunktion  $f$  mit Hilfe der Gradientenabstiegmethode (Abschnitt 2.5.2) mit oberen und unteren Schranken für die Parameter (Abschnitt 2.5.3) minimiert wird. Die Implementierung dieser Methode ist in Abschnitt 6.3 erläutert.

## 7.2.6 Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die wichtigsten Ergebnisse ausführlich erläutert.

### Untersuchung der Reaktionsparameter

Die Fitnessfunktion  $f$  wurde minimiert und die gefunden Reaktionsparameter sind in Tabelle 7.2.1 aufgeführt. Wie in Abschnitt 7.2.5 gefordert, ist die Gesamtmasse der Mikroorganismen

am Anfang und am Ende jedes Experiments ähnlich (vgl. Abbildung 7.2.1).

Unter der Annahme, dass keine Hemmung auftritt, ergeben sich die Verdopplungszeit und die spezifische Wachstumsrate der Acetat Verwerter mit

$$\mu_{\max} = k_{m,ac} Y_{ac} - k_{dec,acd} = 2,48 \cdot 10^{-3} \frac{1}{h} = 5,95 \cdot 10^{-2} \frac{1}{d} \quad (7.2.36)$$

$$t_d = \frac{\ln(2)}{\mu_{\max}} = 11,649 \text{ d.} \quad (7.2.37)$$

Weiterhin kann die Sterberate  $k_{dec} = 4,16 \cdot 10^{-4} \text{ h}^{-1} = 0,009984 \text{ d}^{-1}$  aus Tabelle 7.2.1 entnommen werden. Ähnliche Werte für die Verdopplungszeit, die spezifische Wachstumsrate und die Sterberate sind in der Fachliteratur zu finden [Stams et al., 2003, Conklin et al., 2005].

Die Reaktionsparameter können in zwei verschiedene Gruppen eingeteilt werden. Die erste Gruppe besteht aus  $\{k_{m,ac}, Y_{ac}, k_{dec,acd}, f_{ac,acd}\}$ . Diese Gruppe beeinflusst die Konzentration des Acetats am Ablauf des Reaktors über die gesamte Dauer des Experiments.

Dem gegenüber steht die zweite Gruppe bestehend aus  $\{K_{sac}, MO_{MAX,acd}\}$ . Diese beiden Parameter beeinflussen die Konzentration des Acetats im Ablauf nur unter bestimmten Bedingungen.

*Bemerkung 7.2.2.* Ist die Konzentration des Acetats klein ( $C_{ac}^l \ll K_{sac}$ ), dann gilt

$$\frac{C_{Ac}^l}{K_{sAc} + C_{Ac}^l} \ll 1. \quad (7.2.38)$$

In Abbildung 7.2.2 kann man erkennen, dass der Zulauf des Acetats in den Reaktor für  $t > 18 \text{ d}$  sehr klein ist. In diesem Zeitraum wirkt sich der Parameter  $K_{sac}$  am stärksten auf die Konzentration des Acetats im Ablauf aus. Eine Erhöhung von  $K_{sac}$  würde die Aufnahme des Acetats stärker hemmen und damit würde mehr Acetat aus dem Reaktor fließen.

*Bemerkung 7.2.3.* Ist die Gesamtmasse der Acetatverwerter groß ( $C_{acd}^s \approx MO_{MAX,acd}$ ), dann gilt

$$1 - \frac{C_{MO}^s}{MO_{MAX,acd}} \ll 1. \quad (7.2.39)$$

In Abbildung 7.2.1 kann man erkennen, dass die Gesamtmasse der Mikroorganismen für  $t \in [10 \text{ d}, 15 \text{ d}]$  am größten ist. In diesem Zeitraum wirkt sich der Parameter  $MO_{MAX,acd}$  am stärksten auf den Ablauf des Acetats aus. Eine Erhöhung von  $MO_{MAX,acd}$  würde bedeuten, dass mehr Lebensraum für die Acetatverwerter zur Verfügung stehen würde. Entsprechend, wäre die Gesamtmasse der Acetatverwerter höher und es könnte mehr Acetat konsumiert werden. Demnach würde weniger Acetat aus dem Reaktor fließen.

## Vergleich zwischen Modell und Experiment

Insgesamt wurden fünf Experimente untersucht. Der Zulauf des Acetats wurde durch

Reaktionsparameter	Wert	Einheit
$k_{m,ac}$	$1,54 \cdot 10^{-2}$	$\frac{1}{h}$
$Y_{ac}$	$1,88 \cdot 10^{-1}$	1
$k_{dec,acd}$	$4,16 \cdot 10^{-4}$	$\frac{1}{h}$
$f_{ac,acd}$	$1,00 \cdot 10^0$	1
$MO_{MAX,acd}$	$5,47 \cdot 10^1$	$\frac{kg}{m^3}$
$K_{sac}$	$2,00 \cdot 10^0$	$\frac{kg}{m^3}$

Tabelle 7.2.1: Reaktionsparameter mit Werten aus der Parameterbestimmung.

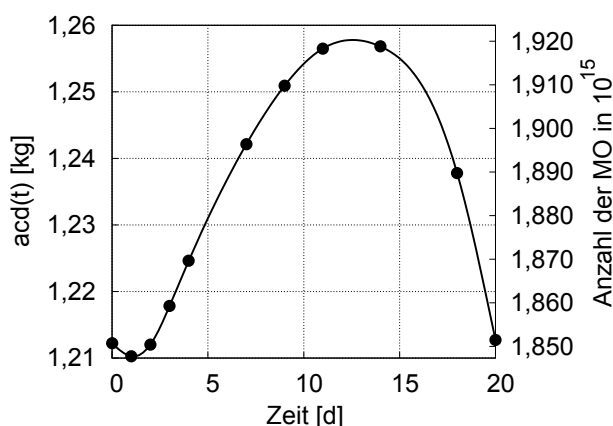


Abbildung 7.2.1: Zeitentwicklung der Gesamtmasse an Mikroorganismen, Experiment d.

entsprechende Randbedingungen im Modell implementiert und anschließend wurde die im Experiment gemessene Konzentration des Acetats im Ablauf mit den entsprechenden Werten aus dem Modell verglichen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 7.2.2 dargestellt. Die Reaktionsparameter wurden mit Hilfe der Experimente a-d bestimmt und es ist zu erkennen, dass die im Modell berechneten Werte für die Konzentration des Acetats im Ablauf für die Experimente a-d sehr gut mit den experimentellen Werten übereinstimmen. Obwohl Experiment e bei der Parameterbestimmung nicht betrachtet wurde, wird die Konzentration des Acetats im Ablauf auch hier vom Modell mit denselben Reaktionsparametern sehr genau berechnet. Dieser Test zeigt, dass das Modell mit denselben Reaktionsparametern als Simulationsmodell bei ähnlichen Experimenten verwendet werden kann.

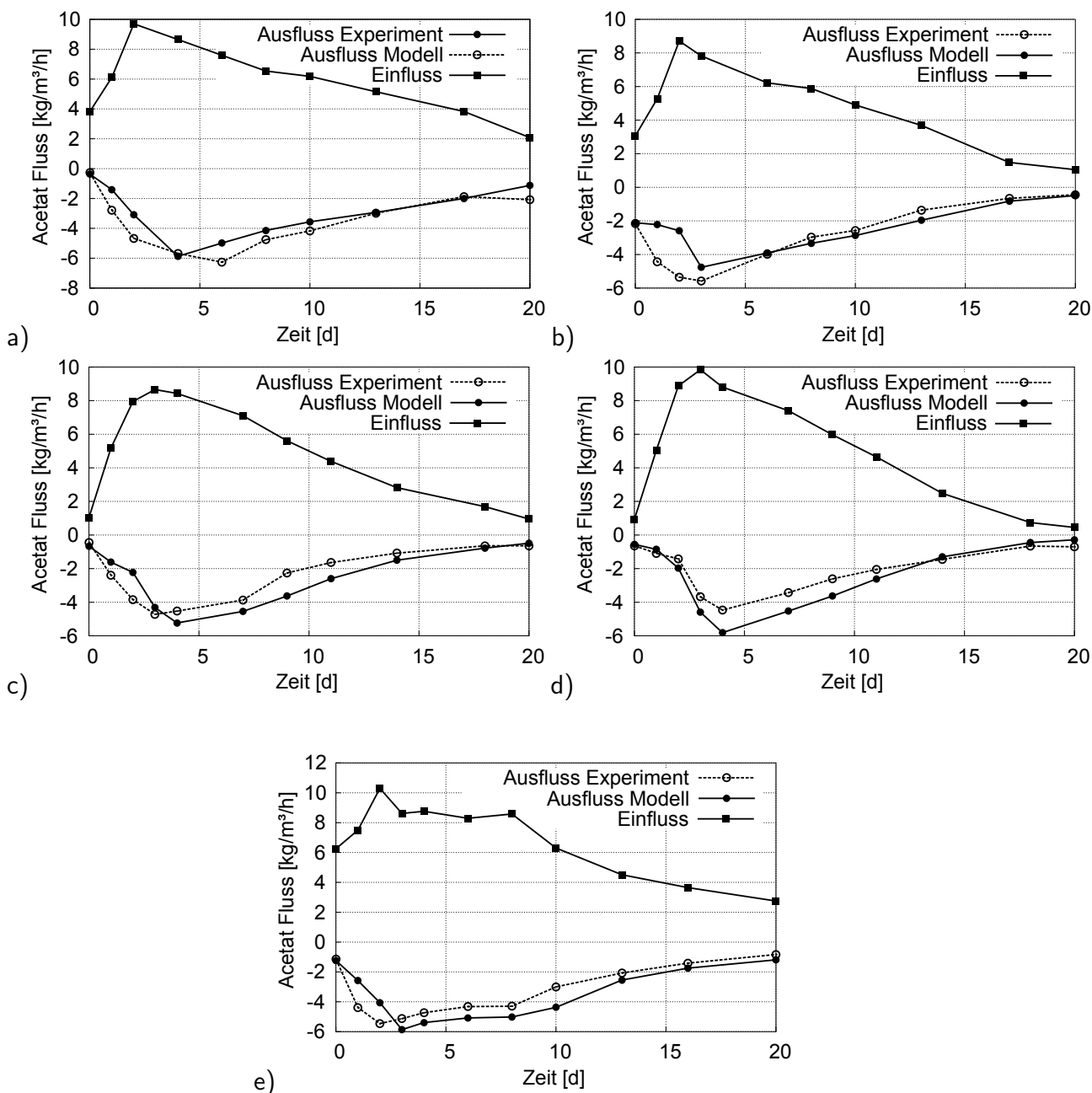


Abbildung 7.2.2: Vergleich der Konzentration des Acetats im Ablauf zwischen Experiment und Modell.

**Sensitivitätsanalyse der Reaktionsparameter**

Für jeden Reaktionsparameter wurde eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 7.2.3 dargestellt. Bis auf  $f_{ac,acd}$  beeinflussen alle Parameter die Fitnessfunktion sehr stark und sind damit für das Modell unerlässlich.

Der Parameter  $f_{ac,acd}$  hat nur einen kleinen Einfluss auf  $f$ , da sich der Parameter an der obersten zulässigen Grenze befindet. Durch eine Erhöhung von  $f_{ac,acd}$  wäre die Massenerhaltung nicht mehr gewährleistet. Der Parameter  $f_{ac,acd}$  sollte dennoch aus Gründen der Konsistenz im Modell verwendet werden (vgl. Abschnitt 5.3.3).

Auf der anderen Seite hat der Parameter  $MO_{MAX,acd}$  im neu eingeführten Hemmterm  $I_{acd}$ , welcher bei Überpopulation der Füllkörper die Aufnahme rate der Mikroorganismen hemmt, die höchste Sensitivität und spielt somit eine entscheidende Rolle im Modell.

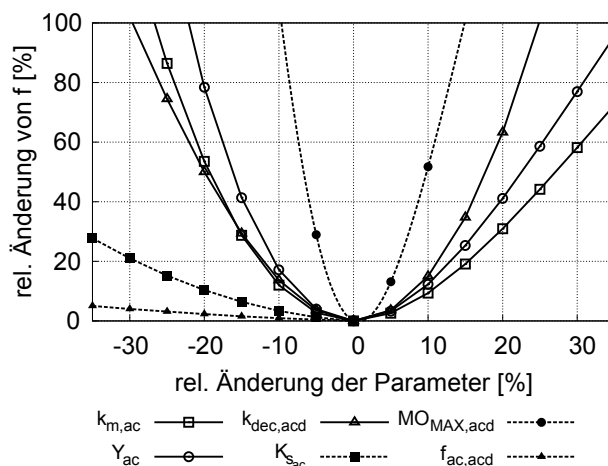


Abbildung 7.2.3: Sensitivitätsanalyse: Relative Änderung der Fitnessfunktion abhängig von einer relativen Änderung der Reaktionsparameter.

### Effektivität des Methanreaktors

Um die Effektivität des Methanreaktors zu untersuchen, definieren wir die maximale Methanproduktion  $P_{max}(t)$  folgendermaßen

$$P_{max}(t) := \max_{\mathbf{x}} P_{CH_4}(t, \mathbf{x}). \tag{7.2.40}$$

Anschließend können wir die Effektivität des Reaktors  $Eff(t)$  definieren als

$$Eff(t) := \frac{1}{V_P} \int_{V_P} \frac{P_{CH_4}(t, \mathbf{x})}{P_{max}(t)} dx, \tag{7.2.41}$$

wobei  $V_P$  den Porenraum des Reaktors darstellt.

Wenn die Methanproduktion gleichmäßig im Reaktor verteilt ist, ergibt sich  $Eff(t) = 1$ . Wenn es allerdings Bereiche im Reaktor gibt, in denen die Methanproduktion unterdurchschnittlich abläuft, sinkt die Effektivität des Reaktors. Man könnte auch sagen, dass die betroffenen Reaktorteile nicht maximal ausgelastet sind.

In Abbildung 7.2.4 ist der Bruch  $P_{CH_4}(t, \mathbf{x})/P_{max}(t)$  für das Experiment d) für die Zeitpunkte

$t = 2$  d,  $t = 12$  d und  $t = 20$  d dargestellt. Man kann erkennen, dass am Anfang des Experiments ( $t = 2$  d) der untere Teil des Reaktors nicht effektiv genutzt wird. Das liegt vor allem daran, dass der Zulauf des Acetats sehr gering ist und deshalb der größte Teil des Acetats im oberen Teil verbraucht wird (siehe Abbildung 7.2.2). Dies führt zu einem Nährstoffmangel im unteren Bereich. In der Mitte des Experiments ( $t = 12$  d) wird der gesamte Reaktor effektiv genutzt. Der Zulauf des Acetats ist jetzt ausreichend hoch und es gibt keinen Nährstoffmangel mehr. Gegen Ende des Experiments ( $t = 20$  d) ist der Zulauf des Acetats wieder sehr gering. Im unteren Bereich des Reaktors wird nur noch wenig Methan produziert, da es wieder an Acetat fehlt.

Insgesamt kann man festhalten, dass der untere Teil des Reaktors oft nur unzureichend ausgelastet wird. Die Effektivität des Reaktors könnte beispielsweise durch eine Verbesserung der Lebensbedingungen für die Acetat Verwerter im unteren Bereich des Reaktors erhöht werden. Um dies zu erreichen, kann man beispielsweise im unteren Bereich bessere Füllkörper verwenden als im oberen Bereich.

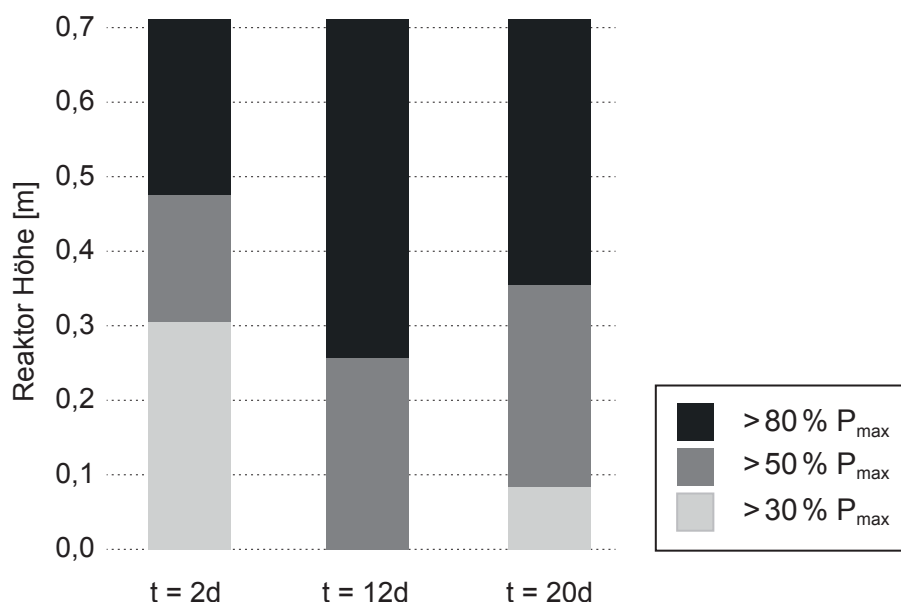


Abbildung 7.2.4: Effektivität des Methanreaktors zu drei verschiedenen Zeitpunkten.

### Steuerung des Methanreaktors

Beim Betrieb von Biogasreaktoren kommt es oft zu Problemen, wobei die meisten Probleme durch eine Über- bzw. eine Unterfütterung des Reaktors entstehen. Bei der Überfütterung kann es beispielsweise zur Verstopfung der Füllkörper durch Mikroorganismen kommen. Bei der Unterfütterung kann die Population der Mikroorganismen durch andauernden Nährstoffmangel stark reduziert werden.

In diesem Abschnitt wird eine optimale hydraulische Verweilzeit bezogen auf die Konzentration



des Acetats im Zulauf hergeleitet. Durch ein regelmäßiges Messen der Acetat-Konzentration im Zulauf, kann die hydraulische Verweilzeit regelmäßig angepasst werden und somit wird eine Über- bzw. Unterfütterung vermieden.

Zunächst betrachten wir die Gesamtmasse der Mikroorganismen im stationären Zustand

$$acd := \lim_{t \rightarrow \infty} acd(t) \quad (7.2.42)$$

für einen festen Zulauf  $Q_{in}$  und eine feste Konzentration des Acetats in der einfließenden Prozessflüssigkeit. Die Ergebnisse sind in Abbildung 7.2.5 dargestellt. Man kann erkennen, dass für eine sehr geringe Konzentration des Acetats bzw. für einen sehr geringen Zulauf der Prozessflüssigkeit die Mikroorganismen nicht lebensfähig sind. Auf der anderen Seite führen hohe Acetat-Konzentrationen und hohe Zuflüsse der Prozessflüssigkeit aufgrund des neu eingeführten Hemmterms  $I_{acd}$ , welcher bei Überpopulation der Füllkörper die Aufnahme des Acetats hemmt, nicht zu einem unbegrenzten Anstieg der Gesamtmasse der Mikroorganismen. In diesem Fall bildet sich ein Plateau bei etwa  $acd \approx 1,4$  kg (vgl. Abbildung 7.2.5).

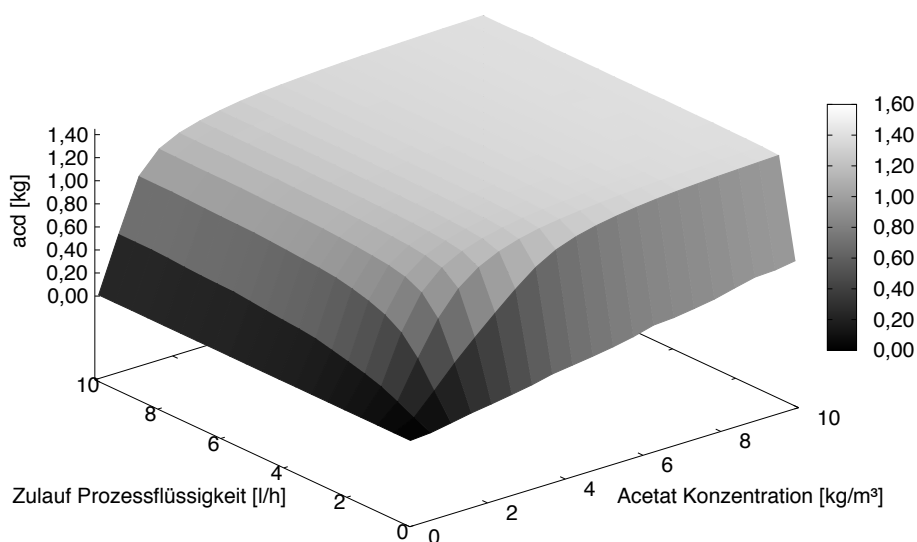


Abbildung 7.2.5: Gesamtmasse der Mikroorganismen im stationären Zustand.

Der optimale Wert für die Gesamtmasse der Mikroorganismen kann nun ermittelt werden, indem das Maximum des Reaktionsterms  $R_{CH_4}^g$ , welcher die Methanproduktion beschreibt, bezüglich der Gesamtmasse der Mikroorganismen ermittelt wird. Es ergibt sich

$$acd_{opt} = \frac{MO_{MAX,acd} \cdot V_{Reaktor}}{2}. \quad (7.2.43)$$

Für den betrachteten Reaktor mit einem Volumen von  $V_{Reaktor} = 0,032 \text{ m}^3$  ergibt sich  $acd_{opt} \approx 0,867 \text{ kg}$ . Das optimale Verhältnis zwischen Zulauf der Prozessflüssigkeit  $Q_{in}$  und Acetat-Konzentration in der Prozessflüssigkeit kann nun direkt aus Abbildung 7.2.5 an der

Isolinie  $acd = 0,867$  kg abgelesen werden.

Wir sind jedoch an der optimalen hydraulischen Verweilzeit interessiert. Die hydraulische Verweilzeit HRT ist gegeben durch (siehe Abschnitt 4.3)

$$\text{HRT} = \frac{V_P}{Q_{\text{in}}}. \quad (7.2.44)$$

Dabei ist das Volumen des Porenraums  $V_P$  gegeben durch

$$V_P = \int \phi(x) dx. \quad (7.2.45)$$

Damit haben wir den benötigten Zusammenhang zwischen HRT und  $Q_{\text{in}}$  gefunden. Die optimale HRT bezogen auf die Konzentration des Acetats in der einfließenden Prozessflüssigkeit ist in Abbildung 7.2.6 dargestellt. Weiterhin sind in Abbildung 7.2.6 zwei weitere Kurven dargestellt, welche zusammen mit der mittleren (optimalen) Kurve einen Schlauch bilden. Innerhalb dieses Schlauchs kann der Reaktor sicher betrieben werden. Liegt man über dem Schlauch wird der Reaktor überfüttert und es ist empfehlenswert die HRT so zu verlängern, dass man auf die optimale Kurve kommt. Liegt man hingegen unter dem Schlauch wird der Reaktor unterfüttert und man sollte die HRT entsprechend verkürzen, damit der Reaktor wieder optimal gefüttert wird.

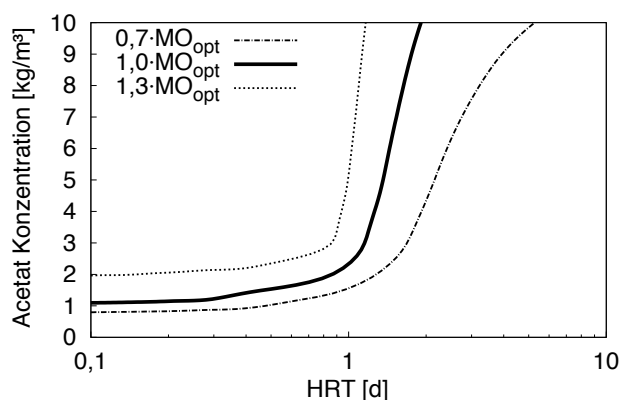


Abbildung 7.2.6: Optimale HRT bezogen auf die Konzentration des Acetats im Zulauf.

## 7.2.7 Diskussion

Anhand der zur Verfügung stehenden Messdaten zur Acetat-Konzentration im Zu- und Ablauf, konnte gezeigt werden, dass das vorgestellte Simulationsmodell in der Lage ist den Konsum von Acetat innerhalb des Methanreaktors gut wiederzugeben. Bei der Sensitivitätsanalyse wurde gezeigt, dass dabei vor allem der neu eingeführte Parameter  $MO_{MAX,acd}$  eine entscheidende Rolle spielt.

Bei der Bestimmung der Reaktionsparameter in Abschnitt 7.2.5 musste ein zusätzlicher Term

$\Delta_{acd}^2$  eingefügt werden, damit die Gesamtmasse der Mikroorganismen den nötigen periodischen Verlauf annimmt. Das liegt vor allem daran, dass einige Vorgänge, wie etwa das Wachstum und der Tod der Acetat Verwerter, nur sehr langsam ablaufen. Dieser Zusammenhang kann auch an den zugehörigen Reaktionsparametern in Tabelle 5.6.1 abgelesen werden. Um das Modell noch besser zu validieren, wäre es sinnvoll zusätzlich Messdaten zur Gesamtmasse der Acetat Verwerter zu erheben.

Das validierte Simulationsmodell wurde anschließend verwendet, um die Effektivität des Reaktors zu untersuchen. Es wurde gezeigt, dass der untere Bereich des Reaktors oft nicht effektiv genutzt wurde. Die Effektivität könnte durch verschiedene Füllkörper im oberen und unteren Bereich gesteigert werden.

Weiterhin wurde untersucht, inwiefern sich die Reaktorsteuerung optimieren lässt. Es wurde ein optimaler Zusammenhang zwischen Acetat-Konzentration und hydraulischer Verweilzeit gefunden. Bei regelmäßiger Analyse der Acetat-Konzentration im Zulauf, kann die hydraulische Verweilzeit entsprechend eingestellt werden, so dass der Reaktor optimal gesteuert wird.

# Kapitel 8

## Diskussion und Ausblick

Um eine nachhaltige Energieversorgung zu gewährleisten, ist ein Ausbau erneuerbarer Energien essentiell. Dabei spielen insbesondere Biogasanlagen eine entscheidende Rolle.

In der Forschung wurde der Biogasreaktor oft als eine Blackbox betrachtet, insbesondere bei mehrstufigen Anlagen war nicht einmal die Aufteilung der Prozessphasen auf die einzelnen Stufen der Anlage ausreichend bekannt. In der vorliegenden Arbeit konnten für einen bestimmten Reaktortyp (zweistufig und zweiphasig) die Prozessphasen eindeutig auf die verschiedenen Stufen des Reaktors aufgeteilt werden. Diese Information ist deshalb so entscheidend, weil dadurch besser verstanden werden kann, welche chemischen Stoffe in welchem Reaktorteil eine entscheidende Rolle spielen. Sowohl bei der Modellierung als auch bei der Erhebung von Messdaten, kann nun der Fokus auf die entscheidenden Stoffe gelegt werden.

Beispielsweise wurde gezeigt, dass zum einen nur etwa 60% des im Methanreaktor entstandenen Methans auf organische Säuren zurückzuführen sind und zum anderen ein großer Teil der Acidogenese im Methanreaktor ablaufen muss. Deshalb sollten in Zukunft neben den organischen Säuren, auch Ausgangsstoffe der Acidogenese in der Prozessflüssigkeit gemessen werden und innerhalb der Modellierung berücksichtigt werden.

In aktuellen Forschungsarbeiten zu Biogasanlagen wird das ADM1-Modell zur Modellierung eingesetzt. Dabei beschreibt das ADM1-Modell mit Hilfe einer Reihe von gewöhnlichen Differentialgleichungen den kompletten anaeroben Abbau. Die Strömung der Prozessflüssigkeit sowie örtliche Variationen verschiedener chemischer Stoffe werden dabei vernachlässigt. Ebenso gibt es im ADM1-Modell keinen Term, welcher die Aufnahme rate der Mikroorganismen hemmt, falls eine Überpopulation der Füllkörper vorliegt.

In dieser Arbeit wurde das ADM1-Modell mit einem Strömungsmodell gekoppelt, wodurch alle berechneten Variablen örtlich aufgelöst wurden. Weiterhin wurde ein Hemmterm eingeführt, welcher bei Überpopulation der Füllkörper die Aufnahme rate der Mikroorganismen hemmt. Bei der Sensitivitätsanalyse hat sich herausgestellt, dass gerade dieser Hemmterm eine entscheidende Rolle im Modell spielt. Schließlich konnte das entstandene Simulationsmodell anhand von Messdaten validiert werden.

Durch Betrachten der Gesamtmasse der Mikroorganismen im stationären Zustand konnten

Regeln zur optimalen Steuerung hergeleitet werden und weiterhin konnte durch Betrachtung der lokalen Methanproduktion die Effektivität des Reaktors berechnet werden. Informationen über optimale Steuerung und Effektivität können helfen den Reaktor weiter zu optimieren. Dies wird im Rahmen zukünftiger Arbeiten noch genauer untersucht werden.

Ebenso soll zukünftig die innerhalb des ADM1-Modells verwendete Michaelis-Menten Kinetik überarbeitet werden. Wie bereits erläutert, werden durch diese Form der Kinetik Stoffe umgesetzt, obwohl die beteiligten Mikroorganismen keinen Energiegewinn daraus erzielen können. Um diesen Sachverhalt zu berücksichtigen, sollen die meisten Reaktionsterme mit Hilfe der Gibbsschen freien Energie modelliert werden.

# Abbildungsverzeichnis

2.1.1 Beispiel für ein Gebiet $\Omega$ mit einspringender Ecke . . . . .	13
2.1.2 Hutfunktion . . . . .	21
2.1.3 Duales Gitter . . . . .	24
2.4.1 Mehrgitterverfahren V-Zyklus . . . . .	35
2.4.2 Mehrgitterverfahren W-Zyklus . . . . .	35
2.4.3 Prolongation im Mehrgitterverfahren . . . . .	37
3.0.1 Energieverbrauch seit 1880 . . . . .	42
3.1.1 Anteil der Erneuerbaren Energien am Primärenergieverbrauch . . . . .	45
3.2.1 Anzahl der Biogasanlagen in Deutschland . . . . .	47
3.4.1 Biogasanlage Semd (Teil 1) . . . . .	49
3.4.2 Biogasanlage Semd (Teil 2) . . . . .	50
3.4.3 Biogasanlage Semd (Teil 3) . . . . .	51
4.2.1 Illustration der anaeroben Fermentation . . . . .	55
4.5.1 Typische Methansummenkurve . . . . .	61
4.6.1 Verfahren zur Biogasproduktion . . . . .	63
4.6.2 Schema einer Nassvergärung . . . . .	64
4.6.3 Schema eines Pfropfenstromreaktors . . . . .	64
4.6.4 Schematische Darstellung einer Feststoffvergärung . . . . .	65
4.6.5 Zweistufiges Bioleaching-System . . . . .	66
4.6.6 Zweistufiges Bioleaching-System mit kontinuierlicher Fütterung . . . . .	66
4.6.7 Schematische Darstellung von Methanreaktoren . . . . .	67
5.1.1 Aufteilung eines Volumens 1 . . . . .	69
5.1.2 Aufteilung eines Volumens 2 . . . . .	69
5.3.1 Abbauwege im ADM1-Modell . . . . .	80
6.1.1 Aufbau des Softwaretools UG . . . . .	104
6.2.1 Interfaces der lokalen Diskretisierungs-Numproc . . . . .	106
6.2.2 Interfaces der Linker-Numproc . . . . .	106
6.2.3 Beispiel 1 für eine lokale Diskretisierungs-Numproc . . . . .	107
6.2.4 Beispiel 2 für eine lokale Diskretisierungs-Numproc . . . . .	107
6.2.5 Beispiel Linker L1 . . . . .	108

6.2.6 Beispiel Linker L2 . . . . .	108
6.2.7 Beispiel für eine Konfiguration in CPLDISC . . . . .	109
6.3.1 Algorithmus zum Schätzen der Parameter . . . . .	112
7.1.1 Versuchsaufbau zweistufige zweiphasige Biogasanlage ATB . . . . .	115
7.1.2 Versuchsaufbau zweistufige zweiphasige Biogasanlage UHO . . . . .	116
7.2.1 Zeitentwicklung der Gesamtmasse an Mikroorganismen . . . . .	125
7.2.2 Vergleich der Konzentration des Acetats im Ablauf zwischen Experiment und Modell . . . . .	126
7.2.3 Sensitivitätsanalyse der Reaktionsparameter . . . . .	127
7.2.4 Effektivität des Methanreaktors . . . . .	128
7.2.5 Gesamtmasse der Mikroorganismen im stationären Zustand . . . . .	129
7.2.6 Optimale HRT bezogen auf die Konzentration des Acetats im Zulauf . . . . .	130

# Tabellenverzeichnis

4.1.1 Biogaszusammensetzung . . . . .	53
4.3.1 Vorteile der mesophilen und thermophilen Vergärung . . . . .	57
4.3.2 Typische Hemmstoffe des Gärprozesses . . . . .	60
4.5.1 Biogasausbeuten verschiedener Stoffe . . . . .	62
4.5.2 Biogasausbeuten verschiedener Substrate . . . . .	62
5.1.1 Notation . . . . .	71
5.2.1 Modellparameter Drei-Phasen-Strömungsmodell . . . . .	75
5.2.2 Unbekannte im Drei-Phasen-Strömungsmodell . . . . .	75
5.2.3 Modellparameter Zwei-Phasen-Strömungsmodell . . . . .	77
5.2.4 Unbekannte im Zwei-Phasen-Strömungsmodell . . . . .	78
5.3.1 Berücksichtigte Stoffe im ADM1-Modell . . . . .	81
5.3.2 Parameter des ADM1-Modells, Teil 1 . . . . .	87
5.3.3 Parameter des ADM1-Modells, Teil 2 . . . . .	88
5.3.4 Parameter des ADM1-Modells, Teil 3 . . . . .	89
5.3.5 Hemmterme im ADM1-Modell . . . . .	92
5.4.1 Konstanten zur Berechnung der Henry-Konstante und der Dissoziationskonstante	95
5.5.1 Einteilung der Stoffe in die Phasen des Strömungsmodells . . . . .	97
5.6.1 Strömungsparameter des Zwei-Phasen-Strömungsmodells für acetoklastische Methanogenese . . . . .	102
5.6.2 Reaktionsparameter des Zwei-Phasen-Strömungsmodells für acetoklastische Methanogenese . . . . .	102
7.1.1 Experimentelle Daten der Versuchsanlage am ATB. . . . .	117
7.1.2 Experimentelle Daten der Versuchsanlage an der UHO. . . . .	117
7.1.3 Einteilung der biologischen Phasen auf die Reaktorstufen . . . . .	118
7.2.1 Reaktionsparameter mit Werten aus der Parameterbestimmung . . . . .	125



# Literaturverzeichnis

- [Amon et al., 2006a] Amon, T., Amon, B., Kryvoruchko, V., Machmüller, A., Hopfner-Sixt, K., Bodiroza, V., Hrbek, R., Friedel, J., Pötsch, E., Wagentristl, H., Schreiner, M., und Zollitsch, W. (2006a). Methane production through anaerobic digestion of various energy crops grown in sustainable crop rotations. *Bioresource Technology*, 98:3204–3212.
- [Amon et al., 2006b] Amon, T., Amon, B., Kryvoruchko, V., Zollitsch, W., Mayer, K., und Gruber, L. (2006b). Biogas production from maize and dairy cattle manure - Influence of biomass composition on the methane yield. *Agriculture, Ecosystems and Environment*, 118:173–182.
- [Bank und Rose, 1987] Bank, R. und Rose, D. (1987). Some error-estimates for the box method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 24:777–787.
- [Bastian et al., 2000] Bastian, P., Birken, K., Johannsen, K., Lang, S., Reichenberger, V., Wieners, C., Wittum, G., und Wrobel, C. (2000). Parallel solution of partial differential equations with adaptive multigrid methods on unstructured grids. In Jäger, W. und Krause, E., editors, *High Performance Computing in Science and Engineering*, pages 506–519, Berlin. Springer.
- [Bastian und Wittum, 1994] Bastian, P. und Wittum, G. (1994). Adaptive Multigrid Methods: The UG concept. In W. Hackbusch; G. Wittum, editor, *Adaptive Methods - Algorithms, Theory and Applications (Proceedings of the 9th GAMM Seminar Kiel)*, volume 46 of *Notes on Numerical Fluid Mechanics*. Vieweg.
- [Batstone, 2006] Batstone, editor (2006). *Anaerobic Digestion Model No 1 - Developments and Applications*. IWA Publishing.
- [Batstone et al., 2002] Batstone, D., Keller, J., Angelidaki, I., Kalyuzhnyi, S., Pavlostathis, S., Rozzi, A., Sanders, W., Siegrist, H., und Vavilin, V. (2002). *Anaerobic Digestion Model No.1 (ADM1)*. IWA Publishing.
- [Bear, 1972] Bear, J. (1972). *Dynamics of Fluid in Porous Media*. Dover Publications, INC. New York.
- [Bear und Bachmat, 1990] Bear, J. und Bachmat, Y. (1990). *Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London.

- [Bey, 1997] Bey, J. (1997). *Finite-Volumen- und Mehrgitterverfahren für elliptische Randwertprobleme*. PhD thesis, Eberhard-Karls-Universität Tübingen.
- [Bischofsberger et al., 2005] Bischofsberger, W., Dichtl, N., Rosenwinkel, K.-H., Seyfried, C. F., und Böhnke, B. (2005). *Anaerobtechnik*. Springer.
- [Blumensaat und Keller, 2005] Blumensaat, F. und Keller, J. (2005). Modelling of two-stage anaerobic digestion using the IWA Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1). *Water Research*, 39(1):171 – 183.
- [BMU, 2010] Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (2010). *Zeitreihe zur Entwicklung der erneuerbaren Energien in Deutschland*.
- [Boubaker und Ridha, 2008] Boubaker, F. und Ridha, B. C. (2008). Modelling of the mesophilic anaerobic co-digestion of olive mill wastewater with olive mill solid waste using anaerobic digestion model No. 1 (ADM1). *Bioresource Technology*, 99(14):6565 – 6577.
- [Box et al., 1969] Box, M. J., Davis, D., und Swann, W. H. (1969). *Non-Linear Optimization Techniques*. Imperial Chemical Industries.
- [Bryant, 1979] Bryant, M. P. (1979). Microbial Methane Production, Theoretical Aspects. *Journal of Animal Science*, 48(1):193–201.
- [Buswell und Mueller, 1952] Buswell, A. M. und Mueller, H. F. (1952). Mechanism of methane fermentation. *Industrial & Engineering Chemistry*, 44(3):550–552.
- [Bührke und Wengenmayr, 2009] Bührke, T. und Wengenmayr, R. (2009). *Erneuerbare Energie: Alternative Energiekonzepte für die Zukunft*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.
- [Chynoweth et al., 2001] Chynoweth, D. P., Owens, J. M., und Legrand, R. (2001). Renewable methane from anaerobic digestion of biomass. *Renewable Energy*, 22(1-3):1 – 8.
- [Conklin et al., 2005] Conklin, A. S., Stensel, H. D., und Ferguson, J. (2005). The Growth Kinetics and Competition Between Methanosarcina and Methanosaeta in Mesophilic Anaerobic Digestion. *Proceedings of the Water Environment Federation*, 2005:100–121(22).
- [Cussler, 1997] Cussler, E. (1997). *Diffusion Mass Transfer in Fluid Systems*. Cambridge University Press.
- [de Poorter et al., 2007] de Poorter, L. M. I., J., G. W., und Keltjens, J. T. (2007). Coupling of Methanothermobacter thermoautotrophicus Methane Formation and Growth in Fed-Batch and Continuous Cultures under Different H<sub>2</sub> Gassing Regiments. *Applied and Environmental Microbiology*, 73(3):740–749.
- [Deuffhard und Bornemann, 2002] Deuffhard, P. und Bornemann, F. (2002). *Numerische Mathematik: Numerische Mathematik 2: II*. de Gruyter Lehrbuch.

- [Deuffhard und Hohmann, 1991] Deuffhard, P. und Hohmann, A. (1991). *Numerische Mathematik: Eine algorithmisch orientierte Einführung*. de Gruyter Lehrbuch.
- [Dziuk, 2010] Dziuk, G. (2010). *Theorie und Numerik partieller Differentialgleichungen*. DeGruyter.
- [Edwards et al., 1978] Edwards, T. J., Maurer, G., J., N., und Prausnitz, J. (1978). Vapor-liquid equilibria in multicomponent aqueous solutions of volatile weak electrolytes. *AIChE Journal*, 24(6):966–975.
- [Fachverband Biogas, 2010] Fachverband Biogas e.V. (2010). *Biogas Branchenzahlen 2010*.
- [Fritsche, 2006] Fritsche, U. R. (2006). Comparison of Greenhouse-Gas Emissions and Abatement Cost of Nuclear and Alternative Energy Options from a Live-Cycle Perspective. Technical report.
- [Garrity et al., 2001] Garrity, G., Boone, D. R., und Castenholz, R. W. (2001). *Bergeys Manual of Systematic Bacteriology 1. The Archea and the Deeply Branching and Phototrophic Bacteria*. Springer.
- [Gilbarg und Trudinger, 1998] Gilbarg, D. und Trudinger, N. S. (1998). *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order*. Springer.
- [Gilbert, 1974] Gilbert, R. P. (1974). *Constructive Methods for Elliptic Equations*. Springer, Berlin.
- [Gilbert und Weinacht, 1976] Gilbert, R. P. und Weinacht, R. J. (1976). *Function Theoretic Methods in Differential Equations*. Pitman Publishing.
- [Grillo et al., 2010] Grillo, A., Logashenko, D., Stichel, S., und Wittum, G. (2010). Simulation of density-driven flow in fractured porous media. *Adv. Water Resour.*, 33(12):1494–1507.
- [Hackbusch, 1985] Hackbusch, W. (1985). *Multi-Grid Methods and Applications*. Springer, Berlin.
- [Hackbusch, 1986] Hackbusch, W. (1986). *Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen*. Teubner Studienbücher.
- [Hackbusch, 1989] Hackbusch, W. (1989). On first and second order box schemes. *Computing*, 41:277–296. 10.1007/BF02241218.
- [Hackbusch, 1991] Hackbusch, W. (1991). *Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme*. Teubner Studienbücher.
- [Hairer et al., 1993] Hairer, E., Wanner, G., und Nørsett, S. (1993). *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems*. Springer.

- [Hassanizadeh und Gray, 1979a] Hassanizadeh, S. und Gray, W. (1979a). General conservation equations for multiphase systems: 1. Averaging procedure. *Adv Water Resour*, 2(3):131–144.
- [Hassanizadeh und Gray, 1979b] Hassanizadeh, S. und Gray, W. (1979b). General conservation equations for multiphase systems: 2. Mass, momenta, energy and entropy equations. *Adv Water Resour*, 2(4):191–203.
- [Hassanizadeh und Gray, 1980] Hassanizadeh, S. und Gray, W. (1980). General conservation equations for multiphase systems: 3. Constitutive theory for porous media flow. *Adv Water Resour*, 3(1):25–40.
- [Herrmann et al., 2011] Herrmann, C., Heiermann, M., und Idler, C. (2011). Effects of ensiling, silage additives and storage period on methane formation of biogas crops. *Bioresource Technology*, 102:5153–5161.
- [Hubbert, 1949] Hubbert, M. K. (1949). Energy from Fossil Fuels. *Science*, 109(2823):103–109.
- [IE Leipzig, 2005] Institut für Energetik und Umwelt, Fraunhofer Institut Umwelt-, Sicherheits-, Energietechnik UMSICHT, Gaswärme Institute E.V. Essen, Wuppertal Institut für Klima, Umwelt, Energie (2005). *Analyse und Bewertung der Nutzungsmöglichkeiten von Biomasse*.
- [Jacobson und DeLucchi, 2009] Jacobson, M. Z. und DeLucchi, M. A. (2009). Plan für eine emissionsfreie Welt bis 2030. *Spektrum der Wissenschaft*, 12:80–87.
- [Kaltschmitt et al., 2009] Kaltschmitt, M., Hartmann, H., und Hofbauer, H. (2009). *Energie aus Biomasse*. Springer.
- [Kanzow, 2005] Kanzow, C. (2005). *Numerik linearer Gleichungssysteme: Direkte und iterative Verfahren*. Springer.
- [Köhler et al., 2009] Köhler, S., Sensel, K., und Habermann, B. (2009). Wie viel Biogas steckt in Pflanzen? - Das Biogas Crops Network (BCN). *Bornimer Agrartechnische Berichte*, 68:5–13.
- [Lang und Wittum, 2005] Lang, S. und Wittum, G. (2005). Large-scale density-driven flow simulations using parallel unstructured Grid adaptation and local multigrid methods. *Concurrency Computat.: Pract. Exper.*, 17:1415–1440.
- [Lemke et al., 2012] Lemke, B., Logaschenko, D., Muha, I., Nägel, A., Paech, B., Wehner, C., und Wittum, G. (2012). The software system ug3 for the simulation of pde-based models. *Computing and Visualization in Science*. In preparation.
- [Maaß, 2009] Maaß, G. (2009). Forschung zur Bioenergie Aktivitäten des BMBF. *Bornimer Agrartechnische Berichte*, 68:14–21.

- [Michev, 1996] Michev, I. D. (1996). *Finite Volume and Finite Volume Element Methods for Nonsymmetric Problems*. PhD thesis, Texas A&M Univ., Inst. for Scientific Computation, 612 Blocker, College Station, Texas 77843-3404, USA. Also available as Technical Report ISC-96-04-MATH.
- [Mosey, 1981] Mosey, F. E. (1981). Anaerobic biological treatment of food industry waste waters. *Water Pollution Control*, 80(2):273–291.
- [Mudrack und Kunst, 1985] Mudrack, K. und Kunst, S. (1985). *Biologie der Abwasserreinigung*. Gustav Fischer Verlag, Stuttgart.
- [Muha et al., 2012a] Muha, I., Grillo, A., Heisig, M., Schönberg, M., Linke, B., und Wittum, G. (2012a). Mathematical modeling of process liquid flow and acetoclastic methanogenesis under mesophilic conditions in a two-phase biogas reactor. *Bioresource Technology*, 106:1–9. DOI: 10.1016/j.biortech.2011.11.087.
- [Muha et al., 2009] Muha, I., Lenz, H., Feuchter, D., Handel, S., und Wittum, G. (2009). VVS eine Software zur Optimierung des Einlagerungsprozesses in Horizontalsilos. *Bornimer Agrartechnische Berichte*, 68:35–43.
- [Muha et al., 2012b] Muha, I., Zielonka, S., Lemmer, A., Schönberg, M., Linke, B., Grillo, A., und Wittum, G. (2012b). Do two-phase biogas plants separate anaerobic digestion phases? - A mathematical model for the distribution of anaerobic digestion phases among reactor stages. *Bioresource Technology*. Submitted.
- [Mumme, 2007] Mumme, J. (2007). *Vergärung nachwachsender Rohstoffe im Aufstromverfahren*. PhD thesis, Humboldt-Universität zu Berlin.
- [Nocedal und Wright, 2006] Nocedal, J. und Wright, S. J. (2006). *Numerical Optimization*. Springer.
- [Nägel et al., 2008] Nägel, A., Hansen, S., Neumann, D., Lehr, C.-M., Schaefer, U. F., Wittum, G., und Heisig, M. (2008). In-silico model of skin penetration based on experimentally determined input parameters. Part II: Mathematical modelling of in-vitro diffusion experiments. Identification of critical input parameters. *Eur J Pharm Biopharm*, 68(2):368–379.
- [Ortega und Rheinboldt, 1987] Ortega, J. M. und Rheinboldt, W. C. (1987). *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables (Classics in Applied Mathematics)*. Society for Industrial Mathematics.
- [Reinhardt, 2008] Reinhardt, H.-J. (2008). *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*. Walter de Gruyter.
- [Rodriguez et al., 2008] Rodriguez, J., Lema, J. M., und Kleerebezem, R. (2008). Energy-based models for environmental biotechnology. *Trends in Biotechnology*, 26(7):366–374.

- [Schwarz et al., 2011] Schwarz, W., Zerlov, V. V., Klocke, M., Leuhn, M., Köhler, S., und Scherer, P. (2011). Stellungnahme zu EHEC-Bakterien in Biogasanlagen. Technical report.
- [Schäfer, 2004] Schäfer, A. S. (2004). *Effiziente reduzierte Newton-ähnliche Verfahren zur Behandlung hochdimensionaler strukturierter Optimierungsprobleme mit Anwendung bei biologischen und chemischen Prozessen*. PhD thesis, Ruprecht - Karls - Universität Heidelberg.
- [Schönberg und Linke, 2009] Schönberg, M. und Linke, B. (2009). Vergärung von Roggen-Ganzpflanzensilage in einer zweiphasigen Prozessführung - Anaerobic digestion of rye silage in two-phase process. *Bornimer Agrartechnische Berichte*, 68:114–125.
- [Sorribas et al., 2007] Sorribas, A., Hernandez-Bermejo, B., Vilaprinyo, E., und Alves, R. (2007). Cooperativity and saturation in biochemical networks: A saturable formalism using taylor series approximations. *Biotechnology and Bioengineering*, 97(5):1259–1277.
- [Stams, 1994] Stams, A. J. M. (1994). Metabolic interactions between anaerobic bacteria in methanogenic environments. *Antonie van Leeuwenhoek*, 66:271–294. 10.1007/BF00871644.
- [Stams et al., 2003] Stams, A. J. M., Elferink, S. J. W. H., und Westermann, P. (2003). Metabolic interactions between methanogenic consortia and anaerobic respiring Bacteria. *Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology*, 81:31–56.
- [Stoer und Witzgall, 1970] Stoer, J. und Witzgall, C. (1970). *Convexity and Optimization in Finite Dimensions I*. Springer.
- [Thamsiriroj und Murphy, 2011] Thamsiriroj, T. und Murphy, J. (2011). Modelling mono-digestion of grass silage in a 2-stage CSTR anaerobic digester using ADM1. *Bioresource Technology*, 102(2):948 – 959.
- [Thauer et al., 1977] Thauer, R. K., Jungermann, K., und Decker, K. (1977). Energy conservation in chemotrophic anaerobic bacteria. *Microbiol. Mol. Biol. Rev.*, 41(1):100–180.
- [Varga, 1962] Varga, R. S. (1962). *Matrix Iterative Analysis*. Springer.
- [Vogel et al., 2012] Vogel, A., Reiter, S., Rupp, M., Nägel, A., und Wittum, G. (2012). Ug 4 - a novel flexible software system for simulating pde based models on high performance computers. CVS. In preparation.
- [Wesseling, 2004] Wesseling, P. (2004). *An Introduction to Multigrid Methods*. R T Edwards Inc.
- [Wett et al., 2007] Wett, B., Schoen, M., Phothilangka, P., Wackerle, F., und Insam, H. (2007). Model-based design of an agricultural biogas plant: application of anaerobic digestion model no. 1 for an improved four chamber scheme. *Wat. Sci. Tech.*, 55(10):21–28.

- [Wichern et al., 2009] Wichern, M., Gehring, T., Fischer, K., Andrade, D., Lübken, M., Koch, K., Gronauer, A., und Horn, H. (2009). Monofermentation of grass silage under mesophilic conditions: Measurements and mathematical modeling with ADM1. *Bioresource Technology*, 100:1675–1681.
- [Wonneberger et al., 2011] Wonneberger, A.-M., Graf, F., Bajohr, S., Lemmer, A., und Reimert, R. (2011). Process development of two-phase pressure fermentation - influence of gas solubilities. In *Progress in Biogas II, Part 1*.
- [Zielonka et al., 2010] Zielonka, S., Lemmer, A., Oechsner, H., und Jungbluth, T. (2010). Energy balance of a two-phase anaerobic digestion process for energy crops. *Engineering in Life Sciences*, 10(6):515–519.
- [Zittel, 2010] Zittel, W. (2010). Abschätzung der jährlichen weltweiten Ausgaben für die Energieversorgung. Technical report.

## LEBENS LAUF

Dipl.-Math. Ivo Muha  
\* 04.03.1984 in Ljubljana, Slowenien  
Familienstand: verlobt, 1 Kind  
Nationalität: slowenisch



## BERUF SERFAHRUNG

---

2008 – heute	Wissenschaftlicher Mitarbeiter Goethe-Center for Scientific Computing Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt am Main
2007 – 2008	Wissenschaftliche Hilfskraft Lehrstuhl Simulation in Technology Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg
2005 – 2008	Wissenschaftliche Hilfskraft Institut für Mathematik Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg

## STUDIUM UND SCHULE

---

JUN 2008	Diplom in Mathematik, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg Note: sehr gut Diplomarbeit: "Coarse Graining auf beliebigen Gitterhierarchien" Betreuer: Prof. Dr. Wittum
2006 – 2007	Auslandssemester Universität Helsinki, Helsinki, Finnland
2003 – 2008	Studium der Mathematik Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg
1994 – 2003	Alstergymnasium, Henstedt-Ulzburg Abitur Note: 1.4
1991 – 1994	Grundschule, Henstedt-Ulzburg
1990 – 1991	Grundschule, Loon op Zand, Niederlande