

Flexible Auslegungsrechnungen für Spülkaskaden

Teil 1

Von E. Giebler und K. Röbenack, Institut für Automatisierungstechnik, Technische Universität Dresden

1 Einleitung

Spülprozesse sind Bestandteil jeder nasschemischen Oberflächenbehandlung. Ziele des Spülens sind:

- die Verschleppung von Prozesslösung einer Behandlungslösung in nachfolgende Prozesslösungen zu verhindern;
- mögliche chemische Reaktionen zwischen Prozesslösung und Warenoberfläche abzubrechen und am Ende der nasschemischen Warenbearbeitung eine von Chemikalien weitgehend freie Warenoberfläche zu erreichen.

Die Gestaltung und der Betrieb von Spülprozessen können sehr unterschiedlich erfolgen. Es folgt eine kurze Übersicht zu den wichtigsten Kriterien zur Unterscheidung von Spülprozessen.

1.1 Struktur von Spülsystemen

Die wichtigste strukturelle Festlegung ist die Anzahl der Spülstufen. Einstufige Spülen reichen im Allgemeinen nicht aus, da sie die nötige Reinigungswirkung nicht oder nur mit unverträglich hohem Wasserverbrauch erreichen. Vom Gesetzgeber ist daher die Mehrfachnutzung von Spülwasser mittels Kaskadenspülung vorgesehen [1]. Eine weitere strukturelle Eigenschaft ist die hydraulische Verschaltung der Spülstufen. Eine Möglichkeit ist dabei die separate Speisung aller Stufen eines Spülsystems mit Frischwasser. Ein solcher Parallelbetrieb wird heute wegen des hohen Wasserbedarfs jedoch kaum noch angewendet. Üblicher sind Kaskadenstrukturen, bei denen Spülwasser entgegen dem Warenstrom von den niedriger konzentrierten (hinteren) zu den höher konzentrierten (vorderen) Spülstufen geleitet wird.

1.2 Art des Spülens

Es ist zwischen Tauchspülen und Spritzspülen zu unterscheiden. Beim Tauchspülen wird die zu reinigende Ware in ein mit Spüllösung gefülltes Tauchbecken eingebracht und nach einer gewissen Tauchzeit wieder entnommen. Hingegen erfolgt beim reinen Spritzspülen lediglich ein Abspritzen

beziehungsweise Absprühen der Ware mit der Spüllösung. Häufig eingesetzt wird eine kombinierte Technik, bei der die Ware zuerst in einem Tauchbecken gespült wird und beim Herausfahren der Ware aus diesem Becken ein zusätzliches Absprühen mit einer niedriger konzentrierten Spüllösung erfolgt. Diese Technik ist insbesondere für Gegenstrom-Kaskadenspülen geeignet, da hier der Kaskadenvolumenstrom zum Abspritzen genutzt werden kann.

1.3 Art der Warenbearbeitung

Beim Spülen von separaten Teilen, Warenträgern oder Trommelware erfolgt das Einbringen der Ware in den Spülprozess *diskontinuierlich*. Hingegen wird band- oder drahtförmige Ware *kontinuierlich* durch den Spülprozess geleitet.

1.4 Anfahren der Spülpositionen

Es sind Anfahrtsabfolgen der Ware für die verschiedenen Spülpositionen festzulegen. Der Standardfall beim Betrieb einer n -stufigen Spülkaskade ist das aufeinanderfolgende Spülen beginnend von der ersten bis zur n -ten Spülstufe. Eine wichtige Sonderform ist die Anwendung eines *Vortauchschritts* (gelegentlich auch als Reversieren [2] oder *Samba-schritt* [3] bezeichnet).

Dabei wird die aus einer vorgelagerten Spüle kommende Ware vor der Behandlung im Prozesselktrolyt in die erste Spülstufe vorgetaucht. Nach der Behandlung wird die Ware nochmals in die erste Spülstufe transportiert und läuft von dort wie beim klassischen Kaskadenspülen weiter in die folgenden Spülstufen.

Die Ziele des Vortauchens können sein:

- eine teilweise Stoffrückführung aus der ersten Spüle in den Behandlungsprozess und damit eine Einsparung an Prozesschemie und Spülwasser;
- eine Aktivierung der Ware für den folgenden Behandlungsprozess;
- eine Neutralisation der Restverschleppung aus der vorgelagerten Prozessstufe im Spülsystem

anstatt im Behandlungsprozess und damit eine Einsparung an Prozesschemie [2].

1.5 Austausch der Spüllösung

Prinzipiell ist zwischen *kontinuierlichem* und *diskontinuierlichem* Austausch von Spüllösung zu unterscheiden. Beim *kontinuierlichen* Betrieb wird während der Betriebszeit einer Spülstufe ständig frische Spüllösung (Frischwasser oder niedriger konzentrierte Spüllösung) in die Spülstufe zugeführt und gleichzeitig überschüssige Spüllösung abgeleitet. Hingegen kommt es bei *diskontinuierlichen* Betriebsregimen nur zu bestimmten Zeitpunkten (in der Regel bei Erreichen der Störgrenzkonzentration in der qualitätsbestimmenden letzten Spülstufe) zu einem vollständigen beziehungsweise teilweisen Austausch der Spüllösung (Batchbetrieb beziehungsweise Teilbatchbetrieb).

Ein Spezialfall stellt der warenrägergetaktete Austausch relativ kleiner Spüllösungsmengen dar. Hierbei handelt es sich zwar prinzipiell um ein diskontinuierliches Betriebsregime; durch die auf das Spülbadvolumen bezogenen kleinen Austauschvolumina sind die Konzentrationsschwankungen pro Austausch in der Spülstufe jedoch relativ gering, sodass sich die Konzentrationsverläufe ähnlich einem kontinuierlichen Betriebsregime verhalten.

1.6 Betriebsparameter von Spülsystemen

Wichtige Betriebsparameter von Spülsystemen sind Tauch- beziehungsweise Spritzzeiten, die Art und Intensität der Umwälzung sowie die Temperatur der Spüllösung. Diese Parameter haben einen besonderen Einfluss auf die *Wirksamkeit des Spülvorgangs*. Die Gesamtwirkung eines Spülsystems wird durch das *Spülkriterium* beschrieben, welches die Konzentrationen der auf der Ware befindlichen Verschleppung vor und nach dem Spülprozess ins Verhältnis setzt.

Die kurze Übersicht zeigt die vielfältigen Möglichkeiten bei der Gestaltung von Spülprozessen. Das Hauptziel ist dabei, ein qualitätsgerechtes Spülen sicherzustellen, das heißt, dass die Restkonzentration der aus der letzten Spülstufe verschleppten Spüllösung einen vorgegeben Maximalwert nicht überschreiten darf. Darüber hinaus wird aus ökonomischen und ökologischen Gründen gefordert, das

gewünschte Spülergebnis mit einem geringen Einsatz an Frischwasser zu erreichen. In einigen Fällen gibt es weitergehende Forderungen an die Konzentrationen in den einzelnen Spülstufen. So kann für eine Spüle zum Beispiel eine maximal zulässige Konzentration der Spüllösung vorgegeben werden, um die Beendigung der chemischen Reaktionen sicherzustellen. Für Vortauchspülen wird unter Umständen eine Mindestkonzentration gewünscht, um eine hinreichende Stoffrückführung oder eine genügende Aktivierung zu erreichen.

2 Berechnung von Spülprozessen

2.1 Unterschiedliche Berechnungsmöglichkeiten

Um die in der Einleitung genannten Ziele für die unterschiedlichen Spülsystemvarianten zu erreichen, sind qualifizierte Berechnungen der Verhältnisse in den betrachteten Spülsystemen nötig. Hierbei kommt zur beschriebenen Vielfalt der Spülsystemvarianten noch eine Vielfalt in den Möglichkeiten, Spülprozesse mathematisch zu modellieren.

Die erste Unterscheidungsmöglichkeit von Spülprozessbeschreibungen (Spülmodellen) sind die dargestellten physikalischen (beziehungsweise chemischen) Größen. So lassen sich die Volumen/Volumenströme von Spüllösungen sowie darin gelöste Stoffe (Masse beziehungsweise Konzentration) quantifizieren. Für bestimmte Anwendungen kann auch die Beschreibung der Temperatur (und somit der Energie) der Spüllösungen beziehungsweise der Ware von Interesse sein. Der eigentliche Spülprozess ist ebenfalls mathematisch beschreibbar, wobei zwischen Modellen zu unterscheiden ist, welche:

- die physikalischen Vorgänge des Spülens (Konvektion, Diffusion, und andere) im Detail darstellen und

die Wirkung des Spülvorgangs summarisch und nicht zwangsläufig auf Basis theoretischer Herleitungen beschreiben.

Ferner lassen sich Spülmodelle (wie alle mathematischen Modelle technischer Prozesse) nach ihrer Abbildung zeitlicher oder örtlicher Verhältnisse einordnen. So können örtliche Verteilungen von Prozessgrößen in unterschiedlicher Auflösung (makroskopisch, mikroskopisch) dargestellt werden. Häufig

werden Ortsverteilungen jedoch nicht detailliert beschrieben, sondern die Spülprozesse werden auf Komponentenebenen betrachtet, das heißt es werden für einzelne Spülprozesse oder Warenträger homogene Werte der betrachteten Prozessgrößen angenommen (konzentrierte Parameter). Werden zeitliche Veränderungen von Spülprozessen mathematisch beschrieben, spricht man von *dynamischen Modellen*. Werden Zeitvorgänge hingegen vernachlässigt und stattdessen mit zeitlichen Mittelwerten gearbeitet, handelt es sich um *statische Modelle*.

2.2 Einordnung des vorgestellten Modells

Der vorige Abschnitt hat noch einmal die Vielfalt der Beschreibungsmöglichkeiten von Spülprozessen skizziert. Entsprechend reichhaltig ist das Angebot an mathematischen Beschreibungen dieser Prozesse; als Beispiele sei hier auf die Arbeiten von Kushner [5], Clarke [6], Winkler [6], Buczko [7] und Kúbik [3] verwiesen. Das im Hauptteil dieses Beitrags vorgestellte Modell knüpft in einigen Punkten an vorliegende Arbeiten an, in anderen unterscheidet es sich jedoch wesentlich.

2.2.1 Ziele

Das Ziel bei der Formulierung des präsentierten Spülsystemmodells war es, ein Modell zu erhalten, welches:

- möglichst einfach strukturiert ist;
- trotzdem umfassend gültig ist, das heißt viele wichtige Spülsystemanwendungen und Effekte abbildet;
- zur verfahrenstechnischen Auslegungsrechnung, zum Variantenvergleich und zur Optimierung dienen kann;
- eine schnelle und effiziente Berechnung mit heute üblichen Rechnerwerkzeugen zulässt;
- eine überschaubare Anzahl von nicht zu schwierig beschaffbaren Parametern enthält.

2.2.2 Eigenschaften des Modells

Um diese Eigenschaften des Modells zu erreichen, wurden folgende Festlegungen getroffen:

- Das Modell stellt stationäre Betriebsverhältnisse dar (statische Modellierung), das heißt zeitliche Veränderungen von Prozessgrößen werden nicht betrachtet.

- Es werden im Gegenstrom kontinuierlich durchflossene Spülkaskaden abgebildet. Nicht betrachtet werden die nicht mehr zeitgemäßen, parallel durchflossenen Kaskaden.
- Als wesentliche Prozessgrößen der Spülprozesse werden Konzentrationen und Volumenströme in Form konzentrierter Größen der Spülstufen beziehungsweise der Verschleppungen dargestellt. Die Konzentration bezieht sich jeweils auf einen repräsentierenden gelösten Stoff. Diese Beschreibung ist auch bei mehreren in den Spüllösungen vorliegenden Stoffen hinreichend, da sich die Verhältnisse der Stoffkonzentrationen in Spülsystemen zueinander nicht ändern (Annahme fehlender Umsatzvorgänge). Unvollständige Vermischung, Vortauchen und Spritzspülen sollen als praktisch bedeutende Phänomene darstellbar sein.

3 Modellierung von Spülprozessen

3.1 Gegenstrom-Fließkaskade

Ausgangspunkt zur Darstellung einer Fließspülkaskade ist das allgemeine Modell einer einzelnen Spülstufe entsprechend *Abbildung 1*. Das Volumen der Spüllösung wird durch die Volumenströme von Zufluss \dot{V}_{if} , Einschleppung \dot{V}_{di} , Abfluss \dot{V}_{of} , Ausschleppung \dot{V}_{do} , Überlauf \dot{V}_{ol} und Verdunstung \dot{V}_{evap} beeinflusst.

Bei kontinuierlichem Überlaufbetrieb der Spüle berechnet sich der Überlaufvolumenstrom wie folgt:

$$\dot{V}_{of} = \dot{V}_{di} + \dot{V}_{if} - \dot{V}_{do} - \dot{V}_{ol} - \dot{V}_{evap} \quad <1>$$

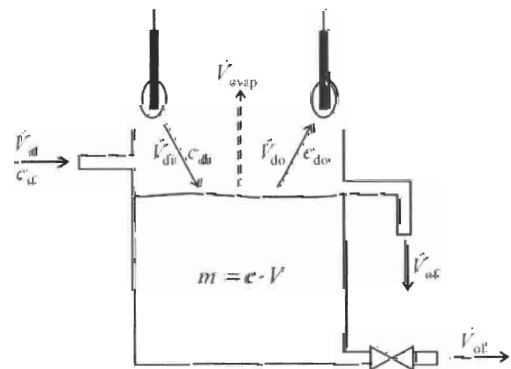


Abb. 1: Modell einer einzelnen Spülstufe

Bei Verschaltung einzelner Spülstufen zu einer n -stufigen Gegenstromkaskade entsteht die in *Abbildung 2* dargestellte Anordnung. Hierbei ergeben sich der Zulauf der ersten Spüle \dot{V}_{if1} aus dem Überlauf der zweiten Spüle \dot{V}_{of2} sowie die Einschleppung der zweiten Spüle \dot{V}_{do2} aus der Ausschleppung der ersten Spüle \dot{V}_{do1} usw. Entsprechend sind die Überlauf-Volumenströme einer n -stufigen Kaskaden-spüle wie folgt berechenbar:

$$\begin{aligned} \dot{V}_{of1} &= \dot{V}_{do0} + \dot{V}_{of2} - \dot{V}_{do1} - \dot{V}_{of1} - \dot{V}_{evap1} \\ \dot{V}_{of2} &= \dot{V}_{do1} + \dot{V}_{of3} - \dot{V}_{do2} - \dot{V}_{of2} - \dot{V}_{evap2} \\ &\vdots \\ \dot{V}_{of,k} &= \dot{V}_{do,k-1} + \dot{V}_{of,k-1} - \dot{V}_{do,k} - \dot{V}_{of,k} - \dot{V}_{evap,k} \\ &\vdots \\ \dot{V}_{of,n} &= \dot{V}_{do,n-1} + \dot{V}_{if,n} - \dot{V}_{do,n} - \dot{V}_{of,n} - \dot{V}_{evap,n} \end{aligned} \quad <2>$$

wobei \dot{V}_{do0} die Einschleppung aus dem Behandlungsprozess und $\dot{V}_{if,n}$ der in die letzte Spüle eingespeiste Spülwasservolumenstrom sind. Die Gleichungen sind in umgekehrter Reihenfolge, das heißt vom n -ten abwärts zum ersten Überlauf-Volumenstrom zu berechnen.

Als Grundlage für ein Konzentrationsmodell einer Spülstufe entsprechend *Abbildung 1* dient die Massebilanz eines in der Spüllösung gelösten Stoffs:

$$dm/dt = \dot{m}_{di} + \dot{m}_{if} - \dot{m}_{do} - \dot{m}_{of} - \dot{m}_{ol} \quad <3>$$

Basierend auf der Konzentrationsdefinition

$$c = m/V \quad <4>$$

können die einzelnen Masseströme durch Konzentration und Volumenstrom ersetzt werden. Für ein Fließgleichgewicht (stationärer Betriebsfall) treten keine Masseänderungen mehr auf, sodass dann aus *Gleichung <3>* folgt:

$$dm/dt = 0 = c_{di}\dot{V}_{di} + c_{if}\dot{V}_{if} - c_{do}\dot{V}_{do} - c_{of}\dot{V}_{of} - c_{ol}\dot{V}_{ol} \quad <5>$$

Für eine n -stufige Gegenstromkaskade (*Abb. 2*) lassen sich unter Berücksichtigungen der Verkopplungen durch Verschleppung und Kaskadengegenstrom entsprechende Gleichungen für die einzelnen Spülstufen aufstellen:

$$\begin{aligned} 0 &= c_{do0}\dot{V}_{do0} + c_2\dot{V}_{of2} - c_{do1}\dot{V}_{do1} - c_1(\dot{V}_{of1} + \dot{V}_{ol1}) \\ 0 &= c_{do1}\dot{V}_{do1} + c_3\dot{V}_{of3} - c_{do2}\dot{V}_{do2} - c_2(\dot{V}_{of2} + \dot{V}_{ol2}) \\ &\vdots \\ 0 &= c_{do,n-1}\dot{V}_{do,n-1} + c_{if,n}\dot{V}_{if,n} - c_{do,n}\dot{V}_{do,n} \\ &\quad - c_n(\dot{V}_{of,n} + \dot{V}_{ol,n}) \end{aligned} \quad <6>$$

Hierbei ist c_{do0} die Konzentration der Verschleppung aus dem Behandlungsprozess und $c_{if,n}$ die Konzentration des eingespeisten Spülwassers, wobei letztere in der Regel Null ist.

Die n linearen *Gleichungen <6>* stellen den Zusammenhang zwischen den **Spülkonzentrationen** c_1 bis c_n und den **Verschleppungskonzentrationen** c_{do0} , c_{do1} bis $c_{do,n}$ in einer n -stufigen **Gegenstromkaskade** (mit Entnahmemöglichkeit an allen Spülstufen) dar. Nur unter bestimmten **Bedingungen stimmen die Spül- und Verschleppungskonzentrationen überein.**

3.2 Vortauchen

Wie einleitend beschrieben, ist das Durchführen eines Vortauchschritts eine **wichtige Modifikation** in der Anfahrreihenfolge der **Spülpositionen** (*Abb. 3*). Dieser Schritt lässt sich **leicht in die Modellgleichungen <2> und <6> einführen, da jeweils nur die erste Gleichung zu ändern ist:**

$$\dot{V}_{of1} = \dot{V}_{do1} + \dot{V}_{do0} + \dot{V}_{of2} - \dot{V}_{do1} - \dot{V}_{of1} - \dot{V}_{evap1} \quad <7>$$

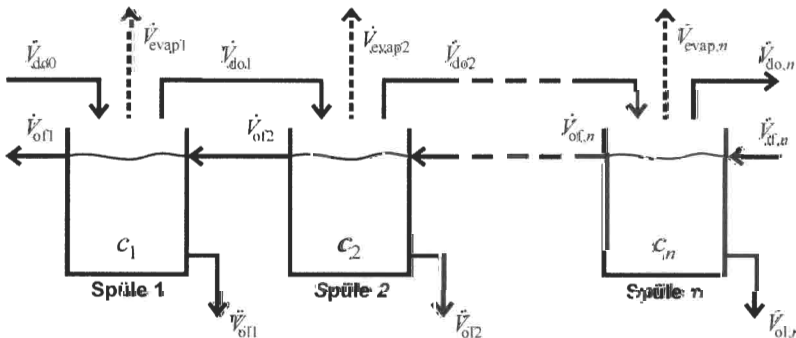


Abb. 2: Gegenstrom-Spülkaskade

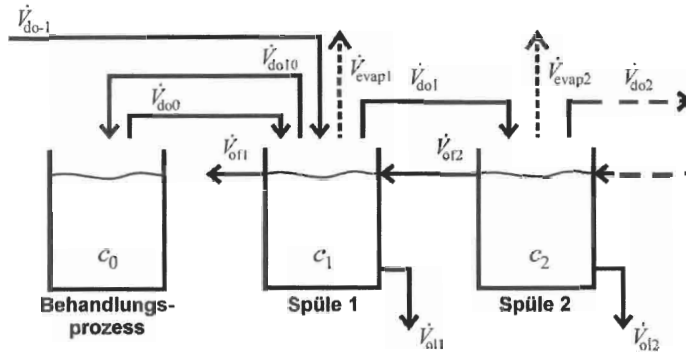


Abb. 3: Spülkaskade mit Vortauchschritt

$$0 - c_1 \dot{V}_{do-1} + c_{do0} \dot{V}_{do0} + c_2 \dot{V}_{of2} - c_{do10} \dot{V}_{do10} - c_{do1} \dot{V}_{do1} - c_1 (\dot{V}_{of1} + \dot{V}_{of1}) \quad <8>$$

Hierbei sind \dot{V}_{do-1} und c_1 der Verschleppung aus der dem Behandlungsprozess vorgelagerten Spüle sowie \dot{V}_{do10} und c_{do10} der Verschleppung durch den Vortauchschritt zuzuordnen.

3.3 Unvollständige Vermischung

Beim Spülvorgang kommt es zu einer Vermischung zwischen der Einschleppung und der Spüllösung. Im Idealfall einer vollständigen Vermischung erreicht die Ausschleppung den in der Spüle herrschenden Konzentrationswert. Ist die Spülzeit beziehungsweise die Spülintensität (insbesondere Hydrodynamik) hingegen nicht hinreichend, findet nur eine unvollständige Vermischung statt. Die nach unvollständiger Vermischung entstehende Verschleppungskonzentration c_{mx} kann nach Buczko [7] durch folgende Konvexkombination

$$c_{mx} = c + (c_{di} - c)\alpha \quad <9>$$

mit dem Koeffizienten der unvollständigen Vermischung $\alpha \in [0,1]$ modelliert werden. Der Fall $\alpha = 0$ entspricht dabei vollständiger Vermischung.

Die Verschleppungskonzentrationen nach nicht idealem Spülen lassen sich in einer Spülkaskade also mit folgenden Gleichungen berechnen:

$$\begin{aligned} c_{mx1} &= c_1 + (c_{do1} - c_1)\alpha_1 \\ c_{mx2} &= c_2 + (c_{do2} - c_2)\alpha_2 \\ &\vdots \\ c_{mx,n} &= c_n + (c_{do,n} - c_n)\alpha_n \end{aligned} \quad <10>$$

Erfolgt ein Vortauchschritt ist die Verschleppungskonzentration analog berechenbar:

$$c_{do10} = c_{mx10} = c_1 + (c_{-1} - c_1)\alpha_{10} \quad <11>$$

Für die Verschleppung aus dem Behandlungsprozess kann in diesem Fall zwar ebenfalls eine entsprechende Gleichung aufgestellt werden

$$c_{mx0} = c_0 + (c_{do10} - c_0)\alpha_0, \quad <12>$$

diese hat jedoch untergeordnete Bedeutung, da die Tauchzeit im Behandlungsprozess in der Regel hinreichend lang ist, um eine vollständige Vermischung (das heißt $\alpha_0 = 0$) zu erreichen.

3.4 Spritzspülen

Es soll der häufig angewendete Fall des kombinierten Tauch-Spritzspülens beschrieben werden. Dabei befindet sich nach dem im Allgemeinen nicht idealen Tauchspülen Ausschleppung mit der Konzentration c_{mx} auf der Ware. Es wird angenommen, die zum Spritzspülen verwendete Flüssigkeit enthalte Stoffe der Konzentration c_{st} . Der Ansatz

$$c_{do} = c_{mx} + (c_{st} - c_{mx})\beta \quad <13>$$

mit dem Spritzspülkoeffizienten $\beta \in [0,1]$ liefert eine einfache Möglichkeit zur Beschreibung des Spritzspülvorgangs [8]. Falls kein Spritzspülen erfolgt, ist $\beta = 0$. Bei $\beta = 1$ hat die auf der Ware verschleppte Lösung die Konzentration der Spritzspüllösung (ideales Spritzspülen).

3.4.1 Spritzspülkaskade

Wird die Ware über einer Spülkaskade mit Spüllösung aus der jeweils folgenden Spülstufe abgespritzt (Abb. 4), ergeben sich folgende Gleichungen zur Berechnung der Verschleppungskonzentrationen:

$$\begin{aligned} c_{do1} &= c_{mx1} + (c_2 - c_{mx1})\beta_1 \\ c_{do2} &= c_{mx2} + (c_3 - c_{mx2})\beta_2 \\ &\vdots \\ c_{do,n} &= c_{mx,n} + (c_{i,n} - c_{mx,n})\beta_n \end{aligned} \quad <14>$$

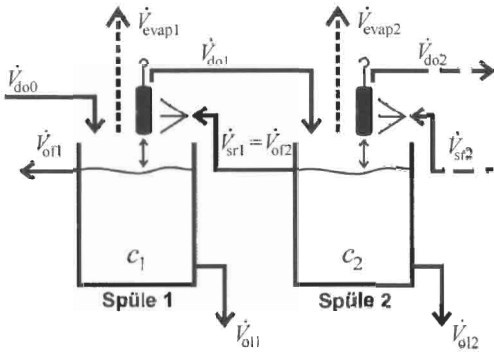


Abb. 4: Spritzspülkaskade

Zum Spritzspülen über der letzten Spüle wird im Normalfall Frischwasser verwendet. In diesem Fall gilt $c_{if,n} = 0$. Wird zusätzlich noch über dem Behandlungsprozess mit Lösung aus der ersten Spüle abgesprüht, gilt:

$$c_{d0} = c_{mx0} + (c_1 - c_{mx0})\beta_0 \quad <15>$$

Mitunter wird zum Spritzspülen über dem Behandlungsprozess auch frisches Spülwasser (mit der Konzentration $c_{if,n}$) verwendet. Dann gilt anstelle von Gleichung <15>:

$$c_{d0} = c_{mx0} + (c_{if,n} - c_{mx0})\beta_0 \quad <16>$$

Zur kompakten Beschreibung können die Gleichung <15> und <16> zusammengeführt werden:

$$c_{d0} = c_{mx0} + (\delta c_1 + (1 - \delta)c_{if,n} - c_{mx0})\beta_0 \quad <17>$$

wobei die beiden Fälle des Spritzspülens über dem Behandlungsprozess durch die Größe

- $\delta = 0$ bei frischem Spülwasser,
- $\delta = 1$ bei Wasser aus Spüle 1

unterschieden werden können.

3.5 Gesamtmodell

Werden für die n -stufige Kaskadenspüle nun die Gleichungen aller beschriebenen Fälle zusammengestellt, erhält man zur Beschreibung der Konzentrationsverhältnisse insgesamt $3n + 3$ lineare Gleichung:

- n Gleichungen aus den Massebilanzen der allgemeinen Fließkaskadenspüle: Gleichung <6> (modifiziert nach Gleichung <8> bei Vortauchen);
- $n + 2$ Gleichungen bei Berücksichtigung unvollständiger Vermischung: Gleichungen <10> bis <12>;

- $n + 1$ Gleichungen bei Spritzspülen: Gleichungen <14> und <17>.

In diesen Gleichungen treten $3n + 3$ unbekannte Konzentrationen auf:

- n Konzentrationen in den Spülstufen: c_1 bis c_n ,
- $n + 1$ Ausschleppkonzentrationen bei unvollständiger Vermischung: c_{mx0} bis $c_{mx,n}$,
- $n + 2$ Verschleppkonzentrationen: $c_{d0,0}$, $c_{d0,1}$, $c_{d0,2}$ bis $c_{d0,n}$.

Fasst man die angegebenen Gleichungen zusammen, so erhält man ein lineares Gleichungssystem der Form:

$$Ac = b \quad <18>$$

Hierbei enthält der Konzentrationsvektor

$$c = (c_1, \dots, c_n, c_{d0,0}, c_{d0,1}, c_{d0,2}, \dots, c_{d0,n}, c_{mx0}, \dots, c_{mx,n}) \quad <19>$$

alle gesuchten Konzentrationen. Die Matrix A (Matrixdimension: $(3n + 3) \times (3n + 3)$) enthält die gegebenen Volumenströme der Verschleppungen, Abflüsse und Verdunstungen sowie der daraus resultierenden Überläufe (nach Gleichung <2>) sowie die Koeffizienten unvollständiger Vermischung und die Spritzspülkoeffizienten. Diese Koeffizienten und die Konzentrationen des Behandlungsprozesses, der vorgelagerten Spüle sowie des Frischwassers sind im Vektor b enthalten. Die vollständige Struktur des linearen Gleichungssystems <18> ist in der Abbildung 5 dargestellt.

3.6 Berechnung der gesuchten Konzentrationen

Zur Berechnung des Vektors der gesuchten Konzentrationen c ist das lineare Gleichungssystem <18> zu lösen. Hierzu stehen eine Reihe effizienter Algorithmen zur Verfügung. In modernen mathematischen Rechnerwerkzeugen lassen sich solche Gleichungssysteme entsprechend einfach lösen. Bei einem matrizenorientierten Werkzeug stellt sich die Lösung von Gleichung <18> in der Form

$$c = A^{-1}b \quad <20>$$

dar. Das heißt, c wird durch Invertierung der Matrix A und Multiplikation mit dem Vektor b berechnet.

In den meisten Fällen sollen bei einem zu berechnenden Spülsystem nicht alle der oben beschriebenen Phänomene betrachtet werden. Ist die Lösung des Modells Gleichung <18> auf dem Rechner

