



Dissertation

**3D-Simulation des Transportverhaltens von
Mikroplastikpartikeln in einem Fließgewässer**

vorgelegt von:

Sarah Falk

im Fach Umweltsystemwissenschaft an der
Universität Osnabrück
Fachbereich Mathematik/Informatik/Physik

April 2023

Erstgutachter: Dr. Jörg Klasmeier
Zweitgutachterin: Prof. Dr. Karin Frank

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen beteiligten Personen bedanken, die mich bei der Forschung, Bearbeitung und Anfertigung meiner Dissertation und auch persönlich unterstützt haben.

Mein besonderer Dank gilt meinem Betreuer und Doktorvater Dr. Jörg Klasmeier. Seit meinem Bachelorstudium hat er mich auf meinem akademischen Weg begleitet, mich vieles gelehrt und Möglichkeiten zur Weiterentwicklung gezeigt. Dabei hat er mich in allem unterstützt, mir gut zugeredet und mir vor allem geholfen, meine Fähigkeiten und Stärken selber zu erkennen. In den unzähligen Stunden unserer Besprechungen, Diskussionen und Planungen hat er mir immer mit Rat und Tat zur Seite gestanden und dabei nie den Humor verloren. Seine Unterstützung in all den Jahren schätze ich sehr und es war fachlich wie auch menschlich eine große Bereicherung für mich, ihn kennenlernen zu dürfen.

Ebenfalls bedanke ich mich bei Prof. Dr. Karin Frank für ihre wichtige Aufgabe als Zweitprüferin. Im Rahmen meines Studiums durfte ich an ein paar ihrer Vorlesungen besuchen und schätze ihr fachliche Kompetenz sehr.

Weiterhin möchte ich mich bei den Mitarbeitenden des Instituts für Umweltsystemforschung und insbesondere bei der Arbeitsgruppe „Angewandte Systemwissenschaft“ bedanken. Durch die vielfältigen fachlichen und auch persönlichen Gespräche in den Seminaren und vor allem in den Kaffeepausen ist dort ein sehr angenehmes Arbeitsumfeld entstanden und der tägliche Austausch hat mich auf dem Weg zu meiner fertigen Arbeit in vielerlei Hinsicht bereichert.

Außerdem gilt mein Dank dem Pool für Frauenförderung des Gleichstellungsbüros der Universität Osnabrück für die finanzielle Unterstützung durch die Vergabe eines Abschlussstipendiums für Doktorandinnen. Dies ermöglichte mir, mich in den letzten Monaten ausschließlich auf das Schreiben meiner Arbeit konzentrieren zu können.

Dr. Jan-Maik Wissing danke ich für seine Unterstützung vor allem in der Anfangsphase meiner Promotion. Er half mir meine Kenntnisse im Bereich der Transportmodellierung auszubauen, zeigte mir neue Herangehensweisen zur Problemlösung und seine Tür stand für mich immer offen. Dabei schätze ich insbesondere seine Begeisterung für die Thematik und seine ausgeprägte Motivation, sein Wissen vermitteln zu wollen.

Ein großer Dank geht an meine Korrekturleserinnen Lara, Paula, Sina und Suse, die mir mit ihren Anmerkungen, Fragen und Hinweisen eine große Hilfe waren und mir den nötigen Blick von außen auf meine Arbeit gaben. Besonders möchte ich auch meiner Familie und meinen Freund:innen für ihre unermüdliche Stärkung und Motivation danken sowie für das stets offene Ohr für meine Gedanken. Dabei möchte ich zwei wichtige Menschen hervorheben, meine Großeltern Erika und Dieter, die mich in all meinen Vorhaben bedingungslos unterstützt und mir in unzähligen Situationen mit Ratschlägen und ihrer Lebenserfahrung zur Seite standen. Ohne sie wäre ich nicht der Mensch, der ich heute bin und ich bin stolz, ihre Enkelin zu sein.

Osnabrück, April 2023

Sarah Falk

Zusammenfassung

Mikroplastikpartikel in der (aquatischen) Umwelt stellen seit Jahren ein bekanntes und stetig wachsendes Umweltproblem dar. Eine Vielzahl von Studien weisen Mikroplastik ubiquitär in Gewässern nach, wo sie den verschiedensten Umweltprozessen ausgesetzt sind. Flüsse besitzen dabei eine besondere Rolle, da sie zum einen als Haupteintragspfade für Mikroplastikpartikel in Meere angesehen werden und zum anderen angenommen wird, dass der Großteil der in den Flüssen vorhandenen Partikel zurückgehalten wird. Die entsprechenden Partikel sedimentieren entlang der Fließstrecke und Flüsse können folglich als ein Reservoir für Mikroplastik fungieren. Über das tatsächliche Transportverhalten einzelner Mikroplastikpartikel in einer fließenden Strömung ist zum jetzigen Zeitpunkt wenig bekannt. Vorhandene Transportmodelle für die Simulation individueller Mikroplastikpartikel, sogenannte *Particle-Tracking*-Modelle, sind bisher hauptsächlich auf die marine Umgebung beschränkt. Das Ziel dieser Arbeit besteht daher darin, ein dreidimensionales Transportmodell für Mikroplastikpartikel in einer fließenden Strömung zu implementieren. Dazu wird in der Modellumgebung OpenFOAM ein hypothetischer Flussabschnitt abgebildet und im ersten Schritt die Strömungsdynamik für drei verschiedene mittlere Fließgeschwindigkeiten modelliert. In das eingeschwungene System werden anschließend Mikroplastikpartikel mit unterschiedlicher Dichte und Größe positioniert und deren Transport simuliert. Für das systematische Vorgehen werden drei Szenarien entwickelt, um die Auswirkungen der vier Parameter Dichte, Durchmesser, Startposition und mittlere Fließgeschwindigkeit auf das Transportverhalten zu untersuchen. In den Simulationen werden die drei Kunststoffarten Polyethylen mit hoher Dichte (PE-HD, $\rho_{\text{PE-HD}} = 970 \text{ kg/m}^3$), Polystyrol (PS, $\rho_{\text{PS}} = 1050 \text{ kg/m}^3$) und Polyvinylchlorid mit Weichmachern (PVC-P, $\rho_{\text{PVC-P}} = 1300 \text{ kg/m}^3$) betrachtet. Der Partikeldurchmesser variiert in den Szenarien zwischen $79 \mu\text{m}$ und $1,7 \text{ mm}$ und die Simulationszeiten liegen zwischen 60 und 120 Sekunden.

Die Simulationsergebnisse zeigen, dass insbesondere die Strömungsdynamik und die Startposition der Mikroplastikpartikel entlang der Fließstrecke sowie im Querschnitt den größten Einfluss auf das Transportverhalten besitzen. Der kurvenreiche Flussverlauf sowie künstliche Hindernisse in Form von hypothetischen Brückenpfeilern erzeugen ein stark inhomogenes Strömungsfeld mit teilweise rückwärts gerichteten Strömungen. Das resultierende Stromlinienbild weist eine Hauptströmung auf, die nahe den Rändern und in den Bereichen mit räumlichen Veränderungen durch Sekundärströmungen überlagert

wird, wodurch es zu lokal teils sehr variablen Fließgeschwindigkeiten kommt. Mikroplastikpartikel, deren Startposition sich innerhalb der Hauptströmung befindet, werden entlang der dort vorherrschenden Stromlinien transportiert. Hierbei zeigt sich bei zunehmender Dichte und Größe der Partikel ein steigender Einfluss der Auftriebs- und Sinkgeschwindigkeit, der bei PS- und PVC-Partikeln tendenziell zu einer Verkürzung der Transportstrecke aufgrund von Sedimentation führt. Darüber hinaus sind allgemeine Unterschiede im Transportverhalten von Mikroplastik mit unterschiedlicher Dichte vorhanden. PVC-P-Partikel mit Durchmessern kleiner 400 μm sinken trotz ihrer relativ hohen Dichte innerhalb der betrachteten Simulationszeiten kaum ab und können so über weitere Strecken transportiert werden. PE-HD-Partikel werden nicht zwangsläufig an die Wasseroberfläche aufgetrieben, sondern werden weitestgehend in den Wasserschichten transportiert, in denen sie eingebracht worden sind. Für PS-Partikel ist eine Vorhersage über ein allgemeines Transportverhalten nur bedingt möglich, da sie im gleichen Maße absinken oder transportiert werden können. Eine PS-Partikelwolke mit Startposition innerhalb der Hauptströmung weist eine Sortierung der Partikel in Abhängigkeit des Durchmessers auf, wodurch größere Partikel in tiefere Wasserschichten gelangen. Aufgrund der dort vorhandenen höheren Fließgeschwindigkeiten werden die Partikel entsprechend weiter transportiert als kleinere. Insgesamt zeigt sich, dass insbesondere lokale Strömungsbedingungen zu einem teilweise konträren Transportverhalten der Mikroplastikpartikel führen können und folglich dieser Aspekt bei Messkampagnen verstärkt berücksichtigt werden muss. Die Simulationsergebnisse lassen darauf schließen, dass die Repräsentativität von Mikroplastikproben in einem Fließgewässer stark abhängig vom Standort der Messung ist und die Morphologie des zu beprobenden Flusses daher unbedingt soweit wie möglich einbezogen werden sollte. Ebenfalls ist es ratsam, Proben an mehreren Stellen im Querschnitt sowie in der Tiefe zu entnehmen, um belastbare Aussagen über die Mikroplastikbelastung treffen zu können.

Abstract

Microplastic particles in the (aquatic) environment constitute a well-known and steadily growing environmental problem for years. A large number of studies show that microplastics are ubiquitously present in water bodies, where they are exposed to a wide variety of environmental processes. In this context, rivers play a special role, as they are considered one of the main input pathways for microplastic particles into the oceans, and it is also assumed that the majority of the particles present in rivers are retained. The corresponding particles sediment along the flow path and rivers can consequently also act as reservoirs for microplastics. At this stage, little is known about the actual transport behaviour of individual microplastic particles in a running stream. Existing transport models for the simulation of individual microplastic particles, so-called particle tracking models, are so far mainly limited to applications in the marine environment. The aim of this work is therefore to implement a three-dimensional transport model for microplastic particles in a river current. For this purpose, a hypothetical river section is mapped in the OpenFOAM model environment and, in the first step, the flow dynamics are modelled for three different average flow velocities. Microplastic particles with different densities and sizes are then positioned in the steady-state system and their transport is simulated. For the systematic approach, three scenarios are developed to investigate the effects of the four parameters density, diameter, starting position and mean flow velocity on the transport behaviour. In the simulations, three types of plastic materials, namely high-density polyethylene (PE-HD, $\rho_{\text{PE-HD}} = 970 \text{ kg/m}^3$), polystyrene (PS, $\rho_{\text{PS}} = 1050 \text{ kg/m}^3$) and polyvinyl chloride with plasticisers (PVC-P, $\rho_{\text{PVC-P}} = 1300 \text{ kg/m}^3$) are considered. The particle diameter varies in the scenarios between $79 \text{ }\mu\text{m}$ and 1.7 mm and the simulation times are between 60 and 120 seconds.

The simulation results show that especially the flow dynamics and the starting position of the microplastic particles along the flow path and in the cross-section have the greatest influence on the transport behaviour. The winding course of the river as well as artificial barriers in the form of hypothetical bridge piers result in a strongly inhomogeneous flow field with partially backward directed flows. The resulting streamline pattern is characterized by a main stream superimposed by secondary flows near the edges and in the areas with spatial changes, resulting in large variable local flow velocities. Microplastic particles, whose starting position is within the main stream, are transported along the prevailing streamlines. Here, with increasing density and size of the particles,

an increasing influence of the buoyancy and sinking velocity becomes apparent, which tends to shorten the total transport distance due to sedimentation in the case of PS and PVC particles. Furthermore, there are general differences in the transport behaviour of microplastics with different densities. PVC-P particles with diameters smaller than 400 μm hardly sink despite their relatively high density within the simulation times considered and can thus be transported over further distances. PE-HD particles do not necessarily float at the water surface, but are largely transported in the water layers in which they were introduced. For PS particles, a prediction about a general transport behaviour is only conditional, as they can sink or be transported to the same extent. A PS particle cloud with a starting position within the main flow shows a sorting of the particles depending on the diameter, whereby larger particles reach deeper water layers. Due to the higher flow velocities there, the particles are transported correspondingly further than smaller ones. Overall, it is shown that local flow conditions in particular can lead to a partially contrary transport behaviour of the microplastic particles and consequently this aspect must be taken into greater consideration when planning monitoring campaigns. The simulation results suggest that the representativeness of grab samples for microplastic analyses in a watercourse is strongly dependent on the sampling location. Thus, the morphology of the river should be considered as detailed as possible. It is also advisable to take samples at several points in the cross-section and in different depths in order to enable robust statements about the microplastic contamination.

Inhaltsverzeichnis

Danksagung	I
Zusammenfassung	III
Abstract.....	V
Abkürzungsverzeichnis.....	X
Symbolverzeichnis.....	XI
Abbildungsverzeichnis.....	XIII
Tabellenverzeichnis	XVI
1 Einleitung	1
2 Stand der Forschung	10
2.1 Modellierung von Emissionsfrachten	13
2.2 1D-Transportmodelle	14
2.3 Vertikales Konzentrationsprofil und Sinkverhalten.....	16
2.4 <i>Particle-Tracking</i> -Modelle	18
3 Ziel der Arbeit	21
4 Theoretische Grundlagen.....	23
4.1 Grundlagen der Hydrodynamik.....	24
4.2 Advektions-Dispersions-Reaktions-Gleichung.....	25
4.3 Sinkgeschwindigkeit von Partikeln (vertikale Verteilung).....	27
4.4 Mathematische Beschreibung der Fluidynamiken	31
4.5 Zweiphasenströmung	33
4.6 Lagrange-Ansatz für <i>Particle-Tracking</i> -Modelle	35
5 OpenFOAM.....	38
5.1 Pre-processing: Aufbau und Datenstruktur einer Simulation	39
5.1.1 Erzeugen des Modellgitters	41
5.1.2 Randbedingungen	41
5.2 Solver	42
5.2.1 interFoam.....	42
5.2.2 icoUncoupledKinematicParcelFoam	43
5.3 Lösungsverfahren.....	43
5.4 Ergänzende Funktionalitäten.....	44
5.5 Post-processing: ParaView.....	45
6 Strömungsdynamik der künstlichen Freiland-Fließrinne	47
6.1 Experimenteller Ansatz.....	47
6.1.1 Messung der Fließgeschwindigkeit	48

6.2 Simulation in OpenFOAM	49
6.2.1 Modellaufbau	49
6.2.2 Simulation der Strömungsdynamik.....	51
6.2.3 Simulation der Dispersion.....	52
7 Mikroplastikpartikel in einem modellhaften Flussabschnitt.....	54
7.1 Modell des theoretischen Flusslaufes	54
7.2 Quasi-stationärer Zustand.....	57
7.3 Simulation des Transportverhaltens von Mikroplastikpartikeln	58
7.3.1 Vorgehen bei der Modellierung	58
7.3.2 Statische Simulation des Auftriebs- und Sinkverhaltens	59
7.3.3 Testsimulationen als Vorversuche	60
7.4 Transport der Mikroplastikpartikel in der fließenden Strömung.....	61
7.4.1 Szenario 1: Positionierung	61
7.4.2 Szenario 2: Partikeldurchmesser.....	63
7.4.3 Szenario 3: Partikelwolke	64
7.5 Ermittlung der Transportstrecke	65
8 Ergebnisse und Diskussion	67
8.1 Geschwindigkeitsfeld der künstlichen Freiland-Fließrinne.....	67
8.2 Simulation der Modell-Fließrinne	70
8.2.1 Einschwingimulationen	70
8.2.2 Implementation einer Tracersimulation.....	77
8.2.3 Eignung der Modell-Fließrinne für die Untersuchung von Partikeltransport.....	79
8.3 Strömungsdynamik des Modellflusses	80
8.4 Plausibilitätsprüfung des Partikeltransportes.....	89
8.4.1 Auftriebs- und Sinkgeschwindigkeiten.....	89
8.4.2 Auswertung der Vorversuche	91
8.4.3 Reproduzierbarkeit der Simulationen	95
8.5 Simulationen von Mikroplastikpartikeln in der fließenden Strömung.....	96
8.5.1 Einfluss des Partikeldurchmessers.....	97
8.5.2 Einfluss der Partikeldichte	106
8.5.3 Einfluss der mittleren Fließgeschwindigkeit der Strömungsdynamik.....	110
8.5.4 Einfluss der Positionierung der Partikel innerhalb der Geometrie	115
8.6 Realitätsbezug der Simulationsergebnisse.....	120
9 Schlussfolgerungen	124
10 Ausblick	132

Literaturverzeichnis	XVII
Anhang.....	XXV
Eidesstattliche Erklärung	XXX

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Bedeutung
AB	Anfangsbedingung
ADR-Gleichung	Advektions-Dispersions-Reaktions-Gleichung
CFD	Computational fluid dynamics
ChesROMS	Chesapeake Bay ROMS Community Model
CSF	Corey Shape Factor
DUFLOW	Dutch Flow Model
FSA	Fließ- und Stillgewässer-Simulationsanlage
KV	Kontrollvolumen
MAC	Marker and Cell
MARPOL	Internationales Übereinkommen zur Verhütung der Meeresverschmutzung durch Schiffe
MSRL	Meeresstrategierahmenrichtlinien
NGO	Non-governmental organization
OpenFOAM	Open Field Operation And Manipulation
PE	Polyethylen
PE-HD	Polyethylen mit hoher Dichte
PET	Polyethylenterephthalat
PIMPLE	Kombination aus SIMPLE und PISO
PISO	pressure-implicit split operator
PS	Polystyrol
PTM	Particle Tracking Model
PVC-P	Polyvinylchlorid mit Weichmachern
RB	Randbedingung
ROMS	Regional Ocean Modelling System
SIMPLE	semi-implicit method for pressure-linked equations
UNEP	United Nations Environmental Programm
VOF	Volume of Fluid

Symbolverzeichnis

Symbol	Definition	Einheit
A	Querschnittsfläche	m^2
A_i	Querschnittsfläche der i-ten Zelle	m^2
A_{ges}	Gesamte Querschnittsfläche	m^2
a	Seitenlänge	m
a	Skalenparameter	-
α	Volumenanteil der Phase	-
α_i	Volumenanteil der Phase in der i-ten Zelle	-
b	Formparameter	-
b	Seitenlänge	m
C	Konzentration	kg/m^3
C_D	Widerstandsbeiwert	-
c	Seitenlänge	M
CSF	Corey Shape-Faktor	-
D	Dispersionskoeffizient	m^2/s
d	Durchmesser	M
d^*	Dimensionsloser Durchmesser	-
dV	Volumenelement	m^3
Δ	Größtfehler	-
\vec{f}	Diverse Kräfte	Nm
F_a	Verteilungsfunktion	-
F_d	Reibungskraft	Nm
F_g	Beschleunigungskraft	Nm
g	Erdbeschleunigung	m/s^2
I	(Konstanter) Eintrag	$kg/(m^3 s)$
l	Länge	m
λ	Ratenkonstante	s^{-1}
λ_{max}	Wellenlänge	nm
m_0	Masse zum Zeitpunkt t_0	kg
N_{adv}	Stofffluss der Advektion	kg/s
n_T	Anzahl der Zeitschritte	-
N_{disp}	Stofffluss der Dispersion	kg/s
η	Dynamische Viskosität	$kg/(m s)$
∇	Nabla-Operator	-
P	Rouse-Nummer	-
p	Druck	Pa
p_0	Druck bei $t = 0$	Pa
\vec{p}	Druckvektor	Pa
\vec{p}_0	Druckvektor bei $t = 0$	Pa
Re	Reynolds-Zahl	-

r	Radius	m
ρ	Dichte	kg/m ³
ρ_f	Dichte des Fluids	kg/m ³
ρ_p	Dichte des Partikels	kg/m ³
ρ_{PE-HD}	Dichte von PE-HD	kg/m ³
ρ_S	Dichte von PS	kg/m ³
ρ_{PVC-P}	Dichte von PVC-P	kg/m ³
ϕ	Winkel	°
s_i	Euklidische Distanz des i-ten Zeitschrittes	m
S_p	Transportstrecke eines Partikels	m
t	Zeit	s
t_0	Startzeitpunkt	s
u	Fließgeschwindigkeit	m/s
u_0	Fließgeschwindigkeit bei $t = 0$	m/s
\vec{u}	Geschwindigkeitsvektor	m/s
\vec{u}_0	Geschwindigkeitsvektor bei $t = 0$	m/s
\vec{u}_i	Geschwindigkeitsvektor der i-ten Zelle	m/s
u_i	i-te Geschwindigkeitskomponente	m/s
u_{mittel}	Gemittelte Fließgeschwindigkeit	m/s
u_s	Sinkgeschwindigkeit	m/s
u_x	Geschwindigkeitskomponente	m/s
u_y	Geschwindigkeitskomponente	m/s
u_z	Geschwindigkeitskomponente	m/s
u^*	Dimensionslose Sinkgeschwindigkeit	-
ν	Kinematische Viskosität	m ² /s
ω	Winkelgeschwindigkeit	rad/s
X^n	Positionsvektor des n-ten Partikels	m
X_0	Positionsvektor bei $t = 0$	m
x	Ort	m
x_i	i-ter Raumpunkt	m
x_0	Anfangsbedingung für den Ort	m
y	Ort	m
z	Ort	m

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 5.1: Schematischer Aufbau der Struktur eines Fallordners in OpenFOAM (eigene Darstellung).	40
Abbildung 6.1: Schematischer Aufbau der künstlichen Fließrinne.....	48
Abbildung 6.2: Geometrie der Modell-Fließrinne mit dem Wasser im Ausgangszustand und Markierung der Fließrichtung.....	50
Abbildung 7.1: Modellflusslauf in der Draufsicht, Fließrichtung am Einlass durch Pfeil sowie Auslass gekennzeichnet.	55
Abbildung 7.2: Querschnitt des Modellflusslaufes dargestellt in Abhängigkeit des Volumenanteils alpha.water (Wasser = 1, blau, Luft = 0, rot).	56
Abbildung 7.3: Startposition der Mikroplastikpartikel im Modellfluss im Szenario 1 in der Draufsicht.	62
Abbildung 7.4: Startposition der Mikroplastikpartikel in Szenario 2 in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [mm].	63
Abbildung 7.5: Startposition der Mikroplastikpartikel im Szenario 3 in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [m].	65
Abbildung 8.1: Geschwindigkeitsmessungen [m/s] der Freiland-Fließrinne im Querschnitt für die langsame (a), mittlere (b) und schnelle (c) Frequenz des Antriebes in Fließrichtung.	69
Abbildung 8.2: Fließgeschwindigkeit \vec{u} [m/s] an der Wasseroberfläche für den Endzeitpunkt der Einschwingsimulation mit der mittleren Umdrehungsgeschwindigkeit und Kennzeichnung von vier Stellen für die Querschnittsbetrachtung.	71
Abbildung 8.3: Gemittelte Fließgeschwindigkeit u_{mittel} [m/s] des gesamten Wasserkörpers in der Modell-Fließrinne in Abhängigkeit der Zeit t [s].	72
Abbildung 8.4: Stromlinien des Geschwindigkeitsfeldes \vec{u} [m/s] im Endzustand der mittleren Einschwingsimulation.	74
Abbildung 8.5: Fließgeschwindigkeit u [m/s] im Querschnitt des Modellflusses in Fließrichtung kurz hinter dem Schneckenpumpenantrieb (a), 15 m hinter dem Antrieb (Messpunkt der Geschwindigkeitsmessung) (b), innerhalb der ersten (c) und zweiten 180°-Kurve (d).	74
Abbildung 8.6: Vergleich des simulierten Querschnittprofils der Fließgeschwindigkeit [m/s] in der Modell-Fließrinne mit gemessenen Werten in der Freiland-Fließrinne (rote Punkte) für die mittlere Umdrehungsgeschwindigkeit.	76
Abbildung 8.7: Simulierte Tracerausbreitung in der langsamen Strömung der Modell-Fließrinne nach der Einbringung in der Gesamtansicht (oben) sowie horizontale (Mitte) und vertikale (unten) Darstellung im Ausschnitt.....	78
Abbildung 8.8: Simulierte Tracerausbreitung in der langsamen Strömung der Modell-Fließrinne nach 100 Sekunden Realzeit in der Gesamtansicht (oben) sowie horizontale (Mitte) und vertikale (unten) Darstellung im Ausschnitt.	79
Abbildung 8.9: Fließgeschwindigkeit \vec{u} [m/s] an der Wasseroberfläche für den Endzeitpunkt der Einschwingsimulation mit der mittleren Einlassgeschwindigkeit und Kennzeichnung von fünf Stellen für die Querschnittsbetrachtung.....	81
Abbildung 8.10: Gemittelte Fließgeschwindigkeit u_{mittel} [m/s] des gesamten Wasserkörpers in Abhängigkeit der Zeit t [s] für die mittlere Einlassgeschwindigkeit.....	82
Abbildung 8.11: Stromlinien des Geschwindigkeitsfeldes \vec{u} [m/s] im Endzustand der mittleren Einschwingsimulation.	83

Abbildung 8.12: Fließgeschwindigkeit \vec{u} [m/s] im Querschnitt des Modellflusses in Fließrichtung in der ersten Kurve (a), 2 m vor dem ersten Säulenpaar (b), innerhalb der 180°-Kurve (c), ca. 5 m hinter dem zweiten Säulenpaar (d) und 2 m vor dem Auslass (e)..	84
Abbildung 8.13: Fließgeschwindigkeit \vec{u} [m/s] der Zellen des Modellflussabschnittes im Endzustand der mittleren Einschwingungssimulation mit einem Volumenanteil $\alpha_{\text{water}} = [0,1; 0,9]$ sowie den Stellen der Geschwindigkeitsprofile.....	87
Abbildung 8.14: Querschnitt des Flusses in Abhängigkeit des Volumenanteils α_{water} im Ausgangszustand (links) und im quasi-stationären Zustand (rechts) (Legende: blau = Wasser; rot = Luft, weiß = Grenzschicht).....	88
Abbildung 8.15: Vergleich der berechneten Sinkgeschwindigkeiten [m/s] nach Stoke (blau) und Dietrich (gelb) mit den in OpenFOAM-Simulationen (rot) für PS.....	90
Abbildung 8.16: Vergleich der berechneten Sinkgeschwindigkeiten [m/s] nach Stoke (blau) und Dietrich (gelb) mit den in OpenFOAM-Simulationen (rot) für PVC-P.....	91
Abbildung 8.17: Vergleich der berechneten Sinkgeschwindigkeiten [m/s] nach Stoke (blau) mit den in OpenFOAM-Simulationen (rot) für PE-HD.....	91
Abbildung 8.18: Vergleich der Mikroplastikpartikel (PS) in der langsamen (rot), mittleren (weiß) und schnellen Strömung (türkis) im Startzustand (oben) und nach 60 s Simulationsdauer (unten) in der Draufsicht.....	93
Abbildung 8.19: Vergleich zwischen PS-Partikeln (weiß) und PVC-P-Partikeln (türkis) in der mittleren Strömung im Startzustand (oben) und nach 60 s Simulationsdauer (unten) in der Draufsicht.....	94
Abbildung 8.20: Vergleich zwischen PS-Partikeln in der langsamen (rot) und PVC-P-Partikeln in der mittleren Strömung (türkis) in der Draufsicht mit den jeweiligen Trajektorien.....	95
Abbildung 8.21: Vergleich der PS-Partikel im Endzustand des ersten (rot) und zweiten Simulationsdurchlaufes (weiß).....	96
Abbildung 8.22 Transportstrecke [m] der PS- (rot) und PVC-P-Partikel (blau) in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [μm] für die mittlere (links) und die schnelle Strömung (rechts).....	98
Abbildung 8.23: PS-Partikel des Szenario 2 in der mittleren Strömung nach 10 s (oben) und 60 s (unten) in farblicher Kennzeichnung des Partikeldurchmessers d [mm].....	100
Abbildung 8.24: Endzustand der PVC-P-Partikel in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [m] in der schnellen Strömung mit den zugehörigen Trajektorien der Partikel und markierter Trajektorie des kleinsten Partikels mit $d = 79 \mu\text{m}$	101
Abbildung 8.25: Transportstrecke [m] der PS-Partikel in der mittleren Strömung des Szenario 3 in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [m].....	102
Abbildung 8.26: PS-Partikel des Szenario 3 nach 60 Sekunden Echtzeit in der mittleren Strömung in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers.....	103
Abbildung 8.27: Box-Plots der Transportstrecken [m] für PE-HD, PS und PVC-P des Szenario 1 in der mittleren Strömung für den Partikeldurchmesser 1 mm (rot) und 330 μm (blau).....	105
Abbildung 8.28: Endzustand von PE-HD (rot), PS (weiß) und PVC-P (türkis) mit $d = 330 \mu\text{m}$ in der mittleren Strömung des Szenario 1.....	107
Abbildung 8.29: Partikelbahnen (weiß) und Startpositionen (rot) von PE-HD des Szenario 1 mit $d = 1 \text{ mm}$ in der mittleren Strömung.....	108
Abbildung 8.30: PE-HD-Partikel des Szenario 3 nach 60 Sekunden Echtzeit in der mittleren Strömung in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [m].....	108
Abbildung 8.31: PS- (rot) und PVC-P-Partikel (türkis) nach 30 Sekunden Echtzeit in der mittleren Strömung in Abhängigkeiten des Partikeldurchmessers d [m].....	109

Abbildung 8.32: Transportstrecken [m] als Box-Plot für PS (rot) und PVC-P-Partikel (blau) verschiedener Durchmesser (n=20) in der mittlere (links) und schnellen (rechts) Strömung.	110
Abbildung 8.33: Transportstrecken [m] als Box-Plots von PE-HD (schwarz), PS (rot) und PVC-P (blau) mit $d = 1$ mm in den drei Strömungen aus Szenario 1.....	111
Abbildung 8.34: Endzustände der PS-Partikel des Szenario 2 in der mittleren (rot) und schnellen (türkis) Strömung in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [m].	112
Abbildung 8.35: Relative Transportstrecken von PS (rot) und PVC-P (blau) aus Szenario 2 in Abhängigkeit des Durchmessers d [μm].	113
Abbildung 8.36: Relative Transportstrecken von PE-HD (links) und PS (rechts) aus Szenario 3 in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers [m].	114
Abbildung 8.37: Trajektorien von PS mit $d = 1$ mm in der mittleren Strömung mit jeweiliger Startposition (rot) der Partikel 1-10.....	117
Abbildung 8.38: Relative Transportstrecken der PS- (rot) und PVC-P-Partikel (blau) des Szenario 1 mit $d = 1$ mm (links) und $d = 330$ μm (rechts).	118
Abbildung 8.39: Trajektorien der PS-Partikel des Szenario 3 in der langsamen (links) und mittleren Strömung (rechts) nach 120 Sekunden Simulationszeit.....	119
Abbildung A.1: Vergleich des simulierten Querschnittsprofils der Fließgeschwindigkeit in der Modell-Fließrinne mit gemessenen Werten in der Freiland-Fließrinne (rote Punkte) für die langsame Umdrehungsgeschwindigkeit.	XXV
Abbildung A.2: Vergleich des simulierten Querschnittsprofils der Fließgeschwindigkeit in der Modell-Fließrinne mit gemessenen Werten in der Freiland-Fließrinne (rote Punkte) für die schnelle Umdrehungsgeschwindigkeit.	XXV
Abbildung B.1: Simulierte Tracerausbreitung in der mittleren Strömung der Modell-Fließrinne nach 100 Sekunden Realzeit in der Gesamtansicht (oben) sowie horizontale (Mitte) und vertikale (unten) Darstellung im Ausschnitt.	XXVI
Abbildung B.2: Simulierte Tracerausbreitung in der schnellen Strömung der Modell-Fließrinne nach 11 Sekunden Realzeit in der Gesamtansicht (oben) sowie horizontale (Mitte) und vertikale (unten) Darstellung im Ausschnitt.	XXVI
Abbildung C.1: Gemittelte Fließgeschwindigkeit umittel [m/s] des gesamten Wasserkörpers in Abhängigkeit der Zeit t [s] für die langsame Einlassgeschwindigkeit.	XXVII
Abbildung C.2: Gemittelte Fließgeschwindigkeit umittel [m/s] des gesamten Wasserkörpers in Abhängigkeit der Zeit t [s] für die schnelle Einlassgeschwindigkeit.	XXVII
Abbildung D.1: PE-HD-Partikel des Szenario 3 nach 60 Sekunden Echtzeit in der mittleren Strömung in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [m].	XXVIII
Abbildung D.2: PVC-P-Partikel des Szenario 3 nach 60 Sekunden Echtzeit in der mittleren Strömung in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [m].	XXVIII
Abbildung D.3: Trajektorien von PVC-P mit $d = 1$ mm in der mittleren Strömung mit jeweiliger Startposition (rot) der Partikel 1-10.....	XXIX
Abbildung D.4: Relative Transportstrecken der PE-HD-Partikel des Szenario 1 mit $d = 1$ mm (rot) und $d = 330$ μm (blau).....	XXIX

Tabellenverzeichnis

Tabelle 7.1: Randbedingungen der Flussgeometrie für die Zustandsgrößen Fließgeschwindigkeit \vec{u} , Druck \vec{p} und Volumenanteil <i>alpha.water</i>	57
Tabelle 8.1: Eingestellte Frequenz des Schneckenpumpenantriebes und gemessen Zeit für zehn Umdrehungen der Schraube sowie daraus berechnete Winkelgeschwindigkeit ω [rad/s]inklusive Größtfehler	68
Tabelle 8.2: Mittlere Fließgeschwindigkeiten [m/s] der quasi-stationären Strömung der Modell-Fließrinne und daraus errechnete Reynolds-Zahlen sowie minimale und maximale, gemessene Fließgeschwindigkeit [m/s] in der Freiland-Fließrinne für die drei Umdrehungsgeschwindigkeit des Schneckenpumpenantriebes.	73
Tabelle 8.3: Errechnete Reynolds-Zahlen aus den mittleren Fließgeschwindigkeiten u_{mittel} [m/s] der quasi-stationären Strömungen des Flussabschnittes.	83
Tabelle 8.4: Parametrisierung der Simulationen für die drei entwickelten Szenarien zum Transportverhalten der Mikroplastikpartikel.....	97

1 Einleitung

Die Verwendung von Kunststoffen für verschiedenste Zwecke ist aus der heutigen Zeit nicht mehr wegzudenken. Aufgrund der vielfältigen Eigenschaften stellen sie einen essentiellen Werkstoff dar, der je nach Bedarf angepasst werden kann. In den EU-Staaten, zuzüglich Norwegen, Großbritannien und der Schweiz, betrug die Nachfrage an Kunststoff in der Industrie im Jahr 2020 alleine 49,1 Millionen Tonnen. Dabei wurden insgesamt rund 70 % des produzierten Rohstoffes für Verpackungen jeglicher Art, als Baustoff oder in der Automobilindustrie verwendet (PlasticsEurope 2021).

Polymere besitzen basierend auf ihrer chemischen Zusammensetzung eine sehr hohe Langlebigkeit, die insbesondere für Produkte, von denen eine lange Lebensdauer erwartet wird, von großem Vorteil ist. Knapp 40 % der produzierten Kunststoff-Rohmaterialien werden für Verpackungen verwendet und stellen folglich überwiegend Einwegprodukte dar, die nach meist einmaliger Benutzung entsorgt werden. Bei richtiger Entsorgung können sortenreine Kunststoffe zwar recycelt werden, 2020 betrug der Anteil an wiederaufbereiteten Plastikabfällen in Europa (inklusive Norwegen, Großbritannien und der Schweiz) jedoch nur 35 %. Der Großteil des Plastikmülls muss derzeit noch in Verbrennungsanlagen oder Deponien entsorgt werden (PlasticsEurope 2022). Ebenso wird ein nicht unerheblicher Teil in andere Länder – vorwiegend nach Asien – exportiert (EIA 2021), wovon große Mengen auf illegalen Deponien und damit in die Umwelt gelangen (Chen et al. 2021). Eine Erhöhung des Anteils an wiederverwertbarem Plastik sollte daher unbedingt forciert werden, um den Lebenszyklus dieses Werkstoffes zu verlängern und Rohstoffe einzusparen. Dabei kann eine fachgerechte und korrekt getrennte Entsorgung zu einer bis zu 13-mal höheren Recyclingrate führen (PlasticsEurope 2022).

Ein beträchtlicher Anteil des Plastikmülls gelangt auf verschiedene Wege in die Umwelt und gefährdet die dortige Flora und Fauna. Insbesondere die Belastung der aquatischen Umwelt durch Plastikabfälle stellt seit Jahren ein ernstzunehmendes (UNEP 2021) und stetig wachsendes Problem der heutigen Zeit dar (Moore 2008; Borrelle et al. 2020). Bereits Ende der 90er Jahre wurde die erste sogenannte „Müllinsel“ im Nordpazifikwirbel entdeckt (engl. *north pacific gyre*), von denen noch weitere existieren und sich fortlaufend vergrößern. Dabei handelt es sich um teils mehrere Quadratkilometer große

Ansammlungen von Plastikabfällen, welche sich durch Meeresströmungen zu einer Art schwimmenden Plattform zusammengefügt haben (Moore 2003).

Exakte Angaben über die eingebrachten Mengen und die daraus resultierende Umweltverschmutzung sind bis heute jedoch kaum machbar. Beispielsweise erfolgt die Quantifizierung von Plastikmengen in Gewässern über das Einsammeln der Abfälle mit Netzen, visuelles Zählen bei Beobachtungen (z.B. von Brücken) oder über Luftaufnahmen. Da es sich bei den bisher angewendeten Methoden hauptsächlich um manuelle Vorgehensweisen handelt, werden vermehrt Techniken erprobt, die automatisiert ablaufen und mit Hilfe maschineller Lernalgorithmen Plastikabfälle identifizieren und kategorisieren können (van Emmerik & Schwarz 2019). Schmidt et al. (2018) entwickelten zum Beispiel ein Verfahren zur halbautomatischen Identifizierung von Mikroplastikpartikeln, in dem bildgebende Kurzwellen-Infrarot-Spektroskopie mit einem multitemporalen Erhebungskonzept kombiniert angewendet wird. Durch die vorhandene Vielfalt an Mess- und Monitoringmethoden entsteht jedoch das Problem, dass sie teilweise sehr unterschiedliche Ergebnisse liefern und aufgrund der abweichenden Arten der Protokollierung und Klassifizierung schwer vergleichbar sind (UNEP 2020).

Schätzungen und Modellierungen zufolge befanden sich 2021 etwa 150 Millionen Tonnen Plastik in den Weltmeeren. Die Mengen in Flüssen und Seen sind hierbei noch nicht berücksichtigt. Jährlich gelangen über verschiedene Eintragungspfade weitere 4,8 bis 12,7 Millionen Tonnen hinzu (Europäisches Parlament 2020), wobei diese Emissionen ebenfalls einem kontinuierlichen Wachstum unterliegen (Borelle et al. 2020) und in den kommenden Jahren um bis zu einer Größenordnung steigen könnten (Jambeck et al. 2015). Gemäß den Berechnungen von Schweizer Forschenden beträgt der jährliche Plastikmüll eintrag in die Umwelt in der Schweiz mindestens 630 g pro Person (Kawecki und Nowack 2019). Hochgerechnet auf die Weltbevölkerung liegt diese Angabe innerhalb der Grenzen der Emissionsmengen, die vom Europäischen Parlament angegeben werden.

Insbesondere die Emissionspfade der Plastikabfälle sind von großer Bedeutung, wenn das Problem der Umweltbelastung durch Kunststoffabfälle angegangen wird. Plastikmüll wird vor allem durch unsachgemäße Entsorgung (engl. *Littering*) direkt in die Umwelt eingetragen. Auf dem Festland geschieht dies meist durch achtloses Wegwerfen von Abfällen, oftmals auch direkt in ein Gewässer. Am Flussufer oder am Strand entsorgte

Abfälle können durch Umwelteinflüsse wie Wind, Gezeitenströme oder temporäre Überflutungen in die aquatische Umwelt transportiert werden (Kataoka et al. 2015, Li et al. 2016).

Studien zeigen, dass Flüsse eine der Haupteintragsquellen von Plastikmüll in die Meere darstellen (Schmidt et al. 2017, Lebreton et al. 2017). Meijer et al. (2021) berechnen mit einem probabilistischen Modellansatz, dass etwa 1.000 Flüsse für 80 % der weltweit jährlichen Einträge von Plastik in die Ozeane verantwortlich sind. Hier handelt es sich in erster Linie um Länder im asiatischen Raum, wobei die Philippinen, Indien, Malaysia und China die Rangliste der größten Emissionsmengen anführen. Folglich wird davon ausgegangen, dass terrestrische Plastikabfälle einen sehr großen Anteil an der Belastung der aquatischen Umwelt ausmachen (Li et al. 2016; van Emmerik et al. 2022a). Neben der Funktion als Transportwege in die Meere, fungieren Flüsse auch als Reservoir für Plastikmüll. Es wird davon ausgegangen, dass nur ein geringer Anteil des Plastiks, das übers Land in die Flüsse gelangt, auch letztlich in die Ozeane transportiert wird. Abfälle können in Flüssen über mehrere Jahre bis hin zu Jahrzehnten verweilen und sind dort den verschiedensten Umweltprozessen ausgesetzt (van Emmerik et al. 2022a).

Außerdem wird ebenfalls ein großer Anteil an Plastikabfällen direkt von Schiffen in die marine Umwelt emittiert. Obwohl über das „Internationale Übereinkommen zur Verhütung der Meeresverschmutzung durch Schiffe“ (MARPOL 1973) das Einbringen von Müll ins Meer untersagt ist, stellen weiterhin insbesondere illegale Abfallentsorgungen und Verluste von Fangnetzen ein Problem dar (EUNOMIA 2016, Boucher & Billard 2019). Letztere werden als sogenannte „Geisternetze“ bezeichnet und treiben unterhalb der Wasseroberfläche (Gajanur & Jaafar 2022). Dort sind sie ein großes Risiko für eine Vielzahl von Meereslebewesen, die sich in den Netzen verfangen können und anschließend verenden. Weiterhin wird Plastik von Tieren oftmals mit ihrer Nahrung verwechselt. Größere und kleinere Partikel werden gefressen und reichern sich in den Mägen an, sobald diese nicht vollständig wieder ausgeschieden werden. Je mehr Plastik sich in den Mägen von Tieren befindet, desto weniger Nahrung können sie aufnehmen und verhungern letztlich (Di Benedetto & Awabdi 2014). Eins der bekanntesten Beispiele ist der Eissturmvogel. Bereits in den 80er Jahren wurden Kadaver der Vögel gefunden, deren Mägen fast vollständig mit Plastikabfällen gefüllt waren (van Franeker 2011). Zudem gibt es eine Vielzahl an Funden von verendeten Walen und Delphinen (Baulch & Perry 2014) sowie Schildkröten (Mascarenhas et al. 2004), deren Mägen verschiedenste

Kunststoffteile beinhalteten. Lederschildkröten bspw. ernähren sich überwiegend von Quallen. Immer häufiger verwechseln die Tiere schwimmende Plastiktüten mit ihrer Beute, fressen stattdessen die für sie unverdauliche Nahrung (Tüten) und können daran versterben (Mrosovsky et al. 2009).

Plastik ist in der marinen Umwelt zudem einer Vielzahl von Umweltprozessen ausgesetzt. Witterungseffekte wie Wind, UV-Strahlung oder der Salzgehalt des Wassers können die Materialien verändern und porös werden lassen (Corcoan et al. 2009), wodurch sie anfällig für das „Zerbrechen“ in immer kleinere Partikel werden (Fragmentierung). Zudem können sich Organismen leicht auf angerauten Oberflächen anreichern. Handelt es sich dabei um Plastikpartikel, können sie ihnen als Transportvektor zur Überwindung größerer Strecken dienen und damit zu ihrer Ausbreitung beitragen (Gregory 2009, Sigler 2014). Meeresströmungen und auch Windverfrachtungen spielen hierfür unter anderem eine große Rolle (Neumann et al. 2014). Angesichts der möglichen negativen Effekte wurden Abfälle im Meer im Allgemeinen und Plastikmüll im Speziellen in die EU-Meeresstrategie-Rahmenrichtlinie (MSRL 2008) aufgenommen. Das Ziel der Vereinbarung besteht darin, den guten Zustand der Meeresumwelt zu erreichen und zu halten. Die Mitgliedsstaaten verpflichten sich dazu, Maßnahmen zum Erreichen des „guten Zustandes“ vorzunehmen und deren Wirksamkeit in geeigneter Weise zu prüfen und mitzuteilen. Im ersten Schritt wird dazu gefordert, eine umfassende Bestandsaufnahme und die Beschreibung des Zustandes der Gewässer aller Beteiligten Staaten durchzuführen. Im Rahmen dessen werden vielfältige Messkampagnen zur Beprobung von Gewässern hinsichtlich der Quantifizierung von Plastik vorgenommen und ausgewertet.

Bereits seit über 25 Jahren werden an mindestens fünf Strandabschnitten der Nordsee vierteljährlich Müllaufnahmen durchgeführt, um die zeitliche Entwicklung der Verschmutzungen einschätzen zu können (Schulz et. al. 2015). Die genaue Quantifizierung der bereits vorhandenen Belastung und Abschätzungen weiterer Emissionsmengen von Kunststoffabfällen in die aquatische Umwelt sind aber aufgrund verschiedener Gründe aktuell noch nicht zufriedenstellend möglich. Diese ist jedoch essentiell dafür, um eine Risikobewertung des Problems und die daraus resultierenden Folgen für die Umwelt und den Menschen benennen zu können (Horton 2022). Eine Vielzahl von Forschenden beschäftigt sich deshalb seit längerem mit der Bestimmung des bereits vorhandenen Plastikmülls in der aquatischen Umwelt. Studien und

Messkampagnen zeigen, dass weltweit an Stränden und in Gewässern Plastikgegenstände und –partikel verschiedener Größe nahezu ubiquitär vorhanden sind (Naidoo et al. 2015; Shim et al. 2022).

Darüber hinaus ist die Tatsache, dass die Einteilung des gefundenen Plastikmülls in verschiedene Größenklassen nicht einheitlich vorgegeben ist, problematisch. Die Klassifizierung der TG Marine Litter (JCR 2013) unterscheidet zwischen Partikeln mit einem Durchmesser größer 25 mm (Makroplastik), solchen zwischen 5 mm und 25 mm (Mesoplastik) sowie kleiner als 5 mm (Mikroplastik). Letzteres wird zusätzlich in großes Mikroplastik ($d = 1 - 5$ mm) und kleines Mikroplastik ($d = 20 \mu\text{m} - 1$ mm) unterteilt. Ein neuerer Vorschlag sieht dagegen vor, die Grenzen an den Begrifflichkeiten zu orientieren, d.h. Partikel von 1 nm bis 1000 nm als Nanopartikel und von 1 μm bis 1000 μm als Mikropartikel anzusehen. Mesoplastik sollte von 1 mm bis 10 mm definiert werden, womit bereits Partikel größer 1 cm (anstatt bisher 5 cm) als Makroplastik zählen würden (Hartmann et al. 2019). Weiterhin werden die Partikel in primäres und sekundäres Mikroplastik unterteilt. Primäre Mikroplastikpartikel werden bereits als Kleinstpartikel meist in Form von Pellets oder Granulat industriell hergestellt. Sekundäres Mikroplastik entsteht hingegen durch Fragmentierung von größere in kleinere Partikel. Dies geschieht bspw. durch mechanischen Abrieb, Verwitterung unter dem Einfluss von UV-Strahlung oder Reibung an Stränden aufgrund der Wellenbewegungen (ter Halle et al. 2016, Song et al. 2017). Hierbei werden Textilfasern und Reifenabriebpartikel besonders hervorgehoben. Studien zeigen, dass es sich bei bis zu 50 % des gefundenen Mikroplastiks um Partikel dieser Arten handelt (Arias et al. 2021).

Insbesondere Mikroplastik ist seit einigen Jahren stark in den Fokus öffentlicher Diskussionen geraten. Ein großes Problem bei der Erfassung der Umweltbelastung im Bereich Mikroplastik ist dabei die fehlende Vergleichbarkeit der Daten. Obwohl es sehr viele Veröffentlichungen zur Mikroplastikbelastung an Stränden weltweit, in Ozeanen und teils auch in Flüssen gibt, sind die Daten uneinheitlich (Eerkes-Medrano et al. 2015). Ein Hauptgrund ist, dass es bis heute keine einheitlichen, standardisierten Methoden zur Probenahme, Probenaufbereitung und Analyse von Mikroplastik in Umweltproben gibt. Bereits bei der Probenahme werden die untersuchten Größenklassenkategorien durch die Maschenweite der verwendeten Netze (z.B. Neustonnetze mit einer Maschenweite von meistens 330 μm) bzw. der Porengröße der Filter pragmatisch vorgegeben. Kleinere Partikel können dadurch in der Regel gar nicht erfasst werden (Razeghi et al. 2020).

Aufgrund dessen ist oftmals keine eindeutige Zuordnung der Ergebnisse zu den theoretisch vorgegebenen Größenklassen zur Einteilung der Plastikpartikel möglich (Stock et al. 2019). Allgemein erfordert die Quantifizierung der Umweltbelastung durch Mikroplastik in Gewässern zum jetzigen Zeitpunkt noch weiteren Forschungsbedarf.

Weiterhin ist auch die Analytik der gefundenen Mikroplastikpartikel bislang noch eine Herausforderung. Gängige Analysemethoden sind dabei Fourier-Transformation-Infrarot- und Raman-Spektroskopie zur Ermittlung der Polymerart sowie Pyrolyse-Gaschromatographie und Massenspektroskopie zur Bestimmung der entsprechenden Massenanteile eines Polymers innerhalb einer Probe (Prata et al. 2019). Bedingt durch ihre geringe Größe sind Mikroplastikpartikel schwer zu detektieren. Je kleiner die Partikel sind, desto größer und komplexer wird der analytische Aufwand zur Bestimmung der Kunststoffart und der Anzahl oder der Masse der Partikel (Silva et al. 2018).

Mikroplastik stellt neben der Belastung der Fauna der verschiedenen Umweltkompartimente, auch eine Bedrohung für Lebewesen dar. Mikroplastikpartikel wurden bereits in einer ganzen Reihe von Organismen (Regenwurm, Muschel, Fisch, etc.) gefunden (Hermsen et al. 2018, Koelmans et al. 2022), wobei die Größe der Partikel durch die Art der Nahrungsaufnahme mitbestimmt wird (Scherer et al. 2017). Direkte negative Auswirkungen dieser Belastung durch Mikroplastik sind bisher nicht eindeutig nachweisbar, was vermutlich daran liegt, dass Organismen auch über einen Ausscheidungsmechanismus für unverdauliche Nahrungsbestandteile verfügen (Klein et al. 2021).

Aufgrund der verhältnismäßig großen Oberflächen in Relation zur Partikelgröße bietet Mikroplastik ein großes Potential für die Anreicherung von Schadstoffen aus der aquatischen Umwelt. Es wird deshalb immer wieder diskutiert, ob es nach Aufnahme derart belasteter Mikroplastikpartikel zu einer Schadstoffanreicherung in Organismen (Bioakkumulation) kommen könnte. Modellrechnungen haben jedoch gezeigt, dass dies durch relativ geringe Verweilzeiten der Partikel im Organismus eher unwahrscheinlich ist (Koelmans et al. 2013, Klasmeier et al. 2014). Insgesamt ist die Benennung der negativen Auswirkungen von Mikroplastik in der Umwelt bis heute nicht eindeutig und daher nicht vollständig möglich und erfordert weitere Forschung. Insbesondere die Vielfalt der Partikel, aufgrund verschiedener Dichte, Größe und Form, stellt die Forschenden vor große Herausforderungen (Khatmullina & Chubarenko, 2019, Koelmans et al. 2022).

Trotz der vielen Unsicherheiten aufgrund bisher ungenügender Fakten ist es allerdings unstrittig, dass eine Verringerung der Mikroplastikbelastung der aquatischen Umwelt unbedingt anzustreben ist. Dazu ist es sehr wichtig, die Eintragsquellen und Eintragspfade zu kennen. Der Eintrag von primärem Mikroplastik in Form von Pellets hängt oftmals mit der Freisetzung bei der Produktion oder des Transportes zusammen. Eine Feldstudie nahe einer Produktionsanlage für Polyethylen-Pellets wies eine beträchtliche Menge entsprechender Partikel in der umgebenden Umwelt nach. Hochrechnungen ergaben, dass darüber jährlich 3 bis hin zu 36 Millionen Mikroplastikpartikel emittiert werden können (Karlsson et al. 2018). Zudem werden vielen Kosmetik- und Reinigungsprodukten Mikroplastikpartikel hinzugefügt, die nach Benutzung über das Abwasser weitergetragen werden. Aufgrund des Drucks, vor allem von Nicht-Regierungsorganisationen (NGOs) und der Öffentlichkeit, werden weltweit vermehrt gesetzliche Maßnahmen gegen den Einsatz von Mikroplastik in entsprechenden Produkten erhoben (Anagnosti et al. 2021).

Ein beträchtlicher Anteil der Mikroplastikbelastung ist sekundäres Mikroplastik. Vor allem nach längerer Umweltexposition und entsprechender Verwitterung kann es durch mechanischen Abrieb oder durch Krafteinwirkung aufgrund von Wellenbewegungen zur Entstehung von Mikroplastikpartikeln unterschiedlicher Größe kommen. Fragmentierung und Abrieb von Kunststoffobjekten werden daher als eine wichtige Quelle für Mikroplastik in der Umwelt angesehen, deren Ausmaß aktuell allerdings noch nicht näher bezifferbar ist (An et al. 2020).

Eine weitere viel diskutierte Eintragsquelle sind die gereinigten Abwässer von Kläranlagen. Studien zeigen, dass das Abwasser bereits mit Mikroplastik kontaminiert ist (Rasmussen et al. 2021). In den verschiedenen Klärstufen innerhalb der Anlagen werden 90 – 95 % der Partikel aus dem Abwasser gefiltert, die sich anschließend im Klärschlamm befinden (Kwon et al. 2022). Wird dieser als Dünger auf landwirtschaftliche Böden aufgetragen, gelangt das enthaltene Mikroplastik in die Umwelt. Aufgrund dessen wird Klärschlamm als eine wichtige Quelle von Mikroplastik in Böden angesehen. Durch Abschwemmungen und Erosionsereignisse kann das Mikroplastik insbesondere unter dem Einfluss von Starkregen anschließend in Flüsse gelangen. Mit der Neufassung der Klärschlammverordnung (AbfKlär 2017) wird die bodenbezogene Verwertung von Klärschlamm ab 2029 zwar zugunsten der thermischen Verwertung und der Phosphorrückgewinnung stark eingeschränkt, jedoch ist davon auszugehen, dass die in den letzten 60 bis 70 Jahren ausgebrachten Mengen ein

beträchtliches Reservoir an Mikroplastik in entsprechend genutzten Böden erzeugt haben. Auch hierfür gibt es allerdings bisher keine wirklich verlässlichen Mengen- oder Konzentrationsangaben (Büks & Kaupenjohann 2020).

Die verbleibenden Mikroplastikpartikel in gereinigtem Abwasser von Kläranlagen gelangen anschließend über den Ablauf direkt in die Flüsse. Mehrere Studien untersuchten Kläranlagenabläufe und ermittelten unterschiedlich hohe Belastungen des Wassers mit Mikroplastikpartikeln und -fasern in verschiedenen Größenklassen. Aufgrund der starken Schwankungen bei den gemessenen Konzentrationen kann auch diese Emissionsquelle bisher nicht abschließend hinsichtlich ihrer Bedeutung für die Gesamtbelastung der aquatischen Umwelt bewertet werden (Habib et al. 2020, Schmidt et al. 2020).

Weiterhin ist der Transport und Verbleib von Mikroplastikpartikeln in der aquatischen Umwelt noch weitestgehend unbekannt und schwierig zu erforschen (Khatmullina & Chubarenko, 2019). Eine Vielzahl von Studien beschäftigt sich mit der Frage, wie sich Mikroplastik in fließenden Gewässern verhält und wodurch das Verhalten beeinflusst werden kann. Die Ergebnisse sind zum jetzigen Zeitpunkt allerdings noch wenig aussagekräftig. Einigkeit herrscht jedoch darüber, dass ein großer Teil des Mikroplastiks über Flüsse in die Meere transportiert wird (Jambeck et al. 2015, van Wijnen et al. 2019, van Emmerik et al. 2022a).

Van Emmerik et al. (2022b) zeigen auf, wie wichtig die Hydrologie der Flüsse für die Emissionsmengen und den Transport ist. Vorhersagen zu Transportdynamiken von Polymerarten sind bedingt durch das breite Spektrum an Partikelzusammensetzungen mit unterschiedlicher Größe, Form und Dichte der Partikel, bisher nur eingeschränkt möglich. Zudem sind die dynamischen Partikeleigenschaften, wie bspw. Sink- oder Auftriebsgeschwindigkeiten, kritische Schubspannungen und Schwellenwerte für Resuspension so vielfältig und daher schwer zu kategorisieren und vorherzusagen. Um dies zu realisieren, müsste der Transportweg eines einzelnen Plastikpartikels in der realen Umwelt verfolgt und ausgewertet werden, was jedoch experimentell unmöglich ist. Aufgrund dessen werden für die Analyse des Transportverhaltens von Plastikpartikeln Modelle benötigt. Insbesondere erscheinen Lagrange'sche Modellansätze für die Umsetzung sinnvoll, da mit ihnen der individuelle Transport einzelner Partikel simuliert werden kann (Khatmullina & Chubarenko 2019).

Die Auswertung einer Vielzahl von vorhandenen Modellen zur Beschreibung und Analyse des Verbleibs und Transportverhaltens von Mikroplastik zeigt, dass der Fokus bisher vor allem auf der marinen Umwelt liegt (Uzen et al. 2021). Zur Untersuchung des Transportverhaltens werden beispielsweise dreidimensionale Simulationsmodelle verwendet, welche verschiedene Umweltprozesse in Meeren berücksichtigen können (Jalón-Rojas et al. 2019). Weiterhin wurden mit Hilfe von Massenbilanzierungen (Piel et al. 2021, Schernewski et al. 2020) oder Nachverfolgung von Partikeln (engl. *Particle-Tracking*) (López et al. 2021, Iwasaki et al. 2017) der Transport und der Eintrag über Mündungsgebiete modelliert. Mit Hilfe von experimentellen Ansätzen wurden im eindimensionalen Raum der Einfluss von Wellen in Küstenregionen untersucht (Kerpen et al. 2020, De Leo et al. 2021). Inwiefern diese Ansätze und Modellierungen jedoch auch auf das Transportverhalten in Flüssen übertragbar sind, ist fraglich (Uzen et al. 2021). Die Modellierung des Transportes von Mikroplastik in Flüssen erfolgt bisher weitestgehend mit Hilfe von eindimensionalen Simulationsmodellen (Quik et al. 2015, Bessling et al. 2016). Dabei werden für die Emissionsmengen Abschätzungen zur Massenbilanzierung verwendet, die anschließend als Eingangsparameter für das Transportmodell verwendet werden (Siegfried et al. 2017, van Wijen et al. 2019). Es zeigt sich, dass weiterhin Lücken bestehen, wenn es um die Modellierung des Partikeltransportes und des Umweltverhaltens in Flüssen geht. Es besteht daher der dringende Bedarf nach einem dreidimensionalen Simulationsmodell zur Beschreibung des Transportverhaltens von Mikroplastikpartikeln mit verschiedener Größe und Dichte. Das Ziel dieser Arbeit besteht darin, ein entsprechendes Transportmodell zu implementieren und mit Hilfe verschiedener Szenarien den individuellen Transport unterschiedlicher Mikroplastikpartikel in einer fließenden Strömung zu simulieren und analysieren.

2 Stand der Forschung

Die Quantifizierung der Umweltbelastung durch Plastikabfälle und im Speziellen Mikroplastik steht seit Jahren im Fokus vieler Studien. Dabei stellen Messungen in Gewässern eine wichtige Grundlage für die Expositionsbewertung der Belastung durch Kunststoffe dar. Sie bilden jedoch immer nur eine Momentaufnahme der Situation ab und liefern aufgrund der nicht einheitlichen Probenahme und -aufbereitung sowie der schwierigen analytischen Erfassung der Partikel oftmals wenig vergleichbare Daten (UNEP 2020). Auf der Basis solcher Daten können deshalb keine verlässlichen Prognosen über zukünftige Entwicklungen der Umweltbelastung durch Plastik abgeleitet werden. Um aussagekräftige Vorhersagen machen zu können, werden Modelle benötigt, die den Eintrag, Verbleib und Transport von Plastikabfällen in Gewässern modellieren und verschiedene Szenarien simulieren können (Kathmullina & Chubarenko 2019). Ebenso spielen Modelle eine bedeutende Rolle für die Analyse des Umweltverhaltens von Plastik und bieten aufgrund ihrer Vielfältigkeit ein wichtiges Werkzeug. Insbesondere Transportmodelle können Aufschluss über Verlagerungen der Partikel innerhalb der Wasserphase und ins Sediment sowie den Transport ins Meer liefern. Diese Erkenntnisse sind wichtig für zukünftige Probenahmen, Dateninterpretationen und für die Schätzung des Beitrags von Flüssen zur Plastikbelastung von Ozeanen. Eine Vielzahl von Forschenden beschäftigt sich daher mit der Modellierung von Plastikpartikeln. Dabei wird bisher jedoch hauptsächlich Makroplastik in Küstenregionen und Ozeanen betrachtet (Rellán et al. 2023, Bagaev et al. 2021 Lebreton et al. 2019).

Die Modellierung des Umweltverhaltens von Mikroplastik in Gewässern ist bisher noch wenig vorangeschritten. Uzen et al. (2021) haben in ihrem Übersichtsartikel verschiedene, zwischen 2012 und 2020 publizierte Modelle zum Transport und Verbleib von Mikroplastikpartikeln in Gewässern (Meer, Fluss, See) betrachtet. Von den insgesamt 36 ausgewerteten Studien beschäftigen sich allerdings nur sieben mit der Modellierung von Mikroplastik in Flüssen. Die meisten vorhandenen Modelle beschreiben den Transport und/oder Verbleib von Mikroplastikpartikeln in der marinen Umwelt, in Mündungsgebieten (Ästuar) oder Küstenregionen. Zudem beschränken sich die Modelle häufig auf die Betrachtung eines oder weniger Aspekte (z.B. Expositionsschätzung, Sinkverhalten, Biofouling). Die Abschätzung von Emissionsfrachten aus verschiedenen diffusen oder punktuellen Quellen (z.B. Abspülen von landwirtschaftlichen Flächen, Abwassereinleitung) steht hier oft im Mittelpunkt.

Ein einfacher Ansatz zur Modellierung des Transportverhaltens von Plastikpartikeln ist eine statistische Betrachtung der eindimensionalen Ausbreitung von Partikeln. Dazu werden in der Regel Emissionsfrachten aus verschiedenen Quellen einzeln abgeschätzt und anschließend als Eingangsdaten für ein hydrodynamisches Transportmodell verwendet. Die für den 1D-Transport betrachteten Prozesse sind meist beschränkt auf Advektion und Dispersion. Verluste durch Sedimentation, Retention („Zurückhaltung“) und Verschüttung werden als Prozesse erster Ordnung aus der Wasserphase beschrieben. Im Vordergrund dieses Ansatzes steht vor allem die Quantifizierung von Partikelkonzentrationen in Abhängigkeit von Ort und Zeit (Besseling et al. 2016, Quik et al. 2015).

Insbesondere in hinreichend tiefen Gewässern ist die vertikale Verteilung der Partikel von großem Interesse, um auch für entsprechende tiefere Wasserschichten Risikobewertungen durchführen zu können. Aufgrund der unterschiedlichen Größe und Dichte von Mikroplastik ist eine Verteilung in der Tiefe wahrscheinlich. Zusätzlich werden sich Mikroplastikpartikel mit Dichten von 970 kg/m^3 (Polyethylen, PE) bis 1400 kg/m^3 (Polyethylenterephthalat, PET) und Größen zwischen $10 \mu\text{m}$ und 1 mm deutlich in ihren Auftriebs- bzw. Sinkgeschwindigkeiten unterscheiden (Kathmullina & Isachenko 2017). Probenahmen in verschiedenen Wassertiefen sind bisher nur bedingt umsetzbar, weshalb zum jetzigen Zeitpunkt wenige Messungen von Mikroplastikpartikeln in Abhängigkeit der Tiefe vorhanden sind. Daher sind Vorhersagen über das Auftriebs- und Sinkverhalten von Partikeln in einer fließenden Strömung kaum möglich. Das Wissen über die vertikalen Konzentrationsprofile verschiedener Polymerarten ist jedoch für die Modellierung des Mikroplastiktransportes ebenfalls von großer Wichtigkeit (Cowger et al. 2021).

Diesbezügliche Modelle sollten daher das dreidimensionale Transportverhalten von Mikroplastikpartikeln berücksichtigen. Zur Lösung entsprechender Modellansätze werden numerische Verfahren benötigt. Als Basis werden hier oftmals hydrodynamische Modelle zur Simulation von Strömungsfeldern eines Gewässers verwendet, die mit einem Partikelmodell gekoppelt werden. Je nach Zielsetzung des Modells sind für die Modellierung der Partikel zwei verschiedene Ansätze vorhanden: Euler und Lagrange. Mit Hilfe des Euler-Ansatzes werden Partikelwolken modelliert und die gesamte Verteilung der Partikel in Abhängigkeit des Ortes und der Zeit beschrieben. Der Ansatz

findet insbesondere bei der Betrachtung von Partikelkonzentrationen und in großskaligen Modellumgebungen Anwendung. Der Lagrange-Ansatz wird hingegen verwendet, um Transportwege einzelner Partikel zu berechnen. Dabei wird für jeden Partikel eine orts- und zeitabhängige Bewegungsgleichung gelöst und damit der Zustand des Partikels beschrieben. Innerhalb einer Simulation ist es so möglich, mehrere einzelne Partikel mit unterschiedlichen Größen und Dichten zu modellieren und deren individuellen Trajektorien zu beschreiben. Aufgrund der sehr langen Rechenzeiten solcher *Particle-Tracking*-Modelle ist die Anwendung meist auf kleinere Gebiete ausgelegt, um die gewünschte hohe räumliche Auflösungen zu ermöglichen (Prandtl 2022, S. 44ff). Letztendlich kann mit beiden Ansätzen der Partikeltransport unter Berücksichtigung von Partikeleigenschaften (Größe, Dichte, Form) simuliert werden.

Modelle unterscheiden sich neben der Wahl des Ansatzes zur Beschreibung des Partikeltransportes auch hinsichtlich der räumlichen und zeitlichen Auflösung. Generell lässt sich sagen, dass eine größere Skala mit einer größeren räumlichen Auflösung der Zellen und einem größeren Zeitschritt einhergeht. Die meisten vorhandenen Transportmodelle für Mikroplastikpartikel besitzen eine regionale oder globale Auflösung im eindimensionalen Raum und einen Zeitschritt im Bereich von Tagen bzw. Jahren. Sie liefern damit eine grobe Beschreibung des Transportverhaltens von Mikroplastik und ermöglichen erste Abschätzungen über Einträge aus Flüssen in Ästuar und Meere (Uzen et al. 2021). Ein Modell, das den Transport einzelner Partikel in Flüssen in Abhängigkeit von Partikeleigenschaften (Größe, Dichte, Form) und den hydrodynamischen Bedingungen auf einer lokalen Skala beschreibt, ist zum jetzigen Zeitpunkt nicht vorhanden.

Im Folgenden werden einige Modelle für den Transport von Mikroplastikpartikeln in Gewässern kurz vorgestellt. Die Einteilung der vorhandenen Modelle erfolgt hinsichtlich der Komplexität der gewählten Modellierungsform. Im ersten Schritt werden einfache Bilanzierungsmodelle betrachtet, die teilweise mit Transportmodellen gekoppelt sind, um Partikelkonzentrationen am Auslass eines Fließgewässers wie bspw. einem Ästuar zu berechnen (2.1). Darauf folgend werden eindimensionale Transportmodelle gezeigt, die ebenfalls die Konzentration der Partikel entlang der Fließstrecke betrachten (2.2). Anschließend werden zwei Vorgehensweisen benannt, mit denen die Auftriebs- und Sinkgeschwindigkeiten bzw. das Tiefenkonzentrationprofil von Mikroplastikpartikeln in

Abhängigkeit von Dichte und Größe abgeschätzt werden können (2.3). Abschließend werden zwei *Particle-Tracking-Modelle* (PTM) beschrieben, die auf regionaler Ebene den dreidimensionalen Transport von Mikroplastikpartikeln in einer marinen Umgebung simulieren. Um die Verwendung der verschiedenen Modellierungsansätze zu vergleichen, wird zudem ein Modell, das den Euler'schen Ansatz verwendet, gezeigt (2.4).

2.1 Modellierung von Emissionsfrachten

Eine häufige Vorgehensweise bei der Transportmodellierung von Mikroplastikpartikeln in Flüssen ist die Kombination von Emissionsabschätzungen aus verschiedenen Quellen mit einem hydrodynamischen Transportmodell. Dabei werden in der Regel bestehende Ansätze, wie sie z.B. für Nährstoffe entwickelt wurden, angepasst. Die Mikroplastik-Emission aus diffusen und/oder punktuellen Quellen wird mit Hilfe von Abschätzformeln und Literaturdaten berechnet und als Eingangsdaten für ein vorhandenes Transportmodell verwendet. Die räumliche Auflösung der Emissionsschätzungen ist dabei meist auf der Ebene der Einzugsgebiete der Nebengewässer angesiedelt. Die Frachten werden an den Mündungen in den Hauptlauf übergeben, wo anschließend Transport und verschiedene Verlustprozesse, wie beispielsweise Sedimentation, simuliert werden können (Uzen et al. 2021).

Piehl et al. (2021) schätzten mit dieser Vorgehensweise die jährlichen Emissionsmengen von Mikroplastikpartikeln im Mündungsbereich der Warnow in die Ostsee in Mecklenburg-Vorpommern ab. Dabei betrachteten sie Einträge aus Kläranlagenabläufen, über (Stark-) Regenwasser und aus Mischwasserüberläufen. Basierend auf den Daten von acht Messkampagnen, berechneten sie eine jährliche Fracht von 291 Milliarden Partikeln, hauptsächlich mit Größen zwischen 10 und 100 μm , von denen etwa die Hälfte (152 Milliarden) in die Ostsee transportiert werden. Der Rest verbleibt im Mündungsgebiet, wobei es sich weitestgehend um Mikroplastik mit hoher Dichte handelt. Schernewski et al. (2020) nutzten eine ähnliche Methodik, um jährliche Mikroplastik-Frachten als Eingangsdaten für ein 3D-Simulationsmodell zu berechnen, die den Eintrag und Transport von Mikroplastik in die Ostsee sowie dessen Verbleib simuliert. Als Emissionsquellen wurden hier ebenfalls Einträge aus Kläranlagen, Regenwasser- oder Mischwasserüberläufen und unbehandeltem Abwasser berücksichtigt. Die Simulationsergebnisse ergaben für PET und PE-Partikel eine durchschnittliche Aufenthaltszeit von 14 Tagen in der Ostsee bevor sie sich schließlich an Küstenlinien

anlagern. Aufgrund dessen werden Küstenlinien als Senke für Mikroplastikpartikel betrachtet. Beide Studien sind sich in ihren Ergebnissen einig, dass insbesondere in Küstenregionen der Eintrag von Mikroplastik durch Mischwasser- und Regenwasserüberläufe (bei Starkregen) eine bedeutende Emissionsquelle darstellt, deren Quantifizierung jedoch bisher sehr großen Unsicherheiten unterliegt. Dies liegt unter anderem daran, dass die Berechnungen und Simulationen für diese diffusen Quellen eine starke saisonale Abhängigkeit zeigen, die bisher nicht ausreichend abgebildet werden kann (Piehl et al. 2021, Schernewski et al. 2020).

Siegfried et al. (2017) lieferten einen globalen Modellansatz zur Bilanzierung der Menge und Zusammensetzung von Mikroplastikemissionen aus Kläranlagenabläufen über Flüsse in die Meere. Dabei berücksichtigten sie vier verschiedene Mikroplastikquellen, um darüber die Eintragsfrachten in die Kläranlagen abzuschätzen: Körperpflegeprodukte, Textilfaser, Hausstaub sowie Reifen- und Straßenabrieb. Zur Berechnung der jährlichen Mikroplastikeinträge in die Kläranlagen verwendeten sie Ansätze eines bestehenden Nährstoffmodells („Global News“; *Nutrient Export from WaterSheds*) unter Einbezug von Bevölkerungszahlen des Einzugsgebietes. Die ermittelten Emissionsmengen kombinierten sie mit Informationen über Abwasserentsorgungsverfahren und Retentionszeiten von Plastikpartikeln während des Transportes in Flüssen, um auf diese Weise jährliche Mikroplastikfrachten an den Flussmündungen zu schätzen. Mit Hilfe des Modells wurden verschiedene Szenarien für 2050, basierend auf unterschiedlichen Annahmen zur künftigen Entwicklung bei der Reduktion von Mikroplastikemissionen in Flüssen, erstellt. Erste Ergebnisse zeigten, dass in allen Szenarien eine Verringerung der Mikroplastikemissionen von bis zu 50 % möglich ist, wobei es teilweise deutliche Schwankungen bei den Einträgen zwischen einzelnen Gebieten gibt. Die Verbesserung der Reduktion durch Abwasserreinigungsanlagen ist insbesondere in afrikanischen Regionen, in denen die Reinigungseffizienz der Kläranlagen deutlich niedriger ist als in Europa, von Bedeutung. Die Autoren gaben jedoch an, dass das Modell noch nicht ausreichend validiert sei und es sich bisher nur um die Betrachtung von ausgewählten Punktquellen für Mikroplastik handelt. Eine Erweiterung um den Eintrag weitere Emissionspfade und um diffuse Quellen sei jedem Fall ratsam.

2.2 1D-Transportmodelle

Eine Erweiterung der zuvor gezeigten Bilanzierungsmodelle ist die Verwendung von instationären Strömungsdynamiken als Grundlage für die Transportmodellierung von

Mikroplastikpartikeln. Dabei werden häufig bereits vorhandene hydrologische Modelle verwendet und diese mit Transportmodellen für Partikel basierend auf dem Euler-Ansatz gekoppelt. Verlustprozesse entlang der Fließstrecke werden auch hier vereinfacht als Prozesse erster Ordnung modelliert.

Um das Transportverhalten und den Verbleib von Nanopartikeln in natürlichen Gewässern zu simulieren, koppelten Quik et al. (2015) das räumlich explizite, hydrologische Modell DUFLOW (*Dutch Flow Model*) mit einem 1D-Transportmodell für Nanopartikel. DUFLOW ist eine Software, mit der eindimensionale, instationäre Strömungen in offenen Kanalsystemen simuliert werden können (Clemmens et al. 1993). Das daraus resultierende Modell NanoDUFLOW simuliert den Transport der Partikel beeinflusst durch lokale Strömungsmuster des Gewässers im eindimensionalen Raum. Es berücksichtigt Retention im Sediment, Resuspension in das Gewässer, Degradation und Verschüttung, sowie die Homo- und Heteroaggregation der Nanopartikel und liefert Partikelkonzentrationen im Wasser und im Sediment in Abhängigkeit von Ort und Zeit. Als Anfangsbedingung wird die Partikelkonzentration am Einlass des Simulationsgebietes festgesetzt. Die Dommel in den Niederlanden diente dabei als Simulationsumgebung. Für die Simulationen wurden bereits validierte Strömungsfelder genutzt und Nanopartikel mit verschiedenen Größen simuliert. Die Durchmesser der eingebrachten Nanopartikel unterlagen einer Größenverteilung mit einem Mittelwert von 43 nm mit einer unteren und oberen Grenze von 30 bzw. 150 nm. Die Ergebnisse zeigten räumlich verteilte Konzentrationspeaks innerhalb der Wassersäule und dem Sediment. Dabei waren der Ort und die Ausprägung der Peaks stark abhängig von den vorherrschenden Strömungseigenschaften. Unter gleichbleibenden Strömungsbedingungen erwies sich die Größe der Partikel als ausschlaggebender Parameter für das Transportverhalten. Insbesondere sehr kleine Partikel wurden eher zurückgehalten als verhältnismäßig größere.

Ähnliche Ergebnisse erzielten auch Besseling et al. (2016) mit ihrer Erweiterung von NanoDUFLOW für Mikro- und Mesoplastikpartikel. Sie simulierten Plastikpartikel in der Dommel mit Durchmessern zwischen 100 nm und 10 mm. Weiterhin fügten sie Aufwuchs als zusätzlichen, die Partikel beeinflussenden Prozess hinzu und legten eine standardmäßige Massekonzentration von Partikeln mit definierter Größe und Dichte am Anfang des betrachteten Gebietes fest. Darüber hinaus wurden mehrere Annahmen

hinsichtlich der Retention von Partikeln getroffen. Unabhängig von der Dichte werden Partikel mit Durchmessern größer $200\ \mu\text{m}$ zu 100 % und zwischen $100\ \text{nm}$ und $1\ \mu\text{m}$ nur zu 50 % zurückgehalten. Partikeln mit einer Größe zwischen $1 - 200\ \mu\text{m}$ wurde eine Retention in Abhängigkeit von der Dichte basierend auf Literaturdaten zugewiesen. Insgesamt wurden Partikel mit 25 unterschiedlichen Durchmessern über eine Dauer von jeweils neun Tagen simuliert. Die Dichte der Partikel variierte zwischen $1000 - 1500\ \text{kg/m}^3$. Bereits nach fünf Tagen stellte sich im Modell ein stationärer Zustand für die Partikelkonzentration entlang der Fließstrecke von ca. $40\ \text{km}$ ein. Wie bei Quik et al. (2015) konnten auch hier mehrere lokale Konzentrationspeaks innerhalb der Wassersäule und dem Sediment beobachtet werden, wobei die Partikelgröße der entscheidende Faktor bei gleichbleibender Strömungsdynamik für die Position der Akkumulation war. Anhand der Simulationsergebnisse beider Studien konnte zudem auch der Einfluss der Stokes-Drift beobachtet werden. Je größer der Durchmesser der Partikel, desto stärker wurden sie durch die Stokes-Drift beeinflusst. Eine interessante Beobachtung von Besseling et al. (2016) war zudem, dass Plastikpartikel mit einem Durchmesser größer als $10\ \mu\text{m}$ und einer Dichte höher $1000\ \text{kg/m}^3$ im Modell fast vollständig innerhalb der Fließstrecke zurückgehalten und nur ca. 60 % der Nanopartikel mit Durchmessern bis zu $10\ \text{nm}$ den Auslass des Flusslaufes erreichten. Folglich werden hauptsächlich Mikroplastikpartikel mit Durchmessern um $5\ \mu\text{m}$ effektiv mit der Strömung entlang der Fließstrecke transportiert.

2.3 Vertikales Konzentrationsprofil und Sinkverhalten

Bei der Modellierung von Mikroplastikpartikeln ist die Berücksichtigung des Auftriebs- und Sinkverhaltens der Partikel notwendig. In eindimensionalen Modellen werden der Auftrieb und die Sedimentation als Prozesse erster Ordnung parametrisiert, wofür zugehörige Ratenkonstanten benötigt werden. Für dreidimensionale Modelle werden hingegen die Auftriebs- bzw. Sinkgeschwindigkeiten der jeweiligen Mikroplastikpartikel verwendet. In beiden Fällen stellt die Bereitstellung der entsprechenden Daten aufgrund der Vielfältigkeit an Mikroplastikpartikeln hinsichtlich ihrer Größe, Dichte und Form eine Herausforderung dar.

Um das Auftriebsverhalten verschiedenster Partikel zu beschreiben, versuchten Crowger et al. (2021) die Tiefenprofilkonzentration von schwimmenden Mikroplastikpartikeln (Partikeldicht $<$ Fluidichte) zu modellieren. Sie nutzten dazu eine Erweiterung des sogenannten Rouse-Profiles. Das Rouse-Profil repräsentiert über den dimensionslosen

Parameter P , der sogenannten Rouse-Nummer, das Tiefenkonzentrationsprofil von absinkenden bzw. nicht-schwimmenden Partikeln. Damit wird die Zusammenwirkung von der theoretischen Absinkgeschwindigkeit der Partikel und der vertikalen, turbulenten Durchmischung des umgebenden Fluides beschrieben. Cowger et al. (2021) erweiterten diese Berechnung um Auftriebsgeschwindigkeiten, ausgedrückt als negative Sinkgeschwindigkeiten, um entsprechend auch schwimmende Partikel berücksichtigen zu können. Die Werte für die Auftriebsgeschwindigkeiten basierten dabei auf theoretischen Berechnungen unter anderem in Abhängigkeit von Dichte, Durchmesser und dynamischer Viskosität des Wassers sowie der Reynolds-Nummer. Mit dieser Erweiterung berechneten sie das theoretische eindimensionale Konzentrationstiefenprofil von Mikroplastikpartikeln mit verschiedenen Dichten und Größen in Flüssen. Die Ergebnisse zeigten deutliche Unterschiede zwischen Partikeln mit einem Durchmesser zwischen 1 bis 5 mm („groß“) und 0,33 bis 1 mm („klein“). Große Partikel befanden sich hauptsächlich an der Oberfläche oder direkt darunter. Kleine Partikel befanden sich hingegen weitestgehend in der Schwebeschicht und wiesen zudem eine niedrigere Auftriebsgeschwindigkeit auf, als größere Partikel mit gleichen Polymereigenschaften.

Kathmullina und Isachenko (2016) untersuchten experimentell die Sinkgeschwindigkeiten verschiedener Mikroplastikpartikel, um anhand der Ergebnisse eine Abschätzformel zur Vorhersage aufzustellen. Im ersten Schritt wurden dafür von ca. 600 Mikroplastikpartikel mit Durchmessern zwischen 0,5 und 5 mm die Sinkgeschwindigkeiten messtechnisch bestimmt. Die Partikel unterschieden sich zudem in ihrer Dichte und Form (Kugel, kleine und große Zylinder). Die gemessenen Sinkgeschwindigkeiten wurden mit semi-empirischen Abschätzungen verglichen und ergaben für kugelförmige und kleine, zylindrische Partikel gute Übereinstimmungen. Für die Auswertung wurden verschiedene Abschätzformeln angewendet, wobei das Vorgehen von Dietrich (1982) zur Berechnung der Sinkgeschwindigkeit von natürlichen Partikeln die besten Ergebnisse lieferte. Insgesamt zeigte sich, dass die Größe der Partikel einen erheblichen Einfluss auf die Sinkgeschwindigkeit hat, wobei größere Partikel schneller absinken als kleinere. Weiterhin hat aber auch die Form der Partikel nicht zu unterschätzende Auswirkungen auf das Absinken. Aufgrund der Vielfältigkeit von Partikelformen gestaltete sich eine Vorhersage dieses Effekts schwieriger, je unregelmäßiger die Partikel geformt sind.

2.4 *Particle-Tracking-Modelle*

Für ein besseres Verständnis der Parameter und Prozesse, die den Transport einzelner Partikel beeinflussen, werden sogenannte *Particle-Tracking-Modelle* (PTM) verwendet. Sie nutzen den Lagrange-Ansatz, der es ermöglicht, den Zustand jedes einzelnen Teilchens in Form einer Bewegungsgleichung in Abhängigkeit von Ort und Zeit zu berechnen. Eine theoretische Beschreibung des Lagrange-Ansatzes erfolgt in Kapitel 4.6. Aufgrund der daraus resultierenden, hohen Rechenzeiten ist die räumliche Auflösung dieser Modelle oftmals auf lokale und regionale Skalen begrenzt. Im Gegensatz zum Euler-Ansatz kann hier die Bewegung einzelner Partikel in Form von Trajektorien dargestellt werden (Prandtl 2022, S. 44ff).

Iwasaki et al. (2017) nutzten einen *Particle-Tracking-Ansatz*, um mit Hilfe eines numerischen Modells das Transportverhalten von Mikro- und Mesoplastikpartikeln im Japanischen Meer unter dem Einfluss von Meeresoberflächenströmungen zu untersuchen. Sie simulierten damit den Transport und Verbleib verschiedener Partikel mit Durchmessern zwischen 0,3 – 10 mm. Dabei verwendeten sie eine dreidimensionale Auflösung mit einer Zellgröße in horizontaler und vertikaler Ausrichtung von ca. 8 x 9 km und betrachteten eine Wassertiefe von 0 – 5 m. Das Absetzen von Partikeln an Küstenregionen wurde innerhalb des Modells ebenfalls nicht berücksichtigt. Weiterhin wurde die Annahme getroffen, dass sich die Partikel unterhalb der Wasseroberfläche befinden, wodurch der Einfluss von Wind im Modell nicht berücksichtigt wurde. Das Ziel der Simulationen bestand darin, gemessene Plastikkonzentration im Japanischen Meer zu reproduzieren, um anhand dessen das Transportverhalten verschiedener Partikel zu untersuchen. Es zeigte sich, dass es zu einer Ansammlung von Partikeln an Küstenlinien kommt, wobei sich die Partikel weiterhin in der Wasserphase befinden. Darüber hinaus ergaben die Simulationsergebnisse, dass die Stokes-Drift auch hier einen wichtigen Einfluss auf das Transportverhalten der Partikel im Ozean hat.

Nach aktuellem Forschungsstand wird angenommen, dass Mündungsgebiete großer Flüsse eine Senke für Mikroplastikpartikel darstellen. Diese Annahme wird von López et al. (2021) mit den Ergebnissen ihres Modells unterstützt. Mit Hilfe des hydrodynamischen Modells *ChesROMS* (*Chesapeake Bay ROMS Community Model; (Regional Ocean Modelling System)*) (ChesROMS Team 2020), gekoppelt mit einem *Particle-Tracking-Modell*, simulierten sie dreidimensionale Strömungsdynamiken in der Chesapeake Bay (Ästuar des Susquehanna River) basierend auf Realdaten über einen Zeitraum von zehn

Jahren. Die Modellumgebung wurde in einem Gitter aus $150 \times 100 \times 20$ Zellen abgebildet. In horizontaler Ausrichtung wurde dafür ein gekrümmtes Gitter mit Zellgrößen zwischen 1 km und 7 km verwendet. Die maximale betrachtete Tiefe lag bei 40 m. Für die Partikelsimulationen wurde das Modell *Ichthyop* eingesetzt, das ursprünglich für die Ausbreitung von Plankton in Gewässern erstellt worden ist. Dazu wurde es entsprechend um die Möglichkeit Plastikpartikeln zu simulieren, erweitert. Dieses Modell verwendet Strömungsdynamiken von Gewässern als Eingangsdaten und simuliert basierend darauf die horizontale und vertikale Ausbreitung von Partikeln (Lett et al. 2008). Die zeitliche Auflösung der hier durchgeführten Simulationen lag bei einem Tag. Zu jedem Zeitschritt wurden an den Übergängen der ins Ästuar mündenden Flüsse gemessene Partikelkonzentration eingebracht und deren Transport simuliert. Anhand der Simulationsergebnisse sollten Aussagen darüber getroffen werden können, welcher Anteil der Partikel sedimentiert oder an Küstenregionen und Stränden akkumuliert. Die individuellen Transportwege einzelner Partikel waren bei der Analyse der Simulationen weniger von Interesse, sondern vielmehr die Ausbreitung und Verteilung der Gesamtheit der Partikel. Die Simulationsergebnisse ergaben, dass nur ca. 10 % des in das Mündungsgebiet eingebrachten Mikroplastiks, dieses auch wieder verlässt. 90 % der Partikel sinken ab oder lagern sich an den Stränden bzw. Küstenlinien ab. Inwiefern das Modell auf das Transportverhalten in Flüssen übertragbar wäre, ist ohne weitere Recherchen jedoch nicht erkennbar.

Abschließend wird zum Vergleich der verschiedenen Vorgehensweisen ein Modell, das den Euler'schen Ansatz verwendet, kurz beschrieben. Mountford et al. (2019) lieferten eins der ersten Modelle zur dreidimensionalen Ausbreitung von Plastikpartikeln in der marinen Umwelt mit diesem Ansatz. Anders als bei *Particle-Tracking*-Modellen, wird hier die Gesamtmasse bzw. Konzentration der Partikel und deren globale Verteilung betrachtet und nicht der Transport einzelner Partikel anhand von Trajektorien. Zudem besitzt das Modell aufgrund der globalen Betrachtungsweise eine relativ grobe Auflösung von ca. 200×100 km (in den Tropen und am Äquator). In der vertikalen Richtung liegt die Auflösung bei 10 bis maximal 500 m, wobei die Zellgröße mit der Tiefe zunimmt. Das Modell berücksichtigte sieben verschiedene Polymerarten, wobei drei davon schwimmend und vier nicht-schwimmend waren. Als Eingangsdaten für die Plastikmengen wurden Angaben aus Studien verwendet. Das Kontrollscenario zeigte Übereinstimmungen mit empirischen Daten auf und simulierte die Entstehung der

bekannten Müllinseln („Garbage Patches“) in den entsprechenden Regionen. Basierend darauf zeigen Simulationsergebnisse, dass erhebliche Mengen an Plastikpartikeln vertikal transportiert werden und demnach temporär in der Wassersäule vorhanden sind. Insbesondere nicht-schwimmenden Partikel akkumulierten in tieferen Wasserhöhen bzw. auf dem Meeresboden. Weiterhin zeigte sich, dass Mikro- und Nanoplastikpartikel mit einer Dichte ähnlich der Dichte von Wasser ubiquitär in der Wassersäule vorhanden sind und dort verbleiben.

3 Ziel der Arbeit

Die vorherigen Kapitel haben gezeigt, dass trotz zahlreicher Untersuchungen und Modellierungsarbeiten das Wissen über das Ausbreitungs- und Transportverhalten von Mikroplastikpartikeln insbesondere in Flüssen noch sehr begrenzt ist. Studien und Messkampagnen weisen immer wieder Mikroplastikpartikel mit höheren Dichten als Wasser ubiquitär in der Wassersäule und an der Oberfläche schwimmend nach. Dies widerspricht jedoch den Erwartungen, da eigentlich davon ausgegangen wird, dass diese Partikel aufgrund der hohen Dichte absinken und sedimentieren sollten. Gleichzeitig werden auch Mikroplastikpartikel mit niedrigerer Dichte als Wasser (bspw. PE mit ρ zwischen 920 und 970 kg/m³) in verschiedensten Wassertiefen gefunden. Experimentelle Studien, die den Transport und die Ausbreitung von Partikeln unter Laborbedingungen simulieren, liefern zwar Ergebnisse über das allgemeine Auftriebs- und Absinkverhalten, jedoch beziehen sich diese häufig auf unbewegte Medien. Untersuchungen des Transportes von Mikroplastikpartikel in einer fließenden Welle wurden bisher nur im eindimensionalen Raum vorgenommen. Dabei stellt vor allem die Verfolgung einzelner Partikel über einen längeren Zeitraum, ohne dabei das Verhalten oder die Eigenschaften der Partikel zu beeinflussen, eine aktuell nicht zufriedenstellend lösbare Herausforderung dar.

Dreidimensionale Transportmodelle für Mikroplastikpartikel in der aquatischen Umwelt sind zwar vorhanden, beziehen sich jedoch vorwiegend auf marine Umgebungen wie Ozeane und Küstenregionen und verwenden eine entsprechend geringe räumlich und zeitliche Auflösung. Zudem wird dabei meist die Gesamtheit der vorhandenen Partikelmengen betrachtet und nicht die einzelnen Transportwege der Partikel. Für die Betrachtung von Mikroplastikpartikeln in Flüssen werden bisher hauptsächlich eindimensionale Transportmodelle mit Massenbilanzmodellen gekoppelt und damit Partikelkonzentrationen simuliert. Ein dreidimensionales Transportmodell für die Ausbreitung einzelner Mikroplastikpartikel in einer fließenden Strömung ist zum jetzigen Zeitpunkt nicht vorhanden.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit besteht daher darin, diese Lücke zu schließen und ein dreidimensionales Modell zu implementieren, das den Transport und das Verhalten von Mikroplastikpartikeln in einem Fließgewässer auf einer lokalen Skala simuliert. Als Modellumgebung wird OpenFOAM verwendet, mit dem Strömungsdynamiken für individuell erstellte Geometrien simuliert werden können. Um die Simulationsergebnisse

auf Plausibilität zu prüfen, wird zunächst die Geometrie einer realen Freiland-Fließrinne in OpenFOAM implementiert und das Strömungsfeld unter vordefinierten Anfangsbedingungen simuliert. Messungen und Experimente in der originalen Fließrinne ermöglichen anschließend eine Validierung der Modellergebnisse. Da das Modell möglichst realitätsnah sein soll, wird im nächsten Schritt ein hypothetischer Flusslauf modelliert und für reale Fließgeschwindigkeiten entsprechende Geschwindigkeitsfelder abgebildet. Diesen Strömungsdynamiken werden Mikroplastikpartikel hinzugefügt und mit Eigenschaften typischer Polymerarten parametrisiert. Mit Hilfe des Modells können anschließend verschiedene Szenarien simuliert werden, um den Einfluss der Partikeleigenschaften, aber auch des Strömungsfeldes zu untersuchen.

Anhand des Simulationsmodells des theoretischen Flussabschnittes soll allgemein das Transportverhalten von Mikroplastikpartikeln mit unterschiedlicher Dichte und Größe in einer fließenden Strömung beschrieben werden. Hinsichtlich dessen ergeben sich folgende Fragestellungen, die mit geeigneten Simulationen überprüft werden:

- Welchen Einfluss besitzen die Dichte und der Durchmesser der Mikroplastikpartikel auf deren Transportverhalten in einer fließenden Strömung?
- Sind Auswirkungen der umgebenden Strömungsdynamiken und der Geometrie des Flussverlaufes auf den Transport der Mikroplastikpartikel erkennbar?
- Können Parameterkonstellationen beobachtet werden, deren Kombination das Transportverhalten der Mikroplastikpartikel beeinflusst?

Im Rahmen dieser Arbeit werden im Hinblick auf die Fragestellungen fünf Parameter des Modells variiert, um deren Einfluss zu überprüfen: Partikelanzahl, Partikeldichte, Partikeldurchmesser, Position der Partikel in der Geometrie und mittlere Fließgeschwindigkeit des Strömungsfeldes. Dabei soll ebenfalls untersucht werden, ob Schwellenwerte für die genannten Parameter existieren, ab denen sich eine Veränderung des Ausbreitungs- und Transportverhaltens zeigt. Anhand der Simulationsergebnisse sollen schließlich unter anderem Empfehlungen für künftige Probenahmen und Messkampagnen von Mikroplastikpartikeln in (fließenden) Gewässern möglich sein. Dabei wären insbesondere Aussagen über die Eignung üblicher Standort sowie Vorschläge bei der Standortwahl für Probeentnahmen in Flüssen von Interesse.

4 Theoretische Grundlagen

Die allgemeine Strömungslehre beschäftigt sich mit der Untersuchung und Beschreibung der Dynamiken von Fluiden meist in Form von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen. Der Begriff Fluid stellt dabei einen Sammelbegriff für alle Arten von Flüssigkeiten und Gasen dar, deren Eigenschaften kurz in Kapitel 4.1 beschrieben werden. Für den einfachen Partikeltransport in einem bewegten Fluid wird häufig die Advektions-Dispersions-Reaktions-Gleichung (ADR-Gleichung) verwendet. Die Herleitung basiert auf der Kontinuitätsgleichung und wird in Kapitel 4.2 näher beschrieben. Mit der ADR-Gleichung kann das Ausbreitungsverhalten von gelösten Stoffen oder dispergierten Teilchen innerhalb eines Kompartiments modelliert werden. Die Lösung der Gleichung gibt die Stoff- bzw. Teilchenkonzentrationen in der Wasserphase entlang der betrachteten Fließstrecke an. Werden Partikel mit einer spezifischen Dichte modelliert, muss ggf. das Absinken der Partikel und die damit einhergehende Verlagerung ins Sediment als Verlustprozess hinzugefügt werden. Die Bestimmung der entsprechenden Verlustraten basiert auf der Sinkgeschwindigkeit der Teilchen und wird in Kapitel 4.3 erläutert.

Im dreidimensionalen Raum werden zur Beschreibung von Strömungsdynamiken eines Fluids üblicherweise die Navier-Stokes-Gleichungen verwendet. Dabei handelt es sich um ein System aus gekoppelten, partiellen Differentialgleichungen, mit dem die zeitliche Änderung des Geschwindigkeitsfeldes in einem festen Volumenelement betrachtet wird. Die Terme der Navier-Stokes-Gleichungen sowie Anfangs- und Randbedingungen, werden in Kapitel 4.4 benannt. Bei der Strömungsmodellierung werden häufig Phasengemische betrachtet. Handelt es sich dabei um zwei inkompressible, nicht-mischbare Fluide, entsteht an der Grenzschicht eine sogenannte freie Oberfläche, die explizit beschrieben wird. Das Vorgehen hierfür wird in Kapitel 4.5 beschrieben.

Um das Transportverhalten eines individuellen Partikels im dreidimensionalen Raum zu betrachten, wird in der Regel der Lagrange-Ansatz verwendet, der auf einer mathematischen Beschreibung der Fluidodynamik aufsetzt. Entsprechende Modelle werden als *Particle-Tracking-Modelle* (PTMs) bezeichnet. Eine kurze Erläuterung dieser PTMs erfolgt in Kapitel 4.6.

4.1 Grundlagen der Hydrodynamik

Fluide sind Flüssigkeiten oder Gase, die basierend auf ihren physikalischen Eigenschaften unterteilt werden. Eine grundlegende Unterteilung wird dabei hinsichtlich der Kompressibilität vorgenommen. Kompressible Fluide spielen vor allem im Bereich der räumlichen Ausbreitung von Gasen eine Rolle. Fluide mit näherungsweise räumlich und zeitlich konstanter Dichte, wie z.B. Wasser, werden als inkompressibel bezeichnet. Durch äußere, auf das Fluid einwirkende Kräfte können innerhalb des Fluids Geschwindigkeitsgradienten entstehen, wodurch Schergeschwindigkeiten erzeugt werden. Diese Gradienten werden auch als Schubspannung bezeichnet und das Verhältnis dieser Größen ergibt die dynamische Viskosität eines Fluids. Ist die Schergeschwindigkeit proportional zur Schubspannung, handelt es sich um ein sogenanntes Newton'sches Fluid (Prandtl 2022, S. 118ff). Die Hydrodynamik beschreibt das Verhalten solcher Newton'schen Fluide (Wolschin 2021).

In der Hydrodynamik gelten die allgemein gültigen Erhaltungssätze der Massen-, Impuls- und Energieerhaltung. Die Massenerhaltung besagt, dass innerhalb eines Volumenelementes dV die zeitliche Änderung der Masse null ist und dementsprechend die einströmende Gesamtmasse in dV der Summe aller ausströmenden Massen entspricht. Als Massenstrom wird hier die Masse pro Volumen betrachtet. Basierend auf der dreidimensionalen Betrachtung ergibt sich die Kontinuitätsgleichung

$$\nabla \vec{u} = 0 \quad (4.1)$$

für inkompressible Fluide, wobei ∇ den Nabla-Operator und \vec{u} den Geschwindigkeitsvektor des Fluids beschreiben. Weiterhin gilt ebenfalls der Impulserhalt, d.h. die Summe aller eintretenden Impulsströme muss gleich der Summe aller austretenden Impulsströme, aller auf dV wirkenden Scher- und Normspannungen und aller auf die Masse von dV wirkenden Kräfte entsprechen. Analog zum Massenstrom wird als Impulsstrom der Impuls pro Volumen beschrieben. Gleichermaßen muss die Energieerhaltung innerhalb eines Volumenelementes gelten. Somit ist die Differenz zwischen der gesamten eingebrachten und austretenden Energie in einem Volumenelement gleich null (Prandtl 2022, S. 275ff).

Aus den Erhaltungssätzen folgen die Navier-Stokes-Gleichungen, die die dreidimensionale Fluidodynamik in einem Volumenelement beschreiben. Eine Beschreibung der Navier-Stokes-Gleichungen erfolgt in Kapitel 4.3.

4.2 Advektions-Dispersions-Reaktions-Gleichung

Die Advektions-Dispersions-Reaktions-Gleichung ist eine lineare, partielle, inhomogene Differentialgleichung zweiter Ordnung und beschreibt die Änderung der Stoffkonzentration an einem Punkt in Abhängigkeit von der Zeit. Die Konzentrationsänderung setzt sich aus der Summe der Änderungen durch Transport- und Reaktionsprozesse zusammen. Für die Transportprozesse wird die Erhaltung der Teilchenzahl N in einem Volumenelement dV durch die Kontinuitätsgleichung (Gl. 4.1) beschrieben (Trapp & Matthies 1996, S. 21ff).

Der Transport wird durch zwei grundlegende Prozesse bedingt: Advektion und Diffusion/Dispersion. Als Advektion wird der passive Transport des Stoffes durch die Bewegung des umgebenden Mediums bezeichnet. Diffusion, auch molekulare Diffusion, beschreibt den entstehenden Konzentrationsausgleich zwischen Stoff und Medium durch die Eigenbewegung von Molekülen ohne äußeren Einfluss und stellt eine Eigenschaft des Moleküls dar. Entsteht die Durchmischung hingegen durch Turbulenzen im umgebenden Medium, wird dies als Dispersion benannt. Dispersion ist daher unabhängig von den Eigenschaften der Moleküle und wird dem umgebenden Medium zugewiesen. Diffusion und Dispersion können mathematisch durch die Fick'schen Gesetze beschrieben werden. In fließenden Gewässern ist der Einfluss durch Turbulenz des Mediums (Wasser) um ein Vielfaches größer als der der molekularen Diffusion, sodass nur Advektion und Dispersion als Transportprozesse betrachtet werden. Darüber hinaus beinhaltet die ADR-Gleichung einen Reaktionsterm erster Ordnung, mit dem Verlustprozesse durch Abbau, Ausgasung oder Sedimentation erfasst werden. Die vollständige Gleichung in der allgemeinen Form lautet:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_{\text{Transport}} + \left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_{\text{Reaktion}} \quad (4.2)$$

Dabei beschreibt C die Stoff- bzw. Teilchenkonzentration [kg/m^3]. In der Praxis werden meist Situationen betrachtet, in denen die gerichtete advektive Bewegung des Mediums durch eine Hauptfließrichtung mit einem konstanten Geschwindigkeitsfeld bestimmt ist (z.B. entlang eines Flusslaufes). Dabei wird angenommen, dass eine schnelle homogene Vermischung der Teilchen durch vertikale und laterale Dispersion erfolgt, sodass die entsprechenden Konzentrationsgradienten vernachlässigt werden können. Unter der weiteren Annahme von Verlustprozessen erster Ordnung mit der konstanten

Ratenkonstante λ und konstantem Eintrag I ergibt sich die eindimensionale Advektions-Dispersions-Reaktions-Gleichung (Schwarzenbach et al. 2003, S. 1006ff):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u \cdot \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda \cdot C + I \quad (4.3)$$

wobei D den Dispersionskoeffizienten [m^2/s], u die mittlere Fließgeschwindigkeit des Fluides [m/s], λ die Summe der Ratenkonstanten der Verlustprozesse [s^{-1}] und I den (konstanten) Eintrag [$\text{kg}/(\text{m}^3 \text{ s})$] darstellen.

Der erste Term von Gl. (4.3) beschreibt die Dispersion und ergibt sich aus dem zweiten Fick'schen Gesetz. In der eindimensionalen Betrachtung kann Dispersion als Stofffluss durch eine Querschnittsfläche A mit dem Konzentrationsgradienten $\Delta C / \Delta x$ beschrieben werden, wobei Δx die räumliche Auflösung der Fließstrecke angibt. Dieser Stofffluss beschreibt die Änderung der Masse in Abhängigkeit der Zeit. Wird nun die Änderung der Konzentration betrachtet, wird der Konzentrationsgradient selber ortsabhängig und die Konzentration hängt dann sowohl von der Zeit als auch dem Ort ab, weshalb die partiellen Differentialquotienten geschrieben werden müssen. Unter der Annahme eines konstanten Dispersionskoeffizienten ergibt sich so das zweite Fick'sche Gesetz:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (4.4)$$

Der zweite Term beschreibt die Konzentrationsänderung aufgrund von Advektion. Der Stofffluss durch eine Querschnittsfläche A wird in Abhängigkeit der Konzentration und der (konstanten) Geschwindigkeit u bestimmt. Analog zur Dispersion kann auch die Advektion als zeitliche Änderung der Konzentration ausgedrückt werden und es folgt die bereits bekannte Schreibweise der Differentialquotienten. Es ergibt sich die Kontinuitätsgleichung und mit einer konstanten Fließgeschwindigkeit u folgt:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \quad (4.5)$$

Der letzte Term $-\lambda C + I$ stellt alle stattfindenden Verlustprozesse und einen potentiellen konstanten Eintrag dar. Die Ratenkonstante λ setzt sich aus der Summe aller Ratenkonstanten für Abbau, Ausgasung und Sedimentation zusammen. Die Ausgasung über die Phasengrenze Wasser/Luft und die Sedimentation werden dabei auch als Verlustprozesse erster Ordnung aus der Wasserphase betrachtet (Trapp & Matthies 1996,

S. 22ff). Für die Simulation von Partikeltransport spielen Abbau und Ausgasung jedoch keine Rolle.

Unter bestimmten Annahmen und Randbedingungen existieren analytische Lösungen für die eindimensionale Advektions-Dispersions-Reaktions-Gleichung. Sowohl für den Dispersionskoeffizienten als auch für die Fließgeschwindigkeit wird dazu angenommen, dass sie über die betrachtete Fließstrecke durch gemittelte Werte beschrieben werden können. Im Allgemeinen ist der Dispersionskoeffizient D allerdings abhängig von den Eigenschaften des betrachteten Strömungsfeldes und dementsprechend ortsabhängig und nicht konstant. Die Annahme eines konstanten Dispersionskoeffizienten stellt insofern eine starke Vereinfachung dar (Schwarzenbach et al. 2003, S. 1040).

Die analytische Lösung für die eindimensionale Advektions-Dispersions-Reaktions-Gleichung für die Konzentration C eines Stoffes an einem Ort x zu einem Zeitpunkt t in einem Fließgewässer bedingt durch einen einmaligen Eintrag m_0 [kg] an der Stelle $x_0 = 0$ m bei $t_0 = 0$ s lautet:

$$C(x, t) = \frac{m_0/A}{\sqrt{4 \cdot \pi \cdot D \cdot t}} \cdot e^{-\frac{(x-ut)^2}{4 \cdot D \cdot t}} e^{-\lambda \cdot t} \quad (4.6)$$

wobei A den Fließquerschnitt [m²] des betrachteten Flusses darstellt (Trapp & Matthies 1996, S. 29).

Die Lösung der ADR-Gleichung gibt die Stoff- bzw. Teilchenkonzentrationen entlang der betrachteten Fließstrecke an. Für die Berücksichtigung von Verlustprozessen sind Ratenkonstanten für die Prozesse Abbau, Ausgasung und Sedimentation erforderlich, die in der Regel aus Literaturdaten abgeleitet werden. Bei der Betrachtung von dispergierten Partikeln (z.B. Mikroplastik) kann der Verlust durch das Absinken auf den Boden des Flusses eine wichtige Rolle spielen und muss als Verlustprozess berücksichtigt werden. Die Sinkgeschwindigkeit der Partikel bestimmt bei gegebener Wassertiefe die mittleren Sedimentationsraten und ist dabei stark abhängig von der Größe, Dichte und Form der Partikel. Die Bestimmung der entsprechenden Verlustraten wird im folgenden Kapitel beschrieben.

4.3 Sinkgeschwindigkeit von Partikeln (vertikale Verteilung)

Im Bereich der Transportmodellierung von Partikeln ist die Sinkgeschwindigkeit eine wichtige Größe zur Beschreibung der Sedimentation und des Sedimenttransportes in der

aquatischen Umwelt. Die Sinkgeschwindigkeit der Partikel bestimmt bei gegebener Wassertiefe die mittlere Rate für die Verlagerung ins Sediment und wird als Prozess erster Ordnung in der eindimensionalen Transportmodellierung berücksichtigt (Siegel & Deuser 1997).

Die Sinkgeschwindigkeit eines Partikels ist eine intrinsische Eigenschaft und abhängig von der Dichte, Größe und Form des Partikels sowie von der Dichte und Viskosität des umgebenden Mediums. Als Sinkgeschwindigkeit wird die resultierende Geschwindigkeit des Absinkens eines Partikels bezeichnet, die sich ergibt, wenn sich ein Kräftegleichgewicht zwischen der Beschleunigungskraft des Partikels und der Summe der Widerstandskräfte des Mediums eingestellt hat (Dietrich 1982). Sie beschreibt daher eine gleichförmige Bewegung bzw. eine Bewegung ohne Beschleunigung (Kathmullina & Isachenko 2017).

Die Sedimentations- bzw. Sinkgeschwindigkeit eines sphärischen Körpers in einer Flüssigkeit wird durch ein Kräftegleichgewicht zwischen der Gravitationskraft auf der einen und der statischen Auftriebskraft sowie der Widerstandskraft (engl. *drag force*) auf der anderen Seite abgeleitet. Die folgende Herleitung dazu stammt aus dem Lehrbuch von Prandtl 2020 (S. 123f). Der Widerstand auf den Körper entsteht aufgrund der Reibung zwischen dessen Oberfläche und dem umgebenden Medium und wird daher auch als Reibungskraft bezeichnet. Für einen kugelförmigen Körper wird die Reibungskraft durch

$$F_d = 6\pi \cdot \eta \cdot r \cdot u_s \quad (4.7)$$

beschrieben, wobei η die dynamische Viskosität des Mediums [kg/(m s)], r den Radius der Kugel [m] und u_s die Sinkgeschwindigkeit des Partikels [m/s] angeben.

Die resultierende Kraft aus der Differenz der Gravitations- und Auftriebskraft ist abhängig von der entsprechenden Dichtedifferenz zwischen dem Partikel und dem Fluid sowie dem Volumen des Partikels. Es ergibt sich folgende Formel für die Beschleunigungskraft auf einen Partikel:

$$F_g = (\rho_p - \rho_f) \cdot g \cdot \frac{4}{3} \pi \cdot r^3 \quad (4.8)$$

wobei ρ_p die Dichte des Partikels [kg/m³], ρ_f die Dichte des Fluides [kg/m³] und g die Gravitationskonstante [m/s²] darstellen.

Die terminale Sinkgeschwindigkeit u_s eines sphärischen Körpers im Kräftegleichgewicht ($F_d = F_g$) kann durch die Stoke'sche Gleichung wie folgt beschrieben werden:

$$u_s = \frac{2}{9} \cdot \frac{\rho_p - \rho_f}{\eta} \cdot g \cdot r^2 \quad (4.9)$$

Diese Formel wird auch Stoke'sches Gesetz genannt, gilt jedoch nur unter der Randbedingung von laminarem Fluss. Anhand der partikel-spezifischen Reynolds-Zahl Re lassen sich die Bereiche von laminaren und turbulenten Strömungen voneinander abgrenzen (Schwarzenbach et al. 2003, S. 1061). Die Reynolds-Zahl gibt an, welchen Strömungswiderstand eine viskose Flüssigkeit auf einen Körper ausübt und wird wie folgt berechnet:

$$Re = \frac{\rho_f \cdot u_f \cdot l}{\eta} = \frac{u_f \cdot l}{\nu} \quad (4.10)$$

wobei u_f die Fließgeschwindigkeit des Fluids [m/s] und l die charakteristische Länge des Körpers [m], für Kugeln entsprechend dem Durchmesser d , beschreibt. Weiterhin ist ν die kinematische Viskosität [m²/s] des Mediums, die mit der dynamischen Viskosität η über die Dichte zusammenhängt: $\nu = \eta / \rho$. Als kritische Grenze für laminaren Fluss wird eine Reynolds-Zahl von $Re < 1$ angegeben, unterhalb derer von einer Stokes-Strömung bzw. einer sogenannten schleichenden Strömung gesprochen wird. Bei Werten größer 10^5 handelt es sich um turbulente Strömungen (Zhiyao et al. 2008).

Aufgrund der durch die Reynolds-Zahl eingeschränkten Gültigkeit des Stoke'schen Gesetzes, ist die Berechnung der Sinkgeschwindigkeit nur für sehr kleine Partikel mit Durchmessern $< 200 \mu\text{m}$ anwendbar (Gregory 2006, S. 24, Kowalski et al. 2016). Für Partikel mit größeren Durchmessern muss zur Abschätzung der Sinkgeschwindigkeit neben der Reibungskraft auch der wachsende Einfluss der Widerstandskraft in Abhängigkeit des Widerstandsbeiwertes C_D berücksichtigt werden. Über das Kräftegleichgewicht ergibt sich für kugelförmige Partikel folgende Formel für den Widerstandsbeiwertes C_D in Abhängigkeit des Durchmessers d (Dietrich 1982):

$$C_D = \frac{4(\rho_p - \rho_f) \cdot g \cdot d}{3\rho_p \cdot u_s^2} \quad (4.11)$$

Aus Gleichung 4.11 geht hervor, dass der Widerstandsbeiwert selbst von der Sinkgeschwindigkeit u_S und dem Partikeldurchmesser abhängt. Um diese Problematik zu umgehen, führen alternative Ansätze wie der von Dietrich (1982) die Verwendung der dimensionslosen Sinkgeschwindigkeit u_* und des dimensionslosen Durchmessers d_* ein, die wie folgt ausgedrückt werden:

$$u_* = \frac{\rho_f \cdot u_S^3}{(\rho_p - \rho_f) \cdot g \cdot \nu} \quad (4.12)$$

$$d_* = \frac{(\rho_p - \rho_f) \cdot g \cdot d^3}{\rho_f \cdot \nu^2} \quad (4.13)$$

Durch Umformung von Gleichung 4.12 lässt sich die Sinkgeschwindigkeit eines sphärischen Körpers bei bekanntem u_* berechnen (Kowalski et al. 2016):

$$u_S = \sqrt[3]{\frac{(\rho_p - \rho_f)}{\rho_f} \cdot g \cdot \nu \cdot u_*} \quad (4.14)$$

Die dimensionslose Sinkgeschwindigkeit u_* kann nach Dietrich (1982) alternativ über eine empirische Funktion in Abhängigkeit des dimensionslosen Partikeldurchmessers d_* geschätzt und dann in Gleichung 4.14 eingesetzt werden.

$$\begin{aligned} \log u_* = & -3,76715 + 1,92944 \cdot \log d_* - 0,09815 \cdot (\log d_*)^2 \\ & - 0,00575 \cdot (\log d_*)^3 + 0,00056 \cdot (\log d_*)^4 \end{aligned} \quad (4.15)$$

Auswertungen von gemessenen Sinkgeschwindigkeiten verschieden geformter Partikel zeigten jedoch, dass die Form der Partikel einen erheblichen Einfluss auf die Sinkgeschwindigkeit hat. Je unregelmäßiger ein Partikel ist, desto langsamer ist seine Sinkgeschwindigkeit im Vergleich zu einem regelmäßig geformten (runden) Partikel mit identischer Dichte. Dies ist damit begründet, dass eine ideale Kugel die geringstmögliche Oberfläche besitzt und folglich die Widerstandskräfte des umgebenden Mediums eine geringere Angriffsfläche auf den Partikel haben. Dadurch stellt sich erst bei größeren Widerstandskräften ein Kräftegleichgewicht ein und es resultiert eine schnellere Sinkgeschwindigkeit. Weiterhin ist bekannt, dass der Einfluss der Form mit der Größe der Partikel zunimmt. Dies lässt sich auch an den damit verbundenen, höheren Reynolds-Zahlen ablesen. Je größer ein Partikel ist, desto größer ist der Einfluss seiner

unregelmäßigen Form auf das Absinkverhalten, da der Widerstand des umgebenden Mediums ebenfalls zunimmt. Gleichung 4.14 ist deshalb nur für die Abschätzung der Sinkgeschwindigkeit von sphärischen Körpern anwendbar. Da jedoch Formen natürlicher Partikel – insbesondere sekundärer Mikroplastikpartikel – keiner idealen Kugel entsprechen, ist eine Anpassung der Formeln notwendig (Kathmullina & Isachenko 2017).

Einer der am häufigsten verwendeten Parameter zur Abschätzung der Abweichung der Form eines Partikels, hinsichtlich eines idealen sphärischen Körpers, ist der *Corey Shape-Faktor* (CSF). Dieser empirisch entwickelte Parameter ist wie folgt definiert (Corey 1949):

$$CSF = \frac{c}{\sqrt{ab}} \quad (4.16)$$

wobei a , b und c jeweils die längste, mittlere und kürzeste, rechtwinklig zueinanderstehende Achse [m] des Partikels beschreiben. Der *CSF* liegt im Wertebereich zwischen 0 und 1 und gibt das Verhältnis zwischen der Querschnittsfläche einer Kugel und der maximalen Querschnittsfläche eines Ellipsoids an. Je kleiner der Wert, desto flacher ist die Form des Partikels (Dietrich 1982). Die Anwendung des *Corey Shape-Faktors* auf ein breites Spektrum an Partikelformen ist bisher nur eingeschränkt möglich, da die Bestimmung der drei benötigten Seitenlängen a , b und c insbesondere für sehr kleine Partikel technisch schwierig und zeitintensiv ist. Aufgrund dessen ist die Güte der Vorhersagekraft der Sinkgeschwindigkeit eines unregelmäßig geformten Partikels zum jetzigen Zeitpunkt nicht vollständig empirisch belegbar (Kathmullina & Isachenko 2017).

Da Sinkgeschwindigkeiten, und entsprechend auch daraus resultierende Absinkraten, abhängig von der Größe, Dichte und Form der Partikel sind, müssen sie für jeden Partikel separat ermittelt werden. Folglich ist die Beschreibung des Transportes von Partikeln mittels der Advektions-Dispensions-Reaktionsgleichung immer nur für eine festgelegte Größe, Dichte und Form von Mikroplastikpartikeln gültig.

4.4 Mathematische Beschreibung der Fluidynamiken

Das Transportverhalten von gelösten Teilchen und Partikeln in einem Gewässer wird maßgeblich durch die Fluidynamik des Mediums bestimmt. Zur mathematischen Beschreibung der dreidimensionalen Fluidynamik werden die Navier-Stokes-Gleichungen verwendet. Sie stellen die Grundlage der Modellierung von 3D-

Fluiddynamiken dar und beschreiben die zeitliche Änderung des Geschwindigkeitsfeldes in einem festen Volumenelement dV . Diese ist neben den Auswirkungen diverser äußerer Kräfte unter anderem durch den skalaren Druck beeinflusst, für den jedoch keine explizite Gleichung zur Beschreibung vorhanden ist. Aufgrund dessen ist eine vollständige analytische Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen nicht möglich und es werden numerische Lösungsverfahren verwendet (Robinson et al 2016, S.1f).

Die allgemeinen Navier-Stokes-Gleichungen zur Beschreibung der Geschwindigkeitsänderung eines Fluids lauten wie folgt:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = \frac{-1}{\rho} \nabla p - \vec{u} \nabla \vec{u} + \nu \nabla^2 \vec{u} + \frac{1}{3} \nu \nabla (\nabla \cdot \vec{u}) + \vec{f} \quad (4.17)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (4.18)$$

wobei $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)$ den Geschwindigkeitsvektor darstellt, der die Geschwindigkeitskomponenten in die jeweilige Raumrichtung x, y, z enthält, und der Term \vec{f} diverse Kräfte beschreibt. Die Herleitung für Gl. (4.17) folgt aus der linearen Impulserhaltung in einem Volumenelement dV . Analog ergibt sich Gl. (4.18) aus der Bedingung der Massenerhaltung.

Der Term $\frac{1}{3} \nu \nabla (\nabla \cdot \vec{u})$ beschreibt die kompressible Reibung. Da Wasser als ein inkompressibles Fluid angesehen werden kann, entfällt dieser Term bei der weiteren Betrachtung. Bei kompressiblen Fluiden müsste zudem die Dichte ρ als Unbekannte berücksichtigt werden. Dementsprechend reduziert sich Gl. 4.17 für die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen auf die Form:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = \frac{-1}{\rho} \nabla p - \vec{u} \nabla \vec{u} + \nu \nabla^2 \vec{u} + \vec{f} \quad (4.19)$$

Gleichung (4.19) und (4.18) bilden zusammen ein Gleichungssystem von insgesamt vier nicht linearen, gekoppelten, partiellen Differentialgleichungen zweiter Ordnung für die vier Unbekannten u_x, u_y, u_z (Komponenten des Geschwindigkeitsvektors \vec{u}) und p (Druck) (Prandtl 2022, S. 284). Auf eine ausführliche Herleitung der Navier-Stokes-Gleichungen wird an dieser Stelle verzichtet und auf entsprechende Literatur (z.B. Chorin & Marsden 1993, Teman 1995, Robinson et al. 2016) verwiesen.

Die Navier-Stokes-Gleichungen stellen häufig die Grundlage von hydrodynamischen Modellen dar, um das Strömungs- und Geschwindigkeitsfeld der betrachteten Modellumgebung von z.B. einem See, einem Flussabschnitt oder einer Küstenregion zu simulieren. Dabei werden die Gleichungen aufgrund der Komplexität mit Hilfe numerischer Verfahren gelöst. Die Lösungen beschreiben anschließend vollständig den dynamischen Status des betrachteten Fluids (Baker 1974, S. 6).

Die numerischen Lösungsverfahren benötigen die Definition von Anfangs- und Randbedingungen für die Navier-Stokes-Gleichungen. Als Anfangsbedingungen werden für den Zeitpunkt $t = 0$ s Startwerte für die Variablen angegeben. Eine übliche Anfangsbedingung wäre bspw. eine Fließgeschwindigkeit zu Beginn von Null. Randbedingungen hingegen legen das Verhalten des Fluids an den Rändern der Modellumgebung fest. Zum Beispiel gilt für die Geschwindigkeit eines Fluids innerhalb einer Geometrie an deren Wand die Haftbedingung. Diese besagt, dass die Geschwindigkeit des Fluids der der Wandgeschwindigkeit entspricht und wird als Dirichlet-Randbedingung bezeichnet. Bei einer unbewegten Geometrie ist die Wandgeschwindigkeit gleich Null und für die Dirichlet-Randbedingung gilt:

$$\vec{u}_0 = 0 \frac{m}{s} \quad (4.20)$$

Für den Druck innerhalb eines Fluides gilt, dass dieser zur Wand hin abnimmt, in diesem speziellen Fall nimmt er bis auf null ab. Dies entspricht daher dem Nullgradienten und wird Neumann-Randbedingung genannt. Die Neumann-Randbedingung für den Druck lautet wie folgt (Ferziger et al. 2020, S. 224f):

$$\frac{\partial p}{\partial x} = 0 Pa \quad (4.21)$$

4.5 Zweiphasenströmung

In den vorherigen Abschnitten wurde die Strömungsdynamik eines einzelnen Fluids betrachtet. Die Modellierung von Fluidodynamiken und deren Strömungsfelder erfordert häufig jedoch die Berücksichtigung von zwei (oder auch mehreren) Fluiden. Bei Zweiphasenströmungen entsteht zwischen zwei inkompressiblen, nicht-mischbaren Fluiden eine sogenannte freie Oberfläche, deren Beschreibung eine Schwierigkeit darstellt. Hierfür gibt es zwei grundlegende Vorgehensweisen: die Interface-Verfolgungsmethode und die Interface-Erfassungsmethode. Interface-

Verfolgungsmethoden beschreiben die freie Oberfläche als scharfe Trennlinie und verfolgen dessen Bewegung. Die Trennlinie wird dabei durch ein randangepasstes Gitter dargestellt, das sich in jedem Zeitschritt an die aktuelle Auslenkung der Oberfläche anpasst. Die Stabilität und Effizienz dieser Methode ist jedoch stark vom verwendeten Algorithmus abhängig, der die Bewegung der freien Oberfläche beschreibt. Insbesondere bei der Beschreibung von Wellenreflexion kann es zu Instabilitäten kommen (Ferziger et al. 2020, S. 602ff).

Die Interface-Erfassungsmethode beschreibt die Grenzfläche nicht als konkrete Trennlinie, sondern mit Hilfe eines festen Gitters. Ein bekanntes Vorgehen hierfür ist das *Marker-and-Cell-Verfahren* (MAC) von Harlow und Welch (1965). Dabei werden zum Startzeitpunkt masselose Partikel auf der freien Oberfläche platziert, deren Bewegung verfolgt und anhand dessen die Grenzfläche ermittelt. Eine weitere übliche Methode ist die *Volume-of-Fluid-Methode* (VOF), vorgestellt von Hirt und Nichols (1981). Jeder Zelle wird der zusätzliche Parameter α zugewiesen, der den Volumenanteil einer der beiden Phasen angibt. In den meisten Modellen zur Beschreibung einer Zweiphasenströmung wird die Grenzfläche zwischen einer Flüssigkeit und einem Gas betrachtet. Es gilt, dass für $\alpha = 1$ die Zelle vollständig mit Flüssigkeit und für $\alpha = 0$ mit Gas gefüllt ist. Innerhalb der Grenzschicht zwischen den Fluiden ist $0 < \alpha < 1$ und die freie Oberfläche wird dort definiert, wo der Volumenanteil bei 0,5 liegt (Ferziger et al. 2020, S. 602f).

Für VOF-Verfahren wird neben den Erhaltungsgleichungen für die Masse und den Impuls noch eine weitere Transportgleichung für den Volumenanteil aufgestellt und gelöst. Die Transportgleichung für α , auch Phasenindikatorfunktion genannt, lautet:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial \alpha u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (4.22)$$

Anders als bei der MAC-Methode wird die freie Oberfläche hier nicht als strenge Trennlinie mit dreidimensionalen Koordinaten angegeben, sondern dehnt sich über eine oder ggf. mehrere Zellen aus. Daher ist auf eine hinreichend feine Auflösung des Gitters nahe der Grenzfläche zu achten. Jedoch liegen darin auch die Vorteile der VOF-Methode; dies macht sie im Gegensatz zur MAC-Methode effizienter, sie benötigt weniger Speicherkapazität und ist sehr gut anwendbar auf komplexe Modelle wie bspw. brechende Wellen (Ferziger et al. 2020, S. 603).

4.6 Lagrange-Ansatz für *Particle-Tracking*-Modelle

Die Darstellung der vollständigen Kinematik eines Strömungsfeldes beinhaltet die Beschreibung der Dynamik eines jeden Fluidteilchens in jeglicher Hinsicht. Dazu gibt es zwei prinzipiell verschiedene Herangehensweisen, die auf einer unterschiedlichen Betrachtung der Teilchen beruhen: der Euler- und der Lagrange-Ansatz. Das resultierende Strömungsbild aus der Betrachtungsweise ist dabei immer abhängig vom gewählten Bezugssystem (Prandtl 2022, S. 46f).

Mit dem Euler-Ansatz wird eine ortsfeste Betrachtungsweise bezeichnet. Dabei wird die Geschwindigkeit bzw. die Änderung der Geschwindigkeit an einem Raumpunkt mit den Koordinaten x, y, z zum Zeitpunkt t betrachtet. Die Darstellung der Geschwindigkeitskomponenten u_x, u_y, u_z erfolgt daher als Funktion des Raumpunktes und der Zeit:

$$u_x = f_1(x, y, z, t) \quad u_y = f_2(x, y, z, t) \quad u_z = f_3(x, y, z, t) \quad (4.23)$$

Der Lagrange-Ansatz beinhaltet hingegen eine teilchenfeste Betrachtungsweise und beschreibt die Änderung des Ortes in Abhängigkeit des Anfangsortes mit den Koordinaten x_0, y_0, z_0 und der Zeit t . Für die drei Koordinaten des Raumpunktes eines Fluidteilchens ergibt sich daher folgende Darstellung:

$$x = F_1(x_0, y_0, z_0, t) \quad y = F_2(x_0, y_0, z_0, t) \quad z = F_3(x_0, y_0, z_0, t) \quad (4.24)$$

Gleichung (4.23) und (4.24) werden daher auch als *Grundgleichungen der Kinematik* benannt (Prandtl 2022, S. 44f).

Beide Ansätze sind in dieser Form nur für die Betrachtung inkompressibler Fluide gültig. Bei kompressiblen Medien, wie Gasen, ist die zusätzliche Berücksichtigung der Druckänderung notwendig, wobei Schwankungen unter 1% vernachlässigt und als inkompressibel angesehen werden können (Prandtl 2022, S. 43). Im Folgenden werden ausschließlich inkompressible Fluide betrachtet, weshalb auf die Ansätze unter Einbezug des Drucks an dieser Stelle nicht genauer eingegangen wird.

Bei der Verwendung des Lagrange-Ansatzes wird das Fluid als Zusammensetzung aus unendlich vielen Partikeln betrachtet, für die sich jeweils eine Trajektorie erstellen lässt (Robinson et al. 2016, S. 340). Die Trajektorie, also die Bewegung eines Partikels, wird mit dem Positionsvektor $X^n(t)$ beschrieben und enthält die Koordinaten x, y, z des

Teilchens in Abhängigkeit der Zeit t . Diese Betrachtungsweise der Ortskoordinaten über die Zeit liefert die jeweilige Bewegungsbahn des n -ten Partikels. Die Anzahl n der Partikel kann dabei diskret oder kontinuierlich angenommen werden (van Sebille et al. 2018). Mathematisch wird die Trajektorie eines Partikels mit der folgenden gewöhnlichen Differentialgleichung beschrieben:

$$\frac{dX^n}{dt} = u(X^n(t), t) \quad \text{mit } X(0) = X_0 \quad (4.25)$$

wobei X_0 jeden Raumpunkt mit den Koordinaten x_0, y_0, z_0 zum Zeitpunkt $t = 0$ s darstellt (Robinson et al. 2016, S. 340).

Für die totale zeitliche Änderung der Geschwindigkeitskomponenten $u_i(x, y, z, t)$ des Geschwindigkeitsvektors $\vec{u}(u_x, u_y, u_z)$ ergibt sich der folgende Ausdruck:

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{u}}{\partial x} \cdot u_x + \frac{\partial \vec{u}}{\partial y} \cdot u_y + \frac{\partial \vec{u}}{\partial z} \cdot u_z \quad (4.26)$$

Die Gesamtheit der Lösungen für $\vec{u}(x, t)$ der Navier-Stokes-Gleichung stellt schließlich das resultierende Geschwindigkeitsfeld einer fließenden Strömung dar. Je nach Definitionsbereich von \vec{u} gibt es verschiedene Lösungsansätze auf deren explizite Ausführung im Folgenden verzichtet und auf die entsprechende Literatur verwiesen wird (Robinson et al. 2016, S. 340 ff.).

Neben der Beschreibung unendlicher vieler Fluidpartikel kann mit Hilfe des Lagrange-Ansatzes auch eine begrenzte Anzahl an Partikeln innerhalb einer Strömungsdynamik modelliert werden. Die Simulation der Bewegung eines Partikels in einem vorhandenen Strömungsfeld wird mit sogenannten *Particle-Tracking-Modellen* (PTM) durchgeführt. Sie verwenden die Lagrange-Vorgehensweise, um die Transportwege verschiedener Partikel innerhalb eines inkompressiblen Fluids zu simulieren. PTMs finden beispielsweise Anwendung in der Modellierung von Sedimenttransport in Küstenregionen (Black et al. 2007), bei der Simulation der Dispersion von Gasmolekülen (Widiatmojo et al. 2016) oder radioaktiver Nukliden (Doucet et al. 2008).

Diese Art der Modellierung ermöglicht es, Angaben über Position, Geschwindigkeit und Beschleunigung für eine große Menge an Partikeln individuell zu bestimmen (Schröder & Schanz 2022). Eine gängige Vorgehensweise ist dabei die Kombination eines

dynamischen Modells, das die Strömungsdynamik des betrachteten Fluids mit dem Euler-Ansatz beschreibt, mit einem *Particle-Tracking*-Modell (Prandtl 2022, S. 339).

Im den vergangenen Jahren wurden PTMs im Bereich der Umweltmodellierung von aquatischen Systemen vermehrt für die Simulation von Plastikpartikeln verwendet. Hierfür werden beispielsweise hydrodynamische Modelle einer Küstenregion oder eines Ästuars als Basis genutzt und die dort vorliegenden Strömungsdynamiken simuliert. In das meist stationäre Strömungsfeld werden anschließend Partikel mit Hilfe eines PTMs implementiert und deren individuelles Transportverhalten unter den vorliegenden Gegebenheiten modelliert. Konkrete Beispiele für die Anwendung von *Particle-Tracking*-Modellen in der aquatischen Umwelt wurden bereits in Kapitel 2.3 benannt (z.B. Iwasaki et al. 2017, López et al. 2021).

5 OpenFOAM

OpenFOAM (*Open Field Operation And Manipulation*) ist ein, in der Programmiersprache C++ geschriebenes, freies Simulationssoftwarepaket zur Lösung von Fragestellungen im Bereich der numerischen Strömungsmechanik (engl.: *computational fluid dynamics, CFD*). Die erste Version wurde ursprünglich von Jasak (1996) und Rusche (2002) veröffentlicht und seitdem kontinuierlich weiterentwickelt. OpenFOAM besteht aus einer Vielzahl an Bibliotheken und Codes zum Lösen komplexer Problem wie bspw. (Mehr-)Phasenströmungen, Turbulenzen, Wärmetransport und chemischen Reaktionen. Die Entwickler stellen dem Nutzer bereits eine Auswahl an vorgefertigten sogenannten *Solvern* für die Betrachtung verschiedener Probleme aus dem Bereich der Kontinuumsmechanik zur Verfügung. Diese *Solver* werden im Folgenden als Löser bezeichnet. Sie sind das Kernstück von OpenFOAM und bieten die Möglichkeit, die entsprechenden Differentialgleichungen für ein bestimmtes Transportproblem unter Verwendung vorgegebener Diskretisierungen und Parameter numerisch zu lösen (5.2 und 5.3).

In der Strömungsmodellierung werden häufig Zwei- oder auch Mehrphasenströmungen betrachtet und es entsteht eine freie Oberfläche zwischen nicht mischbaren, inkompressiblen Fluiden. OpenFOAM verwendet zur Betrachtung dieser freien Oberfläche den *Volume-of-Fluid-Ansatz* (s. Kapitel 4.5). Dabei wird das *Finite-Volume-Verfahren* zur Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen verwendet. Die numerische Vorgehensweise besteht darin, die Modellumgebung räumlich in eine endliche Anzahl an Zellen, sogenannten Kontrollvolumina (KV), zu unterteilen und über die jeweiligen Zustandsgrößen einer Zelle zu integrieren. Eine ausführliche Beschreibung der *Finite-Volume-Methode* ist in Leveque (2002) zu finden.

OpenFOAM stellt ebenfalls Werkzeuge für die Definition und Parametrisierung von Modellen zur Verfügung und bietet die Option eigene Löser zu entwickeln bzw. vorhandene zu erweitern und an die Fragestellung anzupassen. Bestandteil der OpenFOAM-Bibliotheken sind zudem Beispiele (*Tutorials*) für die Anwendung der verschiedenen Löser. Weiterhin besteht die Möglichkeit, zusätzliche Funktionen (*Functions*) bspw. zur Verfolgung eines Tracers oder zur Erstellung von Graphiken für die Nachbearbeitung hinzuzufügen (5.4). Alle Beschreibungen des Aufbaus sowie der Funktionsweise von OpenFOAM in den folgenden Kapiteln sind sinngemäß dem Benutzerhandbuch zur Version 7 (Greenshields 2019) entnommen.

Im Folgenden wird die Gesamtheit der Geometrie, inklusive der Definition der Zustandsgrößen und deren Randbedingungen sowie die Angabe des verwendeten Löser, als Modell bezeichnet. Eine individuelle Simulation dieses Modells mit konkreten Anfangsbedingungen wird in Anlehnung an die englische, in OpenFOAM verwendete Bezeichnung *case* mit dem Begriff „Fall“ benannt. Ein übliches Vorgehen beim Erstellen eines Modells ist es, ein vorhandenes Beispiel, das ein ähnliches Problem behandelt, als Grundlage zu verwenden und an die eigene Fragestellung anzupassen, um den Aufwand einer kompletten Neu-Implementation zu vermeiden. Dabei wird die gewünschte Umgebungsgeometrie für das Modell hinzugefügt, das Modellgitter erzeugt (5.1.1) und die Anpassung der Randbedingungen der Zustandsgrößen vorgenommen (5.1.2). Anschließend können beliebig viele Fälle für das Modell erstellt und simuliert werden. Die allgemeine Struktur eines Falls ist dabei immer gleich und wird in Kapitel 5.1 genauer beschrieben. Die Darstellung der Simulationsergebnisse und deren Bearbeitung erfolgt über ein externes Visualisierungsprogramm. Innerhalb dieser Arbeit wird dafür ParaView genutzt (5.5).

5.1 Pre-processing: Aufbau und Datenstruktur einer Simulation

Zu Beginn eines jeden Modells wird ein eigener Fallordner erstellt. Der allgemeine Aufbau dieses Ordners ist dabei immer gleich und in reduzierter Form schematisch in Abb. 5.1 dargestellt. Auf die vollständige Darstellung aller enthaltenen Unterordner und Dateien wurde der Übersichtlichkeit halber verzichtet.

Ein Fallordner setzt sich aus drei Unterordnern zusammen: *constant*, *system* und *0*. Der *constant*-Ordner beinhaltet Informationen über das numerische Gitter, die konstanten Parameter, die Eigenschaften des Fluids und das Turbulenzmodell. Weiterhin befinden sich hier je nach verwendetem Löser auch die Dateien zum Parametrisieren und Positionieren von Partikeln. Im ersten Schritt wird für die Modellierung der Umgebungsgeometrie ein numerisches Gitter, ein sogenanntes *Mesh*, erzeugt, das die räumliche Diskretisierung vorgibt (5.1.1). Wird diese Geometrie mit Hilfe eines externen Programms (z.B. Salome8) erstellt, befinden sich die entsprechenden Dateien der eigenen Geometrie (*.*stl*) im Unterordner *trisurface*. Dabei müssen die Bestandteile der Geometrie jeweils einer Kategorie zugeordnet werden, für die dieselben Randbedingungen gelten. Die Anzahl sowie die Benennung der Kategorien sind frei wählbar. Alle Bestandteile der Geometrie innerhalb einer Kategorie werden im

Folgenden als Elemente bezeichnet. Beispielsweise kann eine Einteilung in Einlass, Auslass, Wände und Atmosphäre oder in Boden, Decke und Wände erfolgen.

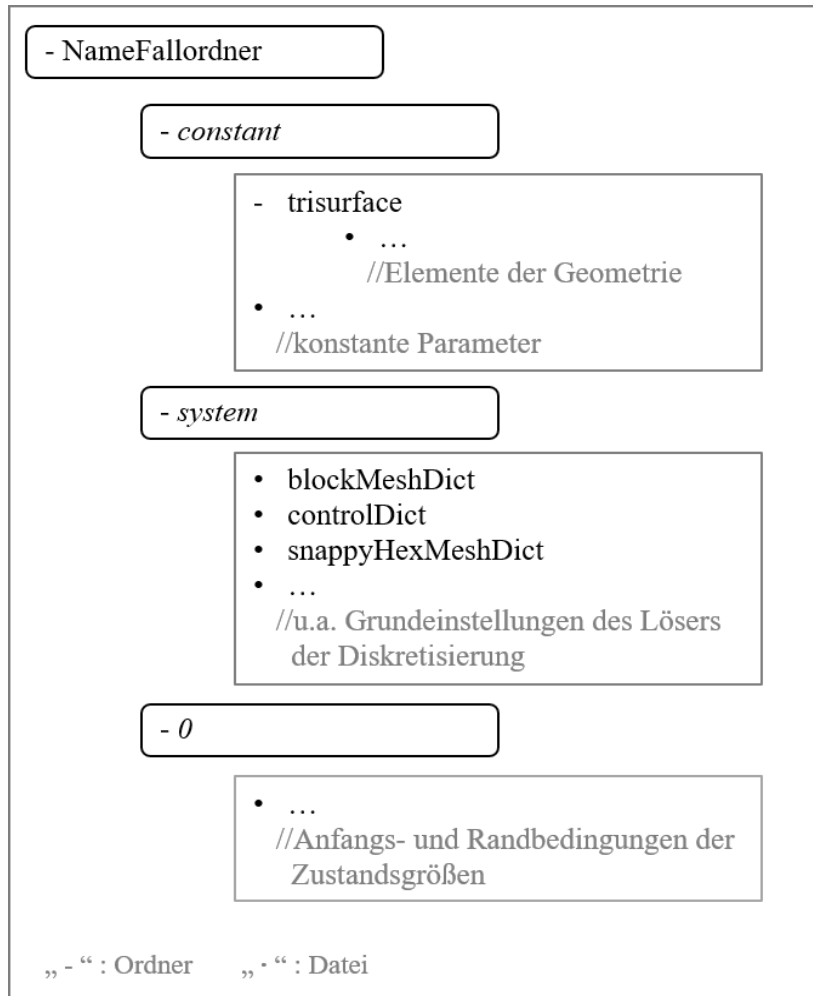


Abbildung 5.1: Schematischer Aufbau der Struktur eines Fallordners in OpenFOAM (eigene Darstellung).

Im Ordner `system` wird zum einen in der Datei `blockMeshDict` die Bauanleitung zum Erzeugen des Modellgitters definiert. Zum anderen werden in der Datei `controlDict` neben dem verwendeten Löser, auch der Start- und Endzeitpunkt sowie der Zeitschritt für das Herausschreiben der Simulationsergebnisse angegeben. Für jeden Zeitschritt wird nach Ablauf der Rechenzeit ein eigener Unterordner im Fallordner erstellt, der für alle Zustandsgrößen den aktuellen Zustand in einer verschlüsselten Datei enthält. Weiterhin werden in separaten Dateien die Diskretisierungen (z.B. für die zeitliche Ableitung) und die Grundeinstellungen für den Algorithmus des Löfers (s. 5.2) festgelegt. Der `0`-Ordner beinhaltet für jede Zustandsgröße eine Datei, in der die physikalische Einheit definiert ist und die Anfangs- und Randbedingungen festgelegt werden. In den folgenden Kapiteln wird eine kurze Beschreibung der Erzeugung des Modellgitters und der wichtigsten Randbedingungen gegeben.

5.1.1 Erzeugen des Modellgitters

Einer der elementarsten Schritte bei der Erstellung eines neuen Modells in OpenFOAM ist die Erzeugung des Modellgitters – das sogenannte *Meshen*. Dabei wird die gewünschte Geometrie in Gitterzellen unterteilt, für die schließlich bei der Simulation die Differentialgleichungen numerisch gelöst werden. Das Modellgitter gibt folglich die räumliche Diskretisierung vor.

Für den Prozess des *Meshens* sind zwei Bestandteile erforderlich: Zum einen ein Gitter, das die gesamte Modellumgebung beinhaltet (*blockMesh*) und zum anderen die Geometrie an sich. Das Gitter wird in der Datei *system/blockMeshDict* definiert, wo ebenfalls die gewünschte maximale Zellgröße angegeben wird. In dieser Arbeit wurde die Modellgeometrie in Form von *stl*-Dateien im Vorfeld mit einem externen Programm (Salome 8¹) erstellt.

In der Datei *system/snappyHexMesh* werden schließlich die Anweisungen für das Verschneiden der Modellgeometrie mit dem Umgebungsgitter (*blockMesh*) angegeben, wobei die Ränder der Geometrie gesondert betrachtet werden. Der Prozess verläuft iterativ, sodass die entsprechenden Zellen an den Rändern immer weiter verfeinert werden. Anschließend werden die dabei entstandenen, eckigen Randstrukturen auf die Geometrie projiziert (*snappen*), sodass sie einen glatten Rand bilden. Letztlich wird das Modellgitter auf eventuelle Fehler überprüft.

5.1.2 Randbedingungen

Eine große Bedeutung kommt der Wahl der passenden Randbedingungen zu. Diese werden benötigt, um an den Rändern des Rechengebietes bzw. den Randzellen der Geometrie, die Differentialgleichungen zur Beschreibung der Strömungsdynamik lösen zu können. Die Simulationsergebnisse unterscheiden sich je nach Modell und den gewählten Bedingungen, weswegen es wichtig ist, entsprechend realitätsnahe Bedingungen zu definieren.

In OpenFOAM wird die Geometrie des Modells in Elemente verschiedener Kategorien unterteilt, für die dieselben Bedingungen gelten. Daher muss die Definition der Anfangs- und Randbedingungen für jede Zustandsgröße und jede Kategorie separat erfolgen. Hierfür bietet OpenFOAM reichlich Möglichkeiten für die Verwendung klassischer, aber

¹ Aktuelle Version: Salome 9.10.0
Zuletzt abgerufen am 18.04.23: <https://www.salome-platform.org/>

auch programmspezifischer Randbedingungen. Die häufig verwendete Dirichlet-Randbedingung wird hier mit dem Begriff *fixedValue* und der Angabe des gewünschten Wertes definiert. Analog wird die Neumann-Randbedingung mit dem Begriff *fixedGradient* angegeben. Für die spezielle Neumann-Randbedingung, bei der die Ableitung der Funktion gleich Null gesetzt wird, wird der Begriff *zeroGradient* verwendet. Darüber hinaus stellt OpenFOAM eine Vielzahl an programmspezifischen Anfangs- und Randbedingungen zur Verfügung, die aus den sogenannten *Basis-Randbedingungen* abgeleitet sind. In vielen Modellen ist es beispielsweise nötig, die Strömungsgeschwindigkeit an den Wänden der Geometrie gleich Null zu setzen. Dies wird mit dem Begriff *noSlip* definiert. Für eine vollständige Auflistung aller in OpenFOAM vorhandenen Randbedingungen wird auf das Benutzerhandbuch verwiesen.

5.2 Solver

Für Simulationen mit OpenFOAM gibt es eine Reihe von frei verfügbaren Lösern, sogenannte *Solver*, die für bestimmte Problemstellungen entwickelt wurden und die Gleichungsstruktur für die numerische Simulation vorgeben. Neben der Verwendung eines bereits vorhandenen Löser, können diese auch beliebig erweitert und angepasst oder auch eigene Löser entwickelt werden. Dies erfordert allerdings ein umfangreiches Wissen über interne Strukturen, sowie gute Programmierkenntnisse und ist für viele Fragestellungen aufgrund der großen Auswahl an Lösern nicht nötig. Im Folgenden werden die zwei in dieser Arbeit verwendeten Löser und deren Eigenschaften kurz vorgestellt.

5.2.1 interFoam

Mit Hilfe des *interFoam*-Löser wird das Strömungsverhalten von zwei inkompressiblen, nicht miteinander mischbaren, isothermen Fluiden (hier: Wasser und Luft) in einer vorgegebenen Geometrie simuliert. Die Strömungsdynamiken der Fluide werden in einem gemeinsamen Strömungsfeld dargestellt und durch die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen (Gl. 4.19 und 4.18) beschrieben. Dieser einzige Satz der Erhaltungsgleichungen gilt daher für beide Fluide. Die Grenzschicht zwischen den Fluiden wird mit der *VOF*-Methode und mit dem *Finite-Volume*-Diskretisierungsverfahren gelöst. Der Volumenanteil α , für den beim *VOF*-Ansatz die zusätzliche Transportgleichung (Gl. 4.22) aufgestellt und gelöst wird, wird in OpenFOAM über die Zustandsgröße *alpha.water* angegeben und in der entsprechenden

Datei im 0 -Ordner definiert. Als Lösungsvorgehen wird hier der *PIMPLE*-Algorithmus verwendet (s. Kapitel 5.3).

5.2.2 icoUncoupledKinematicParcelFoam

Der Löser *icoUncoupledKinematicParcelFoam* ist ein transienter Löser für den passiven Transport einer kinematischen Partikelwolke mit optionaler Gitterbewegung und Änderung der Gittertopologie. Dabei wird ein bestehendes Geschwindigkeitsfeld des umgebenden Fluids verwendet, um die Ausbreitung der Partikelwolke bestehend aus sphärischen Partikeln zu entwickeln. Der Löser berücksichtigt die Interaktion zwischen einzelnen Partikeln, die Interaktion zwischen Partikel und Fluid durch Volumenverdrängung wird hingegen vernachlässigt. Dies ist für entsprechend kleine Partikel wie Mikroplastik gerechtfertigt. Die Positionierung der Partikelwolke wird in der Datei *constant/kinematicCloudPosition* festgelegt. Darin können beliebig viele Partikel einzeln in Form ihrer kartesischen Koordinaten positioniert werden. Hier sei anzumerken, dass die Rechendauer mit Anzahl der Partikel stark zunimmt. In der Datei *constant/kinematicCloudProperties* werden verschiedene Partikeleigenschaften wie unter anderem Dichte, Durchmesser und Zeitpunkt der Einbringung definiert. Der Durchmesser kann für alle Partikel identisch oder basierend auf einer Wahrscheinlichkeitsverteilung variabel gesetzt werden.

5.3 Lösungsverfahren

Bei einer Simulation in OpenFOAM wird zum Lösen der Transportgleichungen (hier die Navier-Stokes-Gleichungen) einer der drei folgenden Algorithmen verwendet:

- *SIMPLE* (semi-implicit method for pressure-linked equations)
- *PISO* (pressure-implicit split operator)
- *PIMPLE* (Kombination der beiden anderen)

Welcher Algorithmus zur Anwendung kommt, ist im jeweiligen Löser festgelegt. Im Folgenden wird das Vorgehen der Algorithmen kurz beschrieben. Eine ausführliche Erklärung der mathematischen Hintergründe ist in Ferziger et al. (2020) nachzulesen.

Das Vorgehen der zwei Algorithmen *SIMPLE* und *PISO* zur numerischen Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen ist ähnlich und nutzt die Kopplung der Massenerhaltung und des Druckimpulses. Das Gleichungssystem, bestehend aus vier partiellen Differentialgleichungen für die vier Unbekannten (Druck und drei

Geschwindigkeitskomponenten), wird mit Hilfe der Diskretisierung in ein algebraisches Gleichungssystem überführt. Anschließend werden die Randbedingungen gesetzt und die diskrete Impulsgleichung gelöst, um das mittlere Geschwindigkeitsfeld zu berechnen. Im nächsten Schritt werden die Massenflüsse an den Zellrändern der Gitterzellen bestimmt und die Druckgleichung gelöst. Beim *SIMPLE*-Algorithmus wird beim Lösen der Druckgleichung zusätzlich eine Unterrelaxation (Dämpfung der iterativen Änderung des Drucks) angewendet. Basierend auf dem daraus resultierenden Druckfeld werden sowohl die Massenflüsse an den Zellrändern sowie das Geschwindigkeitsfeld korrigiert. Letztlich werden die Randbedingungen für den nächsten Zeitschritt aktualisiert. Der *PISO*-Algorithmus wiederholt die zuvor beschriebenen Schritte für eine festgelegte Anzahl an Iterationen. Dahingegen wird der Vorgang beim *SIMPLE*-Algorithmus solange iterativ durchlaufen, bis eine Konvergenz der Kontinuitätsgleichung im Rahmen der vorgegebenen Genauigkeit erreicht ist.

5.4 Ergänzende Funktionalitäten

Simulationen können in OpenFOAM um verschiedene Funktionalitäten erweitert werden. Diese können zum einen in Form von Funktionen vor Beginn der Simulation hinzugefügt werden, indem sie in der Datei *system/controlDict* implementiert werden. Zum anderen können sie im Rahmen der Nachbearbeitung (*Post-Processing*) auf die Simulationsergebnisse angewendet werden. OpenFOAM bietet eine Vielzahl an vordefinierten Funktionen, die individuell angepasst oder auch erweitert werden können. Innerhalb dieser Arbeiten wurden zwei solcher Funktionen verwendet – *scalarTransport* und *particleTracks* – die im Folgenden kurz beschrieben werden.

Mit der Funktion *scalarTransport* wird der Transport eines passiven Skalarfeldes innerhalb einer Strömungsdynamik berechnet. Es wird ein Volumenelement definiert und dessen Ausbreitung basierend auf dem Geschwindigkeitsfeld des umgebenden Fluids ermittelt. Da es sich um einen passiven Transport des Skalarfeldes handelt, werden keine Rückkopplungen auf das Geschwindigkeitsfeld berücksichtigt. Die Funktion wird für jeden Zeitschritt ausgeführt und muss daher in der Datei *system/controlDict* definiert werden. Für die Ausgabe der Simulationsergebnisse ist es erforderlich, eine neue Zustandsgröße für das Skalarfeld zu definieren. Dazu wird im θ -Ordner eine entsprechende Datei angelegt und die zugehörigen Randbedingungen definiert. Nach Abschluss der Simulation kann die Ausbreitung des Skalarfeldes für jeden Zeitschritt innerhalb des Visualisierungsprogramms dargestellt werden.

Die Funktion *particleTracks* wird innerhalb der Nachbearbeitung durchgeführt. Damit werden auf Basis der Simulationsergebnisse für definierte Partikel Trajektorien erstellt. Diese Trajektorien werden dabei aus den kartesischen Koordinaten des jeweiligen Partikels zu jedem herausgeschriebenen Zeitschritt gebildet. Bei einem hinreichend kleinen Zeitschritt können so annähernd kontinuierliche Transportwege abgebildet werden. Die Ergebnisse der Berechnungen mit der Funktion werden in speziellen Dateien (*.vtk) gespeichert und können z.B. mit ParaView visualisiert werden.

5.5 Post-processing: ParaView

Die Simulationsergebnisse einer Rechnung in OpenFOAM werden für benutzerdefinierte Zeitschritte in jeweils einem separaten Zeitordner abgespeichert. Dieser enthält die Dateien, die den Zustand aller betrachteten Zustandsgrößen des θ -Ordners zum entsprechenden Zeitpunkt in codierter Form beschreiben. Die Darstellung, Bearbeitung und Analyse der Daten werden in ein externes Programm ausgelagert. Üblicherweise wird bei OpenFOAM hierfür das Visualisierungsprogramm ParaView verwendet. Die folgende kurze Beschreibung von ParaView 5.6.0 wurde dem Benutzerhandbuch (Ayachit 2019) entnommen.

ParaView ist eine quelloffene, plattformübergreifende Software für die Visualisierung und Analyse von Daten. Es bietet umfangreiche Möglichkeiten zur Nachbearbeitung und Darstellung von großen Datensätzen auch im 3D-Format. Die Nutzung erfolgt über eine grafische Benutzeroberfläche mit intuitiver Bedienung. ParaView kann dabei Rohdaten verschiedenster Formate in Bilder und grafische Darstellungen umwandeln, wofür es ein Visualisierungs-Toolkit (VTK) verwendet. Neben der dreidimensionalen Darstellung von Daten, stellt ParaView eine Vielzahl an Bearbeitungs- und Analysefunktionen zur Verfügung sowie eine Auswahl an Optionen zum Extrahieren von (Teil-)Ergebnissen.

Beim Starten von ParaView werden die Geometrie des Modells und alle vorhandenen Zeitordner inklusive der Zustandsgrößen der Simulation geladen. Das Programm erstellt basierend auf den Daten die (dreidimensionale) Abbildung für den Startzeitpunkt. Die vorhandenen Zustandsgrößen können nun für einen beliebigen Zeitschritt in einer wählbaren Farbskala dargestellt werden. Für die Bearbeitung der Simulationsdaten gibt es verschiedenste Filter und Funktionen, wie bspw. das Extrahieren von bestimmten Elementen (*ExtractBlock*) oder das Erstellen eines Querschnittes an einer definierten Stelle (*Slice*). Weiterhin können zum Beispiel Zustandsgrößen erst ab Werten oberhalb

eines angegebenen Schwellenwertes angezeigt werden (*Threshold*) oder auch Teile der Geometrie heraus- bzw. abgeschnitten werden (*Clip*).

ParaView besitzt zudem verschiedene Möglichkeiten Datensätze zu extrahieren. Basierend auf der (dreidimensionalen) Visualisierung können zum Beispiel Bild- und Videodateien erstellt werden. Weiterhin können die Daten (der Filter) und deren Werte auch in Tabellenblättern dargestellt, anschließend in üblichen Formaten (z.B. *.csv* oder *.xlsx*) abgespeichert und mit einem Tabellenkalkulationsprogramm weiterbearbeitet werden. Darüber hinaus gibt es eine Vielzahl an weiteren Bearbeitungsfunktionen und Darstellungsoptionen, die bei Bedarf im Benutzerhandbuch von ParaView nachzulesen sind.

6 Strömungsdynamik der künstlichen Freiland-Fließrinne

Das Ziel dieser Arbeit war es, das Ausbreitungs- und Transportverhalten von Mikroplastikpartikeln in einem fließenden Gewässer zu simulieren und wenn möglich mit Beobachtungen aus geeigneten Experimenten zu vergleichen. Als Modellumgebung wurde das Programm OpenFOAM ausgewählt, das in Kapitel 5 beschrieben worden ist. Aufgrund der komplexen Morphologie natürlicher Flüsse wurde im ersten Teil der Arbeit eine künstliche Freiland-Fließrinne an der Fließ- und Stillgewässer-Simulationsanlage des Umweltbundesamtes in Berlin als „Vergleichsgewässer“ verwendet. Der Aufbau dieser in sich geschlossenen Fließrinne wird in Kapitel 6.1 näher beschrieben. Das Wasser in der Rinne wird durch einen Schneckenpumpenantrieb in Bewegung gesetzt, wodurch bei konstanter Pumpenfrequenz ein quasi-stationärer Zustand des Strömungsverhaltens in der Fließrinne erzeugt wird (6.1.1). Die Charakterisierung des Strömungsfeldes wurde durch Messungen der Fließgeschwindigkeiten an mehreren Stellen für verschiedene Pumpenfrequenzen vorgenommen.

Im nächsten Schritt sollte die Strömungsdynamik in OpenFOAM simuliert werden, um grundsätzlich die Eignung des Programms für die Fragestellung zu zeigen. Dazu wurde die Geometrie der Freiland-Fließrinne für Simulationen in OpenFOAM implementiert (6.2). Die Beschreibung des dafür verwendeten Modellansatzes findet sich in Kapitel 6.2.1. Es wurde zunächst die Wasserbewegung in der Rinne ausgehend vom Ruhezustand über einen ausreichend langen Zeitraum simuliert, um das quasi-stationäre Strömungsfeld zu erzeugen (6.2.2). Anschließend wurde zur Überprüfung des Dispersionsprozesses der passive Transport eines Tracers in diesem System simuliert (6.2.3).

6.1 Experimenteller Ansatz

Die künstlichen Freiland-Fließrinnen befinden sich in der Fließ- und Stillgewässer-Simulationsanlage (FSA) des Umweltbundesamtes in Berlin-Marienfelde. Sie bieten verschiedene Möglichkeiten, bspw. das Verhalten von Chemikalien oder Partikeln wie Mikroplastik in einem fließenden Gewässer im halbtechnischen Maßstab unter Umweltbedingungen zu untersuchen. Der schematische Aufbau einer Fließrinne ist in Abb. 6.1 dargestellt.

Eine Standardrinne besteht aus zwei geraden Elementen, zwei Kurvenelementen und einem Schneckenpumpenantrieb. Die Gesamtlängelänge der Rinne beträgt 102,68 m und die Querschnittsbreite 1 m. Das einmalige vollständige Durchlaufen der gesamten Fließstrecke wird im Folgenden als eine Umrundung bezeichnet.

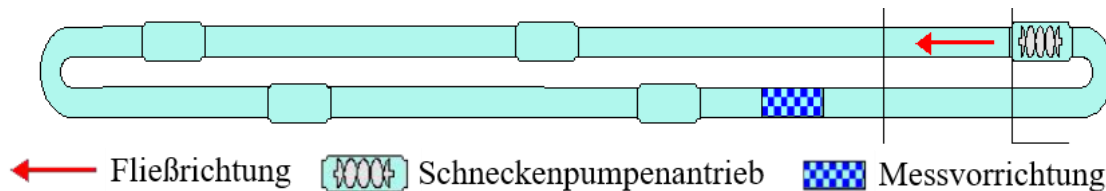


Abbildung 6.1: Schematischer Aufbau der künstlichen Fließrinne².

Der Wasserstand innerhalb der Fließrinne ist variabel einstellbar und das Wasser wird durch einen Schneckenpumpenantrieb in Bewegung gesetzt. Hierzu wird über einen Regler die Frequenz der Pumpe eingestellt. Bei konstanter Winkelgeschwindigkeit ω [rad/s] stellt sich nach hinreichender Zeit ein quasi-stationärer Zustand (Fließgleichgewicht) in der Strömungsdynamik ein. Zudem bietet die Anlage weitere Möglichkeiten, bei Bedarf verschiedene Uferzonen (z.B. Stein-, Kies- oder Sand-Ufer) zu implementieren und durch Einsetzen von Wänden innerhalb der Rinnengeometrie einen naturähnlichen Wellenschlag zu simulieren.

Alle Versuche wurden in einer Standard-Fließrinne ohne Umbauten durchgeführt. Hierzu wurde die Rinne bis zu einer Höhe von 40 cm mit Wasser befüllt. Die Wassermenge blieb für alle Versuche unverändert. Im Folgenden wird das Vorgehen bei den Messungen des Fließgeschwindigkeitsprofils zur Charakterisierung der quasi-stationären Strömungsdynamik beschrieben.

6.1.1 Messung der Fließgeschwindigkeit

Die Messung der Fließgeschwindigkeit wurde für drei verschiedene Frequenzen bzw. Winkelgeschwindigkeiten ω_i des Schneckenpumpenantriebes mit Hilfe eines Flügelradanemometers durchgeführt. Über eine Eichkurve für die mittlere Fließgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Pumpenfrequenz und der Wasserhöhe wurde die Frequenz so gewählt, dass sich die gewünschte Fließgeschwindigkeit einstellen sollte. Da diese Eichkurve auf Messdaten und Erfahrungswerten beruht, kann sie lediglich als Anhaltspunkt für die Einstellung der Pumpenfrequenz genutzt werden und ersetzt nicht die Messung der Fließgeschwindigkeit.

Nach dem Einstellen der Frequenz wurde eine Einschwingphase von ca. einer Stunde abgewartet, bis mit der Messung begonnen wurde. Dies sollte sicherstellen, dass sich eine konstante Strömungsdynamik eingestellt hat. Gleichzeitig wurde die

² Internes Dokument des Umweltbundesamtes 2008; zur Verfügung gestellt von Stefan Meinecke

Umdrehungsgeschwindigkeit ω_i [rad/s] der Schneckenpumpe ermittelt, indem die Zeit über zehn Umdrehungen gemessen wurde. Anhand dessen kann über die Formel

$$\omega = \frac{\phi}{t} \quad (6.1)$$

die jeweilige Winkelgeschwindigkeit mit dem zugehörigen Größtfehler

$$\Delta\omega = \left| \frac{\partial\omega}{\partial t} \right| \cdot \Delta t + \left| \frac{\partial\omega}{\partial\phi} \right| \cdot \Delta\phi \quad (6.2)$$

berechnet werden, wobei ϕ den Winkel [°] der Schneckenpumpe und t die Gesamtzeit [s] für zehn Umdrehungen beschreiben. Mit Δt und $\Delta\phi$ werden die Fehler bzw. Messungenauigkeiten der jeweiligen Größe angegeben. Dieses Messverfahren für die Winkelgeschwindigkeit wurde jeweils dreimal durchgeführt, um die Messungenauigkeiten möglichst genau zu erfassen.

Das resultierende Geschwindigkeitsfeld im Querschnitt wurde für drei verschiedene Antriebsfrequenzen in Fließrichtung 15 m hinter der Pumpe ermittelt. Dazu wurde die Fließgeschwindigkeit an verschiedenen Positionen in Breite und Tiefe mit Hilfe eines Flügelradanemometers gemessen.

6.2 Simulation in OpenFOAM

Im Folgenden werden der Aufbau und die Eigenschaften des Modells der Fließrinne in OpenFOAM beschrieben (6.2.1) und das Vorgehen bei den verschiedenen Simulationen erläutert. Diese gliedern sich in die Simulation des quasi-stationären Zustandes der Strömungsdynamik (6.2.2) und die Dispersion eines Tracers in das eingeschwungene System (6.2.3). Anhand von Vergleichen zwischen den Simulationsergebnissen mit den Messungen in der Anlage (6.1) und der Überprüfung des Ausbreitungsverhaltens eines gelösten Stoffes soll die Eignung von OpenFOAM zur Abbildung von Strömungsdynamiken überprüft werden.

6.2.1 Modellaufbau

Die Geometrie der Freiland-Fließrinne wurde als maßstabsgetreue Nachbildung als Modell in OpenFOAM implementiert. Das hier verwendete Modell wurde innerhalb extern durchgeführter Vorarbeiten erstellt. Die Vorarbeiten beinhalteten den Bau der Rinnengeometrie, die Erzeugung des Modellgitters (*mesh*) und die Festlegung der Randbedingungen. Dabei stellte die Abbildung des Schneckenpumpenantriebes und die damit verbundene Bewegung des Wassers eine große Herausforderung dar und wurde im

Vorfeld in einem kleineren Maßstab modelliert und getestet. Die Umsetzung des Antriebes erfolgte schließlich in Form einer sich mit dem Uhrzeigersinn drehenden Teilgeometrie, die die Schraube umfasst.

Die Abb. 6.2 zeigt die Modellgeometrie und das Wasser in ihrem Startzustand. Die Wände der Fließrinne sind in schwarz dargestellt und das Wasser in blau. Ebenfalls ist der aus der Wasserphase herausragende Anteil des Schneckenpumpenantriebes (grau) zu sehen. Hier ist anzumerken, dass zum einen die Wände der Rinne höher sind und zum anderen die Schraube des Antriebs im Modell eigentlich vollständig von einem Rohr umschlossen ist, da andernfalls das Wasser in Bereiche außerhalb der Rinne transportiert worden wäre. In Abb. 6.2 wurde bewusst auf die Darstellung der höheren Wände und des umgebenden Rohres verzichtet, um eine bessere Übersicht zu erlangen und die Umsetzung des Schneckenpumpenantriebes sehen zu können. Zudem wird in dieser und allen folgenden Abbildungen einer dreidimensionalen Modellumgebung in der unteren linken Ecke ein kleines Koordinatensystem zur Orientierung der Blickrichtung und des Neigungswinkels abgebildet.

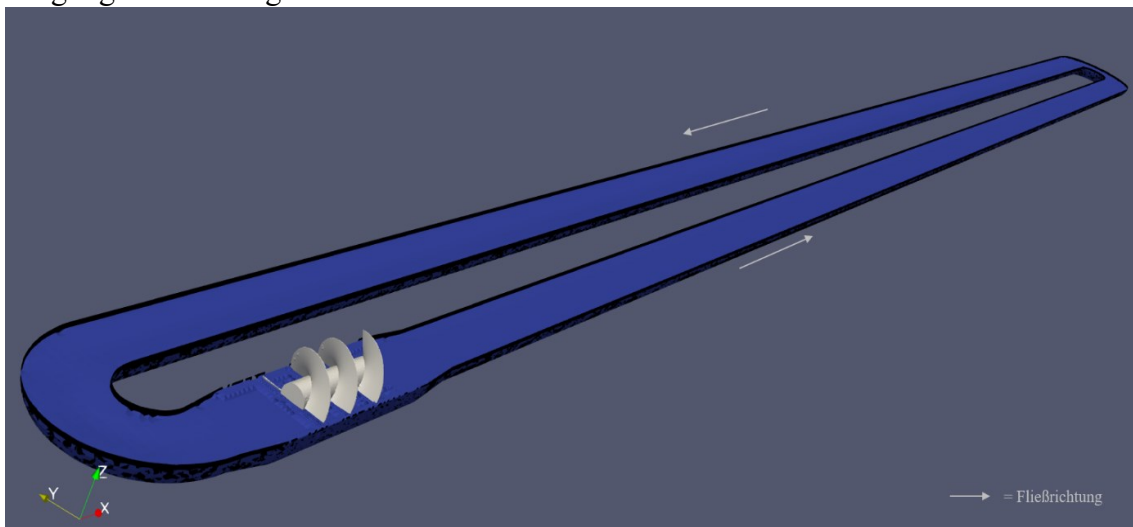


Abbildung 6.2: Geometrie der Modell-Fließrinne mit dem Wasser im Ausgangszustand und Markierung der Fließrichtung.

Das Gitter der Modell-Fließrinne besteht aus etwa 620.000 Zellen, wodurch eine durchschnittliche Zellgröße von 5.4 cm resultiert. Wie in Kapitel 5.1 erwähnt, wird bei der Erstellung der Modellgeometrie eine Kategorisierung der Bestandteile in verschiedene Elemente vorgenommen. Die Geometrie der Modellrinne wurde in fünf Elemente eingeteilt: *atmosphere*, *pipe_air*, *pipe_fluid*, *pipe_screw* und *screw*. Dabei beschreiben *atmosphere* die obere Grenzfläche der Geometrie und *screw* die Schraube des Schneckenpumpenantriebes. Die drei Elemente *pipe_air*, *pipe_fluid* und *pipe_screw* stellen jeweils die Wände des genannten Bereiches der Geometrie dar. Vor Beginn der

Simulationen sind für alle Elemente und jede Zustandsgröße entsprechende Anfangs- und Randbedingungen zu definieren. Da die Wahl der Anfangsbedingungen (AB) vom jeweiligen Szenario abhängt, werden diese in den entsprechenden Kapiteln (6.2.2 und 6.2.3) benannt. Die Randbedingungen (RB) gelten dagegen unabhängig von dem Szenario für die gesamte Geometrie. Die Randbedingungen für die relevanten Zustandsgrößen Fließgeschwindigkeit \vec{u} und Druck \vec{p} des Wassers wurden für das Element *atmosphere* mit *pressureInletOutletVelocity* (*value = uniform (0 0 0)*) für \vec{u} und *totalPressure* ($p_0 = \text{uniform } 0$) für \vec{p} gewählt. Für die weiteren vier Elemente *pipe_air*, *pipe_fluid*, *pipe_screw* und *screw* wurde einheitlich für \vec{u} die Bedingung *fixedValue* (*value = uniform (0 0 0)*) und für \vec{p} *fixedFluxPressure* definiert.

Die Wasserhöhe der Fließrinne im Modell kann für jedes Szenario separat festgelegt werden. Für alle folgenden Simulation wurde eine Wasserhöhe von 40 cm analog zu der Wasserhöhe der Freiland-Messungen verwendet. Die Freiland-Fließrinne ist nach oben hin nicht geschlossen ist und folglich kann sich die Luft oberhalb des Wasser ohne Widerstand bewegen. Entsprechend wurde auch die Modell-Fließrinne nach oben hin offen abgebildet und die Luft neben dem Wasser als zweite Phase modelliert. Somit handelt es sich um ein Modell einer Zweiphasenströmung.

6.2.2 Simulation der Strömungsdynamik

In beschriebenen Modell-Fließrinne wurde im ersten Schritt ein stationärer Zustand der Strömungsdynamik erzeugt. Dies wird im Folgenden mit dem Begriff „Einschwingsimulation“ bezeichnet. Das simulierte Strömungsverhalten in der Modellrinne wurde mit den Messungen in der Freiland-Fließrinne verglichen, um die Eignung von OpenFOAM als Modellierungsumgebung für die Fragestellung zu überprüfen. Der stationäre Zustand nach den Einschwingsimulationen bildete dann die Grundlage für die anschließenden Simulationen der Tracerausbreitung (s. Kapitel 6.2.3).

Für die Simulation der Strömungsdynamik wurde der *interFoam*-Löser ausgewählt (s. Kapitel 5.2.1). Dieser Zwei-Phasen-Löser betrachtet die Oberfläche zwischen den Fluiden mit dem *Volume-of-Fluid*-Ansatz, wobei der Volumenanteil der Phasen in einer Zelle über den Parameter *alpha.water* angegeben wird. Als Anfangszustand werden die Fluide als unbewegt angenommen. Es ergeben sich daher für die Fließgeschwindigkeit und den Druck in der Wasserphase die Anfangsbedingungen $\vec{u}_0 = 0 \text{ m/s}$ und $\vec{p}_0 = 0 \text{ Pa}$.

Für die Geschwindigkeit des Schneckenpumpenantriebes wurde die ermittelte Winkelgeschwindigkeit aus den Messungen (s. Kapitel 6.1.1) verwendet. Die Angabe der Winkelgeschwindigkeit erfolgt in der Datei *constant/dynamicMeshDict*. In der Datei *system/controlDict* wurde der Zeitschritt zum Herausschreiben der Simulationsergebnisse auf 20 Sekunden gesetzt. Der Endzeitpunkt der Simulation wurde in Abhängigkeit von der in der Freiland-Fließrinne gemessenen mittleren Fließgeschwindigkeit gewählt. Hierzu wurde die mittlere Zeit einer Umrundung als Orientierung abgeschätzt und eine Simulationsdauer von mindestens drei Umrundungen festgelegt. Diese Einschwingimulationen wurden für die drei im Feldversuch gemessenen Winkelgeschwindigkeiten durchgeführt.

6.2.3 Simulation der Dispersion

Um die Simulationen der Dispersion in OpenFOAM in einem quasi-stationären Strömungsfeld überprüfen zu können, wurde dem eingeschwungenen System der Modell-Fließrinne aus Kapitel 6.2.2 ein Tracer hinzugefügt und dessen Ausbreitungsverhalten simuliert.

Die Modellierung des Tracers wurde in OpenFOAM wie folgt umgesetzt. Es wurde ein Volumenelement definiert, dessen Größe dem Volumen einer standardmäßigen Lösung aus Tracer und Wasser von vorherigen Dispersionsmessungen in der Freiland-Fließrinne entsprach (Schulz et al. 2012). Dieses Volumenelement wurde als zusätzliche Zustandsgröße deklariert und entsprechend in einer neuen Datei im θ -Ordner angelegt, in der die Randbedingungen definiert werden. Für das Element *atmosphere* wurde die Randbedingung *fixedValue* mit dem Wert 0 gewählt. Die Randbedingung der anderen vier Elemente (*pipe_air*, *pipe_fluid*, *pipe_screw* und *screw*) wurde mit *zeroGradient* angegeben. Da es sich um einen wasserlöslichen Tracer handeln soll, der entsprechend dieselben Transporteigenschaften wie das umgebende Medium besitzt, wurde das Volumenelement über den Parameter *alpha.water* ebenfalls als Wasser definiert. Die Positionierung des Wasserpaketes kann grundsätzlich beliebig innerhalb der Wasserphase gewählt werden. Bei dieser Modellierung wurde die Position der Einbringung in einem Abstand von 9,5 m von Schneckenpumpentrieb gesetzt.

Die Ausbreitung des Tracers wurde in OpenFOAM unter Verwendung der Funktion *scalarTransport* simuliert, die bereits in Kapitel 5.4 beschrieben worden ist. Die Funktion ermöglicht die Berechnung des Transportes eines passiven Skalarfeldes, welches hier den Tracer darstellt und eignet sich daher gut, um dessen Ausbreitung im

Wasser zu modellieren (Jin et al. 2020). Innerhalb der Funktion wird über die Angabe des Namens der zu betrachtenden Zustandsgröße die interne Kopplung zwischen der Berechnung des Transportes und der Zustandsgröße selbst hergestellt.

Für die Simulation dieses Szenarios wurde ebenfalls der *interFoam*-Löser verwendet, da sich die grundlegende Zusammensetzung der Zweiphasenströmung, bestehend aus den Medien Luft und Wasser, nicht verändert hat. Mit dem erweiterten Modell wurde das dreidimensionale Transportverhalten des Tracers nach Zugabe simuliert. Dies wurde für alle drei Szenarien, für die eine Einschwingsimulation gemacht worden war, durchgeführt.

Im weiteren Verlauf war vorgesehen, dass in der Freiland-Fließrinne am Umweltbundesamt entsprechende Versuche zum Verhalten von Mikroplastik innerhalb einer fließenden Strömung durchgeführt werden. Die analytische Erfassung der Mikroplastikpartikel, die zur Beschreibung ihres Ausbreitungs- und Transportverhaltens nötig gewesen wäre, konnte aber trotz umfangreicher Vorversuche nicht erfolgreich umgesetzt werden. Die Herstellung von Standards für die Mikroplastikproben mit einer messbaren Größenverteilung gestaltete sich ebenfalls schwierig. Weiterhin konnten die individuellen Transportwege einzelner Partikel innerhalb der Fließrinne nicht messtechnisch erfasst werden. Dies wäre für einen Vergleich mit entsprechenden Simulationsergebnissen jedoch notwendig gewesen. Aufgrund der fehlenden Vergleichsdaten wäre somit nur eine theoretische Simulation möglich. Daher wurde entschieden, die Simulation nicht für die Modell-Fließrinnen, sondern für ein realitätsnäheres Modell in Form des Abbildes eines Ausschnitts aus einem (theoretischen) Flussverlauf durchzuführen.

7 Mikroplastikpartikel in einem modellhaften Flussabschnitt

Um das Transport- und Ausbreitungsverhalten von Mikroplastikpartikeln in einem Fließgewässer realitätsnah simulieren zu können, wurde in OpenFOAM ein theoretischer Flusslauf mit einem unregelmäßigen Verlauf und Flussbett implementiert (7.1). Analog zum Vorgehen bei den Simulationen der Fließrinne in Kapitel 6.2.2 wurde auch hier zuerst ein quasi-stationärer Zustand der Strömungsdynamik durch Simulationen einer Einschwingphase erzeugt (7.2). Anschließend wurden dem System Mikroplastikpartikel mit verschiedenen Größen und Dichten hinzugefügt (7.3). Im Rahmen einer Plausibilitätsprüfung wurden zunächst die simulierten Auftriebs- und Sinkgeschwindigkeiten in ruhendem Wasser mit theoretischen Werten abgeglichen (7.3.2) sowie Testsimulationen durchgeführt (7.3.3).

Basierend auf den Ergebnissen der Voruntersuchungen wurde das Transportverhalten von Mikroplastikpartikeln in Abhängigkeit der Parameter Anzahl, Dichte, Durchmesser und Position der Partikel sowie Fließgeschwindigkeit der Strömungsdynamik untersucht. Dazu wurden in Kapitel 7.4 drei verschiedene Szenarien entwickelt und mit verschiedenen Parameterkonstellationen simuliert. Anschließend erfolgte die Ermittlung der individuellen Transportstrecken der Mikroplastikpartikel, um die Simulationsergebnisse (auch Szenario übergreifend) zu vergleichen (7.5).

7.1 Modell des theoretischen Flusslaufes

Für die Simulationen wurde ein Ausschnitt eines Flusslaufes definiert, der durch einen kurvenförmigen Verlauf und eingebaute Hindernisse eine unregelmäßige Strömungsdynamik aufweisen sollte. Entgegen der Morphologie eines realen Flusses besitzt der Modellflussabschnitt kein Gefälle. Dies hat den Grund, dass verschiedene mittlere Fließgeschwindigkeiten der Strömungsdynamik betrachtet werden sollen. In einem realen Fluss ist die Fließgeschwindigkeit unter anderem das Resultat aus der Stärke des Gefälles (Putnam 1969, S. 260). Demnach hätte auch das Gefälle der Modellgeometrie für die entsprechende Fließgeschwindigkeit ermittelt und die Geometrie jeweils neu gebaut werden müssen. Der Arbeitsaufwand dafür wäre jedoch nicht vertretbar gewesen und hätte die Möglichkeit verhindert, beliebige Fließgeschwindigkeiten ohne weitere Vorarbeiten zu simulieren. Daher wurde sich für das Vorgehen der Einschwingimulationen entschieden, wodurch der Einfluss des nicht

vorhandenen Gefälles kompensiert wird. Die Abb. 7.1 zeigt den Verlauf des Modellflusses in der Draufsicht.

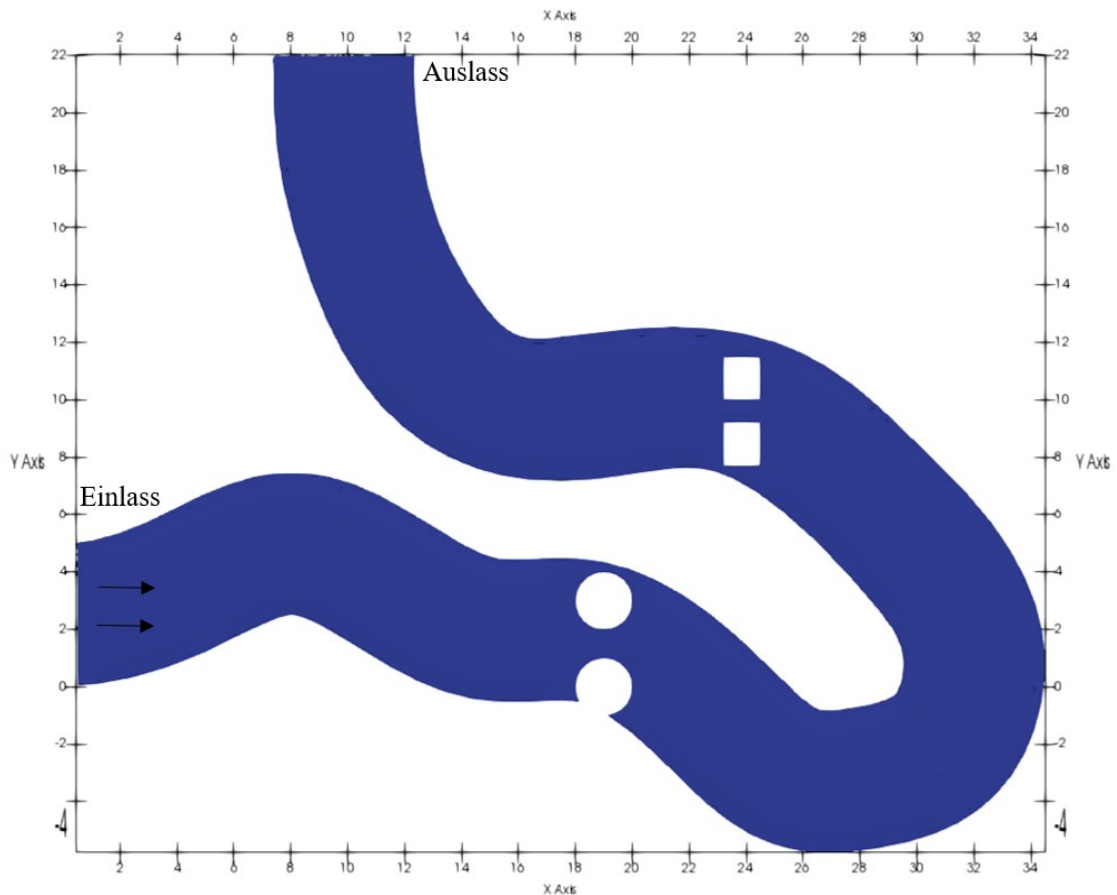


Abbildung 7.1: Modellflusslauf in der Draufsicht, Fließrichtung am Einlass durch Pfeil sowie Auslass gekennzeichnet.

Der Einlass und Auslass der betrachteten Fließstrecke sowie die Fließrichtung sind entsprechend gekennzeichnet. Die runden und quadratischen Aussparungen stellen hypothetische Brückenpfeiler dar, die sich innerhalb des Flusses befinden. Durch den unregelmäßigen Verlauf und künstliche Hindernisse sollten turbulente Fließbedingungen erzeugt werden, um eine realitätsnähere Strömungsdynamik zu erzeugen (Jirka & Lang 2009, S. 17).

Die Fließlänge des Flussabschnittes beträgt 71 m und die Breite wurde konstant auf 5 m festgesetzt. Das Flussbett ist unregelmäßig geformt, sodass der Fluss unterschiedliche Tiefen aufweist. Dieses Querprofil ist entlang der gesamten Fließstrecke identisch und die Wassertiefe variiert im Startzustand zwischen 0,5 m und 1,2 m. In der Simulation wird sowohl die Strömung des Wassers als auch die der darüber liegenden Phase (Luft) betrachtet. Der Querschnitt des Flusslaufes ist in Abb. 7.2 zu sehen, wobei das Wasser in Blau und die Luft in Rot dargestellt werden. Die Zellen der Grenzschicht zwischen Luft

und Wasser (weiß) sind anteilig mit den zwei Phasen gefüllt, wobei der jeweilige Volumenanteil über den Parameter *alpha.water* in OpenFOAM beschrieben wird.

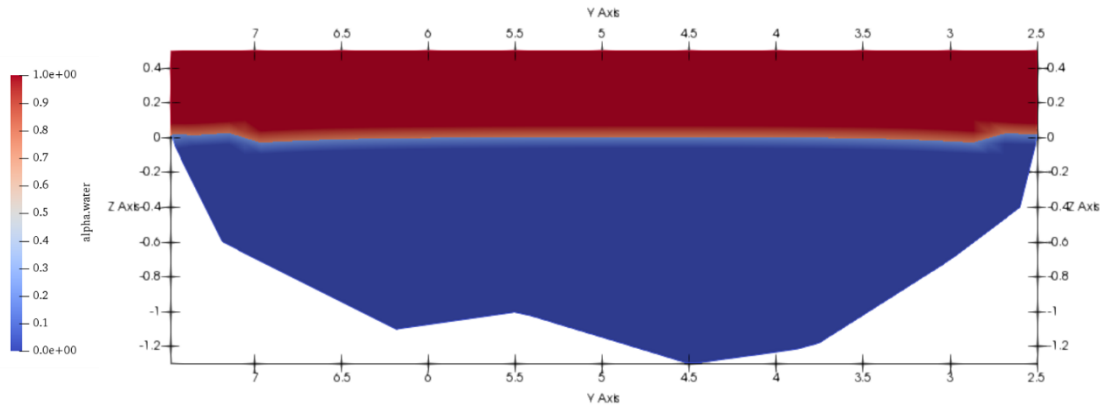


Abbildung 7.2: Querschnitt des Modellflusslaufes dargestellt in Abhängigkeit des Volumenanteils *alpha.water* (Wasser = 1, blau, Luft = 0, rot).

Das gesamte, die Geometrie umgebende Gitter besitzt die Maße 34,5 m x 29 m x 2,45 m und besteht aus 350 x 320 x 40 Zellen. Durch den Vorgang der Erzeugung des Modellgitters (*mesh*) entsteht für den Fluss eine Anzahl von ca. 1.100.000 Zellen mit einem Gesamtvolumen von 503 m³. Daraus resultiert eine durchschnittliche Länge der längsten Zellseite von 7,8 cm.

Die Modellgeometrie wurde in vier Elemente kategorisiert: *atmosphere*, *inlet*, *outlet* und *walls*. Analog zu den englischen Begriffen beschreibt das Element *atmosphere* die obere Grenzfläche der Geometrie. Die Elemente *inlet* und *outlet* stellen jeweils die Fläche des Einlasses und Auslasses des Flussabschnittes dar und das Element *walls* die Wände. Tabelle 7.1 enthält die in OpenFOAM verwendeten Randbedingungen für die drei relevanten Zustandsgrößen Fließgeschwindigkeit \vec{u} , Druck \vec{p} und Volumenanteil *alpha.water*.

Bei der Modellierung des Flussabschnittes sollte es sich um einen Ausschnitt eines längeren Flusslaufes handeln, weshalb die Annahme getroffen wurde, dass vor dem Einlass und nach dem Auslass ebenfalls Wasser vorhanden ist. Dies wird durch die Festlegung der Randbedingung des Volumenanteils *alpha.water* an den Elementen *inlet* und *outlet* auf den Wert 1 erreicht. Da das Strömungsverhalten vor dem Einlass jedoch nicht bekannt ist, müssen die Randbedingungen dort als feste Werte u_0 deklariert werden. Für die Fließgeschwindigkeit wird daher am Einlass ein konstanter Wert u_0 in x-Richtung als Randbedingung definiert, wobei u_0 den gewünschten Wert der Einlassgeschwindigkeit in Meter pro Sekunde darstellt. Am Auslass wird für \vec{u} Randbedingung *inletOutlet*

verwendet, die normalerweise die gleichen Eigenschaften wie *zeroGradient* besitzt, aber ggf. eine Rückwärtsströmung berücksichtigt, falls der Geschwindigkeitsvektor an der Grenzschicht ins Innere des Strömungsfeldes zeigt.

Tabelle 7.1: Randbedingungen der Flussgeometrie für die Zustandsgrößen Fließgeschwindigkeit \vec{u} , Druck \vec{p} und Volumenanteil *alpha.water*.

Element	Fließgeschwindigkeit \vec{u}	Druck \vec{p}	Volumenanteil <i>alpha.water</i>
atmosphere	pressureInletOutletVelocity value = uniform (0 0 0)	totalPressure $p_0 = \text{uniform } 0$	inletOutlet inletValue = uniform 0 value = uniform 0
inlet	fixedValue value = uniform (u_0 0 0)	fixedFluxPressure value = uniform 0	fixedValue value = uniform 1
outlet	inletOutlet inletValue = uniform (0 0 0) value = \$internalField	fixedFluxPressure value = uniform 0	zeroGradient value = uniform 1
walls	noSlip	fixedFluxPressure value = uniform 0	zeroGradient

7.2 Quasi-stationärer Zustand

Im ersten Schritt wurde analog zum Vorgehen bei der Modellierung der Fließrinne ein quasi-stationärer Zustand der Strömungsdynamik innerhalb des Flussabschnittes erzeugt. Dazu wurde am Einlass eine konstante Fließgeschwindigkeit u_0 in x-Richtung angenommen und das Szenario über eine hinreichende Dauer simuliert. Die Dauer einer Einschwingsimulation wurde in Abhängigkeit der verwendeten Fließgeschwindigkeit am Einlass definiert. Dabei wurde zur Abschätzung der Simulationsdauer die Zeit berechnet, die bei der vorhandenen Fließgeschwindigkeit benötigt werden würde, um die gesamte Fließlänge zehnmal zu durchlaufen. Bei der Auswertung der Ergebnisse wurde das Einstellen eines quasi-stationären Zustandes der Strömungsdynamik angenommen, wenn es keine nennenswerten Änderungen der Zustandsgrößen zwischen zwei aufeinanderfolgenden Zeitschritten gab. Um dies zu überprüfen und da lediglich der Endzustand der Simulationen für die folgenden Arbeiten von Bedeutung ist, wurde ein verhältnismäßig großer Zeitschritt zum Herausschreiben der Ergebnisse von 50 Sekunden gewählt. Diese Wahl ermöglicht es dennoch weiterhin, die Entwicklung der Strömungsdynamik über die Zeit zu betrachten und das Einstellen des quasi-stationären Zustandes zu überprüfen.

Die Einschwingimulationen wurden für drei verschiedene Einlassgeschwindigkeiten durchgeführt: 0,1 m/s, 0,3 m/s und 0,5 m/s. Sie wurden anschließend als Ausgangszustand für die nachfolgenden Simulationen mit Mikroplastikpartikeln verwendet.

Da es sich bei dem Modell um eine Zweiphasenströmung handelt, wurde entsprechend der *interFoam*-Löser (s. Kapitel 5.2.1) verwendet. Für die Definition der Anfangsbedingungen wurde angenommen, dass sich das Wasser in einem unbewegten Zustand befindet. Demnach werden allen Zellen zum Zeitpunkt $t = 0$ s die Fließgeschwindigkeit $\vec{u}_0 = 0$ m/s und der Druck $\vec{p}_0 = 0$ Pa zugewiesen.

7.3 Simulation des Transportverhaltens von Mikroplastikpartikeln

Im Folgenden wird das Vorgehen bei der Modellierung des Transportverhaltens von Mikroplastikpartikel in Abhängigkeit ihrer Dichte und Größe sowie der unterschiedlichen Strömungsdynamik (7.3.1) beschrieben. Alle modellierten Mikroplastikpartikel werden in Form von idealen, sphärischen Kugeln dargestellt. In der realen Umwelt besitzen Mikroplastikpartikel in den meisten Fällen zwar eine unregelmäßige Form, diese Charaktereigenschaft kann aufgrund der Komplexität und Vielzahl an verschieden geformten Partikeln im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht berücksichtigt werden. Vor den systematischen Simulationen des Transportes von Mikroplastikpartikeln in der fließenden Strömung (7.4) wird eine Plausibilitätsprüfung für die Anwendung des gewählten Löser vorgenommen. Diese beinhaltet die Simulation des statischen Auftriebs- und Sinkverhaltens und den Vergleich mit entsprechenden Literaturwerten (7.3.2) sowie die Durchführung verschiedener Testsimulationen (7.3.3)

7.3.1 Vorgehen bei der Modellierung

Für die Simulationen der Mikroplastikpartikel wurde der Löser *icoUncoupledKinematicParcelFoam* verwendet, dessen Eigenschaften in Kapitel 5.2.2 beschrieben worden sind. Der Löser verwendet eine bereits vorhandene Strömungsdynamik als Grundlage für den Transport der Partikel. Dabei kann es sich um eine fließende Strömung aber auch um ein ruhendes Fluid handeln.

Die Parametrisierung der Mikroplastikpartikel erfolgt in der Datei *constant/kinematicCloudProperties*. Als Zeitpunkt der Einbringung der Partikel an der gewählten Startposition wurde für alle Szenarien der erste Zeitschritt der Simulation festgelegt. Im Rahmen dieser Arbeit wurden drei verschiedene Kunststofftypen simuliert. Die Auswahl wurde dahingehend getroffen, Mikroplastikpartikel mit niedriger,

geringfügig höherer und deutlich höherer Dichte als Wasser ($\rho_{\text{Wasser}} = 1000 \text{ kg/m}^3$ bei $T = 4 \text{ }^\circ\text{C}$) zu betrachten. Folgende Kunststoffe wurden ausgewählt:

- Polyethylen mit hoher Dichte (PE-HD, $\rho_{\text{PE-HD}} = 970 \text{ kg/m}^3$)
- Polystyrol (PS, $\rho_{\text{S}} = 1050 \text{ kg/m}^3$)
- Polyvinylchlorid mit Weichmachern (PVC-P, $\rho_{\text{PVC-P}} = 1300 \text{ kg/m}^3$)

Für die meisten Kunststoffe wird die Dichte üblicherweise in Wertebereiche angegeben, weil diese unter anderem von zugesetzten Additiven anhängig ist (Abts 2016, S. 29f). Für die folgenden Simulationen der Mikroplastikpartikel können innerhalb eines Falls nur konkrete Werte für die Dichte berücksichtigt werden. Daher wurden die obigen genannten mittleren Dichten handelsüblicher Kunststoff-Materialien verwendet.

Die vollständige Parametrisierung der Partikel (Anzahl, Dichte, Durchmesser Position) ist abhängig vom gewünschten Szenario. Im Folgenden beschreibt ein Szenario die Zusammenstellung der Mikroplastikpartikel und gibt die Anzahl und die Positionierung der Partikel vor. Das Szenario wird anschließend für verschiedene Parameterkonstellationen simuliert. Dazu wird für jede gewünschte Zusammenstellung ein eigener Fall in OpenFOAM angelegt. Für jeden Fall sind schließlich die Dichte und der Durchmesser der Partikel zu definieren sowie eine der drei vorhandenen Strömungsdynamiken aus den Einschwingimulationen auszuwählen. Die jeweiligen Angaben erfolgen in den entsprechenden Kapiteln (s. Kapitel 7.4).

Um die grundsätzliche Eignung des ausgewählten Löser *icoUncoupledKinematicParcelFoam* für die Fragestellung zu überprüfen, wurden zunächst einfache Testsimulationen zum Auftriebs- und Sinkverhalten von Mikroplastikpartikeln im unbewegten Fluid durchgeführt sowie die Ausbreitung von sechs identischen Partikeln unter verschiedenen Bedingungen in einem Strömungsfeld beobachtet.

7.3.2 Statische Simulation des Auftriebs- und Sinkverhaltens

Das Auftriebs- und Sinkverhalten von Mikroplastikpartikel mit verschiedenen Dichten und Größen in einer unbewegten Wassersäule wurde simuliert und mit theoretisch zu erwartenden Werten aus der Literatur verglichen. Als Grundlage für die Simulationen wurde der Ausgangszustand des Modellflusses aus Kapitel 7.1 verwendet, in dem das Geschwindigkeitsfeld in der gesamten Modellumgebung konstant Null ist. In einem

solchen Medium bewegen sich die Partikel nur in Abhängigkeit der Dichtedifferenz zwischen Partikeln und Medium aufgrund der Gravitation in z-Richtung. Es ist zu erwarten, dass die PE-HD-Partikel mit einer geringeren Dichte als Wasser an der Wasseroberfläche bleiben bzw. durch den Auftrieb dorthin getrieben werden. Die PS- und PVC-P-Partikel müssten hingegen in dem unbewegten Medium nach unten sinken. Demnach sollten alle Mikroplastikpartikel nur eine Geschwindigkeitskomponente in z-Richtung (vertikal) aufweisen. Weiterhin sollte für alle Partikel eine Abhängigkeit der Auftriebs- bzw. Sinkgeschwindigkeit hinsichtlich des Durchmessers erkennbar sein. Als Durchmesser wurden Werte von 10 μm , 50 μm , 100 μm , 330 μm und 1 mm gewählt. Die Simulationsdauer betrug 60 Sekunden.

Die Simulationsergebnisse wurden anschließend in ParaView ausgewertet. Die simulierte Sinkgeschwindigkeit der einzelnen Mikroplastikpartikel kann in der tabellarischen Ansicht abgelesen werden. Die Werte wurden anschließend mit den theoretisch zu erwartenden Werten verglichen. Hierfür wurde für alle Partikel die Berechnung nach Dietrich (1982) mit Gl. 4.14 verwendet. Für Partikel mit Durchmessern im Gültigkeitsbereich des Stoke'schen Gesetzes ($d \leq 200 \mu\text{m}$) wurde zusätzlich die Stoke'sche Gleichung (Gl. 4.9) betrachtet.

7.3.3 Testsimulationen als Vorversuche

Das Ausbreitungs- und Transportverhalten von Partikel wird vom verwendeten Löser auf Basis des zugrundeliegenden Strömungsfeldes berechnet. Hierfür wurden die durchgeführten Einschwingimulationen des quasi-stationären Zustandes aus Kapitel 7.2 verwendet.

Es wurden sechs Partikel mit einem festen Durchmesser von 5 mm an drei verschiedenen Stellen entlang der Fließstrecke in das quasi-stationäre Strömungsfeld eingebracht und deren Transport über einen Zeitraum von 60 Sekunden simuliert. Zunächst wurde der Einfluss der Fließgeschwindigkeit und der entsprechenden Strömungsdynamiken getestet. Dazu wurden PS-Partikel in den drei erzeugten Strömungsfeldern simuliert und das Transportverhalten unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Geschwindigkeiten analysiert. Anschließend wurde das Ausbreitungsverhalten von Partikeln mit einer höheren Dichte (PVC-P) ebenfalls mit der mittleren Strömung simuliert und die Plausibilität der Ergebnisse vergleichend geprüft. Zuletzt wurde die Reproduzierbarkeit der Simulationsergebnisse überprüft, indem eine ausgewählte Testsimulation unter identischen Anfangsbedingungen erneut durchgeführt wurde.

7.4 Transport der Mikroplastikpartikel in der fließenden Strömung

Die Simulationen zur Auftriebs- und Sinkgeschwindigkeit sowie die beschriebenen Testsimulationen zeigten, dass der Modellansatz in OpenFOAM geeignet ist, um wichtige Erkenntnisse über das Verhalten von Mikroplastikpartikeln in Fließgewässern zu liefern. Basierend auf den Einschwingimulationen wurde daher im Folgenden systematisch das Transportverhalten verschiedener Mikroplastikpartikel in der fließenden Strömung simuliert. Hinsichtlich der in Kapitel 3 erstellten Fragestellungen wurden Mikroplastikpartikel mit verschiedenen Parameterkonstellationen (Anzahl, Dichte, Durchmesser, Position) in dem jeweiligen Strömungsfeld nach den Einschwingimulationen hinzugefügt und deren allgemeines Transportverhalten, sowie der Einfluss einzelner Parameter analysiert.

Für das systematische Vorgehen wurden drei Szenarien entwickelt. In Szenario 1 (7.4.1) soll das Transportverhalten in Abhängigkeit der Positionierung betrachtet werden. Szenario 2 (7.4.2) überprüft den Einfluss des Partikeldurchmessers auf den Transport. Letztlich sollen in Szenario 3 (7.4.3) Partikelwolken simuliert werden, um zu untersuchen, ob die zuvor beobachteten Ergebnisse ebenfalls erkennbar sind oder ob es ggf. durch Interaktionen zwischen Partikeln zu Veränderungen in ihrem Transportverhalten kommt. Durch die Verwendung verschiedener Werte für die Dichte können zudem die Auswirkungen der Partikeldichte auf das Transportverhalten in allen drei Szenarien analysiert werden. Für jede Parameterkonstellation der drei Szenarien wurde ein separater Fall erstellt und simuliert. Eine ausführliche Beschreibung der Szenarien und der verwendeten Parameterwerte erfolgt in den entsprechenden Kapiteln.

Da die Rechenzeit mit zunehmender Anzahl der simulierten Partikel rapide zunimmt, musste ein Kompromiss zwischen der gewünschten Simulationsdauer und der Anzahl an Simulationen mit verschiedenen Parameterkonstellationen gemacht werden. Im Hinblick auf das Ziel der Arbeit wurde der Fokus auf die Darstellung eines möglichst breiten Spektrums an Parameterkonstellationen der Partikel gelegt und weniger auf die Simulationsdauer. Dadurch konnte in den meisten Szenarien nicht für alle Partikel der vollständige Durchlauf des Flussabschnittes in der Simulationszeit beobachtet werden.

7.4.1 Szenario 1: Positionierung

Im ersten Szenario wurde das Transportverhalten hinsichtlich der Positionierung der Mikroplastikpartikel bei Einbringung entlang der Fließstrecke überprüft. Dazu wurden zehn identische Partikel jeweils in Zweierpaaren an fünf verschiedenen Stellen innerhalb

des Flusslaufes positioniert und ihr Transportverhalten simuliert. Die Startpositionen in der x-y-Ebene sind in Abb. 7.3 dargestellt. Um mögliche Randeffekte durch die Positionierung in der Tiefe analysieren zu können, wurden die z-Koordinaten der Partikel über die gesamte Wassertiefe gewählt. Es sei anzumerken, dass die Mikroplastikpartikel in der Größe nicht maßstabsgetreu, sondern deutlich größer abgebildet werden, um sie in der Modellumgebung erkennbar zu machen. Diese Darstellungsweise wird in allen weiteren Abbildungen der Partikel verwendet.

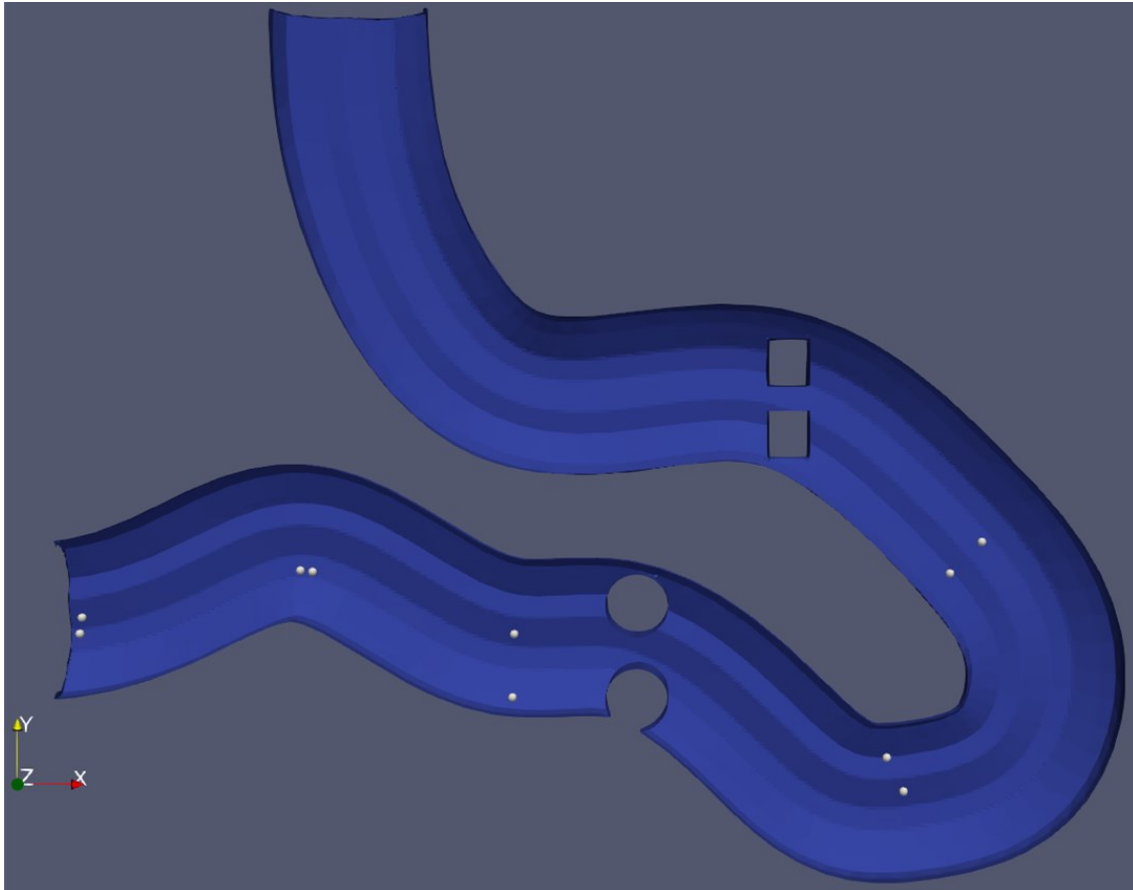


Abbildung 7.3: Startposition der Mikroplastikpartikel im Modellfluss im Szenario 1 in der Draufsicht.

Die Simulationsdauer betrug 120 Sekunden mit einem Intervall zum Herausschreiben der Simulationsergebnisse von 5 Sekunden. Um mögliche Effekte des Strömungsfeldes auf das Transportverhalten direkt nach Simulationsbeginn der Mikroplastikpartikel beobachten zu können, wurde für die ersten zehn Sekunden der Simulation ein verkürztes Schreibintervall von 0,1 Sekunden verwendet. Das Szenario wurde für die drei gewählten Kunststoffarten mit jeder der drei Einschwingimulationen simuliert. Als Partikeldurchmesser wurden dabei $330\ \mu\text{m}$ und $1\ \text{mm}$ gewählt. Folglich ergaben sich 18 separate Fälle für dieses Szenario.

7.4.2 Szenario 2: Partikeldurchmesser

Mit diesem Szenario sollte der Einfluss des Partikeldurchmessers unter ansonsten gleichen Bedingungen untersucht werden. Hierfür wurde das Transportverhalten von 20 Mikroplastikpartikeln simuliert, die etwa 1 m in x-Richtung hinter dem Einlass in den Fluss eingebracht wurden. Um den gegenseitigen Einfluss der Partikel zu minimieren, wurden sie in der Breite in gleichmäßigen Abständen um die Mittelachse positioniert ($y = [2,25, 2,75]$). Da in diesem Szenario eventuelle Randeefekte möglichst eliminiert werden sollten, wurden die Partikel in einer Tiefe von 20 – 50 cm unter der Wasseroberfläche platziert. In Abb. 7.4 ist der Startzustand der Partikel mit farblicher Kennzeichnung ihres Durchmessers d zu sehen.

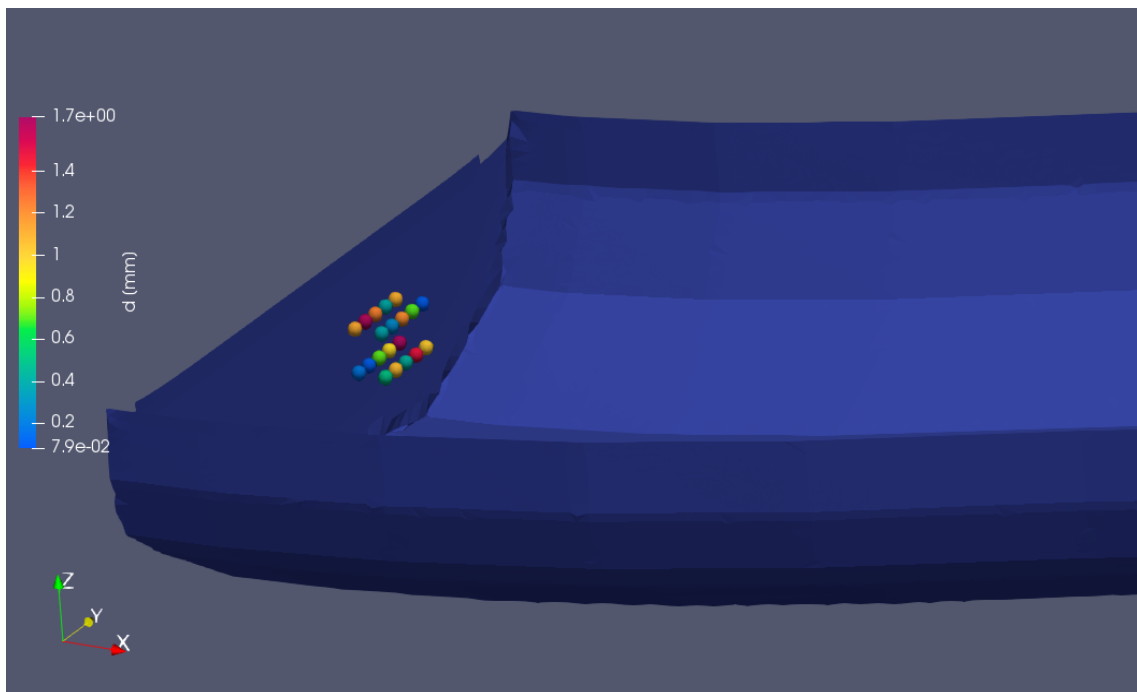


Abbildung 7.4: Startposition der Mikroplastikpartikel in Szenario 2 in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [mm].

Die Simulationsdauer dieses Szenarios lag bei 60 Sekunden mit einem Schreibintervall von 0,5 Sekunden. Für den Partikeldurchmesser wurde die Rosin-Rammler-Verteilung gewählt, die ursprünglich zur Vorhersage der Häufigkeit von Korngrößen beim Mahlprozess entwickelt wurde (Rosin & Rammler 1933). Sie ist heute besser bekannt als spezielle Weibull-Verteilung, die durch die folgende Verteilungsfunktion beschrieben wird:

$$F_a(x) = 1 - e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^b} \quad \text{für } x \geq 0 \text{ und } a, b, > 0 \quad (7.1)$$

wobei a den Skalenparameter und b den Formparameter darstellen. Für den Formparameter $b = 1$ ergibt sich eine Exponentialverteilung. Werden der Verteilungsfunktion ein Minimal- und Maximalwert hinzugefügt, wird aus der Weibull-Verteilung die Rosin-Rammler-Verteilung (Weibull, 1951).

Diese Wahrscheinlichkeitsfunktion lässt sich auf die Verteilung von Partikeldurchmessern von zufällig entstandenen Mikroplastikpartikeln anwenden. Die Parametrisierung der Verteilungsfunktion wurde so gewählt, dass sich ein möglichst breites Spektrum an Durchmessern ergab. Dafür wurden die folgenden Werte in OpenFOAM in der Datei *constant/kinematicCloudProperties* angegeben:

- Skalenparameter: Durchmesser mit höchster Wahrscheinlichkeit $d = 800 \mu\text{m}$
- Minimaler Durchmesser: *minValue* = $10 \mu\text{m}$
- Maximaler Durchmesser: *maxValue* = 5 mm
- Formparameter: $b = 1$

Es wurden entsprechende Simulationen mit den drei Kunststoffarten und jeweils den Einschwingimulationen der mittleren und der schnellen Fließgeschwindigkeit durchgeführt. Es ergaben sich somit sechs verschiedene Fälle für dieses Szenario.

7.4.3 Szenario 3: Partikelwolke

Im letzten Szenario wurde eine größere Anzahl an Mikroplastikpartikeln mit einer ähnlichen Startposition in der fließenden Strömung simuliert. Die Gesamtmenge an Partikeln wird im Folgenden als „Partikelwolke“ bezeichnet. Zum einen sollte mit Hilfe dieses Szenarios getestet werden, ob ein gegenseitiger Einfluss der Partikel vorhanden ist und falls ja, ob dieser abhängig von bestimmten Partikelparametern ist. Zum anderen galt es zu überprüfen, inwiefern die zuvor gemachten Beobachtungen für eine solche Partikelwolke reproduzierbar sind.

Die Partikelwolke bestand aus 120 Mikroplastikpartikeln mit gleicher Dichte und unterschiedlichem Durchmesser. Für die zufällige Auswahl des Partikeldurchmessers wurde in diesem Szenario eine Normalverteilung mit einem Mittelwert von $500 \mu\text{m}$ und einer Varianz von $75 \mu\text{m}$ verwendet. Die Einbringung der Partikelwolke erfolgte ab einem Abstand von 1 m hinter dem Einlass. Bei der Wahl der y- und z-Koordinaten wurde darauf geachtet, dass die Partikel möglichst über die gesamte Breite und Tiefe der Wasserphase verteilt waren, um hier auch den Einfluss möglicher Randeffekte zu

erfassen. Der Anfangszustand der Mikroplastikpartikel in Abhängigkeit ihres Durchmessers ist in Abb. 7.5 zu sehen.

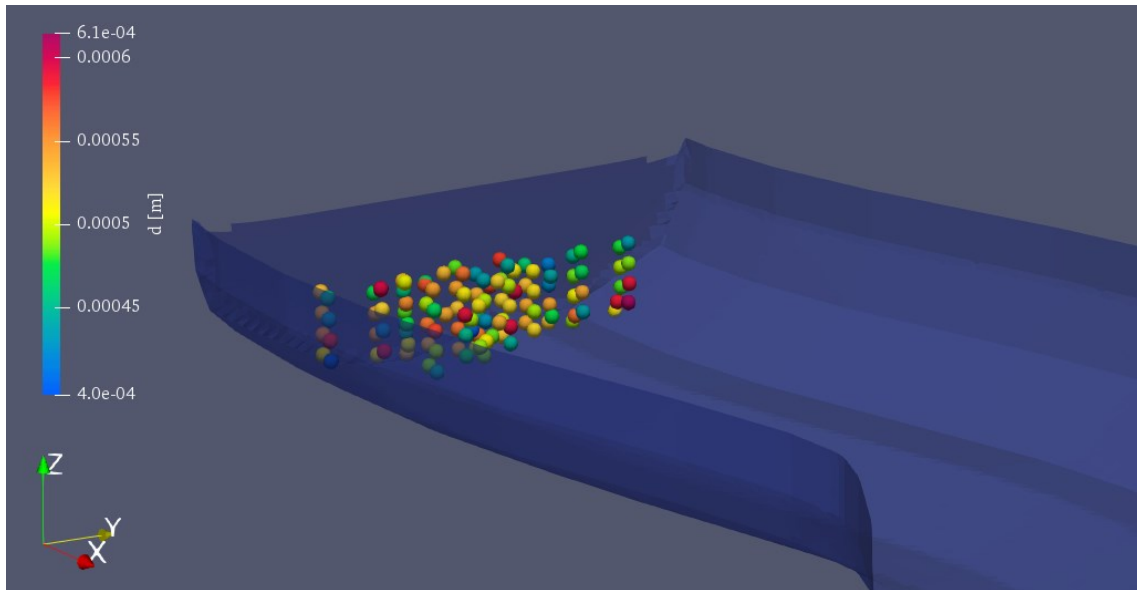


Abbildung 7.5: Startposition der Mikroplastikpartikel im Szenario 3 in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [m].

Die Simulationsdauer für dieses Szenario betrug 90 Sekunden mit einem Schreibintervall der Simulationsergebnisse von 0,5 Sekunden. Bedingt durch die sehr langen Rechenzeiten der Simulationen (min. 2-3 Wochen pro Fall), konnten im Rahmen dieser Arbeit nicht alle Parameterkonstellationen abgedeckt werden. Aufgrund dessen wurde sich auf die Verwendung der langsamen und mittleren Strömungen beschränkt.

7.5 Ermittlung der Transportstrecke

Für die Auswertung der Simulationsergebnisse wurde die Transportstrecke der einzelnen Mikroplastikpartikel in Abhängigkeit der Dichte, des Durchmessers und der mittleren Fließgeschwindigkeit der Einschwingungssimulation ermittelt. Anhand dessen sollten die verschiedenen Simulationsergebnisse miteinander verglichen werden können, um Rückschlüsse auf den potentiellen Einfluss der verschiedenen Parameter und Parameterkonstellationen zu ermöglichen. Das Vorgehen dafür gliederte sich in zwei Abschnitte: Zuerst mussten die Ergebnisse der Partikelsimulationen entsprechend nachbearbeitet werden, um die einzelnen Transportwege darzustellen. Anschließend musste eine Möglichkeit gefunden werden, aus den vorhandenen Daten die gesamte Transportstrecke der jeweiligen Partikel zu bestimmen.

Im ersten Schritt wurde die standardmäßig in OpenFOAM vorhandene Funktion *particleTracks* im Rahmen der Nachbearbeitung (*post-processing*) auf die Simulationsergebnisse angewendet (s. Kapitel 5.4). Damit konnten die individuellen

Transportwege der Mikroplastikpartikel in ParaView abgebildet werden. Wie bereits bei der Beschreibung der Funktion erwähnt, liefert diese die Koordinaten der Partikel zu jedem herausgeschriebenen Zeitschritt gesammelt in einer Tabelle. Über die tabellarische Ansicht in ParaView konnten die entsprechenden Daten für die externe Weiterbearbeitung extrahiert werden.

Die Berechnung der individuellen Transportstrecken der Mikroplastikpartikel erfolgte in *Mathematica*®. Dazu wurde ein Skript geschrieben, welches die gesamte Tabelle der Partikelpositionen einliest und die Daten für die einzelnen Partikel separiert. Anschließend wurde für jeden Partikel die euklidische Distanz s_i [m] zwischen zwei aufeinander folgenden Koordinatenpunkten mit der folgenden Formel berechnet:

$$s_i = \sqrt{(x_i - x_{i-1})^2 + (y_i - y_{i-1})^2 + (z_i - z_{i-1})^2} \quad (7.2)$$

mit $i = 2, \dots, n_T$

wobei n_T die Anzahl der herausgeschriebenen Zeitschritte beschreibt. Hierbei ist darauf zu achten, dass für einen Vergleich verschiedener Simulationen dieselbe Simulationsdauer bei der Auswertung betrachtet werden muss.

Anschließend wurde für die gesamte Transportstrecke S [m] eines Partikels p die Summe über die einzelnen Distanzen der Koordinatenpunkte gebildet:

$$S_p = \sum_{i=2}^{n_t} s_i \quad (7.3)$$

Das Ergebnis dieser Berechnung stellt jedoch nur eine Näherung der tatsächlichen Transportstrecke dar, weil zwischen zwei bekannten Positionen interpoliert werden muss. Für eine exakte Angabe müsste der Zeitschritt zwischen den Daten sehr klein sein, um einen kontinuierlichen Transportweg zu erhalten. Um dies zu umgehen, wurde der Zeitschritt zum Herausschreiben der Simulationsergebnisse hinreichend klein gewählt, sodass die Näherung für den angestrebten Vergleich zwischen den Mikroplastikpartikeln ausreichend genau sein sollte. Die resultierende Unsicherheit für die berechneten Transportstrecken ist außerdem für alle Partikel gleich. Darüber hinaus ist die ermittelte Transportstrecke nicht gleichzusetzen mit der Differenz zwischen Start- und Endposition in Fließrichtung. Es wird die innerhalb der betrachteten Simulationszeit zurückgelegte Strecke eines Partikels im dreidimensionalen Raum betrachtet.

8 Ergebnisse und Diskussion

Im Folgenden werden die Ergebnisse der verschiedenen Modellierungen beschrieben und diskutiert. Zunächst werden die Daten der Messkampagne in der Freiland-Fließrinne ausgewertet (8.1), um die Übertragbarkeit der Strömungsdynamik auf die Modellumgebung in OpenFOAM zu überprüfen. Im Anschluss wird das simulierte Strömungsfeld in der Modell-Fließrinne untersucht und das Geschwindigkeitsfeld der gesamten Rinne sowie an mehreren Querschnitten entlang der Fließstrecke betrachtet. Es folgt ein Vergleich der Messdaten der Geschwindigkeitsmessung mit den Simulationsergebnissen (8.2.1). Letztlich wird die simulierte Dispersion eines gelösten Stoffes in Form eines Tracers betrachtet (8.2.2)

Analog zum Vorgehen bei der Modell-Fließrinne wird die simulierte Strömungsdynamik des implementierten Modell-Flussabschnittes betrachtet (8.3). Mit Hilfe der durchgeführten Vorversuche und Simulationen des statischen Auftriebs- und Absinkverhaltens verschieden parametrisierter Partikel wird der gewählte Löser *icoUncoupledKinematicParcelFoam* hinsichtlich der Eignung der geplanten Simulationen von Mikroplastikpartikeln in der fließenden Strömung überprüft (8.4). Anschließend werden die Simulationsergebnisse der drei entwickelten Szenarien zum Partikeltransport im Hinblick auf den Einfluss einzelner Modellparameter analysiert (8.5.1 – 8.5.4) und ein Realitätsbezug der Simulationsergebnisse hergestellt (8.6).

Für alle Modellsimulationen wurde OpenFOAM v7 verwendet. Die Auswertung der Simulationsergebnisse wurde in ParaView 5.6.0 vorgenommen. Dabei definiert der Begriff „Endzustand“ den Zustand des Modells und aller betrachteten Zustandsgrößen zum letzten simulierten Zeitschritt. Weiterhin werden Echtzeit und Simulationszeit synonym verwendet und beschreiben die gewählte Dauer einer Simulation. Die für eine Simulation benötigte Rechenzeit ist trotz des Einsatzes von 16 Prozessoren sehr groß und schränkte deshalb die Auswahl der simulierten Szenarien ein. Für 60 Sekunden Echtzeit wurden je nach Szenario ein bis drei Wochen Rechenzeit benötigt.

8.1 Geschwindigkeitsfeld der künstlichen Freiland-Fließrinne

Die Auswertung der Daten aus den Versuchen in der Freiland-Fließrinne der FSA umfasste das Erstellen von Querschnittsprofilen aus den Messungen der Fließgeschwindigkeiten und diente dem anschließenden Vergleich zwischen den Messdaten und den in OpenFOAM durchgeführten Simulationen in der Modell-

Fließrinne. Die Geschwindigkeitsmessungen der Freiland-Fließrinne wurden für je für drei Frequenzen des Schneckenpumpenantriebes durchgeführt, die im Folgenden als langsame, mittlere und schnelle Umdrehungsgeschwindigkeit bezeichnet werden. Dabei wurde zusätzlich die Zeit t_{10} für zehn vollständige Umdrehungen der Schraube jeweils dreimal gemessen und der Mittelwert gebildet. Anschließend wurde die Winkelgeschwindigkeit mit Gl. 6.1 und dem zugehörigen Größtfehler (Gl. 6.2) berechnet. Tabelle 8.1 enthält die Ergebnisse der Berechnung sowie die dafür benötigten Daten.

Tabelle 8.1: Eingestellte Frequenz des Schneckenpumpenantriebes und gemessene Zeit für zehn Umdrehungen der Schraube sowie daraus berechnete Winkelgeschwindigkeit ω [rad/s] inklusive Größtfehler.

	Frequenz [Hz]	Zeit t_{10} [s]	Winkelgeschwindigkeit ω $\pm \Delta\omega$ [rad/s]
schnell	900	22,62	$2,78 \pm 0,13$ (4,7%)
mittel	500	41,59	$1,51 \pm 0,04$ (2,6%)
Langsam	300	69,54	$0,903 \pm 0,016$ (1,8%)

Die Winkelgeschwindigkeiten werden für die Parametrisierung der nachfolgenden Simulationen der Strömung in der Modell-Fließrinne mit OpenFOAM benötigt. Der Größtfehler der berechneten Werte ist für alle drei Messungen kleiner als 5 % und wird mit steigender Frequenz nur geringfügig größer. Der Schneckenpumpenantrieb arbeitet somit mit ausreichend hoher Präzision.

Bei konstant bleibender Frequenz des Schneckenpumpenantriebes stellte sich nach hinreichender Zeit (ca. 30 Minuten) ein quasi-stationärer Zustand der Strömungsdynamik ein. Für diesen Zustand wurde jeweils das Geschwindigkeitsprofil des Rinnenquerschnittes mit einem Flügelradanemometer in 15 m Entfernung vom Antrieb gemessen. Die Ergebnisse der Messungen für die Fließgeschwindigkeit [m/s] sind in Abb. 8.1 dargestellt. Für alle drei Messungen stellt sich ein gleichbleibendes Muster im Querschnittsprofil ein. Entsprechend der Erwartungen steigt mit Erhöhung der Frequenz des Schneckenpumpenantriebes die mittlere Fließgeschwindigkeit an. Diese ist zwar nicht linear mit der Frequenz korreliert, für einen definierten Wasserstand in der Rinne kann aber die bei einer eingestellten Frequenz resultierende Fließgeschwindigkeit anhand einer vorgegebenen Eichkurve ungefähr abgeschätzt werden.

Die gemessenen Fließgeschwindigkeiten zeigen eine Abhängigkeit von der Messposition im Querschnitt der Rinne. Dabei ist ein abnehmender Gradient der Geschwindigkeit von der Mitte der fließenden Welle zu den Rändern erkennbar. Zudem ist die Fließgeschwindigkeit in der Mitte in etwa 10 cm Tiefe höher als an der Wasseroberfläche. Aufgrund der Rinnengeometrie ist dies ein zu erwartendes Ergebnis (Jirka & Lang 2009, S. 18f).

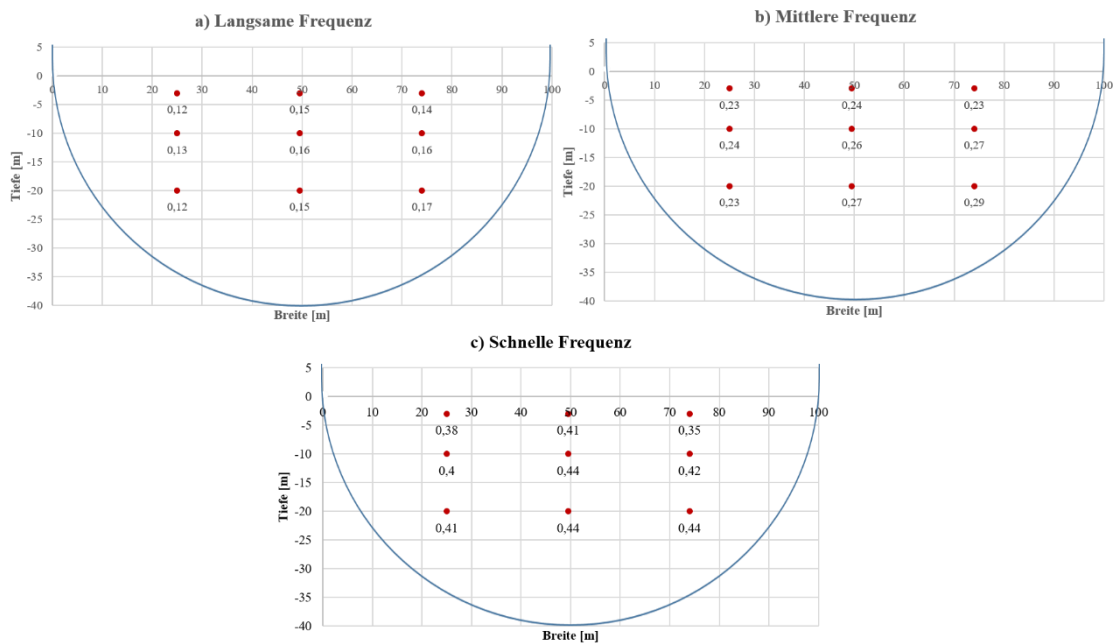


Abbildung 8.1: Geschwindigkeitsmessungen [m/s] der Freiland-Fließrinne im Querschnitt für die langsame (a), mittlere (b) und schnelle (c) Frequenz des Antriebes in Fließrichtung.

Die höchste Fließgeschwindigkeit wurde bei allen drei Messungen in einer Tiefe von 20 cm und mit einem Abstand von 25 cm von der äußeren Wand (rechts) verzeichnet. In einer gleichbleibenden Rinnengeometrie stellt sich nach einer hinreichenden Fließstrecke eine gleichförmige Strömung ein. Durch räumliche Veränderungen, wie z.B. durch die Kurven in der Fließrinne sowie durch den Schneckenpumpenantrieb, werden ungleichförmige Strömungen erzeugt. Aufgrund der lokalen Beschleunigung bedingt durch die Drehung der Antriebsschraube im Uhrzeigersinn entsteht eine nach unten gerichtete Sekundärströmung und es kommt zur Überlagerung mit der Längsströmung. Entlang der Fließstrecke zwischen Antrieb und Messung stellt sich wieder eine gleichförmige Strömung ein. Die in Abb. 8.1 gezeigten Geschwindigkeitsmessungen stellen daher ein charakteristisches Querschnittsprofil für die betrachtete Fließrinne dar (Jirka & Lang 2009, S. 5f).

8.2 Simulation der Modell-Fließrinne

Basierend auf der künstlichen Freiland-Fließrinne wurde eine maßstabsgetreue Modell-Fließrinne in OpenFOAM modelliert und anschließend das Strömungsfeld simuliert. Im ersten Schritt wurden Simulationen der Strömungsdynamik unter identischen Anfangsbedingungen wie in den Messversuchen in der Freiland-Fließrinne vorgenommen und die resultierenden Geschwindigkeitsprofile miteinander verglichen (8.2.1). Daran anschließend wurde das Ausbreitungsverhalten eines gelösten Stoffes in der Modell-Fließrinne überprüft, indem ein passiver Tracer in Form einer weiteren Zustandsgröße hinzugefügt und simuliert worden ist (8.2.2).

8.2.1 Einschwingimulationen

Die Einschwingimulationen zur Erreichung des stationären Zustandes des Strömungsfeldes in der Modell-Fließrinne wurden für drei Umdrehungsgeschwindigkeiten des Schneckenpumpenantriebes durchgeführt. Dabei wurden die ermittelten Winkelgeschwindigkeiten (0,903 rad/s, 1,51 rad/s, 2,78 rad/s) aus dem Versuch in der Freiland-Fließrinne (s. Tabelle 8.1) verwendet. Im Folgenden werden die Modellergebnisse anhand des simulierten Strömungsfeldes mit der mittleren Umdrehungsgeschwindigkeit in der Modellrinne beschrieben. Dabei wurde jeweils der Modellzustand des letzten Zeitschrittes der Simulation, im Weiteren als Endzeitpunkt bezeichnet, in der Auswertung betrachtet. Für die langsame und schnelle Umdrehungsgeschwindigkeit stellen sich analoge Ergebnisse ein, weshalb auf eine separate Darstellung verzichtet wird. Abschließend wird das gemessene Querschnittsprofil der Fließgeschwindigkeit aus Kapitel 8.1 mit den Simulationsergebnissen verglichen, um die Modellergebnisse zu überprüfen.

In Abb. 8.2 ist die Fließgeschwindigkeit an der Wasseroberfläche in der Modell-Fließrinne zum Endzeitpunkt der Simulation dargestellt. Zusätzlich sind vier Stellen für die spätere Betrachtung der Geschwindigkeitsprofile im Querschnitt markiert. Es ist gut erkennbar, dass sich entlang der geraden Fließstrecken über die gesamte Breite eine gleichbleibende Fließgeschwindigkeit einstellt. Dies stimmt mit den Erwartungen überein, da es sich hierbei um ein schmales Gerinne in Bezug auf das Verhältnis zwischen Breite und Höhe handelt und folglich die Strömungswiderstände der lateralen Berandung einen signifikanten Einfluss auf das Strömungsfeld haben. Aufgrund der räumlich gleichbleibenden Bedingungen stellt sich in diesen Bereichen ein homogenes Geschwindigkeitsfeld an der Oberfläche ein (Jirka & Lang 2009, S. 17).

In den zwei 180°-Kurven zeigen sich dagegen deutliche Veränderungen der Fließgeschwindigkeiten. Am Anfang der Kurve werden die höheren Geschwindigkeiten an der Innenseite erreicht. Durch die weitere räumliche Veränderung wird die Strömung an dieser Stelle anschließend abgelenkt und führt dazu, dass sich nach der Mitte der Kurve die höheren Fließgeschwindigkeiten an die Außenseite der Kurve verlagern. Dies entspricht dem typischen Verlauf des Geschwindigkeitsfeldes in einer 180°-Kurve eines gleichförmigen Gerinnes (Naudascher 1992, S. 8).

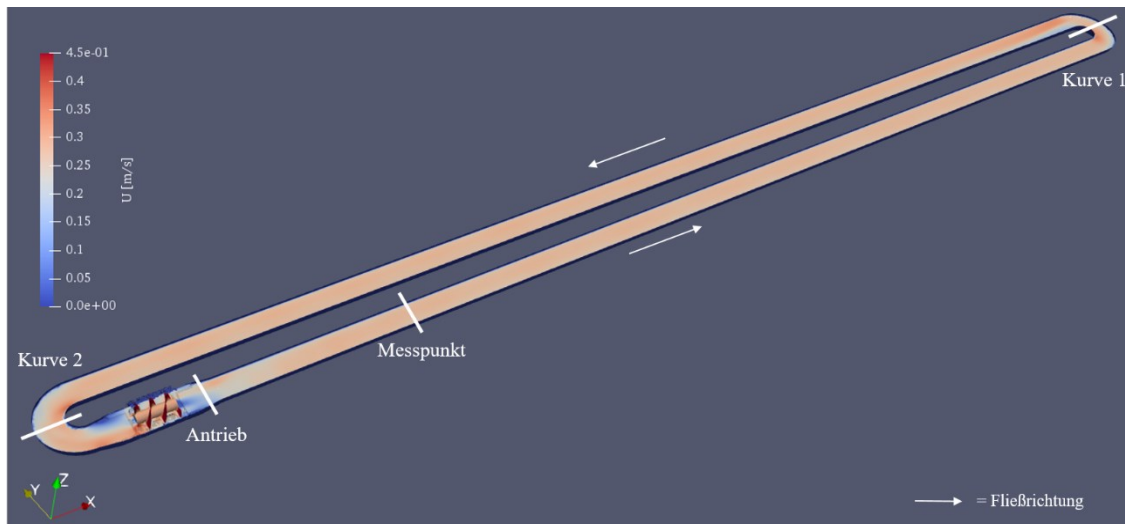


Abbildung 8.2: Fließgeschwindigkeit \vec{u} [m/s] an der Wasseroberfläche für den Endzeitpunkt der Einschwingsimulation mit der mittleren Umdrehungsgeschwindigkeit und Kennzeichnung von vier Stellen für die Querschnittsbetrachtung.

Signifikante Unterschiede in der Fließgeschwindigkeit sind vor und nach dem Schneckenpumpenantrieb vorhanden. Zum einen treten hier die maximalen Fließgeschwindigkeiten auf und zum anderen gibt es Bereiche, in denen die Geschwindigkeit teilweise bis fast auf null absinkt. Dies lässt sich mit der Geometrie und der Umdrehungsrichtung der Schraube erklären. Das Wasser passiert den Antrieb in Fließrichtung auf der rechten Seite der Mittelachse der Schraube (Einlass), wodurch dort sehr schnelle Fließbedingungen resultieren. Aufgrund dessen fließt links vor dem Antrieb praktisch kein Wasser und die Fließgeschwindigkeit verringert sich auf ein Minimum. Die Schraube der Schneckenpumpe dreht sich im Modell mit dem Uhrzeigersinn und das Wasser verlässt diesen Bereich auf der linken Seite der Mittelachse (Auslass). Demnach treten dieselben Bedingungen wie am Einlass auf und es ergeben sich sehr hohe Fließgeschwindigkeiten auf der einen und sehr niedrige auf der anderen Seite.

Insgesamt lässt sich sagen, dass die räumlichen Veränderungen durch die zwei Kurven sowie der Schneckenpumpenantrieb zu lokalen Auswirkungen auf das

Geschwindigkeitsfeld führen. Diese werden jedoch entlang der geraden Fließstrecken kompensiert und es stellt sich dort wieder ein weitestgehend homogenes Geschwindigkeitsfeld an der Wasseroberfläche der Modell-Fließrinne ein. Dies lässt sich auch anhand der gemittelten Fließgeschwindigkeit des gesamten Wasserkörpers erkennen, die in Abb. 8.3 in Abhängigkeit der Zeit grafisch dargestellt ist. Die Fließgeschwindigkeit steigt in den ersten 150 Sekunden sehr stark an und sinkt dann auf einen niedrigeren Wert, der im weiteren Verlauf im Mittel konstant bleibt. Bis zu einer Simulationszeit von 500 Sekunden sind die Schwankungen der Fließgeschwindigkeit um den mittleren Wert größer, verringern sich mit fortlaufender Simulationsdauer aber auf nur noch ca. 1-2 %. Folglich kann die gemittelte Fließgeschwindigkeit als konstant angenommen werden und es stellt sich eine stationäre Strömungsdynamik in der Modell-Fließrinne ein.

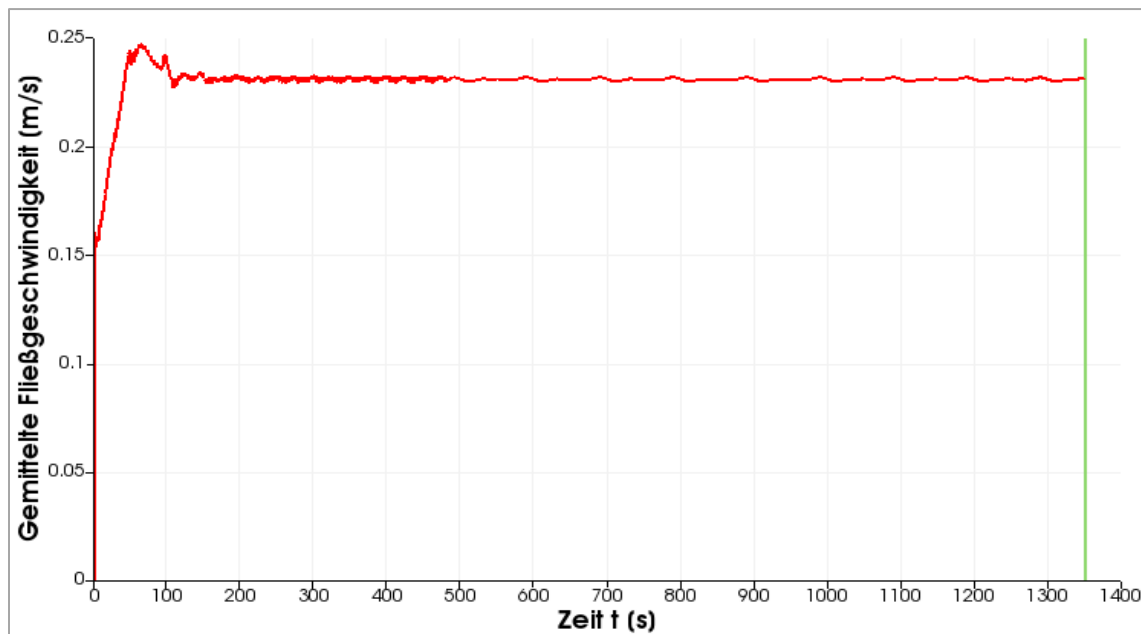


Abbildung 8.3: Gemittelte Fließgeschwindigkeit u_{mittel} [m/s] des gesamten Wasserkörpers in der Modell-Fließrinne in Abhängigkeit der Zeit t [s].

In Tabelle 8.2 sind die resultierenden mittleren Fließgeschwindigkeiten u_{mittel} der Einschwingimulationen für die drei Umdrehungsgeschwindigkeiten des Schneckenpumpenantriebes sowie der Bereich der gemessenen Fließgeschwindigkeiten u_{gem} in der Freiland-Fließrinne aus Kapitel 8.1 aufgelistet. Anhand dessen ist erkennbar, dass für alle drei Simulationen die mittleren Fließgeschwindigkeiten im Bereich der gemessenen Werte liegen und folglich die reale Fließbedingungen in der Modellumgebung abgebildet werden. Zur Bestimmung der Strömungsverhältnisse in der Modell-Fließrinne wurden mit Gl. 4.10 die entsprechenden Reynolds-Zahlen aus den gemittelten

Fließgeschwindigkeiten errechnet und liegen oberhalb der Grenze für Turbulenz ($Re > 10^5$). Folglich liegt hier nach Definition eine turbulente Strömung vor.

Tabelle 8.2: Mittlere Fließgeschwindigkeiten [m/s] der quasi-stationären Strömung der Modell-Fließrinne und daraus errechnete Reynolds-Zahlen sowie minimale und maximale, gemessene Fließgeschwindigkeit [m/s] in der Freiland-Fließrinne für die drei Umdrehungsgeschwindigkeit des Schneckenpumpenantriebes.

Strömung	Mittlere Fließgeschwindigkeit u_{mittel}	Reynolds-Zahl	Gemessene Fließgeschwindigkeit u_{gem}^1
langsam	0,141 m/s	$1,41 \cdot 10^5$	0,12 – 0,17 m/s
mittel	0,231 m/s	$2,31 \cdot 10^5$	0,23 – 0,29 m/s
schnell	0,427 m/s	$4,27 \cdot 10^5$	0,38 – 0,44 m/s

¹ Gemessene Fließgeschwindigkeiten der Geschwindigkeitsmessung in der Freiland-Fließrinne aus Kapitel 8.1

Ein weiterer Aspekt zur Beschreibung der fließenden Strömung in der Modell-Fließrinne ist das Stromlinienbild, das für den Endzeitpunkt der Simulation in Abb. 8.4 dargestellt ist. Auf den ersten Blick fällt auf, dass die Stromlinien nach dem Schneckenpumpenantrieb entlang der geraden Fließstrecke spiralförmig verlaufen. Dies lässt sich damit erklären, dass die Schraube des Antriebes einen Drehimpuls besitzt und seine Rotationsenergie auf das Wasser überträgt. Es resultiert der zu sehende, spiralförmige Verlauf der Stromlinien bis zur ersten Kurve. Da entlang der Fließstrecke bis zur Kurve keine weiteren Einflüsse auf das Strömungsfeld einwirken, wird dieser Zustand aufgrund der Energieerhaltung beibehalten (Wegener 1991, S. 94ff). Die Krümmung der ersten 180°-Kurve führt jedoch zu Sekundärströmungen, die sich auf die Form der Stromlinien auswirken und einen eher gradlinigen Verlauf erzeugen.

Analog zur ersten gerade Fließstrecke verändert sich auch das Stromlinienbild entlang der zweiten Geraden kaum. Erst am Ende kurz vor der zweiten 180°-Kurve sind Veränderungen der Stromlinien mit dem bereits bekannten spiralförmigen Verlauf erkennbar, der ebenfalls durch den Einfluss der sich drehenden Schraube des Antriebes erzeugt wird. Die Pumpe scheint eine Sogwirkung auf das Wasser auszuüben. In dieser Kurve wird der Effekt jedoch durch die Sekundärströmungen bedingt durch die Krümmung der Fließstrecke kurzzeitig überlagert.

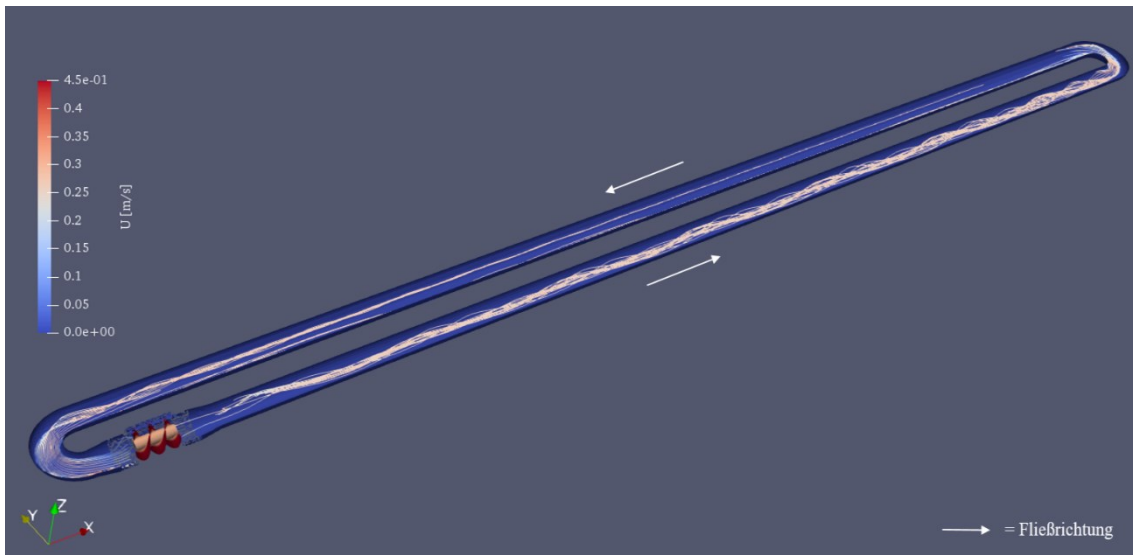


Abbildung 8.4: Stromlinien des Geschwindigkeitsfeldes \vec{u} [m/s] im Endzustand der mittleren Einschwingsimulation.

Im nächsten Schritt wird das Geschwindigkeitsprofil des Wassers an vier Stellen entlang der Modell-Rinne betrachtet. Die Querschnitte der Fließgeschwindigkeiten in Fließrichtung sind in Abb. 8.5 dargestellt. Die entsprechenden Stellen in der Modell-Fließrinne sind in Abb. 8.2 markiert und befinden sich (a) direkt hinter dem Antrieb, (b) an Messpunkt der Geschwindigkeitsmessung aus der Freiland-Fließrinne (s. Kapitel 8.1) sowie (c, d) in der Mitte der beiden 180° -Kurven. In allen Querschnitten ist gut erkennbar, dass die Fließgeschwindigkeiten zu den Rändern der Geometrie hin abnehmen und dort null sind. Dies stimmt mit den Erwartungen für das Geschwindigkeitsfeld eines gleichförmigen Gerinnes überein (Jirka & Lang 2009, S. 19).

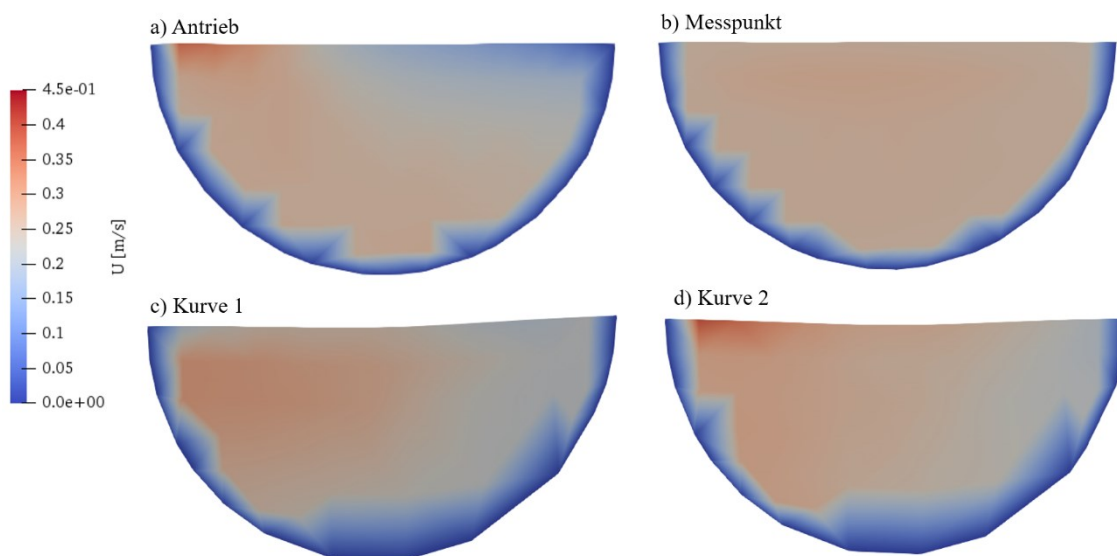


Abbildung 8.5: Fließgeschwindigkeit u [m/s] im Querschnitt des Modellflusses in Fließrichtung kurz hinter dem Schneckenpumpenantrieb (a), 15 m hinter dem Antrieb (Messpunkt der Geschwindigkeitsmessung) (b), innerhalb der ersten (c) und zweiten 180° -Kurve (d).

Das Geschwindigkeitsprofil hinter dem Antrieb (a) weist die höchsten lokalen Fließgeschwindigkeiten auf der linken Seite direkt an der Wasseroberfläche auf, wohingegen rechts sehr niedrige Geschwindigkeiten vorliegen. Dies lässt sich mit dem Auslass der Schraube erklären. Wie zuvor bereits am Geschwindigkeitsfeld der Wasseroberfläche beschrieben worden ist, verlässt das Wasser den Bereich des Antriebes auf der linken Seite der Mittelachse der Schraube. Folglich wird das Wasser durch die Verengung beschleunigt und es resultieren höhere Fließgeschwindigkeiten. Auf der rechten Seite fließt hingegen fast kein Wasser, weshalb dort entsprechend sehr niedrige Geschwindigkeiten verzeichnet werden.

Die Stelle der Geschwindigkeitsmessung in der Freiland-Fließrinne (s. Kapitel 8.1) befindet sich 15 m hinter dem Schneckenpumpenantrieb. Das Querschnittsprofil der Fließgeschwindigkeit (b) weist den zu erwartenden Verlauf eines gleichförmigen, offenen Gerinnes auf (Naudascher 1992, S. 7). Die Fließgeschwindigkeiten sind über die gesamte Querschnittsfläche näherungsweise homogen und besitzen einen Gradienten zu den Rändern. Die höchsten Geschwindigkeiten werden knapp unter der Wasseroberfläche in 6 – 8 cm Tiefe erreicht.

Die Querschnittsprofile jeweils in der Mitte der beiden 180°-Kurven (c) und d) zeigen ein ähnliches Bild, wobei dies eine zu erwartende Beobachtung im Hinblick auf die Rinnengeometrie darstellt. Wie bereits in Abb. 8.2 zu sehen war, werden in diesem Bereich der Kurve die höheren Fließgeschwindigkeiten an der Innenseite erreicht. Dies zeigt sich auch entsprechend im Tiefenprofil. Im Querschnitt der zweiten Kurve (d) ist zudem der Einfluss des Schneckenpumpenantriebes erkennbar, wodurch an der Innenseite an der Wasseroberfläche die höchsten, lokalen Fließgeschwindigkeiten resultieren.

Abschließend werden die simulierten Fließgeschwindigkeiten mit den Messungen in der Freiland-Fließrinne verglichen. Dafür wurden in Abb. 8.6 dem Geschwindigkeitsprofil an der Messstelle die gemessenen Werte aus Kapitel 8.1 an den entsprechenden Messpunkten hinzugefügt. Zudem wurde die Skala der Fließgeschwindigkeit für die Simulationsergebnisse angepasst, sodass der Bereich eine feinere Darstellung der Werte ermöglicht. Die analogen Abbildungen für den Vergleich des Querschnittsprofils der langsamen und schnellen Umdrehungsgeschwindigkeit mit den entsprechenden Messwerten befinden sich im Anhang A (Abb. A.1 und A.2). Die meisten Messpunkte

weisen eine gute Übereinstimmung mit den simulierten Fließgeschwindigkeiten und den gemessenen Werten auf. Jedoch wird die höchste Fließgeschwindigkeit nicht wie in der Freiland-Fließrinne am unteren rechten Messpunkt erreicht. Dies könnte mit der Abbildung des Schneckenpumpenantriebes im Modell zusammenhängen. Aufgrund der komplexen Geometrie der Schraube sowie dem notwendigen Hinzufügen des umgebenden Rohres, entstanden kleine Unterschiede zu der originalen Fließrinne. Diese könnten dazu geführt haben, dass die Besonderheit des Geschwindigkeitsprofils in der Freiland-Fließrinne in der Modellsimulation nicht gleichermaßen abgebildet wird. Die Abweichung für den entsprechenden Messpunkt ist bei allen Simulationen mit den drei Umdrehungsgeschwindigkeiten (langsam, mittel, schnell) vorhanden und liegt bei 10 – 15 %. Daher ist es fraglich, ob das simulierte Geschwindigkeitsfeld die realen Bedingungen ausreichend genug abbildet. Die Geschwindigkeitsmessung in der Freiland-Fließrinne wurden nur an einer Stelle durchgeführt, weshalb keine weiteren Vergleichsdaten vorliegen, anhand derer die Modellgüte weiter validiert werden könnte.

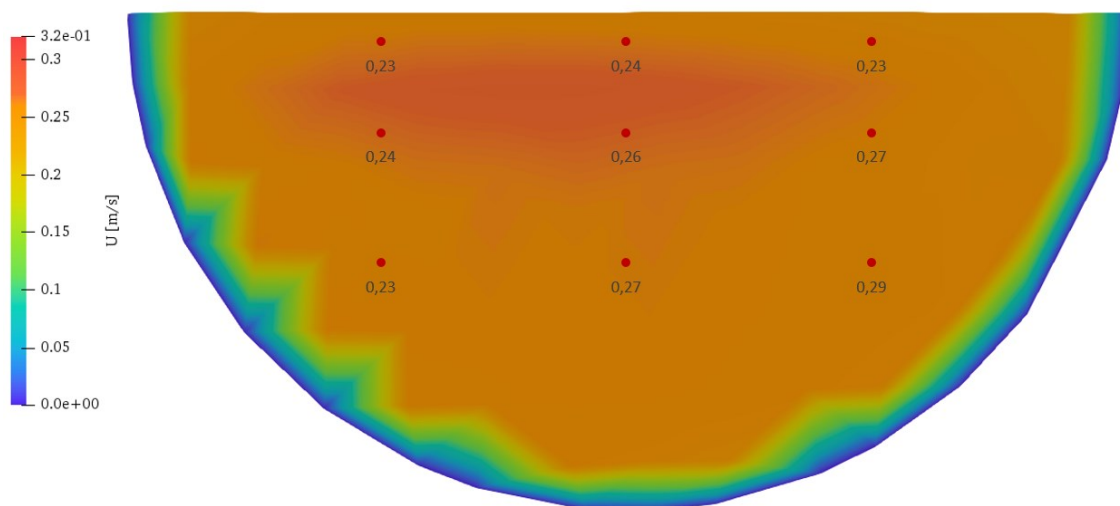


Abbildung 8.6: Vergleich des simulierten Querschnittsprofils der Fließgeschwindigkeit [m/s] in der Modell-Fließrinne mit gemessenen Werten in der Freiland-Fließrinne (rote Punkte) für die mittlere Umdrehungsgeschwindigkeit.

Durch die angepasste Skalierung der Legende für die Fließgeschwindigkeit in Abb. 8.6 lässt sich der Bereich unterhalb der Wasseroberfläche, in dem die höchsten Fließgeschwindigkeiten erreicht werden, besser erkennen. Hierbei zeigt sich zusätzlich, dass eine leichte Verlagerung der hohen Fließgeschwindigkeiten im Modell nach links vorhanden ist. Dies wird ein Resultat aus der Umdrehungsrichtung und dem Auslass des Schneckenpumpenantriebes sein. Wie bereits erwähnt, verlässt das Wasser in Fließrichtung links von der Mittelachse den Antrieb, weshalb die leichte Verlagerung der hohen Fließgeschwindigkeiten plausibel erscheint.

Insgesamt zeigt sich, dass mit der Modell-Fließrinne ein zu erwartendes Geschwindigkeitsfeld und Stromlinienbild für ein gleichförmiges Gerinne simuliert wird. Ebenfalls werden die verwendeten Umdrehungsgeschwindigkeiten des Schneckenpumpenantriebes im Modell richtig übersetzt und die gemittelten Fließgeschwindigkeiten der drei Einschwingimulationen liegen innerhalb des Bereiches der gemessenen Geschwindigkeiten in der Freiland-Fließrinne. Allerdings zeigt der Vergleich zwischen den simulierten und gemessenen Fließgeschwindigkeiten, dass eine Besonderheit des Querschnittsprofils der Freiland-Fließrinne nicht abgebildet wird. Die höchste gemessene Fließgeschwindigkeit wurde in der originalen Rinne in 20 m Tiefe in Fließrichtung rechts verzeichnet. Im Modell hingegen sind die höchsten Fließgeschwindigkeiten erwartungsgemäß knapp unterhalb der Wasseroberfläche vorhanden. Da keine weiteren Geschwindigkeitsprofile an anderen Messstellen entlang der Fließstrecke aufgezeichnet wurden, ist kein weiterer Vergleich zwischen den Mess- und Simulationsergebnissen möglich. Aufgrund der zuvor beschriebenen Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit dem Geschwindigkeits- und Strömungsfeld eines gleichförmigen Gerinnes, kann die Modell-Fließrinne dennoch für weitere Simulationen verwendet werden.

8.2.2 Implementation einer Tracersimulation

Die Implementation einer Tracersimulation in der Modell-Fließrinne erfolgte in das eingeschwungene System aus Kapitel 8.2.1. Die Simulation des Ausbreitungsverhaltens wurde mit den drei vorhandenen Einschwingimulationen durchgeführt. Abb. 8.7 zeigt den Zustand des Tracers in der Modell-Fließrinne kurz nach der Einbringung ($t = 0,2 \text{ s}$) in die langsame Strömung in der Gesamtansicht (oben) sowie in einem Teilausschnitt der Rinne in horizontaler (Mitte) und vertikaler (unten) Ansicht. In die vertikale Darstellung wurde der Querschnitt senkrecht zur Fließrichtung und mittig gesetzt. Als farbliche Kennzeichnung wurde die Konzentration des Tracers verwendet und auf eine Darstellung des Wassers in Abhängigkeit der Fließgeschwindigkeit verzichtet, um die Abbildung übersichtlich zu gestalten. Für das Geschwindigkeitsfeld des Wassers wird auf Kapitel 8.2.1 verwiesen.

Anhand des Horizontalschnitts der oberen Abbildung ist die Anfangsbedingung der gleichmäßigen Verteilung über die Breite erkennbar. Dabei fällt jedoch auf, dass in Fließrichtung links kein Tracer vorhanden zu sein scheint, es aber dafür in Richtung der Mittelachse der Rinne zu einer Ansammlung kommt. Dies lässt sich damit erklären, dass

der Tracer zu Beginn der Simulation knapp unterhalb der Wasseroberfläche positioniert war und dementsprechend zum Zeitpunkt $t = 0$ s in dieser Darstellungsweise nicht zu sehen gewesen wäre. Aufgrund dessen wurde der erste Zeitschritt gewählt, in dem der Tracer an der Wasseroberfläche vorhanden war. Es lässt sich daran gut beobachten, dass eine sofortige Ausbreitung des Tracers stattfindet und die Dispersion basierend auf der fließenden Strömung in der Modell-Fließrinne simuliert wird. Weiterhin ist im Vertikalschnitt (unten) gut zu erkennen, dass sich der Tracer nach dem Einbringen erwartungsgemäß noch an und kurz unterhalb der Wasseroberfläche konzentriert.

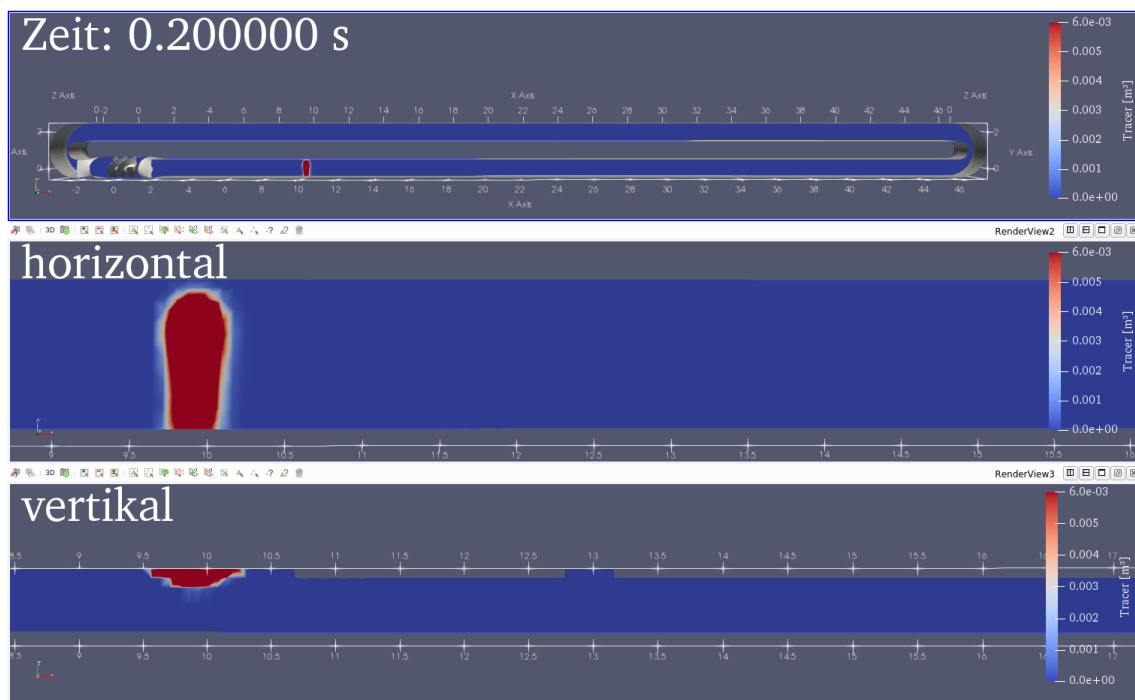


Abbildung 8.7: Simulierte Tracerausbreitung in der langsamen Strömung der Modell-Fließrinne nach der Einbringung in der Gesamtansicht (oben) sowie horizontale (Mitte) und vertikale (unten) Darstellung im Ausschnitt.

In Abb. 8.8 ist in gleicher Weise wie zuvor die Ausbreitung des Tracers unter den langsamen Strömungsbedingungen in der Modell-Fließrinne nach 100 Sekunden Echtzeit dargestellt. Die gesamte Tracerwolke wird entlang der Fließstrecke transportiert und weist ein zu erwartendes Ausbreitungsverhalten auf, weshalb der Dispersionsprozess offenbar realistisch simuliert wird. Im Horizontalschnitt (Mitte) sind deutlich die Auswirkungen der über die Breite unterschiedlichen Strömungsgeschwindigkeiten zu erkennen. Die Konzentration des Tracers ist auf der Innenseite der Modell-Fließrinne höher als auf der Außenseite, was mit den simulierten Geschwindigkeitsprofilen (s. Abb. 8.5) konsistent ist. Der Vertikalschnitt (unten) zeigt, dass nach 100 Sekunden bereits eine nahezu vollständige vertikale Durchmischung erreicht wird, wobei aufgrund des tiefenabhängigen Strömungsprofils die Ausbreitung der Tracerwolke je nach Tiefe leicht

verschieden ist. Basierend auf dem Querschnittsprofil der Fließgeschwindigkeiten (s. Kapitel 8.2.1) und dem vertikalen Geschwindigkeitsfeld eines offenen, gleichförmigen Gerinnes stimmt der zu sehende Verlauf mit den Erwartungen überein (Naudascher 1992, S. 7). Für die Ausbreitung des Tracers in der mittleren und schnellen Strömung ergibt sich qualitativ ein ähnliches Bild (Abb. B.1 und B.2), weswegen auf eine Darstellung der Ergebnisse verzichtet wird. Dabei sei darauf hingewiesen, dass aus technischen Gründen für die Ausbreitung des Tracers in der schnellen Einschwingungssimulation nur 11 Sekunden Echtzeit simuliert werden konnten.

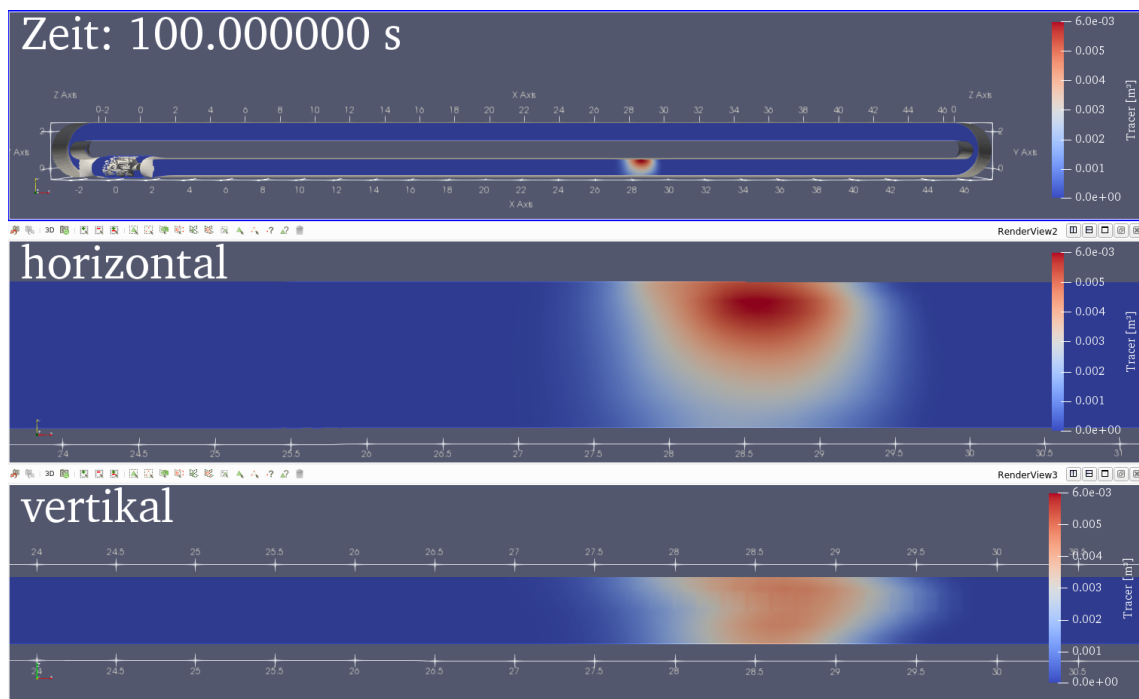


Abbildung 8.8: Simulierte Tracerausbreitung in der langsamen Strömung der Modell-Fließrinne nach 100 Sekunden Realzeit in der Gesamtansicht (oben) sowie horizontale (Mitte) und vertikale (unten) Darstellung im Ausschnitt.

8.2.3 Eignung der Modell-Fließrinne für die Untersuchung von Partikeltransport

Die Auswertung der Simulationsergebnisse der Modell-Fließrinne in OpenFOAM zeigt, dass sich ein typisches Strömungsfeld eines offenen, gleichförmigen Gerinnes erzeugen lässt. Das Geschwindigkeitsfeld und das Ausbreitungsverhalten eines gelösten Stoffes (hier ein Tracer) stimmen mit den Erwartungen überein. Folglich erscheint die Verwendung des Modells für die Simulation des Transportverhaltens von Mikroplastikpartikel grundsätzlich möglich.

Beim Vergleich der simulierten Strömungsdynamik mit der in der Freiland-Fließrinne gemessenen stellte sich jedoch heraus, dass eine Besonderheit der originalen Fließrinne nicht abgebildet wird. Die geringfügigen Abweichungen zwischen der Antriebsschraube im Modell und in der originalen Fließrinne erzeugen einen anderen Verlauf des

Geschwindigkeitsprofils im Querschnitt. Dies könnte zu einem qualitativen Unterschied im Transportverhalten von Mikroplastikpartikel führen. Das Ziel der Implementierung der Freiland-Fließrinne in OpenFOAM bestand darin, die Strömungsdynamik vollständig zu modellieren, um basierend darauf verschiedene Szenarien mit Mikroplastikpartikeln in einer fließenden Strömung zu simulieren. Durch die vorhandenen Abweichungen zwischen der Modell- und der Freiland-Fließrinne ist daher fraglich, inwiefern entsprechende Simulationen von Partikeln auf die originale Rinne übertragbar wären.

Weiterhin wurde bereits in Kapitel 6.2.3 erklärt, dass im Rahmen des Projektes aus verschiedenen Gründen keine experimentellen Versuche zum Transportverhalten von Mikroplastikpartikeln in der Freiland-Fließrinne durchgeführt werden konnten. Daher entfällt die Grundlage des Vergleiches zwischen den Simulationsergebnissen mit Messdaten. Aufgrund der genannten Aspekte wurde entschieden, dass Simulationen des Transportverhaltens von Mikroplastikpartikeln im Strömungsfeld der Modell-Fließrinne nicht weiter durchgeführt werden. Im Hinblick auf die Fragestellung dieser Arbeit erschien es sinnvoller, ein realitätsnäheres Modell in Form eines theoretischen Flussabschnittes als Ausgangssituation für den Partikeltransport zu verwenden.

8.3 Strömungsdynamik des Modellflusses

Für den Modellfluss wurden drei Einschwingimulationen der Strömungsdynamik durchgeführt. Dabei wurden die drei Geschwindigkeiten $u_0 = [0,1 \text{ m/s}, 0,3 \text{ m/s}, 0,5 \text{ m/s}]$ am Einlass als Randbedingung verwendet, welche im Folgenden als langsame, mittlere und schnelle Einlassgeschwindigkeit bezeichnet werden. Um das Einstellen des quasi-stationären Zustandes der Strömungsdynamik zu überprüfen, wurde die gemittelte Fließgeschwindigkeit in Abhängigkeit der Zeit in ParaView überprüft und es zeigte sich, dass sich dieser bereits nach relativ kurzer Simulationsdauer von ca. 400 Sekunden innerhalb des gesamten Flussabschnittes für alle betrachteten Zustandsgrößen einstellte. Abb. 8.9 zeigt die Fließgeschwindigkeit des Modellflusses an der Wasseroberfläche für den Endzeitpunkt der Simulation ($T_{\text{End}} = 2500 \text{ s}$) der mittleren Einlassgeschwindigkeit. Zudem sind fünf Stellen für die spätere Betrachtung der Fließgeschwindigkeiten im Querschnitt markiert. Das gezeigte Strömungsprofil stellte sich als gleichbleibendes Muster mit entsprechend niedrigerer bzw. höherer maximalen Fließgeschwindigkeit für alle drei Szenarien ein. Daher werden bei der folgenden Beschreibung exemplarisch die Simulationsergebnisse der mittleren Einlassgeschwindigkeit gezeigt. Alle genannten Beobachtungen gelten analog für die zwei weiteren Einschwingimulationen.

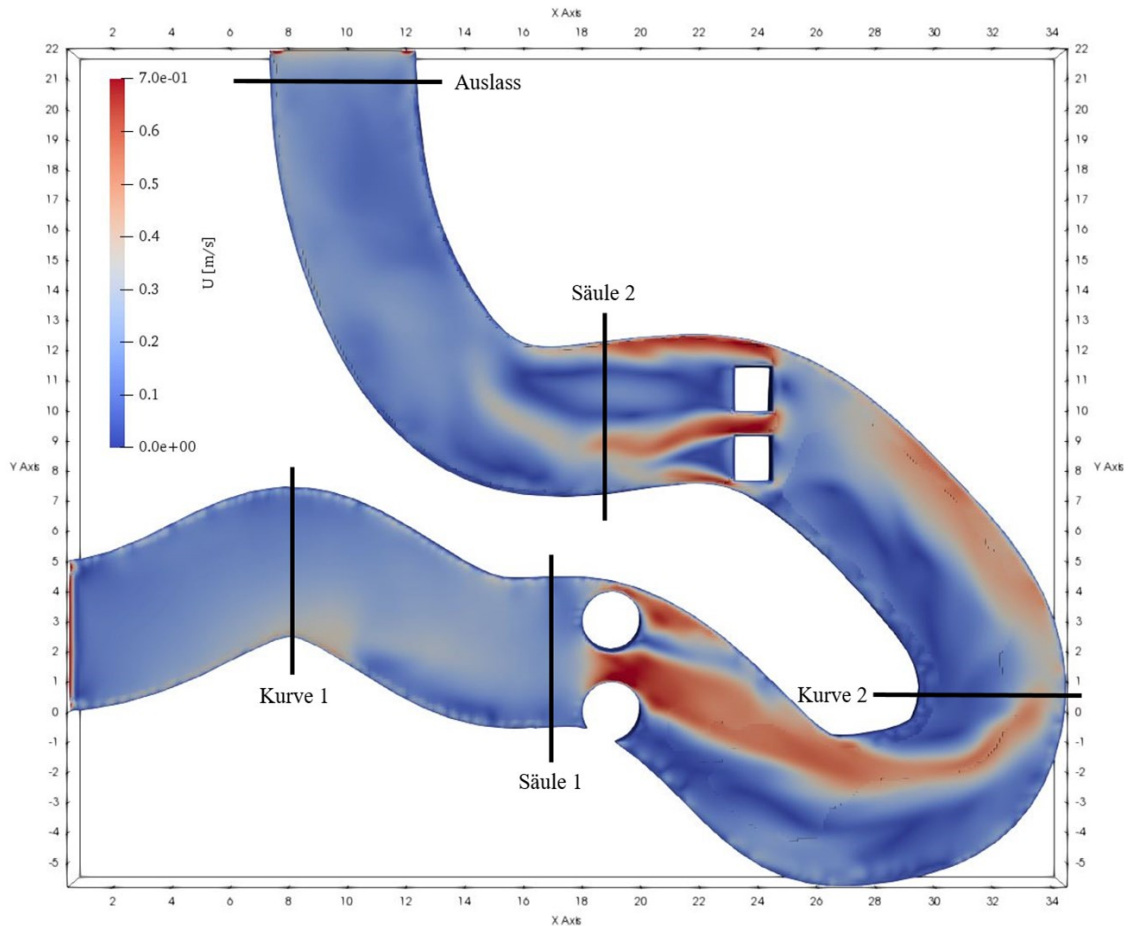


Abbildung 8.9: Fließgeschwindigkeit \vec{u} [m/s] an der Wasseroberfläche für den Endzeitpunkt der Einschwingungssimulation mit der mittleren Einlassgeschwindigkeit und Kennzeichnung von fünf Stellen für die Querschnittsbetrachtung.

An der Wasseroberfläche stellt sich, bedingt durch die Geometrie des Flusses und die Hindernisse in Form der zwei Säulenpaare, ein inhomogenes Geschwindigkeitsfeld ein. Die Verengungen im Querschnitt erzwingen an den betroffenen Stellen deutlich höhere Fließgeschwindigkeiten von bis zu 0,7 m/s. Ebenfalls deutlich erkennbar ist der Einfluss der Kurven auf das Geschwindigkeitsfeld. Die Fließgeschwindigkeit auf der Innenseite der 180°-Kurve („Gleithang“) ist erwartungsgemäß geringer als auf der Außenseite („Prallhang“). Durch den kurvenreichen Verlauf des Flussabschnittes und die gewählten Einbauten entstehen Sekundärströmungen, ähnlich wie bereits bei der Fließrinne beobachtet (s. Kapitel 8.2.1), wodurch es in entsprechenden Bereichen zu Überlagerungen mit der Gerinneströmung kommt und sich ein inhomogenes Strömungsfeld einstellt (Jirka & Lang 2009, S. 30ff).

Abb. 8.10 zeigt die mittlere Fließgeschwindigkeit über alle Zellen der gesamten Wassersäule in Abhängigkeit der Zeit. Innerhalb der ersten 200 Sekunden kommt es zu einem schnellen Anstieg der mittleren Fließgeschwindigkeit in dem zu Beginn als

unbewegt angenommenen Wasserkörper ($\vec{u}_0 = 0 \text{ m/s}$). Bereits nach etwa 300 Sekunden liegt die Änderung der Geschwindigkeit bei weniger als 5 % und schwankt im weiteren Verlauf um einen mittleren Wert. Die analogen Abbildungen für die langsame und schnelle Einlassgeschwindigkeit befinden sich im Anhang C (Abb. C.1 und C.2). Daraus lässt sich schließen, dass sich im Modell relativ schnell ein quasi-stationärer Zustand der Strömungsdynamik einstellt. Die geringen Schwankungen der Fließgeschwindigkeit lassen sich damit erklären, dass es sich bei dem Modell des Flussabschnittes um eine Zweiphasenströmung handelt, wodurch es zu einem Austausch der Fluide an der freien Oberfläche kommt. Da die Geometrie nach oben hin offen ist und sich die Luft oberhalb der Wasserphase frei bewegen kann, ergeben sich über die Zeit stochastisch bedingte Abweichungen vom stationären Strömungsfeld.

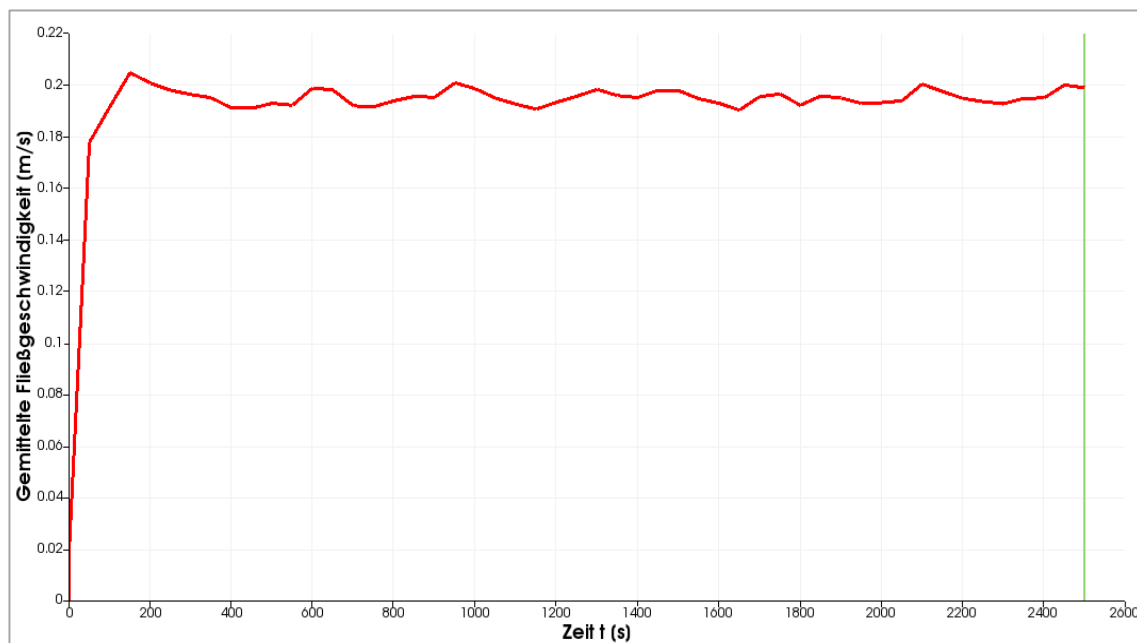


Abbildung 8.10: Gemittelte Fließgeschwindigkeit u_{mittel} [m/s] des gesamten Wasserkörpers in Abhängigkeit der Zeit t [s] für die mittlere Einlassgeschwindigkeit.

Zur Charakterisierung der simulierten Strömungsverhältnisse wurden mit Gl. 4.10. die jeweiligen Reynolds-Zahlen für die drei Geschwindigkeitsfelder berechnet. Dazu wurde die mittlere Fließgeschwindigkeit des gesamten Wasserkörpers verwendet. Tabelle 8.3 enthält die errechneten Reynolds-Zahlen sowie die mittleren Fließgeschwindigkeiten der drei Einschwingimulationen im Endzustand. Anhand der Werte ist erkennbar, dass es sich bei allen drei Einlassgeschwindigkeiten im quasi-stationären Zustand nach Definition ($Re \geq 10^5$) um turbulente Strömungen handelt.

Tabelle 8.3: Errechnete Reynolds-Zahlen aus den mittleren Fließgeschwindigkeiten u_{mittel} [m/s] der quasi-stationären Strömungen des Flussabschnittes.

Strömung	Mittlere Fließgeschwindigkeit	Reynolds-Zahl
	u_{mittel}	
langsam	0,084 m/s	$4,2 \cdot 10^5$
mittel	0,199 m/s	$9,9 \cdot 10^5$
schnell	0,274 m/s	$13,7 \cdot 10^5$

Für die weitere Beschreibung der quasi-stationären Strömung ist in Abb. 8.11 das Stromlinienbild im Endzustand der mittleren Einschwingsimulation dargestellt. Es ist eine Hauptströmung vorhanden, die sich über die gesamte Fließlänge erstreckt. Insbesondere zwischen den Hindernissen ist eine Verdichtung der Stromlinien erkennbar, die auf den dort vorherrschenden erhöhten Fließgeschwindigkeiten beruht. Weiterhin sind an mehreren Stellen Verwirbelungen zu sehen. Diese treten an den Außenseiten der Kurven und hinter den Hindernissen auf. Die Entstehung von Wirbeln im Strömungsfeld entspricht aufgrund der zuvor errechneten Reynolds-Zahlen den Erwartungen, da Verwirbelungen ein Charakteristikum für turbulente Strömungen sind.

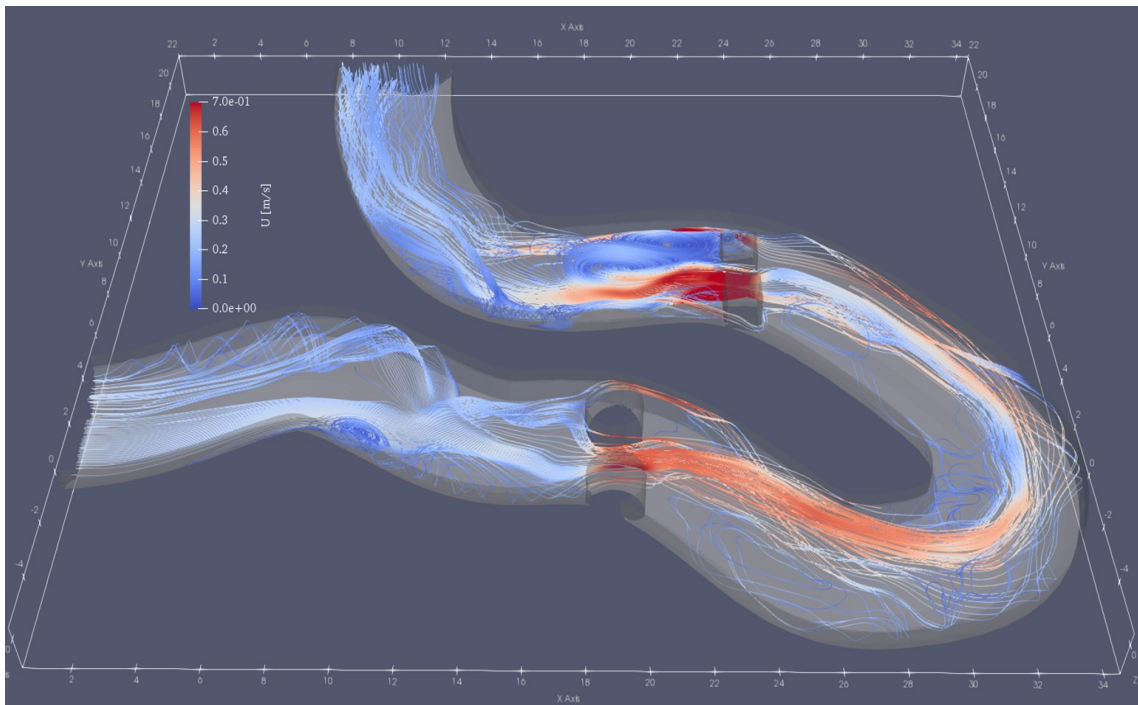


Abbildung 8.11: Stromlinien des Geschwindigkeitsfeldes \vec{u} [m/s] im Endzustand der mittleren Einschwingsimulation.

Der Einfluss der Form der Hindernisse auf die Ausprägung der Wirbel ist hier ebenfalls gut zu erkennen. Die eckig geformten Säulen führen zu deutlich stärkeren

Verwirbelungen direkt dahinter als die runden Säulen (Wegener 1991, S. 171ff). Das Stromlinienbild lässt vermuten, dass darin eingebrachte Mikroplastikpartikel entsprechend der Stromlinien transportiert werden, solange sie nicht sedimentieren. Nicht sinkende Partikel die mit der Hauptströmung transportiert werden, könnten daher schneller weitere Strecken zurücklegen, als Partikel die außerhalb davon positioniert sind. Hierbei ist weiterhin interessant, wie stark das Transportverhalten der Partikel durch Verwirbelungen innerhalb des Strömungsfeldes beeinflusst wird.

Neben der Variabilität der Fließgeschwindigkeit an der Wasseroberfläche sind auch im Flussquerschnitt die unterschiedlichen Strömungsverhältnisse erkennbar. In Abb. 8.12 sind die Fließgeschwindigkeiten im Querschnitt an fünf Stellen entlang des Flusses (s. Abb. 8.9) in Fließrichtung dargestellt. Die Querschnitte befinden sich in (a) der ersten Kurve, (b) 2 m vor dem ersten Säulenpaar, (c) innerhalb der 180°-Kurve, (d) ca. 5 m hinter dem zweiten Säulenpaar und (e) 2 m vor dem Auslass.

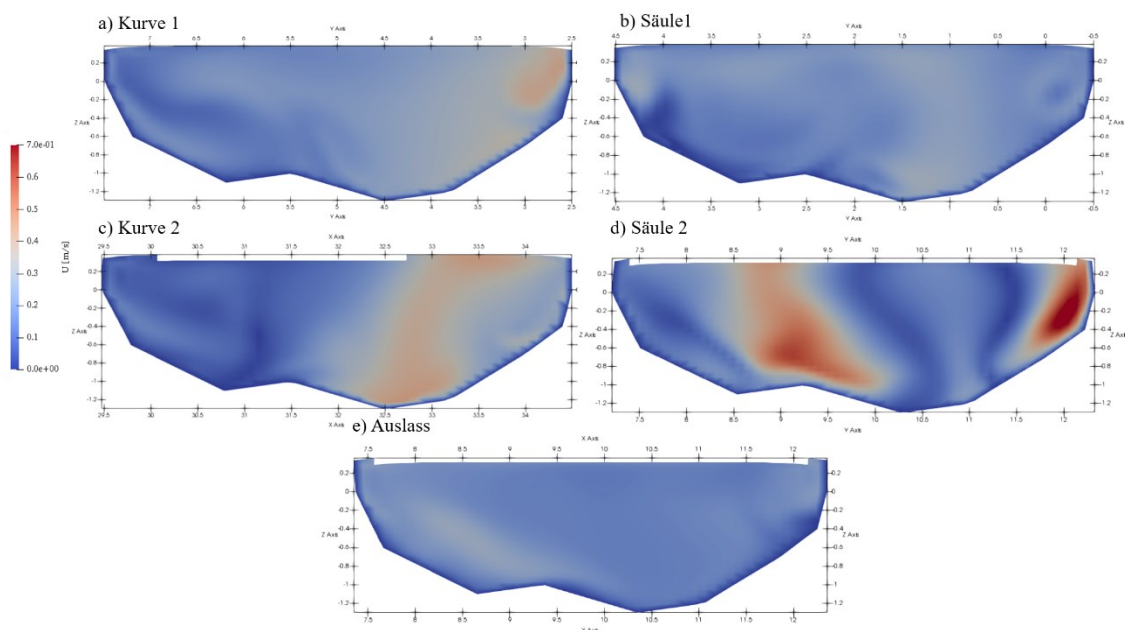


Abbildung 8.12: Fließgeschwindigkeit \bar{u} [m/s] im Querschnitt des Modellflusses in Fließrichtung in der ersten Kurve (a), 2 m vor dem ersten Säulenpaar (b), innerhalb der 180°-Kurve (c), ca. 5 m hinter dem zweiten Säulenpaar (d) und 2 m vor dem Auslass (e).

Die Querprofile der Fließgeschwindigkeit des Modellflusses unterscheiden sich sehr stark in Abhängigkeit ihrer Position entlang der Fließstrecke. Im Querschnitt der Kurve 1 (a) sind rechts (Innenseite) deutlich höhere Fließgeschwindigkeiten zu erkennen als links (Außenseite), was mit Blick auf die Position der Kurve entlang der Fließstrecke (s. Abb. 8.9) zu erwarten ist. Der Druck nimmt aufgrund der Krümmung des Gerinnes von der Innenseite zur Außenseite proportional zur Zentrifugalbeschleunigung zu und die

Längsgeschwindigkeit verteilt sich invers zum Radius. Dadurch entsteht eine Überlagerung der Längsströmung mit der aufgrund des Druckgradienten erzeugten Sekundärströmung und es resultieren die höchsten Geschwindigkeiten in der Innenseite der Kurve (Jirka & Lang 2009, S. 30f).

An der nächsten Stelle ca. 2 m vor dem ersten Säulenpaar (b) sind die Auswirkungen der vorherigen Kurve auf das Geschwindigkeitsfeld nicht mehr so stark zu sehen und es kann als deutlich homogener beschrieben werden (Jirka & Lang 2009, S. 5). Höhere Fließgeschwindigkeiten sind tendenziell in einem Bereich von 10 – 40 cm Wassertiefe zu verzeichnen. Diese Beobachtung stimmt ebenfalls mit den Erwartungen überein (Naudascher 1992, S. 7). Allerdings werden die höchsten Fließgeschwindigkeiten an dieser Stelle im Querschnitt dort erreicht, wo sich offenbar bereits die Verengung durch das Säulenpaar auswirkt. Hier ist tatsächlich über die gesamte Tiefe eine hohe Fließgeschwindigkeit zu beobachten, mit den höchsten Werten in der größten Tiefe. Weiterhin ist in diesem Querschnittsprofil auf der rechten Außenseite ein elliptischer Bereich mit etwas erhöhten Fließgeschwindigkeiten erkennbar. Mit Blick auf das Stromlinienbild (Abb. 8.11) wird es sich dabei um eine der dort vorherrschenden Verwirbelungen handeln.

Das Querschnittsprofil der Fließgeschwindigkeit in Kurve 2 (c) zeigt, dass sich die höchsten Geschwindigkeiten über die gesamte Flusstiefe an der Außenseite der 180°-Kurve ausbilden, während an der Innenseite deutlich geringere Fließgeschwindigkeiten vorherrschen. Dies wird durch den Einfluss der Sekundärströmungen auf die Längsströmung aufgrund der räumlichen Veränderungen durch die Kurve erzeugt. Das Geschwindigkeitsprofil hinter dem zweiten Säulenpaar (d) weist erneut erheblich höhere Fließgeschwindigkeiten in den Bereichen zwischen den Säulen über die gesamte Wassertiefe auf. Die räumlichen Verengungen sorgen für stark ungleichförmige Strömungen, die zu einem Anstieg der Fließgeschwindigkeit in den Zwischenräumen führen (Jirka & Lang 2009, S. 6).

Der letzte Querschnitt kurz vor dem Auslass des Flusses (e) besitzt hingegen ein verhältnismäßig homogenes Geschwindigkeitsprofil. Die Überlagerungen der Längs- und Sekundärströmungen der vorherigen Kurve und die daraus resultierende höhere Geschwindigkeit an der linken Seite sind noch geringfügig erkennbar. Die Einflüsse der räumlichen Verengung durch das zweite Säulenpaar sind praktisch nicht mehr vorhanden.

Es zeigt sich, dass sich nach einer genügend langen Fließstrecke eine ungleichförmige Strömung wieder zu einer gleichförmigen Strömung entwickelt (Jirka & Lang 2009, S. 5).

Die Geschwindigkeitsfelder an den fünf Querschnitten bestätigen, dass sich über die gesamte Tiefe ein inhomogenes Strömungsfeld innerhalb des Modellflussabschnittes eingestellt hat, welches stark abhängig von der räumlichen Struktur ist. Weiterhin sind an den Querschnitten c) – e) in Abb. 8.12 „fehlende Zellen“ in der obersten Schicht erkennbar. Diese resultieren aus der Darstellungsweise, in der nur Zellen mit einem Volumenanteil *alpha.water* oberhalb eines festgelegten Grenzwertes angezeigt werden. Da die entsprechenden Zellen in den Querschnitten a) und b) noch abgebildet werden, bedeutet dies, dass sich die Struktur der Wasseroberfläche entlang der Fließstrecke aufgrund der räumlichen Gegebenheiten verändert. Diese Veränderung der Grenzschicht zwischen Wasser und Luft ist ebenfalls in Abhängigkeit der Zeit erkennbar und wird über die Zellen mit einem Volumenanteil ungleich 0 oder 1 definiert. Zu Beginn der Simulation sind alle Zellen der Geometrie eindeutig einer Phase zugeordnet und es gibt keine „gemischten Zellen“. Im quasi-stationären Zustand der Strömungsdynamik sind hingegen eine Vielzahl an Zellen vorhanden, die einen Volumenanteil an Wasser zwischen 0 und 1 besitzen. Folglich hat sich eine Grenzschicht zwischen den Phasen entwickelt, die in der Höhe aus ein bis drei Zellen besteht. Zur Veranschaulichung sind in Abb. 8.13 alle Zellen des Modells in farblicher Kennzeichnung der Geschwindigkeit im Endzustand der Simulation dargestellt, die nicht eindeutig einer Phase zugeordnet werden können, also einen Volumenanteil *alpha.water* zwischen 10 % und 90 % besitzen. Die Stellen der zuvor betrachteten Querschnitte sind zur Orientierung ebenfalls markiert. Entlang der Fließstrecken vor dem ersten Säulenpaar und vor dem Auslass ist die Wasseroberfläche verhältnismäßig gleichmäßig. Die räumlichen Veränderungen durch die Verengungen der Flussbreite und die starke Krümmung der zweiten Kurve führen dagegen auch zur der angesprochenen ungleichmäßigen Struktur der Wasseroberfläche und folglich zu einer stärkeren Vermischung der beiden Phasen in der Grenzschicht.

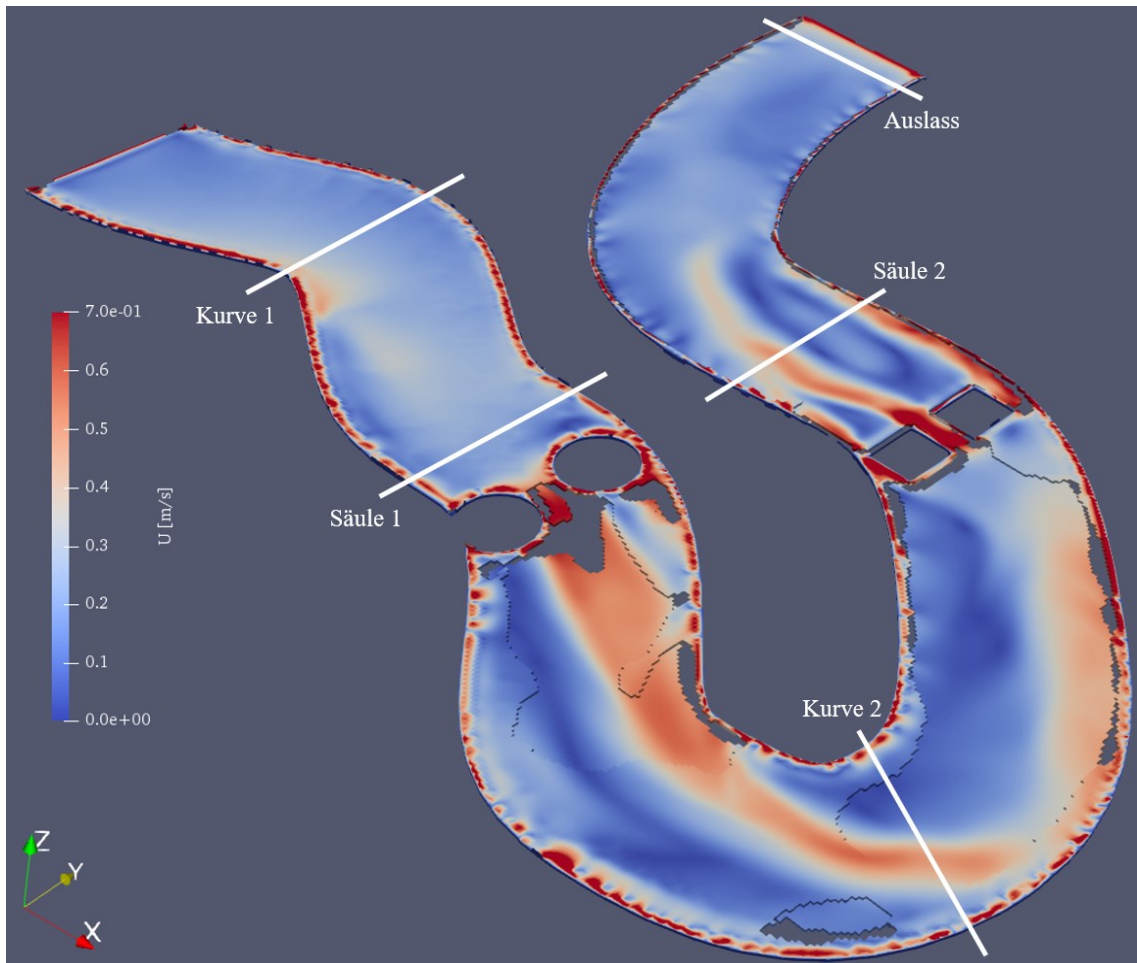


Abbildung 8.13: Fließgeschwindigkeit \vec{u} [m/s] der Zellen des Modellflussabschnittes im Endzustand der mittleren Einschwingungssimulation mit einem Volumenanteil $\alpha_{\text{water}} = [0,1; 0,9]$ sowie den Stellen der Geschwindigkeitsprofile.

Ein weiterer Aspekt ist der simulierte Anstieg des Wasserpegels innerhalb der Geometrie im Vergleich zum Ausgangszustand. Zu Beginn der Einschwingungssimulationen beträgt die Wassertiefe zwischen 0,5 – 1,2 m und die Wasseroberfläche befindet sich bei $z = 0$. Im stationären Zustand stellt sich ein um knapp 40 cm höherer Wasserspiegel ein, wodurch das Gesamtvolumen im betrachteten Flussabschnitt während der Einschwingungssimulationen um ca. 142 m^3 zunimmt. Der Anstieg des Wasserpegels ist in Abb. 8.14 gut erkennbar und tritt entlang der gesamten Fließstrecke auf. Für die Darstellung in Abb. 8.14 wurde exemplarisch der Querschnitt des Flusses in der 180° -Kurve (Kurve 2) ausgewählt. Auf der linken Seite ist der Ausgangszustand abgebildet und rechts der quasi-stationäre Zustand, wobei die Zellen entsprechend ihres Wasseranteils (α_{water}) eingefärbt sind. Rot gefärbte Zellen sind nur mit Luft gefüllt ($\alpha_{\text{water}} = 0$), während blau gefärbte nur Wasser enthalten ($\alpha_{\text{water}} = 1$). Die Grenzschicht zwischen Wasser und Luft wird im Übergang durch weiße Färbungen gekennzeichnet.

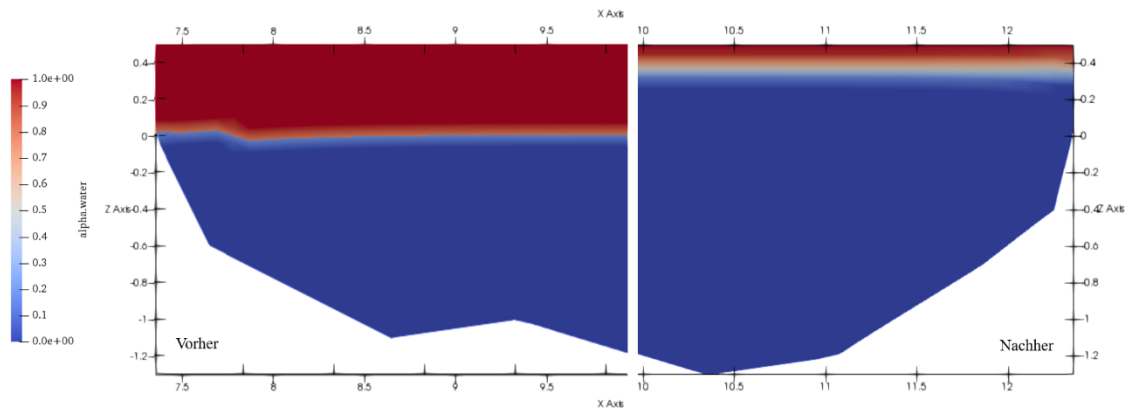


Abbildung 8.14: Querschnitt des Flusses in Abhängigkeit des Volumenanteils *alpha.water* im Ausgangszustand (links) und im quasi-stationären Zustand (rechts) (Legende: blau = Wasser; rot = Luft, weiß = Grenzschicht).

Der Anstieg des Wasserpegels während der Einschwingsimulation lässt sich mit der Definition der Randbedingungen am Einlass bzw. für das Element *inlet* erklären. Die Randbedingung ist so gesetzt, dass die gesamte Fläche des Elementes als Wasser mit einer konstanten Fließgeschwindigkeit deklariert ist. Dadurch fließt am Einlass zunächst zusätzliches Wasser in den Flussabschnitt, wodurch die gesamte Wassermenge bis zu der in Abb. 8.14 gezeigten maximalen Höhe zunimmt. Diese neue Wasserhöhe wird bereits nach 100 Sekunden simulierter Echtzeit erreicht und bleibt dann im weiteren Verlauf der Simulation unverändert. Aus dem rechten Bild ist zu sehen, dass auch im quasi-stationären Endzustand der Einschwingsimulation nicht die gesamte Geometrie mit Wasser gefüllt ist, sondern oberhalb der Wasserphase noch Luft als zweite Phase vorhanden ist. Dadurch kommt es auch weiterhin zum Austausch der beiden Fluide innerhalb der Grenzschicht. Der Anstieg der Wasserhöhe stellt somit kein Problem für die nachfolgenden Simulationen des Partikeltransportes dar. Das Ziel der Einschwingsimulationen bestand darin, ein Fließ- und Geschwindigkeitsfeld eines Gewässerabschnittes zu erzeugen, welches sich in einem quasi-stationären Zustand befindet. Die Wasser- bzw. Pegelhöhe in diesem stationären Zustand ist im betrachteten Flussabschnitt dann stabil.

Insgesamt zeigte sich, dass sich bereits nach relativ kurzer Simulationsdauer von ca. 300 Sekunden ein quasi-stationärer Zustand der Strömungsdynamik innerhalb des Flussabschnittes für alle betrachteten Zustandsgrößen einstellte und das Modell realistische Geschwindigkeits- und Strömungsprofile für die drei Einlassgeschwindigkeiten simuliert. Der kurvenreiche Verlauf sowie die Einbauten besitzen einen erheblichen Einfluss auf die Strömungsdynamik des gesamten

Flussabschnittes und es resultiert ein inhomogenes Strömungsfeld. Bei hinreichend langen Fließstrecken ohne weitere Beeinflussung der Längsströmung durch Sekundärströmungen können sich auch wieder näherungsweise homogene Strömungsverhältnisse im Querschnitt einstellen, wie sie erwartungsgemäß in einem Gerinne vorhanden sind (Naudascher 1992, S. 7f). Das Strömungsfeld nach den jeweiligen Einschwingimulationen, das als Ausgangszustand für die Modellierungen der Mikroplastikpartikel verwendet wird, wird im Folgenden als langsame, mittlere und schnelle Strömung bezeichnet.

8.4 Plausibilitätsprüfung des Partikeltransportes

Um die Verwendung des gewählten Löser *icoUncoupledKinematicParcelFoam* zu verifizieren, wurde im Anschluss der Implementation des Modells zunächst eine Plausibilitätsprüfung durchgeführt. Diese besteht aus einem Vergleich der simulierten Auftriebs- und Sinkgeschwindigkeiten der Partikel mit theoretisch zu erwartenden Werten (8.4.1) und der Auswertung der Simulationen aus den Vorversuchen (8.4.2).

Allgemein sei erneut darauf hingewiesen, dass im Folgenden alle Darstellungen der Mikroplastikpartikel innerhalb der Flussgeometrie nicht maßstabsgetreu sind. Um die Partikel in den Abbildungen gut erkennen zu können, wurden sie entsprechend deutlich vergrößert dargestellt. Weiterhin wird der Zustand aller Mikroplastikpartikel im letzten Zeitschritt der Simulation mit dem Begriff „Endzustand“ bezeichnet.

8.4.1 Auftriebs- und Sinkgeschwindigkeiten

Die Überprüfung der simulierten Auftriebs- und Sinkgeschwindigkeiten erfolgte für die drei ausgewählten Kunststoffdichten und jeweils fünf verschiedene Partikeldurchmesser im Bereich von kleinem Mikroplastik ($d = 10 \mu\text{m}$, $50 \mu\text{m}$, $100 \mu\text{m}$, $330 \mu\text{m}$ und 1mm). Als Vergleichswerte wurden die theoretischen Auftriebs- und Sinkgeschwindigkeiten mit der Stoke'schen Gleichung (Gl. 4.9) und der Formel von Dietrich (Gl. 4.14) berechnet. Die Werte zeigten erwartungsgemäß Abhängigkeiten hinsichtlich der Partikeldichte und des Partikeldurchmessers, die in der OpenFOAM-Simulation ebenfalls auftreten sollte. Zudem sollte der Geschwindigkeitsvektor der simulierten Mikroplastikpartikel nur einen Wert für die z-Komponente besitzen, da das umgebende Fluid unbewegt war und dementsprechend nur die Gravitationskraft auf die Partikel wirken sollte. Dies wurde durch die Überprüfung der Geschwindigkeitsvektoren der einzelnen Mikroplastikpartikel

bestätigt und bei gleicher Parametrisierungen ergaben sich identische Sinkgeschwindigkeiten für alle Partikel.

In den Abb. 8.15 – 8.17 sind jeweils die theoretisch berechneten Werte nach Stoke (blau) und Dietrich (gelb) für PS, PVC-P und PE-HD zusammen mit den Werten aus den OpenFOAM-Simulationen (rot) grafisch dargestellt. Die simulierten Auftriebs- bzw. Sinkgeschwindigkeiten wurden aus der tabellarischen Ansicht in ParaView für den letzten Zeitschritt abgelesen. Da sich die Angaben über mehrere Größenordnungen erstrecken, wurde eine logarithmische Skalierung der y-Achse verwendet. Bei PE-HD ist der Auftrieb aufgrund der niedrigeren Dichte als Wasser größer als die Gravitationskraft, weswegen sich negative Sinkgeschwindigkeiten bzw. dementsprechend Auftriebsgeschwindigkeiten ergeben. Hierfür ist die empirische Formel nach Dietrich nicht definiert; daher wurde für PE-HD nur der Vergleich mit der Vorhersage nach Stoke vorgenommen.

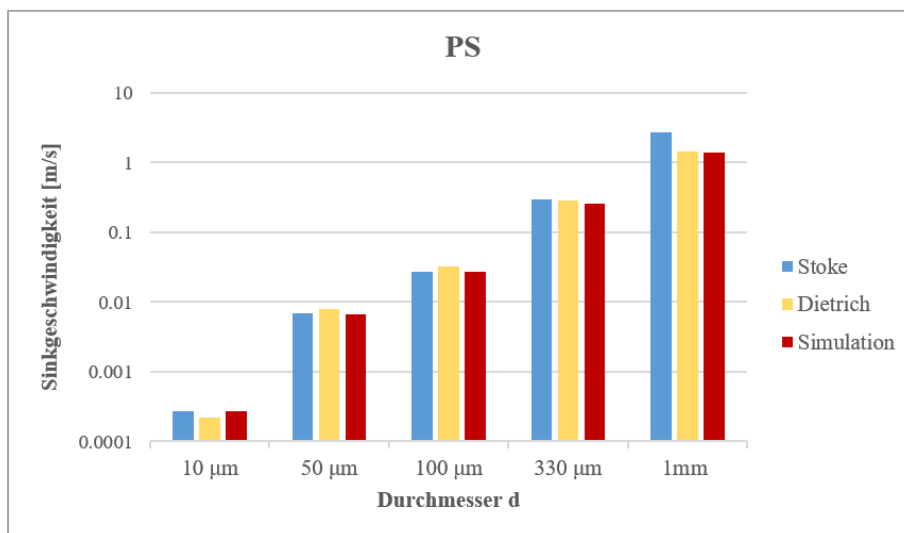


Abbildung 8.15: Vergleich der berechneten Sinkgeschwindigkeiten [m/s] nach Stoke (blau) und Dietrich (gelb) mit den in OpenFOAM-Simulationen (rot) für PS.

Die aus den Simulationen abgelesenen Auftriebs- und Sinkgeschwindigkeiten zeigen für PS und PVC-P für alle Partikeldurchmesser eine gute Übereinstimmung mit den nach der Formel von Dietrich berechneten Werten. Für die kleineren Partikel mit Durchmessern $\leq 330 \mu\text{m}$ ist bei den theoretischen Werten nach Dietrich eine leichte Tendenz zur Überschätzung der vorhergesagten Sinkgeschwindigkeit erkennbar. Da dieser Vergleich jedoch nur für zehn Partikeldurchmesser durchgeführt wurde, ist der Stichprobenumfang zu niedrig, um eine allgemein gültige Gesetzmäßigkeit abzuleiten. Erwartungsgemäß sind die Abschätzungen über das Stoke'sche Gesetz bei größeren Durchmessern zu hoch, weil diese außerhalb des Gültigkeitsbereichs ($d \leq 200 \mu\text{m}$) liegen

(s. Kapitel 4.3). Für kleine Partikeldurchmesser ist dagegen eine sehr gute Übereinstimmung der Werte mit den Simulationen für PE-HD erkennbar.

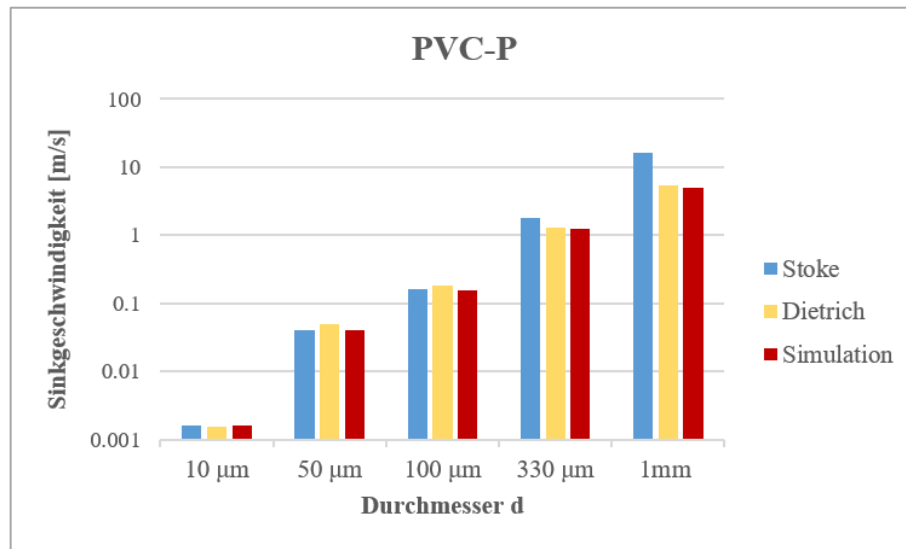


Abbildung 8.16: Vergleich der berechneten Sinkgeschwindigkeiten [m/s] nach Stoke (blau) und Dietrich (gelb) mit den in OpenFOAM-Simulationen (rot) für PVC-P.

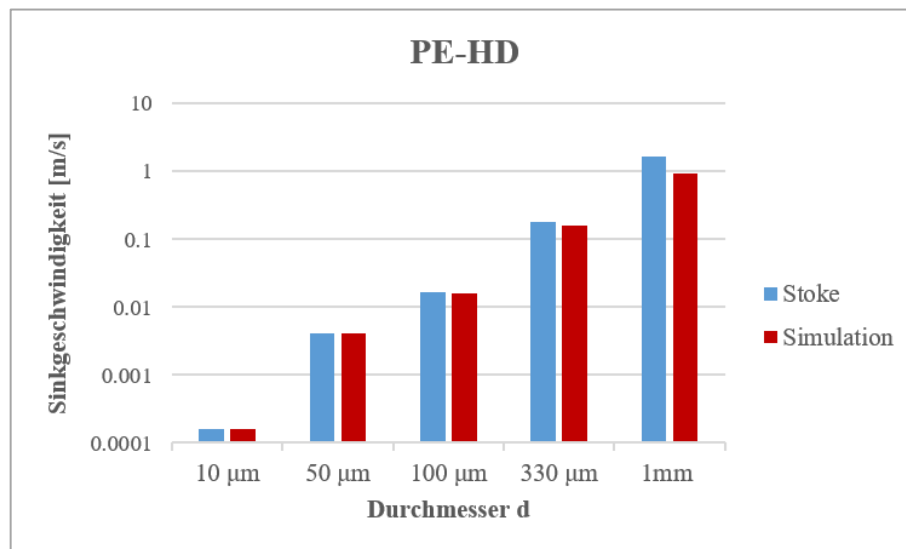


Abbildung 8.17: Vergleich der berechneten Sinkgeschwindigkeiten [m/s] nach Stoke (blau) mit den in OpenFOAM-Simulationen (rot) für PE-HD.

Insgesamt zeigt sich, dass der in OpenFOAM verwendete Löser das Auftriebs- bzw. Sinkverhalten der Partikel in Abhängigkeit ihrer Dichte und ihres Durchmessers realistisch wiedergibt. Es werden also die wichtigsten Prozesse berücksichtigt, die das Aufreiben und das Absinken von Mikroplastikpartikeln bestimmen.

8.4.2 Auswertung der Vorversuche

Die Simulationen der Vorversuche mit dem ausgewählten Löser *icoUncoupledKinematicParcelFoam* dienten der Überprüfung zweier Aspekte:

- Eignung der Einschwingsimulation als Grundlage des Partikeltransportes

- Parametrisierung der Partikeldichte.

Im ersten Schritt wurde dazu das Transportverhalten von sechs identischen PS-Partikeln mit einem Durchmesser von 5 mm unter den drei verschiedenen Strömungsbedingungen untersucht, wobei die Startpositionen jeweils an verschiedenen Stellen entlang der Fließstrecke lagen. In Abb. 8.18 sind die Ausgangs- (oben) und Endzustände (unten) in der langsamen (rot), mittleren (weiß) und schnellen Strömung (türkis) im Vergleich dargestellt. Zusätzlich sind drei Partikel (-paare) für eine folgende individuelle Betrachtung markiert (P1-P3). Es sei anzumerken, dass im Ausgangszustand die Partikel bewusst leicht versetzt abgebildet werden, um eine Darstellung aller Partikel zu ermöglichen. Die Positionen der sich überlagernden Partikel sind zu Beginn der Simulation identisch. Im Folgenden werden die Partikel mit gleichen Startkoordinaten als Vergleichspartikel bezeichnet.

Die Simulationsergebnisse zeigen deutliche Unterschiede zwischen den Transportstrecken der Partikel in Abhängigkeit der mittleren Fließgeschwindigkeit des Strömungsfeldes. Erwartungsgemäß wurden die Partikel in der schnellen Strömung (türkis) in der Regel am weitesten transportiert. Alle betrachteten Partikel sinken innerhalb der Simulationsdauer von 60 Sekunden auf den Boden des Flussabschnittes ab und ordnen sich in einer Linie entlang der Fließstrecke an. Diese Beobachtung lässt sich damit erklären, dass sich die Partikel an der tiefsten Stelle des Flussquerschnittes ansammeln und war zu erwarten. Aufgrund der Dichte von 1050 kg/m^3 und dem relativ großen Durchmesser von 5 mm besitzen die Partikel entsprechend hohe Sinkgeschwindigkeiten. Obwohl die Startpositionen der Partikelpaare in x-Richtung relativ ähnlich sind, legen sie innerhalb der 60 s dennoch teils deutlich unterschiedliche Transportlängen zurück. Lediglich die ersten beiden Partikel mit Startpositionen direkt hinter dem Einlass überlagern sich in ihrem Endzustand in der langsamen Strömung, weshalb in Abb. 8.18 an dieser Stelle nur ein Partikel zu sehen ist (mit P1 gekennzeichnet). Die Überprüfung der Partikelpositionen in der tabellarischen Ansicht bestätigte, dass die jeweiligen Koordinaten identisch sind. Wie erwartet sind die Transportwege der anderen vier Partikel abhängig von der Strömungsgeschwindigkeit; sie sortieren sich nach 60 Sekunden entsprechend entlang einer Linie an der tiefsten Stelle.

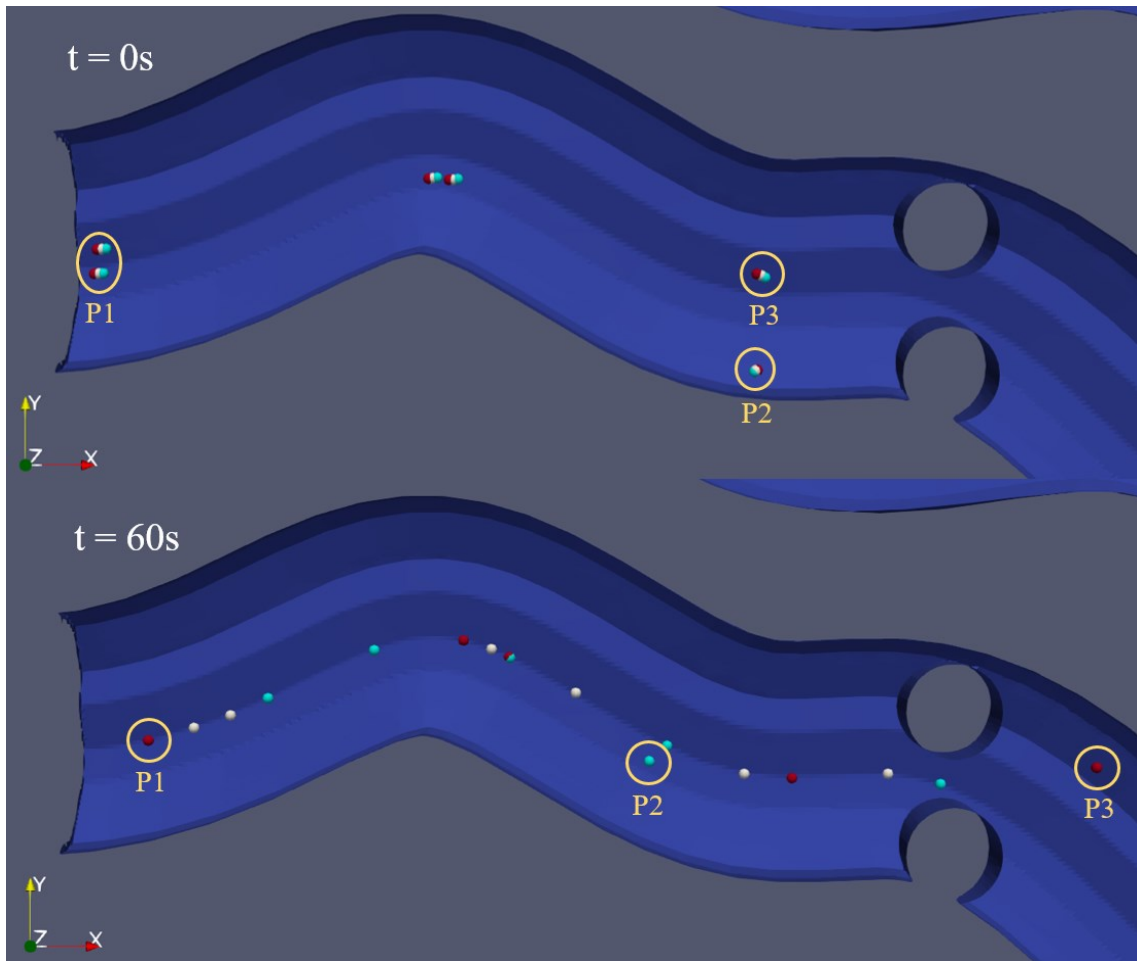


Abbildung 8.18: Vergleich der Mikroplastikpartikel (PS) in der langsamen (rot), mittleren (weiß) und schnellen Strömung (türkis) im Startzustand (oben) und nach 60 s Simulationsdauer (unten) in der Draufsicht.

Der Startpunkt eines Partikels (in Abb. 8.18 oben mit P2 gekennzeichnet), liegt relativ nah am Rand des Gerinnes und außerhalb der Hauptströmung des Strömungsfeldes. In diesem Bereich sind starke Verwirbelungen vorhanden (s. Abb. 8.11), die teilweise zu einer rückwärts gerichteten Strömung führen. Bei der Simulation mit der schnellen Strömung führt dies dazu, dass der Partikel P2 innerhalb der 60 Sekunden Simulationszeit relativ zu seiner Startposition rückwärts zur Hauptfließrichtung transportiert wird (s. Abb. 8.18 unten). Anhand dessen lässt sich vermuten, dass die Position der Partikel zum Startzeitpunkt das Transportverhalten beeinflusst. So könnten Partikel, die sich außerhalb der Hauptströmung befinden, den dort vorherrschenden Stromlinien folgen und sich teilweise sogar entgegen der Fließrichtung bewegen.

Gleichzeitig ist zu erkennen, dass in der Simulation mit der langsamen Strömung (rot) einer der Partikel (mit P3 markiert) überraschenderweise deutlich weiter transportiert wird, als die Vergleichspartikel in der mittleren und schnellen Strömung, die sich kurz vor bzw. zwischen dem Säulenpaar befinden. Eine mögliche Erklärung für diese

Beobachtung könnte sein, dass der Partikel P3 in diesem Szenario in den Bereich der Hauptströmung mit höheren Fließgeschwindigkeiten vor dem ersten Säulenpaar gelangt ist und dadurch entsprechend weiter transportiert wurde. Die beiden Vergleichspartikel scheinen dagegen unter den anderen Strömungsverhältnissen bereits vorher sedimentiert zu sein.

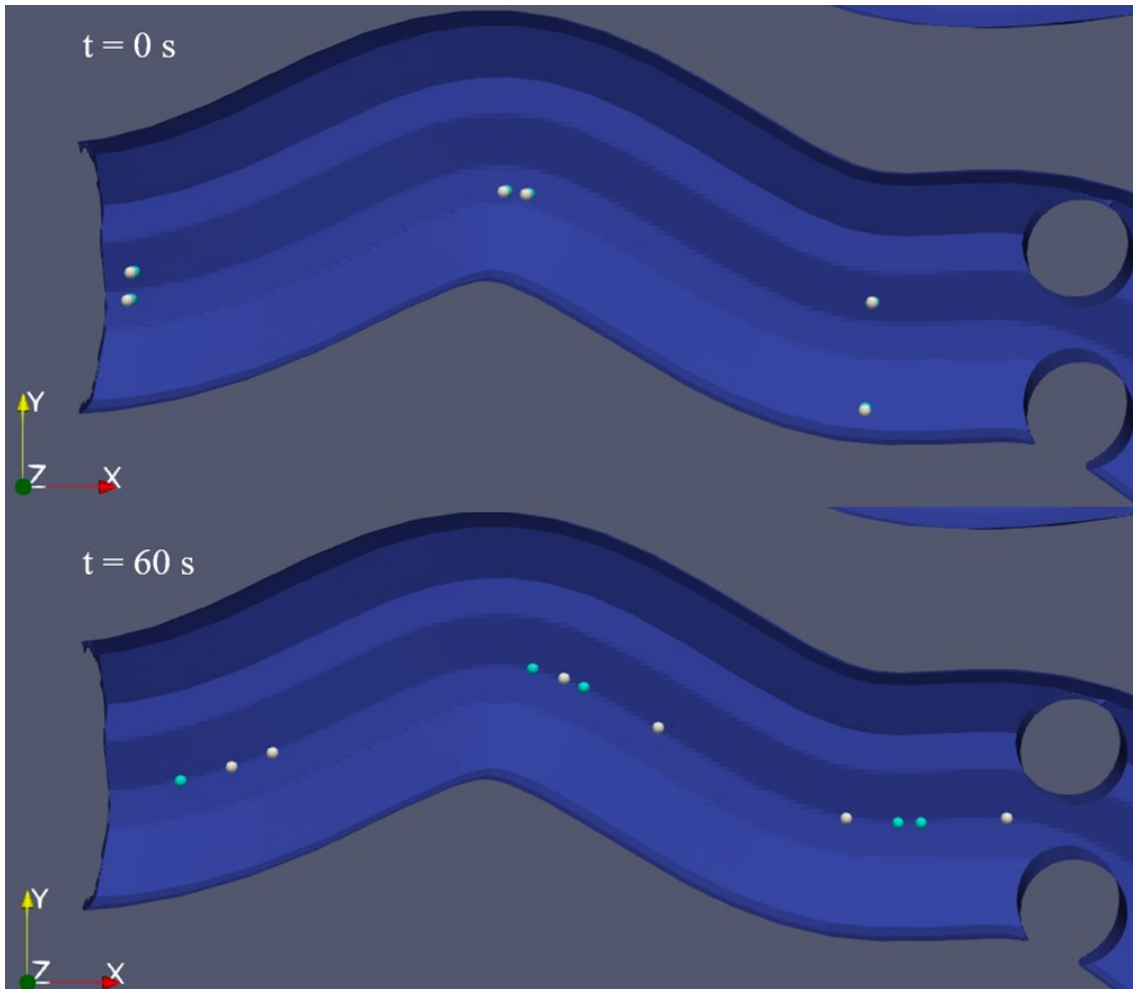


Abbildung 8.19: Vergleich zwischen PS-Partikeln (weiß) und PVC-P-Partikeln (türkis) in der mittleren Strömung im Startzustand (oben) und nach 60 s Simulationsdauer (unten) in der Draufsicht.

Des Weiteren wurde das Transportverhalten von PVC-P-Partikeln ($d = 5 \text{ mm}$) im Rahmen der Vorversuche für die mittleren Strömungsverhältnisse simuliert. Aufgrund der höheren Dichte sollten diese Partikel im Vergleich zu den PS-Partikeln unter ansonsten identischen Bedingungen früher absinken und damit nicht so weit transportiert werden. In Abb. 8.19 sind die Positionen der PS- (weiß) und PVC-P-Partikel (türkis) im Ausgangs- (oben) und Endzustand nach 60 Sekunden Simulationszeit (unten) dargestellt. Es ist gut zu erkennen, dass die PVC-P-Partikel bis auf eine Ausnahme wie erwartet eine kürzere Transportstrecke aufweisen. Auch hier kommt es zur einer Überlagerung von zwei direkt nebeneinander gestarteten PVC-P-Partikeln (links) nach dem Absinken.

Dieses Ergebnis bestätigt, dass die Parametrisierung der Partikeldichte vom Löser korrekt übernommen und berücksichtigt wird.

Eine ebenfalls interessante Beobachtung konnte beim Auswerten der beiden Endzustände der PS-Partikel in der langsamen und der PVC-P-Partikel in der mittleren Strömung gemacht werden. Abb. 8.20 zeigt die Endzustände der beiden Simulationen sowie die jeweiligen Trajektorien der PS- (rot) und PVC-P-Partikel (türkis). Es fällt auf, dass sich die PVC-P- und die PS-Partikel in ihrem Endzustand an sehr ähnlichen Stellen entlang der tiefsten Stelle befinden. Aufgrund der Überlagerung der Partikel wird für PS in Abb. 8.20 auf eine größere und halbtransparente Darstellungsweise zurückgegriffen. Eine Ausnahme ist der einzelne PS-Partikel, der durch die Verengung des ersten Säulenpaares transportiert worden ist. Anhand der abgebildeten Trajektorien ist aber erkennbar, dass die Partikel individuell verschiedene Transportwege zurücklegen. Möglicherweise sind die beiden verwendeten Strömungsfelder zu Beginn des Flussabschnittes noch relativ ähnlich, sodass der schnellere Absinkprozess aufgrund der höheren Dichte von PVC-P durch die höhere mittlere Fließgeschwindigkeit kompensiert werden kann. Demnach könnte auf geraden Abschnitten ohne größere Verwirbelungen wie bspw. vor dem ersten Säulenpaar ein einfacher Zusammenhang zwischen Sinkgeschwindigkeit, mittlerer Fließgeschwindigkeit und Transportstrecke vorliegen.

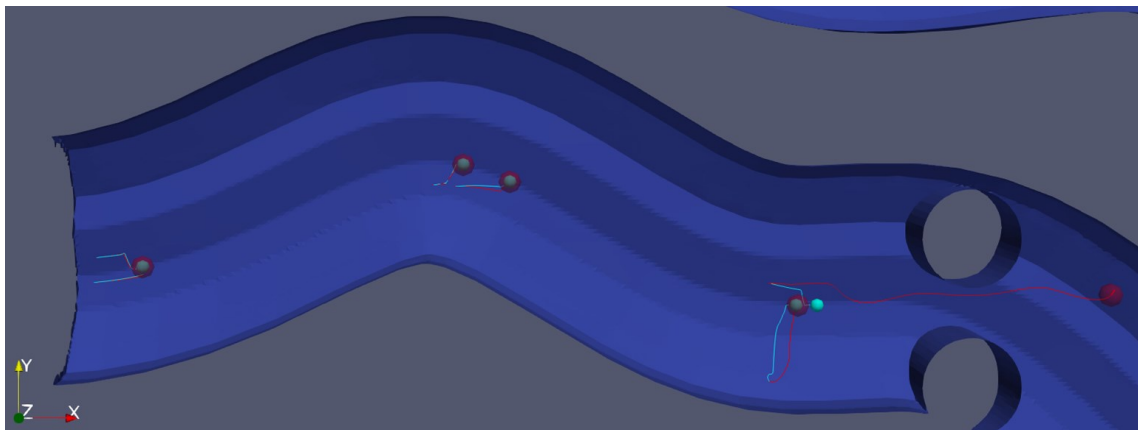


Abbildung 8.20: Vergleich zwischen PS-Partikeln in der langsamen (rot) und PVC-P-Partikeln in der mittleren Strömung (türkis) in der Draufsicht mit den jeweiligen Trajektorien.

8.4.3 Reproduzierbarkeit der Simulationen

Die Simulation der sechs PS-Partikel mit der mittleren Strömung wurde mit identischen Parametrisierungen erneut simuliert. Abb. 8.21 zeigt die Endzustände der Partikel beider Simulationen für den ersten (rot) und den zweiten Durchlauf (weiß). Es ist eindeutig zu erkennen, dass sich nach der Simulation alle Vergleichspartikel auf jeweils denselben Positionen befinden und sich deshalb grafisch vollständig überlagern. Hierfür wurde bei

den Partikeln des zweiten Durchlaufes ebenfalls die halbtransparente, vergrößerte Darstellung verwendet. Dieses Ergebnis bestätigt die Reproduzierbarkeit von Simulationen mit dem verwendeten Modell in OpenFOAM.

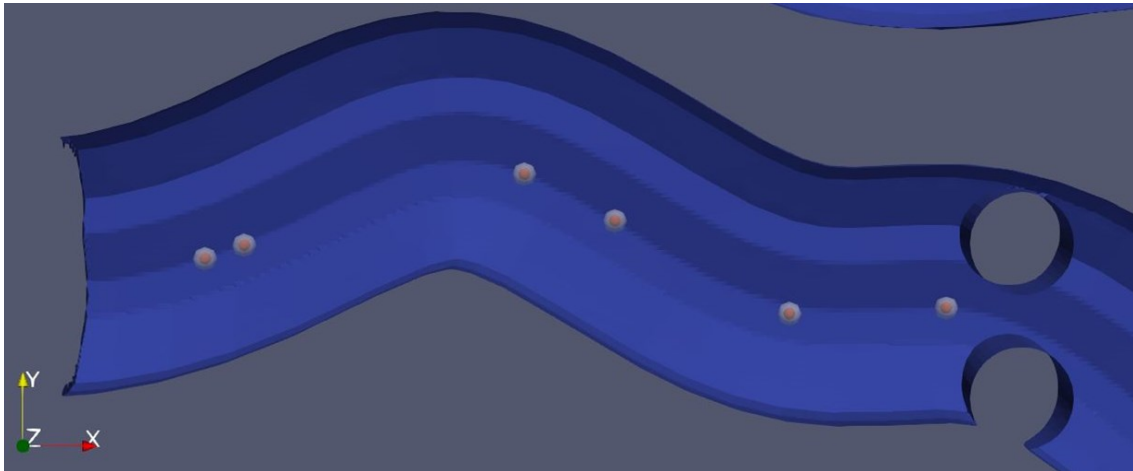


Abbildung 8.21: Vergleich der PS-Partikel im Endzustand des ersten (rot) und zweiten Simulationsdurchlaufes (weiß).

Die Auswertung des Vergleiches der Auftriebs- und Sinkgeschwindigkeiten verschiedener Mikroplastikpartikel mit theoretisch berechneten Werten sowie die Ergebnisse der durchgeführten Vorversuche ergeben, dass die Einschwingsimulationen ein geeignetes Strömungsfeld erzeugen, in dem das Transportverhalten von Mikroplastikpartikeln in Abhängigkeit der Partikeldichte und des –durchmessers simuliert und analysiert werden kann. Die Plausibilitätsprüfung zeigt, dass die Verwendung des gewählten Löser *icoUncoupledKinematicParcelFoam* und die Parametrisierung für die Simulationen korrekt vorgenommen wurden und das Modell für die geplanten Analysen verwendet werden kann.

8.5 Simulationen von Mikroplastikpartikeln in der fließenden Strömung

Im Anschluss an die Plausibilitätsprüfung und die Auswertung der Vorversuche erfolgt die Analyse und Interpretation der verschiedenen Simulationsergebnisse, die basierend auf den drei erstellten Szenarien durchgeführt worden sind. Für jedes Szenario wurden mit dem in Kapitel 7.4 beschriebenen Vorgehen unterschiedlich viele Fälle im Hinblick auf die jeweilige Zielsetzung simuliert. Tabelle 8.4 enthält eine Auflistung der Parametrisierungen für die Simulationen der drei Szenarien.

Nach Betrachtung der Simulationsergebnisse für die drei Szenarien zeigte sich, dass nicht alle Partikel in die Auswertung einbezogen werden können. Gelangt ein Partikel innerhalb des hier verwendeten Modells in die Grenzschicht zwischen Wasser und Luft, kann der verwendete Löser den Transport dieses Partikels dort nicht mehr korrekt

berechnen. Die entsprechenden Partikel können bei der Auswertung nicht berücksichtigt werden, da sie das Ergebnis verfälschen würden. Dies ist überwiegend bei Simulationen mit PE-HD-Partikel vorgekommen, da PE-HD mit 970 kg/m^3 eine niedrigere Dichte als das umgebende Medium Wasser besitzt und dementsprechend ein gewisser Auftrieb stattfindet. Aufgrund dessen konnte die Simulation von PE-HD für Szenario 2 nicht vollständig ausgewertet werden und wurde bei den folgenden Ergebnissen nicht berücksichtigt.

Tabelle 8.4: Parametrisierung der Simulationen für die drei entwickelten Szenarien zum Transportverhalten der Mikroplastikpartikel.

	Szenario 1	Szenario 2	Szenario 3
Partikelanzahl	10	20	120
Durchmesser	330 μm /1 mm	79 μm – 1,7 mm	400 – 610 μm
Startposition	Entlang der Fließstrecke	Mittig am Einlass	Gesamter Querschnitt am Einlass
Kunststoff	PE-HD, PS, PVC-P	PS, PVC-P	PE-HD, PS, PVC-P ²
Strömung	langsam, mittel, schnell	mittel, schnell	langsam, mittel

² PCV-P wurde nur in der mittleren Strömung simuliert

Bei der Auswertung der Simulationsergebnisse und Analyse des Transportverhaltens der verschiedenen Mikroplastikpartikel wird wie folgt vorgegangen: Es wird der Einfluss eines einzelnen Parameters der Simulation (Partikeldurchmesser, Partikeldichte, mittlere Fließgeschwindigkeit der Strömung und Positionierung) untersucht (8.5.1 – 8.5.4). Als eine wichtige Maßzahl für die Auswertung der Simulationsergebnisse wird die in einer festen Zeit zurückgelegte Transportstrecke der Mikroplastikpartikel betrachtet. Die Beschreibung des Vorgehens zur Ermittlung der Länge dieser individuellen Trajektorien befindet sich in Kapitel 7.5.

8.5.1 Einfluss des Partikeldurchmessers

Im ersten Schritt werden die Simulationsergebnisse hinsichtlich des möglichen Einflusses des Partikeldurchmessers auf das Transportverhalten der Mikroplastikpartikel untersucht. Dazu werden die Simulationen mit gleicher Partikeldichte unter den gleichen

Strömungsbedingungen für unterschiedliche Partikeldurchmesser miteinander verglichen.

In Szenario 2 wurde dazu für jeden der zwanzig Partikel ein zufälliger Durchmesser basierend auf einer Rosin-Rammler- bzw. Weibull-Verteilung verwendet (s. Kapitel 7.4.2). Die Durchmesser bewegen sich in der Größenordnung zwischen 79 μm und 1,7 mm (Tabelle 8.4) und decken somit sowohl kleines als auch großes Mikroplastik ab (JCR 2013). Für die Auswertung der Simulationsergebnisse wurden die individuellen Transportstrecken der einzelnen Partikel über die gesamte Simulationszeit, wie in Kapitel 7.5 beschrieben, berechnet. In Abb. 8.22 sind die ermittelten Transportstrecken der einzelnen Mikroplastikpartikel nach 60 Sekunden Simulationszeit in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers für PS (rot) und PVC-P (blau) jeweils im Geschwindigkeitsfeld der mittleren (links) und schnellen (rechts) Strömung grafisch dargestellt. Anhand der Grafiken ist zu sehen, dass für PVC-P ein Zusammenhang zwischen der Transportstrecke und dem Partikeldurchmesser besteht und kleinere Partikel im Allgemeinen weiter mit der Strömung transportiert werden als größere. Diese Beobachtung stimmt mit den Erwartungen überein, da PVC-P aufgrund der relativ großen Dichte von 1300 kg/m^3 hohe Sinkgeschwindigkeiten besitzt, die überproportional mit dem Partikeldurchmesser steigen.

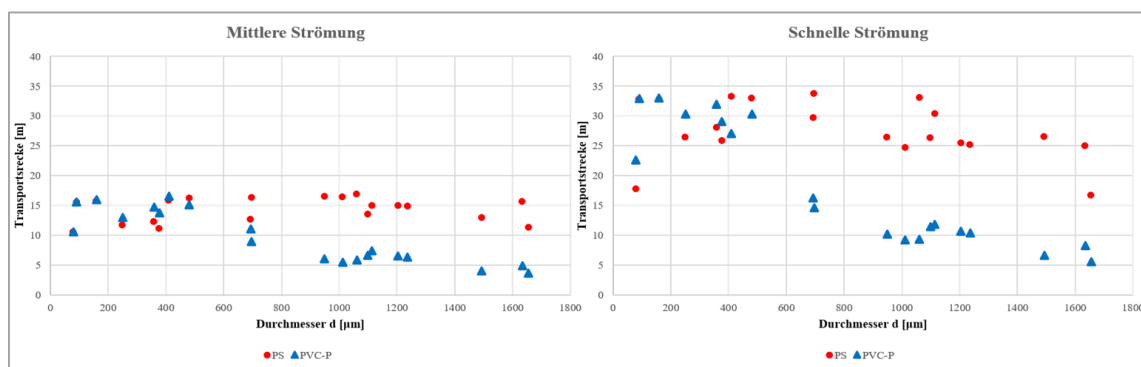


Abbildung 8.22 Transportstrecke [m] der PS- (rot) und PVC-P-Partikel (blau) in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [μm] für die mittlere (links) und die schnelle Strömung (rechts).

Ebenfalls scheint es eine qualitative Veränderung der Transportstrecken für verschiedene Größenbereich des Partikeldurchmessers zu geben und Partikel innerhalb dieser Klassen könnten ein ähnliches Transportverhalten besitzen. Anhand der Grafiken ergibt sich eine Unterteilung in Partikel mit Durchmessern kleiner $600 \mu\text{m}$, zwischen $600 - 800 \mu\text{m}$ und größer $800 \mu\text{m}$. Da im Bereich um $600 \mu\text{m}$ keine weiteren Partikeldurchmesser in den Simulationen dieses Szenarios vorhanden waren, ist eine konkretere Eingrenzung basierend auf den vorliegenden Daten nicht möglich.

Darüber hinaus ist der Einfluss der mittleren Fließgeschwindigkeit der Strömungsdynamik deutlich erkennbar. Die Differenz zwischen den minimalen und maximalen Transportstrecken in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers nimmt mit steigender Fließgeschwindigkeit zu. Dies lässt darauf zurückzuführen, dass eine höhere Fließgeschwindigkeit größere Impulse auf die Partikel überträgt und folglich das Absinken aufgrund der Gravitation stärker kompensiert wird. Erst ab einem Partikeldurchmesser von mehr als $600\ \mu\text{m}$ ist die auf die Partikel wirkende Gravitationskraft so hoch, dass die Transportstrecke deutlich verkürzt wird.

Für die PS-Partikel ist aus den Grafiken kein eindeutiger Effekt des Durchmessers auf das Transportverhalten erkennbar. Die Transportstrecken weisen für alle vorhandenen Durchmesser insgesamt ähnliche Längen mit einer stochastischen Schwankung um einen Mittelwert auf. Dies könnte ein Effekt bedingt durch die Inhomogenität des Strömungsfeldes sein. Die auf verhältnismäßig große PS-Partikel wirkende höhere Gravitationskraft scheint durch die Strömungsdynamik fast vollständig über die Simulationsdauer kompensiert zu werden.

Im Folgenden werden die Simulationen der PS- und PVC-P-Partikel separat betrachtet um den Einfluss des Durchmessers auf die Simulationsergebnisse bei verschiedenen Dichten näher beleuchten zu können. Eine ausführliche Analyse der Auswirkungen einer veränderten Dichte wird im nachfolgenden Kapitel 8.5.2 vorgenommen. Die Transportstrecken der PS-Partikel variieren für alle Durchmesser je nach Strömung im Bereich von 5 bzw. 15 m und es kann anhand der grafischen Darstellung in Abb. 8.22 kein allgemein gültiger Trend für das Transportverhalten in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers abgeleitet werden. Lediglich eine leichte Tendenz der Partikel mit Durchmessern kleiner $400\ \mu\text{m}$ zu verhältnismäßig kurzen Transportstrecken lässt sich vermuten. Da jedoch ein Zusammenhang zwischen der Sinkgeschwindigkeit eines Partikels und seinem Durchmesser bei gleicher Dichte vorhanden ist, sollte sich ein Unterschied im Transportverhalten verschieden großer Partikel zeigen. Daher ist eine Auswertung alleine über die Länge der Transportstrecke für die PS-Partikel nicht ausreichend und es erfolgt eine grafische Analyse der Simulationsergebnisse zu verschiedenen Zeitpunkten. In Abb. 8.23 sind die PS-Partikel aus Szenario 2 in der mittleren Strömung nach 10 Sekunden (oben) und nach 60 Sekunden (unten) Echtzeit – farblich markiert in Abhängigkeit ihres Durchmessers – dargestellt. Der Startzustand für dieses Szenario ist in Abb. 7.4 zu sehen. Bereits nach der kurzen Simulationsdauer von

10 Sekunden zeigt sich, dass sich die Partikel mit größeren Durchmessern tendenziell in tieferen Wasserschichten befinden, wohingegen kleinere Partikel in der Wassertiefe ihrer Startposition verbleiben oder sogar leicht auftreiben. Mit fortlaufender Simulationsdauer findet eine Sortierung der Mikroplastikpartikel entlang der gesamten Wassersäule entsprechend ihres Durchmessers statt.

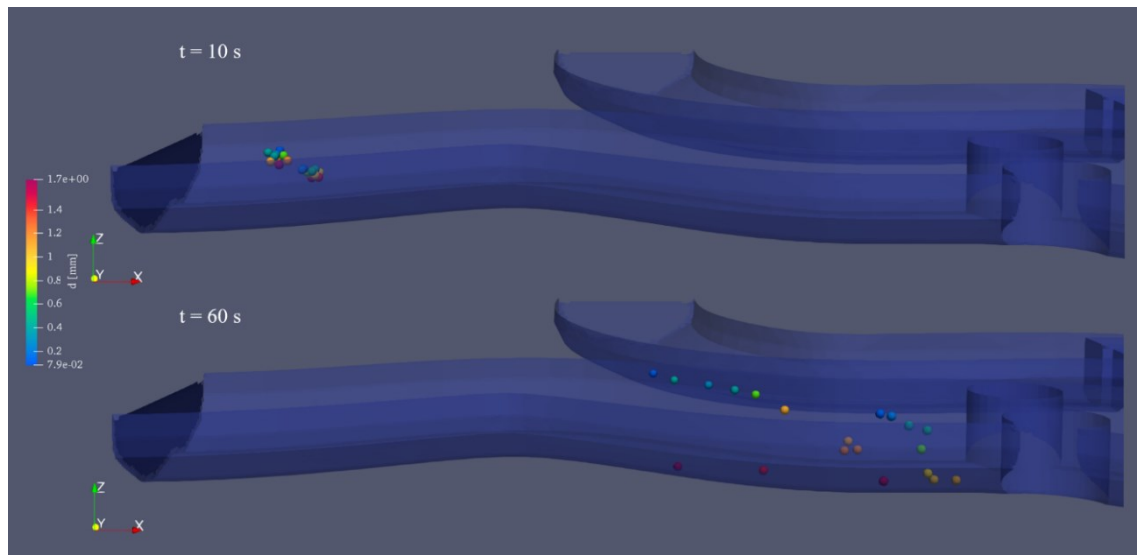


Abbildung 8.23: PS-Partikel des Szenario 2 in der mittleren Strömung nach 10 s (oben) und 60 s (unten) in farblicher Kennzeichnung des Partikeldurchmessers d [mm].

Folglich ist auch der Einfluss des Partikeldurchmessers auf die Sinkgeschwindigkeit und das resultierende Transportverhalten von PS-Partikel in der fließenden Strömung erkennbar. Anhand der oberen Abbildung ist zudem erklärbar, warum die sehr kleinen PS-Partikel dieser Simulation tendenziell kürzere Transportstrecken besitzen als Partikel mit mittleren Durchmessern. Die kleineren Partikel bewegen sich über die gesamte Simulationsdauer hauptsächlich in den geringeren Wassertiefen knapp unterhalb der Wasseroberfläche, also in Bereichen mit niedrigeren Fließgeschwindigkeiten (vgl. Kapitel 8.3), weshalb sie entsprechend langsamer transportiert werden. PS-Partikel mit Durchmessern zwischen $700\ \mu\text{m}$ und $1,7\ \text{mm}$ befinden sich hingegen eher in mittleren Wassertiefen, wo höhere Fließgeschwindigkeiten vorherrschen und sie mit den Stromlinien der Hauptströmung transportiert werden. Im Hinblick auf das Geschwindigkeitsfeld des Modellflusses und die Auswertung der Strömungsdynamik erscheint es logisch, dass die kleineren Partikel dementsprechend kürzere Transportstrecken erreichen.

Das Transportverhalten von PVC-P-Partikel wird hingegen deutlich stärker durch den Durchmesser beeinflusst und für die größere Partikel ergeben sich im Allgemeinen kürzere Transportstrecken als für die PS-Partikel. Ab einem Partikeldurchmesser von ca.

700 μm verringert sich die Länge der Transportstrecke um mehr als die Hälfte in beiden Strömungsdynamiken im Vergleich zu denen von Partikeln mit kleineren Durchmessern, da die entsprechenden Partikel auf den Boden abgesunken sind. Zur Veranschaulichung sind in Abb. 8.24 die Trajektorien der PVC-P-Partikel bis zum Endzeitpunkt der Simulation des Szenario 2 in der schnellen Strömung dargestellt. Die Partikel sortieren sich in Abhängigkeit ihrer Größe entlang der Fließstrecke und die größeren Partikel sedimentieren, wohingegen die kleineren Partikel innerhalb der Simulationszeit von 60 Sekunden weiter transportiert werden. Dies lässt die Vermutung aufkommen, dass es für den Durchmesser von Mikroplastikpartikeln einen Grenzwert gibt, ab dem sich das Transportverhalten der Partikel (unabhängig von der mittleren Fließgeschwindigkeit) verändert. Dies erscheint im Hinblick auf die Abhängigkeit zwischen Sinkgeschwindigkeit und Partikeldurchmesser plausibel, da diese überproportional mit der Größe zunimmt. Diese Beobachtungen könnten erklären, warum bei Probenahmen in den oberen Schichten von Fließgewässern auch kleine Mikroplastikpartikel mit hohen Dichten wie bspw. PS aber auch PVC-P gefunden werden (Mani et al. 2015, van der Wal et al. 2015: S. 53ff, Strungaru et al. 2019).

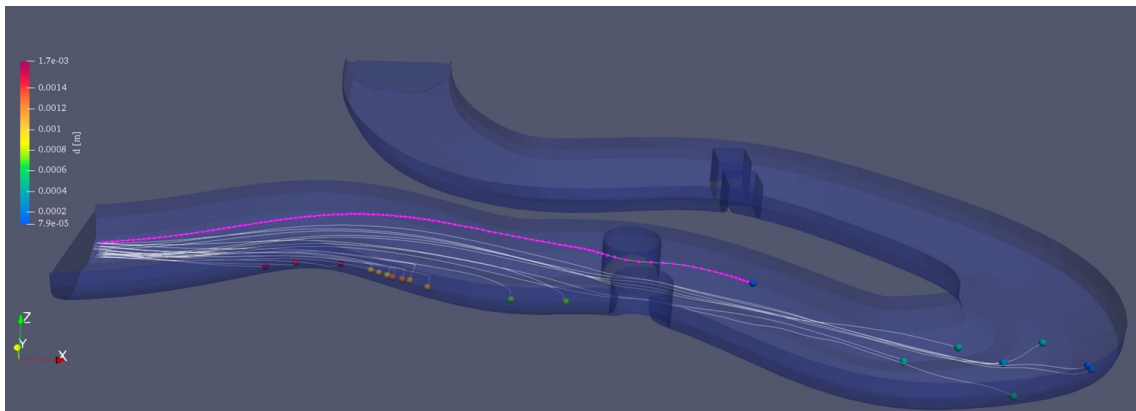


Abbildung 8.24: Endzustand der PVC-P-Partikel in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers $d[\text{m}]$ in der schnellen Strömung mit den zugehörigen Trajektorien der Partikel und markierter Trajektorie des kleinsten Partikels mit $d = 79 \mu\text{m}$.

Weiterhin ist interessant, dass der kleinste Partikel ($d = 79 \mu\text{m}$) jeweils, sowohl bei den PS- wie auch bei den PVC-P-Partikeln, eine deutlich kürzere Transportstrecke besitzt als die etwas größeren. In der mittleren Strömung weist der kleinste PS-Partikel sogar die geringste Transportstrecke aller simulierten Partikel auf. Die zugehörige Trajektorie ist in Abb. 8.24 gekennzeichnet und daran ist erkennbar, dass es sich im Startzustand um einen der äußeren Partikel handelt. Dadurch befindet er sich nicht in der Hauptströmung des Strömungsfeldes und wird in der ersten Kurve in Richtung der Außenseite bewegt. Wie in Kapitel 8.3 gezeigt worden ist, sind die Fließgeschwindigkeiten hier niedriger und

der Partikel wird entsprechend vergleichsweise langsamer transportiert, als die Partikel in der Hauptströmung. Dies wird auch noch einmal deutlich, wenn der Partikel das erste Säulenpaar erreicht. Durch die vorherige Ablenkung seiner Bahnkurve trifft er auf die eine Säule und wird von dort anschließend in den Bereich zwischen den Säulen und in die Hauptströmung bewegt. Zudem befindet sich der Partikel knapp unter der Wasseroberfläche, wo niedrigere Fließgeschwindigkeiten vorherrschen und entsprechend ein langsamerer Transport stattfindet. Hier zeigt sich, dass die Startposition der Partikel innerhalb des Strömungsfeldes die Transportbahnen stark beeinflussen kann. Dieser Aspekt wird im Kapitel 8.5.4 näher untersucht.

In Szenario 3 wurde nun eine Partikelwolke bestehend aus 120 Partikeln über den gesamten Flussquerschnitt kurz hinter dem Einlass verteilt und das Transportverhalten simuliert. Die in diesem Szenario normalverteilten Partikeldurchmesser lagen in einem relativ engen Bereich von 400 – 610 μm (Tabelle 8.4). Abb. 8.25 zeigt die Transportstrecken der PS-Partikel in der mittleren Strömung in Abhängigkeit des Durchmessers. Auf den ersten Blick sind für dieses Szenario keine eindeutigen Abhängigkeiten zwischen der Transportstrecke und dem Partikeldurchmesser erkennbar. Vielmehr lässt sich sehen, dass die Partikel unabhängig von ihrem Durchmesser entweder nur eine sehr kurze Strecke zurücklegen bis sie auf den Boden des Flusses absinken oder aber verhältnismäßig weit transportiert werden.

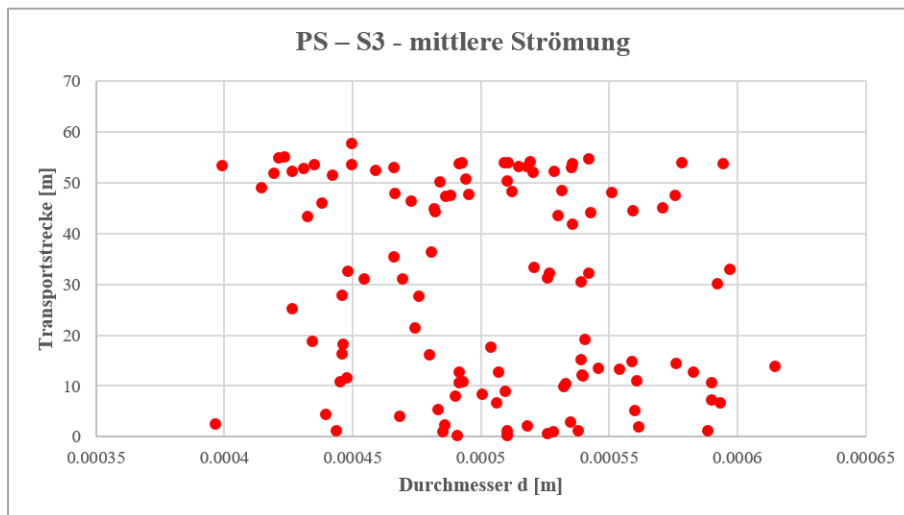


Abbildung 8.25: Transportstrecke [m] der PS-Partikel in der mittleren Strömung des Szenario 3 in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [m].

Dies lässt sich damit erklären, dass die Partikel in ihren Startpositionen über die gesamte Wassersäule des Flusses platziert sind. Bei den innerhalb der Simulationszeit absinkenden Partikeln handelt es sich um diejenigen, die sich zu Beginn bereits in tieferen

Wasserschichten befunden haben. Aufgrund der kürzeren Distanz zum Boden des Flusses ist das Absinken nach kurzer Transportstrecke plausibel. Die dort vorherrschenden niedrigen Fließgeschwindigkeiten durch den Reibungswiderstand der Ränder verhindern einen effektiven Weitertransport der sedimentierten Partikel. Im Gegensatz dazu unterliegen Partikel in mittleren Wassertiefen dem Einfluss der Hauptströmung und sind dadurch deutlich längeren Zeiten höheren mittleren Fließgeschwindigkeiten ausgesetzt. Folglich werden sie entlang der Fließstrecke weiter transportiert, bevor sie ggf. zu einem späteren Zeitpunkt sedimentieren. Zur Veranschaulichung dessen ist in Abb. 8.26 der Zustand der PS-Partikelwolke mit farblicher Kennzeichnung des Durchmessers nach 60 Sekunden Echtzeit in der mittleren Strömung dargestellt. Die zuvor beschriebene Sortierung der Partikelwolke entsprechend des Durchmessers ist hier nicht erkennbar, vermutlich weil die Spanne der Partikeldurchmesser in diesem Szenario wesentlich kleiner als in Szenario 2 gewählt worden ist. Diese Beobachtungen sind analog für die Simulationsergebnisse von PE-HD und PVC-P gemacht worden, die entsprechenden Abbildungen befinden sich im D (Abb. D.1 und D.2).

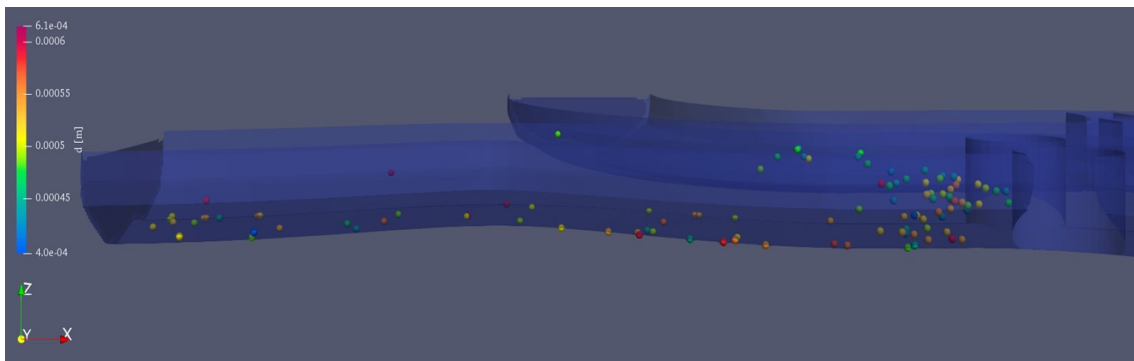


Abbildung 8.26: PS-Partikel des Szenario 3 nach 60 Sekunden Echtzeit in der mittleren Strömung in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [m].

Die Auswertung der Simulationsergebnisse des Szenario 2 insbesondere für PVC-P hat gezeigt, dass sich die Transportstrecken der Partikel mit Durchmessern im Bereich 600 bis 800 μm qualitativ verändern und es einen Zusammenhang zwischen den Größenbereichen und dem Transportverhalten zu geben scheint. Die relativ geringe Partikelanzahl und die statistische Durchmesserauswahl innerhalb des Szenarios führen dazu, dass keine Partikel mit Durchmessern zwischen 400 und 600 μm vorhanden sind, weshalb vorerst keine konkretere untere Grenze benannt werden konnte. Die Partikeldurchmesser in Szenario 3 betrachten genau diesen Größenbereich und die Simulationsergebnisse lassen darauf schließen, dass die untere Grenze auf 400 μm heruntergesetzt werden kann. Eine Konkretisierung der oberen Grenze ließ sich aufgrund nicht vorhandener Simulationen mit entsprechenden Partikeldurchmessern an dieser

Stelle nicht vornehmen. Daher wird der zuvor benannte Wert von 800 μm beibehalten. Folglich entsteht basierend auf den hier vorliegenden Ergebnissen eine Einteilung der Größenbereiche für PVC-P in Partikel mit Durchmessern kleiner 400 μm , zwischen 400 und 800 μm und größer 800 μm , in denen die Mikroplastikpartikel in Abhängigkeit ihrer Dichte ein ähnliches Transportverhalten aufweisen.

Darüber hinaus zeigt sich, dass für Mikroplastikpartikel des Größenbereichs 400 bis 600 μm allgemein keine konkreten Vorhersagen über das Transportverhalten in Abhängigkeit vom Durchmesser möglich sind, weil die Startposition entlang des Querschnittes innerhalb des inhomogenen Strömungsfeldes eine zu hohe Relevanz besitzt. Unter realen Bedingungen ohne Resuspension müssten sich bspw. auch PS-Partikel nach einer überschaubaren Fließstrecke im Sediment anlagern. Anhand der beschriebenen Ergebnisse ist es jedoch selbst in einem bekannten Strömungsprofil schwer vorhersagbar, welche Transportstrecken sie bis dahin zurückgelegt haben. Dies ist im Hinblick auf Probenahmen von Mikroplastik in Flüssen eine interessante, aber auch problematische Beobachtung.

In vielen Studien werden vermehrt hohe Anzahlen an Mikroplastikpartikeln innerhalb dieser Größenbereiche verzeichnet. Jedoch ist bei Probenahmen die Quantität der gefundenen Partikel definierter Größenklassen sehr stark von den verwendeten Netzen abhängig. Häufig werden Manta-Netze mit einer Maschenweite von 330 μm bei der Beprobung von Oberflächengewässern verwendet. Folglich können im Rahmen dieser Probenahmen kaum bis gar keine kleineren Mikroplastikpartikel gesammelt werden und die Anzahl der entsprechenden Größenbereiche lässt sich nicht quantifizieren (Pico et al. 2019, Skalska et al. 2020, S. 27). Die Simulationsergebnisse zeigen jedoch, dass auch Mikroplastikpartikel mit hohen Dichten und kleinen Durchmessern ($d \leq 330 \mu\text{m}$) in oberen Wasserschichten oder sogar an der Wasseroberfläche transportiert werden können. Die Umweltbelastung dieser Partikel insbesondere die Risikobewertung für heimische Lebewesen in den Regionen können anhand entsprechender Messkampagnen demnach nur bedingt vorgenommen werden und es besteht die Gefahr der Unterschätzung (Stungaru et al. 2019).

Weiterhin ist auch die Methodik bei der Probenahme entscheidend. In vielen Messkampagnen werden nur an der Wasseroberfläche oder im Sediment Proben entnommen. Dies führt dazu, dass entsprechend nur schwimmende oder abgesunkene Partikel erfasst werden können (Skalska et al. 2020, S. 22ff). Wie die oben beschriebenen

Ergebnisse zeigen, kann insbesondere für die Größenbereiche der PS-Partikel mit Durchmessern zwischen 400 bis 800 μm kein allgemeines Transportverhalten vorhergesagt werden und es erscheint zufällig, ob sie transportiert werden oder absinken. Infolgedessen könnten Forschende bei Messungen in nur einer Wassertiefe die Gesamtanzahl von Mikroplastikpartikeln mit einer Dichte ähnlich der von Wasser innerhalb dieses Größenbereichs deutlich unterschätzen.

Anhand der Simulationen aus Szenario 1 lassen sich die oben benannten Ergebnisse ebenfalls erkennen. In Abb. 8.27 sind die berechneten Transportstrecken für PE-HD, PS und PVC-P jeweils für die Durchmesser 1mm (rot) und 330 μm (blau) exemplarisch für die mittlere Strömung in Form von Box-Plots dargestellt. Daran ist ein Zusammenhang zwischen der Länge der Transportstrecke und dem Partikeldurchmesser erkennbar, da Partikel mit einem Durchmesser von 330 μm im Mittel für alle drei Kunststoffarten weiter transportiert werden als die mit $d = 1 \text{ mm}$. Jedoch ist die Variabilität der Transportstrecken aufgrund der starken Abhängigkeit von der Startposition bis auf eine Ausnahme (PVC-P mit $d = 1 \text{ mm}$) sehr hoch. In der langsamen und schnellen Strömung ergeben sich ähnliche Ergebnisse. Dieser Aspekt wird an dieser Stelle nicht näher ausgeführt, da der Einfluss der Positionierung erst in Kapitel 8.5.4 genauer untersucht wird.

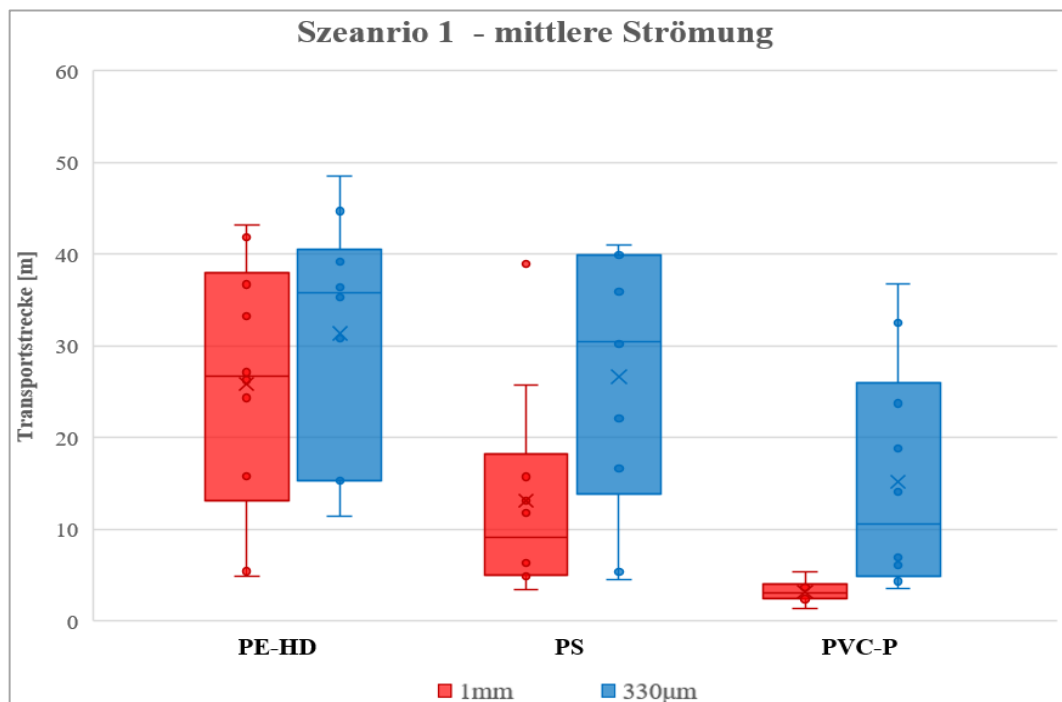


Abbildung 8.27: Box-Plots der Transportstrecken [m] für PE-HD, PS und PVC-P des Szenario 1 in der mittleren Strömung für den Partikeldurchmesser 1 mm (rot) und 330 μm (blau).

Insgesamt lässt sich sagen, dass der Partikeldurchmesser einen Einfluss auf das Transportverhalten besitzt und sich Größenbereiche erkennen lassen, für die sich ähnliche Verhaltensmuster ergeben. Bei Mikroplastikpartikeln mit hohen Dichten können kleine Partikeldurchmesser dazu führen, dass diese sich trotz dessen auch in oberen Wasserschichten fortbewegen. Jedoch zeigt sich auch, dass sich bei Partikeln mit gleichem Durchmesser Unterschiede im Transportverhalten bedingt durch unterschiedliche Dichte, Fließgeschwindigkeit des Wassers oder Position ergeben. Folglich können über den Partikeldurchmesser alleine keine konkreten Vorhersagen über das Transportverhalten eines Partikels gemacht werden.

8.5.2 Einfluss der Partikeldichte

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Partikelsimulationen im Hinblick auf den Einfluss der Partikeldichte betrachtet. Es ist bekannt, dass die Dichte einen entscheidenden Faktor für das Sinkverhalten von Mikroplastikpartikeln darstellt. Die Ergebnisse der Vorversuche zeigen, dass der Einfluss auch innerhalb einer fließenden Strömung auftritt. Bereits im vorherigen Kapitel 8.5.1 wurde ersichtlich, dass längere Transportstrecken der Mikroplastikpartikel erreicht werden, je niedriger die Dichte der Partikel ist. Diese allgemeine Beobachtung stimmt mit den Erwartungen überein und soll durch weitere Simulationsergebnisse noch einmal differenziert betrachtet werden.

Für die systematische Untersuchung der Auswirkungen einer niedrigeren bzw. höheren Dichte als das umgebende Medium Wasser werden jeweils drei Simulationen mit gleichem Partikeldurchmesser in derselben Strömung des Szenario 1 miteinander verglichen. In Abb. 8.28 sind Partikel mit einem Durchmesser von 330 μm aus PE-HD (rot), PS (weiß) und PVC-P (türkis) in ihrem Endzustand in der mittleren Strömung dargestellt. Die Startpositionen der Partikel sind in Abb. 7.3 (Kapitel 7.4.1) zu sehen. Es ist direkt erkennbar, dass die PE-HD-Partikel entlang der Fließstrecke transportiert werden, wohingegen die PS- und PVC-P-Partikel mit wenigen Ausnahmen auf den Boden des Flusses absinken und dort verbleiben. Wie bereits bei den Vorversuchen zu sehen war, sinkt PVC-P früher ab, als die jeweiligen PS-Vergleichspartikel. Die beschriebenen Beobachtungen können analog bei den anderen Simulationen des Szenario 1 gemacht werden.

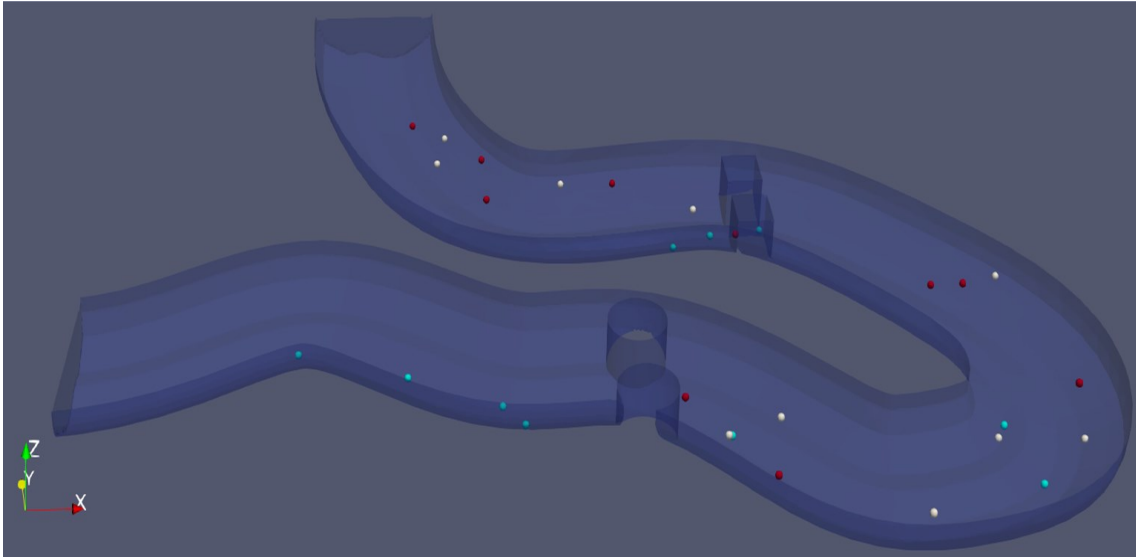


Abbildung 8.28: Endzustand von PE-HD (rot), PS (weiß) und PVC-P (türkis) mit $d = 330 \mu\text{m}$ in der mittleren Strömung des Szenario 1.

Die Betrachtung der Transportwege von PE-HD-Partikeln unter den verschiedenen Strömungsbedingungen zeigt, dass die Partikel tendenziell in der oberen Wasserschicht verbleiben und dort transportiert werden. Dies erscheint aufgrund der niedrigeren Dichte der Partikel als Wasser plausibel. Jedoch bewegen sich die Partikel, je nach Startposition im Strömungsfeld auch in mittleren und teilweise sogar tieferen Wasserschichten und verteilen sich bedingt durch die lokale Strömungsdynamik fast innerhalb der gesamten Wasserschicht.

Dies ist anhand der in Abb. 8.29 dargestellten Trajektorien (weiß) der PE-HD-Partikel mit einem Durchmesser von 1 mm in der mittleren Strömung gut erkennbar. Zur besseren Veranschaulichung werden die jeweiligen Startpositionen der Partikel (rot) in der Abbildung zusätzlich gezeigt. Die Trajektorien weisen einen ähnlichen Verlauf wie die vorherrschenden Stromlinien in den Bereichen der Startpositionen der Partikel auf (vgl. Stromlinienbild Abb. 8.11). Folglich werden die Partikel entlang dieser Stromlinien transportiert und treiben nicht aufgrund ihrer verhältnismäßig niedrigen Dichte an die Wasseroberfläche. Insbesondere in der 180° -Kurve wird der Einfluss des Strömungsfeldes auf die Transportbahnen der PE-HD-Partikel verdeutlicht. Die Partikel werden entlang der wirbelförmigen Stromlinien bedingt durch die räumlichen Veränderungen in tiefere Wasserschichten transportiert und können dort ggf. über längere Strecken verbleiben. Darüber hinaus wird der linke Partikel hinter der Kurve mit der dort vorhandenen rückwärts gerichteten Stromlinie bewegt. Demnach befinden sich PE-HD-Partikel nicht, wie oft vermutet, immer an der Wasseroberfläche oder kurz darunter.

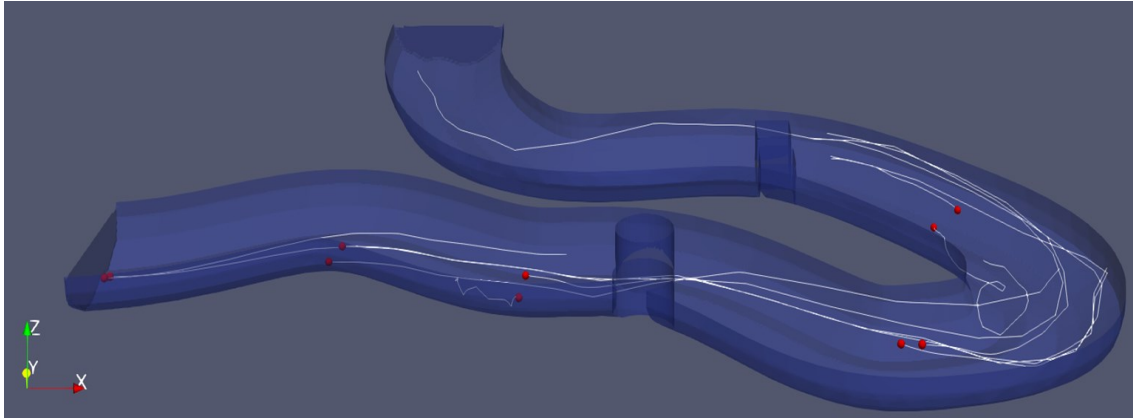


Abbildung 8.29: Partikelbahnen (weiß) und Startpositionen (rot) von PE-HD des Szenario 1 mit $d = 1$ mm in der mittleren Strömung.

Diese Beobachtung wird noch einmal durch die Simulationsergebnisse der Partikelwolke in Szenario 3 verdeutlicht. In Abb. 8.30 sind die PE-HD-Partikel in der mittleren Strömung farblich entsprechend ihres Durchmessers nach 60 Sekunden Echtzeit dargestellt. Daran ist gut erkennbar, dass die Partikel über die gesamte Wassersäule verteilt sind und fortbewegt werden.

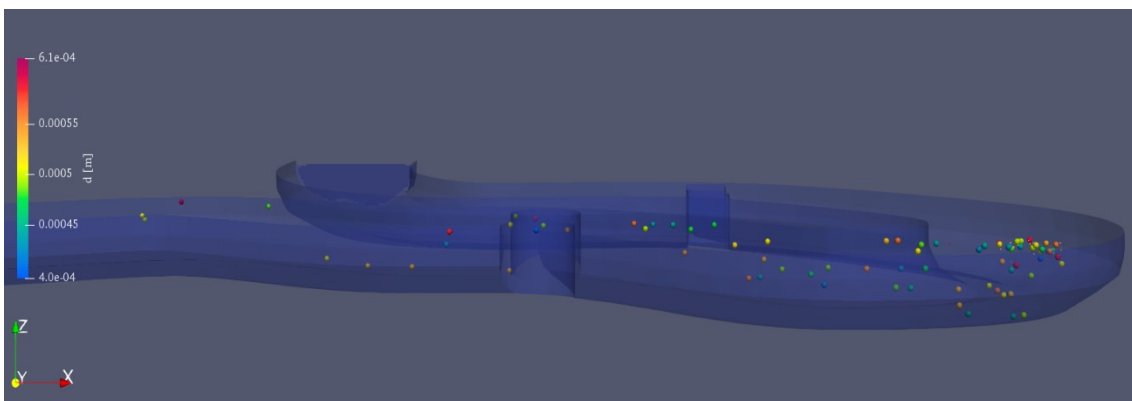


Abbildung 8.30: PE-HD-Partikel des Szenario 3 nach 60 Sekunden Echtzeit in der mittleren Strömung in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [m].

Die Betrachtung der Trajektorien (in obiger Abbildung nicht dargestellt) der Partikel zeigt, dass dies über die gesamte Simulationsdauer so bleibt. Ein großer Teil der Mikroplastikpartikel mit niedriger Dichte scheint in den Wassertiefen ihrer Startposition zu verbleiben und den dort vorherrschenden Stromlinien zu folgen. Folglich könnten Mikroplastikemissionen unterhalb der Wasseroberfläche (z.B. aus Kläranlagen-Einleitungen) der Grund dafür sein, dass bei Probenahmen in Fließgewässern auch Partikel mit niedrigen Dichten in tieferen Wasserschichten gefunden werden (Kooi et al. 2016, Cowger et al. 2021). Die geringe Dichte der PE-HD-Partikel führt demnach nicht zwangsläufig zu einem Auftrieb der Partikel an die Wasseroberfläche.

In Kapitel 8.5.1 ist bereits beschrieben worden, dass sich die Partikel in Szenario 2 hinsichtlich ihres Durchmessers innerhalb der Wassersäule sortieren. Beim Vergleich der PS- und PVC-P-Partikel unter den gleichen Strömungsbedingungen fällt auf, dass dieser Vorgang für die PVC-P-Partikel schneller stattfindet. Dies lässt sich anhand von Abb. 8.31 sehen. Hier sind PS und PVC-P nach 30 Sekunden Echtzeit in der mittleren Strömung in farblicher Kennzeichnung des Durchmessers dargestellt und es zeigt sich, dass die PVC-P-Partikel insgesamt deutlich weiter abgesunken sind als die PS-Vergleichspartikel. Dies ist eine logische Konsequenz der schnelleren Sinkgeschwindigkeit für PVC-P aufgrund der höheren Dichte im Vergleich zu PS.

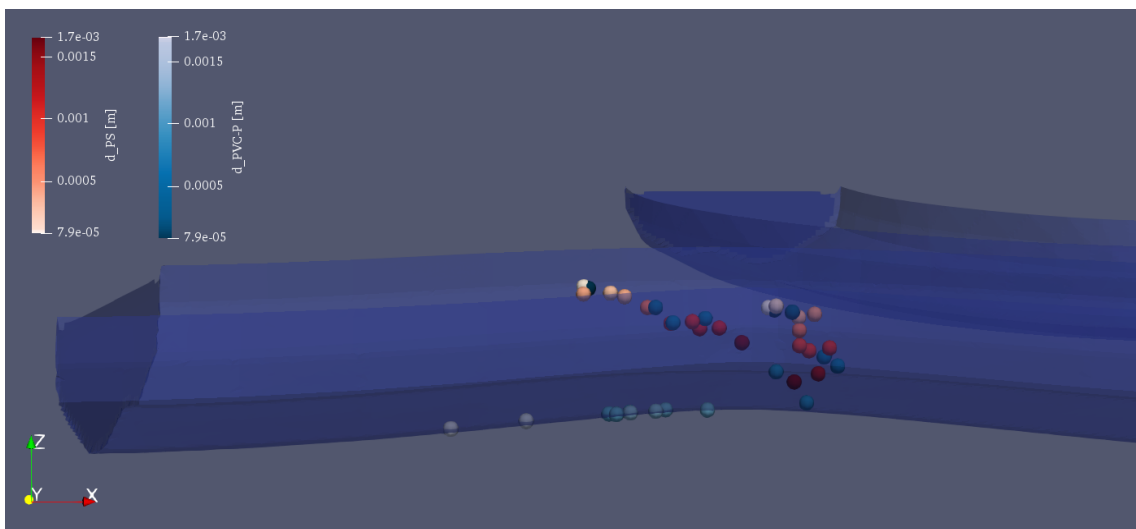


Abbildung 8.31: PS- (rot) und PVC-P-Partikel (türkis) nach 30 Sekunden Echtzeit in der mittleren Strömung in Abhängigkeiten des Partikeldurchmessers d [m].

In Abb. 8.32 sind die Transportstrecken in Form von Box-Plots von PS (rot) und PVC-P (blau) mit unterschiedlichem Durchmesser in der mittleren (links) und schnellen (rechts) Strömung grafisch dargestellt. Der bereits bekannte Zusammenhang zwischen der höheren Dichte und der verminderten Transportstrecke ist gut erkennbar. Weiterhin besitzen die PVC-P-Partikel eine größere Streuung in den Transportstrecken als die PS-Partikel. Dies lässt sich mit den verschiedenen Partikeldurchmessern erklären.

Im vorherigen Kapitel 8.5.1 wurde bereits herausgearbeitet, dass insbesondere die kleineren PVC-P-Partikel auch über weitere Strecken transportiert werden. Hier zeigt sich aber auch, dass die mittlere Fließgeschwindigkeit einen Einfluss auf die Differenz der Transportstrecken zwischen PS und PVC-P hat. Je schneller die Strömungsverhältnisse, desto verhältnismäßig längere Strecken legen die PS-Partikel im Gegensatz zu den PVC-P-Vergleichspartikeln zurück. Eine ausführliche Betrachtung des Einflusses der mittleren Fließgeschwindigkeit wird im nachfolgenden Kapitel 8.5.3 vorgenommen.

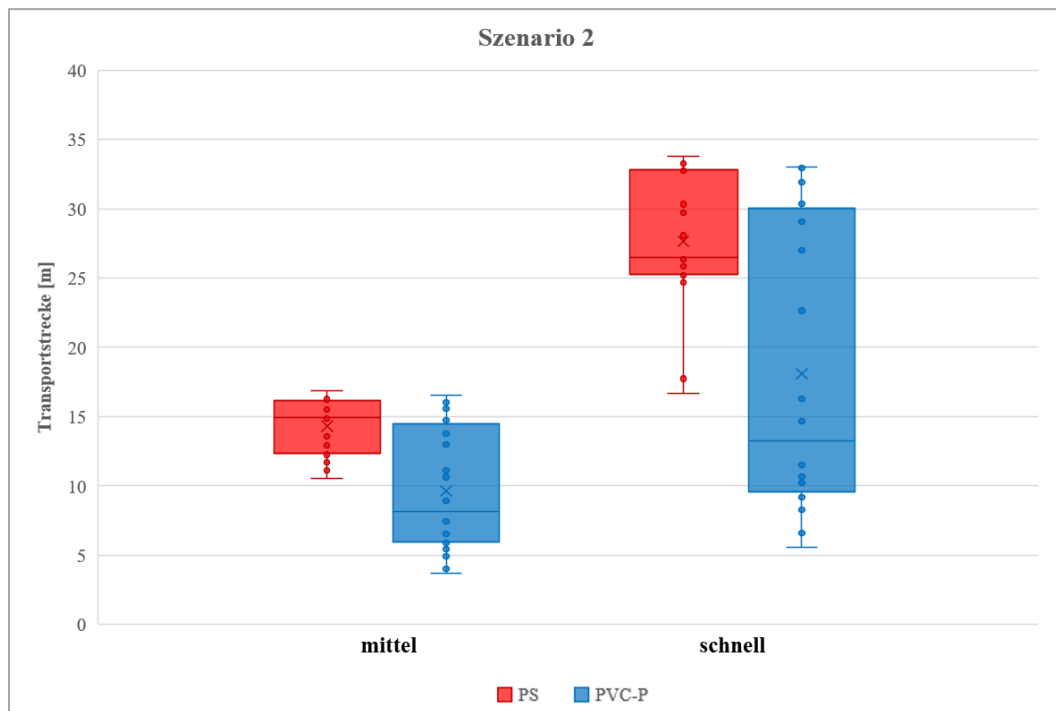


Abbildung 8.32: Transportstrecken [m] als Box-Plot für PS (rot) und PVC-P-Partikel (blau) verschiedener Durchmesser ($n=20$) in der mittlere (links) und schnellen (rechts) Strömung.

Allgemein lässt sich anhand der bisherigen Simulationsergebnisse sagen, dass die Dichte von Mikroplastikpartikel erwartungsgemäß einen wichtigen Einfluss auf deren Transportverhalten in einer fließenden Strömung hat. Die hier beschriebenen Ergebnisse für PS- und PVC-P-Partikel stimmen insgesamt mit den gängigen Vermutungen überein. Etwas überraschend ist jedoch die Tatsache, dass PE-HD-Partikel in den Simulationen innerhalb der gesamten Wassersäule verteilt vorzufinden sind und nicht wie angenommen nur in der oberen Wasserschicht bzw. an der Wasseroberfläche. Die Trajektorien der Partikel zeigen, dass sie auch über weitere Strecken in tieferen Wasserschichten transportiert werden können. Diese Beobachtung stellt eine neue Erkenntnis dar, die eine Erklärung für die Funde bei Probenahmen in fließenden Strömungen von Mikroplastikpartikeln mit niedrigen Dichten in verschiedenen Wassertiefen liefert (van der Wal et al. 2015, S. 66ff, Pico et al. 2019).

8.5.3 Einfluss der mittleren Fließgeschwindigkeit der Strömungsdynamik

Die Simulationsergebnisse von Szenario 1 ermöglichen einen Vergleich der Auswirkungen der drei Strömungsdynamiken für jede der drei gewählten Dichten der Mikroplastikpartikel. In Abb. 8.33 sind die Transportstrecken von PE-HD (schwarz), PS (rot) und PVC-P (blau) mit einem Durchmesser von 1 mm für die drei Strömungen in Form von Box-Plots grafisch dargestellt. Alle Partikel werden bei steigender Fließgeschwindigkeit im Allgemeinen weiter transportiert. Die relative Zunahme der

Transportstrecken ist abhängig von der Partikeldichte, Mikroplastikpartikel mit niedrigeren Dichten werden dabei stärker von der mittleren Fließgeschwindigkeit beeinflusst. Weiterhin vergrößert sich die Spanne der Transportstrecken bei höheren Fließgeschwindigkeiten, wobei dieser Effekt ebenfalls bei niedriger Dichte zunimmt. Insbesondere für die PE-HD-Partikel werden im Mittel bis zu dreimal längere Transportstrecken in der schnellen Strömung erreicht. Dieser starke Anstieg ist bei PS und PVC-P nicht vorhanden. Jedoch weisen die Partikel auch hier insgesamt längere Transportstrecken in der schnelleren Strömung auf.

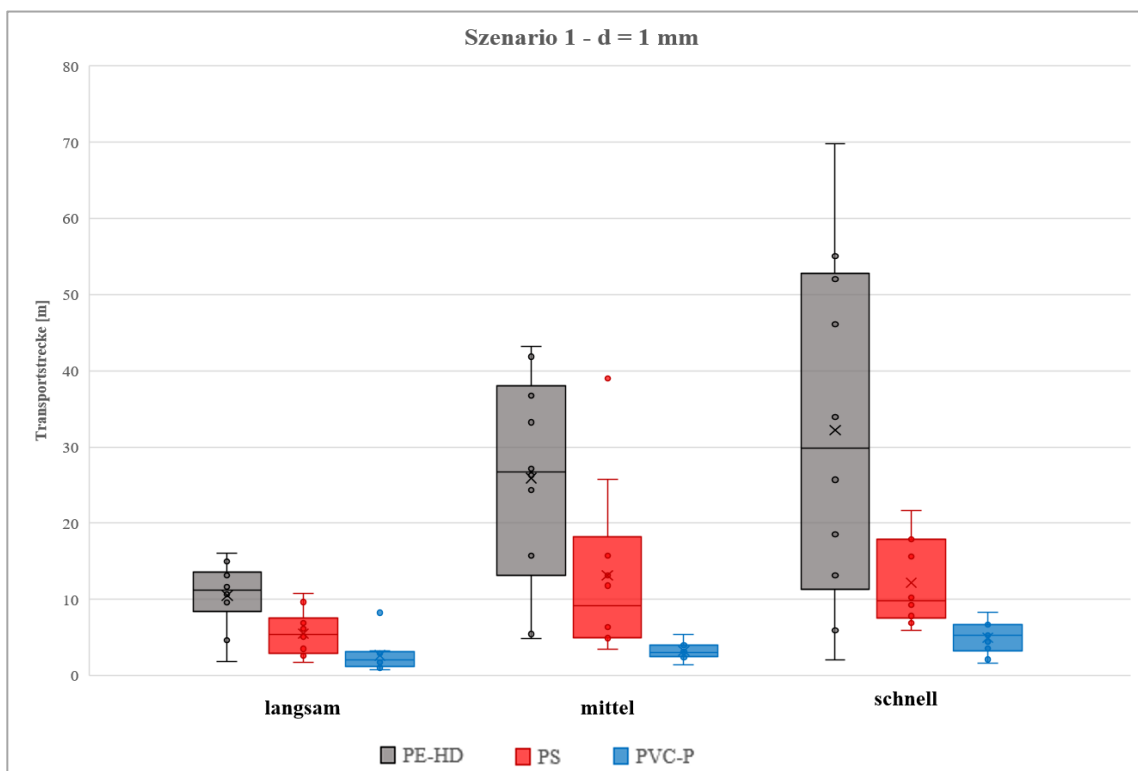


Abbildung 8.33: Transportstrecken [m] als Box-Plots von PE-HD (schwarz), PS (rot) und PVC-P (blau) mit $d = 1$ mm in den drei Strömungen aus Szenario 1.

Mit den Simulationsergebnissen aus Szenario 2 kann die Verlängerung der Transportstrecke bei gleicher Simulationsdauer durch eine höhere Fließgeschwindigkeit anschaulich bestätigt werden. In Abb. 8.34 sind die Endzustände der PS-Partikel in der mittleren (rot) und schnellen (türkis) Strömung im Vergleich dargestellt. Die gesamte PS-Partikelwolke wird in der schnellen Strömung deutlich weiter fortbewegt als in der mittleren Strömung. Auch das Absinken der Partikel mit größerem Durchmesser kommt erst später entlang der Fließstrecke vor. Die Partikel mit größeren Durchmessern sinken in der mittleren Strömung (dunkelrot) bereits vor dem ersten Säulenpaar ab. Die Vergleichspartikel unter den schnellen Strömungsverhältnissen (dunkelblau) hingegen passieren diesen Bereich und sinken innerhalb der Simulationszeit nicht ab. Zudem wird

die Partikelwolke in der schnellen Strömung insgesamt deutlich weiter auseinandergezogen und es ergeben sich größere Differenzen zwischen den Transportstrecken der einzelnen Partikel. Da PS mit 1050 kg/m^3 nur eine leicht höhere Dichte als Wasser hat und dementsprechend nur einen geringen Widerstand gegen die fließende Strömung besitzt, stellt dies ein zu erwartendes Ergebnis dar.

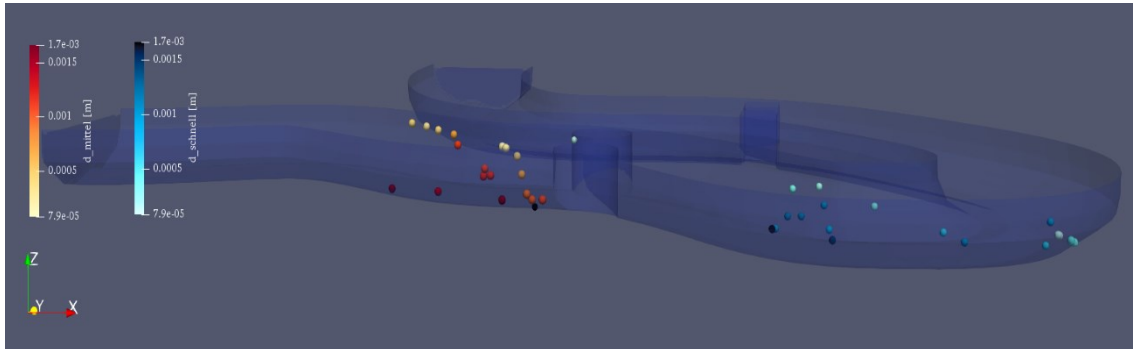


Abbildung 8.34: Endzustände der PS-Partikel des Szenario 2 in der mittleren (rot) und schnellen (türkis) Strömung in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [m].

Um den Einfluss der mittleren Fließgeschwindigkeit auf das Transportverhalten quantifizieren zu können, werden im Folgenden die relativen Transportstrecken S_{rel} für Vergleichspartikel betrachtet. Dazu wird der Quotient aus den Transportstrecken unter niedrigeren und schnelleren Strömungsbedingungen bei gleicher Startposition gebildet. Demnach gilt für eine relative Transportstrecke mit $S_{rel} = 1$, dass die Partikel identisch lange Strecken zurückgelegt haben. Für $S_{rel} < 1$ ist die Vergleichsstrecke in der schnelleren Strömung länger und entsprechend Umgekehrtes gilt für Werte größer 1. In Abb. 8.35 sind die relativen Transportstrecken für die PS- (rot) und PVC-P-Partikel (blau) aus Szenario 2 in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers grafisch dargestellt. Die Mittelwerte der relativen Transportstrecken betragen 0,52 für PS und 0,56 für PVC-P mit jeweils einer Standardabweichung von 0,08. Die relativen Transportstrecken der PS-Partikel weisen keine besonderen Auffälligkeiten auf und schwanken für alle Partikeldurchmesser um den abgegebenen Mittelwert. Diese Beobachtung ist wenig überraschend, da sich bereits in 8.5.1 keine Abhängigkeit der Transportstrecke vom Durchmesser für PS gezeigt hat. Folglich führt die Erhöhung der mittleren Fließgeschwindigkeit bei den PS-Partikeln jeweils zu einer sehr ähnlichen Verlängerung der Transportstrecke.

Auf den ersten Blick könnte dies auch für die PVC-P-Partikel vermutet werden. Die relativen Transportstrecken weisen bis zu einem Partikeldurchmesser von $800 \mu\text{m}$ eine erkennbare Zunahme auf. Für größere Partikel bleiben die Werte hingegen

näherungsweise konstant. Folglich werden Partikel ab einer bestimmten Größe (hier ca. 800 μm) immer in gleicher Weise durch die Erhöhung der mittleren Fließgeschwindigkeiten beeinflusst, während der Effekt für kleinere Partikel umso stärker ist, je geringer der Durchmesser ist. Auch dies scheint aufgrund der vorherigen Ergebnisse plausibel.

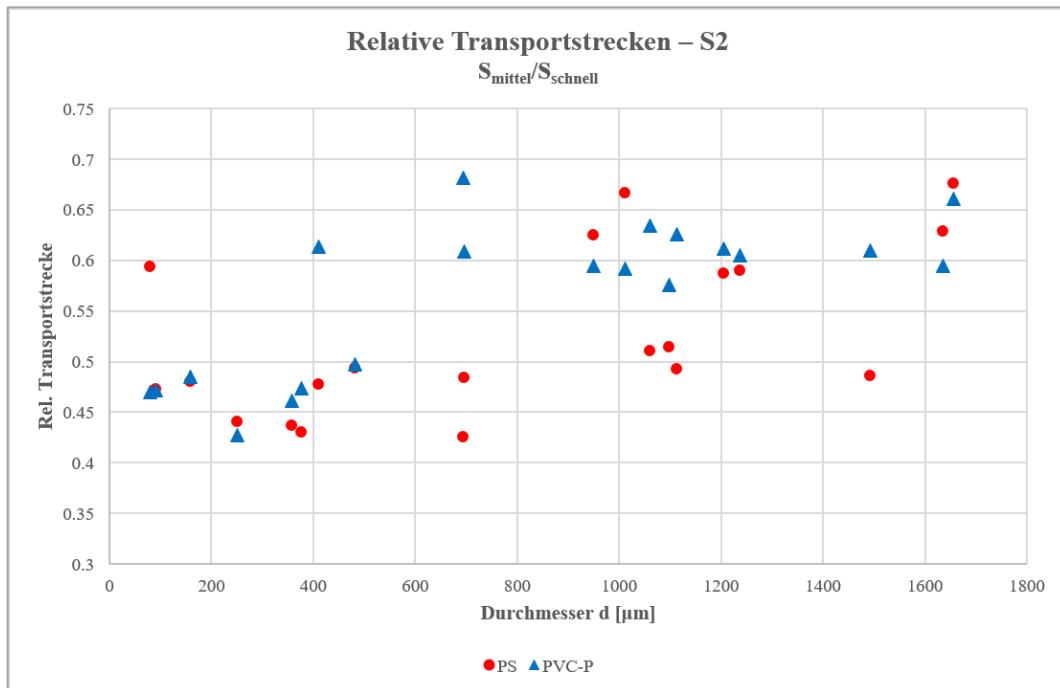


Abbildung 8.35: Relative Transportstrecken von PS (rot) und PVC-P (blau) aus Szenario 2 in Abhängigkeit des Durchmessers d [μm].

PVC-P-Partikel sinken in Abhängigkeit ihres Durchmessers schneller ab und werden nicht weiter transportiert. Demnach wird das Verhalten der Mikroplastikpartikel in Abhängigkeit ihres Durchmessers verschieden stark von der mittleren Fließgeschwindigkeit beeinflusst. Dies erscheint hinsichtlich der auf die Partikel wirkenden Gravitationskräfte plausibel. Je kleiner ein Partikel ist, desto weniger Masse besitzt er und die angreifende Gravitationskraft ist geringer, wodurch eine langsamere Sinkgeschwindigkeit resultiert. Das Strömungsfeld vermindert durch die Druckkräfte den Einfluss der Gravitation und bei höheren Fließgeschwindigkeiten werden entsprechend höhere Gravitationskräfte kompensiert. Dieses Ergebnis unterstützt die vermutete Einteilung der PVC-P-Partikel in Größenbereiche mit ähnlichem Transportverhalten. Die errechneten relativen Transportstrecken innerhalb der genannten Bereiche besitzen bis auf eine Ausnahme ähnliche Werte. Insbesondere die PVC-Partikel mit Durchmessern kleiner 600 μm weisen ein ähnliches Verhalten wie PS auf, was dafürspricht, dass bei sehr kleinen Partikeln der Einfluss der Dichte weniger relevant ist.

Analoge Beobachtungen lassen sich auch bei den Partikelwolken (Szenario 3) machen, wobei anzumerken ist, dass hinsichtlich der mittleren Fließgeschwindigkeit nur Vergleiche zwischen je zwei Simulationen der langsamen und mittleren Strömung für PE-HD- und PS-Partikel gemacht werden konnten. Dies lässt sich Abb. 8.36 entnehmen, in der die relativen Transportstrecken für PE-HD (links) und PS (rechts) grafisch dargestellt sind. Sowohl bei PE-HD als auch bei PS liegen die relativen Transportstrecken mit nur wenigen Ausreißern innerhalb eines engen Wertebereiches. Die mittlere relative Transportstrecke für PE-HD beträgt $0,38 \pm 0,13$ und für PS $0,42 \pm 0,11$. Anhand der geringfügig niedrigeren Werte für die PE-HD-Partikel ist anzunehmen, dass PE-HD durch eine höhere Fließgeschwindigkeit etwas stärker beeinflusst und verhältnismäßig weiter transportiert wird. Zum Vergleich lagen die mittlere relativen Transportstrecken für die PS-Partikel in Szenario 2 bei $0,52 \pm 0,08$ und damit etwa 20% oberhalb des Mittelwertes für Szenario 3. Diese Abweichung lässt sich zum einen mit der Partikelanzahl und dem Durchmesser erklären. In Szenario 3 wurden fünfmal mehr Partikel mit einem deutlich kleineren Durchmesserbereich simuliert als in Szenario 2. Zum anderen sind die Startpositionen der Partikel deutlich verschiedenen und in Szenario 3 befinden sich einige PS-Partikel außerhalb der Hauptströmung und in Nähe des Bodens, weshalb sie vermehrt absinken. Dies spiegelt sich in der verhältnismäßig kürzeren relativen Transportstrecke wieder.

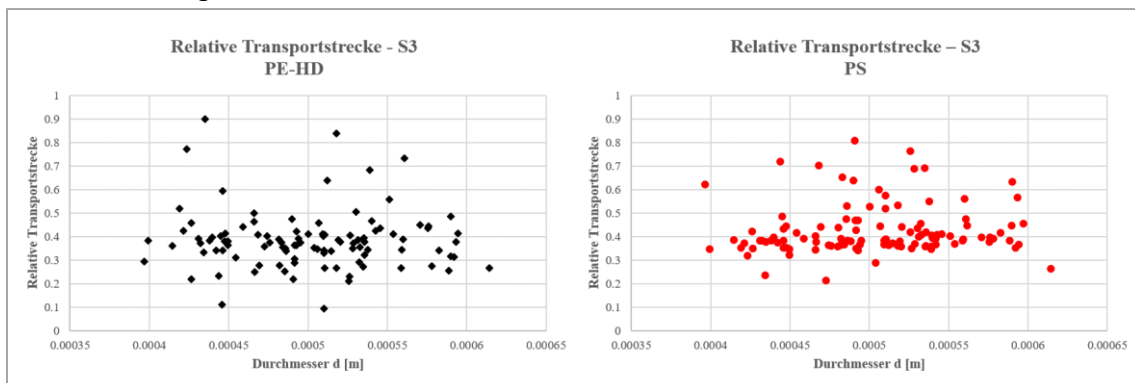


Abbildung 8.36: Relative Transportstrecken von PE-HD (links) und PS (rechts) aus Szenario 3 in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers [m].

Auffällig bei PS ist, dass die vorhandenen Ausreißer fast ausschließlich höhere relative Transportstrecken als der Durchschnitt haben. Wie bereits erwähnt, bedeutet eine relative Transportstrecke von 1, dass die Partikel einen identisch langen Weg innerhalb der Simulationszeit zurücklegen. Demnach besitzen die jeweiligen Vergleichspartikel der Ausreißerwerte tendenziell ähnliche Transportstrecken als die Mehrheit der Partikel. Die Betrachtung der einzelnen Partikel ergibt, dass es sich bei den Ausreißern in der Regel

um absinkende Partikel handelt, die zu Beginn der Simulation nah am Boden platziert sind. Aufgrund der zuvor beschriebenen Ergebnisse ist es plausibel, dass die entsprechenden PS-Partikel nur geringfügig durch eine erhöhte Fließgeschwindigkeit beeinflusst werden. Insgesamt ist weder bei den PE-HD- noch bei den PS-Partikeln ein eindeutiger Zusammenhang zwischen dem Durchmesser in diesem Wertebereich und der mittleren Fließgeschwindigkeit erkennbar. Dies bestätigt die Vermutung, dass Partikel mit den in Szenario 3 betrachteten Durchmessern einen Größenbereich bilden, die ein ähnliches Transportverhalten in Flüssen aufweisen dürften.

Innerhalb der drei Szenarien ist ein allgemeiner Einfluss der mittleren Fließgeschwindigkeit der Strömung auf das Transportverhalten der Mikroplastikpartikel erkennbar. Wie zu erwarten war, werden Partikel im Allgemeinen mit steigender Fließgeschwindigkeit über weitere Strecken transportiert. Dies zeigt sich daran, dass identische Partikel mit derselben Startposition in der gleichen Zeit deutlich andere Transportstrecken zurücklegen, wenn sie in einer langsameren bzw. schnelleren Strömung eingebracht werden. Dies gilt unabhängig davon, ob die Partikel auf den Boden des Flusses absinken oder mit der Strömung bewegt werden. Allerdings zeigen die Ergebnisse erneut, dass der Einfluss der Fließgeschwindigkeit auf die Partikel unterschiedlicher Dichte und Durchmesser schwer vorhersagbar ist und kein einfacher qualitativer Zusammenhang abgeleitet werden kann. Da die verwendeten Einschwingimulationen inhomogene Strömungsfelder aufweisen, beeinflusst die Startposition der Mikroplastikpartikel die Transportbahnen und wirkt sich so auf das Transportverhalten aus. Um diesen Zusammenhang genauer überprüfen zu können, müssten die Simulationen des Szenario 2 mit einem homogenen Strömungsfeld durchgeführt werden. Da jedoch ein natürliches Strömungsfeld eines fließenden Gewässers nicht homogen ist, wurde auf diese Überprüfung im Rahmen dieser Arbeit verzichtet.

8.5.4 Einfluss der Positionierung der Partikel innerhalb der Geometrie

Als letzter Parameter wird die Positionierung der Partikel in der Strömungsdynamik genauer untersucht. Die bisherigen Ergebnisse haben gezeigt, dass sowohl die Position entlang der Fließstrecke wie auch im Querschnitt des Flusses zu deutlichen Unterschieden im Transportverhalten führen können. Bereits bei den Vorversuchen ist aufgefallen, dass der Partikel mit der Startposition kurz vor dem ersten Säulenpaar (P3 in Abb. 8.18) durch

die dort vorherrschenden Stromlinien entgegen der eigentlichen Fließrichtung transportiert worden ist.

In Szenario 1 wurden identische Partikel an fünf verschiedenen Stellen entlang der Fließstrecke eingebracht. Die Ergebnisse zeigen, dass sich daraus teils erhebliche Unterschiede in den Transportstrecken ergeben. In Abb. 8.37 sind die Partikelbahnen der PS-Partikel mit einem Durchmesser von 1 mm in der mittleren Strömung dargestellt. Zur besseren Interpretation wurden die Startpositionen (rot) hinzugefügt und die Partikel nummeriert. Hieran ist gut erkennbar, dass Partikel, deren Startposition sich innerhalb der Hauptströmung befindet (Partikel Nr. 1 – 5, 7 und 8), mit dieser transportiert werden und ggf. absinken. Besonderheiten ergeben sich für die Partikel, die außerhalb der Hauptströmung starten. Die Transportstrecke von Partikel Nr. 6 wurde bereits bei den Ergebnissen der Vorversuche diskutiert (s. Kapitel 8.4.2). Partikel Nr. 9 befindet sich anfangs an der Innenseite der 180°-Kurve. Wie anhand des Stromlinienbildes in Kapitel 8.3 zu sehen ist, entstehen dort Verwirbelungen und es ergeben sich rückwärts zur Hauptfließrichtung gerichtete Strömungen. Anhand der Trajektorie von Partikel Nr. 9 zeigt sich, dass dieser erwartungsgemäß den entsprechenden Stromlinien folgt und daher einige Meter entgegen der Fließrichtung transportiert wird.

Weiterhin ist die Transportbahn von Partikel Nr. 10 sehr interessant. Dieser scheint sich zuerst mit der Fließrichtung zu bewegen, wird dann jedoch vor dem zweiten Säulenpaar nach außen abgelenkt, gerät dort in die Verwirbelungen (bedingt durch die räumliche Veränderung) und wird dementsprechend ebenfalls entgegengesetzt transportiert. Bei der genaueren Betrachtung des Stromlinienbildes (Abb. 8.11) fällt weiterhin auf, dass es aufgrund der Überlagerungen der Hauptströmung mit den Längsströmungen durch die Kurve teils zu nach unten gerichteten Stromlinien kommt, die schließlich vor dem zweiten Säulenpaar entlang der Säule nach außen verlaufen. Partikel Nr. 10 scheint aufgrund seiner vorherigen Transportstrecke in genau diesen Bereich gelangt zu sein, wodurch er diese zuerst wenig intuitive Partikelbahn besitzt. Der entsprechende Vergleichspartikel der analogen Simulation für PCV-P weist hingegen eine andere Transportstrecke auf. Er wird durch das zweite Säulenpaar fortbewegt und sinkt schließlich ab (Abb. D.3). Da die Simulationen unter denselben Strömungsbedingungen durchgeführt wurden, müssen andere Faktoren zu diesen Unterschieden geführt haben. Hier beeinflusst nicht nur das vorhandene Strömungsfeld und die Startposition die Trajektorien der Partikel, sondern auch deren Dichte. Partikel mit unterschiedlicher

Dichte folgen aufgrund des unterschiedlichen Sinkverhaltens nicht zwingend den gleichen Trajektorien.

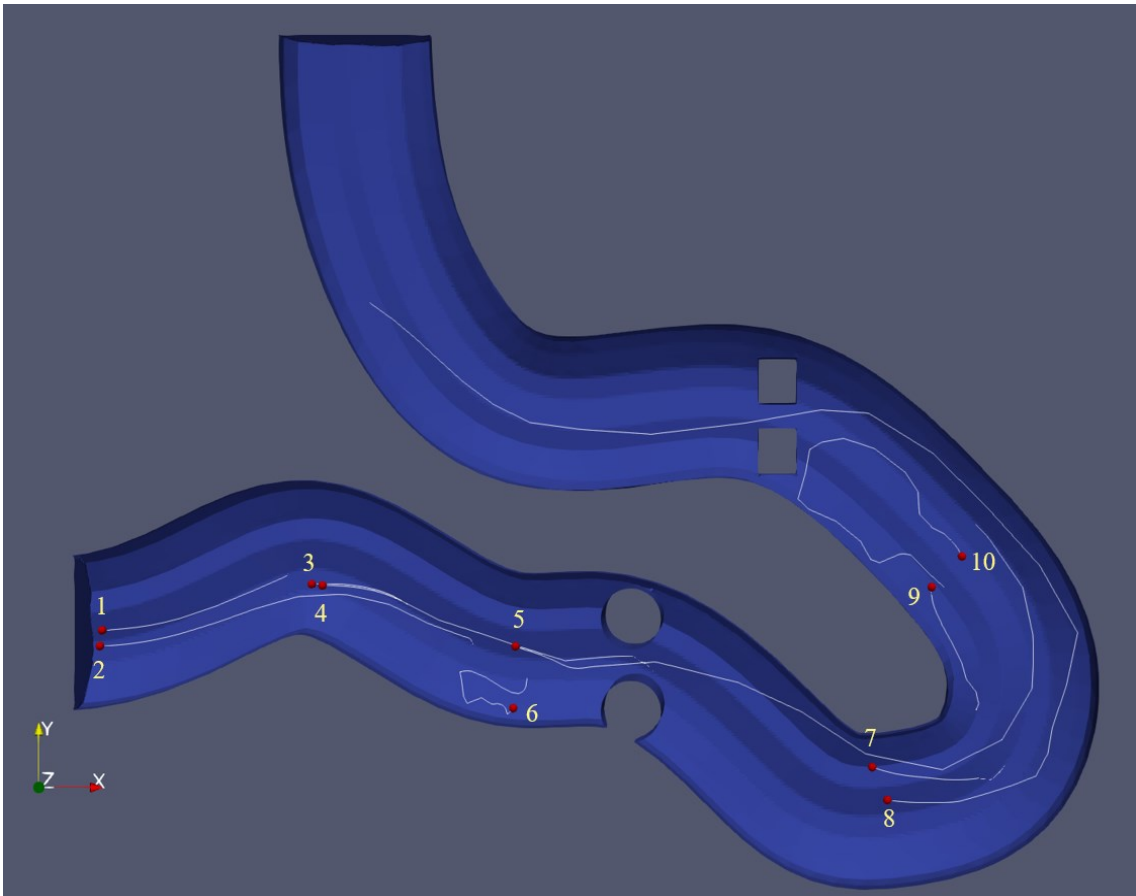


Abbildung 8.37: Trajektorien von PS mit $d = 1$ mm in der mittleren Strömung mit jeweiliger Startposition (rot) der Partikel 1-10.

Zur Verdeutlichung werden die relativen Transportstrecken aus den Simulationen der mittleren und schnellen Strömung für Szenario 1 in Abb. 8.38 für den Durchmesser 1 mm (links) und $330 \mu\text{m}$ (rechts) jeweils für PS (rot) und PVC-P (blau) grafisch dargestellt. Die Reihenfolge entspricht der Nummerierung der Partikel aus Abb. 8.37. Auf die Darstellung der relativen Transportstrecken der PE-HD-Partikel wurde an dieser Stelle verzichtet, da die Auswertung aus den bereits zu Beginn von Kapitel 8.5 genannten Gründen unvollständig ist. Der Vollständigkeit halber sind die Grafiken dennoch dem Anhang D (Abb. D.4) beigelegt.

Für die Partikel Nr. 1 – 4 sind die Werte der relativen Transportstrecken für beide Durchmesser ähnlich. Dies liegt daran, dass das Strömungsfeld am Anfang des Flussabschnittes verhältnismäßig homogen ist und die Partikel zum Startzeitpunkt innerhalb der Hauptströmung positioniert sind. Die Transportstrecken der großen PVC-P-Partikel ($d = 1$ mm) sind bis auf eine Ausnahme in der schnellen Strömung erwartungsgemäß länger als in der mittleren ($S_{\text{rel}} < 1$). Bei den kleineren Partikeln

($d = 330 \mu\text{m}$) ist dagegen der Einfluss der Positionierung erkennbar, da vier von zehn PVC-P-Partikel relative Transportstrecken größer als 1 aufweisen. Für die PS-Partikel tritt dieser Effekt schon bei den großen Partikeln auf. Insgesamt ist die Streuung der relativen Transportstrecken der PS-Partikel in beiden Größenklassen relativ groß.

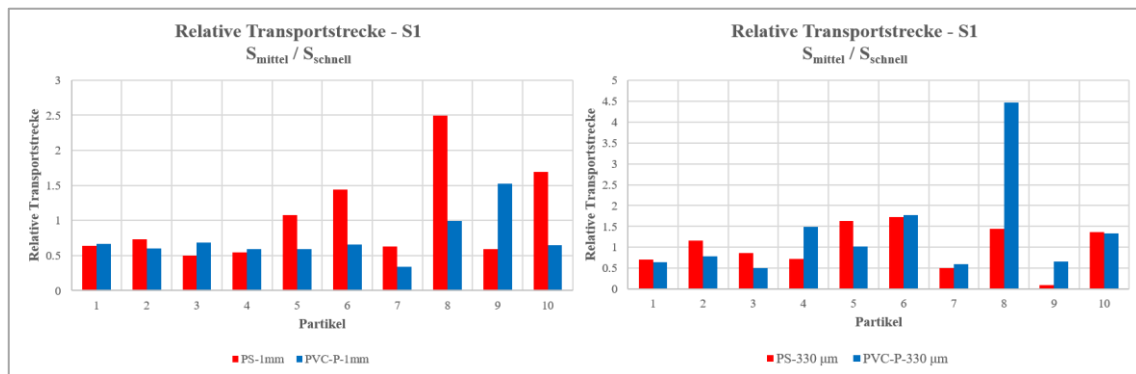


Abbildung 8.38: Relative Transportstrecken der PS- (rot) und PVC-P-Partikel (blau) des Szenario 1 mit $d = 1 \text{ mm}$ (links) und $d = 330 \mu\text{m}$ (rechts).

Offenbar werden insgesamt einige Partikel in der mittleren Strömung weiter transportiert als in der schnellen. Dies würde bedeuten, dass die Vergleichspartikel in der schnelle Strömung vermutlich früher absinken, was erst einmal kontraintuitiv ist. Mit Blick auf die Trajektorien der Partikel fällt jedoch auf, dass diese in der schnellen Strömung häufig in Bereiche transportiert werden, in denen niedrigere Fließgeschwindigkeiten vorherrschen, wodurch sie eine kürzere Strecke transportiert werden, bevor sie sedimentieren. Dabei kann allerdings keine Partikelklasse bestimmter Dichte und Partikeldurchmesser identifiziert werden, für die sich ein gleichbleibendes Muster des Transportverhaltens einstellt. Wie weit ein Partikel in der Strömung transportiert wird, scheint eher statistisch von dem Zusammenspiel zwischen Strömungsfeld und Positionierung abhängig zu sein. Überraschenderweise sind auch die PVC-P-Partikel trotz ihrer relativ hohen Dichte davon betroffen. Partikel mit einem größeren Durchmesser besitzen eine höhere Sinkgeschwindigkeit, die jedoch theoretisch durch eine schnellere Fließgeschwindigkeit eher kompensiert wird. Für die Partikel Nr. 1 – 4 ist dieser Zusammenhang anhand der Grafik auch ablesbar, für die anderen Partikel nicht. Folglich muss diese Veränderung des Transportverhaltens ein Resultat der Positionierung der Partikel im Strömungsfeld sein. Dies erklärt auch, warum bei ausreichend großen Anzahlen an Partikeln bzw. Molekülen der statistische Ansatz der Advektions-Dispersions-Reaktions-Gleichung (Gl. 4.3) das Ausbreitungsverhalten beschreiben könnte.

Die Beobachtung, dass Mikroplastikpartikel außerhalb der Hauptströmung anders transportiert werden, zeigt sich auch sehr gut an den Ergebnissen der in Szenario 3 simulierten Partikelwolken. In Abb. 8.39 sind die Trajektorien der PS-Partikel in der langsamen (rechts) und in der mittleren Strömung (links) dargestellt. In beiden Simulationen werden die äußeren Partikel der Wolken entlang der Stromlinien außerhalb der Hauptströmung transportiert und die jeweiligen Trajektorien folgen den wirbelförmigen Verläufen. In der langsamen Strömung werden deutlich mehr Partikel durch das Strömungsfeld nach dem Einlass auf wirbelförmigen Transportbahnen bewegt und die Transportlängen sind insgesamt kürzer als in der mittleren Strömung. Aufgrund der niedrigeren mittleren Fließgeschwindigkeit der langsamen Strömung ist diese Beobachtung plausibel. Das Transportverhalten von PS-Partikeln wird folglich stark durch die äußeren Bedingungen des Strömungsfeldes beeinflusst. Je schneller dabei die mittlere Fließgeschwindigkeit der Strömung ist, desto wahrscheinlicher ist es, dass die Partikel über weitere Strecken transportiert werden, sofern ihre Startposition in oder nahe der Hauptströmung ist.

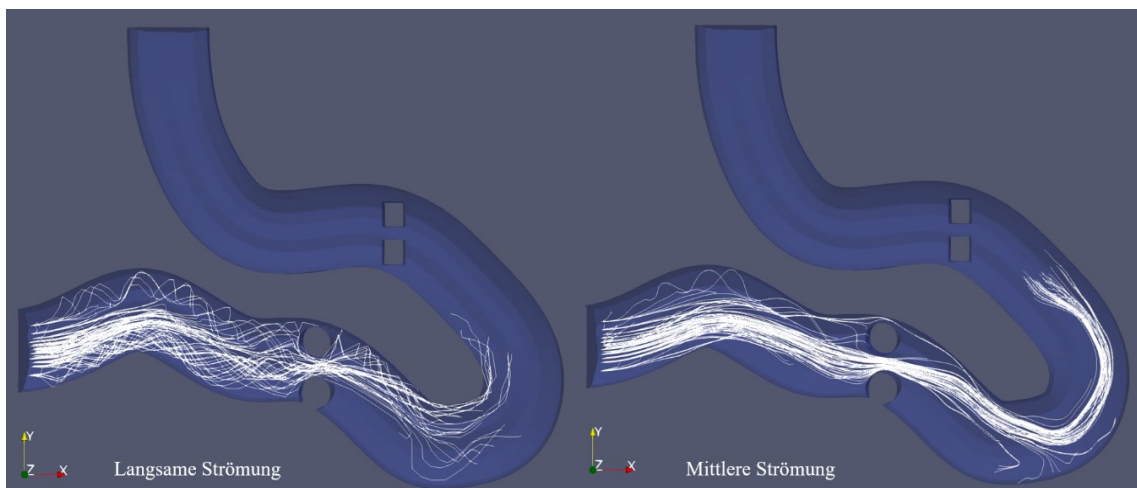


Abbildung 8.39: Trajektorien der PS-Partikel des Szenario 3 in der langsamen (links) und mittleren Strömung (rechts) nach 120 Sekunden Simulationszeit.

Weiterhin zeigen die Trajektorien, dass anhand eines bekannten Strömungsfeldes Stellen entlang der Fließstrecke abgeleitet werden können, an denen eine Akkumulation vorhandener Mikroplastikpartikel wahrscheinlicher ist. Vor dem ersten Säulenpaar sind in beiden Strömungen PS-Partikel über den gesamten Querschnitt des Flusses verteilt. Durch die räumliche Verengung der Fließstrecke werden auch die Trajektorien entsprechend verengt und die Partikel werden anfangs in den Bereich der Innenseite der 180°-Kurve transportiert. In der Kurve sind schließlich deutliche Unterschiede im Transportverhalten zwischen den Strömungsbedingungen vorhanden. In der mittleren

Strömung werden die PS-Partikel vermehrt entlang der Außenseite mit der Hauptströmung transportiert, wohingegen sich die Partikel in der langsamen Strömung eher an der Innenseite der Kurve fortbewegen. Dies würde einen erheblichen Einfluss auf die Funde einer potentiellen Probenahme bei einer Messkampagne von Mikroplastik in einem Fließgewässer haben. Je nachdem an welcher Stelle im Querschnitt eine Probe entnommen werden würde, wären die Funde von PS-Partikeln abhängig vom Strömungsfeld des Flusses. Die Simulationen zeigen, dass das Entnehmen einer repräsentativen Stichprobe zur Mikroplastikbestimmung bei entsprechend geringen Partikelkonzentrationen ohne Kenntnis der Strömungsverhältnisse kaum möglich ist. In dem Modell-Flussabschnitt könnte z.B. eine aussagekräftige Probe am ehesten in den Bereichen vor dem ersten Säulenpaar genommen werden.

Es ist ersichtlich, dass die Position der Einbringung und dementsprechend der Startpunkt der Mikroplastikpartikel im Strömungsfeld einen wichtigen Einflussfaktor für deren Transportverhalten darstellen. Aus den Ergebnissen in der vorherigen Kapiteln 8.5.1 – 8.5.3 geht deutlich hervor, dass das Transportverhalten qualitative Veränderungen in Abhängigkeit der Startpositionen entlang der Fließstrecke sowie im Querschnitt aufweist. Folglich ist der Ort der Einbringung maßgeblich für die Ausbreitung der Mikroplastikpartikel innerhalb einer fließenden Strömung verantwortlich.

8.6 Realitätsbezug der Simulationsergebnisse

Die Simulationen der Strömungsdynamik in der Modell-Fließrinne sowie im Modell-Flussabschnitt mit OpenFOAM liefern in beiden Fällen plausible Geschwindigkeitsfelder. Die Entwicklung der Stromlinien insbesondere in Bereichen mit räumlichen Veränderungen durch Kurven oder Hindernisse entspricht den Erwartungen. Für den Modell-Flussabschnitt zeigen sich zudem bedingt durch die Morphologie der Fließstrecke und des Querschnitts realistische Strömungsverhältnisse (Naudascher 1992, Jirka & Lang 2009). Der kurvenreiche Verlauf findet sich auch in vielen real existierenden Flüssen wieder (bspw. Düte im Raum Osnabrück³) und erlaubt folglich eine Übertragung der Ergebnisse in die reale Umwelt.

Der Vergleich der statischen Simulationen ergab, dass das simulierte Verhalten der Partikel gut mit den Auftriebs- und Sinkgeschwindigkeiten aus den Abschätzungen nach

³ Zuletzt abgerufen am 07.04.2023:

https://www.nlwkn.niedersachsen.de/natura2000/ffh_richtlinie_und_ffh_gebiete/die_einzelnen_ffh_gebiete/ffh-gebiet-334-dute-mit-nebenbachen-198735.html#Sicherheit

Dietrich (1982) zusammenfasst. Kathmullina und Isachenko (2016) zeigten zudem durch Messung der Sinkgeschwindigkeiten von verschiedenen Mikroplastikpartikeln, dass diese Abschätzungen eine sehr gute Vorhersage der Sinkgeschwindigkeit für runde Partikel darstellt. Folglich kann davon ausgegangen werden, dass die OpenFOAM-Simulationen den Einfluss des Auftriebs und der Sedimentation der betrachteten Mikroplastikpartikel realistisch wiedergeben.

Die Simulationsergebnisse des Transportes von Mikroplastikpartikeln in der fließenden Strömung ergeben, dass die Strömungsbedingungen des Gewässers sowie die Position zum Zeitpunkt der Einbringung den größten Einfluss auf das anschließende Transportverhalten besitzen. Messungen von Mikroplastikpartikeln in Flüssen ließen in den letzten Jahren diese Vermutung aufkommen (Skalska et al. 2020, Bai et al. 2022), die im Rahmen dieser Arbeit bestätigt werden kann.

Viele Ansätze zur Modellierung von Mikroplastikpartikeln in Flüssen verwenden eine eindimensionale Beschreibung des Transportes mit der Advektions-Dispersions-Reaktions-Gleichung (Gl. 4.3) bzw. dessen analytischer Lösung (Gl. 4.6) (Uzen et al. 2021). Dabei wird die Annahme getroffen, dass die räumliche Ausbreitung von Plastikpartikeln analog zu gelösten Stoffen vornehmlich durch Advektion und Dispersion bestimmt ist. Die Anwendung der ADR-Gleichung setzt dabei voraus, dass Dispersion im Grunde als statistischer Prozess entlang der Fließstrecke betrachtet werden kann. Der Dispersionskoeffizient beschreibt in diesem Fall die durch das inhomogene Strömungsfeld verursachte statistische Ausbreitung einer Partikelwolke. Die Vorhersage von Konzentrationen entlang der Fließstrecke gelingt mit diesem Ansatz jedoch nur, wenn die Partikelkonzentration ausreichend hoch ist. Konzentrationen von gelösten Umweltschadstoffen liegen in der Regel im nMol-Bereich, was etwas $10^{14} - 10^{16}$ Molekülen pro Liter entspricht. Weiterhin wird bei einer 1D-Simulation angenommen, dass sich die Partikel unmittelbar nach der Einbringung homogen über den Querschnitt verteilen.

Dass diese Modellierungen wenig Realitätsbezug haben könnten, wird vor allem deutlich, wenn gemessene Partikelkonzentrationen von Mikroplastik in Flüssen betrachtet werden. Je nach Messpunkt, wie bspw. vor oder nach einem Kläranlagen-Ablauf oder in Entfernung zu einer Punktquelle, werden Partikelkonzentrationen von max. 10^4 Partikeln pro m^3 verzeichnet (McCornick et al. 2016, Pico et al. 2019, Strungaru et al. 2019, Skalska et al. 2020). Die gemessenen Werte liegen deutlich unterhalb von Stoffkonzentrationen

und somit in einem Bereich, in dem eine quasi-stochastische Modellierung des Partikeltransportes mit der ADR-Gleichung nicht unbedingt sinnvoll erscheint, um realistische Mikroplastikfrachten in Flüssen abzuschätzen. Die theoretischen Partikelkonzentrationen der hier entwickelten Szenarien 2 und 3 betragen 14,3 bzw. 85,7 Partikeln pro m^3 und liegen damit in dem Bereich von gemessenen Mikroplastikkonzentrationen in Flüssen. Die Ergebnisse zeigen deutlich, dass es nur schwer vorstellbar ist, dass die Transportmodellierung einer solchen Partikelwolke mit niedrigerer Konzentration mit einem Advektion-Dispersions-Reaktions-Ansatz realistische Vorhersagen der räumlichen Konzentrationsverteilung in einer gewissen Entfernung vom Startpunkt (Ort der Emission) ergibt. Darüber hinaus lassen die Ergebnisse erheblichen Zweifel daran aufkommen, dass Messwerte von Mikroplastikpartikeln aus Stichproben an einer oft pragmatisch gewählten Stelle im Fluss eine realistische Abschätzung von Mikroplastikfrachten (in Masse pro Zeit) ermöglichen. Zur Ermittlung solcher Frachten werden Partikelkonzentrationen mit dem Durchfluss multipliziert (Quik et al. 2015, Besseling et al. 2016), wobei von einer Repräsentativität der Ergebnisse der Stichprobenmessung ausgegangen wird.

Weiterhin zeigen die hier präsentierten Simulationsergebnisse, dass sich Mikroplastikpartikel nicht zwangsläufig in kurzer Zeit homogen entlang des Querschnittes verteilen, selbst wenn deren Startpositionen entsprechend gewählt wurden. Dies wird noch einmal veranschaulicht, wenn die Simulationsergebnisse der Szenarien 2 und 3 mit den Simulationen der Tracerausbreitung in Kapitel 8.2.2 verglichen werden. Der simulierte Tracer zeigt das zu erwartende Dispersionsverhalten eines gelösten Stoffes (Naudascher 1992, S. 7), da dieser mit einer entsprechend hohen Konzentration von 10^{14} Molekülen pro Liter modelliert worden ist. Wie bereits erwähnt, besitzt die Partikelwolke eine um mehrere Größenordnungen niedrigere Konzentration im Ausgangszustand und es wird deutlich, dass das Ausbreitungsverhalten der geringen aber realistischeren Anzahl an Partikeln nicht vergleichbar mit der Dispersion eines gelösten Stoffes ist. Das individuelle Transportverhalten der Partikel bedingt durch die Strömungsdynamik sowie die intrinsischen Eigenschaften führt dazu, dass die Annahme einer homogenen Durchmischung bei einer entsprechend geringen Konzentration nicht sinnvoll ist.

Darüber hinaus legen die Ergebnisse nahe, dass viele der simulierten Mikroplastikpartikel entlang der Fließstrecke von 71 m sedimentieren. Insbesondere die verhältnismäßig dichten PCV-P-Partikel sinken in den meisten Szenarien innerhalb der Simulationszeiten

ab. Aber auch PS- und in seltenen Fällen PE-HD-Partikel setzten sich am Boden des Flussabschnittes ab. Folglich lässt sich schließen, dass Flusssedimente eine bedeutende Senke für Mikroplastikpartikel darstellen können und nur ein kleiner Anteil der in Flüsse emittierten Partikel über sehr weite Strecken und schließlich in Meere transportiert werden. Diese Beobachtung deckt sich ebenfalls mit dem von van Emmerik et al. (2022a) vorgestellten Konzept, dass Flüsse eine Art Reservoir für Mikroplastik darstellen, sowie mit Auswertungen von Sedimentproben in Flüssen (Strungaru et al. 2019, Skalska et al. 2020).

Insgesamt lässt sich sagen, dass das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Transportmodell für Mikroplastikpartikel gut auf eine reale Umgebung übertragbar ist. Die erreichte Inhomogenität des Strömungsfeldes bildet realistische Strömungsbedingungen ab und zusätzlich kann der Einfluss verschiedener räumlicher Veränderungen durch Kurven oder Verengungen auf das Transportverhalten analysiert werden. Anhand dessen lassen sich im Hinblick auf den Verlauf echter Flüsse Rückschlüsse ziehen, wie sich Mikroplastikpartikel lokal verhalten können und transportiert werden.

9 Schlussfolgerungen

Im Rahmen dieser Arbeit wurde nach aktuellem Wissensstand zum ersten Mal ein *Particle-Tracking-Modell* zur Simulation von Mikroplastikpartikeln in einem Fließgewässerabschnitt auf einer lokalen Skala entwickelt und das Transportverhalten einzelner Partikel in Abhängigkeit ihrer Größe und Dichte sowie der Strömungsdynamik im Fluss analysiert. Die Simulationsergebnisse zeigen, dass das Transportverhalten von Mikroplastikpartikeln in einem Fließgewässer sowohl durch äußere Faktoren als auch durch die intrinsischen Eigenschaften der Partikel beeinflusst wird. Die in der Regel inhomogene Strömungsdynamik im Fluss führt zu einem individuellen Transportverhalten der einzelnen Partikel. Die unterschiedlich gewählten mittleren Fließgeschwindigkeiten der Strömung erzeugen ein gleichbleibendes Stromlinienbild, können jedoch durch lokal variable Fließgeschwindigkeiten Partikel mit identischen Startpositionen auf teils stark verschiedenen Transportbahnen lenken. Daraus ist ersichtlich, dass die Vorhersage der Transportstrecken und Trajektorien einzelner Mikroplastikpartikel mit bekannter Dichte und Durchmesser in einer inhomogenen Strömung nahezu unmöglich vorhergesagt werden kann, ohne deren räumliche Dynamik zu kennen.

Im Hinblick auf das Ziel der Arbeit wurden drei Fragestellungen untersucht, auf die im Folgenden nacheinander eingegangen wird. Die erste Frage befasst sich mit den intrinsischen Partikeleigenschaften und inwiefern sich die Dichte und der Durchmesser der Partikel auf das Transportverhalten in einer fließenden Strömung auswirken. Die Gesamtheit der Simulationsergebnisse zeigt, dass der Partikeldurchmesser je nach Dichte einen größeren bzw. geringeren Einfluss auf das allgemeine Transportverhalten besitzt. Dies ist plausibel, da der Auftrieb bzw. das Absinken von Partikeln durch eben diese beiden Parameter bestimmt ist. Dabei geht der Durchmesser (bzw. der Radius) quadratisch in die Berechnung der theoretischen Sinkgeschwindigkeit ein und die Dichte linear als Dichtedifferenz zum Fluid (s. Gl. 4.9). Demnach ist die Sinkgeschwindigkeit eines Partikels höher, je größer die Dichte und der Durchmesser sind.

Dieser theoretische Zusammenhang ist insbesondere in den Simulationen für PVC-P beobachtet worden. Insgesamt weisen die simulierten Partikel jedoch teilweise ein konträres Transportverhalten in Abhängigkeit ihres Durchmessers auf. Anhand der Simulationsergebnisse kristallisieren sich für PVC-P-Partikel Größenbereiche heraus, in denen sie ein ähnliches Transportverhalten besitzen. Große Partikel mit Durchmessern

größer 800 μm sinken im Modellfluss fast ausschließlich innerhalb der Simulationszeiten von 60 – 120 Sekunden ab und werden dementsprechend nur über kurze Strecken transportiert. Partikel mit kleineren Durchmessern unterhalb von 400 μm sedimentieren dagegen in der betrachteten Zeit nur geringfügig und befinden sich oftmals relativ lange in oberen Wasserschichten. Sie zeigen insgesamt ein ähnliches Transportverhalten wie PS-Partikel derselben Größenbereiche. Es bestätigt sich, dass der Einfluss der Dichte vor allem für verhältnismäßig kleine Mikroplastikpartikel mit geringer Masse weniger relevant ist. Für Partikel mit Durchmessern im Bereich 400 – 800 μm ist hingegen kein einheitliches Transportverhalten der PVC-P-Partikel erkennbar. Hier ist vor allem die Position entlang der Fließstrecke und im Querschnitt entscheidend, ob die Partikel transportiert werden oder absinken. Die für PVC-P-Partikel benannten Größenbereiche lassen sich anhand der Simulationsergebnisse nur bedingt auf PS-Partikel übertragen. Mit größerem Durchmesser steigt auch für PS die Wahrscheinlichkeit, dass ein Partikel innerhalb der Simulationszeit absinkt. Jedoch zeigt sich dies aufgrund der niedrigeren Dichte von PS nicht in der Deutlichkeit wie für PCV-P. Das theoretische Absinken der Partikel wird aufgrund der verhältnismäßig niedrigen Dichtedifferenz zwischen PS und Wasser anscheinend weitestgehend durch den Einfluss der fließenden Strömung kompensiert.

Die Simulationen der PE-HD-Partikel konnten nur eingeschränkt in die Auswertung einbezogen werden. Die gewählte Dichte ist mit 970 kg/m^3 geringer als die Dichte von Wasser und die Partikel treiben vermehrt an die Wasseroberfläche auf. Wie bereits in den Ergebnissen erwähnt, simuliert der Löser *icoUncoupledKinematicParcelFoam* den Transport von Partikeln an der Grenzschicht zwischen Luft und Wasser nicht vollständig realistisch, da einzelne Partikel auch in die Luftströmung gelangen können und somit nicht sinnvoll ausgewertet werden können. Dies trat jedoch nur in selten Fällen auf und entsprechende Partikel wurden händisch für die Analyse aussortiert. Dieses Vorgehen ermöglichte die systematische Weiterbearbeitung der Simulationsergebnisse und anschließende Auswertung der resultierenden Daten für die PE-HD-Partikel sowie den Vergleich zwischen verschiedenen Szenarien und Simulationen. Insgesamt ließ sich ebenfalls für PE-HD-Partikel eine Abhängigkeit des Transportverhaltens vom Partikeldurchmesser erkennen. Je größer die Partikel sind, desto höher ist die Wahrscheinlichkeit, dass sie an die Wasseroberfläche treiben, wo sie in der Realität aufgrund der vom Modell offenbar nicht berücksichtigten Oberflächenspannung bleiben

würden. Dies deckt sich mit den zuvor gemachten Beobachtungen bei den PS- und PVC-P-Partikeln und entspricht den Erwartungen. Da die Auftriebsgeschwindigkeit eines Partikels der negativen Sinkgeschwindigkeit entspricht, gelten entsprechend dieselben Zusammenhänge für die Dichte und den Durchmesser bei der Berechnung. Folglich besitzen größere PE-HD-Partikel eine größere Auftriebsgeschwindigkeit als kleinere.

Im Allgemeinen wird deutlich, dass kleine Partikel mit niedriger Dichte (hier PE-HD) hauptsächlich entlang der Stromlinien transportiert werden, da sie aufgrund ihrer relativ geringen Masse keinen großen Widerstand bieten. Dadurch können sie entgegen der gängigen Vermutung in der gesamten Wassersäule transportiert werden und auch über längere Strecken in tieferen Wasserschichten verbleiben ohne aufzutreiben. Andererseits können verhältnismäßig schwere Partikel (PVC-P) eine Zeit lang nur knapp unterhalb der Wasseroberfläche fortbewegt werden ohne sofort abzusinken.

In der zweiten Frage geht es um mögliche Auswirkungen der umgebenden Strömungsdynamik und der Geometrie des Flussverlaufes auf den Transport der Mikroplastikpartikel. Die Erhöhung der mittleren Fließgeschwindigkeit des Wassers führten in den Simulationen zu größtenteils erwartbaren Veränderungen des Transportverhaltens. Die Auswertung der Einschwingimulationen zum Erreichen des quasi-stationären Zustandes ergab, dass sich ein Strömungsprofil entlang des Flussabschnittes einstellt, das gleichbleibend für die drei verwendeten Einlassgeschwindigkeiten ist. Eine höhere Geschwindigkeit am Einlass führt dazu, dass sich insgesamt eine höhere mittlere Fließgeschwindigkeit einstellt, wobei die Differenzen zwischen der minimalen und maximalen Fließgeschwindigkeit im Flussabschnitt ebenfalls größer werden. Demnach wird das charakteristische Strömungsfeld vor allem durch die Geometrie des Flusses erzeugt.

Wie deutlich herausgearbeitet worden ist, ist das inhomogene Strömungsfeld mit den lokal teils stark variablen Fließgeschwindigkeiten der entscheidende Faktor für das Transportverhalten der Mikroplastikpartikel. Das Stromlinienbild des Flussabschnittes zeigt, dass eine Hauptströmung vorhanden ist, in der tendenziell die höchsten Fließgeschwindigkeiten vorherrschen und die entlang der gesamten Fließstrecke verläuft. Die räumliche Variabilität der Modellgeometrie in Form verschieden stark gekrümmter Kurven und künstlichen Einbauten erzeugen Sekundärströmungen, die die Hauptströmung überlagern und zu einer Veränderung des Verlaufes der Stromlinien führen. Es entstehen Verwirbelungen der Stromlinien, die teilweise sogar in einer

Fließrichtung entgegengesetzt zur Hauptfließrichtung resultieren. Die simulierten Partikel folgen den Stromlinien und werden entlang diesen transportiert. In diesem Zusammenhang ist die Startposition der Partikel entscheidend. Partikel, die zu Beginn bereits in der Hauptströmung platziert sind, werden in der Regel über weitere Strecken transportiert. Befinden sich die Partikel hingegen außerhalb der Hauptströmung ist eine Vorhersage der Transportstrecke fast unmöglich. Die Ergebnisse der Vorversuche und der Simulationen für Szenario 1 verdeutlichen, dass identische Partikel je nach Startposition ganz unterschiedlich fortbewegt und teilweise sogar entgegen der Hauptfließrichtung transportiert werden. Gleichzeitig verändert sich das Transportverhalten von Partikeln mit identischer Startposition jedoch auch entsprechend ihrer Dichte und Größe. In Abhängigkeit der lokalen Fließgeschwindigkeiten und der intrinsischen Auftriebs- und Sinkgeschwindigkeiten der jeweiligen Partikel können sie den dort vorherrschenden Stromlinien folgen oder aber auch über Umwege in die Hauptströmung gelangen.

Die Startposition der Partikel im Querschnitt bzw. in der Tiefe ist ebenfalls entscheidend für das Transportverhalten. PE-HD-Partikel bewegen sich unabhängig der hier simulierten Durchmesser fast immer in den Wasserschichten fort, in denen sie gestartet sind. Entgegen den bisherigen Vermutungen treiben sie nicht zwangsläufig an die Wasseroberfläche, sondern können insbesondere in der Hauptströmung über weitere Strecken in tieferen Wasserschichten transportiert werden. Das Transportverhalten von PS-Partikeln scheint ebenfalls nur bedingt durch ihren Durchmesser beeinflusst zu werden. Aufgrund der geringfügig höheren Dichte als Wasser, sinken PS-Partikel unter statischen Bedingungen mit zunehmendem Durchmesser schneller ab. In einer fließenden Strömung ist dies jedoch nicht immer der Fall und durch lokale Strömungsbedingungen können PS-Partikel sowohl absinken als auch mit der Strömung transportiert werden. Befinden sich die PS-Partikel bereits an ihrer Startposition relativ nah am Boden des Flusses, ist logischerweise die Wahrscheinlichkeit höher, dass sie auf den Boden des Flusses absinken, was aufgrund der zu den Rändern abnehmenden Fließgeschwindigkeiten erwartbar ist. Sind die PS-Partikel zu Beginn hingegen innerhalb der Hauptströmung positioniert, sortieren sie sich in Abhängigkeit ihres Durchmessers und größere Partikel bewegen sich in tiefere Wasserschichten, in denen höhere lokale Fließgeschwindigkeiten auftreten. Aufgrund dessen werden die größeren Partikel vergleichsweise weiter transportiert als kleinere. Die PVC-P-Partikel weisen insgesamt

ein anderes Verhalten wie die PS-Partikel auf, obwohl beide Kunststoffarten eine höhere Dichte als Wasser besitzen. PVC-P-Partikel, die zu Beginn der Simulation in Bodennähe platziert sind, sinken innerhalb kürzester Zeit ab. Selbst bei gleicher Startposition entlang der Fließstrecke zeichnet sich für verschiedene Partikel kein einheitliches Muster des Transportverhaltens ab. Einzelne PVC-P-Partikel werden bspw. in der mittleren Strömung über eine längere Strecke transportiert als die Vergleichspartikel in der schnellen Strömung. Das Transportverhalten von kleineren Partikeln mit höherer Dichte als das umgebende Fluid ist daher im Allgemeinen schwer vorhersagbar und sehr stark abhängig von den äußeren Bedingungen der Strömungsdynamik.

Für die dritte Fragestellung galt es zu überprüfen, ob sich anhand der Simulationsergebnisse Parameterkonstellationen herausstellen, deren Kombination das Transportverhalten der Mikroplastikpartikel beeinflusst. Anhand der vorliegenden Ergebnisse und der beschriebenen Erkenntnisse hat sich eine Reihenfolge des Einflusses der untersuchten Faktoren herausgebildet. Die Strömungsdynamik und deren Inhomogenität aufgrund der räumlichen Struktur des Gewässers besitzen den größten Einfluss auf das Transportverhalten eines Partikels. Unter gleichbleibenden Strömungsbedingungen ist als nächstes die Startposition der Partikel entscheidend. Anschließend folgen die intrinsischen Partikeleigenschaften (Dichte und Durchmesser), deren Auswirkungen nicht immer eindeutig differenziert werden können. Partikel mit identischer Startposition und gleichem Durchmesser können aufgrund einer verschiedenen Dichte ein komplett unterschiedliches Transportverhalten aufweisen. Gleiches gilt auch für Partikel mit identischer Dichte und annähernd gleicher Startposition. Folglich lässt sich nur schwer das Transportverhalten eines spezifischen Partikels mit einer konkreten Startposition vorhersagen.

Im Hinblick auf reale Emissionen von Mikroplastikpartikeln in Flüssen zeigen die Ergebnisse, dass allgemein gültige Vorhersagen über die Transportstrecken von Mikroplastikpartikeln nicht ableitbar sind. Plastikpartikel werden vermutlich vor allem oberflächennah in Gewässer eingetragen. Allerdings erfolgen sowohl Einleitungen mit gereinigtem Abwasser (Kläranlagen) als auch Abspülungen bei Starkregen in der Regel seitlich und somit außerhalb der Hauptströmung. Daher ist zu erwarten, dass ein großer Teil der über diese Pfade in Gewässer emittierte Mikroplastikpartikel zunächst in die von Sekundärströmungen stark beeinflussten Randbereiche gelangt. Das Ausbreitungsverhalten von Partikelwolken die in solche Bereiche mit sehr inhomogenen

Strömungsbedingungen emittiert werden, kann praktisch nicht vorhergesagt werden. Dies liegt zudem daran, dass die Mikroplastikpartikel aufgrund ihrer unterschiedlichen Dichte und Größe ohnehin ein individuelles Transportverhalten besitzen. Daher ist es bei Probeentnahmen in solchen Bereichen besonders wichtig, das lokale Strömungsfeld zu analysieren.

Identische Mikroplastikpartikel mit gleicher Startposition legen im Mittel längere Transportstrecken in einer schnelleren Strömung zurück. Dies ist mit Blick auf die höhere mittlere Fließgeschwindigkeit des Fluids kein überraschendes Ergebnis. Darüber hinaus wird die Spanne der kürzesten und längsten Transportstrecke identischer Partikel in einer Simulation mit steigender Fließgeschwindigkeit größer. Aufgrund zunehmender Variabilität der lokalen Fließgeschwindigkeiten in einer schnelleren Strömung ist auch diese Veränderung des Transportverhaltens plausibel. Zudem werden größere Mikroplastikpartikel weniger stark von einer Erhöhung der mittleren Fließgeschwindigkeit beeinflusst als kleinere. Da größere Partikel entsprechend mehr Masse und folglich mehr Widerstand gegen die Strömungsbedingungen besitzen, entspricht auch dies den Erwartungen und deckt sich insgesamt mit den vorherigen Beobachtungen.

Die Morphologie des Flusses und die daraus resultierende Inhomogenität der Strömungsdynamik sind der Faktor mit dem stärksten Einfluss auf das Transportverhalten von Mikroplastikpartikeln in einem Fluss. Allerdings liefern die Simulationen wichtige Erkenntnisse in Bezug auf das Verständnis des Transportverhaltens der Partikel in einer fließenden Strömung. Zum einen können anhand der Ergebnisse die Funde bei Messkampagnen von z.B. PVC-P-Partikeln an der Wasseroberfläche oder in der darunterliegenden Schicht erklärt werden. Weiterhin kann auch gezeigt werden, dass PE-HD-Partikel innerhalb der gesamten Wassersäule vorhanden sind und transportiert werden. In vielen Messkampagnen werden Proben nur in einer Wassertiefe, meist knapp unterhalb der Wasseroberfläche entnommen, weshalb es bei einer Hochrechnung auf den gesamten Querschnitt folglich zu einer Über- bzw. Unterschätzung der Ergebnisse einzelner Kunststoffarten kommen kann, falls die Zusammensetzung der Proben nicht repräsentativ genug ist. In diesem Zusammenhang zeigen die Ergebnisse auch, wie wichtig der Standort von Probenahmestellen bei Messungen von Mikroplastik in einem Fluss ist, da dieser für die gewünschte Repräsentativität der Proben ganz entscheidend ist.

Abschließend bestand das letzte Teilziel dieser Arbeit darin, mögliche Empfehlungen für Messkampagnen von Mikroplastikpartikeln in Flüssen abzuleiten. Bei der Planung von Messkampagnen sollte die Morphologie des Flusses in Betracht gezogen werden und das Strömungsfeld (sofern möglich) zumindest grob analysiert werden. Dieser Aspekt wurde bisher weniger berücksichtigt und es wurden z.B. in vielen Studien Proben von Brücken entnommen. Prinzipiell ermöglichen Brücken einen guten Zugang zum Gewässer und auf den ersten Blick erscheint diese Wahl auch sinnvoll, da dies zusätzlich Messungen über den gesamten Querschnitt des Flusses ermöglicht. Insbesondere Probenahmen aus der Hauptströmung in der Flussmitte sind ansonsten ohne den Einsatz eines Bootes nahezu unmöglich. Wie die Analyse der Strömungsdynamik des Modellflussabschnittes zeigt, können sich erhebliche Unterschiede ergeben, je nachdem ob in Fließrichtung vor oder nach der Brücke gemessen wird. Gleichzeitig sollten bei der Wahl der Probenahmestelle auch lokale Gegebenheiten von Punktquellen von Mikroplastik wie bspw. Kläranlagenabläufe berücksichtigt werden, da die Höhe der Einbringung in die Wassersäule Auswirkungen auf das Transportverhalten hat.

Basierend auf den vorhandenen Simulationen und den vorliegenden Ergebnissen sowie den daraus gezogenen Schlussfolgerungen können somit drei Aspekte benannt werden, die im Rahmen von Probenahmen sinnvollerweise zu berücksichtigen wären:

1. Morphologie des Flusses

Innerhalb der Planungsphase einer Messkampagne ist es unbedingt ratsam, den Verlauf des betrachteten Flusses zu analysieren und bei der Standortwahl miteinzubeziehen. Probenahmen in Abschnitten mit kurvenförmigem Verlauf sind grundsätzlich nicht zu empfehlen und würden in jedem Fall die Entnahme mehrerer Proben über den gesamten Querschnitt erfordern, um ein repräsentatives Ergebnis erzielen zu können. Das Wissen über lokale Strömungsbedingungen würde folglich die Aussagekraft einer Messung stark erhöhen.

2. Probenahme von Brücken

Bei der Wahl einer Brücke als Messstandort einer Probenahme in einem Fluss empfiehlt es sich, die Bauweise zu betrachten. Wird durch die Brückenpfeiler eine Verengung der Flussbreite bzw. eine starke Veränderung des Querschnitts erzeugt, ist davon abzuraten, in Fließrichtung nach der Brücke Proben zu entnehmen. Sofern kein anderer Standort

möglich ist, sollten nur Proben in Fließrichtung vor der Brücke entnommen werden, um eine aussagekräftige Messung durchführen zu können.

3. Tiefe der Probenahme

Um repräsentative Angaben über die Mikroplastikbelastung eines Fließgewässers zu erreichen, ist es ratsam, Proben in mehreren Wassertiefen zu entnehmen. Andernfalls könnte sowohl die Mikroplastikbelastung von Partikeln mit geringer Dichte überschätzt als auch von Partikel mit hoher Dichte unterschätzt werden. Ein solches Vorgehen würde zu einer realistischeren Hochrechnung der lokalen Mikroplastikfrachten beitragen.

10 Ausblick

Die Ergebnisse der Simulationen von Mikroplastik in dem Modell-Flussabschnitt konnten neue Erkenntnisse über das Transportverhalten der Partikel in einer fließenden Strömung liefern. Gleichzeitig verdeutlichen sie die Wichtigkeit darüber, dieses Wissen zu erweitern. Im Laufe der Simulationsarbeiten ergaben sich einige potentielle Erweiterungen des Modells, die im Folgenden erläutert werden.

Mit dem vorhandenen Modell können innerhalb einer Simulation nur Partikel mit einer festgelegten Dichte simuliert werden. Indem die Simulationsergebnisse unter gleichen Strömungsbedingungen eines Szenarios von Partikeln mit unterschiedlichen Dichten zeitgleich in ParaView betrachtet wurden, konnte ein Vergleich von verschiedenen dichten Mikroplastikpartikeln durchgeführt werden. Da die Partikel in demselben Strömungsfeld simuliert worden sind, müssten sie auch innerhalb einer Simulation das identische Transportverhalten aufweisen. Theoretisch wäre es mit dem bestehenden Modell möglich, Mikroplastikpartikel beliebiger Dichte zu simulieren und miteinander zu vergleichen, indem für jede gewünschte Dichte eine separate Simulation gerechnet wird. Dies würde jedoch einen immensen Rechenaufwand bedeuten und erscheint deshalb nicht zielführend. Daher wäre es von Interesse, eine Möglichkeit zu finden, mit der im Modell innerhalb eines Simulationslaufes Partikel mit verschiedenen Dichten und ggf. kontinuierlichen Werten gleichzeitig simuliert werden können. Die Kombination aus einer variablen Dichte und einem stochastischen Durchmesser würde eine realistischere Darstellung einer Partikelwolke ermöglichen.

Darüber hinaus wären auch Simulationen von kleineren Partikeldurchmessern von Interesse. Die Simulationsergebnisse zeigen, dass sich insbesondere für die PVC-P-Partikel mit verhältnismäßig großer Dichte Größenbereiche abzeichnen, innerhalb derer die Partikel ein sehr ähnliches Transportverhalten besitzen. Die kleinsten betrachteten Partikeldurchmesser betragen $79 \mu\text{m}$, weshalb weitere Simulationen von kleineren Partikeln sinnvoll erscheinen, um zu überprüfen, ob eine weitere Veränderung des Transportverhaltens für sehr kleine Mikroplastikpartikel vorhanden ist. Für Szenario 2 wurden bereits einzelne Simulationen mit einer angepassten Rosin-Rammler-Verteilung für entsprechend kleinere Partikeldurchmesser gerechnet. Für eine systematische Auswertung sind weitere Simulationen jedoch unerlässlich, die im Rahmen dieser Arbeit aus Zeitgründen nicht mehr durchgeführt werden konnten.

Neben der Vergrößerung des Wertebereiches der zu betrachteten Partikeldurchmesser wäre auch die Verlängerung des Modell-Flussabschnittes und ebenfalls die Simulation des Transportes über einen längeren Zeitraum interessant. Aufgrund der damit verbundenen, deutlich längeren Rechenzeiten für die Simulationen wurde sich im Rahmen dieser Arbeit auf kürzere Simulationszeiten beschränkt. Es wäre jedoch auch von Interesse zu ermitteln, ob es für die PS- und PVC-P-Partikel unter gewissen Bedingungen eine maximale Transportstrecke gibt und die Partikel irgendwann auf den Boden des Flusses absinken.

Ein weiterer Aspekt, der Potential zur Erweiterung besitzt, ist die Art der Einbringung der Mikroplastikpartikel. Im vorhandenen Modell werden die Partikel zum Startzeitpunkt im Strömungsfeld positioniert, wodurch eine einmalige Emission simuliert wird. Es stellt sich daher die Frage, inwiefern sich das allgemeine Transportverhalten verändern würde, wenn ein wiederholter bzw. kontinuierlicher Eintrag von Mikroplastikpartikeln in die Strömung vorhanden wäre. Im Hinblick auf einen realen Fluss könnte damit eine Emission von Mikroplastikpartikeln durch einen Kläranlagenablauf dargestellt werden. Im ersten Schritt müsste dazu die Zugabe der Partikel in die Modellumgebung in einem vorgegebenen Zeitintervall implementiert werden. Anschließend müsste die Geometrie um den Ablauf der Kläranlage erweitert und entsprechend neu modelliert werden. Anschließend müsste auch eine erneute Analyse des Strömungsfeldes erfolgen, um die Plausibilität der neuen Strömungsdynamik zu überprüfen. Kläranlagenabläufe sind meist näherungsweise senkrecht zur Fließstrecke ausgerichtet und das Wasser im Ablauf inklusive der potentiell enthaltenen Partikel fließt mit einer höheren Fließgeschwindigkeit in den Fluss. Um die Umsetzbarkeit eines solchen Ablaufes zu testen, erscheint es sinnvoll, diesen im Vorfeld separat zu modellieren und entsprechende Testsimulationen durchzuführen.

Abschließend lässt sich sagen, dass bei der Modellierung von Mikroplastikpartikeln in einer fließenden Strömung noch viele weitere interessante Aspekte zu berücksichtigen wären. Die meisten würden bei der Umsetzung allerdings eine vollständige Neuimplementation der Modellgeometrie mit erheblichem Arbeitsaufwand erfordern. Die damit verbundene größere Geometrie würde auch den ohnehin schon hohen Rechenaufwand weiter ansteigen lassen und somit längere Rechenzeiten zur Folge haben. Bei Überlegungen zu Modellerweiterungen muss somit zwischen Rechenaufwand und möglichem Erkenntnisgewinn sehr gut abgewogen werden. Das im Rahmen dieser Arbeit

entwickelte Modell bietet jedoch eine gute Grundlage, einige der vorgeschlagenen Erweiterungen umzusetzen, um darüber weitere Erkenntnisse über das Transportverhalten von Mikroplastikpartikeln in einer fließenden Strömung erlangen zu können.

Literaturverzeichnis

- AbfKlärV (2017): Verordnung über Verwertung von Klärschlamm, Klärschlammgemisch und Klärschlammkompost (Klärschlammverordnung – AbfKlärV). BGBl. I S. 3465
- Abts, Georg (2016): Kunststoff-Wissen für Einsteiger. 3. Auflage, München: Carl Hanser Verlag
- An, Lihui, Liu, Qing, Deng, Yixiang, Wu, Wennan, Yiyao Gao and Wei Ling (2020): Sources of Microplastic in the Environment in: Defu He and Yongming Luo (Hrsg.): Microplastics in Terrestrial Environments – The Handbook of Environmental Chemistry, Vol. 95, Cham: Springer, S. 143-159
- Anagnosti, Lamprini, Varvaresou, Athanasia, Pavlou, Panagoula, Evangelina Protopapa and Vilelmine Carayanni (2021): Worldwide actions against plastic pollution from microbeads and microplastics in cosmetics focusing on European policies. Has the issue been handled effectively? *Marine Pollution Bulletin*, 162, 111883, doi.org/10.1016/j.marpolbul.2020.111883
- Arias, Andreas H., Alfonso, Maria Belen, Girones, Lautaro, Maria Cintia Piccolo and Jorge Marcovecchio (2021): Synthetic microfibers and tyre wear particles pollution in aquatic systems: Relevance and mitigation strategies, *Environmental Pollution*, 295 (12), 118607, doi.org/10.1016/j.envpol.2021.118607
- Ayachit, Utkarsh (2019): The ParaView Guide – Community Edition, Updated for ParaView version 5.6. Kitware Inc.©
- Bagaev, Andrei, Esiukova, Elena, Litvinyuk, Daria, Chubarenko, Irina, Veereasingam, Subramanian, Ramadoss Venkatachalapathy and Liudmila Verzhevskaya (2021): Investigations of plastic contamination of seawater, marine and coastal sediments in the Russian seas: a review. *Environmental Science and Pollution Research*, 28, 32264-32281, doi.org/10.1007/s11356-021-14183-z
- Bai, Mengyu, Lin, Yan, Hurley, Rachel R., Lixin Zhu and Daoji Li (2022): Controlling Factors of Microplastic Riverine Flux and Implications for Reliable Monitoring Strategy. *Environmental Science & Technology*. 56, 48-61, doi.org/10.1021/acs.est.1c04957
- Baker, A. J. (1974): A finite element solution algorithm for the Navier-Stokes equations. Contractor Report, National Aeronautics and Space Administration, Washington, D. C., 20546
- Baulch, Sarah and Clare Perry (2014): Evaluation the impacts of marine debris on cetaceans. *Marine Pollution Bulletin*, 80 (1-2), 210-221 doi.org/10.1016/j.marpolbul.2013.12.050
- Besseling, Ellen, Quik, Joris T.K., Muzhi Sun and Albert A. Koelmans (2016): Fate of nano- and microplastic in freshwater systems: A modelling study. *Environmental Pollution*, 220, doi.org/10.1016/j.envpol.2016.10.001
- Black, Kevin S., Athey, S., Peter Wilson and Darran Evans (2007): The use of particle tracking in sediment transport studies: a review. *Geological Society*, 274, 73-91, doi.org/10.1144/GSL.SP.2007.274.01.09
- Borrelle, Stephanie B., Ringma, Jeremy, Law, Kara Lavender, Monnahan, Cole C., Lebreton, Laurent, McGivern, Alexis, Murphy, Erin, Jambeck, Jenna, Leonhard, George H., Hilleary, Michelle A., Eriksen, Marcus, Possingham, Hugh P., De Frond, Hannah, Gerber, Leah R., Polidoro, Beth, Tahir, Akbar, Bernhard, Miranda, Mallos, Nicholas, Megan Barnes and Chelsea M. Rochman (2020): Predicted growth in plastic waste exceeds efforts to mitigate plastic pollution. *Science*, 369 (6510), 1515-1518, doi.org/10.1126/science.aba365
- Boucher, Julien and Guillaume Billard (2019): The challenges of measuring plastic pollution. *Field Actions Science Report*, 19, 68-75
- Büks, Frederick and Martin Kaupenjohann (2020): Global concentrations of microplastics in soils – a review. *SOIL*, 6 (2), 649-662, doi.org/10.5194/soil-6-649-2020
- Chen, Hui Ling, Nath, Tapan Kumar, Chong, Siewhui, Foo, Vernon, Chris Gibbins and Alex M. Lechner (2021): The plastic waste problem in Malaysia: management, recycling and disposal of local and global plastic waste. *SN Applied Science*, 3 (437), doi.org/10.1007/s42452-021-04234-y
- ChesROMS Team (2020). ChesROMS (Chesapeake Bay ROMS Community Model), Model Item, OpenGMS, <https://geomodeling.njnu.edu.cn/modelItem/7d340762-438b-4c12-be9e-7dea0d2ab926>, abgerufen am 14.02.2023

- Chorin, Alexander and Jerrold E. Marsden (2000) A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics. 4. Auflage, New York: Springer-Verlag
- Clemmens, A. J., F. M. Holly and W. Schuurmans (1993): Description and evaluation of program: DUFLOW. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*, 119 (4), 724-734, doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9437(1993)119:4(724)
- Corey, Arthur Thomas (1949): Influence of shape on the fall velocity of sand grains. Thesis, Agricultural and Mechanical College Fort Collins, Colorado
- Corcoran, Patricia L., Mark C. Biesinger and Meriem Grifi (2009): Plastic and beaches: A degrading relationship. *Marine Pollution Bulletin*, 58 (1), 80-84, doi.org/10.1016/j.marpolbul.2008.08.022
- Cowger, Win, Gray, Andrew B., Guilinger, James J., Brandon Fong and Kryss Waldschläger (2021): Concentration Depth Profile of Microplastic Particles in River Flow and Implications for Surface Sampling. *Environmental Science & Technology*, 55, 6032-6041, doi.org/10.1021/acs.est.1c01768
- De Leo, Annalisa, Cutroneo, Laura, Damien Sous and Alessandro Stocchino (2021): Settling Velocity of Microplastics Exposed to Wave Action. *Journal of Marine Science and Engineering*, 9, 142, doi.org/10.3390/jmse9020142
- Di Benedetto, Ana Paula Madeira and Danielle Awabdi (2014): How marine debris ingestion differs among megafauna species in a tropical coastal area. *Marine Pollution Bulletin*, 88 (1-2), 86-90, doi.org/10.1016/j.marpolbul.2014.09.020
- Dietrich, William E. (1982): Settling Velocity of Natural Particles. *Water Resources Research*, 18 (6), 1615-1626, doi.org/10.1029/WR018i006p01615
- Doucet, Jocelyn, François Bertrand and Jamal Chaouki (2008): An extended radioactive particle tracking method for systems with irregular moving boundaries. *Powder Technology*, 181 (2), 195-204, doi.org/10.1016/j.powtec.2006.12.019
- EIA (2021): The Truth Behind Trash – The scale and impact of the international trade of plastic waste. *Environmental investigation agency*, Wales and England
- van Emmerik, Tim, Mellink, Yvette, Hauk, Rahel, Kryss Waldschläger and Louise Schreyers (2022a): Rivers as Plastic Reservoirs. *Frontiers in Water*, 3:786936. doi:10.3389/frwa.2021.786936 <
- van Emmerik, Tim, de Lange, Sjoukje Irene, Frings, Roy, Schreyers, L., Aalderink, H., Leusink, J., Begemann, F., Hamers, E., Hauk, R., Janssens, N., Joosse, N., Kelder, D., van der Kuijl, T., Lotcheris, R., Löhr, A., Mellink, Y., Pinto, R., Tasserou, P., P. Vriend and Vivien Vos (2022b): Hydrology as a driver of floating river plastic transport. *Earth and Space Science Open Archive PB*, 23, doi:10.1002/essoar.10510983.1
- van Emmerik, Tim and Anna Schwarz (2019): Plastic debris in rivers. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Water*, 7 (1), doi.org/10.1002/wat2.1398
- Eerkes-Medrano, D., R.C. Thompson and D. C. Aldridge (2015): Microplastics in freshwater systems: A review of the emerging threats, identification of knowledge gaps and prioritisation of research needs. *Water Research* 75, 63-82, doi.org/10.1016/j.watres.2015.02.012
- EUNOMIA (2016): Plastics in the Marine Environment. Eunomia Research & Consulting Ltd, Bristol
- Europäisches Parlament (2020): Plastik im Meer: Fakten, Auswirkungen und neue EU-Regelungen; <https://www.europarl.europa.eu/news/de/headlines/society/20181005STO151110/plastik-im-meer-fakten-auswirkungen-und-neue-eu-regelungen>; abgerufen am: 28.09.2022
- Ferziger, Joel H., Milovan Perić und Robert L. Street (2020): Numerische Strömungsmechanik. 2. Auflage, Berlin: Springer Vieweg
- van Franeker, Jan A., Blaize, Christine, Danielsen, Johannis, Fairclough, Keith, Gollan, Jane, Guse, Nils, Hansen, Poul-Lindhard, Heubeck, Martin, Jensen, Jens-Kjeld, Le Guillou, Gilles, Olsen, Bergur, Olsen, Kåre-Olav, Pedersen, John, Eric W.M. Stienen and Daniel M. Turner (2011): Monitoring plastic ingestion by the northern fulmar *Fulmarus glacialis* in the North Sea. *Environmental Pollution*, 159 (10), 2609-2615, doi.org/10.1016/j.envpol.2011.06.008
- Gajanur, Anya Roopa and Zeehan Jafaar (2022): Abandoned, lost, or discarded fishing gear at urban coastlines. *Marine Pollution Bulletin*, 175, doi: 10.1016/j.marpolbul.2022.113341

- Gregory, John (2006): *Particles in Water. Properties and Processes*, Boca Raton: CRC Press
- Gregory, Murray R. (2009). Environmental implications of plastic debris in marine settings—entanglement, ingestion, smothering, hangers-on, hitch-hiking and alien invasions. *Philosophical Transactions of the Royal Society, B: Biological Sciences*, 364 (1526), 2013–2025.
- Greenshields, Christopher J. (2019): OpenFOAM – The OpenFoam Foundation, User Guide – version 7. OpenFOAM Foundation Ltd.
- Habib, Rana Zeeshan, Thies Thiemann and Ruwaya Al Kendi (2020): Microplastics and Wastewater Treatment Plants – A Review. *Journal of Water Resources and Protection*, 12 (1), 1-35, doi.org/10.4236/jwarp.2020.121001
- ter Halle, Alexandra, Ladirat Lucie, Gendre, Xavier, Goudouneche, Dominique, Pusineri, Claire, Routaboul, Corinne, Tenaillau, Christophe, Benjamin Duployer and Emile Perez (2016): Understanding the Fragmentation Pattern of Marine Plastic Debris. *Environmental Science & Technology*, 50 (11), 5668-5675 doi.org/10.1021/acs.est.6b00594
- Harlow, Francis H. and J. Eddie Welch (1965): Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface. *Physics of Fluids*, 8 (12), 2182–2189, doi.org/10.1063/1.1761178
- Hartmann, Nanna B., Hüffer, Thorsten, Thompson, Richard C., Hassellöv, Martin, Verschoor, Anja, Daugaard, Anders E., Rist, Sinja, Karlsson, Therese, Brennholt, Nicole, Cole, Matthew, Herrling, Maria P., Hess, Maren C., Ivleva, Natalia P., Amy L. Lusher and Martin Wagner (2019): Are We Speaking the Same Language? Recommendations for a Definition and Categorization Framework for Plastic Debris. *Environmental Science & Technology*, 53, 1039–1047, doi.org/10.1021/acs.est.8b05297
- Hermesen, Enya, Mintenig, Svenja M., Ellen Besseling and Albert A. Koelmans (2018): Quality Criteria for the Analysis of Microplastic in Biota Samples: A Critical Review. *Environmental Science & Technology*, 52 (18), 10230-10240, doi.org/10.1021/acs.est.8b01611
- Hirt, C. W. and B. D. Nichols (1981): Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39, 201–225, doi.org/10.1016/0021-9991(81)90145-5
- Horton, Alice A. (2022): Plastic pollution: When do we know enough?. *Journal of Hazardous Materials*, 422, 126885, doi.org/10.1016/j.jhazmat.2021.126885
- Iwasaki, Shinsuke, Isobe, Atsuhiko, Kako, Shin'ichiro, Keiichi Uchida and Tadashi Tokai (2017): Fate of microplastics and mesoplastics carried by surface currents and wind waves: A numerical model approach in the Sea of Japan. *Marine Pollution Bulletin*, 121 (1-2), 85-96, doi: 10.1016/j.marpolbul.2017.05.057
- Jalón.Rojas, L., Xiao Hua Wang and E. Fredj (2019): A 3D numerical model to Track Marine Plastic Debris (TrackMPD): sensitivity of microplastic trajectories and fate to particle dynamical properties and physical processes. *Marine Pollution Bulletin*, 141 (8), 256-272
- Jambeck, Jenna R., Geyer, Roland, Wilcox, Chris, Siegler, Theodore R., Perryman, Miriam, Andrady, Anthony, M., Ramani Narayan and K. Lavender Law (2015): Plastic waste inputs from land into the ocean. *Science*, 347, 768-771
- Jasak, Hrvoje (1996): *Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows*. London, Imperial College of Science, Technology & Medicine, Dissertation, hdl.handle.net/10044/1/8335
- Jin, T., Ramos, P. X., L. Schindfessel and T. De Mulder (2020): Numerical study of the flow and passive scalar transport in an open-channel confluence with a flat and a degraded fixed bed in: Uijtewaal, Wim, Franca, Mário J., Valero, Daniel, Chavarrias, Victor, Arbós, Clàudia Ylla, Ralph Schielen and Alessandra Crosato (Hrsg.) (2020): *River Flow 2020 – Proceedings of the 10th Conference on Fluvial Hydraulics*, Delft: CRC Press
- Jirka, Gerhard H. and Cornelia Lang (2009): *Einführung in die Gerinnehydraulik*. Karlsruhe: Universitätsverlag Karlsruhe
- JRC (2013): *Guidance on Monitoring of Marine Litter in European Seas. JRC Scientific and Policy Reports*, MSFD Technical Subgroup on Marine Litter, Publication Office of the European Union, Luxembourg.

- Karlsson, Therese M., Arneborg, Lars, Broström, Göran, Carney Almroth, Bethanie, Lena Gipperth and Martin Hassellöv (2018): The unaccountability case of plastic pellet pollution. *Marine Pollution Bulletin*, 129, 52-60, doi.org/10.1016/j.marpolbul.2018.01.041
- Kataoka, Tomoya, Hirofumi Hianta and Shigeru Kato (2015): Backwash process of marine macroplastics from a beach by nearshore currents around a submerged breakwater. *Marine Pollution Bulletin*, 101, 539-548, doi: 10.1016/j.marpolbul.2015.10.060
- Kathmullina, Lilya and Irina Chubarenko (2019): Transport of marine microplastic particles: why is it so difficult to predict?. *Anthropocene Coast*, 2, 293-305
- Kathmullina, Lilya and Igor Isachenko (2017): Settling velocity of microplastic particles of regular shapes. *Marine Pollution Bulletin*, 114 (2), 871-880, doi.org/10.1016/j.marpolbul.2016.11.024
- Kawecki, Delphine and Bernd Nowack (2019): Polymer-Specific Modelling of the Environmental Emission of Seven Commodity Plastics As Macro- and Microplastics. *Environmental Science & Technology*, 53, 9664-9676, doi.org/10.1021/acs.est.9b02900
- Kerpen, Nils B., Schlurmann, Torsten, Schendel, Alexander, Gundlach, Janneck, Daniel Marquard and Markus Hüpgen (2020): Wave-Induced Distribution of Microplastic in the Surf Zone. *Frontiers in Marine Science*, 7:590565, https://doi.org/10.3389/fmars.2020.590565
- Klasmeier, Jörg, Ehling, Christian, Dominique Remy and Elke Fries (2014): Microplastics in the marine environmental – How can we identify potential risks? *CIESM Workshop Monograph*, 107-114
- Klein, Kristina, Heß, Sebastian, Nungeß, Sandra, Ulrike Schulte-Oehlmann and Jörg Oehlmann (2021): Particle shape does not affect ingestion and egestion of microplastics by freshwater shrimp. *Neocardidina palamata. Environmental Science and Pollution Research*, 28, 62246-62254
- Koelmans, Albert A., Redondo-Hasselerharm, Paula E., Nor, Nur Hazimah, Mohamed, de Ruiter, Vera N., Svenja M. Mintenig and Merel Kooi (2022): Risk assessment of microplastic particles. *Nature Reviews Materials*, 7, 138-152, doi.org/10.1038/s41578-021-00411-y
- Koelmans, Albert A., Ellen Besseling and Edwin M. Foekema (2013): Leaching of plastic additives to marine organisms. *Environmental Pollution*, 187, 49-54, doi.org/10.1016/j.envpol.2013.12.013
- Kooi, Merel, Reiser, Julia, Slat, Boyan, Ferrari, Francesco F., Schmid, Moritz S., Cunsolo, Serena, Roberto Brambini, Noble Kimberly, Sirks, Lys-Anne, Linders, Theo E. W., Rosanna I. Schoeneich-Argent and Albert A. Koelmans (2016): The effect of particle properties on the depth profile of buoyant plastics in the ocean. *Scientific Reports*, 6, 33882, doi.org/10.1038/srep33882
- Kowalski, Nicole, Aurelia M. Reichardt and Joanna J. Waniek (2016): Sinking rates of microplastics and potential implications of their alteration by physical, biological, and chemical factors. *Marine Pollution Bulletin*, 109, 310-319, doi.org/10.1016/j.marpolbul.2016.05.064
- Kwon, Hyuk Jun, Hidayaturrehman, Haerul, Shaik Gouse Peera and Tae Gwan Lee (2022): Elimination of Microplastics at Different Stages in Wastewater Treatment Plants. *Water*, 14, 2404, doi.org/10.3390/w14152404
- Lebreton, Laurent, Matthias Egger and Boyant Slat (2019): A global mass budget for positively buoyant macroplastic debris in the ocean. *Scientific Reports*, 9, 12922, doi.org/10.1038/s41598-019-49413-5
- Lebreton, Laurent C. M., van der Zwet, Joost, Damsteeg, Jan-Willem, Slat, Boyan, Anthony Andrady and Julia Reisser (2017): River Plastic emissions to the world's ocean. *Nature Communications*, 8, 15611, doi: 10.1038/ncomms15611
- Lett, Christophe, Verley, Philippe, Mullon, Christian, Parafa, Carolina, Timothée Borchier, Pierrick Penven and Bruno Blanke (2008): A Lagrangian tool for modelling ichthyoplankton dynamics. *Environmental Modelling & Software*, 23 (9), 1210-1214, doi.org/10.1016/j.envsoft.2008.02.005
- Leveque, Randall J. (2002): Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems. 1. Auflage, New York: Cambridge University Press
- Li, W.C., H. F. Tse and L. Fok (2016): Plastic waste in the marine environment: A review of sources, occurrence and effects. *Science Total Environmental*, 566-567, 333-349
- López, Alexander G., Najjar, Raymond G., Friedrichs, Marjorie A.M., Michael A. Hickner and Denise H. Wardrop (2021): Estuaries as Filters for Riverine Microplastics: Simulations in a Large, Coastal-Plain Estuary. *Frontiers Marine Science*, 8:715924. doi:10.3389/fmars.2021.715924

- Mani, Thomas, Hauk, Armin, Ulrich Walter and Patricia Burkhardt-Holm (2015): Microplastics profile along the Rhine River. *Scientific Reports*, 5, 17988, doi.org/10.1038/srep17988
- MARPOL (1973): Internationales Übereinkommen zur Verhütung der Meeresverschmutzung durch Schiffe
- Mascarenhas, Rita, Robson Santos and Douglas Zeppelini (2004): Plastic debris ingestion by sea turtle in Paraíba, Brazil. *Marine Pollution Bulletin*, 49 (4), 354-355, doi.org/10.1016/j.marpolbul.2004.05.006
- McCormick, Amanda R., Hoellein, Timothy J., London, Maxwell G., Hittie, Joshua, John W. Scott and John J. Kelly (2016): Microplastic in surface waters of urban rivers: concentration, sources, and associated bacterial assemblages. *Ecosphere*, 7(11), doi.org/10.1002/ecs2.1556
- Meijer, Lourens J. J., van Emmerik, Tim, van der Ent, Ruud, Christian Schmidt and Laurent Lebreton (2012): More than 1000 rivers account for 80% of global riverine plastic emissions into the ocean. *Science Advance*, 7, eaaz5803
- Moore, Charles James (2008): Synthetic polymers in the marine environment: A rapidly increasing, long-term threat. *Environmental Research*, 108 (2), 131-139
- Moore, Charles James (2003): Trashes Across the Pacific Ocean, Plastics, Plastics Everywhere. *Natural History*, 112 (9), 46-51
- Mountford, A.S. and M.A. Morales Maqueda (2019): Eulerian Modelling of the Three-Dimensional Distribution of Seven Popular Microplastic Types in the Global Ocean. *Journal of Geophysical Research*, 124 (12), 8558-8573, doi.org/10.1029/2019JC015050
- Mrosovsky, Nicholas, Geraldine D. Ryan and Michael C. James (2009): Leatherback turtles: The menace of plastic. *Marine Pollution Bulletin*, 58 (2), 287-289, doi.org/10.1016/j.marpolbul.2008.10.018
- MSRL (2008): Meeresstrategie-Rahmenrichtlinie. Richtlinie 2008/56/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 17. Juni 2008
- Naidoo, Trishan, David Glassom and Albertus J. Smit (2015): Plastic pollution in five urban estuaries of KwaZulu-Natal, South Africa. *Marine Pollution Bulletin*, 101 (1), 473-480, doi.org/10.1016/j.marpolbul.2015.09.044
- Naudascher, Eduard (1992): *Hydraulik der Gerinne und Gerinnebauwerke*, 2. Auflage, Wien: Springer Verlag
- Neumann, Daniel, Ulrich Callies and Michael Matthis (2014): Marine litter ensemble transport simulations in the southern North Sea. *Marine Pollution Bulletin*, 86 (1-2), 219-228, doi.org/10.1016/j.marpolbul.2014.07.016
- Piehl, Sarah, Hauk, Rahel, Robbe, Esther, Richter, Boris, Kachholz, Frauke, Schilling, Jannik, Lenz, Robin, Fischer, Dieter, Fischer, Franziska, Matthis Labrenz and Gerald Schernewski (2021): Combined Approaches to Predict Microplastic Emissions Within an Urbanized Estuary (Warnow, Southwestern Baltic Sea). *Frontiers Environmental Science*, 9, 616765, doi.org/10.3389/fenvs.2021.616765
- PlasticsEurope (2022): The circular economy for plastics – a European Overview. *Plastic Europe: Enabling a sustainable future*, Brussels, Belgium
- PlasticsEurope (2021): Plastics – the Facts 2021, An analysis of European plastic production, demand and waste data. *Plastic Europe: Enabling a sustainable future*, Brussels, Belgium
- Prandtl, Ludwig (2022): Prandtl - Führer durch die Strömungslehre. Grundlagen und Phänomene, in: Oertel Jr., Herbert (Hrsg.), 15. Auflage, Wiesbaden: Springer Vieweg
- Prata, Joana Correia, da Costa, João P., Armando C. Duarte and Teresa Rocha-Santos (2019): Methods for sampling and detection of microplastics in water and sediment: A critical review. *Trends in Analytical Chemistry*, 110, 150-159, doi.org/10.1016/j.trac.2018.10.029
- Putnam, William C. (1969): *Geologie: Einführung in ihre Grundlagen*. Berlin, Boston: De Gruyter, doi.org/10.1515/9783110817775
- Quik, Joris T.K., Jeroen J.M. de Klein and Albert A. Koelmans (2015): Spatially explicit fate modelling of nanomaterials in natural waters. *Water Research*, 80, 200-208, doi.org/10.1016/j.watres.2015.05.025
- Rasmussen, Lasse Abraham, Iordachescu, Lucian, Susanne Tumlin and Jes Vollertsen (2021): A complete mass balance for plastic in a waste water treatment plant – Macroplastics contributes more than microplastics. *Water Research*, 201, 117307, doi.org/10.1016/j.watres.2021.117307

- Pico, Yolanda, Ahmed Alfarhan and Damia Barcelo (2019): Nano- and microplastic analysis: Focus on their occurrence in freshwater ecosystems and remediation technologies. *Trends in Analytical Chemistry*, 113, 409-425, doi.org/10.1016/j.trac.2018.08.022
- Razeghi, Nastaran, Hamidian, Amir Hossein, Wu, Chenxi, Yu Zhang and Mi Yang (2020): Microplastic sampling techniques in freshwater and sediments: a review. *Environmental Chemistry Letters*, 19, 4225-4252, doi.org/10.1007/s10311-021-01227-6
- Rellán, Adriana García, Ares, Diego Vázquez, Brea, Constantino Vázquez, Ahinara Francisco López and Pastora M. Bello Bugallo (2023): Sources, sinks and transformations of plastics in our oceans: Review, management strategies and modelling. *Science of the Total Environment*, 854, 158745, doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.158745
- Robinson, James C., José L. Rodrigo and Witold Sadowski (2016): *The Three-Dimensional Navier-Stokes Equations*. 1. Auflage, Cambridge: Cambridge University Press
- Rosin, P. and R. Rammler (1934): Die Kornzusammensetzung des Mahlgutes im Lichte der Wahrscheinlichkeitslehre. *Kolloid-Zeitschrift*, 67, 16-26, doi.org/10.1007/BF01439773
- Rusche, Henrik (2002): *Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions*. London, Imperial College of Science, Technology & Medicine, Dissertation, hdl.handle.net/10044/1/8110
- Scherer, Christian, Brennholt, Nicole, Georg Reifferscheid and Martin Wagner (2017): Feeding type and development drive ingestion of microplastics by freshwater invertebrates. *Scientific Reports*, 7:17006, doi.org/10.1038/s41598-017-17191-7
- Schernewski, Gerald, Radtke, Hagen, Hauk, Rahel, Baresel, Christian, Olshammar, Mikael, Robert Osinski and Sonja Oberbeckmann (2020): Transport and Behavior of Microplastics Emissions From Urban Sources in the Baltic Sea. *Frontiers Environmental Science* 8:579361. doi: 10.3389/fenvs.2020.579361
- Schmidt, Christian, Kumar, Rohini, Soohyun Yang and Olaf Büttner (2020): Microplastic particle emission from wastewater treatment plant effluents into river networks in Germany: Loads, spatial patterns of concentrations and potential toxicity. *Science of The Total Environment*, 737, 139544, doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.139544
- Schmidt, Christian, Tobias Krauth and Stephan Wagner (2017): Export of Plastic Debris by Rivers into the Sea. *Environmental Science & technology*, 51 (21), 12246-12253
- Schmidt, Katharina, Bochow, Mathias, Imhof, Hannes K., Oswald, Sascha E. (2018): Multi-temporal survey for microplastic particles enabled by a novel and fast application of SWIR imaging spectroscopy – Study of an urban watercourse traversing the city of Berlin, Germany. *Environmental Pollution*, 239, 579-589, doi.org/10.1016/j.envpol.2018.03.097
- Schröder, Andreas and Daniel Schanz (2023): 3D Lagrangian Particle Tracking in Fluid Mechanics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 55, 511-540, doi.org/10.1146/annurev-fluid-031822-041721
- Schulz, Marcus, Clemens, Thomas, Förster, Harald, Harder, Thorsten, Fleet, David, Gaus, Silvia, Grave, Christel, Flegel, Imme, Eckart Schrey and Eike Hartwig (2015): Statistical analyses of the results of 25 years of beach litter surveys on the south-eastern North Sea coasts. *Marine Environmental Research*, 109, 21-27, doi.org/10.1016/j.marenvres.2015.04.007
- Schulz, Marcus, Priegnitz, Jan, Klasmeier, Jörg, Heller, Stefan, Stefan Meinecke and Michael Feibicke (2012): Effect of bed surface roughness on longitudinal dispersion in artificial open channels. *Hydrological Processes*, 26, 272-280, doi.org/10.1002/hyp.8229
- Schwarzenbach, Rene P., Philip M. Gschwend and Dieter M. Imboden (2003): *Environmental organic chemistry*. 2. Auflage, Hoboken: John Wiley & Sons
- van Sebille, Erik, Griffies, Stephen M., Abernathey, Ryan, Adams, Thomas P., Berloff, Pavel, Biastoch, Arne, Blanke, Bruno, Chassignet, Eric P., Cheng, Yu, Cotter, Colin J., Deleersnijder, Eric, Döös, Kristofer, Drake, Henri F., Drijfhout, Sybren, Gary, Stefan F., Heemink, Arnold W., Kjellsson, Joakim, Koszalka, Inga Monika, Lange, Michael, Lique, Camille, MacGilchrist, Graeme A., Marsh, Robert, Adame, C. Gabriela Mayorga, McAdam, Ronan, Nencioli, Francesco, Paris, Claire B., Piggott, Matthew D., Polton, Jeff A., Rühls, Siren, Shah, Syed H.A.M., Thomas, Matthew D., Wang, Jinbo, Wolfram, Phillip J., Laure Zanna and Jan D. Zika (2018): Lagrangian ocean analysis: Fundamentals and practices. *Ocean Modelling*, 121, 49-75, doi.org/10.1016/j.ocemod.2017.11.008

- Shim, Won Joon, Kim, Seung-Kyu, Lee, Jongsu, Eo, Soeun, Ji-Su Kim and Chengjun Sun (2022): Toward a long-term monitoring program for seawater plastic pollution in the north Pacific Ocean: Review and global comparison. *Environmental Pollution*, 311 (4), 119911, doi.org/10.1016/j.envpol.2022.119911
- Siegel, D. A. and W. G. Deuser (1997): Trajectories of sinking particles in the Sargasso Sea: modelling of statistical funnels above deep-ocean sediment traps. *Deep-Sea Research*, 44 (9-19), 1519-1541, doi.org/10.1016/S0967-0637(97)00028-9
- Siegfried, Max, Koelmans, Albert A., Ellen Besseling and Carolien Kroeze (2017): Export of microplastics from land to sea. A modelling approach. *Water Research*, 127, 249-257, doi.org/10.1016/j.watres.2017.10.011
- Sigler, Michelle (2014): The Effects of Plastic Pollutions on Aquatic Wildlife: Current Situations and Future Solutions. *Water Air Soil Pollution*, 225, 2184, doi.org/10.1007/s11270-014-2184-6
- Silva, Ana B., Bastos, Ana S., Justino, Celine I.L., da Costa, João P., Armando C. Duarte and Teresa A.P. Rocha-Santos (2018): Microplastics in environment: Challenges in analytical chemistry – A review. *Analytica Chimica Acta*, 1017, 1-19, doi.org/10.1016/j.aca.2018.02.04
- Skalska, Karolina, Ockelford, Annie, James E. Ebdon and Andre B. Cundy (2020): Riverine microplastics: Behaviour, spatio-temporal variability, and recommendations for standardised sampling and monitoring. *Journal of Water Process Engineering*, 38 (101600), doi.org/10.1016/j.jwpe.2020.101600
- Song, Young Kyoung, Hong, Sang Hee, Jang, Mi, Han, Gi Myung, Seung Wong Jung and Won Joon Shim (2017): Combined Effects of UV Exposure Duration and Mechanical Abrasion on Microplastic Fragmentation by Polymer Type. *Environmental Science & Technology*, 51 (8), 4368-4376, doi.org/10.1021/acs.est.6b06155
- Strungaru, Stefan-Adrian, Jijie, Roxana, Nicora, Mircea, Gabriel, Plavan and Caterina Faggio (2019): Micro- (nano) plastics in freshwater ecosystems: Abundance, toxicological impact and quantification methodology. *Trends in Analytical Chemistry*, 110, S. 116-128, doi.org/10.1016/j.trac.2018.10.025
- Stock, Friederike, Kochleus, Christian, Bänisch-Baltruschat, Beate, Nicole Brennholt and Georg Reifferscheid (2019): Sampling techniques and preparation methods for microplastics analyses in the aquatic environment – A review. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 113, 84-92, doi.org/10.1016/j.trac.2019.01.014
- Terman, Roger (1984): Navier-Stokes Equations – Theory and Numerical Analysis. Providence, Rhode Island: AMS CHELSEA PUBLISHING
- Trapp, Stefan und Michael Matthies (1996): Dynamik von Schadstoffen – Umweltmodellierung mit CemoS, Eine Einführung. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag
- UNEP (2021): Planetary Action, United Nations Environment Programme 5
- UNEP (2020). Monitoring Plastics in Rivers and Lakes: Guidelines for the Harmonization of Methodologies. United Nations Environment Programme, Nairobi
- Uzen, Pelin, Sofi Farazande and Basak Guven (2021): Mathematical modelling of microplastic abundance, distribution, and transport in water environments: A review. *Chemosphere*, 288, 132517, doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.132517
- van der Wal, Maarten, Van der Meulen, Myra, Tweehuijsen, Gijsbert, Peterlin, Monika, Palatinus, Andreja, Kovac Viršek, Manca, Luica Soscia and Andrej Kržan (2015): SFRA0025: Identification and Assessment of Riverine Input of (Marine) Litter. Report for Michail Papadoyannakis, DG Environment, UK
- Wang, Hong, Wang, Wan-Xian, Yi Yang and Wei-Min Cai (2008): Visible light induced photodegradation and phototoxicity of phloxine B and uranine. *Biomed Environmental Science*, 5, 438-441, doi.org/10.1016/S0895-3988(08)60066-5
- Wegener, Horst (1991): Physik für Hochschulanfänger. 3. Auflage, Stuttgart: Teubner
- Weibull, Waloddi (1951): A Statistical Distribution Function of Wide Applicability. *Journal of Applied Mechanics*, 18, 293-297

- van Wijnen, Jikke, Ad M.J. Ragas and Carolien Kroeze (2019): Modelling global river export of microplastics to the marine environment: Sources and future trends. *Science of the Total Environment*, 673, 392-40, doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.04.078
- Widiatmojo, Arif, Sasaki, Kyuro, Widodo, Nuhindro Priagung, Sugai, Yuichi, Amin Yousefi Sahzabi and Ronald Nguele (2016): Predicting gas dispersion in large scale underground ventilation: A particle tracking approach. *Building and Environmental*, 95, 171-18, doi.org/10.1016/j.buildenv.2015.07.025
- Wolschin, Georg (2021): Hydrodynamik. 2. Auflage, Berlin, Wiesbaden: Springer Spektrum
- Zhiyao, Song, Tingting, Wu, Xu Fumin and Li Ruijie (2008): A simple formula for predicting settling velocity of sediment particles. *Water Science and Engineering*, 1 (1), 37-43, doi.org/10.1016/S1674-2370(15)30017-X

Anhang

Anhang A

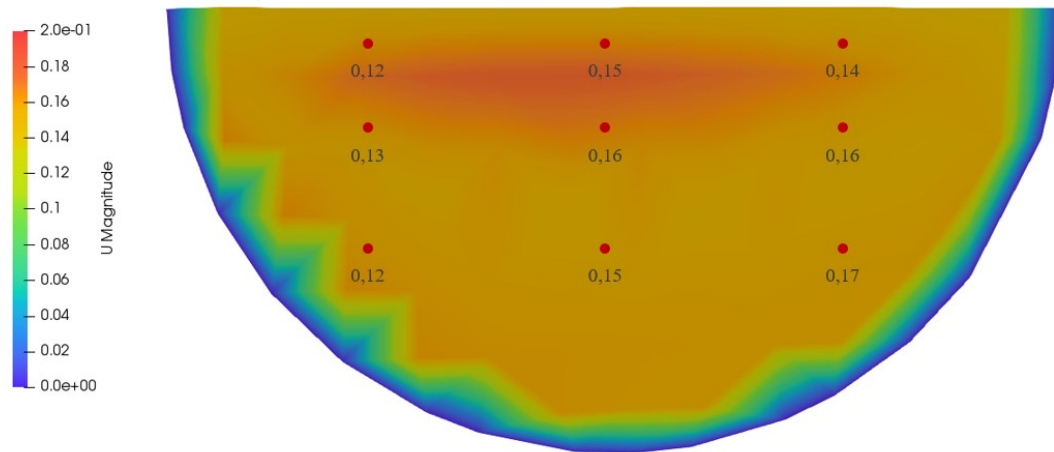


Abbildung A.1: Vergleich des simulierten Querschnittsprofils der Fließgeschwindigkeit in der Modell-Fließrinne mit gemessenen Werten in der Freiland-Fließrinne (rote Punkte) für die langsame Umdrehungsgeschwindigkeit.

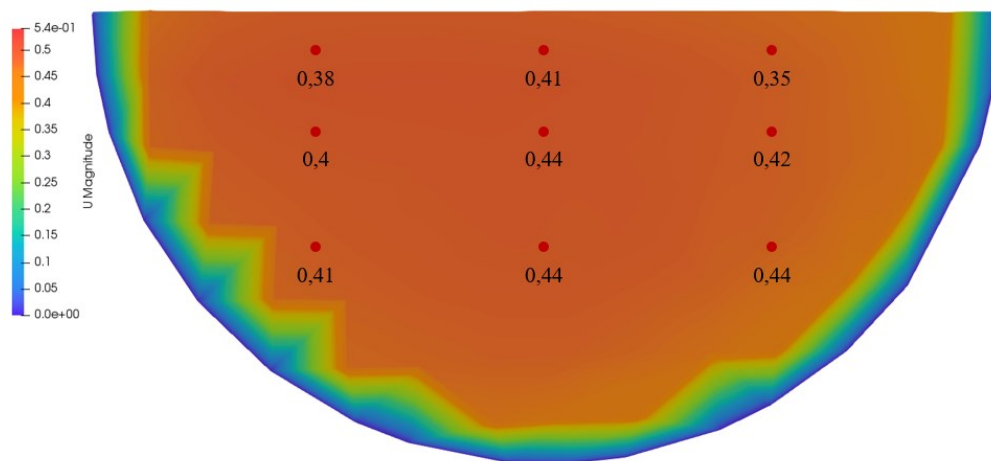


Abbildung A.2: Vergleich des simulierten Querschnittsprofils der Fließgeschwindigkeit in der Modell-Fließrinne mit gemessenen Werten in der Freiland-Fließrinne (rote Punkte) für die schnelle Umdrehungsgeschwindigkeit.

Anhang B

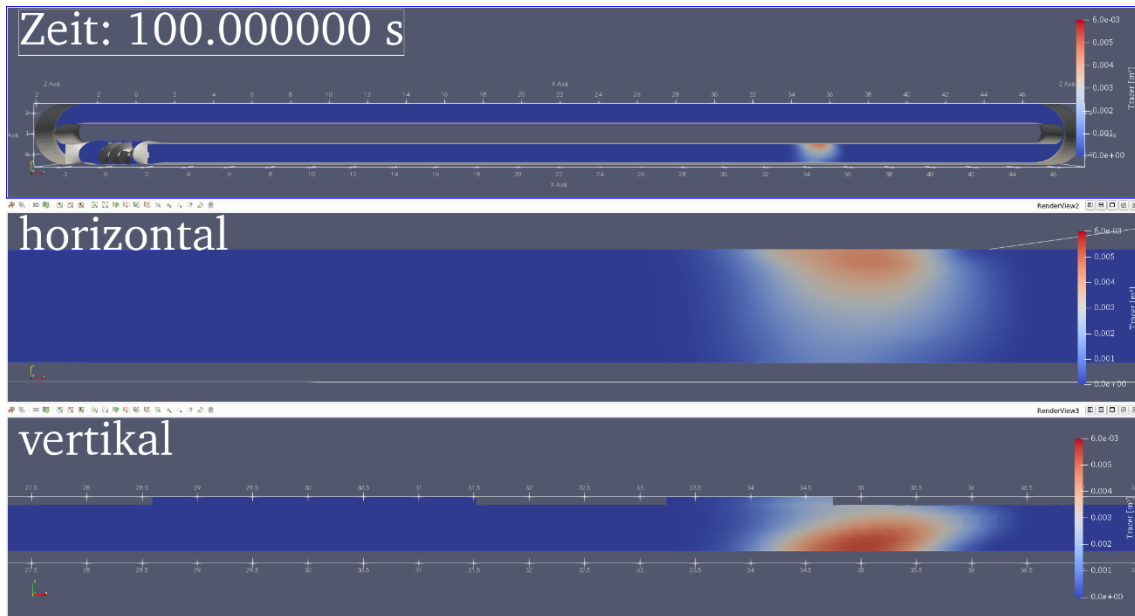


Abbildung B.1: Simulierte Tracerausbreitung in der mittleren Strömung der Modell-Fließrinne nach 100 Sekunden Realzeit in der Gesamtansicht (oben) sowie horizontale (Mitte) und vertikale (unten) Darstellung im Ausschnitt.

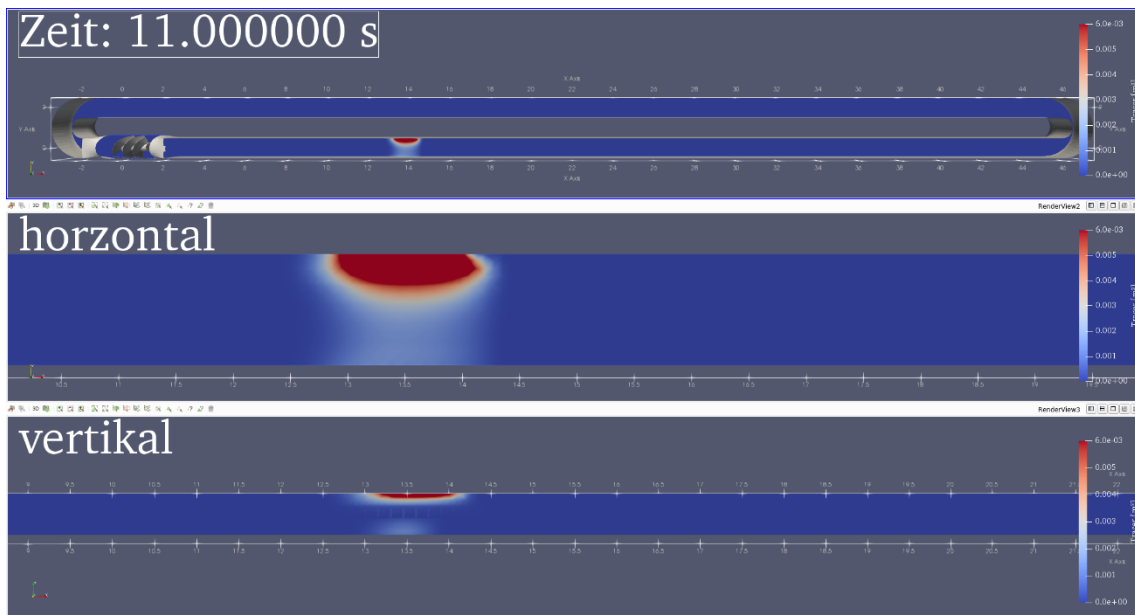


Abbildung B.2: Simulierte Tracerausbreitung in der schnellen Strömung der Modell-Fließrinne nach 11 Sekunden Realzeit in der Gesamtansicht (oben) sowie horizontale (Mitte) und vertikale (unten) Darstellung im Ausschnitt.

Anhang C

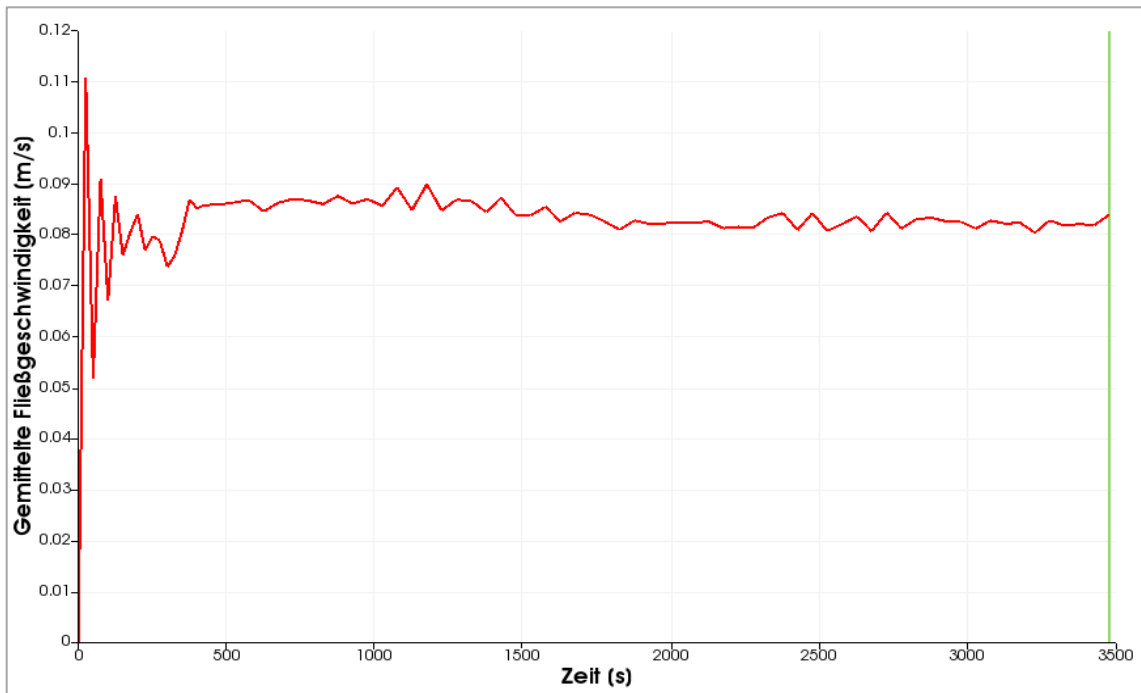


Abbildung C.1: Gemittelte Fließgeschwindigkeit umittel [m/s] des gesamten Wasserkörpers in Abhängigkeit der Zeit t [s] für die langsame Einlassgeschwindigkeit.

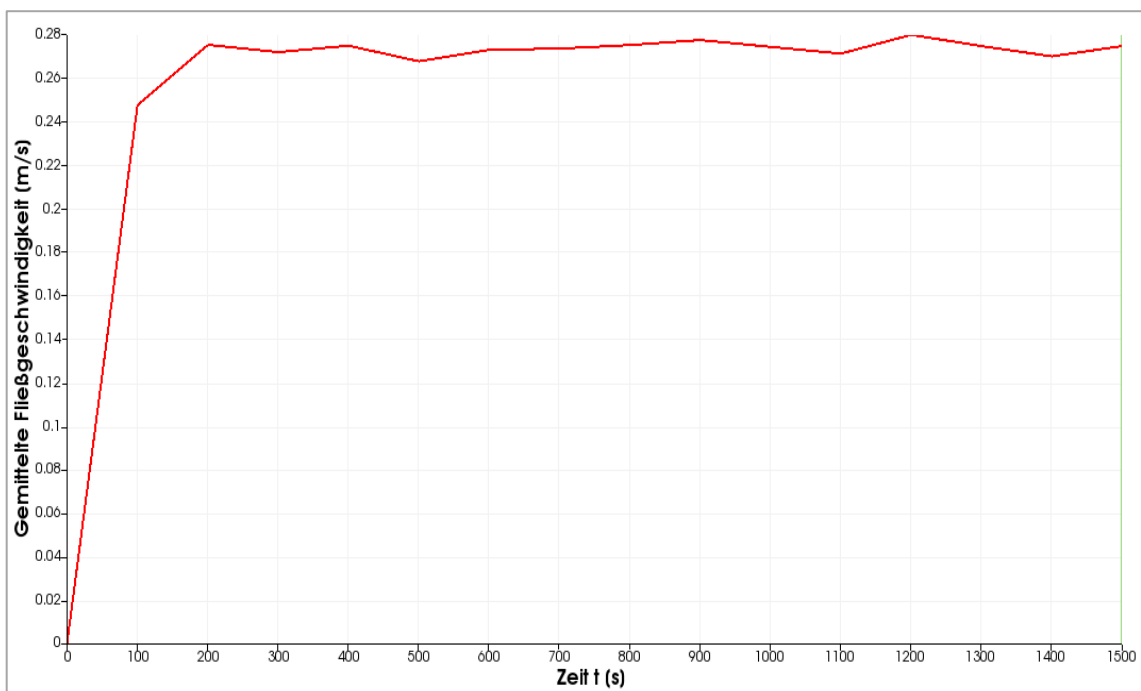


Abbildung C.2: Gemittelte Fließgeschwindigkeit umittel [m/s] des gesamten Wasserkörpers in Abhängigkeit der Zeit t [s] für die schnelle Einlassgeschwindigkeit.

Anhang D

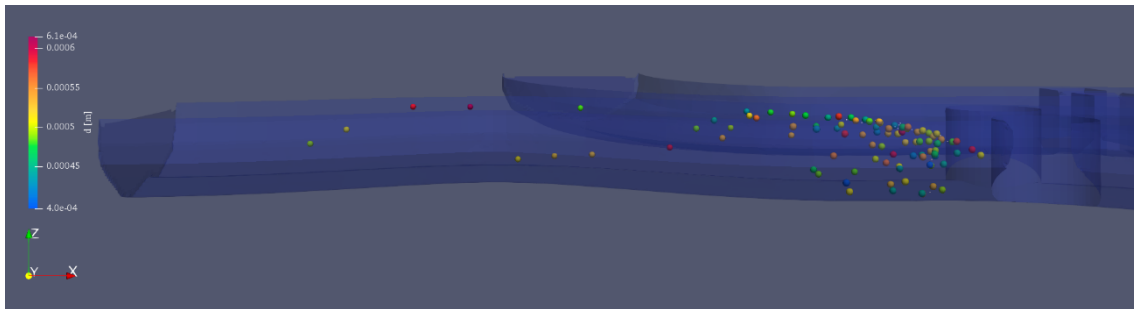


Abbildung D.1: PE-HD-Partikel des Szenario 3 nach 60 Sekunden Echtzeit in der mittleren Strömung in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [m].

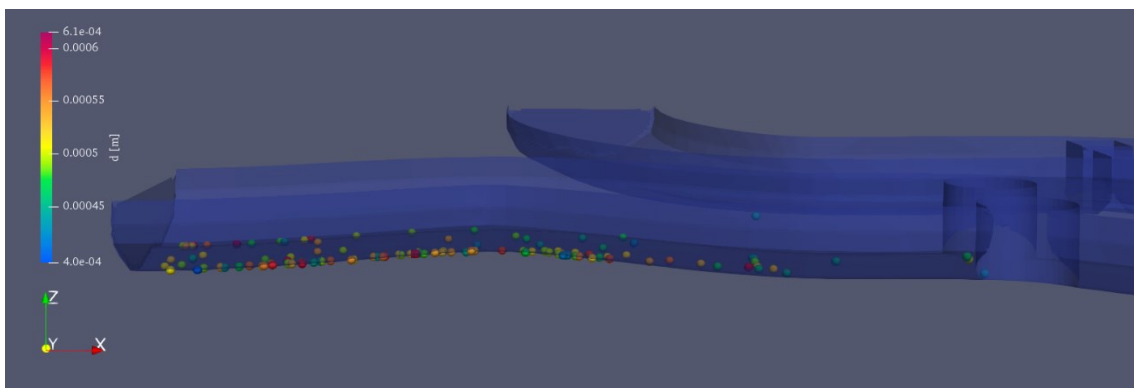


Abbildung D.2: PVC-P-Partikel des Szenario 3 nach 60 Sekunden Echtzeit in der mittleren Strömung in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers d [m].

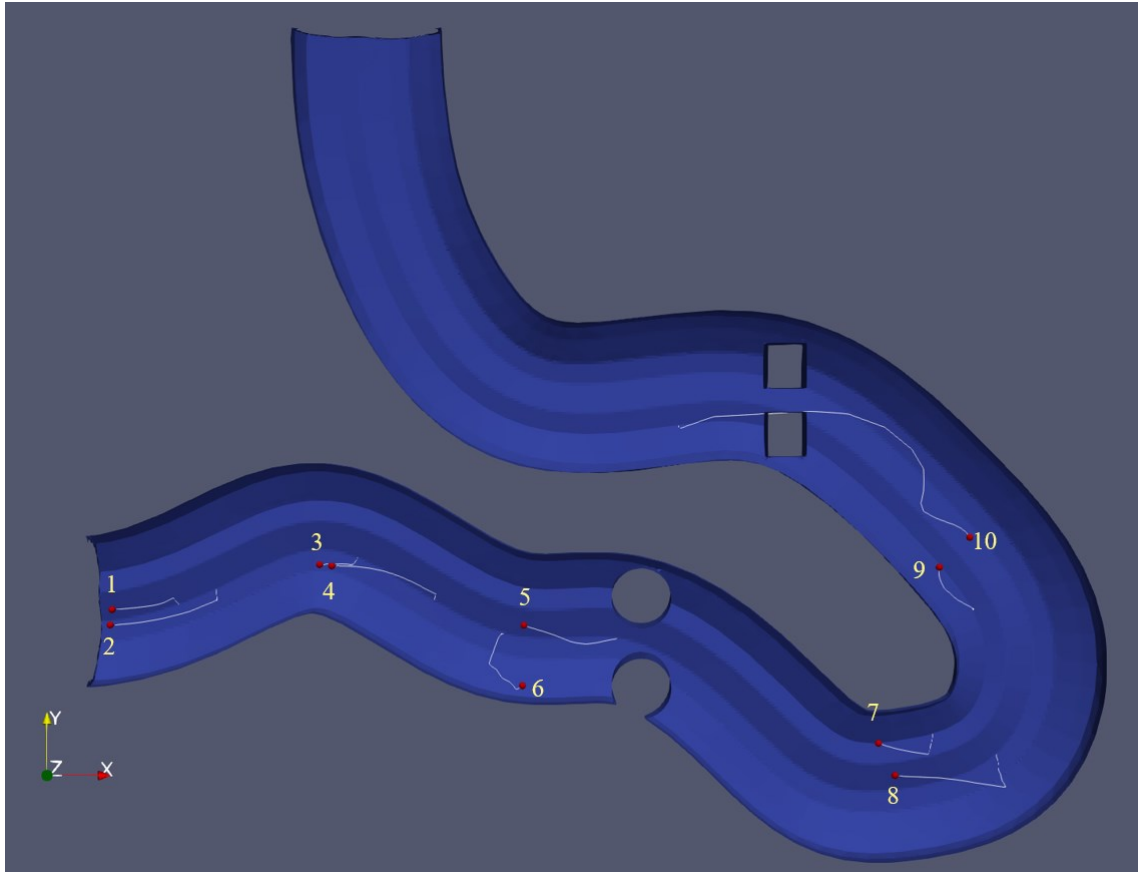


Abbildung D.3: Trajektorien von PVC-P mit $d = 1 \text{ mm}$ in der mittleren Strömung mit jeweiliger Startposition (rot) der Partikel 1-10.

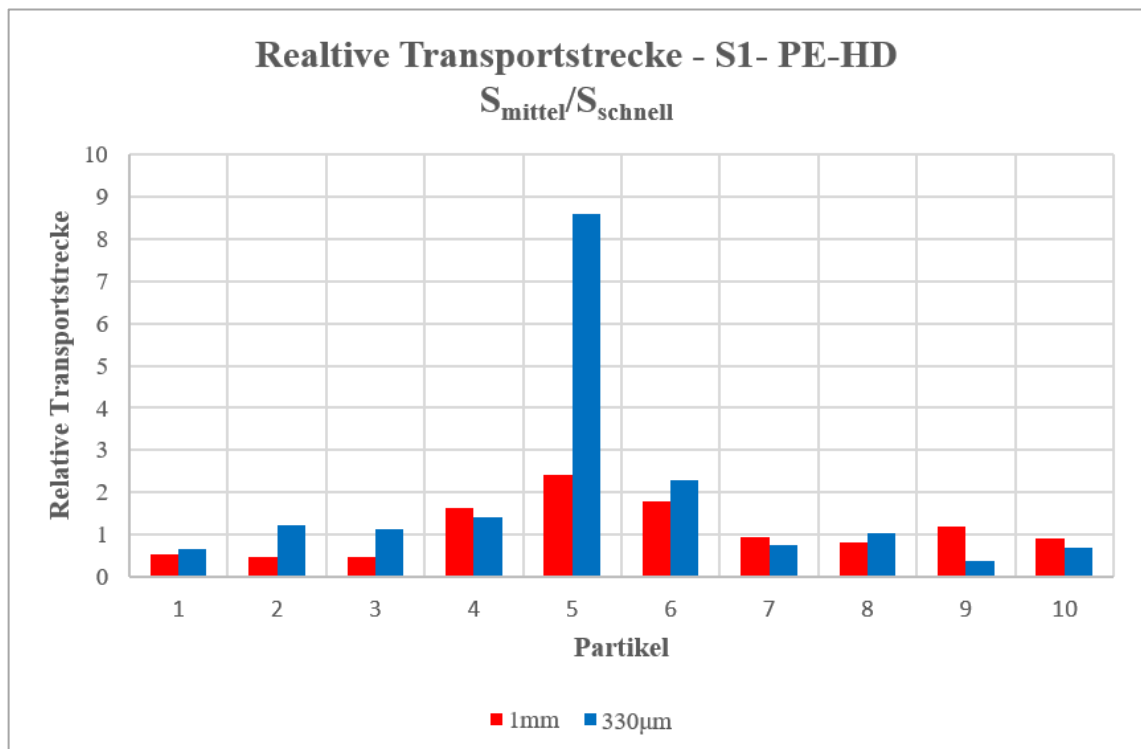


Abbildung D.4: Relative Transportstrecken der PE-HD-Partikel des Szenario 1 mit $d = 1 \text{ mm}$ (rot) und $d = 330 \text{ μm}$ (blau).

Eidesstattliche Erklärung

Erklärung über die Eigenständigkeit der erbrachten wissenschaftlichen Leistung

Ich erkläre hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Die aus anderen Quellen direkt oder indirekt übernommenen Daten und Konzepte sind unter Angabe der Quelle gekennzeichnet.

Bei der Auswahl und Auswertung folgenden Materials haben mir die nachstehend aufgeführten Personen in der jeweils beschriebenen Weise entgeltlich / unentgeltlich geholfen.

1.
.....
2.
.....
3.
.....

Weitere Personen waren an der inhaltlichen materiellen Erstellung der vorliegenden Arbeit nicht beteiligt. Insbesondere habe ich hierfür nicht die entgeltliche Hilfe von Vermittlungs- bzw. Beratungsdiensten (Promotionsberater oder andere Personen) in Anspruch genommen. Niemand hat von mir unmittelbar oder mittelbar geldwerte Leistungen für Arbeiten erhalten, die im Zusammenhang mit dem Inhalt der vorgelegten Dissertation stehen.

Die Arbeit wurde bisher weder im In- noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

.....

(Ort, Datum)

.....

(Unterschrift)