

Schlussbericht

der Forschungsstelle(n)

1. Fraunhofer-Gesellschaft e.V., Fraunhofer-Institut für Umwelt-, Sicherheits- und Energietechnik
2. Universität Duisburg-Essen, Lehrstuhl für Umweltverfahrenstechnik und Anlagentechnik

zu dem über die



im Rahmen des Programms zur
Förderung der Industriellen Gemeinschaftsforschung und -entwicklung (IGF)

vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie
aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages

geförderten Vorhaben **15780**

***Verbesserung der Feuerraummodellierung von Ersatzbrennstoffkraftwerken und
Abfallverbrennungsanlagen durch empirische Untersuchungen zur Flüchtigfreisetzung -
Entwicklung einer Apparatur zur Ermittlung neuer Brennstoffkenngrößen.***

(Bewilligungszeitraum: 01.09.2008 - 31.05.2011)

der AiF-Forschungsvereinigung

UMWELTTECHNIK

Oberhausen, 31.08.2011

Ort, Datum

Philipp Danz, Prof. Dr.-Ing. habil. Klaus Görner

Name und Unterschrift des/der Projektleiter(s)
an der/den Forschungsstelle(n)

Gefördert durch:



Bundesministerium
für Wirtschaft
und Technologie

aufgrund eines Beschlusses
des Deutschen Bundestages

Abschlussbericht

»Verbesserung der Feuerraummodellierung von Ersatzbrennstoff/
Biomassekraftwerken und Abfallverbrennungsanlagen durch empiri-
sche Untersuchungen zur Flüchtigensfreisetzung - Entwicklung einer
Apparatur zur Ermittlung neuer Brennstoffkenngrößen«

erstellt von:

Fraunhofer-Institut für Umwelt-, Sicherheits-
und Energietechnik UMSICHT
Institutsleiter: Prof. Dr.-Ing. Eckhard Weidner
Osterfelder Straße 3
46047 Oberhausen

Institut für Energie- und Umweltverfahrenstechnik
Universität Duisburg-Essen
Institutsleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Klaus Görner
Leimkugelstr. 10
45141 Essen

Oberhausen, August 2011

Projektteam:

Dipl.-Ing. Philipp Danz (UMSICHT) | **Projektleiter**

Telefon: 02 08-85 98-11 70

E-Mail: philipp.danz@umsicht.fraunhofer.de

Dipl.-Ing. Julia Behling (UMSICHT)

Telefon: 02 08-85 98-13 06

E-Mail: julia.behling@umsicht.fraunhofer.de

Dipl.-Ing. Andrea Gerstner (UMSICHT)

Telefon: 02 08-85 98-11 70

E-Mail: andrea.gerstner@umsicht.fraunhofer.de

Dr.-Ing. Thomas Marzi (UMSICHT)

Telefon: 02 08-85 98-12 30

E-Mail: thomas.marzi@umsicht.fraunhofer.de

Dipl.-Ing. Martin Weghaus (Weghaus GmbH)

Telefon: 09 31-20 75 06 4

E-Mail: martin@weghaus.net

M.Sc. Ali Jamal Abdullah Al-Zuhairi (LUAT)

Telefon: 02 01-18 3-75 32

E-Mail: ali.al-zuhairi@uni-due.de

Dr.-Ing. Peter Gillmann (LUAT)

Telefon: 02 01-18 3-75 15

E-Mail: peter.gillmann@uni-due.de

INHALT

	Abkürzungsverzeichnis	III
1	Kurzzusammenfassung	1
2	Einleitung und Zielstellung	2
2.1	Einleitung	2
2.2	Aufgabenstellung	4
2.3	Vorgehensweise	6
3	Ergebnisse der Arbeitspakete TB 2 bis TB 11	8
3.1	Einleitung	8
3.2	TB 2: Labormaßstab: Untersuchung unterschiedlicher Brennstoffe	9
3.2.1	Vorstellung der Labormethoden	9
3.2.2	TB 2A: Charakterisierung von Referenzmaterialien (Reine Brennstoffe)	14
3.2.3	TB 2B: Charakterisierung von künstlich hergestellten Mischbrennstoffen (definierte Mischung)	17
3.2.4	TB 2C: Charakterisierung von EBS und Abfallfraktionen	21
3.2.5	TB 2D: Auswertung	24
3.3	TB 3: Entwicklung einer Versuchsanlage zur temperaturabhängigen Freisetzung flüchtiger Stoffe im Technikumsmaßstab	33
3.3.1	TB 3A: Konzeption und Planung der Versuchsanlage	33
3.3.2	TB 3B: Überprüfung des Ofenkonzepts	34
3.3.3	TB 3C: Bau und Installation der Versuchsanlage	36
3.3.4	TB 3D: Entwicklung einer Auswerteroutine	43
3.3.5	TB 3E: Errichtung, Inbetriebnahme und Kalibrierung der Versuchsanlage	45
3.4	TB 4: Technikumsmaßstab: Untersuchung unterschiedlicher Brennstoffe	48
3.4.1	TB 4A: Tests mit Referenzmaterialien (Reine Brennstoffe) und TB 4B: Tests mit künstlich hergestellten Mischbrennstoffen (Definierte Zusammensetzung)	48
3.4.2	TB 4C: Tests mit EBS und Abfall	52
3.4.3	TB 4D: Auswertung der Untersuchungsergebnisse	54
3.5	TB 5: Vergleich der Untersuchungsergebnisse aus Labor- und Technikumsversuchen	55
3.6	TB 6: Implementierung des Entgasungsverhaltens in ein Rostmodell	58
3.6.1	TB 6A: Übertragung der Messdaten in Modellkompatible Formate	58
3.6.2	TB 6B: Implementierung des Entgasungsverhaltens in das Rostmodell (inkl. Beschreibung des Rostmodells)	72
3.7	TB 7: Erweiterung des Rostmodells um Submodule	76
3.7.1	Anpassung der Module	76
3.7.2	Validierung des Rostmodell-Entgasungsverhaltens anhand eines Technikumsversuches	77

3.8	Rostmodellierung einer Abfallverbrennungsanlage und eines EBS-Kraftwerks (TB8 und TB9)	80
3.8.1	Beschreibung der Verbrennungsanlagen	80
3.8.2	Eingangsgrößen der Modelle	80
3.8.3	Simulationsergebnisse für eine Abfallverbrennungs- und eine EBS-Anlage	82
3.9	Feuerraummodellierung einer Abfallverbrennung und eines EBS-Kraftwerks	84
3.9.1	Beschreibung der Feuerraummodelle	84
3.9.2	Simulationsergebnisse für eine Abfallverbrennungs- und eine EBS-Anlage (TB9 und TB11)	91
3.10	TB 10: Validierung der Modelle	96
3.11	TB 11: Korrektur der Modelle	96
3.12	Ableitung von feuerungstechnischen Vorgaben aus den Simulationsergebnissen	99
4	Zusammenfassung	100
5	Wirtschaftliche Bedeutung des Forschungsthemas für kleine und mittlere Unternehmen (kmU)	102
6	Umsetzung der Forschungsergebnisse	103
7	Bezug zum Verwendungsnachweis	104
8	Literaturverzeichnis	105

Abkürzungsverzeichnis

A	Asche
CAE	Computergestützte Analyse Techniken
CFD	Computational Fluid Dynamics
EB	Einzelbestandteile
EBS	Ersatzbrennstoffe
EBU	Eddy Break-Up
GKS	Gemeinschaftskraftwerk Schweinfurt
GSH	Grundstoffherstellung
IPZ	Inerte Pyrolysezone
kmU	Kleine und mittlere Unternehmen
LfU	Bayrisches Landesamt für Umweltschutz
Lutro	lufttrocken
MFC	Mass Flow Controller
MV	Massenverlust
NDIR	Nichtdispersiver Infrarot-Absorptionsanalysator
NW	Nennweite
OZ	Ofenzone
PA	Polyamid
PE	Polyethylen
PL	Primärluft
PMMA	Polymethylmethacrylat
PP	Polypropylen
PPK	Papier Pappe Kartonage
PTFE	Polytetrafluorethylen
RSL	Rohrstutzen leicht
SL	Sekundärluft
TG	Thermogravimetrie
TNV	Technische Nachverbrennung

TS	Trockensubstanz
VBA	Visual Basic for Applications
wafk	wasser-, asche und koks frei
WLD	Wärmeleitfähigkeitsdetektor

1 Kurzzusammenfassung

In dem vorliegenden Forschungsvorhaben wurde ein wichtiges Anliegen für kleine und mittlere Unternehmen (KMU), wie z. B. Brennstoffaufbereiter und Betreiber von Verbrennungsanlagen aufgegriffen. Das Verbrennungsverhalten von Ersatzbrennstoffen (EBS), Abfällen und Biomassen weicht vom Verbrennungsverhalten konventioneller Brennstoffe ab. Dies kann durch die standardmäßig durchgeführten Brennstoffanalysen nicht abgebildet werden, da nur die elementare Zusammensetzung, die Immediatanalyse und der Heizwert-/Brennwert bestimmt werden. Aus diesem Grund wurde ein Messverfahren angewendet, mit dem die Verbrennungseigenschaften der genannten Brennstofffraktionen besser betrachtet werden können. Dieses Messverfahren erlaubt die Bestimmung der elementaren Flüchtigenzusammensetzung in Abhängigkeit von der Freisetzungstemperatur der Flüchtigen. Es wurden zunächst im Labormaßstab reine Brennstofffraktionen (z. B. Papier, Zellulose, Lignin, Holz, Kunststoffpolymere usw.), Mischbrennstoffe aus den Reinfraaktionen und reale Abfall- und EBS-Brennstoffe untersucht. Neben den klassischen Parametern, welche mittels Elementar- und Immediatanalyse bestimmt werden, wurde das oben genannte spezielle Messverfahren verwendet. Aus den ermittelten Flüchtigen-Elementarzusammensetzung wurde im Anschluss über ein Berechnungsverfahren eine Speziesverteilung (CO , CO_2 , C_3H_8 usw.) in den Flüchtigen ermittelt und in ein Rostmodell implementiert.

Um der Heterogenität der Brennstoffe und der schwankenden Zusammensetzung gerecht zu werden, wurde zudem eine Apparatur im Technikumsmaßstab entwickelt, die es erlaubt, große Brennstoffproben zu untersuchen. Gegenüber dem Labormaßstab kann nun die tausendfache Menge Probenmaterial in annähernd originaler Korngröße eingebracht werden. Diese Technikumsanlage wurde genutzt, um die bereits im Labormaßstab betrachteten Fraktionen erneut zu untersuchen und hinsichtlich des Freisetzungsverhaltens zu charakterisieren. Zudem wurde das bereits beschriebene Rostmodell erfolgreich an der Technikumsanlage validiert.

Mit den im Labor und im Technikum gewonnenen Brennstoffdaten und den realen Anlagendaten zweier Verbrennungs-Anlagen (EBS-Kraftwerk und Abfallverbrennung) wurden anschließend mittels Rostmodell und Strömungssimulationssoftware Simulationen durchgeführt und mit realen Betriebsdaten abgeglichen. Es zeigte sich, dass die entwickelte Kombination aus Labor-, Technikums- und Berechnungsmethoden ein zuverlässiges, neues Instrument zur verbesserten Feuerraummodellierung darstellt. Durch den erstellten Stoffdatenkatalog, das öffentlich zugängliche Rostmodell und die Offenlegung des Labormessverfahrens zur Flüchtigenmessung stehen KMU hiermit weitreichende neue Möglichkeiten zur Brennstoffcharakterisierung und Anlagenmodellierung zur Verfügung. Das Ziel des Vorhabens wurde erreicht.

2 Einleitung und Zielstellung

2.1 Einleitung

Knapper werdende Ressourcen fossiler Rohstoffe lassen Engpässe und Preisanstiege für konventionelle Energieträger erwarten, deren erste Anzeichen schon heute deutlich spürbar sind. Eine zentrale Aufgabe von Forschung und Entwicklung muss es somit sein, die effiziente Bereitstellung und Nutzung umweltgerechter und kostengünstiger Energie dauerhaft zu gewährleisten. Die Nutzung von Brennstoffen, die aus Abfällen oder Biomassen erzeugt werden, schont fossile Ressourcen und stellt einen bedeutsamen Schritt in Richtung einer nachhaltigen Energiewirtschaft dar. Aus diesem Grund und durch Umsetzung der TA Siedlungsabfall haben Abfälle und so genannte Ersatzbrennstoffe aus energetischer Sicht an Bedeutung gewonnen. Abfallverbrennungsanlagen verbrennen unaufbereiteten Siedlungsabfall und erweitern derzeit ihr Aufgabenfeld neben der Entsorgung um die Energiebereitstellung. Aus vorbehandelten Abfällen hergestellt, sollen EBS fossile Brennstoffe in bestimmten Prozessen als Regelbrennstoff ersetzen. Die energetische Verwertung von EBS kann durch Mitverbrennung in Braun- und Steinkohlekraftwerken oder Zementwerken sowie direkt in Monoverbrennungsanlagen erfolgen, wobei je nach Nutzung der Aufbereitungsgrad variiert. Bei Monoverbrennungsanlagen beider Fraktionen überwiegt die Rostfeuerung. Das vorliegende Forschungsvorhaben ist deshalb auf dieses Feuerungssystem ausgerichtet.

Im Vergleich zu fossilen Energieträgern ist die Zusammensetzung von Abfällen und EBS größeren Schwankungen unterworfen. Diese Schwankungen bilden den Hintergrund für Qualitätssicherungsmaßnahmen, wie sie von der Bundesgütegemeinschaft Sekundärbrennstoffe vorgeschlagen werden. Die Aufmerksamkeit konzentriert sich bei den Qualitätskriterien auf Parameter wie den Heizwert des gesamten Brennstoffs bzw. dessen Chlor- und Schwermetallgehalt. Aus diesen Angaben kann eine pauschale Aussage zur umgesetzten Energie bei einer vollständigen Verbrennung des Brennstoffs abgeleitet werden. Zur Beurteilung des Verhaltens von Brennstoffen in einer Feuerung sind die Ergebnisse dieser Methoden keinesfalls ausreichend, weshalb z. B. in der Kohleforschung seit jeher auch weitere, das Verbrennungsverhalten bestimmende Parameter, untersucht werden.

Es ist zu berücksichtigen, dass sich der Verbrennungsvorgang in mehrere Schritte untergliedert, die sich zu einem komplexen Gesamtprozess überlagern. So wird der Brennstoff nach der Trocknung durch Energiezufuhr thermisch zersetzt. Dabei werden chemische Bindungen in der Struktur des Brennstoffs aufgebrochen und die gebildeten Produkte freigesetzt. Sie werden als „flüchtige Bestandteile“ oder „Flüchtige“ bezeichnet und initiieren durch ihre Zündung den eigentlichen Verbrennungsprozess. Durch die exotherme Oxidation der Flüchtigen wird Energie freigesetzt, die wiederum zur erneuten Flüchtigensfreisetzung führt. Während der

Entgasung der Flüchtigen bildet sich eine kohlenstoffhaltige Phase, der sogenannte Restkoks bzw. fixe Kohlenstoff (C_{fix}). Er zündet nach oder während der Verbrennung der flüchtigen Bestandteile unter Beteiligung von Vergasungsreaktionen. Da die flüchtigen Bestandteile schneller brennen als der Koks, ist die Flüchtigenfreisetzung maßgeblich für das Zündverhalten verantwortlich. Die Restkoksumsetzung ist der letzte Schritt der Verbrennung. Als Asche verbleibt der anorganische Brennstoffanteil.

Konventionelle Brennstoffprüfmethoden bringen nur Ergebnisse zur Masse der insgesamt gebildeten Flüchtigen hervor. Um welche Stoffe es sich handelt, welchen Heizwert sie haben, wie sie sich bei verschiedenen Zersetzungstemperaturen unterscheiden und wie sie zusammengesetzt sind, ist noch ungeklärt. Das Verbrennungs- und Zündverhalten von Ersatzbrennstoffen und Abfällen kann deshalb auf Basis konventioneller Daten schwer vorhergesagt werden. Ein großes Unterscheidungsmerkmal zwischen EBS und Abfallstoffen ist der viel größere Flüchtigenanteil bei EBS, der zu einer schnelleren Zündung und Verbrennung auf dem Rost und tendenziell höheren Temperaturen im Feuerraum führt. Durch Unkenntnis des temperaturabhängigen Entgasungsverhaltens kann dies bei der Beschreibung der Vorgänge auf dem Rost nicht ausreichend betrachtet werden.

Durch die Kombination rechnerischer Feuerraummodelle mit experimentellen Methoden, die brennstoffbezogene Kenngrößen liefert, wird im vorliegenden Forschungsvorhaben ein neues Verfahren entwickelt, mit dem das Verhalten von Brennstoffen in Verbrennungsanlagen beschrieben werden kann. Hierbei kommen sowohl Labormethoden, als auch eine eigens entwickelte Technikumsanlage zum Einsatz.

2.2 Aufgabenstellung

Ziel des Projektes ist die Entwicklung eines Instruments zur praxisnahen Simulation des Verhaltens von Abfällen, Biomassen und Ersatzbrennstoffen in einer Rostfeuerung. Das Verfahren liefert detaillierte Informationen zu den Abbrandbedingungen und Brennverhalten im Brennbett und Feuerraum. Diese Informationen tragen dazu bei die Primär- und Sekundärluftsteuerung (z.B. die Positionierung der Sekundärlufteindüsung) in Rostfeuerungsanlagen optimal an Brennstoffe anzupassen. Dies kann z.B. bei Biomassefeuerungen zu einer deutlichen Verbesserung des Ausbrands und damit zu verbesserten Ascheeigenschaften und einer höheren Energieeffizienz beitragen. Weiteres Ziel ist es den Einfluss unterschiedlicher Brennstoffkorngrößen auf das Verbrennungsverhalten herauszuarbeiten und Vorschläge für mögliche Brennstoffaufarbeitungsschritte abzuleiten. Die Abbrandbedingungen in Brennbett und Feuerraum determinieren auch die Freisetzung korrosionsrelevanter anorganischer Chlor- und Schwefelverbindungen. Die Simulation dieser Bedingungen stellt somit eine wichtige Voraussetzung dar, um bei späteren Untersuchungen, das Verhalten dieser Stoffe im Feuerraum zu beschreiben und steuernd darauf einzuwirken. Das zu entwickelnde Verfahren ist hauptsächlich für die Neuplanung und Modifizierung von Anlagen von Bedeutung.

Die Entwicklung verfolgt gegenüber der konventionellen Vorgehensweise, einen grundsätzlich anderen und neuen Lösungsansatz. So wird nicht der Verbrennungsvorgang als ganzes im kleineren Maßstab dargestellt, sondern es werden experimentelle Daten, die die einzelnen Teilschritte des Verbrennungsprozesses für Brennstoffe definiert beschreiben, mit einem Rost/Feuerraummodell kombiniert. Hierzu erfolgt die Entwicklung einer Untersuchungsapparatur, mit der, für eine über den Labormaßstab deutlich hinausgehende Probemenge, temperaturabhängig Informationen zum Heizwert, zur Zusammensetzung und zur Freisetzungsgeschwindigkeit der Flüchtigen als brennstoffcharakteristische Kenngrößen ermittelt werden können. Diese Kenngrößen werden neben Laborergebnissen als empirische Basisgrößen in das Rostmodell CombAte integriert. Das Rostmodell wurde am GKS Schweinfurt entwickelt und steht der Öffentlichkeit unter www.gks-sw.de zur Verfügung. Nähere Beschreibungen des Rostmodells finden sich u. a. in [Warnecke; 2011]. Es verfügt über eine (wahlweise iterative) Kopplung zu Strömungsmodellen für den Feuerraum. Die Ergebnisse des Rostmodells werden an der Technikumsanlage validiert. Gegebenenfalls soll das Modell um verfügbare Submodelle erweitert werden, die die enthaltenen Submodelle ergänzen. Die bestehenden Submodelle müssen aufgrund der neu integrierten Stoffdaten ebenfalls angepasst werden.

Anhand der Simulationen eines EBS-Kraftwerks und einer Abfallverbrennungsanlage soll gezeigt werden, dass das Rostmodell grundsätzlich für ein breites Band von Rostverbrennungsanlagen parametrisiert werden kann, da spezifische Unterschiede des eingesetzten Brennstoffs und der Rostfahrweisen berücksichtigt werden können.

Das Ergebnis des Forschungsvorhabens ist ein Instrument, mit dessen Hilfe Betriebsparameter neuer und bestehender Anlagen an Abfallstoffe und Ersatzbrennstoffe angepasst und optimiert werden können. Kernstück sind eine Labormethode und eine experimentelle Vorrichtung, mit der neuartige Brennstoffkenngrößen ermittelt werden können und das Rostmodell validiert werden kann.

Mit Hilfe geeigneter Schnittstellen zu bestehenden Feuerraummodellen sowie deren Erweiterung soll schließlich ein Rostmodell zur Verfügung stehen, das die praxisnahe Beurteilung von Brennstoffen (Abfall, Biomassen EBS) und eine Optimierung der Anlagentechnik erlaubt.

2.3 Vorgehensweise

Zunächst werden mit einem speziell entwickelten Labormessverfahren verschiedene Brennstofffraktionen auf ihr temperaturabhängiges Flüchtigenfreisetzungverhalten hin untersucht. Es werden reine Brennstofffraktionen (Papier, Kunststoffpolymere, Zellulose, Lignin usw.), synthetische Mischungen (Zusammensetzung orientiert sich an Sortieranalysen) und reale Mischbrennstoffe (EBS und Abfall, Probenahmen erfolgen an den später zu simulierenden Anlagen) untersucht. Aus den Laborergebnissen lässt sich nun ein Katalog an Stoffdaten bilden, der neben den bereits erwähnten Flüchtigendaten auch Elementar- und Immediatanalysen (Flüchtigengehalt, Aschegehalt, Heizwert / Brennwert) enthält.

In einem nächsten Schritt müssen die ermittelten Laborergebnisse angepasst werden. Messergebnisse sind stets mit Fehlern behaftet. Bevor sie in Modelle einfließen können, muss deshalb eine begründete und dokumentierte Anpassung erfolgen. Im vorliegenden Fall bezieht sich dies auf die Stetigkeit der Entgasungsreaktionen und komplett geschlossene Massenbilanzen. Es wird ein Verfahren entwickelt, mit dem die Messwerte so angepasst werden, dass sie im späteren Modell keine Inkonsistenzen hervorrufen.

Die Laborergebnisse stellen Elementarverteilungen der Flüchtigen in Abhängigkeit von der Freisetzungstemperatur dar. Hieraus lassen sich überschlägig Heiz- und Brennwerte berechnen. Die genutzten Modellgleichungen nach [Boie; 1953] und [Channiwala; 2002] sind der Literatur entnommen. Für eine Implementierung der Messdaten in das Rostmodell ist jedoch eine weitergehende Umrechnung erforderlich. Die Elementarverteilung (C, H, O, N) muss in eine Speziesverteilung (CO, CO₂, C₃H₈ usw.) umgewandelt werden. Hierfür wird ein mathematisches Verfahren, basierend auf dem thermodynamischen Gleichgewicht, hergeleitet. Die ermittelten Speziesverteilungen werden wiedergegeben und in das Rostmodell implementiert.

Die im Fokus des Forschungsvorhabens stehenden Brennstoffe Abfall und EBS sind durch ausgeprägte Heterogenität und schwankende Zusammensetzungen gekennzeichnet. Deshalb muss bei der Betrachtung eines solchen Brennstoffs angestrebt werden, größere Probenmengen untersuchen zu können. Hierzu wird eine Technikumsanlage geplant, konstruiert und errichtet. Diese Technikumsanlage beinhaltet neben Untersuchungsmöglichkeiten zum zeitlichen Masseverlust in Abhängigkeit von der Temperatur (Thermogravimetrie) auch eine Gasanalytik, welche die Zusammensetzung der entstehenden Rauchgase online erfasst. In der errichteten Technikumsanlage werden Proben mit größerer Korngröße untersucht (übliche Laborgrößen: < 1 mm; Technikumsgröße: < 20 mm). Außerdem kann der Probenumfang drastisch erhöht werden (übliche Labormenge: < 100 mg; Technikumsmenge: < 100 g).

Die Versuchsergebnisse der Technikumsanlage werden zum einen für qualitative Aussagen zum Brennstoffverhalten genutzt. Zum anderen erfolgt hieran eine Validierung des Rostmodells. Da in der Technikumsanlage die Randparameter exakt definiert werden können, können die Messungen zur Validierung herangezogen werden (wohingegen bei der Validierung an großtechnischen Verbrennungsanlagen stets mit Schwankungen um einen bestimmten Betriebspunkt gerechnet werden muss). Schließlich werden in der Technikumsanlage aus Versuchen von reinen Brennstofffraktionen und künstlich hergestellten Mischungen Vergleiche hergestellt. Dies soll eine Beurteilung ermöglichen, inwiefern Mischbrennstoffe durch die Betrachtung einzelner Brennstoffanteile charakterisiert werden können.

Nach dem das Rostmodell CombAte (s. hierzu [Warnecke; 2011]) an der Technikumsanlage validiert ist und bestimmte Submodelle angepasst worden sind, erfolgt eine Simulation eines EBS-Kraftwerks und einer Abfallverbrennung mit Hilfe des Rostmodells. Hierbei gehen reale Betriebsparameter und Brennstoffanalysen ein. Die Brennstoffproben wurden an den zu simulierenden Anlagen genommen und die Betriebsparameter beziehen sich jeweils auf den Tag der Probenahme.

Die so generierten Rostdaten fließen anschließend in Strömungssimulationsmodelle der Anlagen ein, so dass eine Betrachtung der Vorgänge im Feuerraum ermöglicht wird. Im Dialog mit den Anlagenbetreibern werden die Ergebnisse bewertet, evtl. Korrekturen an der Simulation vorgenommen und Konsequenzen für den realen Betrieb der Anlagen abgeleitet.

In den nun folgenden Kapiteln werden die Ergebnisse des Forschungsvorhabens präsentiert.

3 Ergebnisse der Arbeitspakete TB 2 bis TB 1 1

3.1 Einleitung

In den nachfolgenden Kapiteln werden die Ergebnisse des Forschungsvorhabens vorgestellt. Hierbei orientiert sich die Gliederung an der Planung der Teilbereiche, in einzelnen Fällen wird jedoch davon abgewichen, wenn es der Verständlichkeit dienlich ist. Hierdurch repräsentiert der Umfang eines einzelnen Abschnitts nicht immer den Umfang der Arbeiten.

Zunächst werden die Untersuchungen im Labormaßstab beschrieben, deren Auswertung erläutert und Ergebnisse präsentiert. Anschließend erfolgen eine Beschreibung des Aufbaus der Technikumsanlage und die Ergebnispräsentation der Technikumsversuche. Schließlich werden die Rost- und Feuerraummodelle erläutert und die Ergebnisse der durchgeführten Simulationsberechnungen gezeigt und diskutiert.

Im Anhang befinden sich die nicht im Bericht aufgeführten Analyseergebnisse.

3.2 TB 2: Labormaßstab: Untersuchung unterschiedlicher Brennstoffe

In den folgenden Abschnitten werden die im Labor durchgeführten Arbeiten vorgestellt. Hierbei werden neben den Standardmethoden auch Arbeiten an speziell entwickelten Methoden erläutert und deren Auswertung gezeigt.

3.2.1 Vorstellung der Labormethoden

Probenvorbehandlung

Die Untersuchung der Materialien erfordert in allen Fällen eine Vorbehandlung. In Laborgeräten kommen typischerweise Einwaagen zwischen 10 mg und 200 mg zum Einsatz. Um hier eine gute Homogenität der Probe zu gewährleisten und um Stofftransport- und Wärmeleiteffekte auszuschließen, sind Korngrößen < 1 mm notwendig. Nachdem die Inertstoffe aus der Probe aussortiert, gewogen und verworfen worden sind, wird die Probe deshalb zerkleinert. Falls notwendig erfolgt eine Versprödung durch Kühlung mit flüssigem Stickstoff während der Zerkleinerung (Zentrifugalmühle, Hammermühle, Schneidmühle). Nach der Zerkleinerung wird die Probe bei 105 °C getrocknet. Werden leicht flüchtige Bestandteile vermutet, erfolgt die Trocknung bei 65 °C .

Elementaranalyse

Der Elementaranalysator vario MAX CHN arbeitet nach dem Prinzip der katalytischen Rohrverbrennung unter Sauerstoffzufuhr und hohen Temperaturen. Die Verbrennungsgase werden von störenden Fremdgasen (z. B. flüchtigen Halogenen und SO_2) gereinigt. Die Messkomponenten werden mit Hilfe von spezifischen Adsorptionssäulen voneinander getrennt und nacheinander mit einem Wärmeleitfähigkeitsdetektor bestimmt. Als Spül- und Trägergas dient Helium.

Brennwert

Die Bestimmung erfolgt im Bombenkalorimeter. Kernstück der Apparatur ist eine Verbrennungsbombe aus V2A-Stahl. In dieser wird die Probe nach elektrischer Zündung unter einem Sauerstoff-Druck von 25 bar (= 2,5 MPa) verbrannt. Die Bombe befindet sich dabei in einem mit Wasser gefüllten Thermostaten, dem Kalorimeter. Das Kalorimeter nimmt die bei der Verbrennung freiwerdende Wärme auf, die Temperaturerhöhung wird mit einem Thermometer gemessen.

Das Bombenkalorimeter besteht aus zwei Teilen: der Bombe mit konstantem Volumen, und dem Wassermantel, der unter konstantem Druck steht. Die Bombe ist ganz von Wasser umgeben und besitzt die gleiche Temperatur wie das Wasser. Gegenüber der Umgebung ist das Bombenkalorimeter adiabatisch. Durch Rühren wird für einen raschen Temperaturengleich zwischen Bombe und Wassermantel gesorgt.

LiquiTOC

Die ursprünglich geplanten Untersuchungen zur zeitabhängigen Freisetzung des Kohlenstoffs aus einer Laborprobe mittels des LiquiTOC-Gerätes sind nicht weiter verfolgt worden, da Vergleiche mit TG-Untersuchungen gezeigt haben, dass keine verlässliche Aussage über die Freisetzungsdauer und den Freisetzungsbeginn getätigt werden können. Ursachen hierfür liegen in Verdünnungseffekten und den Gastransportwegen im LiquiTOC.

Fraunhofer FINGERPRINT – Methode

Die Fraunhofer FINGERPRINT – Methode basiert auf einer Abwandlung der herkömmlichen Elementaranalyse im CHN-Analysator.

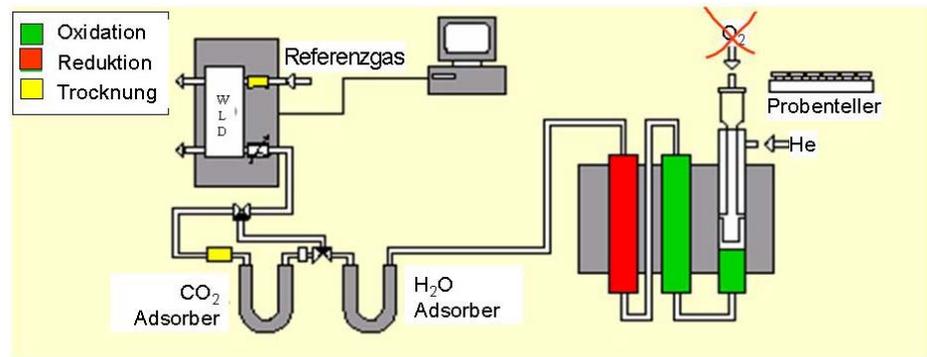
Im ersten Schritt wird die zu untersuchende Probe unter Sauerstoffmangel bei unterschiedlichen Temperaturen zersetzt. Aufgrund der komplexen Zusammensetzung des gebildeten Substanzgemisches ist eine analytische Charakterisierung nur eingeschränkt und mit hohem Aufwand möglich. Deshalb werden die flüchtigen Bestandteile in einem zweiten Schritt verbrannt und die Produkte CO_2 , N_2 und H_2O bestimmt. Hierdurch lässt sich ein charakteristischer »Fingerprint« für den Brennstoff ermitteln, der die Freisetzung C-, N- und H-haltiger Zersetzungsprodukte in Abhängigkeit von der Temperatur beschreibt. Aus der Zusammensetzung der flüchtigen Bestandteile kann ihr Heizwert berechnet werden. Durch die anschließende Oxidation des Zersetzungsrückstands bei 900°C wird ebenfalls dessen Zusammensetzung ermittelt. Hierdurch erhält man den Anteil an fixem Kohlenstoff (C_{fix}).

Die Messungen werden mit einem handelsüblichen Elementaranalysator durchgeführt (Abbildung 3-2-1). Er besteht aus drei hintereinander geschalteten Öfen. Im Normalbetrieb erfolgt die Bestimmung der Elementarzusammensetzung durch die Verbrennung einer Probe im ersten Ofen bei 900°C bis 1150°C . Im zweiten Ofen werden die gebildeten Verbrennungsprodukte nachoxidiert. Nachgeschaltet ist ein Reduktionsofen, in dem Stickoxide zu molekularem Stickstoff reduziert und überschüssiger Sauerstoff, sowie Chlor und Schwefelverbindungen zurückgehalten werden. Der gebildete Stickstoff wird direkt zum Wärmeleitfähigkeitsdetektor (WLD) transportiert und dort quantitativ erfasst. Ebenfalls zu quantifizierende Gase wie CO_2 und H_2O , die sich aus dem Kohlenstoff- und Wasserstoffanteil der Brennstoffe bilden, werden von spezifisch wirkenden Adsorptionsfallen zurückgehalten, nacheinander kontrolliert thermisch freigesetzt und ebenfalls mit Hilfe des Wärmeleitfähigkeitsdetektors erfasst. Nach der quantitativen Erfassung der Gase N_2 , CO_2 und H_2O wird der C-, H- und N-Gehalt des Brennstoffs berechnet.

Um das thermische Freisetzungsverhalten der flüchtigen Bestandteile zu bestimmen, wurde die oben beschriebene konventionelle Vorgehensweise modifiziert und der erste Ofen hierzu ohne Zuführung von Sauerstoff betrieben. Dabei werden die flüchtigen Bestandteile freigesetzt und im zweiten Ofen mit Hilfe eines

Oxidationsmittels oxidiert. Die Zersetzung im ersten Ofen erfolgt bei unterschiedlichen Temperaturen [Marzi, 2005].

Abbildung 3-2-1:
abbildungsbeschreibung [MARZI, Fingerprint]



Hierbei wird zunächst die in einer Laborwaage gewogene Probe auf die Zieltemperatur erhitzt. Danach wird die Probe entnommen, erneut gewogen und im Exsikkator aufbewahrt. Der Elementaranalysator wird nun ohne Probe auf 900 °C aufgeheizt, um evtl. auskondensierte flüchtige Bestandteile mit dem WLD erfassen zu können. Die hierbei gemessenen Gaskonzentrationen werden den zuvor gemessenen Flüchtigkonzentrationen zuaddiert. Im Anschluss daran wird die im Exsikkator gelagerte Probe (Pyrolyserückstand) im Elementaranalysator mittels Standardbetriebsverfahren auf ihren C-, H- und N-Gehalt hin untersucht. Die Elementaranalyse des Pyrolyserückstands bietet die Möglichkeit, über Differenzbildung die Elementarverteilung der Flüchtigen zu berechnen. Hierzu sind jedoch gewöhnliche Elementar- und Immediatanalyse des Brennstoffs erforderlich. Diese Analysen werden bei jeder FINGERPRINT-Untersuchung mit durchgeführt. Abbildung 3-2-2 zeigt die Eingabemaske der hierfür geschaffenen Auswertesoftware, welche eine Übersicht des Berechnungsverfahrens wiedergibt. Die gelb hinterlegten Felder müssen durch Eingaben bearbeitet werden.

Abbildung 3-2-2:
Eingabemaske der
FINGERPRINT-
Auswertung, Beispiel:
Temperaturstufe
500 °C eines Brenn-
stoffs

Formular leeren!

Werte eintragen!

Auswertung

Probe
Probenbezeichnung:

Messung
 Messung 1
 Messung 2

Temperatur
 Ofen 1: °C
 Ofen 2: °C
 Ofen 3: °C

Erlaubte Fehler
 Feststoff: mg
 Gas: Ma.-%

Masse-Berechnungen

Teigelmassen:
 Anfangsleertgewicht: g
 Anfangsvollgewicht: g
 Pyrolysegewicht: g
 Oxidationsgewicht: g
 Endergewicht: g

Masse-Berechnungen
 Problemasseseite: $f = b - a = 140,37$ mg
 Engastmasse: $g = b - c = 27,13$ mg
 Masse Oxidierter Engastmasse: $h = c - d = 107,76$ mg
 Masse Oxidations-Rückstand (Kontrollwert): $o = d - e = 5,48$ mg

Masse-Berechnungen (bezogen auf Einwaage)
 Engast: $k = g / f = 19,327$ Ma.-%
 Oxidierter Engastungs-Rückstand: $m = h / f = 76,768$ Ma.-%
 Engastungs-Rückstand: $l = i / f = 80,672$ Ma.-%
 Oxidations-Rückstand: $n = j / f = 3,9039$ Ma.-%

Klassische Daten

Brennwert in MJ/kg:

Heizwert in MJ/kg:

Flüchtige in Ma.-% TS:

C-fix in Ma.-% TS:

Asche in Ma.-%:

C: in Ma.-% TS

H: in Ma.-% TS

N: in Ma.-% TS

Masse-Berechnungen

Problemasseseite: $f = b - a = 140,37$ mg
 Engastmasse: $g = b - c = 27,13$ mg
 Masse Oxidierter Engastmasse: $h = c - d = 107,76$ mg
 Masse Oxidations-Rückstand (Kontrollwert): $o = d - e = 5,48$ mg

Masse-Berechnungen (bezogen auf Einwaage)
 Engast: $k = g / f = 19,327$ Ma.-%
 Oxidierter Engastungs-Rückstand: $m = h / f = 76,768$ Ma.-%
 Engastungs-Rückstand: $l = i / f = 80,672$ Ma.-%
 Oxidations-Rückstand: $n = j / f = 3,9039$ Ma.-%

Konzentration Rückstandverbrennung

Stickstoff: Ma.-%
 Kohlenstoff: Ma.-%
 Wasserstoff: Ma.-%

Konzentration Rückstandverbrennung (mit O2)

Stickstoff: Ma.-%
 Kohlenstoff: Ma.-%
 Wasserstoff: Ma.-%

Konzentration flüchtigenverbrennung

Stickstoff: Ma.-%
 Kohlenstoff: Ma.-%
 Wasserstoff: Ma.-%

Integrierte Masse-Berechnungen, Rückstand

Stickstoff: Ma.-%
 Kohlenstoff: Ma.-%
 Wasserstoff: Ma.-%

Integrierte Masse-Berechnungen, Rückstand

Stickstoff: Ma.-%
 Kohlenstoff: Ma.-%
 Wasserstoff: Ma.-%

Integrierte Masse-Berechnungen, flüchtige

Stickstoff: Ma.-%
 Kohlenstoff: Ma.-%
 Wasserstoff: Ma.-%

Integrierte Masse-Berechnungen, flüchtige

Wasserstoff: $ih = fh + bh = 2,248$ Ma.-%
 Kohlenstoff: $ic = fc + bc = 12,719$ Ma.-%
 Stickstoff: $in = fn + bn = 0,866$ Ma.-%
 Sauerstoff: $io = k - (ih + ic + in) = 3,494492$ Ma.-%

Rückstandszusammensetzung

Rückstandszusammensetzung

$ro = m - (fh + fc + fn)$

Sauerstoff: Ma.-%

Dokument leeren

August 2011

»Verbesserung der Feuerraummodellierung...«, FV-Nr.: 15780

12

Das in Abbildung 3-2-2 gezeigte Beispiel verdeutlicht die notwendigen Messschritte, um die Freisetzung einer Temperaturstufe zu bestimmen. Hierzu sind vier Elementaranalysen mittels CHN-Analysator, vier Massenbestimmungen mittels Laborwaage und eine Immediatanalyse (welche wiederum Massebestimmungen beinhaltet) notwendig. Es ergeben sich hieraus m_{leer} als Tiegelleermasse, m_{voll} als Tiegelvollmasse, m_{pyr} als Masse des Pyrolyserückstands, m_{ox} als Oxidationsrückstand und die jeweiligen Gaskonzentrationen H_{pyr} , H_{blind} , H_{ox} (analog für N und C). Am Beispiel des Wasserstoffs wird nun die Berechnung der jeweiligen freigesetzten Gasmenge $H_{T,i}$ in Ma.-% bei der Temperatur T_i gezeigt. Nachfolgend wird diese Methode als FINGERPRINT 1 bezeichnet.

$$H_{T_i} = H_{\text{pyr},T_i} + H_{\text{blind},T_i} \quad (3-2-1)$$

Analog werden die Flüchtigkonzentrationen für $C_{T,i}$ und $N_{T,i}$ berechnet. Die entgaste Sauerstoffmenge $O_{T,i}$ berechnet sich mit m_{entgast} als entgaster Massenanteil in Ma.-% folgendermaßen:

$$m_{\text{entgast}} = \frac{m_{\text{voll}} - m_{\text{pyr}}}{m_{\text{voll}} - m_{\text{leer}}} \quad (3-2-2)$$

$$O_{T_i} = m_{\text{entgast}} - C_{T_i} - H_{T_i} - N_{T_i} \quad (3-2-3)$$

Alternativ bietet sich eine Berechnungsmethode FINGERPRINT 2 an. Hierbei werden die Elementarverteilungskonzentrationen des Pyrolyserückstands von den Konzentrationen (C_{el} , H_{el} , N_{el}) des Brennstoffs subtrahiert. Am Beispiel des Wasserstoffs vollzieht sich die Berechnung zu

$$H_{T_i,II} = H_{\text{el}} - H_{\text{ox},T_i} \quad (3-2-4)$$

Die Berechnung des entgasten Sauerstoffs erfolgt analog Gleichung 3-2-3 nach

$$O_{T_i,II} = m_{\text{entgast}} - C_{T_i,II} - H_{T_i,II} - N_{T_i,II} \quad (3-2-5)$$

Für Temperaturstufen $T_i < 600$ °C wird die Berechnungsmethode FINGERPRINT 2 genutzt, da bei niedrigeren Temperaturen der zweite Ofen des Elementaranalysators aus konstruktiven Gründen ebenfalls in seiner Temperatur abgesenkt werden muss. Während des Pyrolysevorgangs ist hier mit einer unvollständigen Oxidation der Flüchtigen zu rechnen, so dass das Rauchgas auch andere Komponenten als CO_2 , H_2O und N_2 enthalten könnte, die der WLD nicht erfasst. Die Messdaten der Konzentrationen C_{pyr} , H_{pyr} und N_{pyr} sind an dieser Stelle also evtl. nicht aussagekräftig. Aus diesem Grund wird FINGERPRINT 2 verwendet, da hier diese Messgrößen nicht einfließen. Für Temperaturstufen $T_i > 600$ °C wird FINGERPRINT 1 verwendet.

Für die Massenbestimmung wird jeweils eine Analysenwaage TB 215D der Firma Denver Instrument genutzt. Zwischen den einzelnen Untersuchungsschritten

kann sich die Probenmasse durch Wasseraufnahme aus der Luft ändern. Durch Lagern im Exsikkator wird versucht dies zu vermeiden. Trotzdem ist ein gewisser Messfehler nicht zu vermeiden. Gerade bei niedrigen Freisetzungsraten im unteren Temperaturbereich, bei denen teilweise weniger als 1E-04 mg umgesetzt werden, kann es hierdurch zu Inkonsistenzen bei der Berechnung des Sauerstoffgehaltes kommen. Die Messfehler des Verfahrens kulminieren in diesem Wert. Die Auswertung der Messdaten, und damit auch die Messfehlerbehandlung, werden in Abschnitt 3.2.5 dargelegt.

3.2.2 TB 2A: Charakterisierung von Referenzmaterialien (Reine Brennstoffe)

Die vorgestellten Methoden wurden nun an ausgewählten Referenzmaterialien durchgeführt. Hierdurch ergibt sich die Möglichkeit, grundlegende Aussagen über den Einfluss einer Mischbrennstoff-Zusammensetzung auf das zu erwartende Verbrennungsverhalten abzuleiten.

Als Referenzmaterialien wurden die in Tabelle 3-2-1 aufgeführten Materialien ausgewählt. Dabei wurden auch Vorschläge des Projektbegleitenden Ausschusses (PBA) berücksichtigt. Unter anderem wurden Einzelfractionen einer Sortierung des Bayerischen Landesamtes für Umwelt (LfU) hinzugezogen. Für die Freigabe dieser Daten und Überlassung von Probenmaterial danken wir Hr. Dr. Warnecke von der Gemeinschaftskraftwerk Schweinfurt GmbH.

Tabelle 3-2-1: Auswahl der Referenzmaterialien

Stoffklasse	Material
Kunststoff	PE (Polyethylen)
	PP (Polypropylen)
	PMMA (Polymethylmethacrylat)
Biomasse	Buchenholz
	Zellulose
	Lignin
andere Materialien	Papier
	Reifengummi
	Ausgewählte Fraktionen LfU-Sortierung

LfU: Bayerisches Landesamt für Umweltschutz

Diese Materialien wurden hinsichtlich ihres Freisetzungsverhaltens der Flüchtigen in Abhängigkeit von der Temperatur nach der FINGERPRINT-Methode (s. Abschnitt 3.2.1) untersucht. Außerdem wurden klassische Laborwerte bestimmt. Die

Ergebnisse der Untersuchungen sind nachfolgend aufgeführt (beispielhaft für PE und Buchenholz, alle übrigen Ergebnisse finden sich im Anhang wieder).

PE (POLYETHYLEN)

PE ist ein Thermoplast und findet Anwendung bei der Rohr- und Kabelisolierungsherstellung. Außerdem ist es ein verbreitetes Verpackungsmaterial. Der weltweite Anteil an der Kunststoffproduktion betrug 2001 mit 52 mio. t ca. 29 % [Beer, 2001]. In Tabelle 3-2-2 und 3-2-3 sind die Ergebnisse der Labor-Versuche dargestellt.

Tabelle 3-2-2: Polyethylen - FINGERPRINT und Elementaranalyse (TS)

Methode	Temperatur in °C	Flüchtigenzusammensetzung in Ma.-%				Rückstandszusammensetzung in Ma.-%		
		C	H	N	O	C	H	N
Fingerprint	300	0,4	0,1	0,0	0,0	86,2	14,4	0,0
	430	86,5	14,6	0,0	0,0	0,9	0,1	0,2
	600	86,5	14,6	0,0	0,0	0,1	0,0	0,2
	900	86,5	14,5	0,1	0,0	0,0	0,0	0,2
Elementaranalyse	900	86,5	14,6	0,1				

TS: Trockensubstanz

Nicht stetig steigende Konzentrationen sind nicht plausibel. Sie sind auf Messungenauigkeiten beim Bestimmen der Probenmassen zurückzuführen (s. Abschnitt 3.2.1). Eine Kompensation der Messfehler wird später beschrieben.

Tabelle 3-2-3: Polyethylen - klassische Methoden

Parameter	Wert	Einheit
Ascheanteil	0	Ma.-% TS
Flüchtigenanteil	100	Ma.-% TS
Cfix-Anteil	0	Ma.-% TS
Heizwert	46,3	MJ/kg TS

BUCHENHOLZ

Das untersuchte Buchenholz war unbehandelt und lutro (lufttrocken). Wie alle Proben wurde es nach der Zerkleinerung komplett getrocknet. Buchenholz ist ei-

ner der häufigsten Laubbäume Europas und besitzt zudem mit eine der höchsten Einschlagszahlen. Es wird u. a. als Industrie-, Bau- oder Möbelholz verwendet. In den Tabellen 3-2-4 und 3-2-5 sind die Ergebnisse der Labor-Versuche dargestellt.

Tabelle 3-2-4: Buchenholz - FINGERPRINT und Elementaranalyse (TS)

Methode	Temperatur in °C	Flüchtigenzusammensetzung in Ma.-%				Rückstandszusammensetzung in Ma.-%		
		C	H	N	O	C	H	N
Fingerprint	300	19,8	3,9	0,0	30,6	29,0	2,4	0,4
	500	31,4	5,7	0,0	42,3	17,4	0,6	0,1
	700	34,8	6,0	0,1	42,1	13,4	0,2	0,1
	900	36,7	6,1	0,1	45,0	11,2	0,1	0,2
Elementaranalyse	900	48,8	6,3	0,1				

TS: Trockensubstanz

Tabelle 3-2-5: Buchenholz - klassische Methoden

Parameter	Wert	Einheit
Ascheanteil	0	Ma.-% TS
Flüchtigenanteil	88	Ma.-% TS
Cfix-Anteil	12	Ma.-% TS
Heizwert	18,7	MJ/kg TS

Die vorliegenden Untersuchungsergebnisse ergeben ein breites Wissen über die verbrennungstechnischen Charakteristika der Referenzmaterialien, welche in laborüblichen Mengen und Korngrößen untersucht wurden. Es handelt sich jedoch um fehlerbehaftete Messgrößen. Wie deren Auswertung und Übertragung in modellkompatible Formate erfolgt, wird in einem späteren Abschnitt erläutert. Im nachfolgenden Abschnitt werden nun aus bestimmten Referenzmaterialfraktionen Mischproben gebildet.

Die übrigen Analyseergebnisse befinden sich im Anhang.

3.2.3 TB 2B: Charakterisierung von künstlich hergestellten Mischbrennstoffen (definierte Mischung)

ZUSAMMENSETZUNG DER MISCHUNG

Um die Übertragbarkeit der untersuchten Referenzstoffe auf Mischproben zu untersuchen, wurden zwei künstlich hergestellte Mischbrennstoffe betrachtet. Die Modell-Brennstoffe EBS-synth und Abfall-synth bestehen aus Kunststoff-Folie (PE), Papier, Textilien (Baumwolle), Keramik-Kugeln und Buchenholz (siehe Abbildung 3-2-3 und Tabelle 3-2-6).

Abbildung 3-2-3:
Einzelbestandteile der künstlich hergestellten Mischbrennstoffe



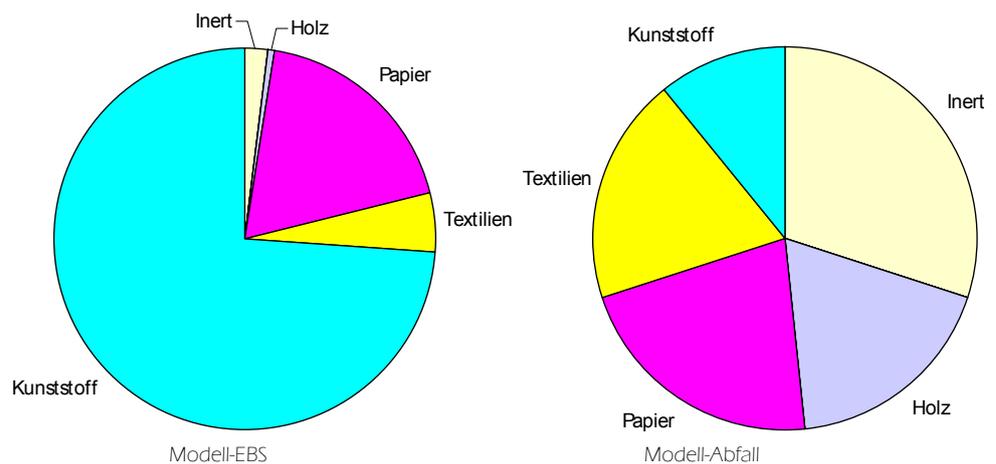
Das Mischungsverhältnis des EBS-synth wurde durch die Sortieranalyse einer üblichen EBS-Probe erhalten. Die Einzelfractionen aus der Sortieranalyse wurden den oben genannten Fraktionen des Modells zugeordnet. Verbundmaterialien aus der Original-Probe wurden zu je einem Drittel der Kunststofffolie, dem Papier und dem inerten Bestandteil des Modell-Brennstoffs zugeteilt. Das Mischungsverhältnis des Abfall-synth wurde aus der Zusammensetzung des EBS-synth abgeleitet, indem dessen Biomasse- und Inertanteil erhöht und Kunststoffanteil entsprechend abgesenkt wurde.

Tabelle 3-2-6: Ersatzbrennstoff - klassische Methoden

Fraktion	Wert	Einheit
EBS-synth	100	Ma.-% TS
PE	73,9	Ma.-% TS
Papier	18,7	Ma.-% TS
Baumwolle	5,0	Ma.-% TS
Buchenholz	0,4	Ma.-% TS
Keramik	2,0	Ma.-% TS
Abfall-synth	100	Ma.-% TS
PE	10,9	Ma.-% TS
Papier	21,8	Ma.-% TS
Baumwolle	19,0	Ma.-% TS
Buchenholz	18,4	Ma.-% TS
Keramik	29,9	Ma.-% TS

Eine grafische Darstellung der Zusammensetzung findet sich unter Abbildung 3-2-4. Hier sind deutlich die unterschiedlichen Anteile an Kunststoffen, Inerten und Biomassen zu erkennen.

Abbildung 3-2-4:
Zusammensetzung
der Modellbrennstoffe
im Vergleich



ERGEBNISSE

In der nachfolgenden Tabelle sind die Ergebnisse der FINGERPRINT-, Elementar- und Immediatanalyse für den synthetischen EBS und den synthetischen Abfall aufgelistet.

Tabelle 3-2-7: EBS-synth - FINGERPRINT und Elementaranalyse (TS)

Methode	Temperatur in °C	Flüchtigenzusammensetzung in Ma.-%				Rückstandszusammensetzung in Ma.-%		
		C	H	N	O	C	H	N
Fingerprint	300	13,6	3,0	0,0	23,3	37,3	4,0	0,1
	500	36,5	6,5	0,1	39,6	14,4	0,5	0,1
	700	39,9	6,6	0,2	41,4	10,9	0,2	0,1
	900	42,1	6,9	0,2	45,5	8,9	0,1	0,1
Elementaranalyse	900							

TS: Trockensubstanz

Tabelle 3-2-8: EBS-synth - klassische Methoden

Parameter	Wert	Einheit
Ascheanteil	0,6	Ma.-% TS
Flüchtigenanteil	93,8	Ma.-% TS
Cfix-Anteil	3,9	Ma.-% TS
Heizwert	18,8	MJ/kg TS
Brennwert	20,3	MJ/kg TS

Tabelle 3-2-9: Abfall-synth - FINGERPRINT und Elementaranalyse (TS)

Methode	Temperatur in °C	Flüchtigenzusammensetzung in Ma.-%				Rückstandszusammensetzung in Ma.-%		
		C	H	N	O	C	H	N
Fingerprint	300	1,7	0,0	0,0	0,0	39,4	6,5	0,2
	500	38,7	6,5	0,2	9,8	2,3	0,1	0,0
	700	39,1	6,5	0,2	10,5	1,9	0,0	0,1
	900	39,6	6,5	0,2	11,7	1,4	0,0	0,1
Elementaranalyse	900	41,0	6,5	0,2				

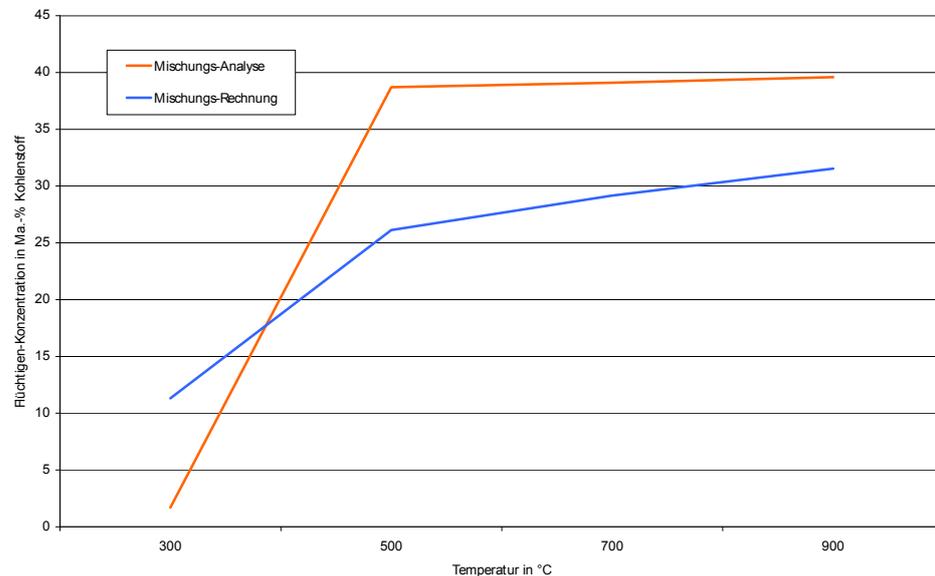
TS: Trockensubstanz

Tabelle 3-2-10: Abfall-synth - klassische Methoden

Parameter	Wert	Einheit
Ascheanteil	41,3	Ma.-% TS
Flüchtigenanteil	57,1	Ma.-% TS
Cfix-Anteil	1,6	Ma.-% TS
Heizwert	18,9	MJ/kg TS
Brennwert	20,3	MJ/kg TS

Ein Vergleich der tatsächlichen Mischung mit der rechnerisch ermittelten Mischung für den Brennstoff EBS-synth zeigt tendenziell gleiches Verhalten, aber nicht vollkommene Übereinstimmungen (s. Abbildung 3-2-5, beispielhaft für die Kohlenstoff-Freisetzung). Der Vergleich wurde als Summenwert aus den Referenzmaterial-Untersuchungen unter Berücksichtigung der Massenanteile gebildet. Aus den Abweichungen wird abgeleitet, dass eine Untersuchung der Mischfraktionen stets angebracht ist, auch wenn die Untersuchungen der Einzelfraktionen gut die Tendenz widerspiegelt.

Abbildung 3-2-5:
Vergleich der
Mischungs-Analyse
mit der Mischungs-
Rechnung am Beispiel
Abfall-synth, Kohlen-
stoff-Freisetzung



Gründe für die Abweichungen können durch die Heterogenität des Brennstoffs, durch Entmischung bei den Probenahmen oder durch Messungenauigkeiten verursacht worden sein. Eine weitere Fehlerquelle besteht bei der Herstellung des Brennstoffgemischs. Die ausgewählten Fraktionen neigen zur Separierung, was die Homogenisierung erschwert.

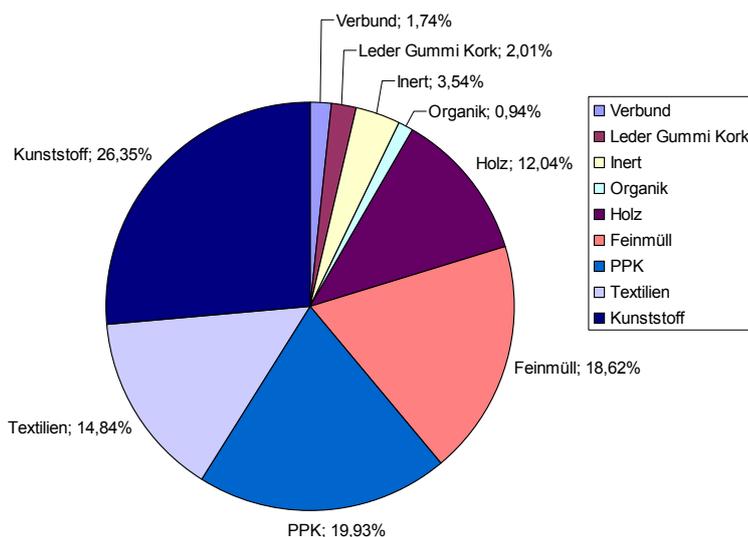
3.2.4 TB 2C: Charakterisierung von EBS und Abfallfraktionen

Nachdem Referenzmaterialien und reine Stoffe, sowie deren Mischungen untersucht wurden, werden im nachfolgenden Abschnitt die Ergebnisse realer Abfall- und EBS-Fraktionen vorgestellt. Da diese Fraktionen durch heterogene und schwankende Zusammensetzungen charakterisiert sind, ist eine einzelne Probenahme stets unter Vorbehalt auszuwerten. Im vorliegenden Forschungs-vorhaben konnte aus organisatorischen Gründen keine länger angelegte Probenahmekampagne durchgeführt werden. Da die Darstellung einer beispielhaften Analyse, Auswertung und Verwendung im Modell im Mittelpunkt des Vorhabens stand, war diese Vorgehensweise vertretbar. Sollen jedoch verlässliche Daten für Anlagenbewertungen oder Auslegungsfragen gewonnen werden, muss eine breite Probenahmekampagne durchgeführt werden. Wie z. B. der Heizwert einer Abfallverbrennungsanlage bei gleichbleibender Zusammensetzung innerhalb eines Jahres schwanken kann, ist in [Danz; 2008] dargestellt.

EBS (ERSATZBRENNSTOFF)

Die EBS-Fraktion wurde bei einer Probenahme an einer EBS-Feuerung gewonnen. Hierzu wurde aus einer LKW-Ladung eine ca. 700 l umfassende Probe gezogen. Die Probe enthielt keine Störstoffe und ca. 34 Ma.-% Wasser. Die Ergebnisse der Sortieranalyse (TS) sind in Abbildung 3-6 dargestellt. Die Erhebungsgesamtheit für die Sortieranalyse wurde durch Verjüngungen der homogenisierten Gesamtprobe gewonnen. Die Homogenisierung wurde durch eine Zerkleinerung der Gesamtprobe auf Korngrößen kleiner 20 mm erreicht.

Abbildung 3-2-6:
Sortieranalyse EBS-
Fraktion, Probenahme
vom 13.04.2010



Die Einteilung der Sortierfraktionen orientierte sich an einer Untersuchung des Bayerischen Landesamtes für Umweltschutz (LfU) [Marb, 2003]. Bei der Sortierung wurde die Fraktion Mittelmüll entgegen der LfU-Sortierung aufgrund des vorangegangenen Homogenisierungsschritts ebenfalls händisch sortiert. Die Laboruntersuchungen (FINGERPRINT, Elementar- und Immediatanalyse) sind in den nachfolgenden Tabellen dargestellt.

Tabelle 3-2-11: Ersatzbrennstoff - FINGERPRINT und Elementaranalyse (TS)

Methode	Temperatur in °C	Flüchtigenzusammensetzung in Ma.-%				Rückstandszusammensetzung in Ma.-%		
		C	H	N	O	C	H	N
Fingerprint	300	13,7	3,2	0,3	5,7	36,1	3,9	0,9
	500	35,9	6,5	0,6	15,8	13,9	0,5	0,6
	700	39,1	7,0	0,9	17,2	10,9	0,2	0,4
	900	38,0	6,8	1,1	16,3	9,9	0,0	0,3
Elementaranalyse	900	48,1	6,8	1,3				

TS: Trockensubstanz

Tabelle 3-2-12: Ersatzbrennstoff - klassische Methoden

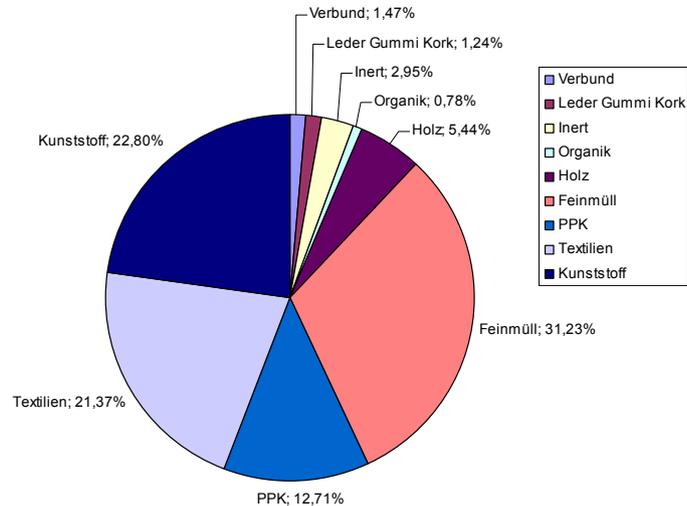
Parameter	Wert	Einheit
Ascheanteil	10	Ma.-% TS
Flüchtigenanteil	77	Ma.-% TS
Cfix-Anteil	13	Ma.-% TS
Heizwert	19,1	MJ/kg TS

Der hier vorgestellte EBS ist charakteristisch für diese Brennstoffklasse. Der Aschenanteil ist relativ gering, der Flüchtigenanteil sehr hoch. Dies deutet auf einen hohen Kunststoffanteil hin (s. Tabelle 3-2-12). Auch die FINGERPRINT-Analyse belegt dies, da der Hauptteil der Flüchtigen erst bei der Temperaturstufe 500 °C freigesetzt wurde. Im Vergleich zu den Referenzmaterialien weist dies ebenfalls auf einen hohen Anteil Kunststoff hin.

SIEDLUNGSABFALL

Die Abfall-Fraktion wurde bei einer Probenahme an einer Abfallfeuerung gewonnen. Hierzu wurde ebenfalls eine ca. 700 l umfassende Probe genommen, homogenisiert (Zerkleinerung auf < 20 mm), verjüngt und sortiert. Die Probe enthielt 9 Ma.-% Störstoffe und ca. 34 Ma.-% Wasser. Die in Abbildung 3-2-7 dargestellte Sortieranalyse bezieht sich auf die störstoff- und wasserfreie Probe. Vorbild für die Einteilung der Fraktionen war wiederum [Marb, 2003].

Abbildung 3-2-7:
Sortieranalyse Abfall-
Fraktion, Probenahme
vom 13.04.2010



Die Laboruntersuchungen (FINGERPRINT, Elementar- und Immediatanalyse) sind in den nachfolgenden Tabellen dargestellt.

Tabelle 3-2-13: Abfall - FINGERPRINT und Elementaranalyse (TS)

Methode	Temperatur in °C	Flüchtigenzusammensetzung in Ma.-%				Rückstandszusammensetzung in Ma.-%		
		C	H	N	O	C	H	N
Fingerprint	300	12,2	2,6	0,4	13,8	26,8	2,7	1,1
	500	27,5	4,9	0,8	14,5	11,5	0,4	0,7
	700	30,5	5,5	1,3	26,0	9,5	0,1	0,5
	900	32,1	5,6	1,5	29,7	8,4	0,0	0,3
Elementaranalyse	900	36,1	4,9	1,1				

TS: Trockensubstanz

Tabelle 3-2-14: Abfall - klassische Methoden

Parameter	Wert	Einheit
Ascheanteil	40	Ma.-% TS
Flüchtigenanteil	52	Ma.-% TS
Cfix-Anteil	8	Ma.-% TS
Heizwert	17,1	MJ/kg TS

Die Ergebnisse der im Rahmen einer Probenahmekampagne in Bayern erhaltenen Abfallfraktionen Feinmüll und Mittelmüll (s. [Marb; 2003]) befinden sich zu Vergleichszwecken im Anhang.

3.2.5 TB 2D: Auswertung

3.2.5.1 FINGERPRINT

Die Messung nach dem Fraunhofer FINGERPRINT-Verfahren wurde bereits in einem vorangegangenen Kapitel beschrieben. Nachfolgend wird erläutert, wie mit Messfehlern umgegangen wird und wie die weitere Messdatenauswertung erfolgt. Die Übertragung der Messdaten in modellkompatible Formate durch Umrechnung in Speziesverteilung mittels Gibbs-Minimierung wird in einem späteren Kapitel vorgestellt.

RECHNERISCHE KOMPENSATION DER MESSFEHLER

Die ermittelten Messdaten sollen in ein Verbrennungsmodell einfließen und müssen deshalb bestimmten Randbedingungen genügen. Messfehler können hierbei zu inkonsistenten Berechnungen führen. Zum Ausgleich der Messfehler wurden deshalb Randbedingungen bezüglich der Analyseauswertung postuliert.

1. Die Summen der Elementar- und Immediat-Analyse müssen sich zu 100 % ergänzen.

$$100\% = m_{\text{Asche}} + C_{\text{el}} + H_{\text{el}} + O_{\text{el}} + N_{\text{el}} + (Cl_{\text{el}} + S_{\text{el}}) \quad (3-2-6)$$

2. Die Summen der FINGERPRINT- und Immediatanalysen müssen sich zu 100 % ergänzen.

$$100\% = m_{\text{Asche}} + C_{T_i} + H_{T_i} + O_{T_i} + N_{T_i} + (Cl_{T_i} + S_{T_i}) + \dots \\ \dots + C_{\text{ox},T_i} + H_{\text{ox},T_i} + O_{\text{ox},T_i} + N_{\text{ox},T_i} + (Cl_{\text{Rest},T_i} + S_{\text{Rest},T_i}) \quad (3-2-7)$$

3. Die Gaskonzentrationen der Flüchtigen sind mit steigender Temperatur monoton steigend, die Konzentrationen des Rückstands dementsprechend monoton fallend.

4. Die Massenabnahme der Probe ist mit steigender Temperatur monoton steigend.

5. Konzentrationen sind immer größer, bzw. gleich 0.

Das erste Postulat kann eingehalten werden, in dem die Berechnung des Sauerstoffgehalts (O_{el}) nach

$$O_{\text{el}} = 100\% - [m_{\text{Asche}} + C_{\text{el}} + H_{\text{el}} + N_{\text{el}} + (Cl_{\text{el}} + S_{\text{el}})] \quad (3-2-8)$$

erfolgt. Zu beachten ist dies vor allem bei den getrennten Analysen für C, H und N im CHN-Analysator und Cl und S im Bombenkalorimeter, da der Sauerstoffgehalt normalerweise über die Differenz aus Asche und CHN zu 100 Ma.-% ermittelt wird. Asche- und Flüchtigengehalt werden mittels Immediatanalyse gewonnen.

Der bei jeder FINGERPRINT-Temperaturstufe über Differenzbildung ermittelte freigesetzte Sauerstoff O_{T_i} kann aufgrund von Messfehlern Werte kleiner 0 annehmen. In diesem Fall wird eine Korrektur vorgenommen: der entsprechende Wert wird 0 gesetzt und der Betrag des Wertes von den übrigen Konzentrationen anteilig subtrahiert.

$$O_{T_i}^* = 0 \quad (3-2-9)$$

Für Kohlenstoff lautet die Berechnung (bei CHON-Analyse)

$$C_{T_i}^* = C_{T_i} - \frac{|O_{T_i}|}{3}, \quad (3-2-10)$$

für Wasserstoff und Stickstoff erfolgt die Berechnung analog. Sollten durch die Korrekturen weitere Elemente in negative Konzentrationen abgleiten, wird die Korrektur analog wiederholt, bis alle Angaben dem 5. Postulat entsprechen.

Die Analysenwerte A_{T_i} der FINGERPRINT-Untersuchungen (im Folgenden stellvertretend für alle analysierten Elemente) werden nach

$$A_{T_i, \text{wakt}} = A_{T_i} \cdot \frac{100}{100 - m_{\text{Asche}} - m_{\text{Koks}}} \quad (3-2-11)$$

auf die wasser-, asche- und koks freie Probe bezogen. Somit werden nur noch die Elementaranteile der Flüchtigen betrachtet. Die Flüchtigen stellen das Reservoir A_R dar, aus dem bei unterschiedlichen Temperaturen unterschiedliche Konzentrationsanteile freigesetzt werden können, die FINGERPRINT_{wakt}-Konzentrationen repräsentieren die freigesetzten Flüchtigen. Beide müssen sich zu 100 % ergänzen (2. Postulat). Es gilt

$$A_R = A_{900^\circ\text{C}, \text{wakt}}, \quad (3-2-12)$$

da bei 900 °C die Normtemperatur zur Bestimmung der Flüchtigen liegt und davon auszugehen ist, dass alle Flüchtigen ausgetrieben werden.

Die bei der Temperatur T_i im Reservoir verbleibenden Flüchtigenanteile A_{R, T_i} berechnen sich zu

$$A_{R, T_i} = A_R - A_{T_i, \text{wakt}} \quad (3-2-13)$$

Nach Gleichung 3-2-X ergibt sich stets

$$A_{R,900^\circ C} = 0 \text{ Ma.} - \% . \quad (3-2-14)$$

Für niedrigere Temperaturstufen kann es aufgrund der angesprochenen Messfehler zu $A_{R,T_i} < 0 \text{ Ma.}\%$ kommen, was dem 5. Postulat und unter Berücksichtigung von Gleichung 3-2-X dem 3. Postulat widerspricht. Aus diesem Grund werden diese Messwerte angepasst.

Durch die Untersuchungsmethodik FINGERPRINT stehen sowohl die elementaren Zusammensetzungen der jeweiligen Flüchtigen, als auch der Pyrolyserückstände (Reservoir + Asche + Koks) zur Verfügung. Anhand der Messwerte können $A_{T_i, \text{waf}}$ und A_{R,T_i} berechnet werden (waf: wasser-, asche-, koksfrei). Dann wird die prozentuale Aufteilung zwischen asche- und koksreichem Reservoir p_R und der Flüchtigen p_{T_i} bestimmt. Anhand der Elementar- und Immediatanalyse wird der absolute (korrigierte) Elementengehalt der Flüchtigen ($A_{T_i, \text{waf}}^{**}$) und des Reservoirs (A_{R,T_i}^{**}) berechnet.

$$p_R = \frac{A_{R,T_i}}{A_{R,T_i} + A_{T_i, \text{waf}}} \cdot 100 \% \quad (3-2-15)$$

$$p_{T_i} = 100 \% - p_R = \frac{A_{T_i, \text{waf}}}{A_{R,T_i} + A_{T_i, \text{waf}}} \quad (3-2-16)$$

$$A_{T_i, \text{waf}}^{**} = p_{T_i} \cdot A_{El, \text{waf}} \quad (3-2-17)$$

$$A_{R,T_i, \text{waf}}^{**} = A_{El, \text{waf}} - A_{T_i, \text{waf}}^{**} \quad (3-2-18)$$

Hierdurch wird das 5. Postulat eingehalten. Die Monotonie der Steigungen wird durch eine weitere Anpassung gewährleistet.

Falls $A_{T_i}^{**} > A_{T_{i-1}}^{**}$ ist, ergeben sich zwei Fehlerkorrekturmethoden. Bei Methode 1 wird die Korrektur $A_{T_i}^{***}$ mit

$$A_{T_i, \text{waf}}^{***} = \frac{A_{T_{i+1}, \text{waf}}^{**} - A_{T_{i-1}, \text{waf}}^{**}}{2} + A_{T_{i-1}, \text{waf}}^{**} \quad (3-2-19)$$

vorgenommen, was einer linearen Interpolation zwischen vor- und nachgelagertem Messwert entspricht.

Bei Methode 2 wird

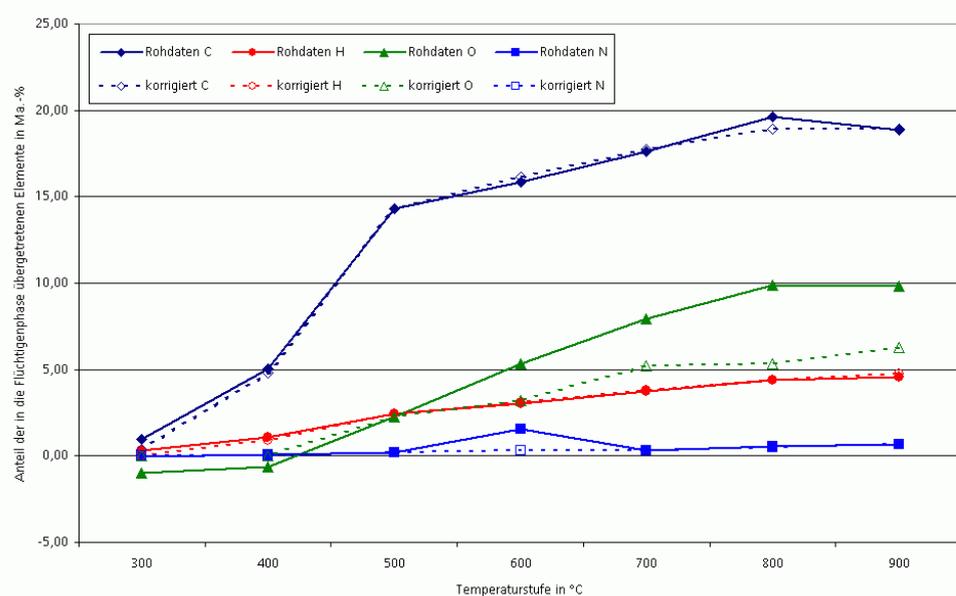
$$A_{T_i, \text{waf}}^{***} = A_{T_{i-1}, \text{waf}}^{**} \quad (3-2-20)$$

gesetzt. Da hierdurch die Abweichung zum ursprünglichen Messwert geringer ist, wird Methode 2 verwendet.

Die vorgestellten Anpassungen werden iterativ wiederholt, bis alle Postulate gleichzeitig eingehalten werden.

In Abbildung 3-2-8 ist ein Vergleich zwischen Roh- und Korrekturwerten dargestellt. Die Korrektur erfolgt automatisiert mittels Excel-VBA-Programm (Code, s. Anhang).

Abbildung 3-2-8:
Vergleich einer Brennstoffprobe – Rohdaten und korrigierte Daten der FINGERPRINT-Untersuchung



Aus Abbildung 3-2-8 ist ersichtlich, dass die Messdaten (CHN) nur kleine Korrekturen erfahren und lediglich die rechnerisch ermittelte Sauerstoffkonzentration eine große Korrekturabweichung aufweist. Dies ist auf die eingangs erwähnten Ungenauigkeiten bei den Massebestimmungen zurückzuführen.

HEIZWERTBERECHNUNG

Die durch die FINGERPRINT-Analysen gewonnenen elementaren Zusammensetzungen können genutzt werden, um mittels Modellgleichungen den Heizwertanteil der Flüchtigen am Gesamtbrennstoff abzuschätzen. Vor allem in Deutschland gebräuchlich ist hier eine Modellgleichung nach Boie [Boie; 1957], welche aus empirischen Daten und theoretischen Bildungsenthalpien abgeleitet wurde. Ursprünglich wurde diese Gleichung für die Heizwertberechnung von Torf genutzt, es hat sich aber auch eine ausreichende Übereinstimmung zu vielen Abfallfraktionen gezeigt. Mit C als Masseanteil des elementaren Kohlenstoffs, H (Wasserstoff), O (Sauerstoff) und N (Stickstoff) ergibt sich nach Boie der Heizwert H_i zu

$$H_i = 0,348 * C + 0,939 * H - 0,108 * O + 0,063 * N. \quad (3-2-21)$$

Da die angegebene Modellgleichung ursprünglich für Torf vorgesehen war und es deshalb zu größeren Abweichungen des errechneten Heizwerts zum realen kommen kann [Boie; 1957], wurde im Rahmen des Forschungsvorhabens eine Literaturrecherche durchgeführt. Hierbei wurde ein Berechnungsansatz nach Channiwala ermittelt [Channiwala; 2002]. Dieser Ansatz stellt eine Modellgleichung zur Verfügung, welche sowohl für feste, als auch für gasförmige Stoffe aufgestellt wurde. Die bessere Eignung zur Berechnung konnte durch Vergleiche mit im Bombenkalorimeter ermittelten Brennwerten belegt werden. Die Berechnung des Brennwertes H_s mit A (Asche) erfolgt durch

$$H_s = 0,3491 * C + 1,1783 * H - 0,1034 * O - 0,0151 * N - 0,0211 * A. \quad (3-2-22)$$

Da die vorliegende Formel lediglich den Brennwert berechnet, kann eine Umrechnung auf den Heizwert erfolgen. Nach [Rotter; 2003] und [Danz; 2008] erfolgt dies vereinfachend durch

$$H_i = 0,92 H_s \quad (3-2-23)$$

Im folgenden Abschnitt ERGEBNISSE sind die Heizwerte und zugehörigen Massenverluste grafisch und tabellarisch für vier Beispiel-Brennstoffe dargestellt. Im Anhang befinden sich sämtliche Auswertungen.

3.2.5.2 ERGEBNISSE

Die Korrektur der Messwerte und die daran anschließenden Berechnungen führen zu nachfolgenden Ergebnissen. Zum einen kann der bei einer bestimmten Temperatur freigesetzte Energieanteil berechnet werden. Zum anderen können Spezies-Verteilungen berechnet werden, die als Eingangsgröße in das später vorgestellte Rostmodell einfließen. Die Berechnungsmethode zur Ermittlung der Spezies-Verteilungen wird in einem späteren Abschnitt vorgestellt. Der besseren Übersichtlichkeit halber werden die Ergebnisse trotzdem schon in den nachfolgenden Tabellen aufgeführt.

PE

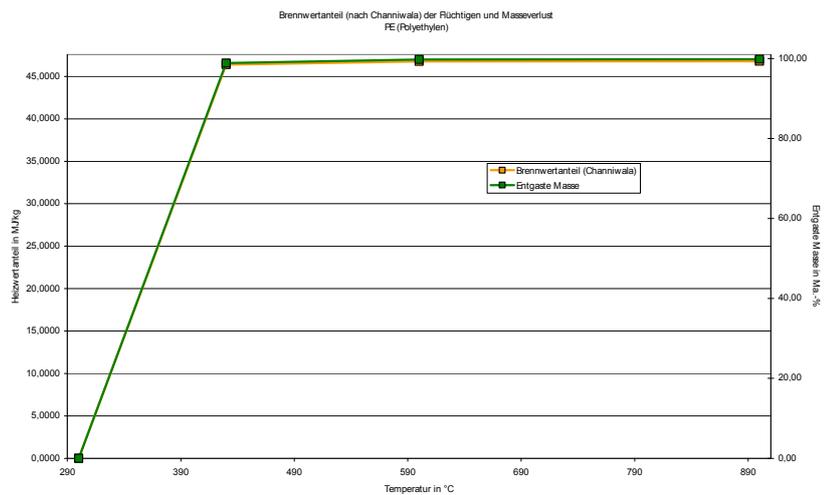
Die für den Brennstoff PE ermittelten Ergebnisse sind in Tabelle 3-2-15 dargestellt. Auffällig ist eine fast vollständige Freisetzung bei 430 °C. Dies ist durch die Homogenität der untersuchten Substanz verursacht. In der grafischen Darstellung (Abbildung 3-2-9) wird dies besonders deutlich.

Tabelle 3-2-15: Polyethylen - korrigierter FINGERPRINT und Elementaranalyse (TS)

Methode	Temperatur in °C	Flüchtigenzusammensetzung in Ma.-%				Rückstandszusammensetzung in Ma.-%			Brennwert in MJ/kg
		C	H	N	O	C	H	N	
Fingerprint - korrigiert	300	0,0	0,0	0,0	0,0	85,5	14,4	0,1	0,0
	430	84,9	14,3	0,0	0,0	0,9	0,1	0,1	46,4
	600	85,4	14,4	0,0	0,0	0,1	0,0	0,1	46,8
	900	85,4	14,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	46,8
Elementaranalyse	900	86,5	14,6	0,1					

TS: Trockensubstanz

Abbildung 3-2-9: Freisetzungsprofil (Heizwert) und Masseverlust der PE-Probe



Aus Abbildung 3-2-9 wird ersichtlich, dass Masseverlust und Heizwertanteil der Flüchtigen deckungsgleich verlaufen. D. h., der Heizwert, welcher in die flüchtige Phase übergeht ist stets proportional zum Masseverlust. Dass dies nicht immer der Fall ist, zeigt nachfolgendes Beispiel.

BUCHENHOLZ

Die Ergebnisse der Buchenholzuntersuchungen sind typisch für holzartige Biomassen. Nach einer raschen Freisetzung der leichter flüchtigen Bestandteile bis ca. 430 °C erfolgt eine schwache aber anhaltende Freisetzung oberhalb dieser Temperatur (s. Abbildung 3-2-10)

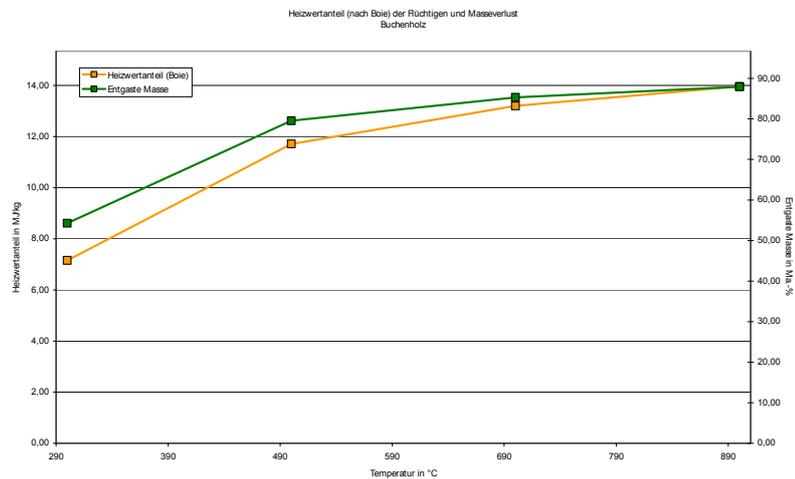
Tabelle 3-2-16: Buchenholz - korrigierter FINGERPRINT und Elementaranalyse (TS)

Methode	Temperatur in °C	Flüchtigenzusammensetzung in Ma.-%				Rückstandszusammensetzung in Ma.-%			Brennwert in MJ/kg
		C	H	N	O	C	H	N	
Fingerprint - korrigiert	300	19,8	3,8	0,0	30,7	29,0	2,5	0,1	8,2
	500	31,4	5,7	0,0	42,4	17,4	0,6	0,1	13,3
	700	35,3	6,0	0,0	44,0	13,5	0,2	0,0	14,9
	900	37,2	6,2	0,0	44,5	11,7	0,1	0,0	15,7
Elementaranalyse	900	48,8	6,3	0,1					

TS: Trockensubstanz

Abbildung 3-2-10:

Freisetzungsprofil (Heizwert) und Masseverlust der Buchenholz-Probe



Im Vergleich zum Freisetzungsprofil des Pes (vgl. Abbildung 3-2-9) sind beim Holz (Abbildung 3-2-10) Masseverlust und Heizwertanteil der Flüchtigen nicht deckungsgleich. Entscheidend ist hierbei jeweils die Steigung der Kurven, welche für den Heizwertanteil ab 500 °C höher ist als für den Masseverlust. Hieraus lässt sich ableiten, dass sich die Zusammensetzung der Flüchtigen und deren Heizwert geändert hat, was die elementare Verteilung aus Tabelle 3-2-16 ebenfalls zeigt.

EBS

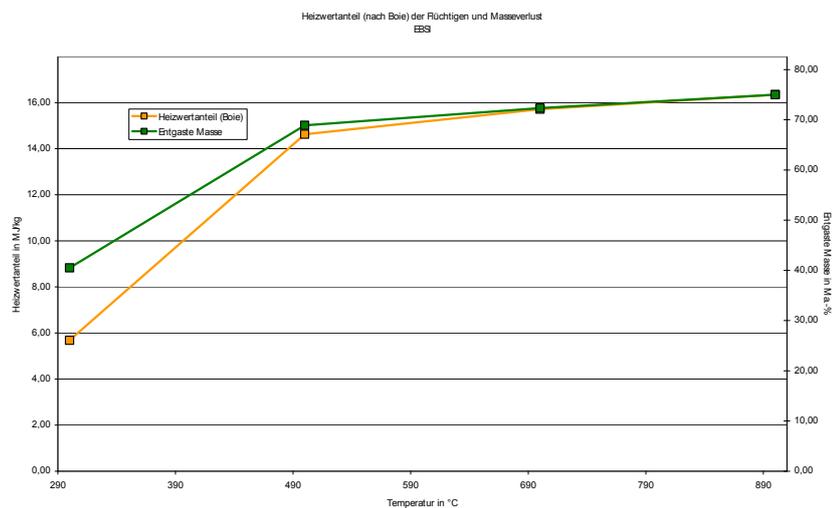
Der untersuchte Ersatzbrennstoff weist hohe Anteile an polymeren Kunststoffen und an Papier auf, weshalb es auch hier zu einer Freisetzung kommt, die zwischen PE und Buchenholz liegt (s. Abbildung 3-2-11). Die Freisetzung lässt sich deshalb vereinfachend als eine Überlagerung der Freisetzungskurven für PE und Buchenholz interpretieren.

Tabelle 3-2-17: EBS - korrigierter FINGERPRINT und Elementaranalyse (TS)

Methode	Temperatur in °C	Flüchtigenzusammensetzung in Ma.-%				Rückstandszusammensetzung in Ma.-%			Brennwert in MJ/kg
		C	H	N	O	C	H	N	
Fingerprint - korrigiert	300	14,2	3,4	0,4	22,6	33,9	3,4	0,9	6,4
	500	33,8	6,3	0,6	28,2	14,3	0,5	0,7	16,0
	700	36,1	6,6	0,9	28,8	12,0	0,2	0,4	17,2
	900	37,8	6,7	1,0	29,5	10,3	0,0	0,3	17,8
Elementaranalyse	900								

TS: Trockensubstanz

Abbildung 3-2-11: Freisetzungsprofil (Heizwert) und Masseverlust der EBS-Probe



SIEDLUNGSABFALL

Die Masseverlustkurve des Siedlungsabfalls ähnelt im Verlauf dem des Buchenholzes. Die absoluten Werte weichen durch den höheren Ascheanteil jedoch ab. Der ähnliche Verlauf ist auf den hohen Biomasse-Anteil in Siedlungsabfällen zurückzuführen.

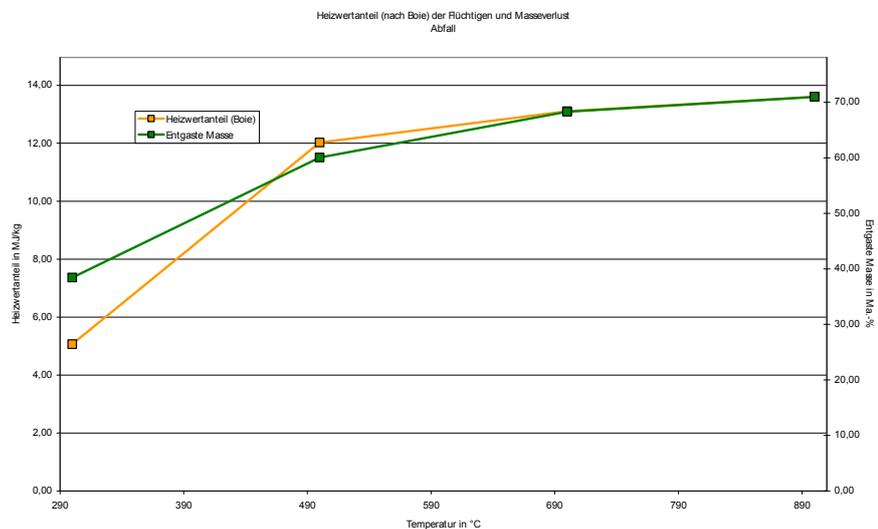
Die vorgestellten Ergebnisse zeigen, dass sich die vier ausgewählten Brennstoffe nicht nur hinsichtlich des Heizwertes und des Flüchtigenanteils unterscheiden. Sie zeigen außerdem, dass sich die elementare Zusammensetzung der Flüchtigen bei unterschiedlichen Freisetzungstemperaturen verschieben, bzw. ändern kann. Durch die Umrechnung in Speziesverteilungen bietet sich die Möglichkeit, diese Änderungen in Modelle einfließen zu lassen. Diese Vorgehensweise wird in späteren Abschnitten noch eingehender beschrieben.

Tabelle 3-2-18: Abfall - korrigierter FINGERPRINT und Elementaranalyse (TS)

Methode	Temperatur in °C	Flüchtigenzusammensetzung in Ma.-%				Rückstandszusammensetzung in Ma.-%			Brennwert in MJ/kg
		C	H	N	O	C	H	N	
Fingerprint - korrigiert	300	13,7	2,8	0,6	21,4	28,2	2,9	1,2	5,4
	500	28,3	5,2	0,9	25,6	13,6	0,5	0,8	12,9
	700	31,7	5,6	1,3	29,8	10,2	0,1	0,4	14,1
	900	33,1	5,7	1,5	30,7	8,8	0,0	0,2	14,6
Elementaranalyse	900	41,9	5,7	1,7					

TS: Trockensubstanz

Abbildung 3-2-12: Freisetzungsprofil (Heizwert) und Masseverlust der Abfall-Probe



3.3 TB 3: Entwicklung einer Versuchsanlage zur temperaturabhängigen Freisetzung flüchtiger Stoffe im Technikumsmaßstab

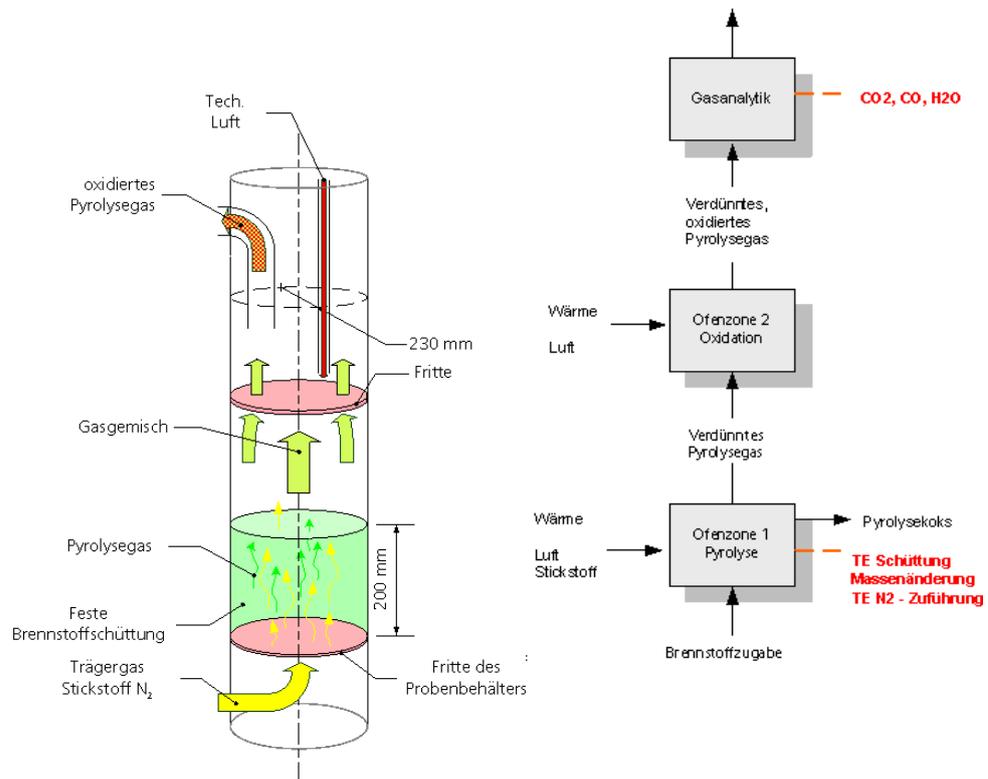
3.3.1 TB 3A: Konzeption und Planung der Versuchsanlage

Die Versuchsanlage basiert auf der bei Fraunhofer UMSICHT entwickelten FINGERPRINT-Methode. Das Verfahren wird vor allem durch eine zweigeteilte Umsetzung der Probe charakterisiert. In einer ersten Ofenzone wird der feste Brennstoff in inerter Atmosphäre erhitzt, wodurch flüchtige Bestandteile freigesetzt werden. Diese werden in eine zweite, räumlich und thermisch getrennte Ofenzone überführt. Dort findet die Oxidation der flüchtigen Bestandteile statt. Nachgeschaltet ist eine Analyse der entstehenden Rauchgase. Für die Versuchsanlage im Technikum leiten sich aus der Zielstellung des Forschungsprojektes und der basierenden Labormethode folgende Anforderungen ab:

- Inerte Pyrolysezone (IPZ), in die fester Brennstoff eingebracht werden kann,
- räumlich und thermisch getrennte Oxidationszone, in der eine thermische Nachverbrennung der Flüchtigen statt findet (TNV),
- Probenvolumen bis 10 l,
- Beheizung der IPZ und der TNV bis 1 000 °C,
- Überführung der entstehenden Rauchgase in eine geeignete Gasanalytik,
- Möglichkeit zur Bestimmung des Masseverlusts der Probe,
- Möglichkeit zur Bestimmung des Temperaturverlaufs in der Probe und
- Sicherheitsmaßnahmen, um explosive Gemische in heißen Ofenatmosphären zu vermeiden.

Die an die Versuchsanlage gestellten Anforderungen führten zur Entwicklung eines Ofenkonzeptes mit einem zylindrischen Ofeninnenraum, der durch eine gasdurchlässige Fritte in die IPZ und TNV getrennt wird. Die Sauerstoffzufuhr in die TNV erfolgt durch ein Keramikrohr, aus dem technische Luft (öl- und wasserfrei) einströmt (s. Abbildung 3-3-1).

Abbildung 3-3-1:
Strömungsweg der
Gase

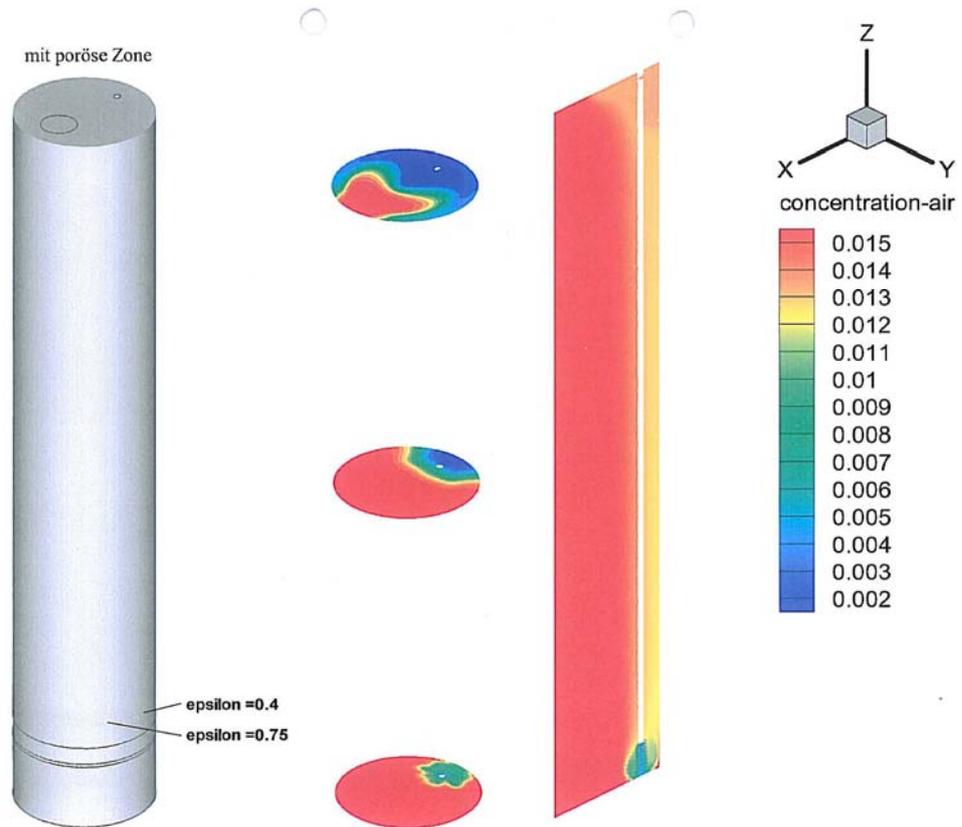


Das Keramikrohr durchzieht den gesamten Innenraum der TNV, um eine ausreichende Vorwärmung der Verbrennungsluft zu gewährleisten. Um die Inertisierung der IPZ aufrecht zu erhalten, sind IPZ und TNV durch eine Keramikfritte getrennt und die IPZ wird von unten mit Stickstoff durchströmt. Eine Strömung von Luft in die IPZ wird durch einen stets höheren Volumenstrom an Stickstoff verhindert. Die Strömungsrichtung ist also immer von unten nach oben.

3.3.2 TB 3B: Überprüfung des Ofenkonzepts

Das Ofenkonzept wurde hinsichtlich mehrerer Aspekte überprüft. Zum einen muss die Oxidation in der TNV sichergestellt werden. Da vermutet wurde, dass die aus dem Keramikrohr austretende Verbrennungsluft viel kälter als die TNV-Innentemperatur ist, ist eine schlechte Durchmischung der Gase und somit eine schlechte Oxidationsrate nicht ausgeschlossen. Aus diesem Grund wurde eine Strömungs- und Reaktionssimulation mittels CFD (Computational Fluid Dynamics)-Software vorgenommen. In Abbildung 3-3-2 ist das Ergebnis der Berechnung dargestellt. Es ist zu sehen, dass die austretende Luft ausreichend mit den Pyrolysegasen vermischt wird und überall genügend Sauerstoff für Verbrennungsreaktionen zur Verfügung steht.

Abbildung 3-3-2:
Berechnung zur O₂-
Verteilung in der TNV



Um die Durchmischung der Gase zu begünstigen, wurde weiterhin eine Keramikschüttung in der TNV vorgesehen. Beim Durchströmen kommt es zu Turbulenzen, die die gewünschte Durchmischung bewirken. Weiterhin stellen die Keramikelemente Zündflächen für die Gasgemische bereit, was ebenfalls die Oxidationsvorgänge voran treibt. Hierzu wurden mehrere Schüttungsmaterialien auf ihre Eignung hin untersucht (Schüttdichte, Schüttungsporosität). Die untersuchten Materialien sind in Abbildung 3-3-3 abgebildet.

Abbildung 3-3-3:
Verschiedene
Schüttungsmaterialien
zur Beförderung des
Umsatzverhaltens in
der TNV



Aufgrund des guten Verhältnisses zwischen Schütthöhe, Schüttgewicht und Porosität wurde der Reflux-Ring RR 35-4 als Schüttmaterial ausgewählt.

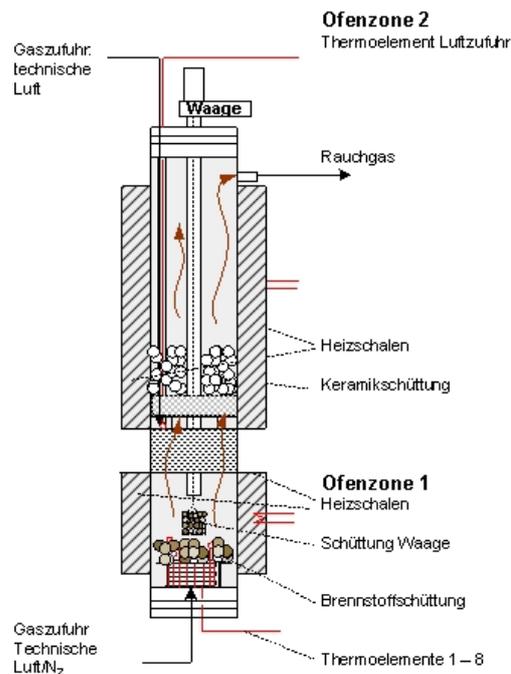
3.3.3 TB 3C: Bau und Installation der Versuchsanlage

Auf Grundlage der Planungen und Prüfungen (s. vorhergehende Abschnitte) wurde die Ofeneinheit errichtet. Hierzu wurde ein bereits bestehendes Quarzrohrsystem umgerüstet und notwendige Geräte und Messeinrichtungen ergänzt. Eine Aufstellung der verwendeten Mittel und der beschafften Geräte befindet sich in Kapitel 7 »Bezug zum Verwendungsnachweis«.

3.3.3.1 REAKTOR

Eine Prinzipskizze des Systems ist in Abbildung 3-3-4 dargestellt. In dieser Abbildung werden sowohl die Heizelemente als auch die Keramikschüttung und weitere technische Einrichtungen gezeigt.

Abbildung3-3-4:
Prinzipskizze der
Technikumsanlage



Die verwendeten Heizelemente sind gemäß der Zonen IPZ und TNV aufgeteilt und umschließen den Quarzglasreaktor. Die vordere Hälfte der Heizung ist für jede Zone separat aufklappbar (siehe Abbildung 3-3-5). Beim Aufklappen der Heizungen öffnet ein Endlagenschalter, welcher aus Sicherheitsgründen die Heizwendel ausschaltet. Der Abstand zwischen den zwei Heizzonen beträgt 110 mm. Dieser Bereich wird im Quarzglasreaktor durch einen Faserformzylinder geschlossen und dient als Fritte. Der Spalt zwischen Quarzglasreaktor und dem Ende der oberen Heizzone sowie zwischen der IPZ und TNV wird mit Thermoisolationmaterial abgedichtet. Als Heizelemente werden Fibrothal – Module verwendet. Diese sind in Reihe geschaltet und für einen Betrieb bei 230 V ausgelegt. Die Zonen

werden getrennt geregelt. Die Regel-Thermoelemente der Heizung sind außerhalb des Arbeitsrohres nahe den Heizspiralen radial angeordnet. Die Elemente befinden sich jeweils in der Mitte der Zone. Durch die Lage wird zwar eine vom Reaktorinnenraum systematisch abweichende Temperatur gemessen. Aus sicherheits- und regeltechnischen Gründen ist diese Anordnung der Thermoelemente notwendig gewesen.

Abbildung 3-3-5:
Quarzasreaktor mit
umgebenden
Heizschalen (geöffnet)



Eine technische Zeichnung der Heizeinheiten für die IPZ und TNV ist im Anhang (Heizeinheit Zone 1, Heizeinheit Zone 2) dargestellt.

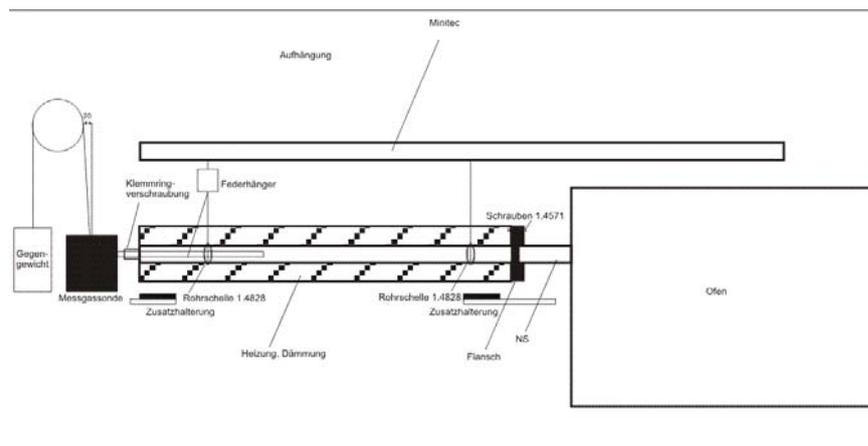
Der Quarzasreaktor wird an beiden Enden durch Flansche geschlossen. Die Endflansche sind mit einer Stangendichtung auf das Quarzrohr aufgesetzt und schließen dieses gasdicht ab. Beide Flansche sind wassergekühlt und mit zusätzlichen 6mm-Swagelock-Anschlüssen versehen. Die Kühlwasserkreisläufe beider Flansche sind getrennt voneinander geschaltet und werden beständig mit 10-gradigem Wasser versorgt. An den Endflanschen werden der Boden bzw. der Deckelflansch angeschraubt (s. Abbildung 3-3-6). Die Halterungen an den Flanschen sind auf dem Gerüst aufgesetzt und tragen damit den Reaktor (Technische Zeichnung Flansche und neues Rohr, s. Anlage).

Abbildung 3-3-6:
Abschlussflansch mit
Anschluss zur
Wasserkühlung



ist in Quarzglasreaktornähe mittels fixer Schelle an einer Gerüstbrücke zwischen Ofen und Gasanalytik befestigt. In Gasanalytiknähe ist die Befestigung durch einen Federhänger realisiert. Der Federhänger dient hier als Loslager. Bei Wärmeausdehnung des Stahlrohres erfolgt diese in Richtung Federhänger und nicht in Richtung Quarzglasreaktor (s. Abbildung 3-3-9)

Abbildung 3-3-9:
Aufhängung,
Stahlrohr



Die Messgassonde, welche die zur Messung bestimmten Gase entnimmt, ist frei hängend am Ende des Stahlrohres angebracht. Das zugehörige Gasentnahmerohr wird mittels Klemmringverschraubung im Stahlrohr befestigt. Die Gasentnahmesonde ist auf 180 °C beheizt, um ein Auskondensieren der Gase zu vermeiden.

Die Weiterleitung der Gase in die Gasanalytik erfolgt durch einen beheizten Schlauch. In der Gasanalytik wird zunächst der Wasseranteil bestimmt. In der Messgaskühlung wird anschließend das Gas getrocknet. Danach wird in der Gasanalytik der CO- und CO₂-Anteil bestimmt und der Wasseranteil rechnerisch berücksichtigt. Zwischen Messgaskühler und der Gasaufnahme von CO und CO₂ ist eine Wasserfalle der Fa. SUN-Control installiert. Die gesamte Gasanalytik setzt sich zusammen aus

- dem auf 120 °C beheizten Entnahmesonde mit Staubfilter,
- der auf 120 °C beheizten Messgasleitung (selbstregelnd und selbstbegrenzend)
- dem NGA 2000 MLT 2 – Analysator und
- dem Messgaskühler mit Schlauchpumpe.

Im Folgenden werden das Arbeitsprinzip der Messgasentnahme und Gasaufbereitung sowie die Gasanalytoren beschrieben.

Die Gasanalyse umfasst die Messung der Komponenten CO, CO₂ und H₂O. Für die Prozessanalyse wurde der MLT 2 – Multikomponenten-Gasanalytator NGA

2000 der Firma EMERSON ausgewählt. Die hierbei erforderlichen Anlagenbestandteile sind im Wesentlichen die Messgasentnahmesonde, beheizte Messgasleitung, Messgaskühler, Kondensatabscheider, Filter und Pumpe. Das Messgas wird mit Hilfe einer Membranpumpe gefördert. Der zu fördernde Volumenstrom ist über ein Ventil auf der Druckseite der Messgaspumpe regulierbar.

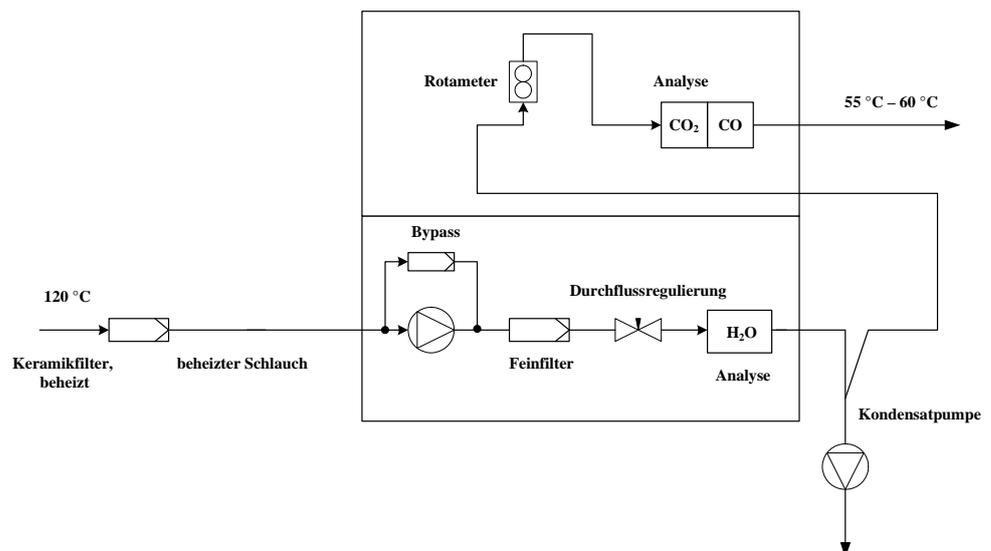
Durch eine unvollständige Oxidation in der TVN oder ein Auskondensieren der Rauchgase kann sich im Rauchgasweg Teer ansetzen. Um das nachgeschaltete Analysegerät nicht übermäßiger Verunreinigung bzw. einer eventuellen Beschädigung auszusetzen, wird nach der Messgasentnahmesonde das Rauchgas mit Hilfe eines Sintermetallfilters aufgenommen und von Störstoffen gereinigt.

Tabelle 3-3-1: Messbereiche der Gaskomponenten

Kanal	Gaskomponente	Messbereich
1	CO	0-1 Vol.-%
2	CO ₂	0-20 Vol.-%
3	H ₂ O	0-10 Vol.-%

Die beheizte Entnahmesonde ist mit einer Temperaturregelung, einem eingebauten Filterelement (Sintermetallfilter) und einem Prozessanschluss 6 mm Rohrverschraubung versehen. Der selbstregelnde Heizschlauch (NW 4) besteht aus einer festen PTFE-Seele und einem PA-Außengeflecht. Das Messgas wird in dem Heizschlauch auf 120 °C abgekühlt. Die beidseitigen RSL-Armaturen (6/4 mm-Rohr) sind aus V4A gefertigt. Die max. Umgebungstemperatur beschränkt sich auf 45 °C und die Betriebstemperatur auf ca. 120 °C. Die Messbereiche der jeweiligen Gaskomponenten werden in Tabelle 3-3-1 dargestellt.

Abbildung 3-3-10:
Gasweg, Analytik



Die Messgase werden nach dem Prinzip der nichtdispersiven Infrarot-Fotometrie (NDIR) gemessen. Dieses Verfahren beruht auf der Absorption von Infrarotlicht

durch das Messgas. Die Schwächung von Strahlung durch ein Gas folgt im Allgemeinen dem Lambert-Beerschen Gesetz.

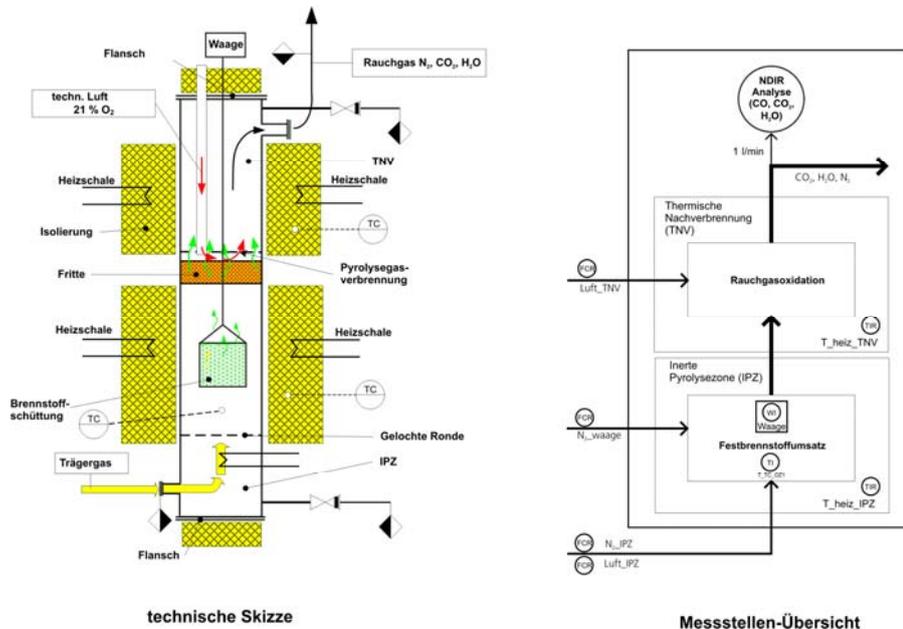
Jedes Gas absorbiert Licht bei charakteristischen Frequenzen. Dispersive Spektroskope senden nur bestimmte Frequenzen des Lichtes durch das Gas zum Empfänger. Das Licht wird an einem Gitter oder einem Prisma gestreut. Bei nichtdispersiven Verfahren wird das Licht zunächst ohne eine Frequenzselektion auf die Messeinrichtung gerichtet. Eine gute Frequenzauflösung der Messeinrichtung (angegeben in Wellenzahlen in cm^{-1}) ist wichtig, um Querempfindlichkeiten durch die Absorption des Lichtes bei benachbarten Frequenzen durch andere Gase zu vermeiden.

In Abbildung 3-3-10 ist der Gasweg innerhalb der Gasanalytik dargestellt. Die Rauchgase aus der Gasanalytik und aus dem begleitbeheizten Rohr werden anschließend durch eine Ringspaltöffnung mit Umgebungsluft verdünnt, bevor sie in einem Wickelfalzrohr in die Abluft weitergeleitet werden.

3.3.4 TB 3D: Entwicklung einer Auswerteroutine

Die erfassten Messgrößen am Ofensystem sind in Abbildung 3-3-11 dargestellt. Im Einzelnen sind dies das zugeführte Trägergas (Stickstoff) $N_{2,IPZ}$ in l/min, das zugeführte Oxidationsmittel (technische Luft) $Luft_{TNV}$ in l/min, das Spülgas der Waage (Stickstoff) $N_{2,Waage}$ in l/min, die Temperatur in der IPZ $T_{TC,IPZ}$ in °C, die Temperatur in der IPZ-Heizschale $T_{heiz,IPZ}$ in °C, die Temperatur in der TNV-Heizschale $T_{heiz,TNV}$ in °C und die Gaskonzentrationen des Rauchgases x_{H_2O} , x_{CO} und x_{CO_2} in Vol.-%.

Abbildung 3-3-11:
Technische Skizze und
Messstellen-Übersicht
des Ofensystems



Da nach dem Austritt aus dem Ofensystem aus technischen Gründen keine Volumenstrommessung mehr erfolgt, müssen alle Eingangsvolumenströme bei der Auswertung berücksichtigt werden. Die resultierenden Volumenströme für H_2O ,

CO und CO₂ berechnen sich folgendermaßen:

$$\dot{V}_{H_2O} = \frac{(N_{2,IPZ} + N_{2,Waage} + Luft_{TNV}) \cdot x_{H_2O}}{100 \text{ Vol.}\% - (x_{CO_2} + x_{H_2O} + x_{CO})} \quad (3-3-1)$$

$$\dot{V}_{CO_2} = \frac{(N_{2,IPZ} + N_{2,Waage} + Luft_{TNV}) \cdot x_{CO_2}}{100 \text{ Vol.}\% - (x_{CO_2} + x_{H_2O} + x_{CO})} \quad (3-3-2)$$

$$\dot{V}_{CO} = \frac{(N_{2,IPZ} + N_{2,Waage} + Luft_{TNV}) \cdot x_{CO}}{100 \text{ Vol.}\% - (x_{CO_2} + x_{H_2O} + x_{CO})} \quad (3-3-3)$$

Der Gesamtvolumenstrom \dot{V}_{ges} in l/min berechnet sich zu

$$\dot{V}_{ges} = \dot{V}_{CO} + \dot{V}_{CO_2} + \dot{V}_{H_2O} + N_{2,IPZ} + N_{2,Waage} + Luft_{TNV} \quad (3-3-4)$$

Aus den berechneten (Norm-)Volumenströmen lassen sich nun die Massenströme des Wasserstoffs \dot{m}_{H_2} und des Kohlenstoffs \dot{m}_C ableiten.

$$\dot{m}_{H_2} = \frac{\dot{V}_{H_2O} \cdot \rho_{H_2O,Steam0}}{9} \quad (3-3-5)$$

$$\dot{m}_C = \frac{12}{44} \cdot \dot{V}_{CO_2} \cdot \rho_{CO_2,0} + \frac{12}{28} \cdot \dot{V}_{CO} \cdot \rho_{CO,0} \quad (3-3-6)$$

Die vorgenannten Berechnungen bieten nun die Möglichkeit, das H/C-Verhältnis über die Freisetzungsdauer, den Stoffumsatz und das Freisetzungsverhalten des untersuchten Brennstoffs zu betrachten. Ergebnisse hierzu werden in späteren Kapiteln gezeigt.

3.3.5 TB 3E: Errichtung, Inbetriebnahme und Kalibrierung der Versuchsanlage

Die Errichtung des Systems erfolgte bei UMSICHT stationär, d.h. Strom- und Gasanschluss wurden fest gekoppelt, ebenso Rauchgasabzug und Gasanalytik. Hierbei wurde auf vibrationsarme Umgebung geachtet, da das Wägesystem nicht durch externe Störgrößen beeinflusst werden soll. Abbild 3-3-12 zeigt das komplett errichtete Ofensystem.

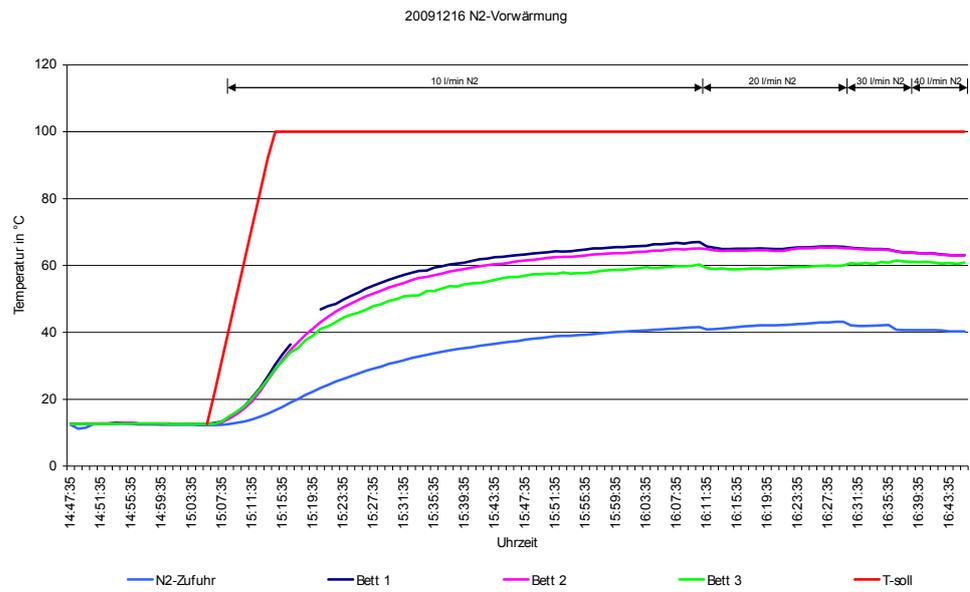
Abbildung 3-3-12:
Ofensystem (links:
Gasanalyse, mittig:
Uarozrohr mit Heizschalen, rechts: Schalt-
schrank mit Reglern)



Zur Inbetriebnahme wurden zunächst einfache Aufheizversuche, Verdampfungsversuche mit Wasser und Pyrolyseversuche mit Buchenholz-Kugeln durchgeführt. In Abbildung 3-3-13 sind die Ergebnisse eines solchen Tests dargestellt. Hier wurde der Einfluss des zugeführten Trägergases (N_2) auf die Innentemperatur des Ofens (Bett 1 – Bett 4) untersucht. Es zeigte sich, dass (erwartungsgemäß) die Innentemperatur sinkt, wenn ein erhöhter Kaltgasstrom in das Ofeninnere geleitet wird. Dieser Effekt ist beim Schritt 10 l/min auf 20 l/min am größten und bewirkt eine Abkühlung um ca. 10 K. Hieraus wird abgeleitet, dass während eines Versuchs die zugeführte Trägergasmenge konstant gehalten werden muss. Ein Nachregeln

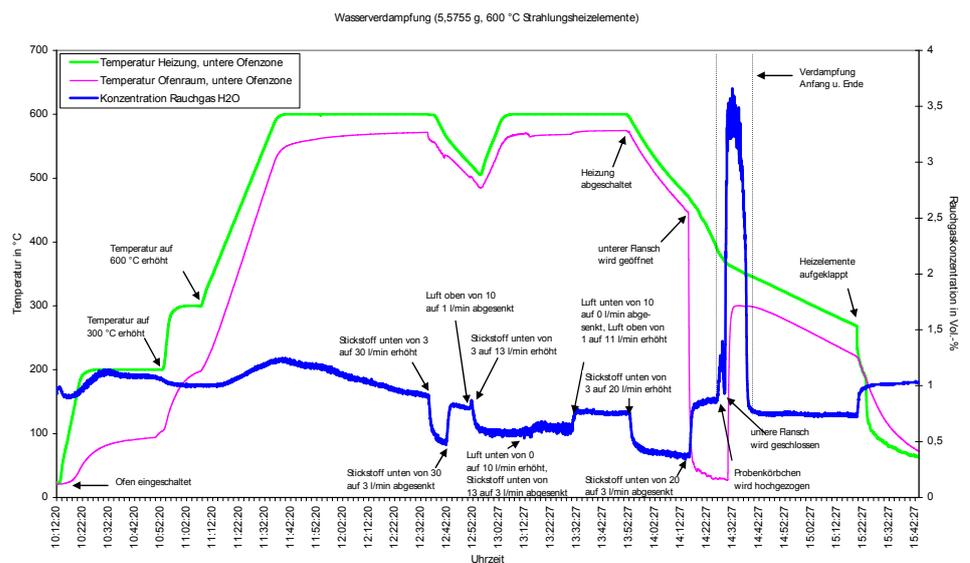
führt zu schwer quantifizierbaren Temperaturabsenkungen, die den Versuch beeinflussen.

Abbildung 3-3-13:
Versuch zum Einfluss
der Stickstoffzufuhr



Im nächsten Schritt wurden während einer Wasserverdampfung die Versuchsparmeter (Heizleistung, Gaszufuhr usw.) variiert und die gemessene Gaskonzentration dabei beobachtet. Abbild 3-3-14 zeigt die Ergebnisse.

Abbildung 3-3-14:
Versuch zum Einfluss
verschiedener
Regelgrößen

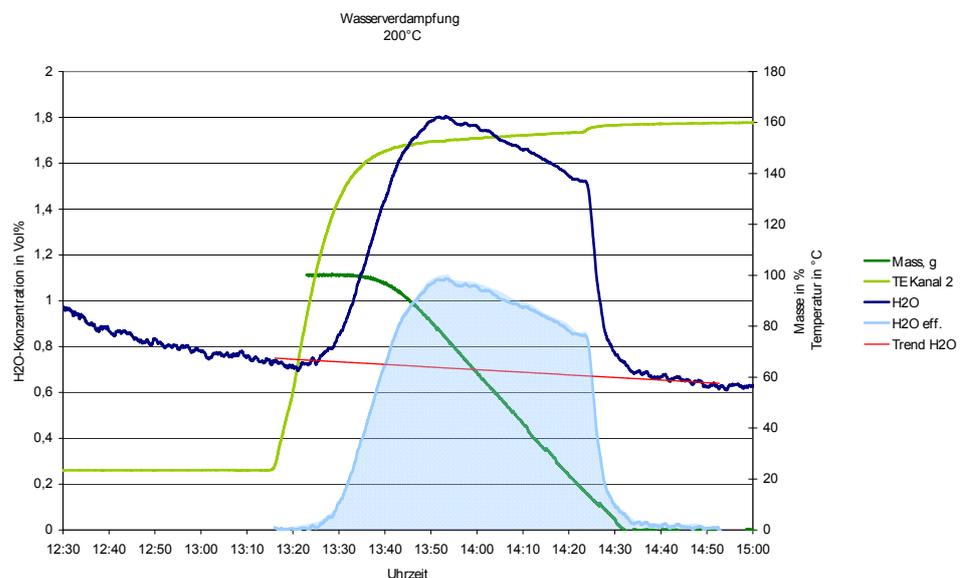


Die Kommentare an den Messkurven erläutern jeweils die Ursachen der Veränderungen.

Die Betrachtung der H₂O-Messkurve führt zu mehreren Erkenntnissen. Zum einen wird hier deutlich, dass sich durch eine Änderung der zugeführten Gase eine (erwartete) Änderung der Konzentration ergibt. Um dies zu vermeiden, muss wiederum die zugeführte Gasmenge während des Versuchs konstant gehalten werden. Zum anderen zeigt sich ein Drift, bzw. eine abnehmende Wasserkonzentration über die Dauer des Versuchs. Hierfür werden Trocknungseffekte verantwortlich gemacht, die das gesamte Ofensystem betreffen. Da sich der Verlauf dieser „Ofentrocknung“ gut extrapolieren lässt, kann dieser Anteil bei der Auswertung aus den gemessenen Wasserkonzentrationen herausgerechnet werden. Ein Beispiel für eine solche Berechnung zeigt Abbildung 3-3-15, welche Messwerte einer Wasserverdampfung wiedergibt. Die dunkelblaue Kurve stellt die ursprünglichen Messdaten dar, die hellblaue Kurve die um die Ofentrocknung bereinigten Werte. Dunkelgrün dargestellt ist der Masseverlust des Wassertöpfchens, hellgrün dargestellt ist der Temperaturverlauf in der IPZ. Die rote Linie stellt den interpolierten Verlauf der Ofentrocknung dar.

Abbildung 3-3-15:

lalala



3.4 TB 4: Technikumsmaßstab: Untersuchung unterschiedlicher Brennstoffe

3.4.1 TB 4A: Tests mit Referenzmaterialien (Reine Brennstoffe) und TB 4B: Tests mit künstlich hergestellten Mischbrennstoffen (Definierte Zusammensetzung)

Die Referenzmaterialien Papier, PE-Folie, Buchenholz und Baumwolle (Textilien) wurden einzeln und als Mischung untersucht. Es soll gezeigt werden, dass aus den Versuchen mit reinen Brennstoffen rechnerisch das Verhalten des Mischbrennstoffs dargestellt werden kann.

Die Versuchsreihe zeigt, dass sich das Verhalten des Modell-EBS teilweise durch das additive Verhalten der Einzelkomponenten beschreiben lässt. In Tabelle 3-4-1 sind Versuchsparameter, Analysenwerte, Massenverluste (MV) und weitere Auswertungsparameter zusammengestellt (OZ1 = IPZ, OZ2 = TNV). Die Zusammensetzung des Modell-EBS wurde bereits in vorangegangenen Kapiteln dargestellt.

Tabelle 3-4-1: Messbereiche der Gaskomponenten

	Brennstoff	Modell-EBS	EB Papier	EB PE-Folie	EB Textilien	EB Buche II	original EBS
Versuchsreihe 2							
Temperatur OZ 2 in °C	850	850	850	850	850	850	
Temperatur OZ 1 in °C	500	500	500	500	500	500	
Aufheizrate OZ 1 in K/min	40	40	40	40	40	40	
Kohlenstoff in Ma%	31,9	15,2	12,5	22,7	15,5	41,8	
Wasserstoff in Ma%	5,2	3,5	2,2	4,5	3,7	7,1	
Feuchte in Ma%	0,2	0,4	0,1	0,2	0,2	0,11	
MV nach Waage in Ma%	86,7	64,0	100,0	86,8	75,5	81,6	
Rückstand nach Waage in Ma%	13,3	36,0	0,0	13,2	24,5	18,4	
Temperatur TE 2 CO ₂ -Anstieg in °C	229	200	215	197	219	157	
Temperatur 1. CO ₂ Max. in °C	333	336	354	357	345	317	
Temperatur 2. CO ₂ Max. in °C	394	-	392	-	-	397	
Dauer MV 60% * in min:s	15:11	05:11	05:30	04:52	03:03	19:13	

* Dauer zwischen CO₂-Anstieg (Beginn Flüchtigenfreisetzung) und genantem Massenverlust (MV)

In den Abbildungen 3-4-1 und 3-4-2 sind die Ergebnisse des Pyrolyseversuchs mit Modell-EBS dargestellt. Die Freisetzung kann in drei Phasen eingeteilt werden:

Trocknung, Flüchtigensfreisetzung biogener Bestandteile und Flüchtigensfreisetzung der Kunststofffraktionen. Abbildung 3-4-1 zeigt die H₂O- und Abbildung 3-4-2 die CO₂-Konzentrationen der Pyrolyse von Modell-EBS und seiner Einzelbestandteile Papier, Folie, Holz und Textilien. Feuchte im Brennstoff kommt hauptsächlich im Holz vor, ein sehr geringer Anteil in Papier und Textilien. Da im Modell-EBS nur 0,4 % Holz enthalten sind, wirkt sich dessen Feuchtegehalt kaum auf den Modell-Brennstoff aus. Papier und Textilien bilden 24 % des Brennstoffs, daher ist eine schwache Trocknungskurve zu sehen.

Abbildung 3-4-1:
H₂O-
Freisetzungprofil,
500 °C, Modell-EBS
und Einzelbestandteile

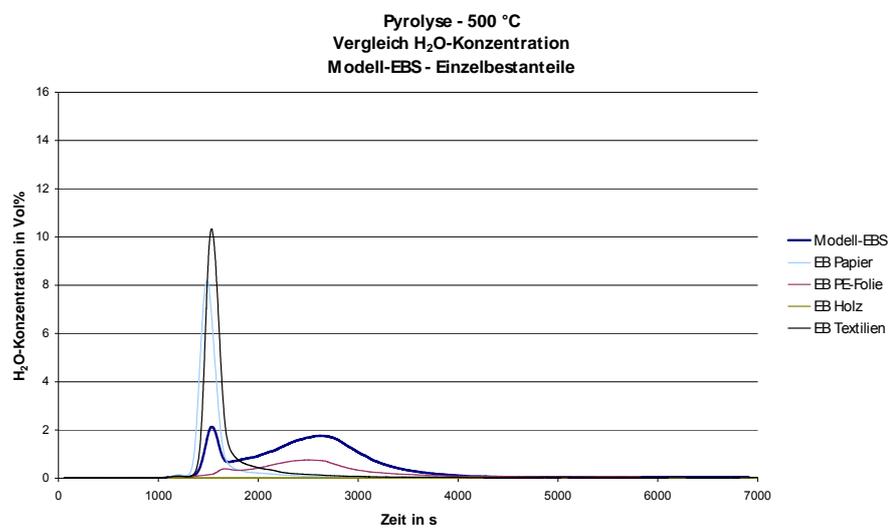
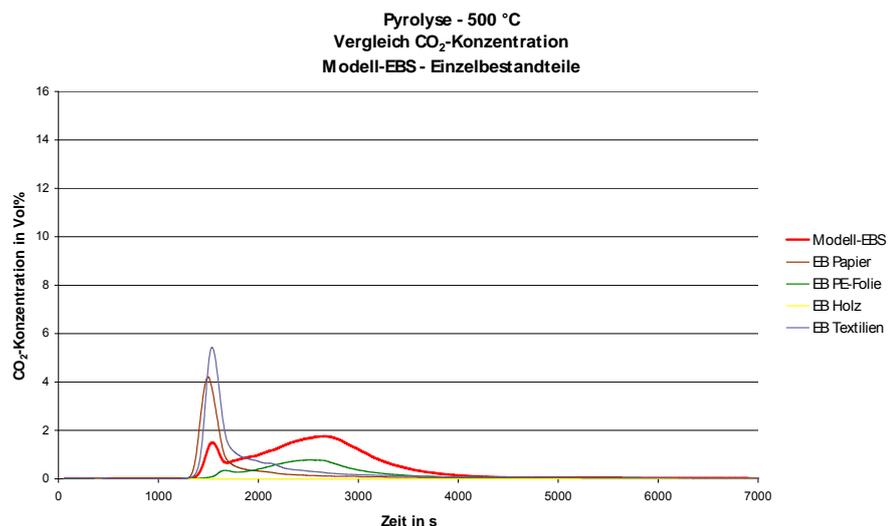


Abbildung 3-4-2:
CO₂-Freisetzungprofil
500 °C, Modell-EBS
und Einzelbestandteile

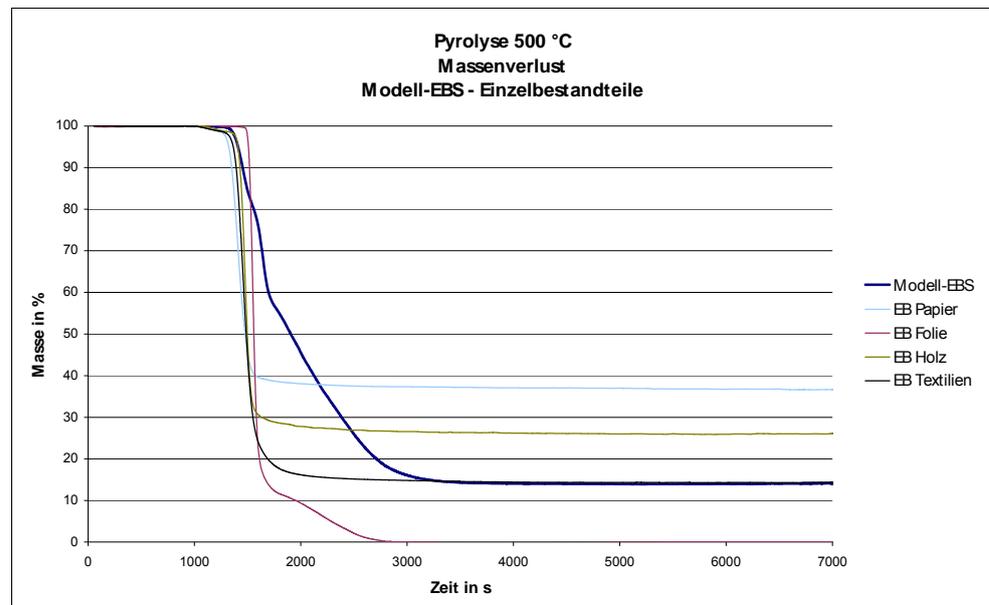


Die Flüchtigensfreisetzung biogener Bestandteile beinhaltet Holz, Papier und Textilien (Naturfasern). Sie bilden den ersten Peak, wie an den Kurven der Einzelbe-

standteile zu sehen ist. Den zweiten Peak verursacht die PE-Folien-Fraktion, welche den Hauptbestandteil des Brennstoffs ausmacht. Auch im Verlauf der Massenverluste kann ein solcher Trend erkannt werden (s. Abbildung 3-4-3). Mit einem Massenverlust von 86,7 % liegt der Modell-Brennstoff im Mittel der Kurven seiner Einzelbestandteile. Holz und Papier haben einen geringeren Massenverlust (75,5 % und 64 %), Textilien liegen im Bereich des Modell-Brennstoffs, alleine die PE-Folie liegt mit einem Massenverlust von 100 % darüber.

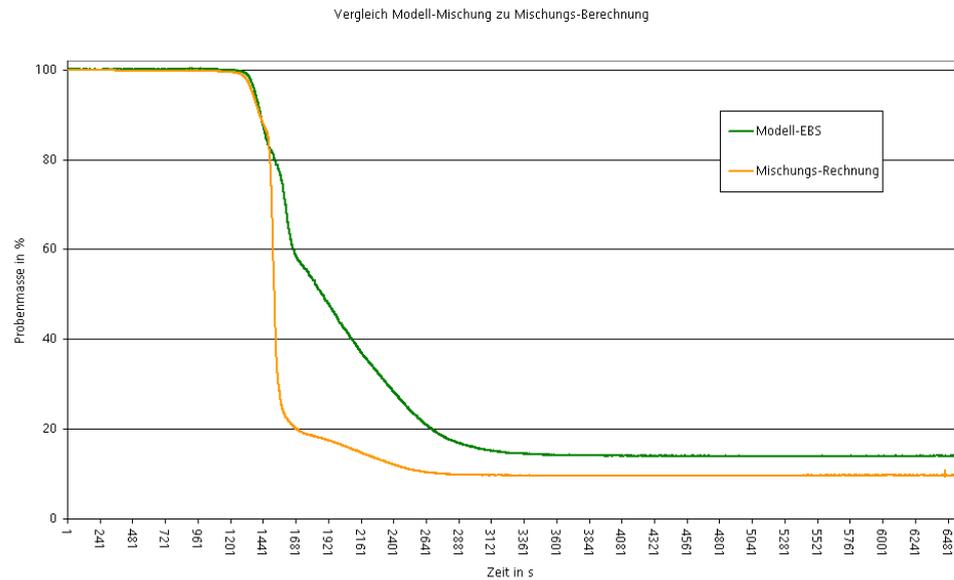
Das unterschiedliche Freisetzungverhalten ist auch hier auf die strukturelle Diversität der Einzelfraktionen zurückzuführen. Biogene Bestandteile spalten schon früh Nebengruppen aus großen, stabilen und kohlenstoffhaltigen Molekülen ab, wohingegen PE recht spät in kleinere Moleküle zerfällt, welche sich durch weitere Zersetzungsprozesse in flüchtige Bestandteile umsetzen.

Abbildung 3-4-3:
Massenverluste
500 °C, Modell-EBS
und Einzelbestandteile



Aus den Entgasungsdaten der Einzelfraktionen wurde nun unter Berücksichtigung der Massenanteile eine Summenfunktion gebildet. Im Vergleich zum Modell-EBS-Versuch zeigen sich bemerkenswerte Abweichungen (s. Abbildung 3-4-4). Während der anfängliche Masseverlust der Proben gut übereinstimmt, zeigt das Entgasungsverhalten des Modell-EBS nach ca. 1 500 s gegenüber der Mischungs-Rechnungs-Kurve eine starke Verzögerung. D. h., die hier statt findende Pyrolyse der Kunststofffraktion geht im Modell-EBS langsamer vonstatten, als bei der Pyrolyse der Einzelfraktion (deren Daten in die Mischungsrechnung eingehen). Es kann also davon ausgegangen werden, dass die Pyrolyse der Kunststoffanteile durch andere Bestandteile des Brennstoffs gebremst wird. Vorstellbar ist z. B., dass Koks-rückstände der bereits entgasten Biomassen (Textilien, Holz, Papier) eine isolierende Wirkung haben und somit die Entgasung verzögern.

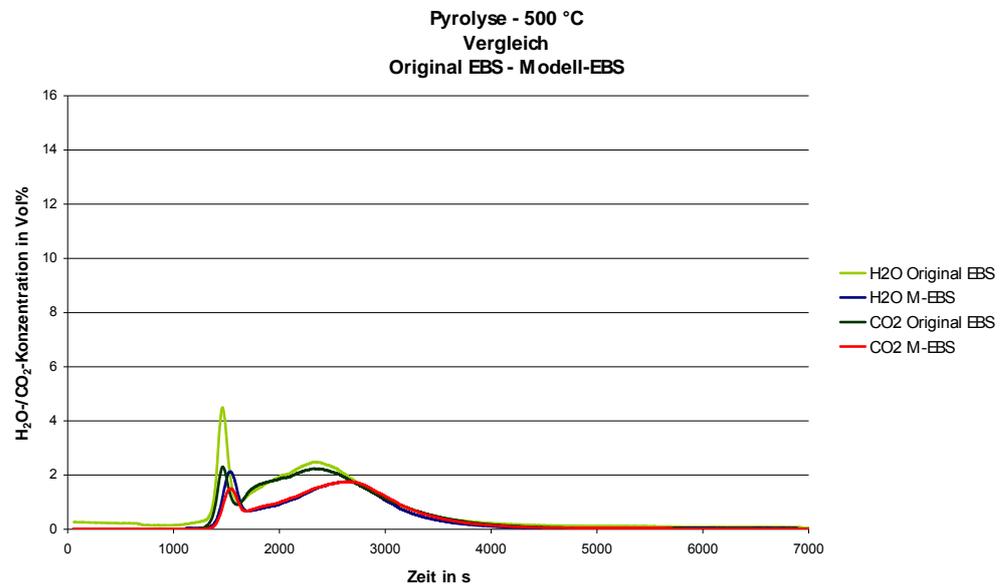
Abbildung 3-4-4:
Vergleich Massever-
lust Modell-EBS und
Mischungs-Rechnung



Bemerkenswert ist außerdem, dass der Modell-EBS absolut weniger Flüchtige freisetzt als nach der Mischungs-Rechnung möglich sein müsste (ca. 5 %_{Ma}). Die Freisetzung findet also nicht nur verzögert statt, auch das absolut freisetzbare Flüchtigenreservoir wird reduziert.

Für eine Abschätzung inwiefern sich der Modell EBS wie das Original verhält, wird der original EBS unter den gleichen Versuchsbedingungen pyrolysiert, wie der Modell-EBS und seine Einzelbestandteile. Dabei wird ersichtlich, dass die beiden Kurven einen ähnlichen Verlauf besitzen. Modell-EBS, sowie das Original, weisen ein zweistufiges Freisetungsverhalten auf (s. Abbildung 3-4-5). Aus den Ergebnissen der Einzelfraktion-Untersuchungen kann nun auch auf den realen EBS geschlossen werden. Zum einen gibt es die Freisetzung der biogenen Bestandteile, welche den ersten Anstieg verursachen und zum andern werden die Fraktion Folie und andere Kunststoffe in einer zweiten Freisetzungsphase entgast. Der frühere zweite Anstieg des Original-EBS ist auf den Feinanteil im Brennstoff zurückzuführen, welcher aufgrund größerer Oberfläche einen schnelleren Wärmeübergang zulässt.

Abbildung 3-4-5:
 H_2O_7 / CO_2 -
 Freisetzungprofil
 Modell – original EBS,
 500 °C

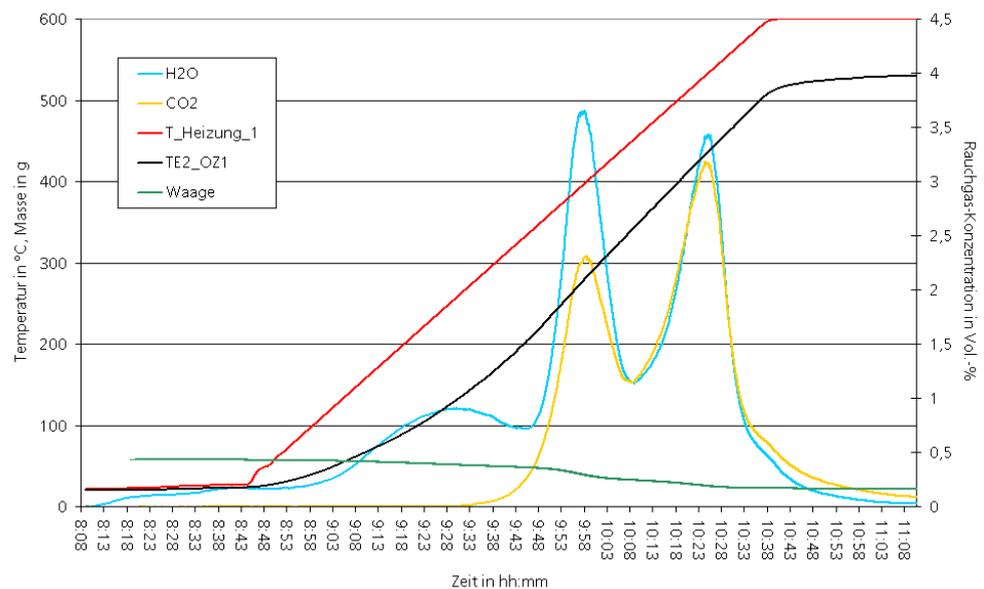


Die vorliegenden Versuchsergebnisse zeigen zum einen, dass ein realer Mischbrennstoff durch künstlich hergestellte Mischungen »simuliert« werden kann. Dies kann zum Beispiel für Verbrennungsversuche von Krankenhausabfällen von Bedeutung sein, da hier nicht das belastete Originalmaterial, sondern eine äquivalente Modellsubstanz untersucht werden muss. Zum anderen zeigt sich aber auch, dass das Entgasungsverhalten eines Mischbrennstoffs nicht durch bloßes Zusammenrechnen der Ergebnisse aus Einzelfraktions-Untersuchungen bestimmt werden kann. Hierbei würden wichtige Wechselwirkungen zwischen den Brennstoffbestandteilen nicht berücksichtigt werden.

3.4.2 TB 4C: Tests mit EBS und Abfall

Nachdem im vorangegangenen Abschnitt Versuche mit einzelnen Fraktionen und einem Modell-EBS vorgestellt wurden, werden nun Ergebnisse aus Untersuchungen realer Abfall- und EBS-Proben präsentiert. Dabei handelt es sich um die gleichen Proben, welche bereits in TB 2 (Abschnitt 3.2) untersucht wurden. Da sich die Freisetzungskurven grundsätzlich ähneln, werden hier nur die Ergebnisse der Abfallfraktion gezeigt, die Ergebnisse der EBS-Fraktion befinden sich im Anhang. Der Versuch wurde mit einer Aufheizgeschwindigkeit der Heizelemente von 5 K/min durchgeführt. In die IPZ wurden 10 l/min N_2 eingeleitet, in die TNV 5 l/min technische Luft. Die Waage wurde mit 2 l/min N_2 gespült. Als Einwaage befanden sich 58,45 g Abfall im Proben-Körbchen. Die Feuchte der Probe betrug 18 %_{Ma}. In Abbildung 3-4-6 sind die Messdaten des Versuchs abgebildet.

Abbildung 3-4-6:
H₂O-/ CO₂-
Freisetzungsprofil
Abfall, 600 °C



Zu Beginn des Versuchs (ca. 8:58) beginnt die Trocknung der Probe. Das in der IPZ befindliche Thermoelement zeigt hier eine Temperatur von ca. 70 °C an. Das nun folgende Trocknungsprofil (bis 9:43) ist typisch und konnte auch in anderen Versuchen beobachtet werden (s. Abschnitt 3.7). Ein sanfter Anstieg der H₂O-Konzentration und ein ebensolcher Abstieg (ohne gleichzeitige CO₂-Entstehung), welcher nahtlos in die Pyrolyse (ab 9:43) übergeht, beschreibt die komplette Trocknung des Brennstoffs. Die H₂O-Messkurve, welche sowohl durch Wasserverdunstung als auch durch Freisetzung von Kohlenwasserstoffen beeinflusst wird, legt nahe, dass sich im Zeitraum von 9:43 bis 9:48 die Verbrennungsteilschritte Trocknung und Pyrolyse überlagern. Ab 9:48 setzt eine starke pyrolytische Freisetzung ein, was an gleichzeitig ansteigenden H₂O- und CO₂-Konzentrationen zu erkennen ist. Das Thermoelement in Probennähe (IPZ) misst bei Pyrolysebeginn eine Temperatur von ca. 210 °C. Die erste Pyrolysephase dauert an bis 10:08 bei einer erreichten Temperatur von ca. 350 °C. Direkt im Anschluss setzt eine weitere Pyrolysephase ein. Da die gemessenen Gaskonzentrationen zwischen den beiden Phasen nicht auf 0 %_{Vol} zurückgehen, ist von einer Überlagerung auszugehen. Die zweite Phase beginnt bei einer Temperatur von ca. 350 °C und endet bei Erreichen von ca. 510 °C, was gleichzeitig das Ende der Aufheizrampe darstellt. Bei einem weiteren Aufheizen der Probe ist evtl. mit einer weiteren, geringen Flüchtigenfreisetzung zu rechnen.

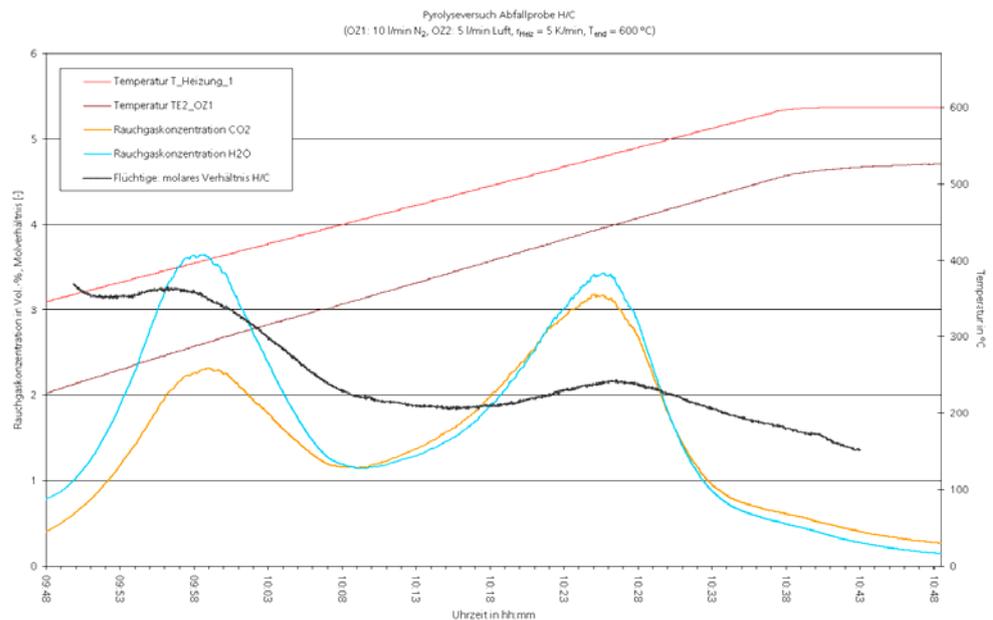
Die charakteristische Zweiteilung der Pyrolyse des Brennstoffs wurde bereits in den Untersuchungen aus Abschnitt 3.4.1 bemerkt. Da der Biomasseanteil der Abfall-Proben noch höher als bei den dort untersuchten Proben ist (s. Sortieranalyse, Abschnitt 3.2), besitzt die erste Pyrolysephase hier eine noch stärkere Ausprägung. Unter Berücksichtigung der stetigen Aufheizung ist der zunächst stattfindende Rückgang der Freisetzung von 9:58 bis 10:08 bemerkenswert. Er zeigt, dass die

Flüchtigenfreisetzung in Abhängigkeit von der Temperatur betrachtet werden muss, da in unterschiedlichen Temperaturfenstern unterschiedliche Fraktionen der Mischfraktion Abfall zersetzt werden. Diese Beobachtung deckt sich mit den Erkenntnissen aus den FINGERPRINT-Untersuchungen (s. Abschnitt 3.2). Auf das sich ändernde H/C-Verhältnis der Flüchtigen wird im nächsten Abschnitt eingegangen.

3.4.3 TB 4D: Auswertung der Untersuchungsergebnisse

Aus den Freisetzungsdaten der Flüchtigen lassen sich weitere Kenndaten ableiten. Neben den unter 3.4.2 vorgestellten Auswertungen lässt sich z. B. der zeitliche Verlauf des H/C-Verhältnisses in den Flüchtigen darstellen. In Abbildung 3-4-7 ist das für den vorgestellten Pyrolyseversuch mit der Abfallprobe durchgeführt worden.

Abbildung 3-4-7:
H₂O/ CO₂-
Freisetzungsprofil
Abfall, 600 °C



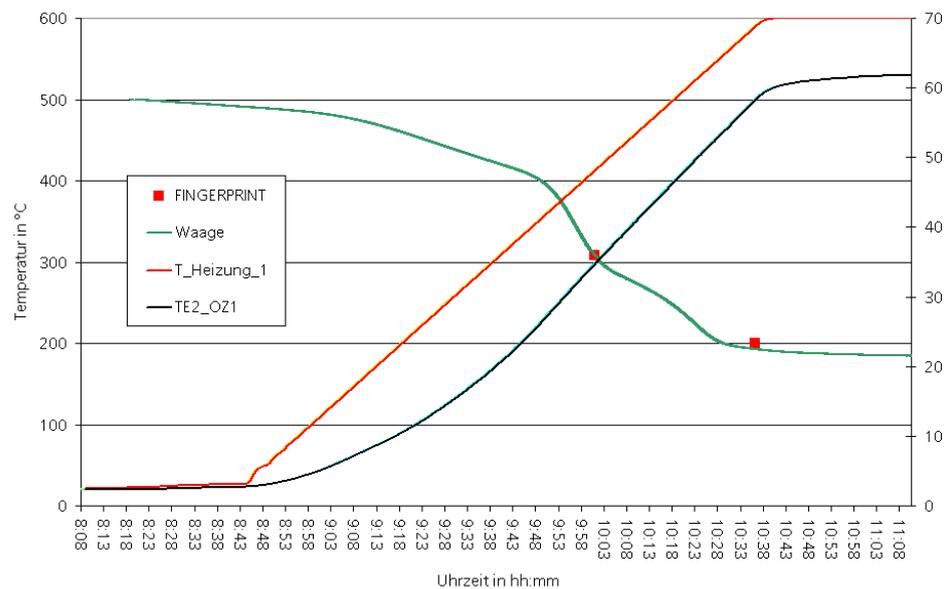
Gut zu erkennen ist, dass das molare H/C-Verhältnis mit fortlaufendem Versuch abnimmt. D. h., die flüchtigen Verbindungen, welche am Anfang freigesetzt werden (erste Pyrolysephase), haben einen höheren Wasserstoffanteil als die gegen Ende (zweite Pyrolysephase). Aus dem H/C-Verhältnis der Flüchtigen lassen sich zum Beispiel in erster Näherung Rückschlüsse auf die Dichte des Gases bilden (leichtere Gase haben einen höheren Wasserstoffanteil).

Inwieweit die ermittelten Daten mit den im Labor ermittelten Messwerten übereinstimmen, wird im nächsten Abschnitt betrachtet.

3.5 TB 5: Vergleich der Untersuchungsergebnisse aus Labor- und Technikumsversuchen

Die in Abschnitt 3.2 vorgestellten FINGERPRINT-Untersuchungen enthaltenen neben den elementaren Zusammensetzungen für jede Temperaturstufe den zugehörigen Masseverlust, welcher durch die Flüchtigenfreisetzung verursacht wurde. Dies bietet die Möglichkeit, die im Labor ermittelten Daten mit den Daten der Thermowaage aus dem Technikumsofen zu vergleichen.

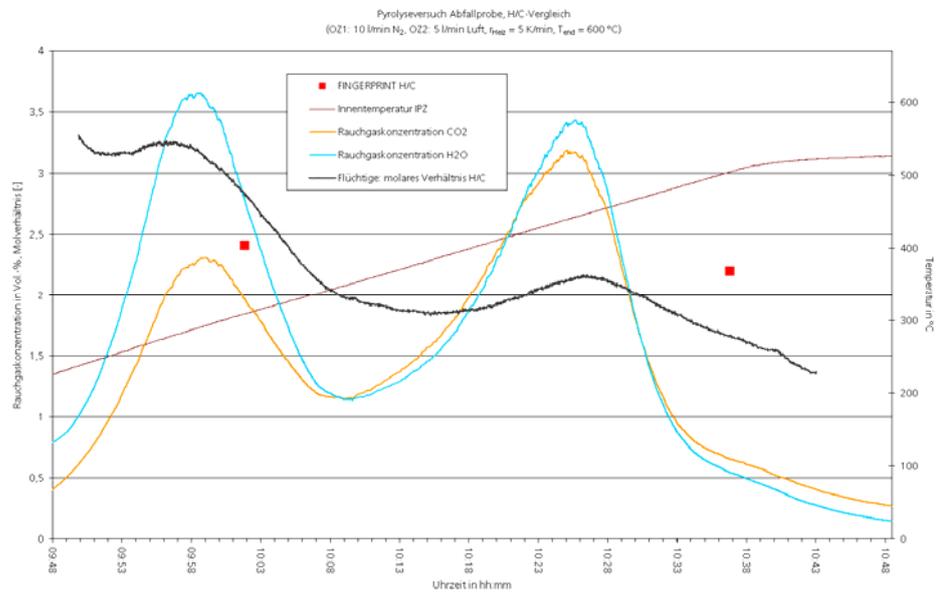
Abbildung 3-5-1:
Vergleich
Technikumsofen –
FINGERPRINT-Analyse,
Massenverlust,
Abfallprobe



In Abbildung 3-5-1 sind die FINGERPRINT-Daten auf die Ofeninnentemperatur bezogen worden. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung. Hieraus ist abzuleiten, dass die Stoff- und Wärmetransporteinflüsse in der Technikumsanlage bei diesen niedrigen Aufheizraten zu vernachlässigen sind.

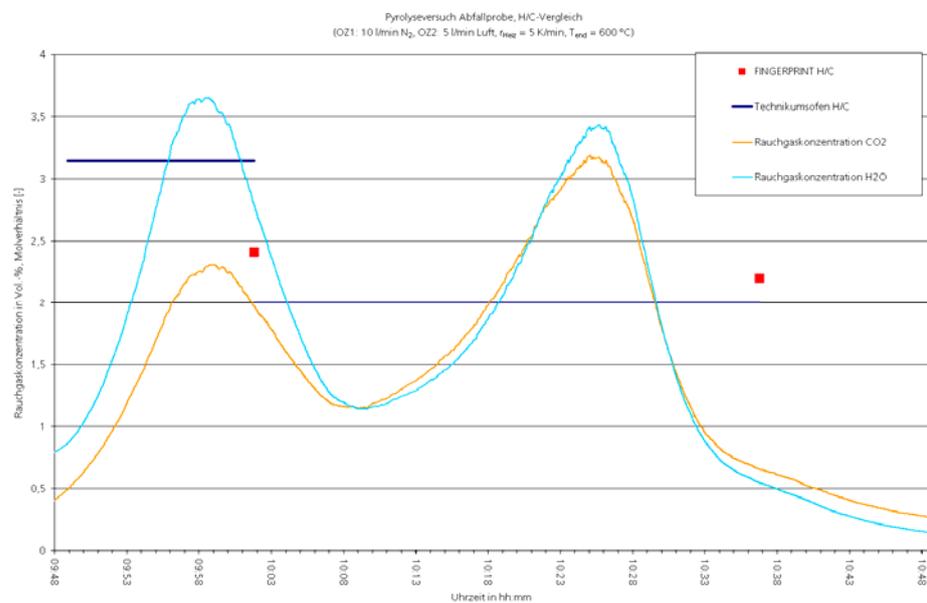
In Abbildung 3-5-2 ist ein weiterer Vergleich dargestellt. Das aus der FINGERPRINT-Analyse berechnete H/C-Verhältnis wird dem im Technikumsofen bestimmten Verhältnis gegenübergestellt. Es ist zu sehen, dass beide Methoden die Tendenz (mit steigender Temperatur fallendes H/C-Verhältnis in den Flüchtigen) wieder geben. Die Übereinstimmung ist jedoch nicht sehr gut. Ursache hierfür ist vor allem die Charakteristik der Messung. Während in der Technikumsanlage in-situ-Messungen vorgenommen werden, erfolgt in der FINGERPRINT-Analyse eine Aufsummierung der Werte bis zu einer bestimmten Temperatur.

Abbildung 3-5-2:
Vergleich
Technikumssofen –
FINGERPRINT-Analyse,
H/C-Verhältnis



Deshalb wird in einem nächsten Schritt der Mittelwert des H/C-Verhältnisses in der Technikumsanlage bis zur jeweiligen FINGERPRINT-Temperatur gebildet, und diese Daten verglichen (s. Abbildung 3-5-3). Auch hier zeigen sich Abweichungen von 0,7 bzw. 0,2. Diese Abweichungen werden auf Messungenauigkeiten und die unterschiedlichen Versuchsbedingungen zurückgeführt. Zudem ist aufgrund der Probenheterogenität stets mit gewissen Messchwankungen zu rechnen.

Abbildung 3-5-3:
Vergleich
Technikumssofen –
FINGERPRINT-Analyse,
H/C-Verhältnis



Insgesamt zeigt sich, dass die Technikumsanlage geeignet ist, das Entgasungsverhalten zu untersuchen. Die im Labor erhaltenen Daten, welche nur Momentaufnahmen einer Flüchtigenfreisetzung wiedergeben können, und die Ergebnisse der kontinuierlich messenden Technikumsanlage stimmen gut überein. Vorteile der Technikumsanlage sind größere Probenmengen (im Vergleich zum Labor das bis zu 1000-fache) und geringerer Probenaufbereitungsaufwand. Zudem können Partikel meist in Originalgröße untersucht werden. Nachteilig sind im Vergleich zum Labor größere Messungenauigkeiten und ein insgesamt größerer Arbeitsaufwand je Versuch.

Eine Kombination der Labor- und Technikumsversuche, bzw. eine fallspezifische Auswahl der anzuwendenden Methoden hat sich bewährt.

3.6 TB 6: Implementierung des Entgasungsverhaltens in ein Rostmodell

Die vorgestellten Freisetzungsdaten aus den Laborversuchen liefern zunächst elementare Zusammensetzungen der Flüchtigen bei unterschiedlichen Temperaturen. Wie bereits weiter oben erläutert ist zum Einbinden in Feuerraum- und Rostmodelle eine Umrechnung dieser Daten in Speziesverteilungen vorteilhaft. Im folgenden Abschnitt wird ein möglicher Rechnungsweg hierzu vorgestellt. Der vorgestellte Ansatz wurde verwendet, um aus den FINGERPRINT-Ergebnissen die Speziesverteilung mit O_2 , CO , CO_2 , C_3H_8 , H_2 , H_2O , N_2 , NH_3 , NO , zu berechnen. Bei vorliegenden Analysewerten kann eine Erweiterung um SO_2 , HCl und HF erfolgen.

3.6.1 TB 6A: Übertragung der Messdaten in Modellkompatible Formate

3.6.1.1 Erläuterung GIBBS-Minimierung

Das Entgasungsverhalten von Brennstoffen in Abhängigkeit der Temperatur wurde im Rahmen der Gibbs-Minimierung berechnet. Hierbei ist es von grundsätzlicher Bedeutung, dass das Entgasungsverhalten einzelner Spezies messtechnisch nicht oder nur mit sehr großem Aufwand erfassbar ist. Stattdessen wurde auf Basis von gemessenen Brennstoffdaten einzelner Elemente rechnerisch eine Verteilung auf Verbindungen durchgeführt, deren Temperaturverhalten bestimmt werden kann. Die Verteilung des Brennstoffes unterliegt hierbei gewissen Randbedingungen, die bei der Berechnung berücksichtigt werden müssen. Insbesondere müssen thermodynamische Prinzipien berücksichtigt werden, die sich aus der Gibbs-Gleichung ergeben. Im Folgenden wird das gewählte Verfahren vorgestellt und anhand eines Beispiels (Brennstoff Holz) veranschaulicht.

GRUNDLAGE DER BERECHNUNGEN

Für die Simulation des Verbrennungsverhaltens ist es notwendig, das Entgasungsverhalten unterschiedlicher Materialien im Hausmüll numerisch zu beschreiben. Als Eingabe werden hierzu Laborergebnisse verwendet, die wie folgt gewonnen wurden. Zunächst wird eine Probe in dem Testofen langsam erhitzt, wobei das entstehende Gas kontinuierlich analysiert wird. Über die Auswertung der Analyse wird die Summenverteilung der Elemente im Gas über die Temperatur und Zeit, sowie die zugehörige chemische Energie (Heizwert) ermittelt. Da die Elementenverteilung nicht direkt für weitere Berechnungen eingesetzt werden kann ist es notwendig, aus einer vorliegenden Elementenverteilung eine Verteilung von Verbindungen aus den Elementen zu berechnen, die beim Verbrennen den gleichen Heizwert liefert. Daraus ergibt sich ein Pseudo-Brennstoff, der für die weiteren Berechnungen herangezogen werden kann und das gleiche Entgasungsverhalten und den gleichen Heizwert wie das ursprüngliche Verbrennungsmaterial aufweist.

Bei dieser Vorgehensweise ist es essentiell, die Verteilungen der Verbindungen unter thermodynamischen und verbrennungstechnischen Randbedingungen zu erstellen. Zunächst wird eine Umverteilung der Elemente durchgeführt, so dass die vorhandene Masse eines Elementes im Brenngut als Funktion der Temperatur und Verbrennungszeit kontinuierlich abnimmt und die Summenkurve entsprechend zunimmt.

Asche und Koks werden hinsichtlich des Entgasungsverhaltens als Inert angesehen und werden nachfolgend nicht betrachtet. Das die Feuchte des Brennstoffs bildende Wasser wird ebenfalls nicht betrachtet, da das Trocknen des Brennstoffes anderen Gesetzen folgt und bis zum Pyrolysebeginn bereits abgeschlossen ist. Das beschriebene Verfahren wird also nur auf die möglichen Flüchtigen im Brennstoff angewandt.

BERECHNUNG DES ENTGASUNGSVERHALTENS ÜBER GIBBS-MINIMIERUNG

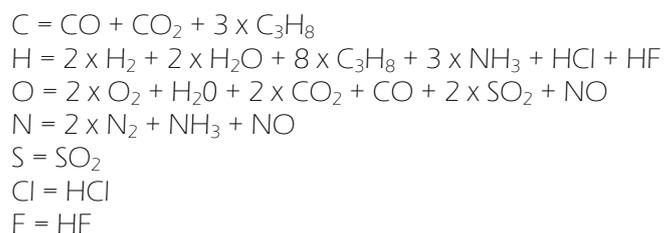
Bei der Modellbildung wird zunächst empirisch davon ausgegangen, dass folgende Verbindungen im freigesetzten Verbrennungsgas auftreten können:



Es können somit bei der Brennstoff-Analyse nur folgende Elemente gemessen bzw. bestimmt werden:



Die Anzahl der in der Atome der jeweiligen Elemente in der Elementaranalyse muss auf Grund der Teilchenerhaltung der in den Verbindungen zu jedem Zeitpunkt entsprechen. Unter dieser Randbedingung ergibt sich folgendes lineare Gleichungen zu jeder Temperatur T :



In diesem Gleichungssystem werden die Elemente- und Verbindungssymbole mit ihrer Anzahl identifiziert und die Abhängigkeit von der Temperatur T und Zeit t sind aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht angegeben. Weiterhin sei darauf hingewiesen, dass die Koeffizienten des linearen Gleichungssystems stets gleich bleiben. Neben der Teilchenerhaltung muss auch die Energieerhaltung gewährleistet sein, so dass auch die Erhaltungsgleichung für die Heizwerte

$$H_{ges} = \sum_{i=1}^n h_i x_i \quad (3-6-1)$$

berücksichtigt werden muss. H_{ges} entspricht dem gemessenen Gesamt-Heizwert des Brennstoffes, h_i dem Heizwert der Verbindung i , x_i der Stoffmenge der Verbindung i und n der Anzahl der beteiligten Verbindungen. Für die weitere mathematische Beschreibung werden folgende Abkürzungen eingeführt:

$x_1 := O_2$; $x_2 := CO$; $x_3 := CO_2$; $x_4 := C_3H_8$; $x_5 := H_2$; $x_6 := H_2O$; $x_7 := N_2$; $x_8 := NH_3$; $x_9 := NO$; $x_{10} := SO_2$; $x_{11} := HCl$; $x_{12} := HF$.

Die Heizwerte h_i der vorkommenden Verbindungen sind in Tabelle 3-6-1 angegeben.

Tabelle 3-6-1: Heizwerte h_i und Polynomkoeffizienten a_i zur Berechnung der Enthalpie und Entropie der Verbindungen x_1, \dots, x_{12} .

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}	x_{11}	x_{12}
h_i [kJ/kmol]	0	282990	0	2044020	241840	0	0	313000	0	0	0	0
a_i	3.78	3.58	2.36	0.93	2.34	4.20	3.30	4.28	4.22	3.27	3.52	3.44
$a_i/10^3 K$	-3.00	-0.61	8.98	26.4	7.98	-2.03	1.41	4.66	-4.64	5.32	30.0	0.54
$a_i/10^6 K^2$	9.85	1.02	-7.12	6.11	-19.5	6.52	-3.96	21.7	1.10	0.68	-0.86	-1.52
$a_i/10^9 K^3$	-9.68	0.91	2.46	-22.0	20.1	-5.49	5.64	22.8	-9.34	-5.28	2.10	1.76
$a_i/10^{12} K^4$	3.24	-0.90	-0.14	9.51	-7.37	1.77	-2.44	8.26	2.80	2.56	-0.99	-0.58
$a_i/10^3 T$	-1.06	-14.3	-48.4	-1.40	0.92	-30.3	-1.02	-6.74	9.84	-36.9	-12.2	-33.8
a_i	3.66	3.51	9.90	19.2	0.68	-0.85	3.95	-0.62	2.28	9.66	2.41	1.21

Weiterhin werden die Abkürzungen

$b_1 := C$, $b_2 := H$, $b_3 := O$, $b_4 := N$, $b_5 := S$, $b_6 := Cl$, $b_7 := F$, $b_8 := H_{ges}$

für den Eingabevektor der Berechnung eingeführt, so dass sich das lineare Gleichungssystem zu jeder Temperatur T über

$$Ax(T) = b(T) \quad (3-6-2)$$

zusammenfassen lässt. Die Matrix A ergibt sich hierbei über

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 8 & 2 & 2 & 0 & 3 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 282990 & 0 & 2044020 & 241804 & 0 & 0 & 313000 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3-6-3)$$

Dieses lineare Gleichungssystem mit $n = 12$ Variablen und $m = 8$ Bestimmungsgleichungen ist unterbestimmt ($n > m$) und kann somit nicht unmittelbar bzw. eindeutig gelöst werden. Um dennoch eine Berechnung des Entgasungsverhaltens durchführen zu können, sind einige mathematische Überlegungen notwendig.

Zunächst sind $4 = n - m$ Variablen in dem unterbestimmten Gleichungssystem frei wählbar, so dass dann $m = 8$ Variablen festgelegt sind. Weiterhin wird durch Umsortieren bzw. Umordnen des Vektors x ein neuer Vektor y eingeführt, der über

$$y := Px \quad (3-6-4)$$

definiert ist mit der Permutationsmatrix P . Diese Matrix hat die Dimension $n \times n$ und vertauscht die Einträge in x . Sie hat pro Zeile genau eine 1 während die restlichen Einträge 0 sind, d.h. $P^T = P^{-1}$. Somit ergibt sich

$$x = P^T y = P^{-1} y \quad (3-6-5)$$

bzw.

$$Ax = b \Rightarrow AP^T y = b \Rightarrow \hat{A}y = b, \quad (3-6-6)$$

wobei die Matrix \hat{A} der Matrix A mit entsprechend vertauschten Spalten entspricht. Im einem weiteren Schritt wird die Matrix P heuristisch so bestimmt, dass die ersten m Spalten von \hat{A} linear unabhängig sind. Dies ist bei dem gegebenen Problem immer möglich, da A für alle relevanten Datensätze gleich ist. Für die Bestimmungsgleichung ergibt sich durch diesen Schritt folgender Ausdruck:

$$\begin{aligned} \bar{A}\bar{y} + \tilde{A}\tilde{y} = b &\Rightarrow \bar{y} = \bar{A}^{-1}(b - \tilde{A}\tilde{y}) \\ &= -\bar{A}^{-1}\tilde{A}\tilde{y} + \bar{A}^{-1}b = \alpha\tilde{y} + \beta, \end{aligned} \quad (3-6-7)$$

mit $\alpha := -\bar{A}^{-1}\tilde{A}$ (Dimension: $m \times 4$) und $\beta := \bar{A}^{-1}b$. Es ist zu beachten, dass die Matrix \bar{A} quadratisch ist (Dimension: $m \times m$) und somit wegen der linearen Unabhängigkeit invertierbar ist.

Die Bestimmungsgleichung

$$\bar{y} = \alpha \tilde{y} + \beta \quad (3-6-8)$$

enthält den unabhängigen Vektor \tilde{y} mit $n - m = 4$ frei wählbaren Einträgen $\tilde{y}_1, \dots, \tilde{y}_4$. Nach freier Wahl der Einträge von \tilde{y} liegen die Einträge $\bar{y}_1, \dots, \bar{y}_8$ des Vektors \bar{y} eindeutig fest und zwar so, dass gilt:

$$\hat{A}y = \tilde{b}, \quad (3-6-9)$$

mit $y = (\bar{y}_1 \dots \bar{y}_8, \tilde{y}_1 \dots \tilde{y}_4)^T$. Somit wird auch die ursprüngliche Bestimmungsgleichung $Ax=b$ gelöst, denn es gilt $x = P^T y$. Mathematisch ausgedrückt bilden alle Lösungen von Gl. 3-6-2 einen vierdimensionalen Unterraum in \mathbf{P}^{12} . In geometrischer Analogie dazu würde z.B. ein eindimensionaler Unterraum in \mathbf{P}^4 der Schnittmenge zweier Ebenen entsprechen. Für die Lösung des Problems müssen die Ungleichungen $x_i < x_i^k$ ($i = 1, \dots, 12$) in der Originalformulierung beachtet werden, die das Ausgasen der relevanten Stoffe berücksichtigen, d.h. den abnehmenden Masseanteil der Verbindung x_i mit steigender Temperatur wiedergeben. Der Index k bezieht sich auf die k -te Messtemperatur. Dies resultiert in

$$y_i < y_i^k \Rightarrow \bar{y}_i < \bar{y}_i^k \text{ und } \tilde{y}_i < \tilde{y}_i^k, \quad (3-6-10)$$

was mit $\bar{y} = \alpha \tilde{y} + \beta$ und unter Berücksichtigung der Dimensionen zu 12 Ungleichungen im \mathbf{P}^4 führt. Dies bedeutet bei k -Ungleichungen einem Schnitt aus k -Halbräumen in einem Raum mit gegebener Dimension. Als Lösung entsteht ein konvexes Polytop, was einer Verallgemeinerung eines Polygons auf beliebige Dimensionen entspricht.

Auf Grundlage dieser mathematischen Umformungen wählen wir nun ein gängiges Verfahren zum Finden einer eindeutigen Lösung des Gleichungssystems 3-6-2 über die Minimierung der Gibbs-Energie. Diese ist allgemein gegeben über

$$G^T(x) := \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^n \mu_i^k(T) x_i, \quad (3-6-11)$$

wobei der Index k die Phasen fest, flüssig und gasförmig beschreibt. Im vorliegenden Fall wird lediglich die gasförmige Phase betrachtet, so dass gilt

$$G^T(x) := \sum_{i=1}^n \mu_i^g(T) x_i, \quad (3-6-12)$$

mit

$$\mu_i^g(T) := h_i^0 - s_i^0 T + RT \ln\left(\frac{x_i}{\sum_{i=1}^n x_i}\right) + RT \ln\left(\frac{p}{p_0}\right) \quad (3-6-13)$$

gilt und vorausgesetzt wird, dass alle Elemente in der Gasphase vorliegen. Für die weiteren Rechnungen ist es vorteilhaft, diese Gleichung mit $1/RT$ zu erweitern. Die Terme h_i^0/RT und s_i^0/R werden als Polynome mit empirischen Koeffizienten a_i vorgegeben:

$$\frac{h_i^0}{RT} = a_1 + a_2 \frac{T}{2} + a_3 \frac{T^2}{3} + a_4 \frac{T^3}{4} + a_5 \frac{T^4}{5} + a_6 \frac{1}{T} \quad (3-6-14)$$

und

$$\frac{s_i^0}{R} = a_1 \ln(T) + a_2 \frac{T}{1} + a_3 \frac{T^2}{2} + a_4 \frac{T^3}{3} + a_5 \frac{T^4}{4} + a_7, \quad (3-6-15)$$

wobei die stoffspezifischen Koeffizienten in Tabelle 3-6-1 angegeben sind. Bei der Minimierung der Gibbs-Energie muss die Erhaltung der Atome,

$$\sum_{k=1} x_k a_{ka} - b_a = 0 \quad (3-6-16)$$

und die Erhaltung der Enthalpie (bzw. Heizwert)

$$\sum_{k=1} x_k h_{ka} - h = 0 \quad (3-16-17)$$

als Randbedingung der numerischen Berechnung beachtet werden.

Für die Bestimmung der Verbindungen in Abhängigkeit der Temperatur wird nun die Gibbs'sche Energie $G^T(x)$ unter den gegebenen Randbedingung und Bestimmungsgleichung 3-6-2 minimiert, um den Ergebnisvektor x für die relevanten

Temperaturen zu erhalten. Hierbei muss weiterhin beachtet werden, dass nur nicht-negative Einträge für die Vektoren $x_i(T)$ physikalisch erlaubt sind. Dies ist klar verständlich, da die Anzahl der Teilchen der i -ten Verbindung bei jeder Temperatur ≥ 0 sein muss. Weiterhin muss berücksichtigt werden, dass bei der Entgasung die Menge $x_i(T)$ eines Stoffes im Brenngut kontinuierlich abnehmen muss (vgl. Gl. 3-6-10).

Für die numerische Berechnung des Entgasungsverhaltens der Verbindungen x_i wird der folgende einfache Algorithmus gewählt. Es seien die Messwerte $b^1 (= b(T_1)), \dots, b^p (= b(T_p))$ für die Temperaturen $T_1 < T_2 < \dots < T_p$ (mit p der Anzahl der Messtemperaturen) gegeben. Dann wird die Minimierung über folgenden Algorithmus berechnet:

ALGORITHMUS:

(S.0) Setze $k := 0$ und $x_0 := 0$.

(S.1) Wenn $k > p$: STOP.

(S.2) Bestimme x_{k+1} als Lösung von $\min G_k^T(x)$ unter der Nebenbedingung $Ax = b^k, x \leq x_k$.

(S.3) Setze $k = k + 1$. Gehe zu (S.1).

Es ist noch zu bemerken, dass für das zu lösende Optimierungsproblem (S.2) letztendlich nicht die eigentliche Gibbs-Energie aus 3-6-11 benutzt werden muss, sondern die vereinfachte Funktion

$$\hat{G}^T(x) := \sum_{i=1}^n (\alpha_i^T + \ln x_i) x_i - \sum_{i=1}^n x_i \ln \left(\sum_{i=1}^n x_i \right) \quad (3-6-18)$$

mit

$$\alpha_i^T = \frac{h_i^0}{RT} - \frac{s_i^0}{R} \quad (3-6-19)$$

herangezogen wird, da nur die Gasphase relevant ist und keine Druckabhängigkeit vorliegt ($\ln(\rho/\rho_0) \rightarrow 0$ in Gl. 3-6-13). Somit ergibt sich über die temperaturabhängige Elementanalyse der Verbrennungsvorganges (Bestimmung von b) und der Lösung der Gl. 3-6-2 über die Gibbs-Minimierung das gewünschte Entgasungsverhalten der entsprechenden Verbindungen x_i bzw. des Pseudo-Brennstoffes, das für weitere Berechnungen genutzt werden kann.

BERECHNUNGSBEISPIEL, BRENNGUT HOLZ

Im Folgenden soll das vorgestellte Verfahren zur Berechnung des Entgasungsverhaltens exemplarisch für Holz als Brenngut illustriert werden.

Zunächst liefert die Messung nach TB2 des temperaturabhängigen Freisetzungsverhaltens von flüchtigen Anteilen b_{mess} und deren Heizwert die in Tabelle 3-6-2 angebenen Werte.

Tabelle 3-6-2: Temperaturabhängiges Freisetzungsverhalten von flüchtigen Anteilen in Holz (wasserfrei) in Mas.-% und deren Heizwert in MJ/kg. *: Messwerte, **: berechnete Werte, ***Summe Koksrückstand und Flüchtige bei 900 °C.

Freisetzungstemperatur [°C]	Komponente	N* [%]	C* [%]	H* [%]	S* [%]	Cl* [%]	O** [%]	Hu** [MJ/kg]
300	Flüchtige	0.6	11.1	2.5	0.013	0.220	18.5	4.3
380	Flüchtige	0.4	23.1	4.7	0.022	0.332	34.6	8.7
430	Flüchtige	0.5	26.1	5.1	0.024	0.334	36.6	10.0
600	Flüchtige	0.7	30.8	5.7	0.033	0.370	39.6	11.8
750	Flüchtige	0.8	33.7	6.0	0.030	0.360	43.0	12.8
900	Flüchtige	1.0	34.7	6.3	0.033	0.427	41.7	13.5
900	Koksrückstand nach Entgasung	0.3	14.8	0.1	0.0	0.0	0.2	5.2
Gesamt***		1.3	49.4	6.4	0.0	0.0	41.8	18.7

Auf Basis dieser Daten werden die Massenanteile für die angegebenen Temperaturen auf wasser-, asche- und koksfreie Werte $b_{i, \text{wasser, koks, aschefrei}}$ umgerechnet. Hier werden der Ascheanteil b_{asche} und der Anteil des Koksrückstandes b_{koks} über eine DIN-Analyse bestimmt. Die Anteile $b_{i, \text{wasser, koks, aschefrei}}$ werden über die bekannten Dreisätze umgeformt. Die korrigierten Heizwerte werden analog berechnet. Die resultierenden wasser-, asche- und koks-freien Werte von Holz sind in Tabelle 3-6-3 angegeben.

Tabelle 3-6-3: Temperaturabhängiges Freisetzungsverhalten von flüchtigen Anteilen in Holz in Mas.-% bzw. MJ/kg, koks- und aschefrei.

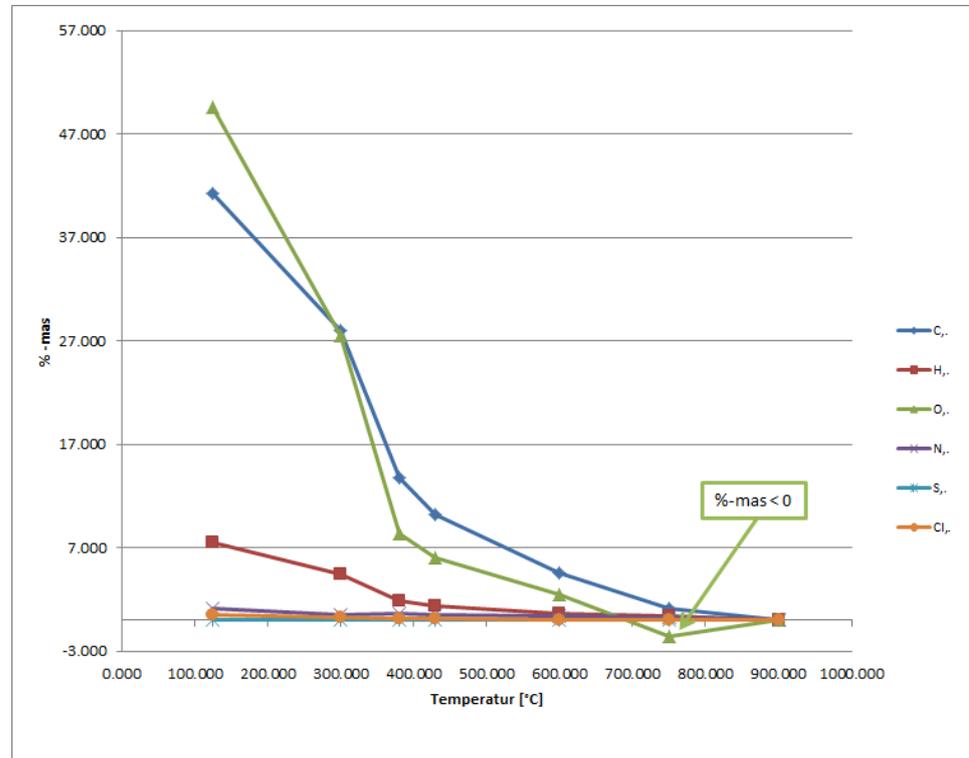
Freisetzungstemperatur [°C]	N [%]	C [%]	H [%]	S [%]	Cl [%]	O [%]	Hu [MJ/kg]
300	0.713	13.190	2.971	0.015	0.261	21.983	5.110
380	0.475	27.449	5.585	0.026	0.394	41.114	10.338
430	0.594	31.014	6.060	0.029	0.397	43.490	11.883
600	0.832	36.598	6.773	0.039	0.440	47.055	14.021
750	0.951	40.044	7.130	0.036	0.428	51.095	15.210
900	1.188	41.233	7.486	0.036	0.507	49.550	16.042

Unter der begründeten Annahme, dass die Pyrolyse der Holzverbindungen erst oberhalb von 125 °C einsetzt und bei 900°C alle flüchtigen Anteile freigesetzt wurden, können auf Basis der in Tabelle 3-6-3 angegebenen Werte die in dem Brennstoff bis zu der jeweiligen Temperatur T noch enthaltenen flüchtigen Anteile $b_{i, \text{enthalten}}(T) = b_{i, \text{wasser, koks, aschefrei}}(T=900^\circ\text{C}) - b_{i, \text{wasser, koks, aschefrei}}(T)$ berechnet werden. Analog werden die entsprechenden Heizwerte berechnet. Die Ergebnisse sind in Tabelle 3-6-4 angegeben und in Abbildung 3-6-1 illustriert.

Tabelle 3-6-4: Temperaturabhängige Anteile und Heizwert flüchtiger Elemente in Holz in Mas.-% bzw. MJ/kg, wasser-, koks- und aschefrei bei der jeweiligen Freisetzungstemperatur.

Freisetzungstemperatur [°C]	N [%]	C [%]	H [%]	S [%]	Cl [%]	O [%]	Hu [MJ/kg]
125	1.188	41.233	7.486	0.036	0.507	49.550	16.042
300	0.475	28.043	4.515	0.021	0.246	27.568	10.932
380	0.713	13.784	1.901	0.010	0.113	8.437	5.704
430	0.594	10.219	1.426	0.007	0.110	6.060	4.159
600	0.356	4.634	0.713	-0.003	0.067	2.495	2.020
750	0.238	1.188	0.356	0.000	0.079	-1.545	0.832
900	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Abbildung 3-6-1:
 Temperaturabhängige unkorrigierte Massenanteile der flüchtigen Elemente von Holz (aus Verbrennungsanalyse), Wasser-, Asche- und Koks-frei. Bei O_2 wird bei $T = 750\text{ °C}$ ein negativer Wert (mit Pfeil gekennzeichnet) beobachtet, was physikalisch nicht plausibel ist.



Hier auch eine graphische Darstellung und Pfeile auf die Unplausibilität. In Tabelle 3-6-4 und Abb. 3-6-1 fällt auf, dass negative Einträge $b_{i,neg}$ bei Schwefel und Sauerstoff (in Abb. 3-6-1 mit einem Pfeil gekennzeichnet) auftreten, was aus physikalischen Gründen nicht möglich ist und auf Messfehler bei der Bestimmung der flüchtigen Anteile zurückgeführt wird. So ist es möglich, dass bei der Pyrolyse freigesetzte Elemente bei einer gegebenen Freisetzungstemperatur noch im Analyserohr verbleiben und somit zu einem systematisch zu kleinen Masseanteil führen. Um dies zu korrigieren, wird iterativ so lange folgender Ausgleich vorgenommen, bis keine negativen Einträge mehr vorliegen. Im Rahmen eines praktikablen (aber nicht streng begründeten) Ansatzes wird jedem Anteil von $T = 300\text{ °C}$ bis zu der Temperatur, bei der ein negativer Anteil $b_{i,neg}$ auftritt, ein Anteil $-b_{i,neg}/5$ hinzuaddiert. Der ursprünglich negative Anteil wird gleich $-b_{i,neg}/5$ gesetzt. Entsprechend korrigierte Werte sind in Tabelle 3-6-5 angegeben. Es ist zusätzlich die relative Abweichung entsprechend der Differenz zwischen nicht korrigiertem und korrigiertem Wert dividiert durch den nicht korrigierten Wert angegeben. Dieser fällt bei Sauerstoff am größten aus, der der Sauerstoffanteil aus den anderen, gemessenen Anteilen errechnet wird und sich die entsprechenden Messfehler akkumulieren.

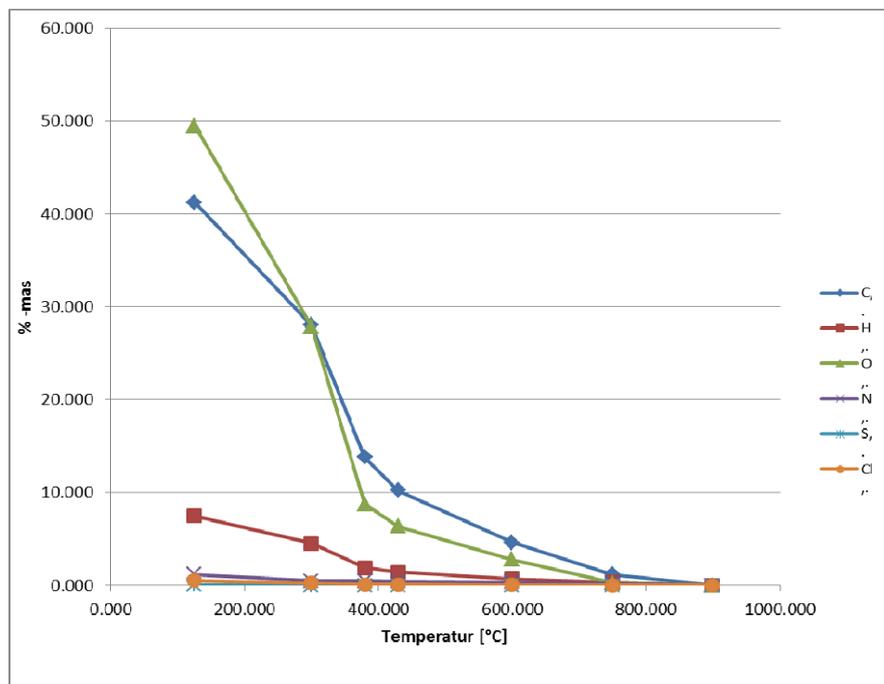
Tabelle 3-6-5:

Auf positive Einträge korrigierte temperaturabhängige Anteile und Heizwert flüchtiger Elemente in Holz in Mas.-% bzw. MJ/kg, koks- und aschefrei bei der jeweiligen Freisetzungstemperatur. Die relative Abweichung von Sauerstoff ist exemplarisch angegeben.

Freisetzungstemperatur [°C]	N [%]	C [%]	H [%]	S [%]	Cl [%]	O [%]	relativer Fehler, O	Hu [MJ/kg]
125	1.188	41.233	7.486	0.036	0.507	49.550	0.00%	16.042
300	0.475	28.043	4.515	0.021	0.246	27.877	-1.12%	10.932
380	0.460	13.784	1.901	0.011	0.113	8.746	-3.66%	5.704
430	0.446	10.219	1.426	0.008	0.110	6.369	-5.10%	4.159
600	0.356	4.634	0.713	0.001	0.067	2.804	-12.38%	2.020
750	0.238	1.188	0.356	0.001	0.034	0.309	120.00%	0.832
900	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.00%	0.000

In Abbildung 3-6-2 ist das Ergebnis der beschriebenen Korrektur dargestellt. Das kontinuierliche Abnehmen der Elemente im Feststoff mit fortlaufendem Entgasungsprozess ist nun eindeutig zu erkennen. Insbesondere treten keine negativen Massenanteile mehr auf (vgl. O₂ bei T = 750 °C), welche physikalisch nicht plausibel wären.

Abbildung 3-6-2:
Temperaturabhängige Massenanteile der flüchtigen Elemente von Holz (aus Verbrennungsanalyse), Wasser-, Asche- und Koks-frei.



Schließlich werden für die folgende Gibbs-Minimierung alle flüchtigen Anteile über das jeweilige Molgewicht in kmol umgerechnet. Die entsprechenden Werte sind in Tabelle 3-6-6 angegeben und in Abb. 3-6-2 veranschaulicht. Sie dienen als b/T als (temperaturabhängiger) Eingabevektor für die Gibbs-Minimierung.

Tabelle 3-6-6: Korrigierte temperaturabhängige Anteile und Heizwert flüchtiger Elemente in Holz in mol bzw. kJ, koks- und aschefrei bei der jeweiligen Freisetzungstemperatur.

Freisetzungstemperatur [°C]	N [mol]	C [mol]	H [mol]	S [10^{-3} mol]	Cl [mol]	O [mol]	F [mol]	Hu [kJ]
125	0.848	34.328	74.266	11.118	0.143	30.970	0.000	16042
300	0.339	23.347	44.796	6.671	0.069	17.424	0.000	10932
380	0.329	11.476	18.861	3.335	0.032	5.466	0.000	5704
430	0.318	8.508	14.146	2.409	0.031	3.981	0.000	4159
600	0.255	3.858	7.073	0.185	0.019	1.753	0.000	2020
750	0.170	0.989	3.536	0.185	0.009	0.193	0.000	832
900	0.848	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Auf Basis dieses Eingabevektors wird die Gibbs-Minimierung wie oben beschrieben für die relevanten Temperaturen unter Berücksichtigung für die gegebenen Randbedingungen durchgeführt. Das Ergebnis dieser Rechnung, d.h. die temperaturabhängigen Werte der freigesetzten Verbindungen in mol bzw. Mas.-% sind in Tabellen 3-6-7 und 3-6-8 zusammengefasst.

Tabelle 3-6-7: Berechnete temperaturabhängige Stoffmengen flüchtiger Verbindungen in Holz in mol.

Freisetzungstemperatur [°C]	x_1 [10^{-3} mol]	x_2 [10^{-3} mol]	x_3 [10^{-3} mol]	x_4 [10^{-3} mol]	x_5 [10^{-3} mol]	x_6 [10^{-3} mol]	x_7 [10^{-3} mol]	x_8 [10^{-3} mol]	x_9 [10^{-3} mol]	x_{10} [10^{-3} mol]	x_{11} [10^{-3} mol]	x_{12} [10^{-3} mol]
125	96.341	4450	11687	6064	9866	2931	421	6.653	0	11.0	143.0	0
300	96.341	3405	5959	4661	1821	18943	168	3.111	0	7.0	69.0	0
380	96.341	3404	931	2288	258	2.176	164	0.016	0	3.0	32.0	0
430	96.341	2201	791	1699	258	1.778	159	0.016	0	2.0	31.0	0
600	96.341	1016	272	817	258	0.596	127	0.016	0	0.0	19.0	0
750	96.341	0.348	0.000	376	258	0.002	85	0.001	0	0.0	9.0	0
900	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.0	0.000	0	0.0	0.0	0

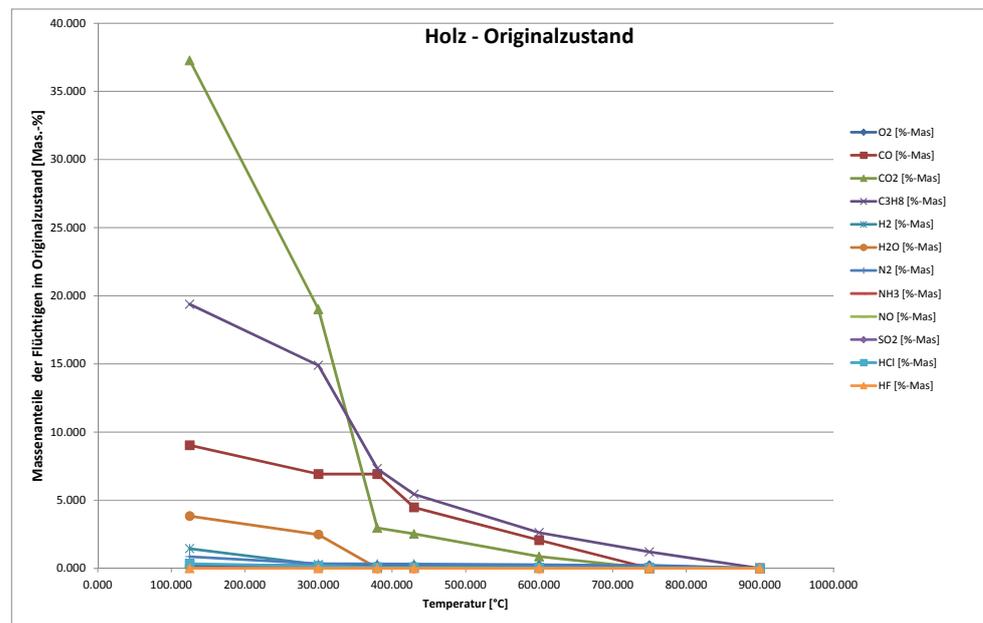
Tabelle 3-6-8: Berechnete temperaturabhängige Stoffmengen flüchtiger Verbindungen in Holz in Masse-% Koks- und Aschefrei bei der jeweiligen Freisetzungstemperatur.

Freisetzungstemperatur [°C]	x_1 [%]	x_2 [%]	x_3 [%]	x_4 [%]	x_5 [%]	x_6 [%]	x_7 [%]	x_8 [%]	x_9 [%]	x_{10} [%]	x_{11} [%]	x_{12} [%]
-----------------------------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	--------------	--------------	--------------

125	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.000
300	1.000	0.765	0.510	0.769	0.185	0.646	0.399	0.468	0.838	0.636	0.483	0.000
380	1.000	0.765	0.080	0.377	0.026	0.001	0.391	0.002	0.838	0.273	0.224	0.000
430	1.000	0.495	0.068	0.280	0.026	0.001	0.378	0.002	0.838	0.182	0.217	0.000
600	1.000	0.228	0.023	0.135	0.026	0.000	0.303	0.002	0.838	0.000	0.133	0.000
750	1.000	0.000	0.000	0.062	0.026	0.000	0.202	0.000	0.838	0.000	0.063	0.000
900	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Abb. 3-6-3 zeigt schließlich graphisch das Ergebnis der Gibbs-Minimierung für Holz. Wie gefordert und physikalisch begründet nehmen die Masse-Anteile aller Verbindungen als Funktion der Temperatur ab. Eine besonders signifikante Abnahme zeigt das stark flüchtige CO_2 . Im Gegensatz dazu zeigt das bekanntermaßen stärker gebundene CO ein deutlich schwächeres Entgasungsverhalten. Beides bestätigt die Verlässlichkeit des gewählten Ansatzes, welcher bei gegebener Elementanalyse effizient auf alle relevanten Brenngüter angewandt werden kann.

Abbildung 3-6-3:
Berechnete Massenanteile der flüchtigen Verbindungen von Holz aus Gibbs-Minimierung, Wasser-, Asche- und Koks-frei.



Zusammenfassend wurde im Rahmen des Projekts eine praktikable Methode entwickelt, die das Entgasungsverhalten von Brennstoffen sehr verlässlich und effizient beschreibt. Die gewählte Methode zur Umrechnung der Elementanalyse auf die für weitere Berechnungen essentiellen temperaturabhängigen Verteilungen der Verbindungen basiert auf mathematischen und physikalischen Methoden, die insbesondere physikalisch plausible Randbedingungen berücksichtigt. Der entwi-

ckelte Lösungsalgorithmus ist sehr stabil und liefert die gewünschten Ergebnisse innerhalb von wenigen Minuten. Es ist bemerkenswert, dass die exemplarisch für Holz als Brennstoff vorgestellte Methode nicht auf die angegebenen Elemente und Spezies beschränkt ist und beliebig erweitert werden kann.

3.6.1.2 Ergebnisse der GIBBS-Minimierung

Die Ergebnisse der GIBBS-Minimierung für die Stoffe PE, Buchenholz, EBS und Abfall sind in diesem Abschnitt dargestellt. Die restlichen Berechnungswerte und grafische Darstellungen der Ergebnisse befinden sich im Anhang. Bei den Berechnungen wurde die Spezies NO mit berücksichtigt, die auftretenden Stoffmengen lagen jedoch stets bei Nahe null. Aus diesem Grund werden sie nicht explizit in den Tabellen aufgeführt.

Tabelle 3-6-9: Polyethylen – Berechnete temperaturabhängige Stoffmengen flüchtiger Verbindungen in mol.

Temperatur in °C	Speziesvorrat im Brennstoff in 10 ³ mol							
	O ₂	CO	CO ₂	C ₃ H ₈	H ₂	H ₂ O	N ₂	NH ₃
125	0,0000	4,4435	0,0246	22,2598	0,5657	0,0000	0,0000	0,0000
300	0,0000	4,4435	0,0080	22,2598	0,5657	0,0000	0,0000	0,0000
430	0,0000	0,0000	0,0000	0,1390	0,4825	0,0000	0,0000	0,0000
600	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
900	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabelle 3-6-10: Buchenholz – Berechnete temperaturabhängige Stoffmengen flüchtiger Verbindungen in mol.

Temperatur in °C	Speziesvorrat im Brennstoff in 10 ³ mol							
	O ₂	CO	CO ₂	C ₃ H ₈	H ₂	H ₂ O	N ₂	NH ₃
125	0,57431	22,1376	3,6521	3,1481	21,3534	1,0517	0,0080	0,0000
300	0,57431	8,6629	0,0007	2,6058	3,1204	0,0000	0,0080	0,0000
430	0,0000	2,5432	0,0007	0,9831	0,0049	0,0000	0,0080	0,0000
600	0,0000	0,7939	0,0002	0,3516	0,0017	0,0000	0,0080	0,0000
900	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabelle 3-6-11: Abfall – Berechnete temperaturabhängige Stoffmengen flüchtiger Verbindungen in mol.

Temperatur in °C	Speziesvorrat im Brennstoff in 10 ³ mol							
	O ₂	CO	CO ₂	C ₃ H ₈	H ₂	H ₂ O	N ₂	NH ₃
125	0,0000	6,2460	9,5809	7,6640	7,1799	1,6313	0,7658	0,0074
300	0,0000	6,2407	1,5733	4,9833	0,3217	0,0085	0,4880	0,0000
500	0,0000	2,5067	0,9875	0,7039	0,3203	0,0085	0,3120	0,0000
700	0,0000	1,0647	0,0002	0,2039	0,0016	0,0000	0,1305	0,0000
900	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabelle 3-6-12: EBS – Berechnete temperaturabhängige Stoffmengen flüchtiger Verbindungen in mol.

Temperatur in °C	Speziesvorrat im Brennstoff in 10 ³ mol							
	O ₂	CO	CO ₂	C ₃ H ₈	H ₂	H ₂ O	N ₂	NH ₃
125	0,0000	9,6097	2,8102	11,6313	0,0497	3,9151	0,4281	0,0068
300	0,0000	9,6097	0,0037	7,7059	0,0332	0,0001	0,2860	0,0000
500	0,0000	4,9228	0,0004	0,7489	0,0051	0,0001	0,1755	0,0000
700	0,0000	3,1248	0,0004	0,7022	0,0035	0,0001	0,0450	0,0000
900	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Die so berechneten Speziesverteilungen in Abhängigkeit von Temperatur und Brennstoff können nun in das Rostmodell integriert werden. Im nachfolgenden Abschnitt wird verwendete Rostmodell näher beschrieben.

3.6.2 TB 6B: Implementierung des Entgasungsverhaltens in das Rostmodell (inkl. Beschreibung des Rostmodells)

BESCHREIBUNG DES ROSTMODELLS COMBATE

Das Rost- und Feuerraummodell beschreibt die Transportvorgänge auf dem Rost, das Ausgasen und den Ausbrand des Mülls sowie den Transport und die Reaktionen der Verbrennungsgase.

Grundsätzlich ist zu betonen, dass das nachfolgend beschriebene Modell dazu dient, die Vorgänge auf einem Rost zu beschreiben. Die Gasphase wird in dem Feuerungsmodell nur rudimentär abgebildet. Damit ist das Feuerungsmodell kein Ersatz, sondern eine Ergänzung zu einem CFD-Modell. Erst die Kopplung des Feuerungsmodells mit einem CFD-Modell kann die realen Vorgänge zuverlässig abbilden. Jedes der beiden Teil-Module allein, CombAte und CFD, weist grundsätzliche Schwächen auf.

Das Programmpaket CombAte ist so konzipiert, dass beliebige Rostsysteme nur durch Angabe von Werten aus der Praxis wie z.B. Rostlänge und -neigung, Abmessungen der Roststäbe, Bewegungsfrequenzen, Brennstoff- und Luftmengen zu definieren. Es sind keinerlei Expertenfaktoren oder dergleichen erforderlich. Durch die Simulation einer Vielzahl unterschiedlicher Rostsysteme ist diese Vorgehensweise und somit die Programmantwort validiert worden.

Durch die freie Programmierung kann die automatische Übergabe der berechneten Größen an ein CFD-Programm realisiert werden.

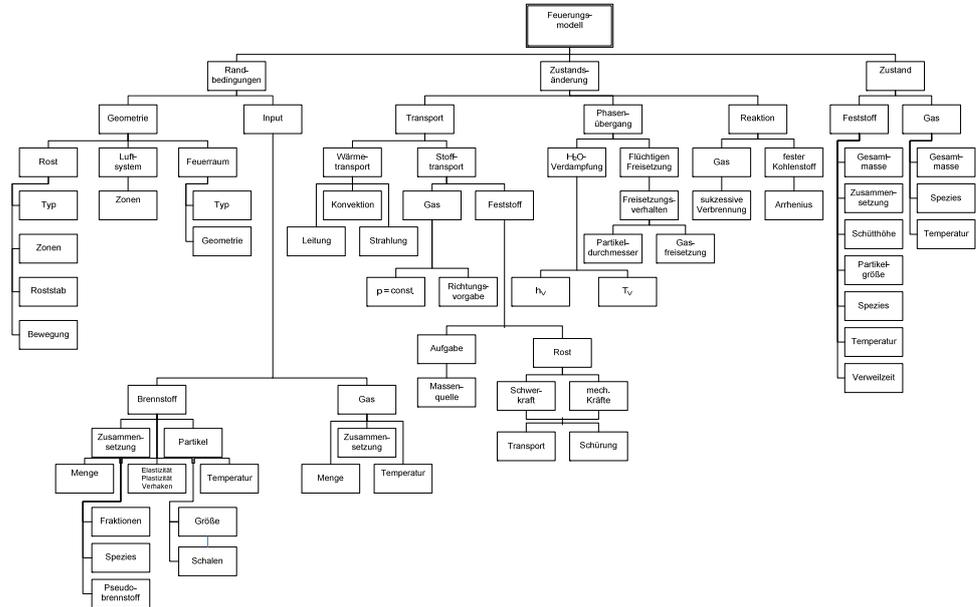
Für die Simulation von verfahrenstechnischen Prozessen sind allgemein die drei folgenden 3 Bereiche zu definieren:

- Randbedingungen (Geometrie sowie vor-definierte Stoff- und Energieströme über die Systemgrenzen)
- Zustand (aktueller physikalisch-chemischer Zustand innerhalb der Systemgrenzen)
- Zustandsänderung (dynamisches Modell, das die Veränderung der Zustände beschreibt).

Das Rost- und Feuerraummodell CombAte ist modular aufgebaut. Alle Module können einem dieser 3 Bereiche zugeordnet und unabhängig von den anderen Modulen bearbeitet definiert werden.

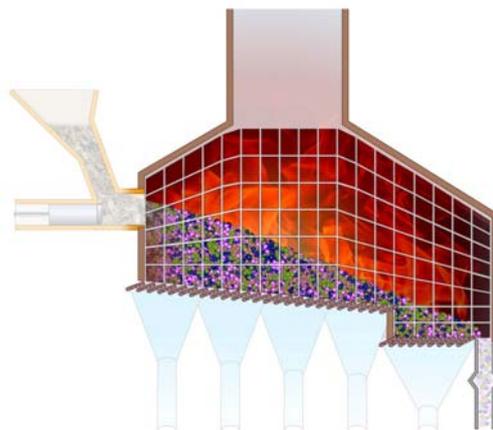
Eine Übersicht über die chemisch/physikalischen Module und deren strukturelle Berücksichtigung gibt Abbildung 3-6-4.

Abbildung 3-6-4:
Module innerhalb
des Feuerraum-
Modells



Die eigentliche Modellierung basiert auf einem finiten Differenzen-Verfahren. Hierzu wird der zu betrachtende Feuerraum in kleine Abschnitte, sogenannte Zellen aufgeteilt (siehe Abbildung 3-6-5). Jede Zelle wird als homogener Rührkessel betrachtet. Die Kombination aller Zellen entspricht also einer mehrdimensionalen Rührkesselkaskade. Innerhalb einer Zelle werden Feststoff und Gas zunächst getrennt betrachtet. Die Bewegung/der Transport des Feststoffes erfolgt nur aufgrund von äußeren Kräften, unten denen z.B. die Gravitation oder aber die aus der Rostbewegung resultierenden Kräfte genannt werden können. Das Gas umgibt den Feststoff.

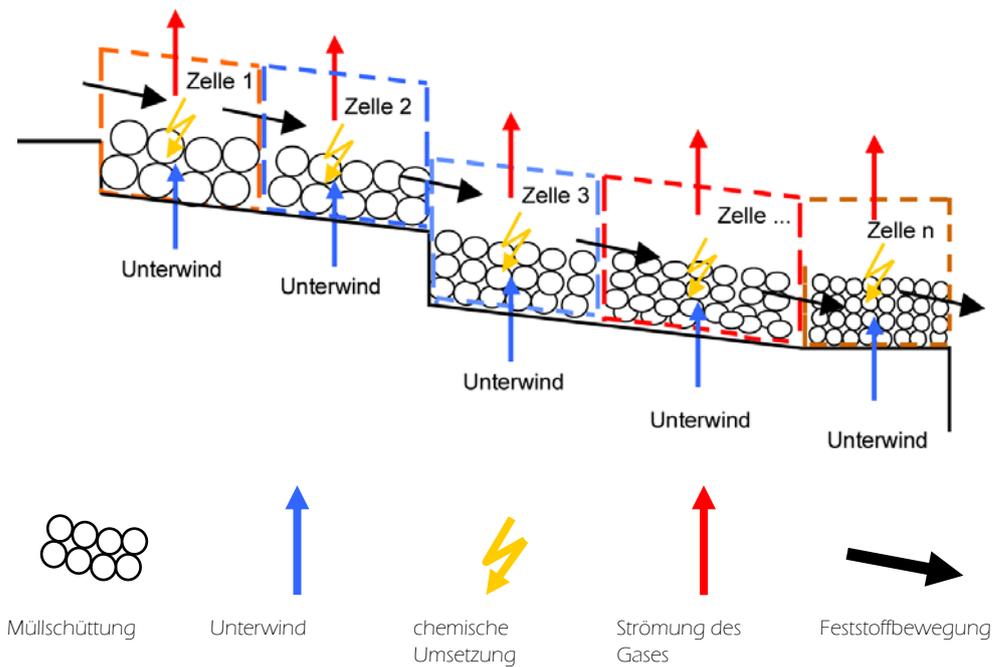
Abbildung 3-6-5:
Schematische
Darstellung der
Einteilung des
Brennraumes in
einzelne Zellen.



Entsprechend kann in einer mit Feststoff gefüllten Zelle nur innerhalb der sich innerhalb der Schüttung ergebenden Hohlräume Gas vorhanden sein. Gas- und Feststoffphase kommunizieren über die Phasengrenzfläche, also die Oberfläche

des Feststoffes. Hier werden Stoff und Wärme ausgetauscht. Der Transport des Gases erfolgt über einen Druckterm. Erhöht sich in einer Zelle die Gasmenge, sei es durch eine innere Quelle (z.B. entgasender Feststoff) oder Eintrag über die Zellgrenzen, steigt zunächst der Druck in der Zelle. Der Differenzdruck zu den benachbarten Zellen initiiert dann den Gastransport. Die Haupttransportrichtungen sind schematisch in Abbildung 3-6-6 zusammengefasst.

Abbildung 3-6-6:
Schematische
Darstellung der
Transporteffekte



3.7 TB 7: Erweiterung des Rostmodells um Submodule

3.7.1 Anpassung der Module

Wie bereits 3.6.2 erwähnt, wird sich das Entgasungsverhalten eines realen Brennstoffes nicht nur mit der beschriebenen temperaturabhängigen Charakterisierung beschreiben lassen. Vielmehr werden der Prozessverlauf und insbesondere Transportvorgänge für Wärme und Stoff den Entgasungsprozess beeinflussen. Hinsichtlich des globalen Transportes ist in CombAte ein Partikelmodell implementiert. Der dem Rostmodell zugeführte Brennstoff kann somit neben den einzelnen Brennstofffraktionen auch mit einer mittleren Stückgröße definiert werden. Die einzelnen Stücke/Partikel werden über äußere Kräfte transportiert und gemischt. Daraus ergeben sich differierende Zustände in den einzelnen Partikeln. Mit der ersten Implementierung des neuen Entgasungsmodells haben sich einige Effekte gezeigt, die weitere Optimierungen bzw. Submodule erforderlich machten. Hier soll auf 2 wesentliche Neuerungen eingegangen werden.

Zunächst hat sich gezeigt, dass das globale Entgasen und somit die Feuerlage der Rostsimulation nicht realistisch dargestellt hat. Konkret war der gesamte Umsatzprozess zu schnell, der Brennstoff war zu früh ausgebrannt. Dieses Problem konnte auf einen Selbstverstärkungseffekt eingegrenzt werden. Das freigesetzte Gas des Brennstoffes wird über dem Brennstoff gezündet/verbrannt. Die Flamme strahlt auf den Brennstoff zurück, der dadurch weiter erwärmt, mehr Gas freisetzt und so wieder zu heiserer Flamme führt. Dies ist ein unrealistischer Effekt. Betrachtet man ein brennendes Holzsplit im Lagerfeuer, so fällt schnell auf, dass trotz der Flamme an den Stirnflächen Wasser austritt. Holz ist ein schlechter Wärmeleiter, so dass die äußere Temperatur nur langsam nach innen weitergegeben wird. Der Wärmetransport in das Holzsplit oder allgemein in das Partikel spielt eine wesentliche Rolle. Dies war bekannt und wurde durch ein Kern-Hülle-Modell berücksichtigt, das mit dem alten Entgasungsmodell hinreichend war. Mit der Verbesserung des Entgasungsmodells musste nun dieses Modell erweitert werden.

Wesentliche Erweiterung ist der Wechsel vom Kern-Hülle-Modell zu einem Schalenmodell (s. Abbildung 3-7-1). Dieses Modell ist gut in der Literatur belegt und anerkannt.

Abbildung 3-7-1:
Grafische Darstellung des verwendeten Schalenmodells [Warnecke, 2011].



Es können beliebig viele Schalen definiert werden, die miteinander über die Grenzflächen kommunizieren. Mit zunehmender Schalenanzahl steigt die Genauigkeit der Transportvorgänge innerhalb des Partikels. Die derzeit genutzte Anzahl

von 5 Schalen zeigt einen guten Kompromiss zwischen Rechengeschwindigkeit und Genauigkeit des Temperaturprofils.

Mit dieser Implementierung können einige praktische Beobachtungen auch in der Simulation gefunden werden. Insbesondere der oben erwähnte Effekt, nasser Kern am brennenden Holzsplit, kann sehr gut wiedergegeben werden.

Das Einführen weiterer Schalen hat beabsichtigt zur Folge, dass die Wärmeleitung nach innen geringer ist. Daraus folgt eine heißere Oberfläche, was den oben beschriebenen selbstverstärkenden Effekt vermeidet. Durch die heißere Oberfläche wird die Temperaturdifferenz zur strahlenden Flamme und somit die Einstrahlleistung auf das Partikel geringer.

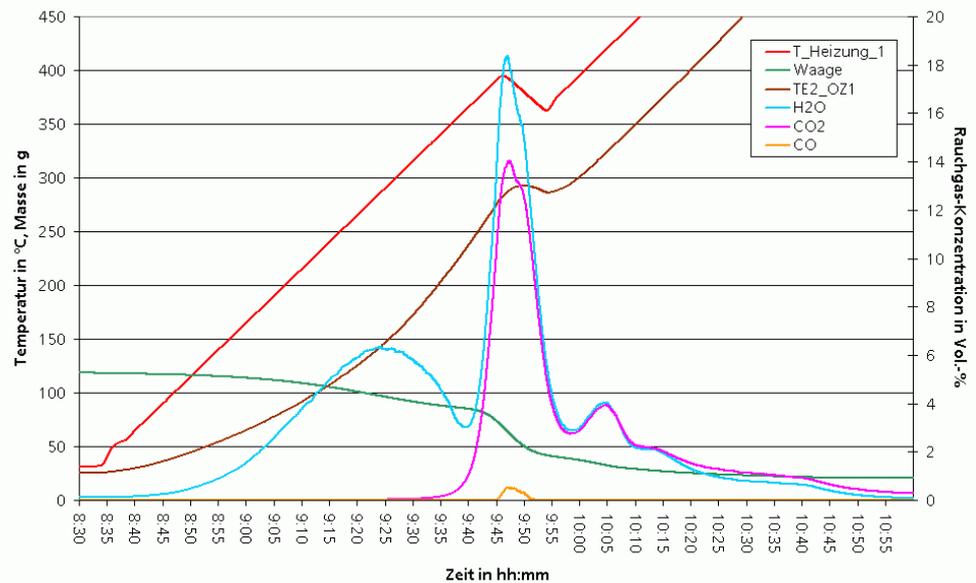
Nebeneffekt der erhöhten Oberflächentemperatur war aber, dass mit dem vorhandenen Koksabbrandmodell der Koks zu schnell umgesetzt wurde. Auch hier war zunächst ein sehr einfaches Modell implementiert.

Die aus der Kohleforschung bekannte Literatur verweist auf ein Koksumsatz-Modell, bei dem sowohl temperaturabhängige Kinetik als auch die Sauerstoffdiffusion berücksichtigt wird. Dieses Modell zeigt auch im der CombAte-Umgebung realistische Werte.

3.7.2 Validierung des Rostmodell-Entgasungsverhaltens anhand eines Technikumsversuches

Wie weiter oben erwähnt musste das Entgasungsmodul des Rostmodells angepasst werden. Um das neue Umsatzverhalten zu validieren, wurden Versuche an der Technikumsanlage durchgeführt. Diese wurden im Anschluss mit Berechnungsergebnissen des Rostmodells verglichen. Die Versuchsparameter wurden so gewählt, dass mehrere Aspekte des Modells geprüft werden konnten. Die Probe, welche im Versuch verwendet wurde (Buchenholz) wurde durch Wässern auf eine Feuchte von 28 %_{Ma} gebracht. Somit weisen die Versuchsergebnisse eine ausgeprägte Trocknungsphase auf. Die Probeneinwaage betrug insgesamt 125,49 g. An Stickstoff wurden 12 l_N/min in die IPZ und an Luft 5 l_N/min in die TNV zugeführt. Die Versuchsergebnisse sind in Abbildung 3-7-2 dargestellt.

Abbildung 3-7-2:
Schematische
Darstellung der
Einteilung des
Brennraumes in
einzelne Zellen.

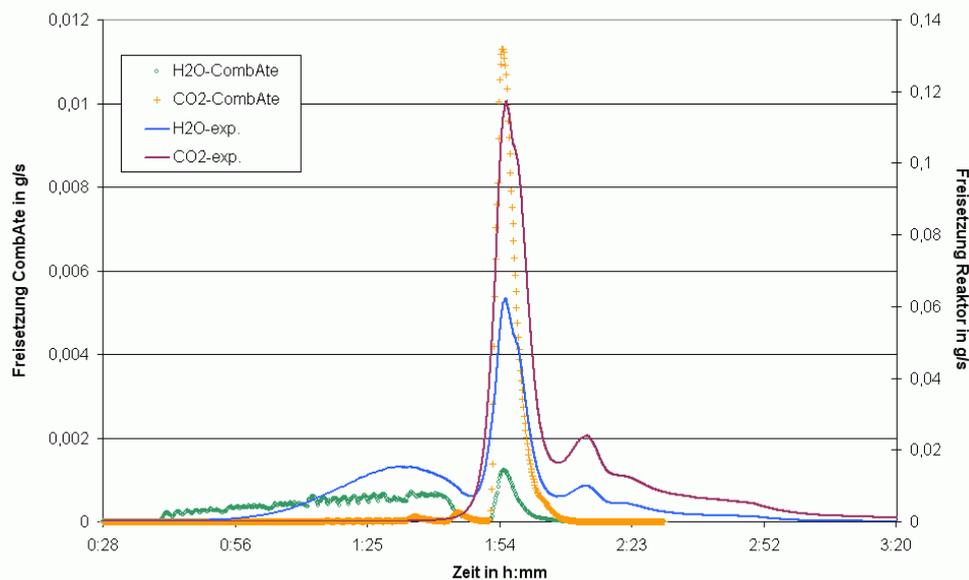


Die blaue Kurve (H_2O) in Abbildung 3-7-2 weist mehrere Maxima auf. Das Erste, welches im Zeitraum zwischen 8:40 Uhr und 09:40 auftritt, ist auf die Trocknung des Brennstoffs zurückzuführen. Dies ist zum einen aus den niedrigen Temperaturen in der IPZ (braune Kurve) und zum anderen aus der Abwesenheit von CO_2 (rosa Kurve) zu schlussfolgern. Um ca. 09:40 setzt ein weiterer Anstieg der Kurve zum nächsten Maximum ein. Hier beginnt die Pyrolyse des Brennstoffs, allerdings überlagert mit der abklingenden Trocknung. Parallel zur H_2O -Kurve steigt auch die CO_2 -Kurve steil an. D. h., es kommt zur Freisetzung von Kohlenwasserstoffen, welche in der TNV zu H_2O und CO_2 verbrannt werden. Da ab 09:45 CO im Rauchgas gemessen wurde (orangene Kurve), wurde die Reglertemperatur begrenzt (rote Kurve) und so die Flüchtigensfreisetzung abgeschwächt.

Die Trocknung und Flüchtigensfreisetzung ist nicht nur über die Gaskonzentration festzustellen, sondern auch über den Masseverlust der Probe (grüne Kurve). Diese Messung bietet den Vorteil, dass direkt an der Probe gemessen wird, während bei der Messung der Gaskonzentration die Flüchtigen erst oxidiert werden und den Weg zur Gasanalytik zurück legen müssen.

Die vorliegenden Versuchsergebnisse und Regelparameter (Feuchte und Zusammensetzung der Probe, Aufheizgeschwindigkeit etc.) wurden nun soweit möglich in das Rostmodell CombAte übertragen und eine Simulationsrechnung wurde vorgenommen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 3-7-3 im Vergleich zu den Versuchsergebnissen zu sehen.

Abbildung 3-7-3:
Schematische
Darstellung der
Einteilung des
Brennraumes in
einzelne Zellen.



Bei der vorliegenden Grafik ist zu beachten, dass sich die Kurven jeweils auf verschiedene Skalen beziehen. Die Freisetzungsraten unterscheiden sich zwischen Modellrechnung und Experiment ca. um Faktor 10. Dies ist auf die vorliegende Modellrechnung zurückzuführen: Da CombAte eigentlich für die Simulation von Rostverbrennungsanlagen mit Massenströmen im t/h-Bereich erstellt wurde, ist keine unbegrenzte Skalierung nach unten möglich. Es wurde also ein ähnlicher Versuch wie in der Technikumsanlage mit höheren Massenströmen berechnet, welche in gleicher Relation zueinander standen wie im Versuch. Mehrere Dinge sind zu erkennen. Zum einen wird zwar der Verlauf der Trocknung nicht korrekt dargestellt, die Dauer der Trocknung stimmt jedoch sehr gut überein (Zeit von ca. 0:40 bis 1:40). Die Trocknungsdauer von ca. 1 h bei den vorliegenden Randparametern wird also korrekt berechnet. Auch das Einsetzen der berechneten Pyrolyse gegen 1:50 und das Ende der Pyrolyse gegen 2:15 stimmt gut mit den experimentellen Daten überein. Lediglich das zweite Pyrolyse-Maximum, welches durch den speziellen Versuchsablauf (ab- und anschalten der Heizelemente, s. o.) verursacht und im Modell nicht berücksichtigt wurde, wird nicht berechnet. Zusammenfassend ist zu sagen, dass mit der Technikumsanlage eine gute Validierung des Modells CombAte durchgeführt werden konnte. Das erweiterte Pyrolysemodell liefert verlässliche Daten, um diesen Teilschritt der Verbrennung abzubilden. Weitere Validierungsversuche, u. a. mit Strömungssimulationssoftware, sind geplant. Das betrachtete Rostmodell wird nun im nächsten Schritt genutzt, um großtechnische Verbrennungsanlagen zu simulieren.

3.8 Rostmodellierung einer Abfallverbrennungsanlage und eines EBS-Kraftwerks (TB8 und TB9)

3.8.1 Beschreibung der Verbrennungsanlagen

Die betrachtete Abfallverbrennungs-Anlage besteht aus drei Linien, die jeweils einen Durchsatz von 8 t/h besitzen. Es kommen bei allen drei Linien Vorschubroste und Mittelstromfeuerungen zum Einsatz. Hiermit können im Jahr 155 000 t Abfall verbrannt werden.

Die EBS-Verbrennungsanlage verfügt über eine Verbrennungslinie, welche mit einem wassergekühlten Vorschubrost ausgestattet ist. Der Brennstoff kann Heizwerte zwischen 11 und 18 MJ/kg aufweisen, der Betriebspunkt liegt bei 14 MJ/kg bei einem Durchsatz von 12,2 t/h. Die Durchsatzrate liegt zwischen 6,6 und 13,15 t/h.

3.8.2 Eingangsgrößen der Modelle

3.8.2.1 Randbedingungen

Die wesentlichen Randbedingungen sind:

- Allgemeiner Betriebszustand / Lastfall / Feuerungsleistungsdiagramm
- Geometrie: Rostgrößen / Feuerungstyp / Kesselgenehmigungszeichnung / Düsendurchmesser, -anzahl, -anordnung
- Brennstoff: Durchsatz / Zusammensetzung / Schütthöhe / Partikeleigenschaften
- Luft / Rezi: Mengen / Verteilung / Zusammensetzung
- Transporteigenschaften: Roststabgeometrie / Hublänge / Doppelhubzahl.

Die Geometrie des Rostes ist in Tabelle 3-8-1 zusammengefasst.

Tabelle 3-8-1: Rostgeometrien

Parameter	Einheit	Abfallverbrennung		EBS-Verbrennung	
		Länge	Breite	Länge	Breite
Rost, gesamt	[m]	9,6	3,0	9	4,97
Rostzone 1	[m]	3,6	3,0	1,8	4,97
Rostzone 2	[m]	3,6	3,0	4,5	4,97
Rostzone 3	[m]	2,4	3,0	2,7	4,97

Tabelle 3-8-2: Brennstoff und Luftströme

Allgemeines	Einheit	Abfallver- brennung	EBS- Verbren- nung
Massenstrom	[Mg/h]	6,6	11
Heizwert	[MW]	10,4	11,76
Dampf	[Mg/h]	20,9	7,5
Dampf Druck	[bar]	65	
Dampf Temperatur	[°C]	435	260
Luftmenge, gesamt	[Nm ³ /h]	23800	60000
Anteil PL	[%]	49	50
Anteil SL	[%]	23	50
Falschluff	[%]	1	
<u>Verteilung PL</u>			
PL gesamt	[Nm ³ /h]	211600	30000
Temperatur	[°C]	25	35
Zone 1	[% vol]	7	9
Zone 2	[% vol]	23,5	24
Zone 3	[% vol]	35,5	33
Zone 4	[% vol]	18,5	27
Zone 5	[% vol]	15,5	7
<u>Verteilung SL</u>			
SL gesamt	[Nm ³ /h]	5500	30000
Temperatur	[°C]	25	23,5
<u>Brennstoff Zusam- mensetzung</u>			
Wasser	[% _{mas}]	21,3	34
Asche	[% _{mas}]	27	6,65
Flüchtige	[% _{mas}]	16,7	50,77
Koks	[% _{mas}]	35	8,58
<u>Elementaranalyse</u>			
Kohlenstoff	[% _{mas}]	27,6	28,54
Wasserstoff	[% _{mas}]	3,7	4,04
Sauerstoff	[% _{mas}]	19,2	26,00
Stickstoff	[% _{mas}]	0,5	0,77
Schwefel	[% _{mas}]	0,2	0,00
Chlor	[% _{mas}]	0,5	0,00

Tabelle 3-8-2 gibt eine Übersicht über die Brennstoff- und Luft-Ströme des Prozesses. Darin sind die Mengen und Anteile der jeweiligen Ströme näher beschrieben. Die Datengrundlage für die EBS-Feuerung bezieht sich auf die Teillast von 80 %. Dies ist aus organisatorischen Gründen geschehen, da an einem Tag mit 80-%iger Teillast die Probenahme des Abfalls erfolgte. Die Zusammensetzung der Luftströme ist ebenfalls angegeben (s. Tabelle 3-8-3).

Die Zusammensetzung des Abfalls wird in einer Mischung aus Kurz- und Elementaranalyse angegeben. Dabei werden die Flüchtigen in „Flüchtige Kohlenwasserstoffe“ und „Flüchtige Anorganika“ unterteilt. Bei den Berechnungen findet sich ein Teil des Sauerstoffgehaltes des festen Brennstoffes in der Schlacke wieder. Grund für diese Vorgehensweise ist die unzureichende Information über die Bindungsarten des Sauerstoffes im festen Brennstoff. Mit dieser Einschränkung sind die Berechnungsergebnisse an realen Anlagen validiert worden und liefern ausgesprochen gute Übereinstimmungen mit den Messwerten und Beobachtungen.

Tab. : 3-8-3 Gas Zusammensetzung von Primär und Sekundär-Luft

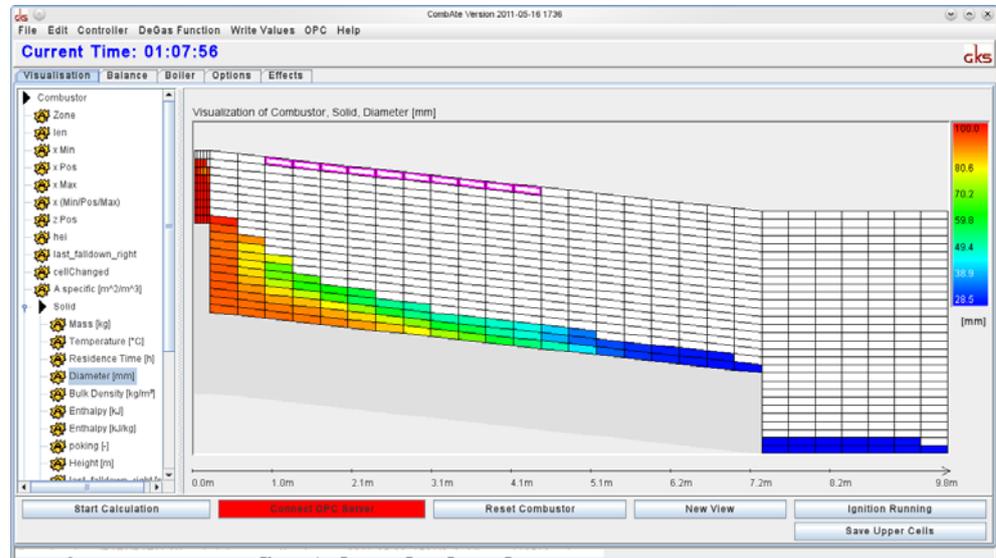
Parameter	Einheit	Primärluft	Sekundär-luft
CO ₂	[Vol-%]	0,330	0,330
N ₂ + Ar	[Vol-%]	77,959	77,959
O ₂	[Vol-%]	20,665	20,665
H ₂ O	[Vol-%]	1,343	1,343
SO ₂	[Vol-%]	0,000	0,000
HCl	[Vol-%]	0,000	0,000
HF	[Vol-%]	0,000	0,000

3.8.3 Simulationsergebnisse für eine Abfallverbrennungs- und eine EBS-Anlage

Durch das Rostmodell CombAte wurden in diesem Projekt vor allem Eingangsdaten für Strömungssimulationen gewonnen. Deshalb wird hier auf eine ausführliche Darstellung der Ergebnis-Daten verzichtet. Eine Ausführliche Darstellung der Strömungssimulationsergebnisse findet sich in den nächsten Abschnitten.

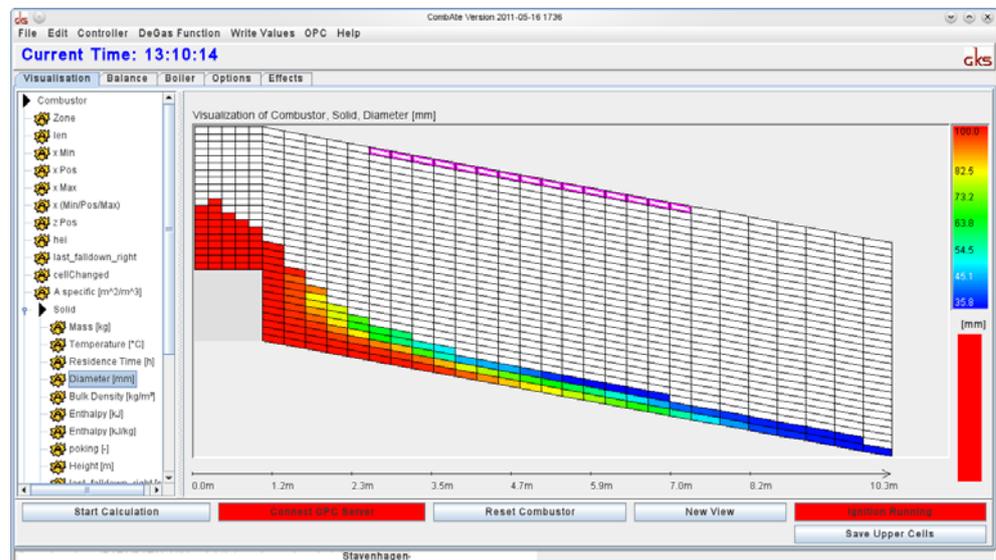
Nachfolgend werden stellvertretend für die Rostsimulationsergebnisse für beide Anlagen die Berechnungsergebnisse für den Partikeldurchmesser über der gesamten Rostlänge dargestellt (s. Abbildung 3-8-1 und 3-8-2).

Abbildung 3-8-1:
Abfallverbrennungs-
Anlage



Es ist aus beiden Abbildungen zu erkennen, dass sowohl Schütthöhe als auch Partikeldurchmesser über die Rostlänge hin abnehmen. Die rosa gekennzeichneten Zellen stellen den Eintritt in den Feuerraum dar. Die Charakteristika der Abfall-Anlage und die Mittelstromfeuerung der EBS-Anlage sind gut zu erkennen.

Abbildung 3-8-2:
EBS-Verbrennungs-
Anlage



Die ermittelten Daten werden nun genutzt, um die Feuerraummodelle mittels Strömungssimulationssoftware abzubilden.

3.9 Feuerraummodellierung einer Abfallverbrennung und eines EBS-Kraftwerks

3.9.1 Beschreibung der Feuerraummodelle

3D-CFD-SIMULATION MIT DEM KOMMERZIELLEN PROGRAMM ANSYS-CFX

AnsysCFX ist ein kommerzielles CFD-Programm. Eine genauere Beschreibung wird im Folgenden gegeben. Computergestützte Analyse Techniken (CAE) haben Entwurf und Konstruktion in vielen Bereichen, vornehmlich in der strukturellen Analyse, revolutioniert. Die Strömungssimulation (CFD) hat mittlerweile einen ähnlichen Einfluss auf die Analyse der Phänomene bei Fluiden, einschließlich Wärmeübertragung, Stoffübergang und chemischen Reaktion. Das häufige Auftreten solcher Phänomene in der Industrie bewirkt, dass CFD jetzt ein Standard des CAE Repertoires ist. AnsysCFX ist ein leistungsfähiges CFD Werkzeug für Thermofluidanalyse und ist für Gebrauch in einem CAE-Umfeld bestimmt worden.

MÖGLICHKEITEN VON ANSYS-CFX

Der Hintergrund von Ansys-CFX ist, dass die Differentialgleichungen der Fluid-Physik mit numerischen Methoden auf einem Berechnungsgitter für allgemeine Beschreibungen gelöst werden. Für sehr große Rechengebiete ist der Code auch parallel auf mehreren Rechnern lauffähig. Dadurch kann die Rechenzeit drastisch reduziert werden.

Die aktuelle Version von CFX bietet ein großes Spektrum an Möglichkeiten:

- Reibungsbehaftete laminare und turbulente Strömung
- Kompressibel und inkompressibel
- Sehr gute Turbulenzmodelle (z.B. SST) und neue Methoden zur Wandbehandlung, welche die Wandreibung, Wärmeübergang und Quellen und Senken an den Wänden sicher beschreiben.
- Mehrphasen-Strömungen (Euler Euler Modell, Lagrange' Partikel, Verdampfung)
- Freie Oberflächen – stehende und rotierende Bezugssysteme wie es z.B. für Turbomaschinen, Pumpen oder Ventilatoren erforderlich ist.
- Verbrennung, Strahlung und reagierende Strömung
- Nicht newtonsches Verhalten
- Adaptives Netze
- Direkter Geometrie Import aus CAD Programmen wie z.B. ProEngineer, CATIA, Unigraphics
- Übertreffende Parallele Leistung
- Einzigartige Löser Technologie, die sich durch hohe Genauigkeit, Geschwindigkeit und Robustheit auszeichnet.

- Implementierung eigener Module, über die offene Schnittstelle können eigene Methoden wie z.B. die Reaktionsbetrachtung mit detaillierter Chemie implementiert werden.

CHEMISCHE REAKTIONEN UND VERBRENNUNG

AnsysCFX kann chemisch reagierende Strömungen berechnen, weil es bei der Lösung die Erhaltungsgleichungen für chemische Spezies und Energie berücksichtigt. Der Code lässt Dichteänderungen im Fluid zu, die durch Temperatur- und/oder Konzentrationsveränderungen hervorgebracht werden. Die vorhandenen Möglichkeiten erlauben das Modellieren chemischer Reaktion bei Prozessen wie:

- Verbrennungsmaschinen
- Chemische Reaktoren
- Gas-Turbinen
- Feuerungen.

Ogleich der Code allgemein ist, ist es nicht immer einfach, reagierende Strömungen direkt abzubilden. Dies hat mathematische und physikalische Gründe. Die physikalischen Komplikationen liegen hauptsächlich bei der chemischen Kinetik, der Turbulenz und deren Interaktionen. Chemische Kinetik wird mit den Einheiten und der Rate der Reaktion der chemischen Sorte auf dem molekularen Niveau berücksichtigt. Diese Informationen sind wesentlich für das Modellieren, aber in hohem Grade System-spezifisch (d.h. abhängig von der Art der Reaktionsmittel, des Drucks, der Temperatur, etc.) und häufig schwierig zu erreichen. Reaktionsmechanismen schwanken in Größe und Kompliziertheit von den einfachen Entwürfen, die einige Sorten und einen einzelnen Reaktion Schritt, z.B. die irreversible Reaktion $A + B \rightarrow C$, zu den in hohem Grade komplexen Systemen in dem tausende Sorten und hunderte Reaktionen einbezogen werden. Die letztere ist z.B. die Kohlenwasserstoffverbrennung, eine wichtige Gruppe der reagierenden Strömungen. Einfachere Reaktionen werden häufig als Bruttoreaktionen abgebildet.

Selbstverständlich ist die Genauigkeit der Analyse abhängig von der Gültigkeit der Näherungswerte. Bei turbulenten Strömungen ist es herkömmliche Praxis beim Lösen die Zeit/Durchschnittswerte der Spezieskonzentrationen, der Temperatur und anderer Variablen zu verwenden. Bei der Lösung reagierender Strömungen können sich die Werte unter Umständen lokal blitzschnell ändern. Bei 'turbulenten Reaktionen', ist es folglich notwendig, die durchschnittliche Reaktions-Rate auszuwerten. Solche Modelle sind vorhanden, aber sie haben ihre eigenen Sätze der zugrunde liegenden Näherungswerte und der Ungenauigkeiten. Außerdem neigen sie dazu, nicht allgemein zu sein. Z.B. gibt es eine Kategorie turbulenter Verbrennungsmodelle, die darauf basiert, dass Kraftstoff und Luft ideal gemischt werden, bevor sie verbrennen ('premixed' Modelle). Eine andere Kategorie erfor-

dert, dass das Brennstoff und Oxidant separat eingeführt werden ('unpremixed' oder 'Diffusion (Zerstäubung)' Modelle).

TURBULENZ-KONTROLLIERTES EDDY BREAK-UP MODEL

Eine der frühesten Darstellungen der turbulenten chemischen Reaktion, die einen Erfolg erzielt hat, ist das „Eddy Break-Up“ Modell von Magnussen. Es wird noch weitgehend verwendet und ist in Ansys-CFX enthalten. Das „Eddy Break-Up“ Modell (EBU) wurde ursprünglich für Verbrennungsanwendungen entwickelt und basiert auf den folgenden Annahmen:

- Die Reaktion ist irreversible und eine 1-Schritt-Reaktion mit Kraftstoff (F), Oxydationsmittel (O) und Produkte (P), und eine zusätzliche inerte Spezies.
- Der Zeitskala der Reaktion ist so klein, dass die Reaktionsrate von turbulenter Mikromischung bestimmt ist.

Die Reaktionsrate dieses Modells wird beschrieben mit:

$$R_F = -\frac{\rho \varepsilon}{k} A_{EBU} \min \left[m_F, \frac{m_O}{s_O}, B_{EBU} \frac{m_P}{s_P} \right] \quad (3-9-1)$$

und

$$s_O \equiv \frac{n_O M_O}{n_F M_F} \quad (3-9-2)$$

$$s_P \equiv \frac{n_P M_P}{n_F M_F} \quad (3-9-3)$$

A_{EBU} und B_{EBU} sind dimensionslose empirische Koeffizienten mit nominalen Default-Werten 4 und 0.5. Die ersten zwei Argumente in den eckigen Klammern der Gleichung 3-8-2 stellen die lokale Ratensteuernde Konzentration fest, während das dritte Argument, das optional gelöscht werden kann, die Reaktion dort hemmen soll, wo die Temperatur niedrig ist.

Als micromixing Zeitskala wird k/ε , die Zeitskala der Dissipation, gesetzt. Dieses Modell eignet sich sowohl für „premixed“ und „unpremixed“ Systeme, obgleich es in der Praxis häufig notwendig, die A_{EBU} , B_{EBU} Koeffizienten zu korrigieren, um beste Performance für eine bestimmte Anwendung zu erreichen. In allen Fällen folgen die Spezies-Berechnungen in Ansys-CFX der Praxis des vorhergehenden Abschnitts. So wird der 'Kraftstoff' von seiner eigenen differentialen Transportgleichung errechnet und enthält die oben genannte Reaktions-Rate. Für nicht homogene Systeme wird eine zusätzliche Differentialgleichung für (3-8-1), den Mischungs-Bruch, gelöst.

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial t} (\sqrt{g} \rho f) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho \tilde{u}_j f - \left(\rho D_f + \frac{\mu_t}{\sigma_{f,t}} \right) \frac{\partial f}{\partial x_j} \right] = S \quad (3-9-4)$$

Andere Spezies werden entweder durch die differentialen Transportgleichungen oder algebraisch bestimmt. Die Behandlung von Mehrfachreaktion kann auch berechnet werden. In diesem Fall können unterschiedliche EBU-Raten für jede Reaktion implementiert werden.

GRENZEN DER METHODEN

Das Programm AnsysCFX hat verschiedene Aufgaben und ist daher, wie jedes Programm, in seiner Aussage zu interpretieren. Erste Aufgabe des Programms ist die schnelle Antwort auf Fragen nach den stationären (instationär ist grundsätzlich auch möglich) Vorgängen auf dem Rost. Dies betrifft sowohl die Freisetzung der Energie und die Vollständigkeit des Ausbrandes der Feststoffe, als auch die Vollständigkeit des Ausbrandes der Gasphase.

Besonders wichtig war die Schaffung eines Programms, das mit vernünftigem Aufwand an realen Großanlagen validierbar sein sollte. Es zeigte sich, dass die Erhöhung der Parameter-Vielfalt dieser Anforderung entgegen steht. Es ergibt sich teilweise mit zunehmender Variablen-Anzahl eine zunehmende Anzahl von Lösungen, da die Variablen-Abhängigkeit untereinander nicht eindeutig ist. Zudem ist die Validierbarkeit zum Beispiel des Einflusses einer Partikel-Größenverteilung oder Oberflächenhaftung zwischen den Partikeln schwierig. Es wird daher erwartet, dass die Summe der Abweichungen der einzelnen Variablen größer ist als die Abweichung von gemessenen Werten mittels eines Over-all Ansatzes. Die Beschränkung auf Kern-Parameter hat sich im Rahmen der Validierung ausgezeichnet bewährt.

Die hauptsächlich angewandten Parameter für die Validierung sind Temperaturen im Müll-Bett. Außerdem können die Gas-Spezies über dem Bett gemessen werden. Hinsichtlich des instationären Verhaltens können die Messungen zeitabhängig durchgeführt werden.

Trotz der Validierung treten zum Beispiel im Feuerraum Temperaturabweichung von +/- 50 K in der Gasphase auf. Auch die lokalen Konzentrationen können von Messwerten um bis zu 10 % abweichen. In der Simulation sind aber die Energie- und Stoffbilanzen vollständig geschlossen, somit ist die Abweichung nur lokal aber nicht generell.

Unter Berücksichtigung dieser Einschränkungen hat sich aber gezeigt, dass die Berechnungen die Realität gut wiedergeben. Eine große Anzahl von Simulationen von verschiedenen Anlagen (z.B. Müll-, Biomasse-, Ersatzbrennstoff-, Kohle-Verbrennungsanlagen) bestätigt dies.

3.9.1.1 Grundlegende Informationen

Die mittlere Zellgröße liegt bei ca. 0.25 m, aber in Gebieten mit großen Gradienten ist die Zellgröße auf ca. 0.1 m reduziert.

Die Wärmetauscher sind als Volumen-Senken modelliert, einzelne Rohre sind nicht abgebildet. Die Senken für Wärme und Impuls sind entsprechend VDI Wärmeatlas implementiert.

Lokale Beläge/Verschmutzungen werden bei Wärmeübergang und Druckverlust berücksichtigt.

Es wird dargestellt:

- Modell,
- Temperatur Verteilung,
- Spezies Verteilung,
- Geschwindigkeiten und
- Stromfäden.

3.9.1.2 Geometrie Abfall-Verbrennungsanlage

Neben den in Kapitel 3-8-2 genannten Randbedingungen müssen weitere Daten für die Feuerraummodellierung und –simulation berücksichtigt werden. Die Geometrie von Feuerraum und Kessel wurde als Vollgeometrie abgebildet. So ist es möglich nichtsymmetrische Zustände wie z.B. Strömungsschieflagen zu erkennen. Der dem Kessel nachgeschaltete Rauchgaskanal wurde mit simuliert, da hier hohe Abrasionen und Druckverluste auftreten.

Abbildung 3-9-1:
Geometrie, Mittenschnitt, Abfallverbrennungs-Anlage

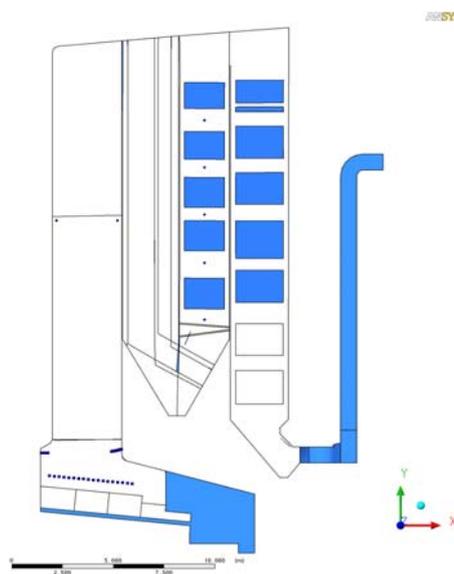
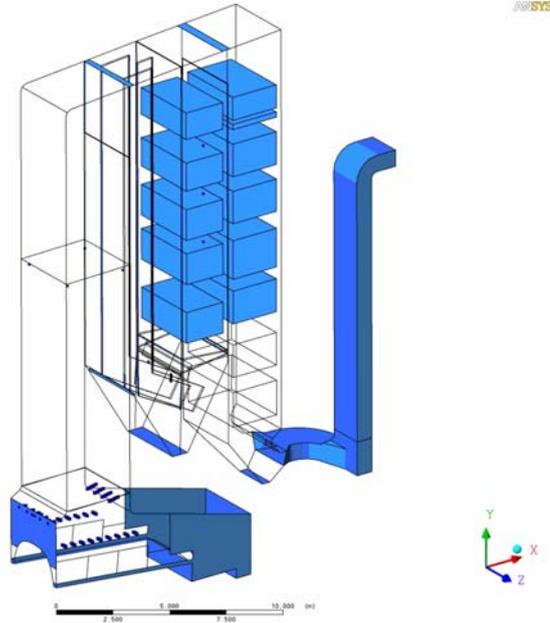


Abbildung 3-9-2:
Geometrie, Isometrie,
Abfallverbrennungs-
Anlage



Im Feuerraum sind an den Seitenwänden Rezi-Düsen kämmend angeordnet. Im Eintritt 1. Zug sind an Vorder- und Rückwand Sekundärluftebenen zu finden.

Abbildung 3-9-3:
Geometrie Sekundär-
luft- und Tertiärluft-
Düsen

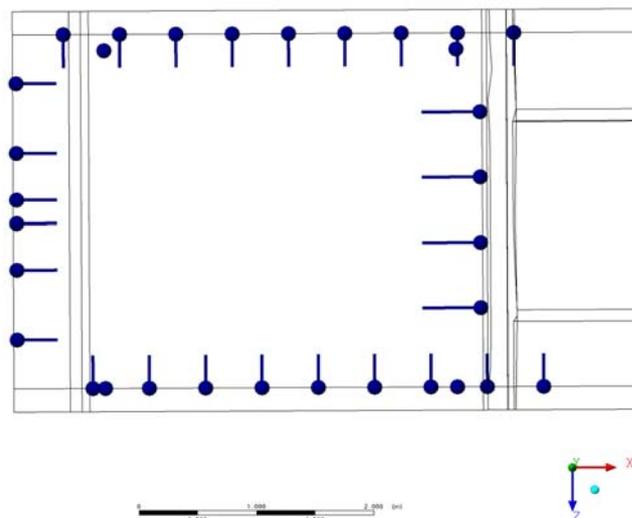
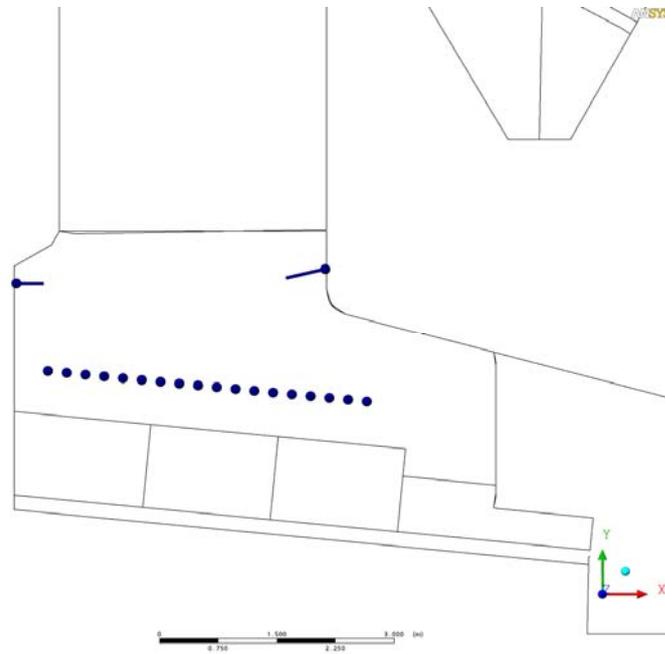


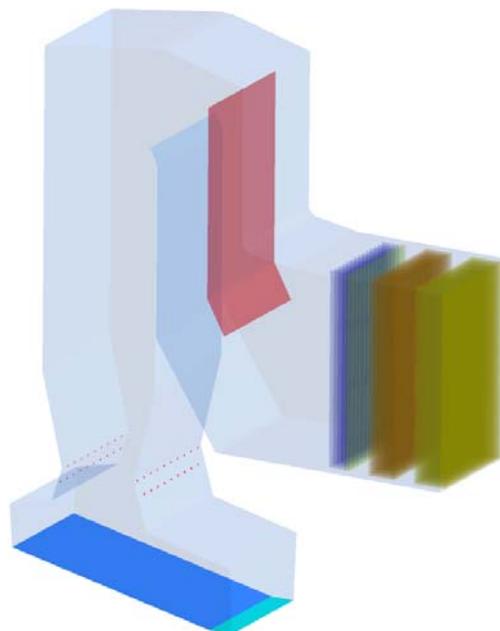
Abbildung 3-9-4:
Geometrie Sekundär-
luft- und Tertiärluft-
Düsen



3.9.1.3 Geometrie EBS-Verbrennungsanlage

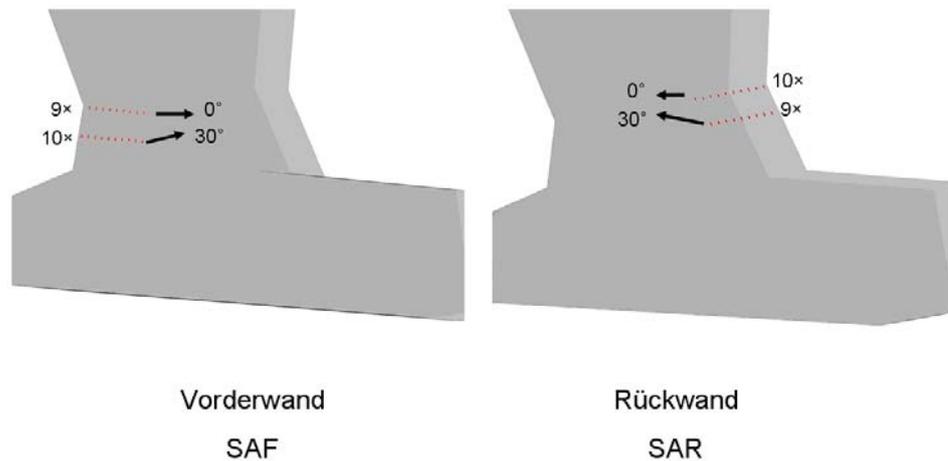
Die Geometrie der EBS-Verbrennungsanlage wurde ebenfalls als Vollgeometrie abgebildet, um eine gute Vergleichbarkeit zu den weiter oben vorgestellten Berechnungen zu schaffen (s. Abbildung 3-9-5).

Abbildung 3-9-5:
Geometrie, Isometrie,
EBS-Verbrennungs-
Anlage



Die Anordnung der Sekundärluftdüsen ist in Abbildung 3-9-6 dargestellt.

Abbildung 3-9-6:
Geometrie, EBS-
Verbrennungs-
Anlage, Sekundär-
luftdüsen-
Anordnung



3.9.2 Simulationsergebnisse für eine Abfallverbrennungs- und eine EBS-Anlage (TB9 und TB11)

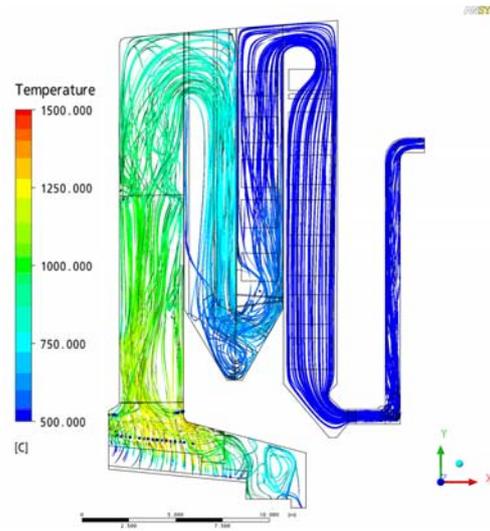
Nachfolgend werden ausgewählte Simulationsergebnisse dargestellt. Hierbei werden die beiden Anlagen gegenüber gestellt. Sämtliche vorliegende Berechnungsergebnisse befinden sich im Anhang. Teilweise werden bei der Gegenüberstellung Ergebnisse einer zweiten Berechnung genutzt. Dies ist dann ggf. angegeben.

3.9.2.1 Stromlinien

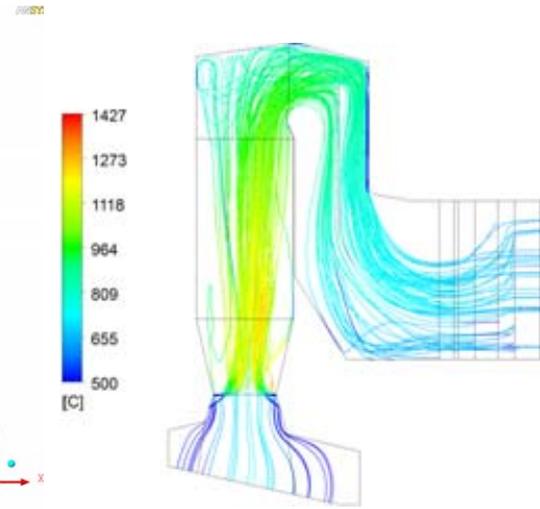
Stromlinien sind eine Darstellungsmethode, um das 3-dimensionale Strömungsbild auch in bildlicher, also 2-dimensionaler Darstellung erfassen zu können. Sie können als Bahn eines masselosen Partikels durch das Strömungsfeld verstanden werden.

Aus den Darstellungen sind einige erste Erkenntnisse zu lesen. Bei der Abfallverbrennung liegt die Strömung zunächst mit Eintritt in den 1. Zug in Richtung Vorderwand. Mit Erreichen der tangential eingedüsten Ammoniak-Aufgabe wird der gesamten Strömung ein Drall aufgeprägt. In den Zügen 2 bis 4 verleiht sich die Strömung. Die Strömung der EBS-Feuerung weist eine leichte Neigung zur Rückwand des Kessels auf. Unter der Kesseldecke werden zudem Rückströmungen berechnet. Im zweiten Kesselzug ist aber auch hier ein sehr homogenes Strömungsfeld zu sehen.

Abbildung 3-9-7:
Stromlinien, Temperatur

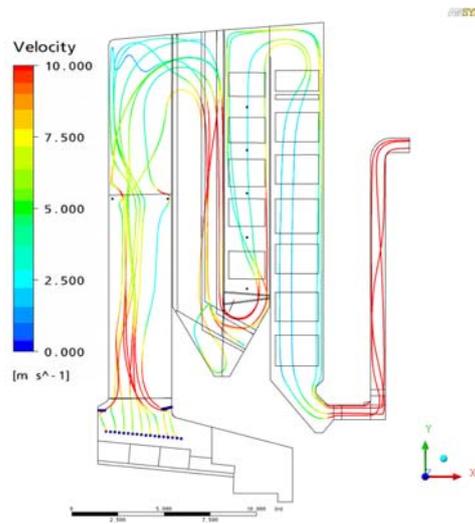


Abfallverbrennung

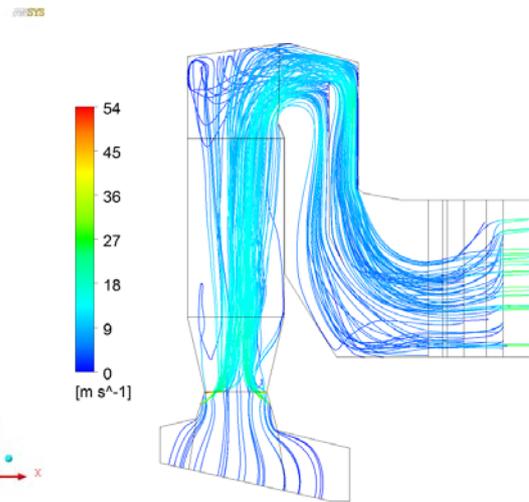


EBS-Verbrennung (1. Berechnung)

Abbildung 3-9-8:
Stromlinien, Geschwindigkeit



Abfallverbrennung

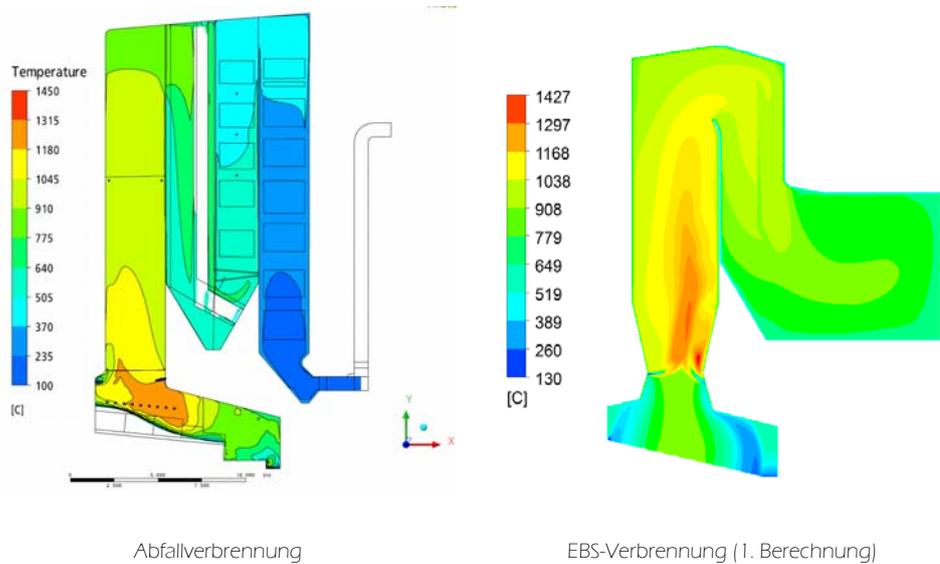


EBS-Verbrennung (1. Berechnung)

3.9.2.2 Temperatur Verteilung

Die Temperaturdarstellung ermöglicht eine sichere Methode, die Simulation zu validieren. Üblicherweise sind entlang des Kessels mehrere Temperatur-Messstellen angeordnet, deren Werte mit denen der Simulation verglichen werden können. Im nachstehenden Mittenschnitt der Abfallverbrennungs-Simulation ist deutlich zu erkennen, dass die Schüttung des Brennbettes berücksichtigt ist.

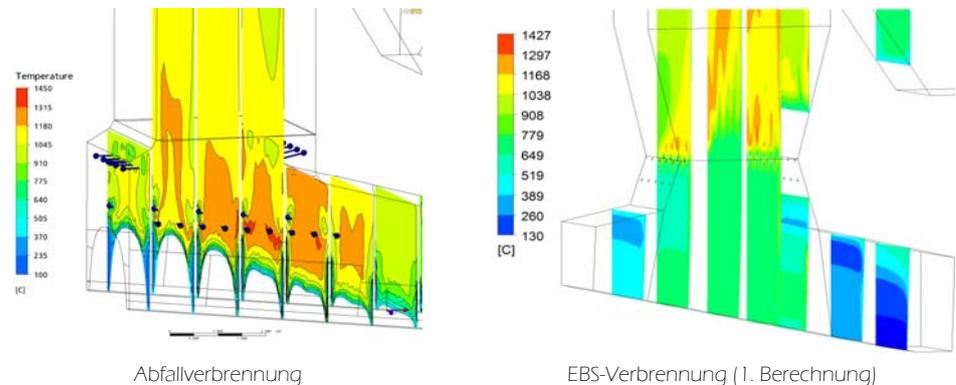
Abbildung 3-9-9:
Temperaturverteilung, Mittenschnitt



3.9.2.3 Temperatur-Verteilung Feuerraum

Die Temperaturverteilung im Feuerraum ist hier noch mal genauer dargestellt. Wie bereits aus den vorangegangenen Abbildungen ersichtlich, befindet sich unterhalb des Eintritts in den Feuerraum die reaktivste Zone.

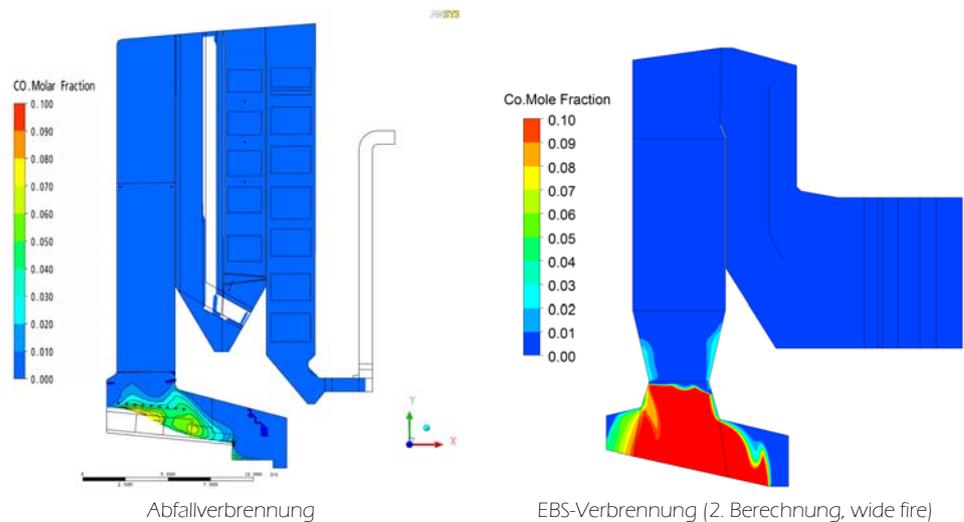
Abbildung 3-9-10:
Temperaturverteilung Feuerraum,
Abfallverbrennung



3.9.2.4 Spezies-Verteilung

Die Spezies-Verteilung im Feuerraum gibt Aufschluss darüber, in welchem Umfang die aus dem Rost freigesetzten Verbindungen bereits reagiert haben oder noch im Rauchgas vorhanden sind. An den hier abgebildeten Darstellungen ist gut der Einfluss des Rostmodells und der enthaltenen Daten zu erkennen.

Abbildung 3-9-11:
CO-Verteilung,
Mittenschnitt



Deutlich ist in Abbildung 3-9-12 (C_3H_8 -Verteilung) eine zweigeteilte Freisetzung auf dem Rost zu erkennen. Diese Berechnungsergebnisse decken sich mit den Versuchsergebnissen aus der Technikumsanlage. Die Mischbrennstoffe Abfall und EBS beinhalten Kunststoffe und biogene Fraktionen. Diese Fraktionen werden, wie im Technikumsversuch gezeigt, ihre Flüchtigen bei unterschiedlichen Temperaturen freisetzen.

Abbildung 3-9-12:
 C_3H_8 -Verteilung,
Mittenschnitt

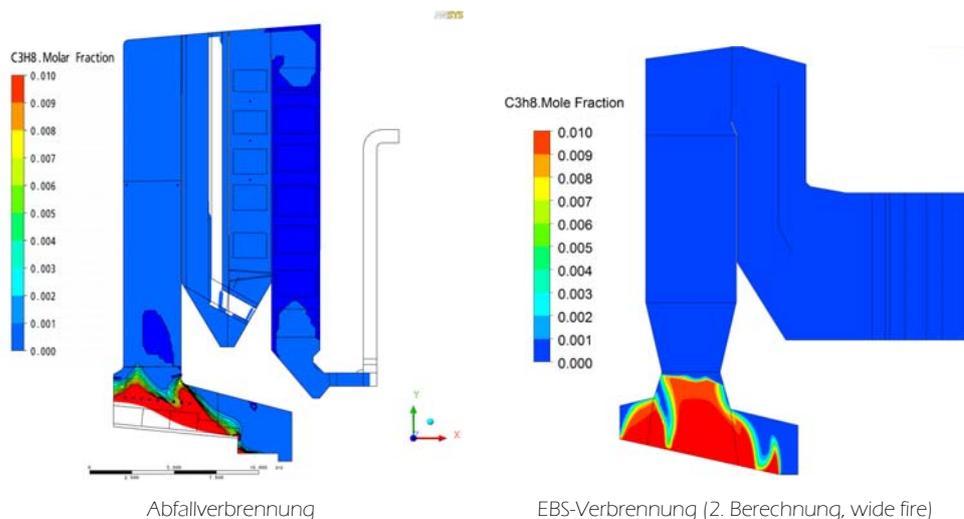
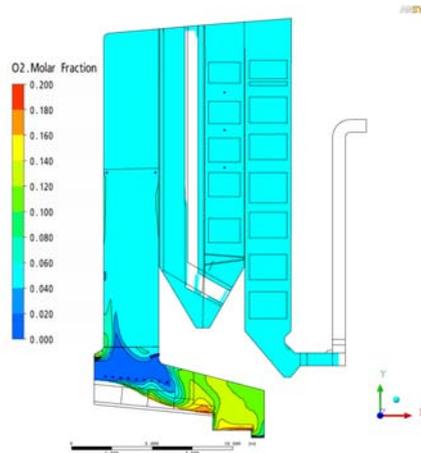
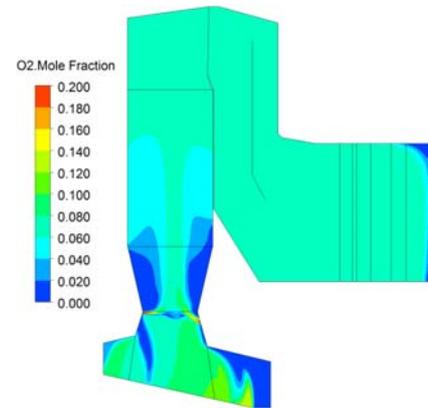


Abbildung 3-9-13:
O₂-Verteilung,
Mittenschnitt

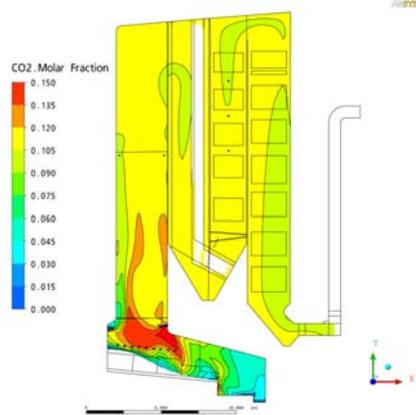


Abfallverbrennung

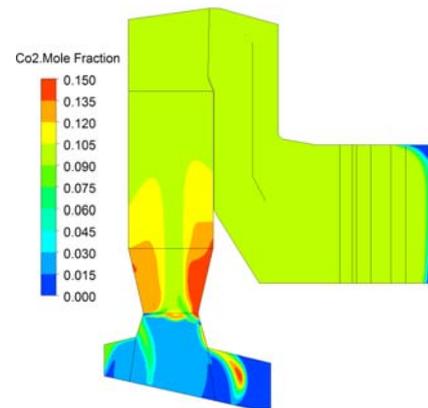


EBS-Verbrennung (2. Berechnung, Fall: wide fire)

Abbildung 3-9-14:
CO₂-Verteilung,
Mittenschnitt

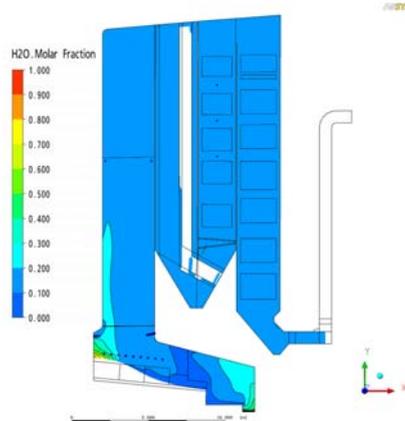


Abfallverbrennung

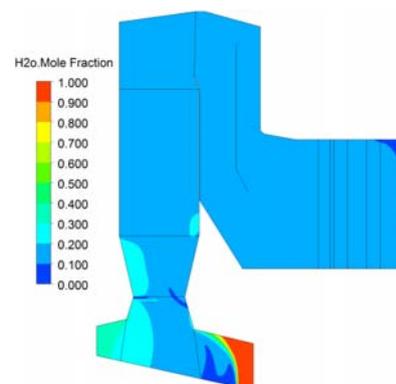


EBS-Verbrennung (2. Berechnung, Fall: wide fire)

Abbildung 3-9-15:
H₂O-Verteilung,
Mittenschnitt



Abfallverbrennung



EBS-Verbrennung (2. Berechnung, Fall: wide fire)

3.10 TB 10: Validierung der Modelle

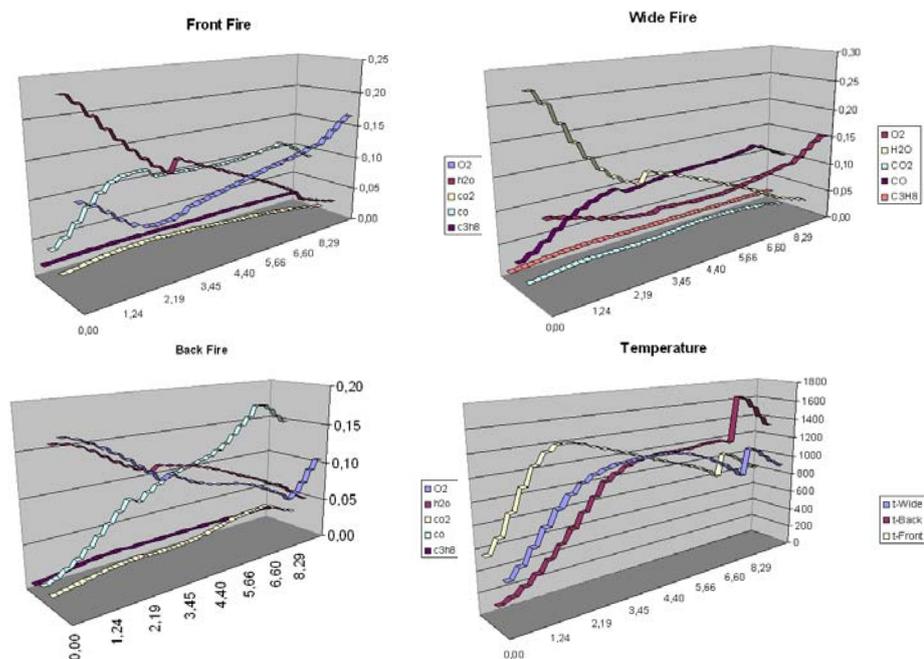
Im Dialog mit den Anlagenbetreibern sind die in TB 9 berechneten Simulationsergebnisse diskutiert und bewertet worden. Dies führte im Fall der EBS-Verbrennung zu erneuten Berechnungen. In der ersten Berechnung zeigte sich eine leichte Schiefelage der Hauptströmung im ersten Zug (s. o.). Es wurde nun nach Wegen gesucht, diese Schiefelage zu beseitigen.

Drei Parametrierungsvarianten wurden ausgetestet. Das Feuer wurde weiter in die Länge gezogen, weiter nach vorne und auf eine hintere Rostzone (mittig unter dem ersten Zug) positioniert. Die Ergebnisse hierzu sind teilweise in Abschnitt 3.9 dargestellt. Im folgenden Abschnitt sind die für die zweite Berechnung erstellten Rostsimulationsergebnisse dargestellt.

3.11 TB 11: Korrektur der Modelle

Wie bereits im vorangegangenen Abschnitt erläutert, wurde die Berechnung der EBS-Verbrennung angepasst, da die Lage des Feuers und die Strömungssituation im ersten Zug bei der Validierung nicht als zufriedenstellend erachtet wurde (Schiefelage im ersten Zug (Feuerraum)). Mit Hilfe des Rostmodells wurden Vorschub-Geschwindigkeit und Unterwindverteilung angepasst. Hierdurch ergab sich eine veränderte Spezies-Freisetzung aus dem Rostbett. Es wurden drei Modellfälle berücksichtigt, deren Ergebnisse im Folgenden dargestellt sind.

Abbildung 3-11-1:
Ergebnis Rostmodell, Spezies- und Temperaturverteilung über dem Rost (links oben: die Speziesverteilung über dem Rost in der Front-Fire Position, oben rechts: die Speziesverteilung in der Wide-Fire Position, unten links: die Spezies Profile über dem Rost, in der Back-Fire Position, unten rechts: Vergleich der Temperaturprofile



Die Ergebnisse der Rostmodellierung dienen wiederum als Eingangsgrößen für CFD-Berechnungen. Nachfolgend sind stellvertretend die Speziesverteilungen für Sauerstoff und C_3H_8 , sowie die Stromlinien der Geschwindigkeiten dargestellt. Die gesamten Berechnungsergebnisse befinden sich im Anhang.

Abbildung 3-11-2:
O₂-Verteilung der korrigierten Berechnungen

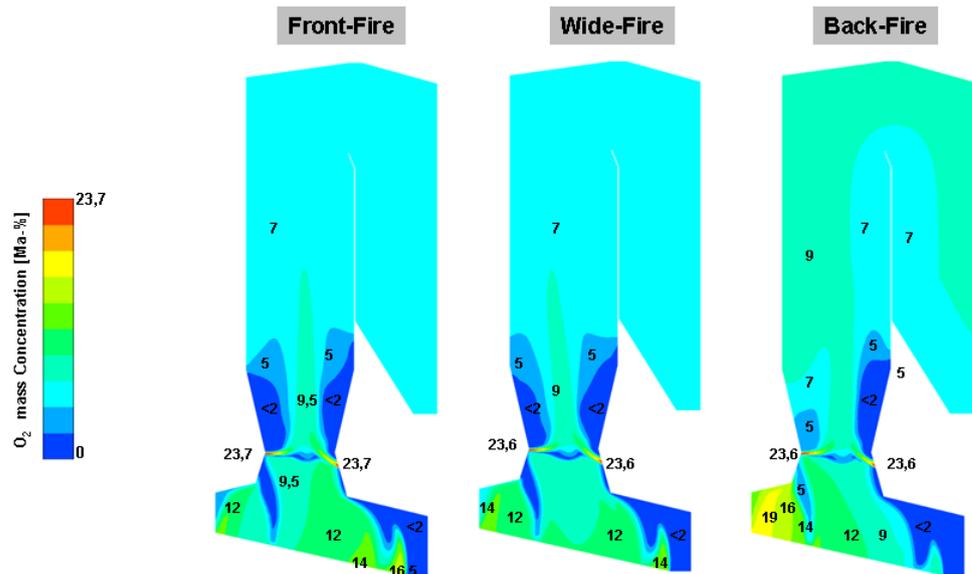
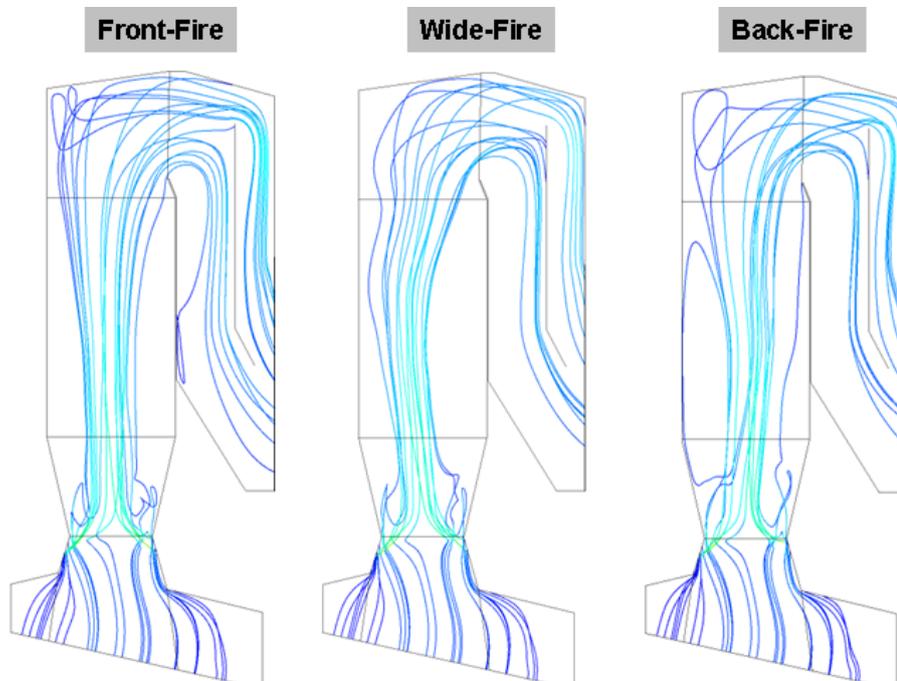


Abbildung 3-11-2 zeigt die O₂-Verteilung für den Symmetriequerschnitt der Brennkammer. Wie die Darstellung zeigt, ist die O₂-Konzentration der Back-Fire-Simulation ungleichmäßig verteilt. Die O₂-Konzentration in der Nähe der vorderen Wand ist höher als die an der Rückwand. Ganz anders ist es bei den zwei anderen Positionen. Die O₂-Verteilung ist homogener als bei der Back-Fire Position. Am Ende der Brennkammer, ist die Feuerlage in den beiden Fällen, der Front-Fire und Wide-Fire Positionen, ziemlich homogen. Beide haben fast einen konstanten Wert von 7% Ma-% der O₂-Konzentration.

Die Stromlinien sind in Abbildung 3-11-3 dargestellt und zeigen die Gasphase des Hauptstroms. Sie weisen darauf hin, dass die Strömung der Back-Fire Position mehr Tendenz in Richtung der Rückwand hat und es auch eine große tote Zone in der Nähe der vorderen Wand gibt. In der Wide-Fire Position neigt die Strömung zur vorderen Wand.

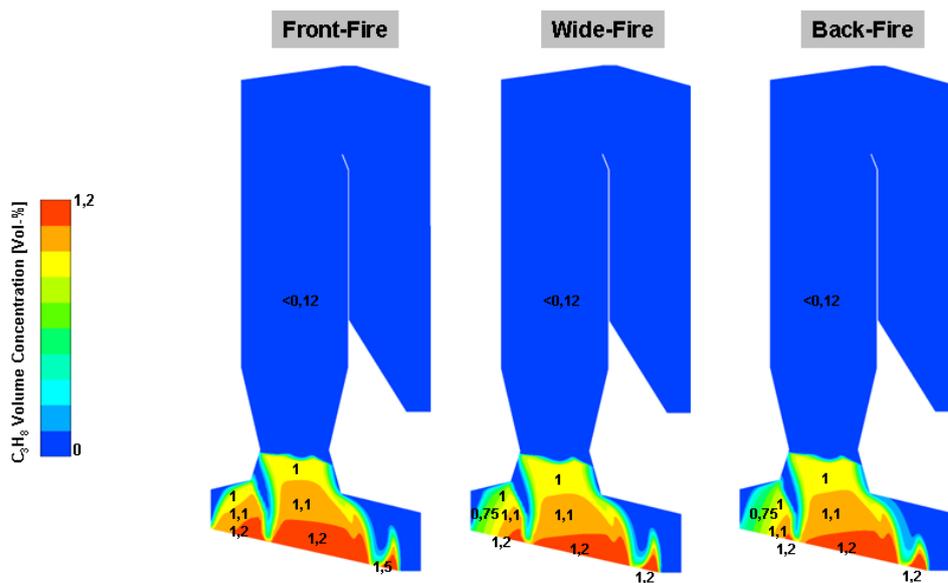
Die Front-Fire Position hat die beste Strömungsverteilung, d.h. das Gas strömt in der Mitte der Brennkammer und erzeugt keine toten Zonen. Allerdings zeigt die Wide-Fire-Simulation das homogenere Strömungsfeld am Ende des ersten Zuges auf

Abbildung 3-11-3:
Stromlinien darge-
stellt als Geschwin-
digkeiten



Die oben dargestellten Ergebnisse zeigen deutlich, dass die Front-Fire Position die beste Verteilung und Vermischung der Verbrennungsluft und der Abgase im Vergleich zu den anderen beiden Positionen hat. Sie zeigen auch, dass die Hauptströmung in der Mitte der Brennkammer bleibt und dadurch die Rost- und Schlacke-Probleme auf den Wänden der Brennkammer reduziert werden können.

Abbildung 3-11-4:
Abbildung 1:
Volumen C₃H₈
Verteilung für drei
verschiedene Feuer
Positionen (Symmetrie
Querschnitt)



3.12 Ableitung von feuerungstechnischen Vorgaben aus den Simulationsergebnissen

Aus den Simulationsergebnissen lassen sich zahlreiche Hinweise zur verbesserten Fahrweise ableiten. Es hat sich gezeigt, dass die Mischbrennstoffe Abfall und EBS ein zweistufiges Freisetzungsverhalten der Flüchtigen auf dem Rost aufweisen. Aufgrund der Ergebnisse der Technikumsversuche wird vermutet, dass dies auf das unterschiedliche Freisetzungsverhalten der Kunststoffe und der biogenen Fraktionen (Baumwolle, Organik, Papier) zurückzuführen ist. Da eine Positionierung der Hauptreaktionszone auf dem Rost unter dem Eintritt des ersten Zuges vorteilhaft ist, muss also der Anteil der jeweiligen Fraktion berücksichtigt werden. Enthält ein Brennstoff hohe Anteile biogenen Ursprungs, werden die Flüchtigen bei niedrigeren Temperaturen das Brennbett verlassen. Enthält ein Brennstoff einen hohen Kunststoffanteil (wie es bei vielen EBS der Fall ist), findet die Flüchtigenfreisetzung bei höheren Temperaturen statt. Bezogen auf den trockenen (!) Brennstoff reagieren Brennstoffe mit hohem biogenen Anteil also eher als kunststoffreiche Brennstoffe

Da biogene Bestandteile häufig einen hohen Feuchteanteil besitzen, wird der oben genannte Einfluss abgeschwächt, wenn nicht sogar umgekehrt. Die Trocknung des Brennstoffs verzögert die Verbrennung stark. Aus der Überlagerung der Effekte Trocknung und Flüchtigenfreisetzung ergibt sich ein komplexes Wechselwirkungssystem, welches mit Hilfe der Rostsimulation dargestellt werden kann. Hier bietet das vorgestellte Rostmodell die Möglichkeit, die für den Verbrennungsvorgang entscheidenden Parameter (z. B. die temperaturabhängige Flüchtigenzusammensetzung) zu berechnen, um Feuerraumsimulationen mit Strömungssimulationssoftware durchzuführen.

4 Zusammenfassung

In dem vorliegenden Bericht wurde ein wichtiges Anliegen für kleine und mittlere Unternehmen angegriffen. Durch die öffentliche Zugänglichkeit des weiter entwickelten Rostmodells und die genaue Beschreibung der speziellen Brennstoffanalytik versetzt es Brennstoffproduzenten und -abnehmer in die Lage, selbständig Untersuchungen vorzunehmen, bzw. auf Grundlage der ermittelten Messergebnisse beauftragte Untersuchungen zu beurteilen.

Zunächst wurden, um eine breite Datenbasis zu schaffen, reine Brennstofffraktionen, wie Papier, Zellulose, Lignin, Kunststoffpolymere usw. hinsichtlich ihrer elementaren Zusammensetzung, ihres Heiz- / Brennwertes und ihrer Immediatanalyse hin untersucht. Außerdem wurde das speziell entwickelte FINGERPRINT-Verfahren angewendet, um temperaturabhängige Daten zur Flüchtigenzusammensetzung zu gewinnen. Hier liegt nun ein Stoffdatenkatalog vor, der bei Kenntnis der eigenen Abfallzusammensetzung helfen kann, das Verbrennungsverhalten des Abfalls, des Ersatzbrennstoffes (EBS) oder der Biomasse zu beurteilen.

Anhand der erstellten Mischbrennstoffe und der realen Abfall- und EBS-Brennstoffe konnte gezeigt werden, dass eine bloße Betrachtung der Einzelfraktionen nicht ausreicht, sondern die Untersuchung der gemischten Fraktionen zu empfehlen ist. Dass hierbei aber nicht unbedingt der reale Brennstoff, sondern ein unter Fachkenntnis erzeugtes synthetisches Gemisch genutzt werden kann, ist vor allem für Brennstoffe wie z. B. Krankenhausabfälle von Bedeutung. Bei diesen Brennstoffen ist aus gesundheitlichen und gesetzlichen Gründen eine Probenahme und Charakterisierung nicht oder nur schwer möglich. Die Erstellung eines ähnlichen synthetischen Brennstoffes würde hier Abhilfe schaffen.

Für die im Labor ermittelten Brennstoffdaten konnte ein Berechnungsverfahren entwickelt werden, welches die Überführung von elementaren Verteilungsdaten (C, H, O, N) in Speziesverteilungen (CO, CO₂, C₃H₈, H₂ usw.) erlaubt. Hierbei wird auf einen Minimierungsansatz nach Gibbs zurückgegriffen. Die so ermittelten Speziesverteilungen konnten in das Rostmodell integriert werden, so dass dieses nun unter Berücksichtigung der Flüchtigenfreisetzung in Abhängigkeit von der Temperatur und vom eingesetzten Brennstoff das Verbrennungsverhalten auf dem Rost berechnen kann.

Da die im Labor eingesetzten Mengen der Heterogenität und den schwankenden Zusammensetzungen der betrachteten Brennstoffe nicht gerecht werden, wurde eine Technikumsanlage entwickelt und errichtet, die einen Vergleich zwischen Labor- und Technikumsmaßstab erlaubt (Skalierungsfaktor 1000), die die zeitliche Freisetzung der Flüchtigen erfassen kann und die die Randparameter realer Verbrennungs- und Pyrolysebedingungen annehmen kann. Somit können nun im

Technikum EBS- und Abfallproben im größeren Umfang untersucht werden. Im Gegensatz zu bereits bestehenden, vergleichbaren Einrichtungen (so genannte »Batch-Reaktoren«), bietet die errichtete Technikumsanlage die Möglichkeit, den Verbrennungsteilschritt Pyrolyse komplett von den übrigen Verbrennungsteilschritten zu entkoppeln. Hierdurch können Überlagerungen der Teilschritte vermieden werden. Bis jetzt war es z. B. im Technikumsmaßstab nicht möglich, eine definierte Pyrolysetemperatur einzustellen, um das Entgasungsverhalten bei genau dieser Temperatur zu betrachten. Lediglich der gesamte Verbrennungsprozess konnte im Technikumsmaßstab untersucht werden.

Mit der jetzt bestehenden Technikumsanlage wurden die reinen Brennstofffraktionen und Mischbrennstoffe untersucht. Zum einen konnte hierdurch das Rostmodell validiert werden. Zum anderen konnte im Vergleich der Versuchsergebnisse gezeigt werden, dass biogene Bestandteile frühzeitiger entgasen als z. B. polymere Kunststoffe. Da genau diese beiden Fraktionen in EBS- und Abfallfraktionen in unterschiedlichen Konzentrationen auftreten, kann hier gut das divergierende Verbrennungsverhalten dargestellt werden.

Unter Zuhilfenahme des Rostmodells und der im Labor und Technikum ermittelten Brennstoffdaten konnte eine Abfallverbrennung und ein EBS-Kraftwerk simuliert werden. Die Ergebnisse des Rostmodells und der Strömungssimulationen konnten die Gegebenheiten der bestehenden Anlagen gut wiedergeben. Somit besteht nun ein allen zugängliches Werkzeug zur verbesserten Simulation von Rostfeuerungsanlagen unter Berücksichtigung verschiedenster Brennstoffparameter. Die Bandbreite der Messgrößen konnte dabei um wichtige Größen erweitert werden. Nun ist es möglich, nicht nur die klassischen Parameter Elementar- und Immediatanalyse einfließen zu lassen. Auch das temperaturabhängige Flüchtigenfreisetzungsverhalten, welches sich z. B. für die Fraktionen Biomasse und Kunststoffe stark unterscheidet, kann berücksichtigt werden.

Die in diesem Forschungsvorhaben ermittelten Ergebnisse und präsentierten Verfahren führen dazu, dass Ersatzbrennstoffe, Abfälle und Biomassen effizienter verbrannt werden können. Außerdem werden Brennstoffaufbereitern, Anlagenbauern und Anlagenbetreibern neue Werkzeuge an die Hand gegeben, um den Einfluss des eingesetzten Brennstoffes auf die Verbrennung besser zu beurteilen.

Das Forschungsvorhaben wurde aus Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) über die Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen (AiF) gefördert.

5 Wirtschaftliche Bedeutung des Forschungsthemas für kleine und mittlere Unternehmen (kmU)

NUTZUNG DER FORSCHUNGSERGEBNISSE

Die Forschungsergebnisse stellen eine wichtige Grundlage für weitere Arbeiten in den Fachgebieten Reststoffverwertung, Abfallwirtschaft, Aufbereitungstechnik, Brennstofftechnik usw. dar und können vor allem in den Wirtschaftszweigen der Grundstoffherstellung (GSH – Zement, Grobkeramik, Ziegel, Stahl usw.), Landwirtschaft (biogene Brennstoffe) sowie der Energiewirtschaft bzw. Kraftwerksindustrie angewendet werden.

BEITRAG ZUR STEIGERUNG DER LEISTUNGS- UND WETTBEWERBSFÄHIGKEIT DER KMU

Ausgehend von den hier ermittelten Methoden zur Charakterisierung von Brennstoffen und Modellierung / Simulation von Verbrennungsanlagen ist es möglich, besser als bisher die Eignung eines Brennstoffs für einen bestimmten Anlagentyp zu beurteilen, bzw. die Regelung der Anlage abzustimmen. Die Wettbewerbsfähigkeit von kleinen und mittleren Unternehmen, welche Brennstoffe aufbereiten, Verbrennungsanlagen betreiben oder Regelungstechnik hierfür bereitstellen, wird so gestärkt.

Die freie Verfügbarkeit des Rostmodells (Download auf www.gks-sw.de) führt zu einer guten Verbreitung der wissenschaftlichen Ergebnisse und zu einer weitgefächerten Stärkung der Branche.

6 Umsetzung der Forschungsergebnisse

Über die Ergebnisse des Projektes wurden in einem Gremium von Fachleuten (projektbegleitender Ausschuss) aus den Bereichen der der Abfallbehandlung, des Anlagenbaus, des Anlagenbetriebs (Abfallverbrennung, EBS-Kraftwerk) und der Kraftwerksindustrie berichtet.

Weiterhin wurden die Ergebnisse in Veröffentlichungen und anlässlich von Fachtagungen präsentiert und veröffentlicht:

- Julia Behling, Philipp Danz, Martin Weghaus, Ragnar Warnecke, Ali Al-Zuhairi, Klaus Görner: »Verbesserte Feuerraummodellierung durch empirische Untersuchungen zur Flüchtigensfreisetzung aus Abfallbrennstoffen«. 25. Deutscher Flammentag - Verbrennung und Feuerung. 14.-15. September 2011, Karlsruhe.
- M.Sc. A. Al-Zuhairi, Dr.-Ing. P. Gillmann, Prof. Dr.-Ing. habil. K. Görner, Dipl.-Ing. P. Danz, Dipl.-Ing. J. Behling, Dipl.-Ing. M. Weghaus, Dr.-Ing. T. Klasen : »CFD Simulation of a full scale RDF incinerator«. 25. Deutscher Flammentag - Verbrennung und Feuerung. 14-15. September 2011, Karlsruhe.
- Julia Behling, Philipp Danz, Dr. Thomas Marzi: »Untersuchungen von Biomassen im 2-stufigen Pyrolyseofen«. Fachtagung: UMSICHT zur Sachel - Ersatzbrennstoffe – Know-How für den erfolgreichen Einsatz von EBS. 10. Juni 2010, Oberhausen.
- Philipp Danz, Dr. Thomas Marzi, Asja Mrotzek: »Modellierung des Zündverhaltens einzelner, flächiger Brennstoffpartikel in einem Temperaturfeld«. 24. Deutscher Flammentag - Verbrennung und Feuerung. 16-17. September 2009, Bochum.

Die Mitarbeit von Partnern des Projekt begleitenden Ausschuss und der Forschungspartner in internationalen Ausschüssen (z. B. VGB-Arbeitskreis Biomasse) gewährleistet eine unmittelbare Übertragung der Ergebnisse des Projektes in die betreffenden Gremien. Die öffentliche Zugänglichkeit des Rostmodells CombAte ist durch die Bereitstellung auf den Internetseiten der GKS Schweinfurt GmbH gewährleistet (www.gks-sw.de). Hierdurch kann jeder interessierte Anwender von den ermittelten Forschungsergebnissen direkt profitieren.

Die Weiterverwendung der Technikumsanlage und des Laborverfahrens ist durch mehrere neue Forschungsvorhaben gewährleistet (z. B. Energie.NRW: »Ersatzbrennstoffe der Zukunft«).

7 Bezug zum Verwendungsnachweis

Die zur Verfügung gestellten Mittel wurden hauptsächlich als Personalkosten, Reisekosten (Veröffentlichungen, Projekttreffen) und Sachmittel (Umbau Ofensystem, Beschaffung Gasanalytik) ausgegeben (siehe zahlenmäßiger Nachweis der Forschungsstellen und unten stehende Tabelle).

Lfd. Nr.	Bezeichnung des Gegenstandes	Lieferfirma	Ausgaben für die Beschaffung	Tag des Zugangs	Inventarisierungsnummer
1	Klapprohrfen	CARBOLITE	4.570,38	13.03.2009	A842200/2008/100200
2	Gasanalytik	EMERSON	33.000,00	19.08.2009	A840000/2009/100400
3	Gaszuflusscontroller	WESTPHAL	3.347,00	15.09.2009	A192000/2009/108200
4	Temperaturbegrenzer und Implementierung in einen Schaltschrank	HTM Reetz	5.235,00	19.10.2009	A267000/2009/101200

Das Personal wurde planmäßig (beide Forschungsstellen) eingesetzt. Die Arbeiten waren notwendig und angemessen.

8 Literaturverzeichnis

- [Beer; 2001] Gerd Beer: »Polyethylen«. **Kunststoffe 10/2001, Seite 248-253. Carl Hanser Verlag. München, 2001.**
- [Boie; 1953] Prof. Dr.-Ing. Werner Boie: »Vom Brennstoff zum Rauchgas«. B.G. Teubner Verlagsgesellschaft, 1957, Leipzig.
- [Channiwala; 2002] S.A. Channiwala, P.P. Parikh: »A unified correlation for estimating HHV of solid, liquid and gaseous fuels«. *Fuel* 81, 2002, S. 1051-1063.
- [Danz; 2008] Philipp Danz, Asja Mrotzek, Dr. Thomas Marzi: »Beprobung großer Siedlungsabfallmengen unter wirtschaftlichen Gesichtspunkten zur Bestimmung der Feuchte und des Heizwerts«. *Müll und Abfall* 02/2008. Berlin, 2008.
- [Marb; 2003] C. Marb, I. Przybilla, F. Neumeyer, J. Fripan: »Zusammensetzung und Schadstoffgehalt von Siedlungsabfällen - Abschlussbericht.«. Bayerisches Staatsministerium für Landesentwicklung und Umweltfragen. Augsburg, 2003.
- [Marzi; 2005] Dr. Thomas Marzi, Dr. Kai Keldenich, Prof. Dr.-Ing. habil. Klaus Görner: »Energetische Verwertung von Ersatzbrennstoffen - Entwicklung einer Methodik zur Erfassung der feuerungstechnischen Brennstoffeigenschaften«. *Müll und Abfall*, Mai 2005, S. 572-579.
- [Rotter; 2003] Dr.-Ing. Susanne Rotter, Dr.-Ing Thomas Kost, Prof. Dr. Bernd Bilitewski, Dr. Olaf Kock, Hendrick Seeger, Prof. Dr.-Ing. Arndt Urban: »Abfallanalysen - Anwendung, Probleme und neue Wege für die Praxis«. *Müll und Abfall*, 2003, S. 438-454.
- [Warnecke; 2011] Dr. Ragnar Warnecke, Philipp Danz, Volker Müller, Martin Weghaus, Martin Zwiellehner: »Validierung des Feuerungsprogramms "CombAte" zur Prognose des Feuerungsverhaltens«. VDI-Feuerung / Kessel-Tagung 2011. 06.07-08.07 2011 in Kassel.