



KIT SCIENTIFIC REPORTS 7646

Impulse für die Zukunft der Energie

**Wissenschaftliche Beiträge des KIT
zur 2. Jahrestagung des KIT-Zentrums Energie**

Doktorandensymposium, 13.06.2013

Dr. Wolfgang Breh
Dominique Sauer (Hrsg.)

Dr. Wolfgang Breh, Dominique Sauer (Hrsg.)

Impulse für die Zukunft der Energie

**Wissenschaftliche Beiträge des KIT zur 2. Jahrestagung
des KIT-Zentrums Energie**

Doktorandensymposium, 13.06.2013

Karlsruhe Institute of Technology
KIT SCIENTIFIC REPORTS 7646

Chancen der Energiewende

**Wissenschaftliche Beiträge des KIT
zur 2. Jahrestagung des KIT-Zentrums Energie**

Doktorandensymposium, 13.06.2013

by
Dr. Wolfgang Breh
Dominique Sauer (Hrsg.)

Impressum



Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
KIT Scientific Publishing
Straße am Forum 2
D-76131 Karlsruhe

KIT Scientific Publishing is a registered trademark of Karlsruhe
Institute of Technology. Reprint using the book cover is not allowed.

www.ksp.kit.edu



*This document – excluding the cover – is licensed under the
Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 DE License
(CC BY-SA 3.0 DE): <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/de/>*



*The cover page is licensed under the Creative Commons
Attribution-No Derivatives 3.0 DE License (CC BY-ND 3.0 DE):
<http://creativecommons.org/licenses/by-nd/3.0/de/>*

Print on Demand 2013

ISSN 1869-9669

ISBN 978-3-7315-0097-1

Vorwort

Hoch qualifizierter wissenschaftlicher Nachwuchs ist ein entscheidender Faktor im weltweiten Wettbewerb der Technologie- und Wissensstandorte des 21. Jahrhunderts. Dies gilt gerade für die Forschungsfelder mit breiter Querschnittswirkung und hoher gesellschaftlicher Bedeutung, wie die Energieforschung. Eine sichere, bezahlbare und umweltverträgliche Energieversorgung zu gewährleisten, gehört zu den großen Aufgaben der Gegenwart und Zukunft. Dabei hat sich Deutschland mit seinen Vorgaben für die Energiewende besonders ehrgeizige Ziele gesetzt. Diese bringen große Herausforderungen, aber auch enorme Chancen mit sich. Daher benötigen Forschung und Industrie engagierte Nachwuchswissenschaftlerinnen und -wissenschaftler, die mit ihrer Qualifikation und ihren Ideen wichtige Innovationen vorantreiben.

Das Karlsruher Institut für Technologie (KIT) fördert den wissenschaftlichen Nachwuchs in einem exzellenten Umfeld, das universitäre Forschung, Großforschung und Innovation verbindet. Am KIT-Zentrum Energie und der KIT School of Energy finden junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler verschiedener Fachrichtungen spannende Themen aus der Energieforschung und eine hervorragende fachliche Betreuung. Alle zwei Jahre richtet das KIT-Zentrum Energie seine Jahrestagung als Doktorandensymposium aus, bei dem Promovierende ihre Projekte und aktuellen Ergebnisse präsentieren. So war auch die Jahrestagung 2013 am 13. Juni unter dem Titel „Impulse für die Zukunft der Energie“ dem wissenschaftlichen Nachwuchs gewidmet.

Zahlreiche Doktorandinnen und Doktoranden stellten ihre Arbeiten in einem Vortrag oder auf einem Poster vor. Die Beiträge stammten aus allen sieben Topics, die am KIT-Zentrum Energie bearbeitet werden. Energieumwandlung, Erneuerbare Energien, Energiespeicherung und -verteilung, Effiziente Energienutzung, Fusionstechnologie, Kernenergie und Sicherheit sowie Energiesystemanalyse. Sie zeigten das breite Spektrum der Forschung und das hohe Niveau des wissenschaftlichen Nachwuchses am KIT. Zwischen den Beiträgen gab es Raum für Fragen und Rückmeldungen und Gelegenheit zur Vernetzung.

Der vorliegende Tagungsband dokumentiert die Beiträge zum Doktorandensymposium. Den Teilnehmern und Besuchern sowie allen, die zum Erfolg dieser Tagung beigetragen haben, möchte ich an dieser Stelle noch einmal ganz herzlich danken.

Karlsruhe,
im August 2013

Wolfgang Breh
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Inhalt

Impulse für die Zukunft der Energie

Christian Kraus, Henning Bockhorn

Verbrennungsinstabilitäten in Brennkammern mit Einzel- und Mehrfachbrenneranordnung 1

Michael Plevan

Hydrogen Production via Thermal Decomposition of Methane 9

Benedict Holbein, Dr. Joerg Isele

Advanced measuring systems for the efficient use of geothermal energy as baseload-supplier 15

Diego López Barreiro, Giuseppe Terranella, Ursel Hornung, Andrea Kruse

Hydrothermal liquefaction of microalgae for biofuel production 21

Carola Meller, Albert Genter, Thomas Kohl

A Method to Map Clay Zones in Crystalline Geothermal Reservoirs 27

Yuantao Cui, C. Ziebert, M. Rohde

Feststoffelektrolyte für Hochtemperatur-Lithiumionenbatterien 33

Felix Kammerer, Johannes Kolb, Mario Gommeringer, Michael Braun

Modularer Multilevel Matrix Umrichter für flexible und hocheffiziente Generatorsysteme 39

Johannes Kolb, Felix Kammerer, Mario Gommeringer, Michael Braun

Innovative Konzepte und Anwendungen von Modulen Multilevelumrichtern in zukünftigen Energiesystemen 45

Matthias J. Schmid, Katrin R. Bickel, Petr Novák, Rolf Schuster

Mikrokalorimetrische Untersuchungen zur elektrochemischen Lithiumbulkabscheidung 51

<i>Martin Bublinski, Hans Leibold, Helmut Seifert</i> Kontinuierliche Entfernung von CO ₂ aus Synthesegasen unter Hochtemperatur und Hochdruckbedingungen.....	55
<i>Evelise Leite Didoné, Andreas Wagner</i> Sensitivity analysis of semi-transparent PV window for the prediction of the total energy consumption	61
<i>Hendro Wicaksono</i> An Integrated Method for ICT Supported Energy Efficiency Improvement in Manufacturing.....	67
<i>Hendro Wicaksono, Preslava Dobрева</i> Intelligent knowledge generation for energy management in buildings.....	73
<i>Christoph Blunck, Frank Becker, Manfred Urban</i> Simulation der ⁹⁰ Y Handexposition des Personals in der Nuklearmedizin	79
<i>Sonja Babrowski, Patrick Jochem, Wolf Fichtner</i> Verteilung und Bedarf elektrischer Speicher im deutschen Energiesystem	85
<i>Susanne Schmidt, Tobias Jäger, Ute Karl</i> Analyse des Einflusses umweltpolitischer Instrumente auf den deutschen Elektrizitätsmarkt	91
<i>Robbin Bhagwan, Nikolaos Zarzalis, Peter Habisreuther, Fabio Turrini</i> An Experimental Comparison of the Combustion Characteristics of Standard Jet A-1 and Synthetic Jet Fuels	97
<i>F. Zhang, N. Sebbar, I. Auzmendi-Murua, P. Habisreuther, L. Zhang, H. Bockhorn</i> Large Eddy Simulation of DTBP Pool Fires	103

Verbrennungsinstabilitäten in Brennkammern mit Einzel- und Mehrfachbrenneranordnung

Herausforderung im Zuge der Energiewende

Christian Kraus, Henning Bockhorn

*Karlsruher Institut für Technologie, Engler-Bunte-Institut Bereich Verbrennungstechnik,
76131 Karlsruhe, Deutschland, E-mail: christian.kraus@kit.edu, henning.bockhorn@kit.edu
Telefon: +49(0)721/608-44233/45270*

Kurzfassung

Der steigende Anteil der erneuerbaren Energien an der Energieerzeugung führt zu neuen Herausforderungen für moderne Gaskraftwerke und Gasturbinen bezüglich Flexibilität beim Start-Up und Betriebsbereich. In technischen Brennkammern können jedoch bei bestimmten Betriebsbedingungen Verbrennungsinstabilitäten auftreten, die mit erhöhten Druckschwankungen verbunden sind und somit zu Einschränkungen des Betriebsbereichs führen, in der z.B. eine Gasturbine sicher betrieben werden kann. Um die komplexen Entstehungsmechanismen von Verbrennungsinstabilitäten zu erforschen und Zusammenhänge zu erschließen, die ihre Vermeidung während des Designprozesses möglich machen, wird am Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik ein modularer Erdgasbrenner untersucht. Im Beitrag werden Ergebnisse von Untersuchungen präsentiert und diskutiert, die bei ausgewählten Betriebspunkten und des Brenners in Einzel- und Mehrfachbrenneranordnung durchgeführt wurden.

Stichworte

Energieumwandlung, Verbrennung, Verbrennungsinstabilitäten, Druckschwingungen, Gasturbine, Mehrfachbrenner

1 Einleitung

Mit dem steigenden Anteil der erneuerbaren Energien an der Energieerzeugung nehmen auch die Herausforderungen für konventionelle Kraftwerke zu. Windstrom ist beispielsweise nicht immer im gleichen Maße verfügbar und somit ist die Einspeisung von Windstrom in das Stromnetz starken Schwankungen unterworfen (Abb. 1) [1]. Für moderne Gaskraftwerke und Gasturbinen resultieren daraus größere Anforderungen an die Flexibilität bezüglich Start-Up, Regelbarkeit in einem breiten Betriebsbereich und alternativen Brennstoffen. Einschränkungen hierfür können

sich jedoch durch Verbrennungsinstabilitäten ergeben, die bei bestimmten Betriebsbedingungen in technischen Brennkammern auftreten können und mit hohen Druckschwingungen verbunden sind. Als Folgen sind, neben einer erhöhten Anlagenbelastung und dadurch verringerter Lebensdauer, auch erhebliche Anlagenschäden möglich. In Abb. 2 ist als Beispiel ein Schaden an einem Schutzblech in einer Brennkammer zu sehen, der aus dem Auftreten von Verbrennungsinstabilitäten in Verbindungen mit hohen Oszillationen des Druckes in der Brennkammer resultierte [2].

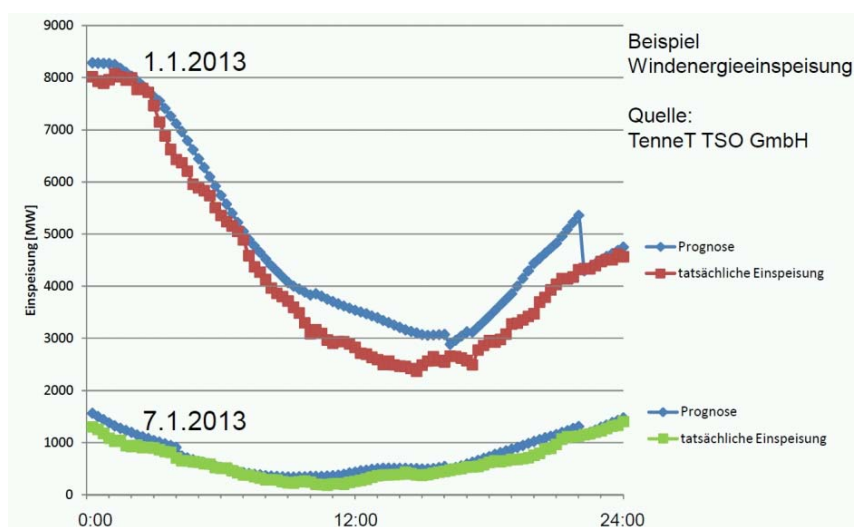


Abb. 1: Tagesverlauf der Windenergieeinspeisung an zwei verschiedenen Tagen

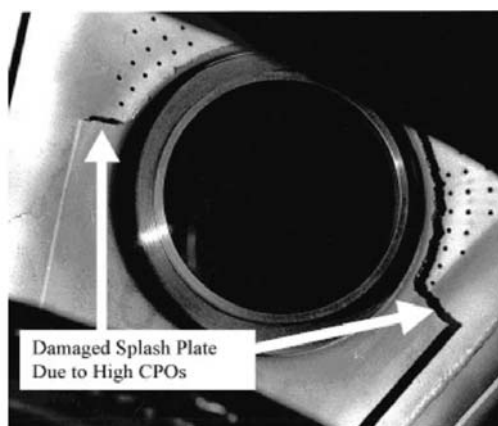


Abb. 2: Schaden an einem Schutzblech in einer Brennkammer einer Gasturbine der Firma Solar Turbines, der durch Verbrennungsinstabilitäten verursacht wurde

Verbrennungsinstabilitäten entstehen im Allgemeinen durch eine Rückkopplung zwischen den Schwankungen der Wärmefreisetzung der Flamme und des Brennkammerdrucks. Diese Rückkopplung kann z.B. durch Schwankungen des Volumenstroms der Verbrennungsluft oder des Brennstoffstroms sowie durch mit der Flamme wechselwirkende Wirbelstrukturen in der Brennkammerströmung entstehen. Voraussetzung für verstärkte Druckoszillationen ist, dass die Schwankungen des Brennkammerdruckes p' und der Wärmefreisetzung q' ausreichend in Phase ($< 90^\circ$) sind. Dies kann mathematisch über das sog. Rayleigh-Kriterium ausgedrückt werden:

$$\int_T p' q' dt > 0, \quad [1]$$

Weitere Informationen darüber sind u. a. in [4] und [5] zu finden. Die genaue Vorhersage von Verbrennungsinstabilitäten während der Designphase eines Brennersystems ist aufgrund der Komplexität ihrer Ursachen schwierig. Die Beseitigung im Falle ihres Auftretens nach Inbetriebnahme eines Brennersystems ist meist mit hohem Aufwand verbunden. Weitere Forschung ist notwendig, um ein besseres Verständnis von Verbrennungsinstabilitäten und ihren Entstehungsmechanismen zu erlangen. Zu diesem Zweck wird am Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik ein modularer Erdgasbrenner untersucht. Dieser Brenner kann in Einzelbrenner (EB) und in Mehrfachbrenner (MB)-Anordnung betrieben werden um zusätzlich den Einfluss der MB-Anordnung auf die auftretenden Verbrennungsinstabilitäten zu untersuchen.

2 Konzept des Versuchsbrenners und des experimentellen Aufbaus

Der Versuchsbrenner (Abb. 3) wird unter atmosphärischen Bedingungen betrieben. Zur Flammenstabilisierung wird eine Doppeldralldüse eingesetzt. Der Brennstoff wird radial durch 60 Bohrungen der Brennstoff in den Luftstrom des inneren Drallerzeugers eingedüst. Die Luftzuführungen der beiden Drallerzeuger sind separat ausgeführt. Im MB-Aufbau sind die Luftversorgungen und die Brennkammern der einzelnen Brenner verbunden.

Über Mikrofonsonden werden durch Druckfeldmikrofone von Bruel & Kjaer die Druckschwankungen in der Brennkammer und im Plenum des Brenners gemessen. Die Mikrofonsonde der Brennkammer wird mit einem kleinen Stickstoffstrom durchspült, um das Eindringen von Abgasen in die Mikrofonsonde zu vermeiden. Die Brennkammer des Brenners ist mit Quarzglasscheiben ausgestattet, um den Einsatz von optischen Messtechniken zu ermöglichen. Die Intensität der Chemilumineszenz des OH^* -Radikals, die als Maß für die Wärmefreisetzung der Flamme verwendet werden kann, kann dadurch mittels einer intensivierten Hochgeschwindigkeitskamera aufgenommen werden.

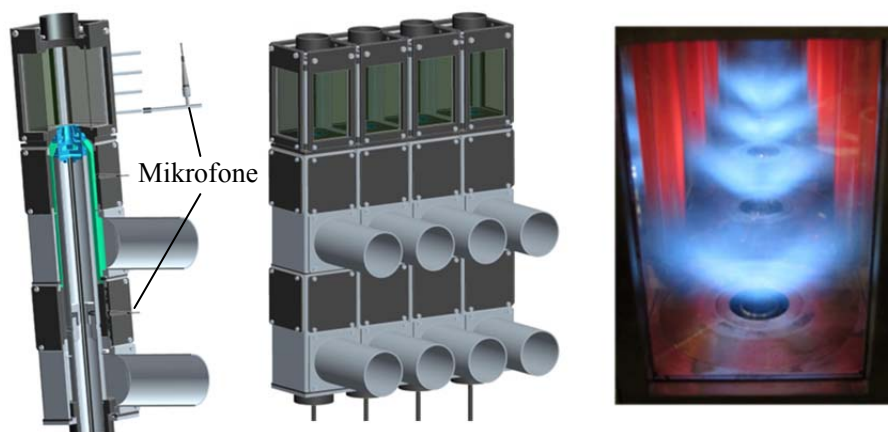


Abb. 3: Versuchsburner in Einzel- und Mehrfachburneranordnung;

3 Numerisches Setup

Für die numerische Simulation der reaktiven Brennerströmung wurde mit der Software IcemCFD von ANSYS ein Berechnungsgitter mit 6,7 Millionen hexaedrischen Volumenelementen erstellt. Die Simulation wurde mit einem eigens in OpenFOAM implementierten Solver durchgeführt. Die Berechnung der turbulenten Strömung erfolgt mittels Large-Eddy-Simulation (LES) und dem Smagorinsky-Feinstrukturmodell. Zur Modellierung der turbulenten Flamme wird das Unified-Turbulent-Flame-Speed-Closure (UTFC) – Modell verwendet. Dessen Grundkonzept beruht auf der Annahme, dass die Flamme über ein Kollektiv aus vorgemischten Flammen abgebildet werden kann. Das Modell ist im Detail in [5] erklärt. Als Brennstoff wurde CH₄ verwendet.

4 Ergebnisse

In Abb. 4 sind die experimentellen Ergebnisse der Messungen von p' und der OH*-Intensität der Betriebspunkte (BP) im EB-Setup bei einer thermischen Leistung von $P_{th} = 25$ kW bzw. 30 kW und im MB-Setup bei $P_{th} = 100$ kW bzw. 120 kW dargestellt. Der Volumenstrom der Luft ist bei den EB- und MB-Betriebspunkten jeweils konstant. Bei der Erhöhung von P_{th} und Verminderung der Luftzahl λ wurde demzufolge nur der Brennstoffmassenstrom vergrößert. Es ist zu erkennen, dass Luftzahl und Brennersetup einen signifikanten Einfluss auf die Frequenz und Amplitude der Druckschwingungen in der Brennkammer haben. Der BP des EB bei 25 kW und $\lambda = 1,42$ zeigt erhöhte Druckoszillationen bei 410 Hz mit einer Amplitude von 380 Pa. Die Erhöhung von P_{th} auf 30 kW und der damit verbundenen kleineren Luftzahl $\lambda = 1,17$ führt zu einer Änderung der dominanten Frequenz der Druckoszillationen auf 750 Hz und einer höheren Amplitude von 780 Pa. Bei den BP des MB zeigt sich bei Zunahme von $P_{th} = 100$ kW auf $P_{th} = 120$ kW nur eine

geringe Veränderung der dominanten Frequenz von 393 Hz auf 410 Hz, jedoch fällt die Erhöhung der Amplitude im Vergleich zum EB erheblich höher aus (48 Pa zu 900 Pa). Zudem die signifikant kleineren Druckschwankungen des MB bei 100 kW im Vergleich zu denen des EB bei 25 kW auffällig.

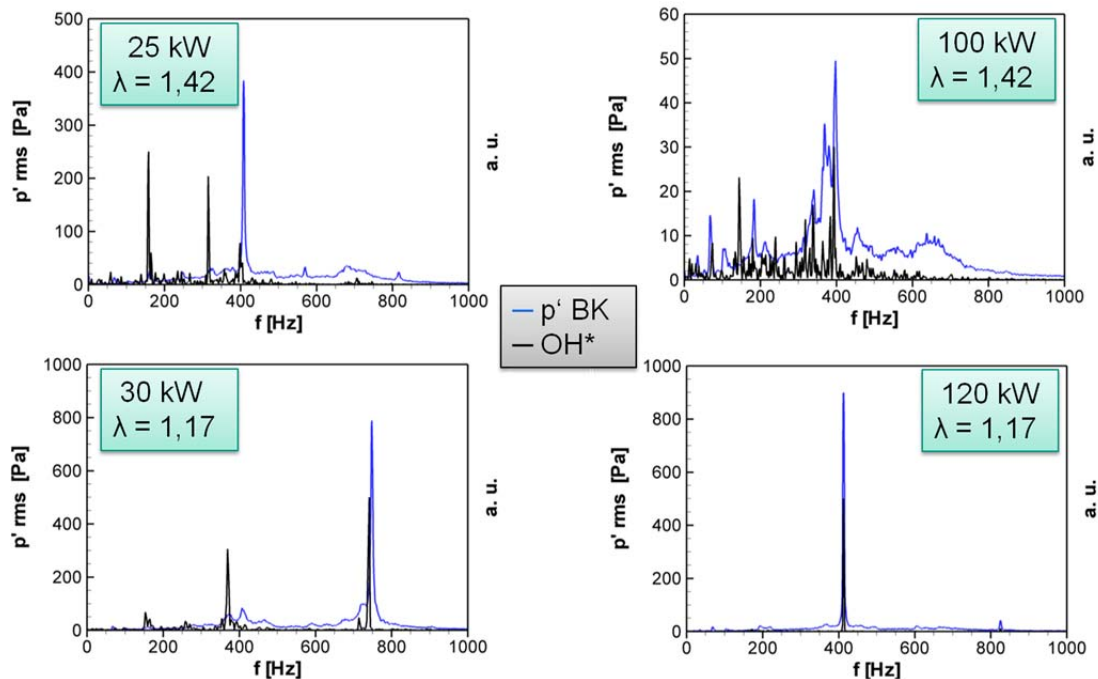


Abb. 4: Spektren der Druckoszillationen bei den BP der EB (links) und des MB (rechts)

Die Analysen des OH^* -Chemilumineszenz-Signals zeigen die gleichen dominanten Moden wie die Druckoszillationen in der Brennkammer. Dies legt nahe, dass eine thermoakustische Kopplung der Wärmefreisetzung der Flamme mit den Druckoszillationen in der Brennkammer vorliegt. Mittels einer Phasenmittelung der OH^* -Chemilumineszenz-Aufnahme ist es möglich die dominante Mode der Schwingung der Flamme sichtbar zu machen. In Abb. 5 ist beispielhaft für die BP $P_{th} = 30$ kW (EB) und $P_{th} = 120$ kW (MB) ein Oszillationszyklus der Flammenschwingung dargestellt. In beiden Fällen ist ein starkes Pulsieren der Flamme zu erkennen.

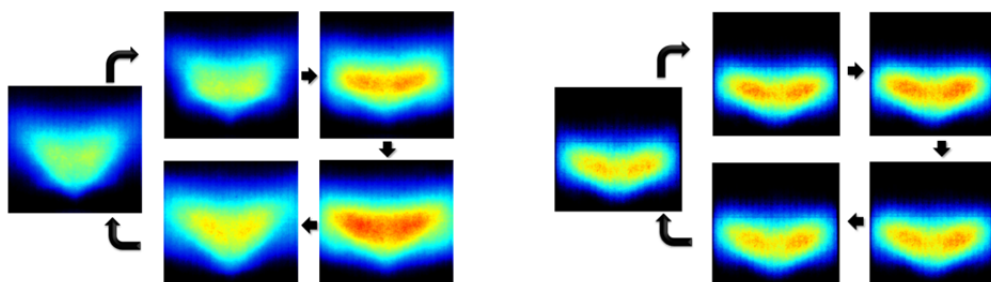


Abb. 5: Flammenschwingung bei 750 Hz $P_{th} = 30$ kW (EB, links) und 410 Hz $P_{th} = 120$ kW (MB, re)

Der BP des EB bei $P_{th} = 25$ kW wurde numerisch untersucht, um eine bessere Vorstellung der Vorgänge zu bekommen, die zu den erhöhten Druckoszillationen führen. Die berechnete zeitlich gemittelte Wärmefreisetzung zeigt eine ähnliche Verteilung wie die zeitlich gemittelte abeltransformierte OH^* -Chemilumineszenzaufnahme (Abb. 6). Die größten Schwankungen der Wärmefreisetzung treten bei der Simulation in der Nähe des Düsenaustrittes auf. In der Simulation liegen die Frequenz der dominanten Mode bei 445 Hz und die berechnete Amplitude bei 430 Pa. Beide Werte stimmen relativ gut mit den gemessenen Werten überein. Wertet man die Schwankungen der Brennstoffmassenkonzentration an einem Monitorpunkt am Düsenaustritt aus, zeigt sich, dass diese mit der gleichen dominanten Frequenz wie der Druck oszilliert (Abb. 7).

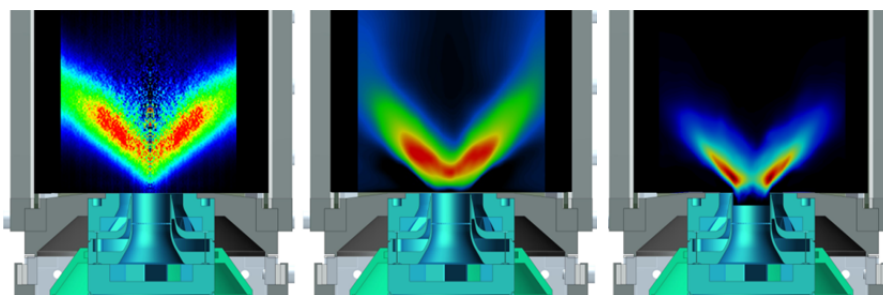


Abb. 6: Links: zeitlich gemittelte abeltransformierte OH^* -Chemilumineszenzaufnahme (Schnittebene Brennkammermitte); Mitte: zeitlich gemittelte Wärmefreisetzung aus LES (Schnittebene Brennkammermitte); rechts: zeitlich gemittelte Schwankungen der Wärmefreisetzung

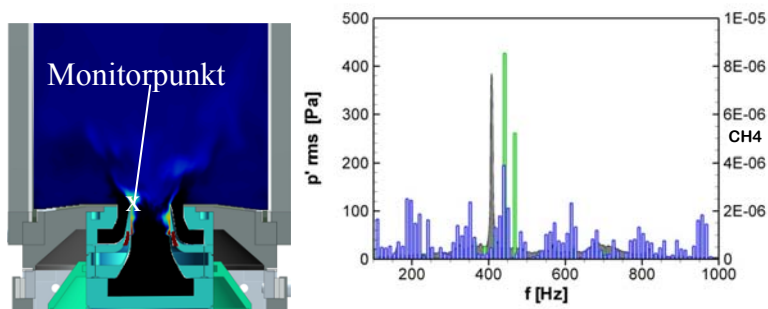


Abb. 7: Links: Momentanbild der CH_4 -Massenkonzentration und Monitorpunkt; rechts: Oszillationen von p' aus Exp. (—) und LES (—) und der Massenkonzentration von CH_4 (—);

Es ist somit zu anzunehmen, dass die Rückkopplung der Oszillation des Brennkammerdruckes mit der Wärmefreisetzung der Flamme über einen oszillierenden Brennstoffstrom in die Brennkammer stattfindet.

5 Ergebnis und Ausblick

Es wurde gezeigt, dass die Anzahl der Brenner in einem Brennersystem einen großen Einfluss auf auftretende thermoakustische Oszillationen haben kann. Bei der Durchführung einer LES für den BP mit 25 kW ergaben sich ähnliche Druckschwankungen wie bei Messung. Dadurch konnte als wahrscheinliche Ursache der verstärkten Druckoszillationen, die bei diesem BP auftreten, ein oszillierender Brennstoffstrom in die Brennkammer identifiziert werden. Um dieses Ergebnis zu bestätigen, das Verhalten der Versuchsbrenneranlage genauer zu verstehen und um diese Ergebnisse als Grundlage für das Beschreiben des Systemverhaltens anderer Brennersysteme zu verwenden, werden in Zukunft noch weitere Untersuchungen durchgeführt werden.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1: Tagesverlauf der Windenergieeinspeisung an zwei verschiedenen Tagen	2
Abb. 2: Schaden an einem Schutzblech in einer Brennkammer einer Gasturbine der Firma Solar Turbines, der durch Verbrennungsinstabilitäten verursacht wurde.....	2
Abb. 3: Versuchsbrenner in Einzel- und Mehrfachbrenneranordnung;	4
Abb. 4: Spektren der Druckoszillationen bei den BP der EB (links) und des MB (rechts)	5
Abb. 5: Flammenoszillation bei 750 Hz $P_{th} = 30$ kW (EB, links) und 410 Hz $P_{th} = 120$ kW (MB, re).....	5
Abb. 6: Links: zeitlich gemittelte abeltransformierte OH*-Chemilumineszenzaufnahme (Schnittebene Brennkammermitte); Mitte: zeitlich gemittelte Wärmefreisetzung aus LES (Schnittebene Brennkammermitte); rechts: zeitlich gemittelte Schwankungen der Wärmefreisetzung	6
Abb. 7: Links: Momentanbild der CH ₄ -Massenkonzentration und Monitorpunkt; rechts: Oszillationen von p' aus Exp. (—) und LES (—) und der Massenkonzentration von CH ₄ (—);	6

Literaturverzeichnis

- [1] Tennet TSO GmbH.
<http://www.tennetso.de/site/Transparenz/veroeffentlichungen/netzkennzahlen/tatsaechliche-und-prognostizierte-windenergieeinspeisung>. 2013.
- [2] K. O. Smith and J. Blust. *Instabilities in Industrial Gas Turbines: Solar Turbines' Experience*, American Institute of Aeronautics and Astronautics. 2005.
- [3] B. T. Zinn und T. C. Lieuwen. *Combustion Instabilities: Basic Concepts*, American Institute of Aeronautics and Astronautics. 2005.
- [4] F. Joos. *Technische Verbrennung*, Springer. 2006.
- [5] F. Zhang, P. Habisreuther, M. Hettel, H. Bockhorn. *Numerical computation of combustion induced noise using compressible LES and hybrid CFD/CAA methods*, *Acta Acustica United with Acustica*. 98. 2012. 120–134.

Hydrogen Production via Thermal Decomposition of Methane

Michael Plevan

*Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Kern- und Energietechnik IKET
Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Germany
Email: michael.plevan@kit.edu, Telefon: +49(0)721/608-28482*

Abstract

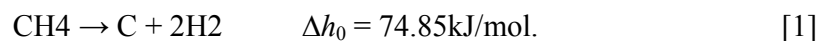
Steam reforming of natural gas is the predominant process used worldwide for hydrogen production. This technology is responsible for considerable amounts of emitted CO₂ (up to 12gCO₂/gH₂) and thus not suitable for an environmentally-sustainable hydrogen-based society. Following the global efforts for reducing greenhouse gas emission, the direct thermal decomposition of methane $\text{CH}_4(\text{g}) \rightarrow \text{C}(\text{s}) + 2\text{H}_2(\text{g})$ by different cracking processes has been widely suggested recently as an alternative solution. Although this is a scientifically-proven process, a continuously operating process is still lacking. A new approach for thermal decomposition of methane into hydrogen and solid carbon in the presence of molten metal, with the potential of continuous operation, was suggested by Prof. Carlo Rubbia [1]. An experimental facility for testing this concept is under development at KIT-KALLA (Karlsruhe Liquid Metal Laboratory). In this setup, methane is bubbled through a column-type reactor with molten metal at high temperatures (up to 1000°C). For practical purposes, the reactor is divided in to two sections, as follows. In the cold section (about 400°C), steel is used for the gas injection components, allowing for design flexibility. Quartz glass is used in the hot section due to its material compatibility with molten metals at high temperature. Remote charging and discharging of the molten metal is possible through an external sump tank. The presented experimental facility is being completed currently; first experimental campaigns will be conducted soon. Based on their results, the initial reactor design will be optimized, in order to reach a continuously operating process. Future experiments shall be focused on the investigation of different gas injectors as well as different operating parameters. In particular, it is intended to maximize the hydrogen yield and minimize the production of intermediate reaction products.

Keywords

Hydrogen production, Liquid metal, Bubble column reactor, Methane cracking, Pyrolysis

1 Introduction

One of the most important challenges of global economies is to reduce the emission of green house gases, especially CO₂ [7]. In order to reduce CO₂ emissions effectively, not only renewable energy technologies have to be improved, but also technologies that separate carbon from fossil energy carriers before combustion. One example of a suitable process is thermal decomposition of methane into hydrogen and solid carbon, according to the equation:



Such hydrogen production process is becoming increasingly attractive, since hydrogen is being proposed as a future emission-free energy vector for a variety of applications especially in automotive industry. Today, the vast majority of hydrogen is produced by reforming or gasification of fossil fuels emitting considerable amounts of CO₂ [6]. Steam reforming of methane, the most widely used hydrogen production technology, emits about 12g CO₂/g H₂ [11]. Additionally, hydrogen for fuel cell applications retrieved from a steam reforming cycle requires a reverse methanation reaction to reduce the CO concentration to sub-ppm levels to avoid fuel cell poisoning [15]. Due to the absence of oxygen in the proposed pyrolysis reaction, additional hydrogen purification steps could be eliminated. Thermal decomposition of methane for hydrogen production is a widely accepted process and has been investigated in numerous studies in theory and experiments. It has been reported in the literature that appreciable methane conversion can be achieved only at temperature levels above 1200°C [9]. The use of catalysts is then crucial in order to lower the reaction threshold to a feasible temperature value. Therefore, the utilization of catalysts has been investigated thoroughly [13], [3]. In most cases, packed-bed or fluidized-bed reactors have been used comprising metal [12], [17], [4] or carbonaceous catalysts for example activated carbon [2], [5] or carbon black pearls [8]. As a consequence of solid carbon formation at the active catalytic surface, the catalyst deteriorates proportionally to the methane conversion ratio. A catalyst regeneration however could only be achieved by carbon oxidation, which needs to be balanced at greenhouse-gas emission. Cracking methane using a molten metal bubble column reactor is an alternative that is likely to provide a solution for the biggest drawback experienced in gaseous reactors: In the molten metal reactor it may be possible to capture the carbon in the liquid metal and separate the carbon on the molten metal surface, on which it accumulates due to the density difference. The carbon could then be skimmed off the liquid metal surface, similar to slag removal from molten iron. Thermal decomposition of methane using molten metal as heat transfer medium has been suggested in theory by Steinberg [16], Gulevich [10] and Abanades [1] and was investigated experimentally by Serban [14] by several lab-scale experiments.

2 Objectives

The utilization of presented technology was proposed and tested feasible, however further development is needed to investigate the potential for a future industrial application. Therefore, the main path of this project is planning, design, construction and operation of an experiment using molten metal as heat transfer medium in a bubble column-type reactor for hydrogen generation by methane pyrolysis. In a first step the focus of this activity will be on possible options of structure material for the chemical reactor and for the bubbling device. Since it is envisaged to operate the chemical reactor at high temperature up to 1000°C in liquid metal and in presence of carbon coke and hydrogen, it is of outmost importance to select high temperature strength materials which are not only compatible with the high temperatures, but they must also be chemically resistant to tin and solid carbon. There are several material options that have to be considered to meet these requirements as e.g. Mo, W, Ta, ceramics, quartz and other materials. The hydrogen yield of the reactor is depending on several operational parameters. In detail, several parameters need to be discussed and put into relation towards the methane conversion/hydrogen production.

1. Operation temperature
2. Gas flow rate
3. Pore diameter of porous sparger (Corresponding parameter for the reaction time)
4. Temporal evolvement of the reaction products

In detail, it is planned to conduct several experimental campaigns in which the above mentioned parameter are varied individually. For each experimental run, the following reaction products will be analyzed using gas chromatography¹: H₂, CH₄, C₂H₆, C₂H₄, C₂H₂ and solid carbon.

3 Experimental Facility

Due to high temperatures at the reactor and flammable gases it was necessary to develop a remote handling of experimental campaigns. The entire facility is divided into four component groups:

1. Bubble column reactor
2. Gas supply infrastructure
3. Sump tank
4. Three-zone heater

¹ PERKIN&ELMER ARNEL 4016- Analyzer: Ar carrier gas, thermal conductivity detector (TCD)

The hot pyrolysis reaction zone of the reactor tube is located inside the three-zone furnace. External heating is realized by heating wires that are wrapped around the tube and flange of the reactor body. The gas flow is controlled using an Ar- flow meter and an flow meter. The feed flow direction is controlled by pneumatic valves. Pressure and temperature measurements are conducted before and after the reactor. According to figure 1, the sump tank is permanently connected to the reactor by a 12x1mm pipe. The charge and discharge procedure is considered to be a unique event for every experimental campaign, thus only manually operated valves are used here. The sump tank volume is heated with a 1.4kW heater.

For practical reasons, the solid metal nuggets are molten inside a sump tank from which the molten inventory is pumped into the reactor volume through a heated rise pipe. The sump tank is made of a 316 SS tube with a volume of about 5.3l. The sump tank is positioned below the reactor. It contains 2.9l of liquid tin and is considered to be heated by electrical heaters during the entire duration of an experimental campaign. The considered operation temperature is 300°C, but the reactor is designed to withstand the amount of hot liquid tin containment at up to 1000°C released from the reactor. Regular charge and discharge procedures will be controlled by pressurized Ar which is applied to the sump tank pushing the molten tin through into the rise pipe and the reactor. After the charging is complete a valve at the rise pipe is closed disconnecting the sump tank from the reactor. In case of emergency, the valve can be opened and the molten tin inventory of the reactor retreats to the sump tank volume. The sump tank is designed for a maximum pressure of 3 bars. The heaters are attached directly to the steel body underneath the insulation cover.

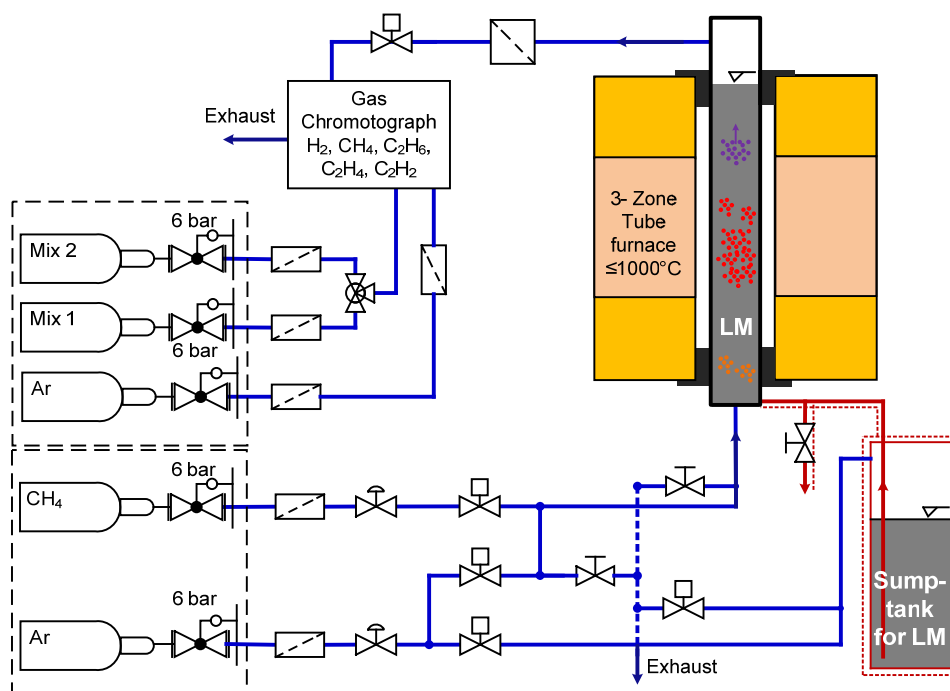


Figure 1: Scheme of the experimental facility

Literature

- [1] Abanades, A., C. Rubbia, and D. Salmieri (2012). Technological challenges for industrial development of hydrogen production based on methane cracking. *Energy* 46(1), 359 – 363. *Energy and Exergy Modelling of Advance Energy Systems*.
- [2] Abbas, H. F. and I. F. Baker (2011). Thermocatalytic decomposition of methane using activated carbon: Studying the influence of process parameters using factorial design. *International Journal of Hydrogen Energy* 36(15), 8985 – 8993.
- [3] Abbas, H. F. and W. W. Daud (2010). Hydrogen production by methane decomposition: A review. *International Journal of Hydrogen Energy* 35(3), 1160 – 1190.
- [4] Amin, A. M., E. Croiset, Z. Malaibari, and W. Epling (2012). Hydrogen production by methane cracking using ni-supported catalysts in a fluidized bed. *International Journal of Hydrogen Energy* 37(14), 10690 – 10701.
- [5] Ashok, J., S. N. Kumar, A. Venugopal, V. D. Kumari, S. Tripathi, and M. Subrahmanyam (2008). Cox free hydrogen by methane decomposition over activated carbons. *Catalysis Communications* 9(1), 164 – 169.
- [6] Demirci, U. B. and P. Miele (2013). Overview of the relative greenness of the main hydrogen production processes. *Journal of Cleaner Production* (0), –.
- [7] Dufour, J., D. Serrano, J. Glvez, J. Moreno, and C. Garca (2009). Life cycle assessment of processes for hydrogen production. environmental feasibility and reduction of greenhouse gases emissions. *International Journal of Hydrogen Energy* 34(3), 1370 – 1376.
- [8] Dunker, A. M., S. Kumar, and P. A. Mulawa (2006). Production of hydrogen by thermal decomposition of methane in a fluidized-bed reactor- effects of catalyst, temperature, and residence time. *International Journal of Hydrogen Energy* 31(4), 473 – 484.
- [9] Gueret, C., M. Daroux, and F. Billaud (1997). Methane pyrolysis: thermodynamics. *Chemical Engineering Science* 52(5), 815 – 827.
- [10] Gulevich, A., P. Martynov, V. Gulevsky, and V. Ulyanov (2008). Technologies for hydrogen production based on direct contact of gaseous hydrocarbons and evaporated water with molten pb or pbbi. *Energy Conversion and Management* 49(7), 1946 – 1950. ICENES2007, 13th International Conference on Emerging Nuclear Energy Systems, June 38, 2007, Istanbul, Turkiye.
- [11] Kothari, R., D. Buddhi, and R. Sawhney (2008). Comparison of environmental and economic aspects of various hydrogen production methods. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 12(2), 553 – 563.
- [12] Li, Y., D. Li, and G. Wang (2011). Methane decomposition to cox-free hydrogen and nano-carbon material on group 8 to 10 base metal catalysts: A review. *Catalysis Today* 162(1), 1 – 48.
- [13] Muradov, N., F. Smith, C. Huang, and A. T-Raissi (2006). Autothermal catalytic pyrolysis of methane as a new route to hydrogen production with reduced co2 emissions. *Catalysis Today* 116(3), 281 – 288. 2nd European Hydrogen Energy Conference.

- [14] Serban, M., M. A. Lewis, C. L. Marshall, and R. D. Doctor (2003). Hydrogen production by direct contact pyrolysis of natural gas. *Energy & Fuels* 17(3), 705–713.
- [15] Shah, N., D. Panjala, and G. P. Huffman (2001). Hydrogen production by catalytic decomposition of methane. *Energy & Fuels* 15(6), 1528–1534.
- [16] Steinberg, M. (1999). Fossil fuel decarbonization technology for mitigating global warming. *International Journal of Hydrogen Energy* 24(8), 771 – 777.
- [17] Villacampa, J., C. Royo, E. Romeo, J. Montoya, P. D. Angel, and A. Monzn (2003). Catalytic decomposition of methane over ni-al₂o₃ coprecipitated catalysts: Reaction and regeneration studies. *Applied Catalysis A: General* 252(2), 363 – 383.

Advanced measuring systems for the efficient use of geothermal energy as baseload-supplier

Development of modular research-probes for geothermal boreholes

Benedict Holbein, Dr. Joerg Isele

*Karlsruher Institute of Technology, Institute for Applied Computer Science IAI,
76344, Eggenstein-Leopoldshafen, Germany, e-mail: benedict.holbein@kit.edu, phone:
+49(0)721/608-25765*

Outline

The measuring systems being developed at IAI are designed especially for the use in deep boreholes. They shall allow widespread research in extreme environments with high pressures, high temperatures and corrosive media which are characteristic features of geothermal boreholes. To quickly realize solutions for individual research applications, the whole system is based on a platform strategy with modular structure. All modules such as devices for measurement and borehole interaction or components for cooling systems have to be engineered accordingly to the tough conditions of boreholes. Therefore the main challenges which are damages by overheating, the lack of space and corrosion have to be coped with by advanced engineering in conjunction with extensive experimental work.

Notes

Cooling, measuring system, geothermal energy, widespread research

1 Introduction

A change in energy supply means to strike new paths. To realize this in a situation characterized by economical pressure and pressure of time, these paths have to be well known. According to that it is clear, that applied research including exploration of possible energy sources is essential. One renewable energy source with high potential is geothermal energy. It contains a high quantity combined with unlimited availability, thus it has all the attributes to be used as base load supplier. Although geothermal energy doesn't have its meaning, conditioned by high risks and costs for its use. This is caused significant by a lack of information about the surrounding conditions and media parameters in geothermal boreholes during preliminary as well as extraction stages of geothermal power plants. To handle this problem it would be a great advance

to have devices which allow receiving permanent and widespread data of boreholes. Therefore these have to withstand the challenging borehole-conditions [1].

2 Challenges

The operation depth for the measuring system should be 5 km. This provides some important boundary conditions for the engineering of its components, which are listed in table 1 [2].

Tab. 1: operating conditions and construction consequences

borehole conditions	construction consequences
temperature 200°C	insulation required
pressure 600 bar	robust design
corrosive surrounding media	use of resistant materials
minimal operation time 3 weeks	active cooling necessary
borehole diameter 8 ½ inch	maximal outer diameter 170mm

This means that all components standing in direct contact with the borehole media have to be made of corrosion resistant materials. To withstand additionally the high pressures while regarding the geometrical limits, the favored materials are nickel-based alloys. The construction with these materials is constrained by their strongly limited machinability and deliverability. An optimized design using simple geometries is inevitable.

The main problem is the borehole temperature. The measurement applications contain electronic components like units for controlling, data-processing and memory units which have to be heat-resistant or protected against overheating. For many applications there are no high temperature electronics, the few ones which exist are expensive and difficult to implement into different system. Because the systems are targeted to be adjustable for different applications and cost-reduction is requested, the use of standard electronics is preferred. To avoid damages caused by overheating their temperatures must not exceed 70°C. In every case this makes a good insulation necessary. Insulation can reduce the heat input from outside and so slow down the heating up inside the casing but it can't avoid the heat input completely and additionally the electronics produce heat themselves inside. Thus long operation times make it necessary to cool down relevant components.

3 Heat management

Basically it is important for the modules to *have* a good working insulation. The general concept provides that vacuum and MLI (Multi Layer Insulation) are used in radial direction. The module connections and heads are insulated with Solid Material i.e. Teflon (PTFE). Especially the vacuum insulation has a high potential to decrease the outer heat input (see Figure 1).

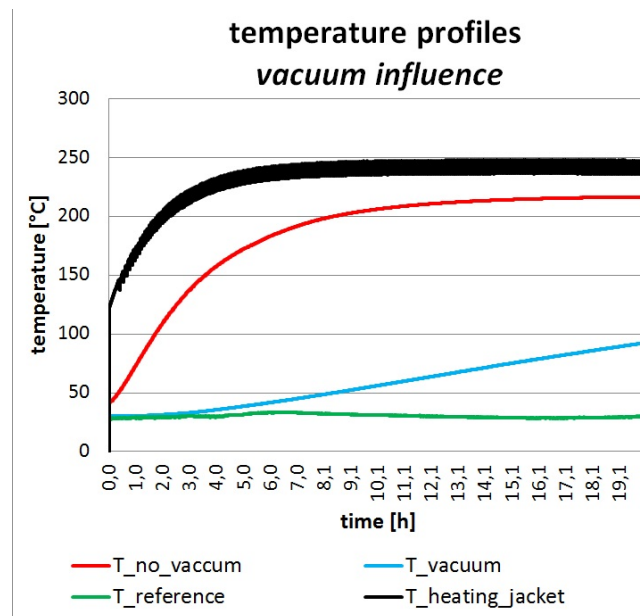


Fig. 1: experiment of heat-input reduction using vacuum insulation (red: without vacuum, blue: with vacuum)

The experimental data shows clearly, that vacuum insulation reduces significantly the heat-input into the module casing.

For the cooling there are two basic approaches. The first one is based on PCM (Phase Change Material) which takes away heat from the cooled area during phase change. A heat-pipe transfers the heat from sensitive components to the PCM. Therefore storage for the PCM i.e. ice, working as cold storage is needed as well. With this method short operation times of a couple of hours can be realized.

Longer operation times up to measurement processes without time-limitations can be made possible by an active cooling system based on a thermodynamic cycle process.

During the process a refrigerant evaporates transferring heat out of the cooled area. The gaseous refrigerant gets compressed to a pressure above the vapor pressure at borehole temperature. Like this it can condense in an outer heat exchanger (condenser) transferring heat to the borehole surrounding. The condensate reaches starting condition through expansion in an expansion-valve.

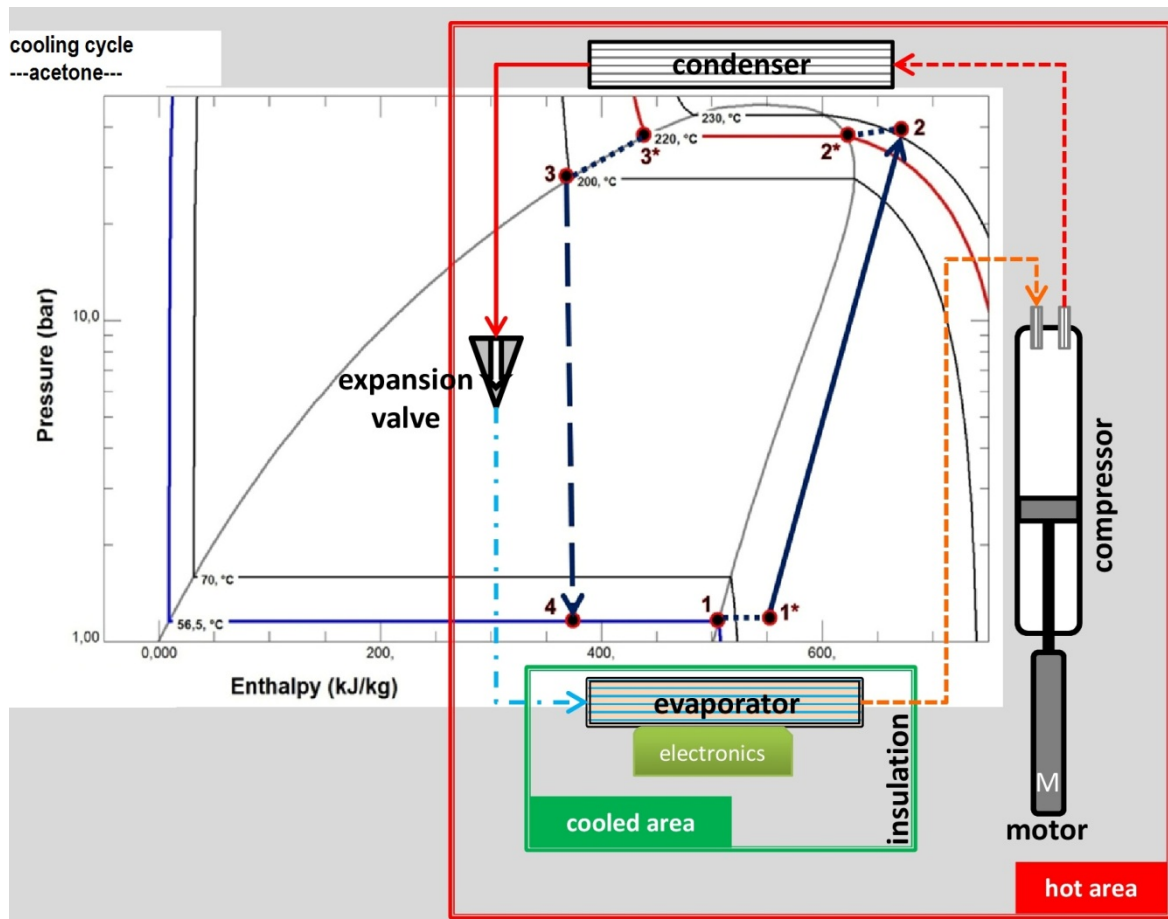


Fig. 2: concept of the cooling system with cooling cycle

In this concept the evaporator and the components which are sensitive to heat are installed in a cooled area, which is insulated. The strongly heat producing components compressor and motor and the condenser are located in the hot area, without cooling and insulation. For the special operation and environment conditions, all important components have to be custom-built and optimized for the use in borehole measurement systems.

Figure 3 shows how such a system would possibly look like. The system has a vertical structure to fulfill the constraints of space. Inside the casing of the cooled room (Figure 2, right) an evaporator, especially designed to cool electronics in borehole probes is installed. By its tube bundle structure the condenser (left) reaches a great surface for heat exchange, while complying

with the conditions of machinability of corrosion resistant materials, pressure resistance and small geometries. Linked to both, inner and outer heat-exchanger, in the middle the compact compressor is installed.



Fig. 3: CAD model of the borehole probe cooling system

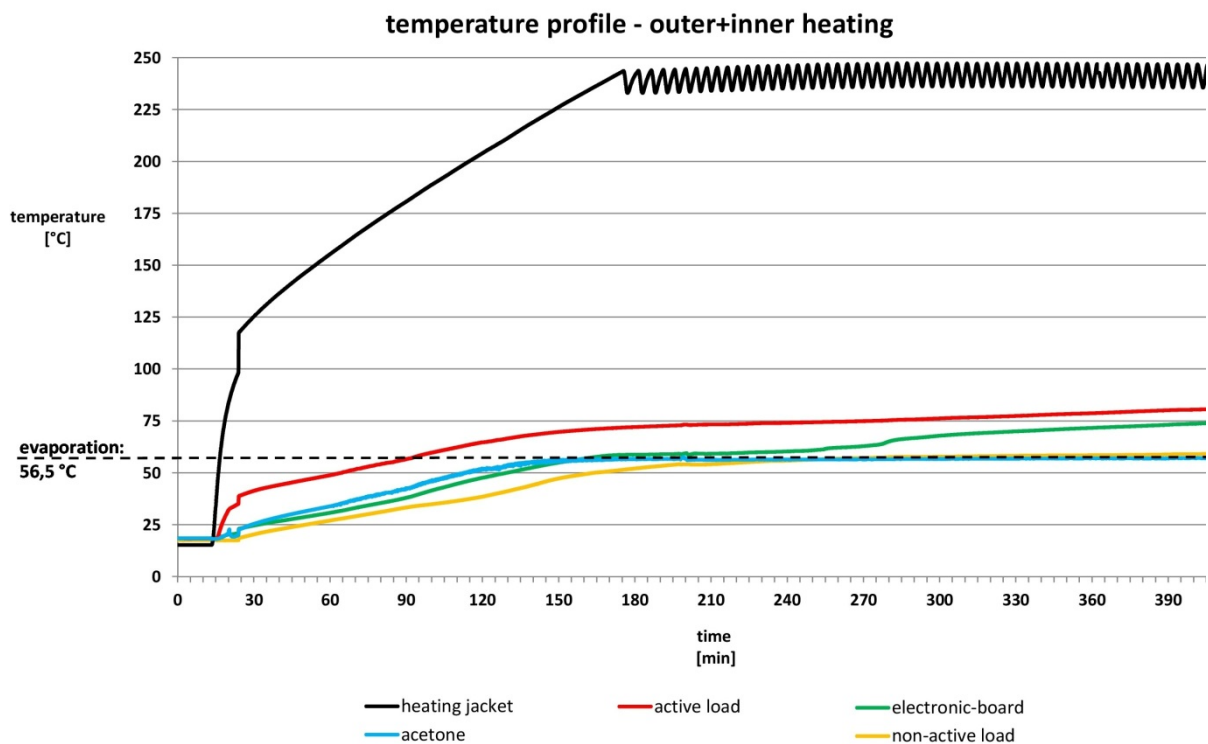


Fig. 4: experimental evaporation process

First experiments showed that acetone is a promising candidate as refrigerant for the probe cooling system. With an evaporation temperature of 56.5°C (1atm), the cool room temperature can be hold below 70°C permanently. For the experiments (see Figure 4) the casing of the cooled room was heated up from outside with a heating jacket. Inside some power resistors were simulating electrical loads producing heat. Like this a total heat input of about 40Watt (20W inside, 20W from outside) was compensated by the evaporating acetone during a time period. The experiments of the evaporation process also showed that single temperatures became too high during the heating phase. This was caused by an insufficient heat transfer from heat sources

to refrigerant. An optimized evaporator, based on the experimental results is being manufactured at the moment [3].

4 workflow and prospects

Currently we're developing first research modules and the components for the cooling systems, based on laboratory experiments and computer simulations. To investigate the functionality of the cooling concepts i.e., the sub processes get conducted separately first, based on analytical calculations and simulation done in advance. In the next step these processes get combined to more comprehensive investigation targets.

The first major-goal is to complete working prototypes to be able to conduct field tests with real applications within the next 3 years.

In the future this advanced measurement system can help designing geothermal power plants more efficient and reliable and to reduce costs and risks of reservoir-exploration. This will support geothermal energy becoming a key baseload-supplier.

List of figures

Fig. 1: experiment of heat-input reduction using vacuum insulation.....	3
Fig. 2: concept of the cooling system with cooling cycle.....	4
Fig. 3: CAD model of the borehole probe cooling system.....	5
Fig. 4: experimental evaporation process.....	5

List of tables

Tab. 2: operating conditions and construction consequences.....	2
---	---

References

- [1] B. Holbein, J. Isele. *Development of a Research Probe for Geothermal Boreholes*. 38th Workshop on Geothermal Reservoir Engineering, Stanford California. 2013.
- [2] B. Holbein. *Entwicklung eines Kühlsystems für Geothermie-Bohrlochsonden*. Bachelor-Thesis, Karlsruhe. 2011
- [3] B. Holbein. *Development of a Cooling-System for Research Probes for Geothermal Boreholes*. 38th Workshop on Geothermal Reservoir Engineering, Stanford California. 2013.

Hydrothermal liquefaction of microalgae for biofuel production

Diego López Barreiro, Giuseppe Terranella, Ursel Hornung, Andrea Kruse

*Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Katalyseforschung und -Technologie,
76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Deutschland, E-mail: Diego.LopezBarreiro@UGent.be,
Telephone: +49(0)721/608-24323*

Abstract

Microalgae have the potential of becoming an important energy source, and hydrothermal liquefaction (HTL) is a promising technology for that purpose, given the high water content of microalgae. It produces an organic liquid energy carrier called biocrude oil as main product. In this work, algae slurries from *Scenedesmus almeriensis* (freshwater) and *Nannochloropsis gaditana* (marine) are liquefied in 10 mL microautoclaves at different temperatures (325 to 375 °C) and reaction times (5 and 15 min). Results show the importance of an accurate characterization of the feedstock for assessing the product yields. Temperatures in the range of 325 to 375 °C and 15 minutes lead to oil yields in the vicinity of 60 wt% for both species.

Keywords

Microalgae, Thermochemical conversion, Biofuels, Liquefaction

1 Introduction

An exponentially increasing world population, together with the threats of a global climate change demand more efficient and more sustainable energy sources. In this context, biomass is a renewable carbon source that is expected to play an important role in the future. Microalgae appear as an interesting type of biomass, due to their higher photosynthetic efficiency, faster growth rate and higher area-specific yields than terrestrial biomass.

The major focus of biofuels from microalgae was obtaining biodiesel from lipid-rich strains, by means of solvent extraction plus transesterification [1]. But this process uses only a fraction of the algae biomass, thus the other fractions remain unused and generate a large amount of residues. Hydrothermal liquefaction constitutes an alternative technology that processes the whole microalgae fractions in hot compressed water (250-375°C, 5-25 MPa), producing a liquid

energy carrier called biocrude oil that has an energy content similar to fossil petroleum. HTL benefits from the high water content of microalgae, avoiding the energy cost of drying them [2]. In this work, two microalgae strains were liquefied to assess their biocrude oil productivity, as well as the possibility of recovering nitrogen through the aqueous phase for nutrient recycling.

2 Materials and methods

2.1 Microalgae strains

Two strains were chosen for this study: the freshwater species *Scenedesmus almeriensis* (CCAP 276/24), and the marine *Nannochloropsis gaditana* (Lubián CCMP 527). The organic content of the microalgae pastes was analyzed by centrifuging three times (10000 rpm, 10 min) 0.15 g of dry algae dissolved in 40 mL of distilled water. Between each centrifugation, the supernatant was removed and replaced by new distilled water, to ensure the removal of any water soluble salts that might be accumulated with the algae cells from the harvesting step. After the centrifugation, the algae cells were dried overnight at 105 °C, and the dry weight was quantified. The samples were then ashed at 550 °C for 5 h. The elemental composition (C, H, N, S) was measured using an elemental analyzer (Vario EL III), and the mineral content was analyzed by ICP-OES (Agilent 725).

2.2 Hydrothermal liquefaction and product separation

Algae pastes with a concentration of 10 wt % of algae were liquefied in batch microautoclaves of 10 mL of internal volume made of stainless steel. 70% of the volume was filled with the algae paste. Before closing the autoclaves, the air was flushed with N₂, and following that, they were loaded with 20 bar of N₂, to ensure that water kept in a liquid state during the reaction.

The microautoclaves were then introduced in a GC oven and heated up to the desired reaction temperature. The heating rate was typically 20 °C·min⁻¹, and once the reaction time was completed, the microautoclaves were quenched by submerging them in a ice bath. Each experiment was repeated in quadruplicate.

After cooling down, the reactors were opened. The inner pressure of the autoclaves was recorded with a manometer, and then the other products were taken out from the reactors and filtered. Most of the biocrude oil produced remained stuck to the microautoclave walls, requiring the use of an organic solvent to maximize its collection. 25 mL of dichloromethane (Merck, 99,5% purity) were used, in stepwise additions of 5 mL.

The solid products were recovered through vacuum filtration. To ensure that no biocrude was remaining in the filter cake, 10 mL of dichloromethane were additionally used to wash it. The filtrate consisted of a bi-phase mixture (water with organic matter dissolved, and biocrude oil dissolved in dichloromethane), which was centrifuged (7500 rpm, 10 min) to maximize the

separation between phases. The aqueous phase was recovered with a syringe. The biocrude oil dissolved in dichloromethane was flushed for 24 h with N₂ to remove the solvent and any water that could still be present in the sample.

The yield of the different product phases was calculated in an organic basis as the ratio of the weight of the recovered organic mass (m_i) and the mass of microalgae (dry, ash free) initially loaded to the reactor, according to Eq. 1:

$$Yield(wt\ %) = \frac{m_i}{m_{microalgae(daf)}} \cdot 100 \quad [1]$$

The organic matter present in the aqueous phase was determined by drying aliquots of 1.5 mL at 60 °C for 24 h. Its ash content was determined by treating the dry residue at 550 °C for 5 hours. The gas phase was analyzed after the experiment using a gas chromatograph (HP 6890). The mass of gas was calculated with the ideal gas law, considering the pressure of the gas after the HTL experiment and its composition, and it was used in Eq. 1 to calculate the gas yield. The filtrated solids were quantified by drying them at 105 °C overnight to remove any residual water and dichloromethane after the filtration. Their ash content was determined by treating them at 550 °C for 5 hours. The aqueous phase was subjected to ion chromatography to analyze its content in ammonia. Samples of the solid residue were analyzed with a field emission scanning electron microscope (FE-SEM).

3 Results and discussion

3.1 Algae characterization

Table 1 shows the characterization of the algae feedstock. Part of the inorganic matter present in the feedstock volatilize or decompose during the ash analysis, leading to an overestimation of the organic content. Therefore, this inorganic volatile matter needs to be removed prior to the determination of the organic content of algae, to be able to properly assess the conversion of organic matter into biofuels.

Tab. 1: Proximate and ultimate analysis of the algae species (in wt %).

Species	C	H	N	S	Ca	K	Mg	Mn	Na	P	Organics	Ash	Volatile inorganics
<i>Nannochloropsis gaditana</i>	47,6	7,5	6,9	0,5	4,4	1,2	1,1	0,1	0,5	3,7	66,5	12,4	21,1
<i>Scenedesmus almeriensis</i>	38	5,6	5,5	0,5	9,7	0,1	0,7	1,8	0,6	0,1	53,5	20,0	26,5

3.2 Mass balances

The yields obtained for each species and reaction conditions are shown in Figure 1. A high conversion of biomass-to-biocrude is obtained already at temperatures of 325 °C (around 60 wt %). For *Scenedesmus almeriensis*, it can be seen that the mass balance exceeds 100% of closure at 325 °C. This was caused by the presence of inorganic matter from the culture medium in these product phases, affecting the determination of the organic yields. At higher temperatures (above 350 °C), the salts seem to precipitate and crystallize, as already reported elsewhere [3], leading to mass balance closures of 90-100%.

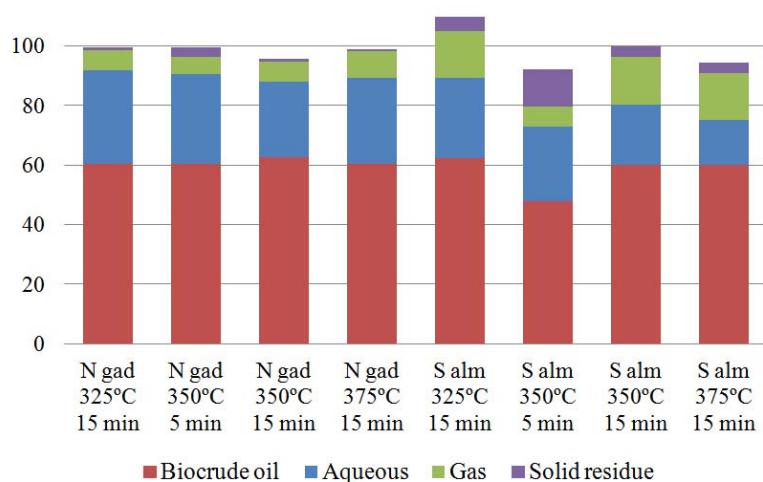


Fig. 1: Mass balances at different reaction conditions.

Other product phases show bigger variations in their yields amongst both: *Nannochloropsis gaditana* presents a higher content of organics in the aqueous phase, while *Scenedesmus almeriensis* leads to a higher production of gas. This might be explained by the different concentration of salts in both algae (Table 1). The presence of calcium-containing salts has been reported to increase the gas yield [4]. The higher gas yields for *Scenedesmus almeriensis* in this work could be also owed to its higher content of calcium.

With regard to the effect of time, it was found that at 5 min, the amount of oil produced was similar for *Nannochloropsis gaditana*, when compared to 15 min. This was not happening for *Scenedesmus almeriensis*: the yield of biocrude was approximately 20% at 5 min than at 15 min. However, the greenish color of the solid residue from both species after 5 min suggested an incomplete conversion at these conditions, which contrasted with its brown char-like appearance after 15 min.

3.3 Recovery of nutrients

The water phase obtained from HTL was analyzed in view of recycling nutrients through it [5]. A proper management of this phase seems crucial for a sustainable operation of microalgae HTL. High temperatures seemed to promote the presence of nitrogen in the form of ammonia (more than 50% of the nitrogen from the feedstock at 375 °C).

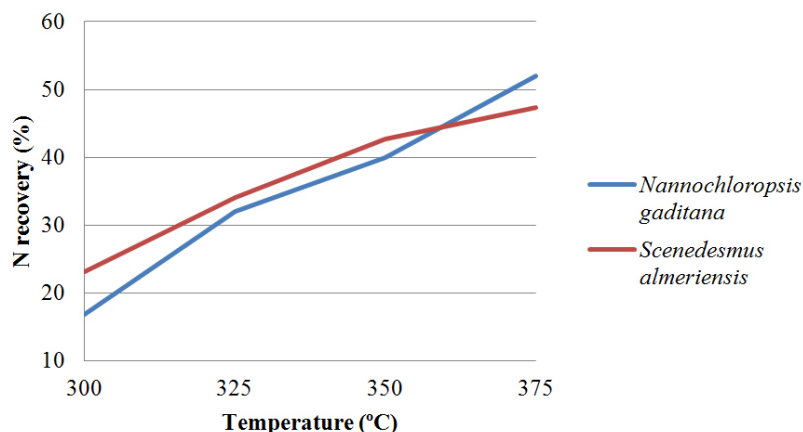


Fig. 2: Nitrogen recovery with respect to the content in the initial feedstock.

3.4 Behavior of salts in the process

The interaction of salts with water at near critical conditions differs significantly from standard conditions, because water becomes less polar, dramatically reducing the solubility of salts. This can result in a shock precipitation and crystallization [6]. Fig. 3 shows SEM pictures of crystals in the solid residue of *Nannochloropsis gaditana* at 350 °C. The precipitation of salts appears to occur at 325 °C for *Nannochloropsis gaditana*, and at 350 °C for *Scenedesmus almeriensis*. This precipitation temperature might be determined by types of salts present in each algae. For an effective separation of salts from the biocrude and aqueous phases, near critical conditions seem better ($T \geq 350$ °C).

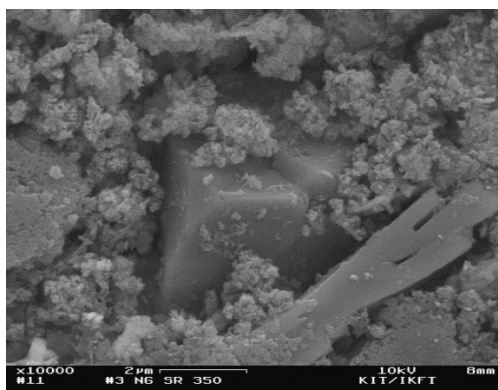


Fig. 3: Crystal precipitates in the solid residue from *Nannochloropsis gaditana* at 350 °C and 15 min.

4 Conclusions

The results presented here indicate that both species tested constitute a good feedstock for HTL when sufficiently high temperatures (325-375 °C) and enough reaction times (15 min) are given.

The aqueous phase proved to be suitable for nutrient recovery: more than 50% of the nitrogen in the feedstock can be recovered in the form of dissolved ammonia. A proper management of this phase appears to be critical for the success of HTL.

Salts management is also important, given their high content in the algae pastes. These salts only separate effectively from the aqueous and biocrude oil phases when near critical temperatures are used, precipitating and crystallizing, thus leading to biofuels with less inorganic material.

List of figures

Fig. 1: Mass balances at different reaction conditions.	4
Fig. 2: Nitrogen recovery with respect to the content in the initial feedstock.	5
Fig. 3: Crystal precipitates in the solid residue from <i>Nannochloropsis gaditana</i> at 350 °C and 15 min.	5

List of tables

Tab. 1: Proximate and ultimate analysis of the algae species (in wt %).	3
--	---

Bibliography

- [1] Y. Chisti. Biodiesel from microalgae. *Biotechnology Advances*. 2007.
- [2] D. López Barreiro, W. Prins, F. Ronsse and W. Brilman. Hydrothermal liquefaction (HTL) of microalgae for biofuel production: state of the art review and future prospects. *Biomass & Bioenergy*. 2013.
- [3] D. López Barreiro, W. Brilman, F. Ronsse and W. Prins. Hydrothermal liquefaction of microalgae: influence of volatile salts from the culture water on the mass balances. 9th European Congress of Chemical Engineering. 2013.
- [4] U. Jena, K.C. Das and J.R. Kastner. Comparison of the effect of Na₂CO₃, Ca₃(PO₄)₂, and NiO catalysts on the thermochemical liquefaction of microalga *Spirulina platensis*. *Applied Energy*. 2012.
- [5] L. García Alba, C. Torri, D. Fabbri, S.R.A. Kersten, W. Brilman. Microalgae growth on the aqueous phase from Hydrothermal Liquefaction of the same microalgae. *Chemical Engineering Journal*. 2013.
- [6] Schubert, M. Catalytic hydrothermal gasification of biomass - salt recovery and continuous gasification of glycerol solutions. PhD thesis, ETH/PSI, Zürich. 2010.

A Method to Map Clay Zones in Crystalline Geothermal Reservoirs

A Neural Network Based Approach Towards a Better Mechanical and Hydraulic Understanding of the Reservoir

Carola Meller*; Albert Genter¹; Thomas Kohl²

**Karlsruhe Institute of Technology, Applied Geosciences,*

76131 Karlsruhe, Germany, E-mail: carola.meller@kit.edu, Phone: +49(0)721/608-45224

¹GEIE Exploitation Minière de la Chaleur; Kutzenhausen, France

² Karlsruhe Institute of Technology, Applied Geosciences

Abstract

Geothermal energy is a quasi-inexhaustible source of energy, which is –in contrast to wind and solar power- able to provide base-load power. Being an important contribution to the renewable energy mix, research on the exploitation of geothermal energy is of growing importance. An aspect guaranteeing the success of a geothermal power plant is a thorough understanding of the mechanical and hydraulic processes inside a geothermal reservoir. Clay minerals as alteration products play an important role for reservoir hydraulics and mechanical processes.

The present work describes a method enabling the location of clay bearing fracture zones in geothermal reservoirs. A neural network is used to create synthetic logs from standard radioactive logging data, indicating the clay content in fractures along boreholes. The applicability of this method is demonstrated on data from the geothermal site in Soultz-sous-Forêts (Alsace).

Keywords

Geothermal reservoir, Soultz-sous-Forêts, granite alteration, clay minerals, neural network

1 Introduction

The growing demand for energy and the stepwise demolition of nuclear power plants in Germany necessitate the development of new techniques to use alternative energy forms. Geothermal energy plays an important role for base-load power supply, as it is independent from weather conditions, seasons and daytime.

Geophysical methods from the earth surface or from boreholes are used for the exploration of potential geothermal reservoirs and their evaluation as candidates for heat extraction. Knowledge

about processes in the underground are derived from indirect methods and therefore the relationship between mineralogical and geophysical processes has to be well known. A commonly observed process is the alteration of siliceous minerals inside fractures into clay minerals. Figure 1 shows the alteration around a fracture observed on a core piece of the well EPS1.

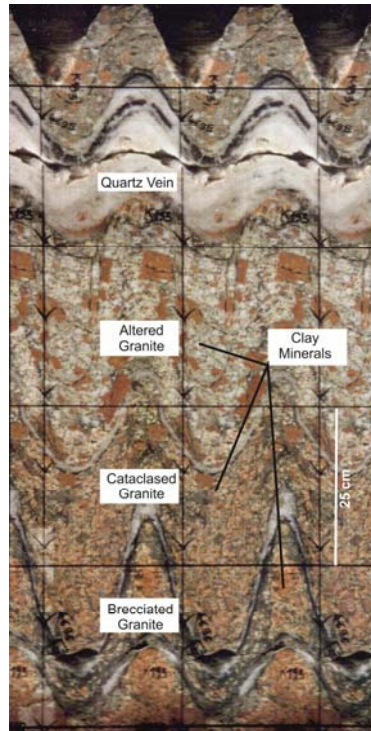


Figure 1: The alteration of the Soutz granite around a fracture, core picture from the well EPS1.

Clay on fracture surfaces considerably reduces the frictional stability of rock (e.g. Schleicher *et al.*, 2009) and changes the hydraulic properties of the fracture (e.g. Vrolijk and van der Pluijm, 1999). Both parameters are of major importance for the success and operation of a geothermal power plant. The mitigation of seismicity during power plant operation is a highly topical issue for geothermal applications. Knowledge about the rock permeability and frictional strength helps deciding about the injection pressure for stimulation and power plant operation in a way that the risk for earthquakes caused by slip on fractures is kept low.

Owing to generally low budgeting for geothermal wells, only a limited number of borehole measurements are committed. A commonly used standard logging technique is the spectral gamma ray log (SGR), which measures the natural radioactivity of the rock in the spectra of uranium (U), thorium (Th) and potassium (K). This log is especially suited for the location of clay minerals, as radioactive isotopes are incorporated into the clay structures.

The geothermal site in Soultz sous Forêts is a project situated at the western border of the Upper Rhine Graben and was drilled through Mesozoic sediments into the granitic basement. Five wells have been drilled to 2230 m (EPS1), 3600 m (GPK1), 5080 m (GPK2), 5100 m (GPK3), and 5260 m (GPK4), respectively.

Soultz looks back on decades of intensive research and therefore it provides a unique dataset of borehole measurements and scientific publications. In addition to numerous well loggings, EPS1 has been completely cored, so that more than 800 m of granitic core samples are available. The present study focuses on core data, SGR logs as well as fracture data derived from image logs (UBI).

2 The Neural Network

The neural network used for this study is based on the supervised Kohonen algorithm (Kohonen, 1984), which works with a self-organizing map (SOM), which is a 2-dimensional representation of the multidimensional network.. With this algorithm (part of the software Techlog64 from Schlumberger) a neural network (NN) can be trained on a reference dataset to learn the relationship between different parameters (Figure 2 a). This knowledge can afterwards be applied on other datasets to derive unknown parameters (Figure 2 c). For the present study the NN was trained on the relationship between the appearance of clay-filled fractures derived from the granitic EPS1 core and the SGR logs of this well. The application on the remaining wells GPK1-4 allows for the creation of synthetic logs indicating the density of clay-filled fractures along the wells. We refer to these logs as synthetic clay content logs (SCCL).

The maximum density of clay filled fractures in EPS1 is 9 fracs/m. For the application of the SOM the Techlog software requires grouping of the data. We chose 5 different groups corresponding to

Group 1: 0-1.8 fracs/m

Group 4: 5.5-7.2 fracs/m

Group 2: 1.9-3.6 fracs/m

Group 5: 7.3-9 fracs/m

Group 3: 3.7-5.4 fracs/m

The network was run with 5'000'000 iterations and 25 x 25 nodes SOM. For a quality check, the trained network was applied on the SGR data of EPS1 and the results were compared with the reference data. This way, wrongly indexed nodes could be identified and re-index correctly. Afterwards the network could be applied on the remaining wells.

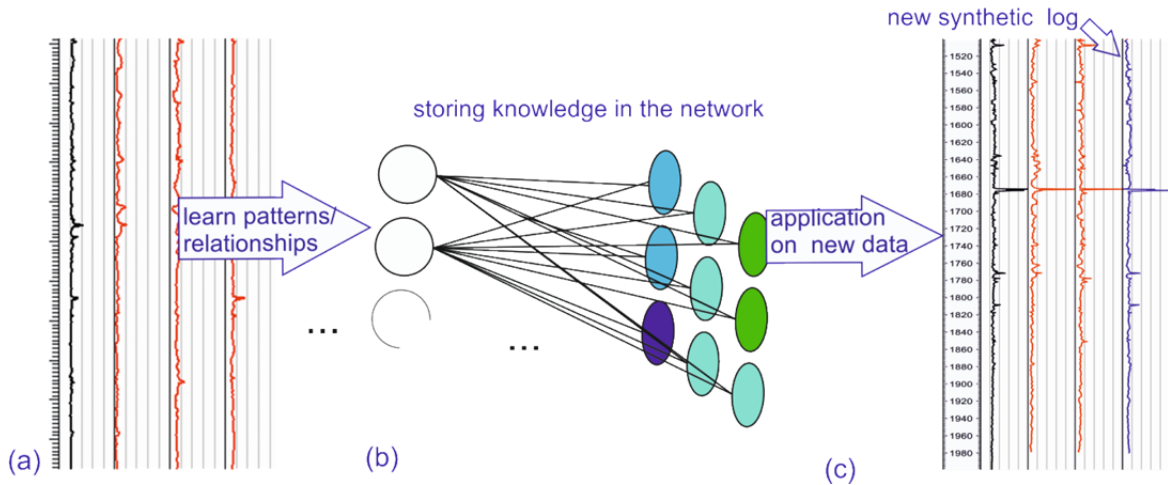


Figure 2: Schematic overview of the neural network procedure. a) The network is trained on a reference dataset to learn the correlation between different parameters. b) The acquired knowledge is stored in a self-organizing map, which is a 2D representation of the whole network. C) The knowledge is applied on a new dataset, whereas one parameter is unknown. The unknown parameter is synthetically created.

3 Results

Figure 3 shows the input logs used for the NN analysis. The resulting SCCL can be directly compared to the reference data labeled Index-SCCL. There is big accordance between the real data and the synthetic log generated by the NN. Approximately 74 % of the synthetic log exactly reproduces the reference data and more than 90 % of the log deviate between 0 and 3.6 fracs/m from the Index-SCCL (Table 1). The application on the remaining wells will be published elsewhere, but the comparison between the results and research data on seismic behavior and reservoir hydraulics are promising with respect to clay prediction.

Table 1: Statistics of the deviation of the generated SCCL compared to the index. The groups correspond to the groups defined for the density of clay filled fractures.

deviation [groups]	portion [%]
0	74.32
1	16.38
2	5.64
3	3.06
4	0.60

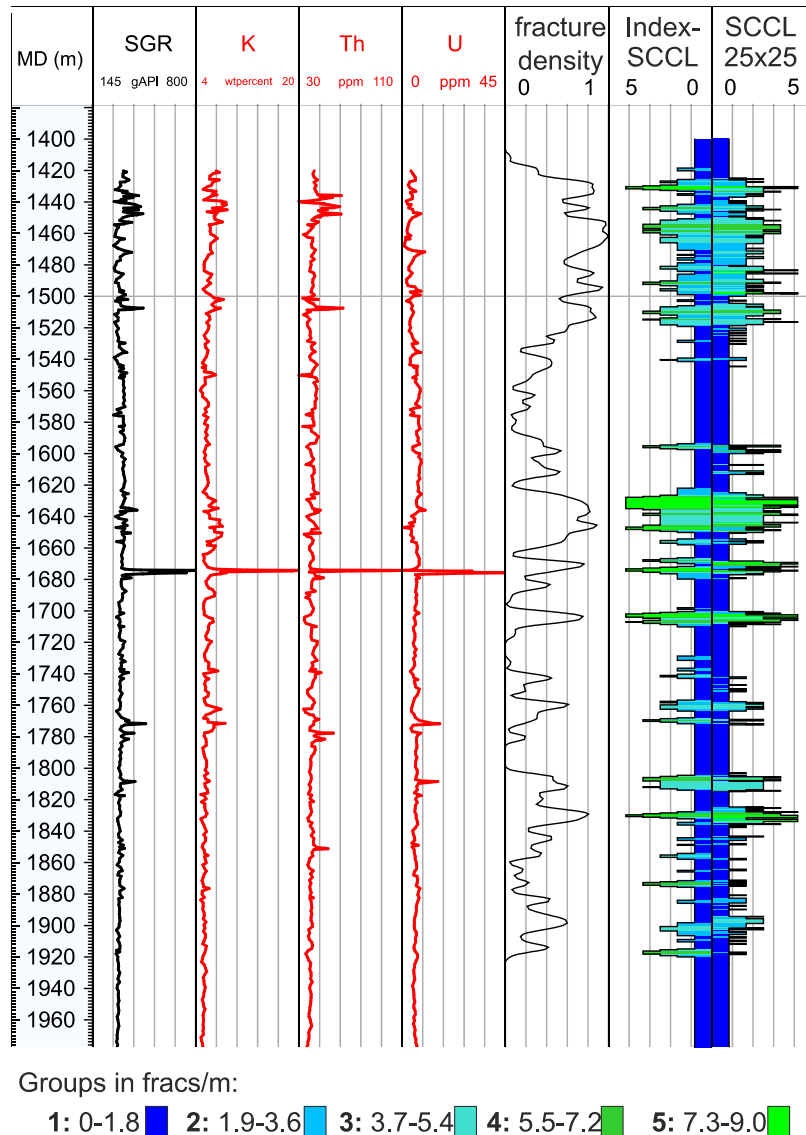


Figure 3: The input logs (SGR, K, Th, U, Index-SCCL) of EPS1 and the SCCL generated by the network directly comparable to the Index-SCCL.

4 Conclusion and Outlook

With the present study the applicability of the NN analysis for clay localization along (geothermal) boreholes has been demonstrated. The synthetically generated clay density log is to more than 74 % consistent with the reference data and more than 90 % of the SCCL deviates less than 3.6 fracs/m from the index.

Application on wells with unknown clay fracture density could not be in this text here but will be published elsewhere. The results are much in agreement with earlier studies on weak and hydraulically active zones.

The applicability of the introduced NN based method is not restricted to the study side, but it can also be used elsewhere. Because it needs only little input, this easily applicable technique is of great advantage for the assessment of the reservoir productivity. It can also ease the planning process of reservoir stimulation and production and thus mitigating the risk for small earthquakes.

Complementary laboratory studies will further investigate the relationship between the appearance of clay inside fractures and the rock mechanical properties.

Acknowledgements

The authors are grateful to the EnBW for the financial support of the research, to the BRGM for providing the Soultz structural data and core pictures from EPS1, and to the GEIE EMC for providing the various geophysical data from the Soultz wells.

List of Figures

Figure 1: The alteration of the Soultz granite around a fracture, core picture from the well EPS1.....	2
Figure 2: Schematic overview of the neural network procedure. a) The network is trained on a reference dataset to learn the correlation between different parameters. b) The acquired knowledge is stored in a self-organizing map, which is a 2D representation of the whole network. C) The knowledge is applied on a new dataset, whereas one parameter is unknown. The unknown parameter is synthetically created.....	4
Figure 3: The input logs (SGR, K, Th, U, Index-SCCL) of EPS1 and the SCCL generated by the network directly comparable to the Index-SCCL.....	5

List of Tables

Table 1: Statistics of the deviation of the generated SCCL compared to the index. The groups correspond to the groups defined for the density of clay filled fractures.	4
--	---

References

- [1] Kohonen, T., 1984. Self-organization and associative memory, 1 edn, Vol. 8, pp. 255, Springer, Berlin.
- [2] Schleicher, A., Warr, L. & van der Pluijm, B., 2009. On the origin of mixed-layered clay minerals from the San Andreas Fault at 2.5–3 km vertical depth (SAFOD drillhole at Parkfield, California), *Contributions to Mineralogy and Petrology*, 157, 173-187.
- [3] Vrolijk, P. & van der Pluijm, B.A., 1999. Clay gouge, *Journal of Structural Geology*, 21, 1039-1048.

Feststoffelektrolyte für Hochtemperatur-Lithiumionenbatterien

Herstellung und Charakterisierung von Feststoffelektrolyten und darauf basierenden Zellen

Yuantao Cui, C. Ziebert, M, Rohde

Karlsruher Institut für Technologie, IAM-AWP,
76131 Karlsruhe, Deutschland, E-mail: yuantao.cui@kit.edu.

Kurzfassung

Feststoffelektrolyte in Lithiumionenbatterien weisen im Vergleich zu flüssigen Elektrolyten die Vorteile von höherer Sicherheit und thermischer Stabilität auf. LATP ($\text{Li}_{1+x}\text{Al}_x\text{Ti}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$) und LAGP ($\text{Li}_{1+x}\text{Al}_x\text{Ge}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$) wurden als Kandidaten für den Einsatz in Lithiumionenbatterie gewählt. LATP- und LAGP-Pulver wurden durch das Melt-Quench-Verfahren hergestellt. Glaskeramik-Proben wurden durch Ofensintern hergestellt. Ihre thermischen Eigenschaften wurden mittels DSC, Dilatometer und Laserflash untersucht. Die Ionischen Leitfähigkeiten wurden mittels Impedanzspektroskopie gemessen. Es wurde erste Testzellen mit Feststoffelektrolyt gebaut und galvanostatische Test durchgeführt.

Stichworte

Feststoffelektrolyte, Lithiumionenbatterie, LATP, LAGP, Ionenleitfähigkeit.

1 Einleitung

Li-Ionen-Batterien weisen im Vergleich zu anderen Sekundärbatterien die Vorteile von hoher Energiedichte und der Abwesenheit des Memory-Effektes auf. Die heutigen Li-Ionen-Batterie benutzen aprotische Flüssigkeiten als Lösungsmittel für Elektrolyte, welche aber ein Sicherheitsrisiko bergen. Die Feststoffelektrolyte aus Keramikwerkstoff sind hingegen thermisch viel stabiler[1].

Ihre Ionenleitfähigkeit ist aber kleiner bei Raumtemperatur im Vergleich zu flüssigen Elektrolyten. Die Ionenleitfähigkeit nimmt stark mit der Temperatur zu, da der Ionentransport im Festkörper der Arrhenius-Gleichung gehorcht. Daher kommt die Idee von Hochtemperaturbatterie.

Die Materialien LATP ($\text{Li}_{1+x}\text{Al}_x\text{Ti}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$) und LAGP ($\text{Li}_{1+x}\text{Al}_x\text{Ge}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$) wurden für diese Arbeit gewählt, weil sie relativ gute Ionenleitfähigkeit und thermische Stabilität aufweisen[2]. Sie besitzen

eine NaSICON-Struktur, deren Skelett aus eckenverknüpften PO_4 -Tetraedern und TiO_6 - bzw. GeO_6 -Oktaedern besteht. Entlang der c-Achse bildet es Tunnel für die Li-Diffusion.

Ein Ziel der Arbeit ist es, einen Zusammenhang zwischen den Prozessparametern der Sintertechnologie, dem Gefüge und der Ionenleitfähigkeit der glaskeramischen Feststoffelektrolyten aufzuzeigen. Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeit ist die Untersuchung der Stabilität der Li-Ionenleiter bei höheren Temperaturen.

2 Experimente

Die Ausgangsmaterialien Li_2CO_3 (99,0%), Al_2O_3 , P_2O_5 (99,1%), TiO_2 (99,5%, für LATP) , GeO_2 (99,98%, für LAGP) wurden gewogen, in Al_2O_3 -Tiegeln durchgemischt und in einem Kammerofen auf 1450°C erhitzt. Die Schmelze wurde direkt nach der Entnahme aus dem Ofen auf eine Eisenplatte abgegossen und mit einer zweiten Eisenplatte zu einer dünnen durchsichtigen Scheibe gepresst und abgeschreckt. Durch diesen Abschreckvorgang bricht die Scheibe schnell in Stücke. Die Stückchen wurde in einer Planeten-Kugelmühle mit Al_2O_3 -Kugeln und –Mahlbecher gemahlen. Ein Teil des LAGP-Pulvers wurde noch bei 700°C kalziniert. Das Pulver wurde bei etwa 670MPa in Plättchen gepresst. Schließlich wurden die Presslinge gesintert. Dabei wurde die Sinteremperatur und –zeit variiert. Die Heizrate betrug 5K/min.

Die chemische Zusammensetzung der Pulver wurde analysiert(Tabelle 1). Das Sinterverhalten der gepressten Probe wurden mit dem Sinterdilatometer DIL 402E der Firma Netzsch untersucht. DSC-Kurven wurden mit der DSC 404C der Firma Netzsch aufgenommen. Mit einem LCR-Messgerät ST 2826 von Sourcetric wurde die Impedanzspektren bis zu 250°C gemessen. Die Gefüge der gesinterten Probe wurde durch REM-Aufnahme und Röntgendiffraktometrie (XRD) analysiert.

Anschließend wurden Testzellen mit LAGP gebaut. Das Kathodenmaterial LiCoO_2 , dünne LAGP-Plättchen und Li-Metallplättchen als Anode wurden in eine Swagelokzelle eingebaut. Die Zelle wurde mittels des Zyklirers ARBIN BT2000 getestet.

Tabelle 1: chemische Zusammensetzung von 3 Pulvern

		Li	O	Al	P	Ti	Ge
LATP-Pulver	Massen-%	2,180	51,900	4,730	24,300	18,000	
	Atom-%	6,41	66,28	3,57	16,04	7,68	
LAGP-Pulver 1	Massen-%	2,860	47,700	3,750	22,200	0,828	22,600
	Atom-%	8,60	62,40	2,90	19,20	0,36	6,50
LAGP-Pulver 2	Massen-%	2,820	46,300	3,980	22,520		23,290
	Atom-%	9,04	64,39	3,28	16,18		7,12

3 Ergebnisse

3.1 LATP

Die DSC-Kurve (Abbildung 1) wurde bis 1200°C aufgenommen. Bei 670°C liegt der Rekrystallisationspeak. Bei 1090°C gibt es einen anderen kleinen Peak. Auf der Abkühlkurve sind 2 Peaks bei 841,9°C und 890,7°C zu erkennen. In Abbildung 2 werden die Längenänderungen der LATP-Proben bei verschiedenen Sinteremperaturen gezeigt. Die maximale Verdichtung wurde bei 1000°C erreicht. Die gemessene Probenichte stimmt jedoch nicht mit den Ergebnissen des Dilatometers überein. Die bei 900°C gesinterte Probe weist eine etwas größere Dichte auf, obwohl das Dilatometer nur eine kleine Schrumpfung zeigt. Ursache dafür ist die offene Porosität, da diese Poren bei der Archimedischen Dichtebestimmung durch die Flüssigkeit gefüllt sind.

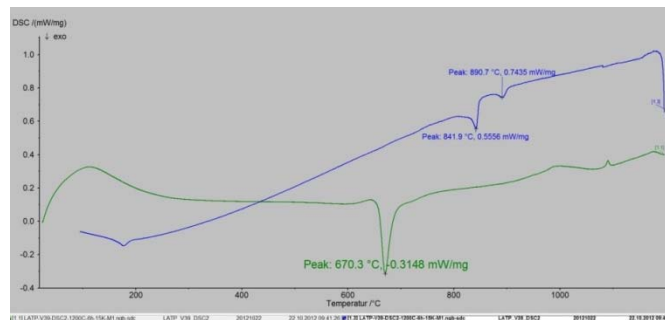


Abbildung 1: DSC-Kurve von LATP-Pressling, Grün: Aufheizlinie, blau: Abkühlkurve

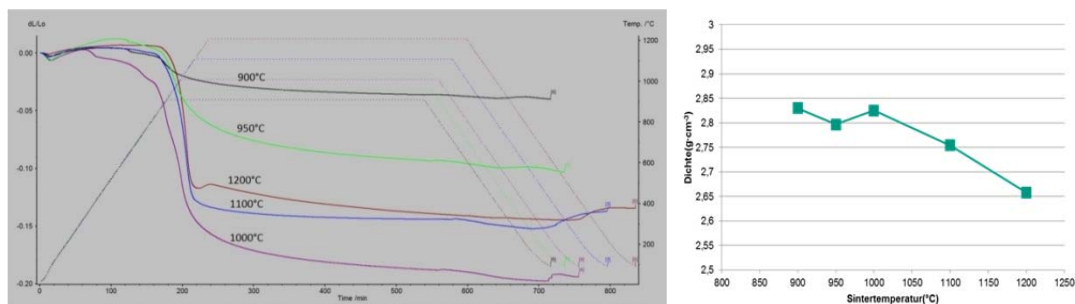


Abbildung 2: Dilatometerkurve bei verschiedenen Sinteremperaturen (links) und Dichte der jeweiligen Probe aufgetragen gegen die Sintertemperatur (rechts).

In Abbildung 3 wurde die Logarithmische Ionenleitfähigkeit gemessen bei verschiedenen Temperatur gegen $1000/T$ aufgetragen. Die bei 1000°C für 6h gesinterte Probe zeigt die höchste Ionenleitfähigkeit. Die Aktivierungsenergie für den Ionentransport wurde berechnet. Sie nimmt mit steigender Sintertemperatur ab von 0,260eV bei 900°C bis zu 0,236eV bei 1200°C. Die bei 1100°C in Helium gesinterten Probe zeigt eine geringe Ionenleitfähigkeit und eine größere Aktivierungsenergie (0,37eV). In einer inerten Atmosphäre kann mehr Ti^{3+} vorhanden sein [3], was die Ionenleitfähigkeit negativ beeinflussen könnte.

Von den gesinterten LATP-Proben wurden Schriffe angefertigt und REM Bilder wurden aufgenommen (Abbildung 4). Auf dem 900°C Bild kann man die offene Porosität gut erkennen. Ab 1000°C ist die Probe schon viel kompakter gesintert und eine zweite dunkle Phase ist erkennbar. Die dunkle Phase hat sich im 1100°C-Bild vergrößert und bildet sich auch entlang der Korngrenze. Energiedispersive Röntgenspektroskopie(EDX) und XRD weisen darauf hin, dass diese Phase von AlPO_4 gebildet wird. Die große AlPO_4 -Ausscheidungen könnten auch eine Ursache für die kleinere Ionenleitfähigkeit der bei höherer Temperatur gesinterten Proben sein.

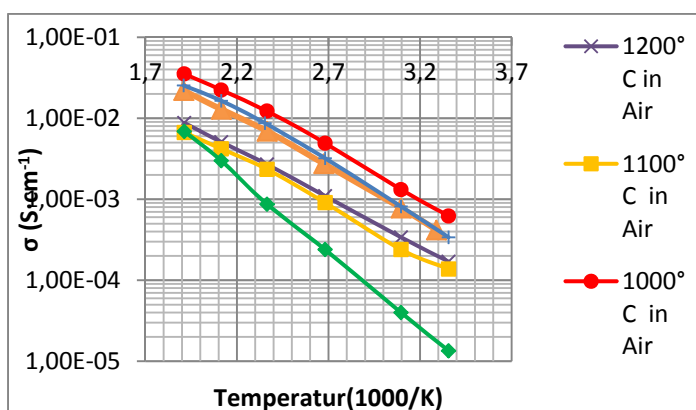


Abbildung 3: Ionenleitfähigkeit der Proben, die 6 h bei verschiedenen Temperaturen und Atmosphären gesintert wurden.

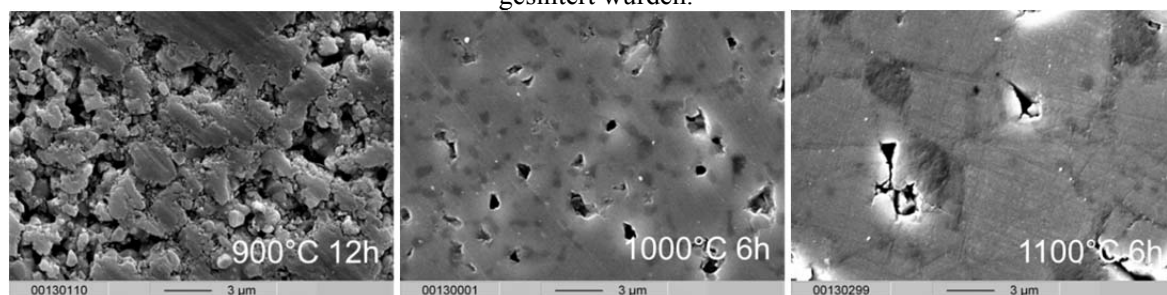


Abbildung 4: REM-Schliffbilder der gesinterten LATP-Proben

3.2 LAGP

Für das LAGP-Pulver wurden prinzipiell die gleiche Untersuchungen durchgeführt. Beim Sintern expandiert die Probe ab etwa 600°C. Am Ende hat die Probe, statt zu schrumpfen, um etwa 30% expandiert. Entsprechend ist ihre Ionenleitfähigkeit auch relativ schlecht. Um die Expansion zu vermeiden, wurde das Pulver bei 700°C für 3 Stunden kalziniert. Dadurch wurde die maximale Verdichtung bei 800°C erreicht. Ab 900°C expandiert die Probe wieder (siehe Abbildung 5).

Die bei 800°C für 6h gesinterte Probe zeigt auch die beste Ionenleitfähigkeit (siehe Abbildung 6). Ihre Aktivierungsenergien für Ionentransport liegen zwischen 0,29eV und 0,31eV.

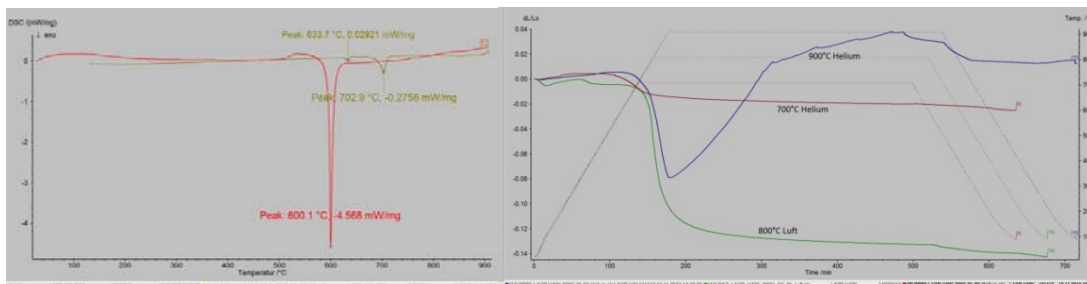


Abbildung 5: links: DSC-Kurve bis 900°C von LAGP-Pulver 2. rechts: Dilatometerkurve bei verschiedenen Sintertemperaturen

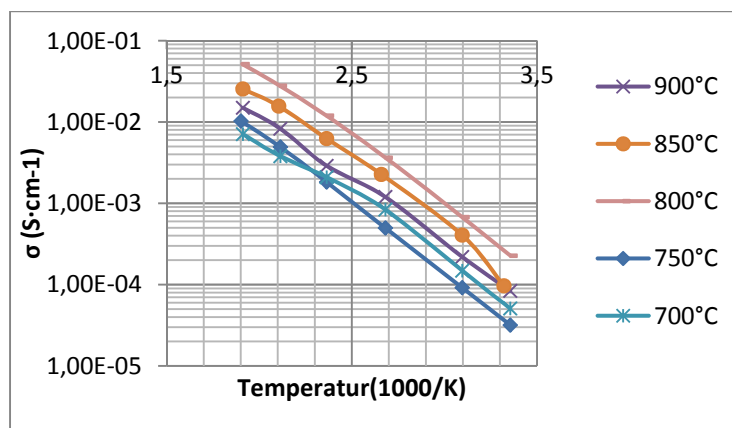


Abbildung 6: Ionenleitfähigkeit der Proben aus LAGP-Pulver 1, die 6 h bei verschiedenen Temperatur gesintert wurden.

3.3 Testzelle

Die Testzellen wiesen einen schlechten Kontakt zwischen dem Feststoffelektrolyt und dem Kathodenmaterial auf. Um den Kontakt zu verbessern wurde die Kathode mit konventionellem flüssigem Elektrolyt benetzt. Die Testzelle mit LAGP-Feststoffelektrolyt zeigt ein ungewöhnliches Ladeverhalten (Abbildung 7). Die Ladespannung steigt zuerst steil auf etwa 3,97V. Dann läuft die Kurve durch ein kurzes Plateau und fällt wieder auf 3,92V und bleibt für lange Zeit konstant. Aber nur ein kleiner Teil des geladenen Stroms konnte wieder entladen werden.

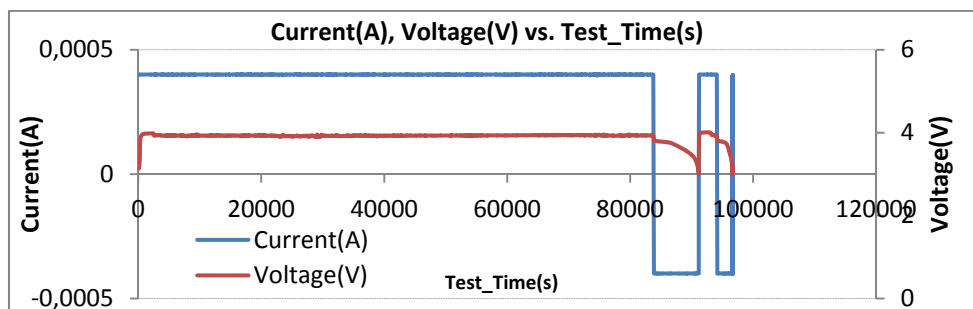


Abbildung 7: Strom und Spannung gegen die Ladezeit

Die Zelle wurde post-mortem geöffnet. Es hat sich zwischen dem Elektrolyt und der Li-Anode eine schwarze Schicht ausgebildet, die an beiden Komponenten haftet. Anscheinend hat eine Grenzflächenreaktion stattgefunden, die nicht zu den Elektrochemischen Reaktionen der Batteriezelle gehört.

4 Zusammenfassung und Ausblick

Die beste gefundene Sinterprozedur für LATP ist 1000°C 6h und 800°C 6h für LAGP. Es wurde gezeigt, dass kompakte gesinterte Proben eine bessere Ionenleitfähigkeit zeigen und große Bereiche von AlPO₄ Ausscheidungen sich negativ auf die Ionenleitfähigkeit auswirken. Von Interesse sind auch die Einflüsse der verschiedenen Phasen in der Matrix und die chemischen Zusammensetzung.

Für die Testzellen soll die ungewünschte Nebenreaktion untersucht werden. Des Weiteren wird versucht, den Kontakt zwischen Kathode und Feststoffelektrolyt zu verbessern.

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: DSC-Kurve von LATP-Pressling, Grün: Aufheizlinie, blau: Abkühllinie	3
Abbildung 2: Dilatometerkurve bei verschiedenen Sintertemperaturen (links) und Dichte der jeweiligen Probe aufgetragen gegen die Sintertemperatur (rechts).....	3
Abbildung 3: Ionenleitfähigkeit der Proben, die 6 h bei verschiedenen Temperaturen und Atmosphären gesintert wurden.	4
Abbildung 4: REM-Schliffbilder der gesinterten LATP-Proben.....	4
Abbildung 5: links: DSC-Kurve bis 900°C von LAGP-Pulver 2. rechts: Dilatometerkurve bei verschiedenen Sintertemperaturen.....	5
Abbildung 6: Ionenleitfähigkeit der Proben aus LAGP-Pulver 1, die 6 h bei verschiedenen Temperatur gesintert wurden.	5
Abbildung 7: Strom und Spannung gegen die Ladezeit	5

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: chemische Zusammensetzung von 3 Pulvern	2
--	---

Literaturverzeichnis

- [1] Jeffrey W. Fergus, Journal of Power Sources 195 (2010) 4554–4569.
- [2] Xiaoxiong Xu, Zhaoyin Wen, w Xiangwei Wu, Xuelin Yang, and Zhonghua Gu, J. Am. Ceram. Soc., 90 [9] 2802–2806 (2007).
- [3] B.V.R. Chowdari, G.V. Subba Raob, G.Y.H. Leea, Solid State Ionics 136–137 (2000) 1067–1075.

Modularer Multilevel Matrix Umrichter für flexible und hocheffiziente Generatorsysteme

Felix Kammerer, Johannes Kolb, Mario Gommeringer, Michael Braun

Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Elektrotechnisches Institut (ETI),

76131 Karlsruhe, Deutschland, E-mail: felix.kammerer@kit.edu, Telefon: +49(0)721/608-42461

Kurzfassung

Der Modulare Multilevel Matrix Umrichter eignet sich aufgrund seiner Skalierbarkeit durch den Einsatz identischer Zellen besonders für flexible und hocheffiziente Generatorsysteme hoher Leistung. Er ermöglicht zusammen mit einem doppelgespeisten Asynchrongenerator den Bau von drehzahlvariablen Kraftwerken. Diese zeichnen sich durch eine höhere Effizienz der Turbine im Teillastbereich sowie einer dynamischeren Wirk- und Blindleistungsregelung zur Netzstabilisierung aus. Weitere Vorteile sind die erzeugten mehrstufigen Spannungen mit geringen Oberschwingungen, die unerwünschte Filteranlagen entbehrlich werden lassen sowie die intrinsisch vorhandene Redundanz, welche eine hohe Verfügbarkeit des Gesamtsystems sicherstellt. Das System ermöglicht daher die Flexibilisierung des Kraftwerksparks und die Einbindung erneuerbarer Energieerzeugungsanlagen ins Verbundnetz.

Stichworte

Leistungselektronik, Modularer Multilevel Matrix Umrichter, doppelgespeister Asynchrongenerator

1 Einleitung

Abb. 1 zeigt den Modularen Multilevel Matrix Umrichter (M3C¹) zur Rotorkreispeisung eines doppelgespeisten Asynchrongenerators (DFIG²) [1]. Der Stator der DFIG ist direkt an das Netz angeschlossen und ermöglicht somit den direkten Leistungsaustausch ohne weitere Energiewandlungsstufen. Der M3C verbindet den Rotorkreis mit dem Netz und ermöglicht die Regelung der Rotorströme durch Einspeisung eines geeigneten Rotorspannungssystems. Die Regelung der Rotorströme erlaubt die unabhängige Wirk- und Blindleistungsregelung der DFIG, z.B. durch den Einsatz einer statorflussorientierten Regelung [2].

¹ M3C = Modular Multilevel Matrix Converter

² DFIG = Doubly Fed Induction Generator

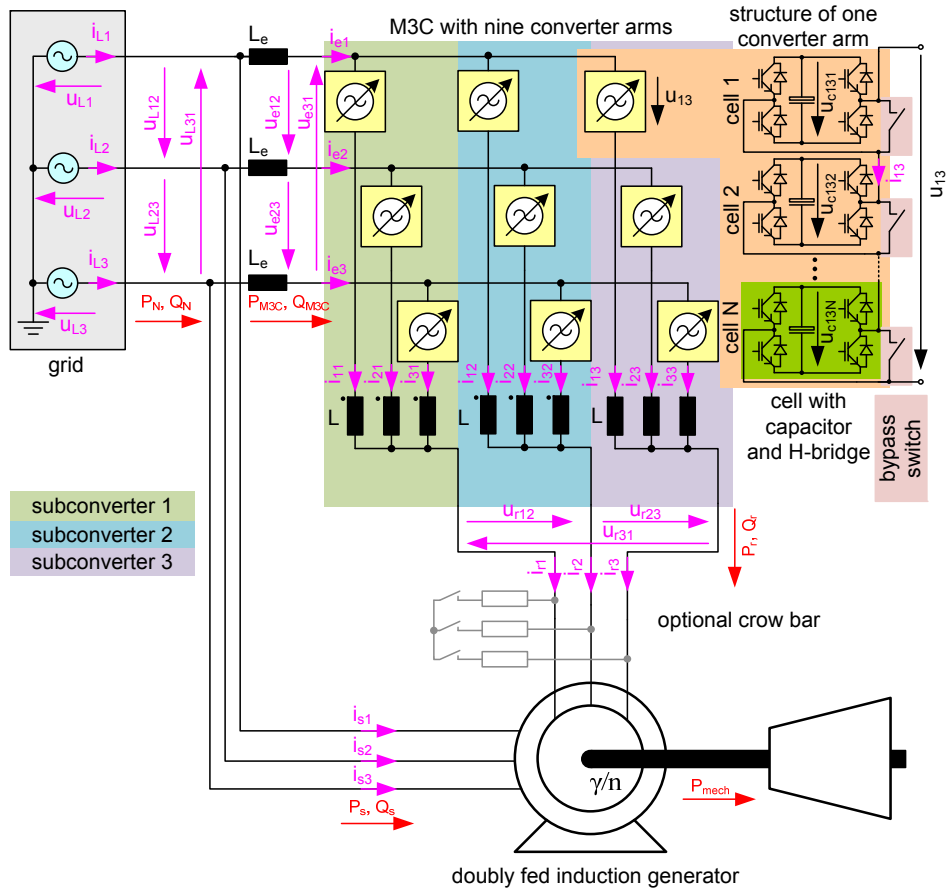


Abb. 1: Modularer Multilevel Matrix Umrichter (M3C) zur Rotorkreispeisung eines doppeltgespeisten Asynchronengenerators (DFIG)

Der M3C (Abb. 1) besteht aus drei Teilumrichtern³, welche direkt, über optionale Netzdrosseln L_e oder einen Standardtransformator an das Drehspannungsnetz angeschlossen sind. Jeder Teilumrichter verbindet durch drei Umrichterzweige⁴ mit den dazugehörigen Zweigdrosseln L die drei Eingangsphasen des Netzes mit einer Phase des Rotorkreises. Die Zweige selbst sind als Reihenschaltung von N Zellen⁵ ausgeführt, die aus Vierquadrantenstellern mit einem zugehörigen DC-Speicherkondensator bestehen. Zur Erhöhung der Verfügbarkeit können defekte Zellen mit einem Überbrückungsschalter⁶ kurzgeschlossen werden, um einen Weiterbetrieb des M3C im Fehlerfall zu ermöglichen. Eine detaillierte Beschreibung des M3C und seiner Regelung kann der Literatur [3-5] entnommen werden.

³ engl. subconverter
⁴ engl. converter arm
⁵ engl. cell
⁶ engl. bypass switch

2 Vorteile der Rotorkreispeisung durch den M3C

2.1 Vorteile des Doppelgespeisten Asynchrongenerators

Der Einsatz eines DFIG anstelle eines konventionellen Synchrongenerators mit fester Drehzahl bietet insbesondere die folgenden Vorteile [6]:

- Durch die Anpassung der Drehzahl an den Arbeitspunkt kann ein höherer Turbinenwirkungsgrad insbesondere im Teillastbereich erreicht werden.
- Ein Großteil der Leistung wird vom Stator ohne weitere Energiewandlungsstufen direkt ans Netz geliefert, die Bauleistung des Umrichters im Rotorkreis entspricht daher üblicherweise nur ca. 10-30% der Nennleistung der Maschine, abhängig vom gewünschten Drehzahlbereich.
- Durch Nutzung des Trägheitsmoments der Welle kann eine hochdynamische Wirk- und Blindleistungsregelung zur Netzstabilisierung erreicht werden.

Als Umrichter für den Rotorkreis kommen in heutigen Anlagen insbesondere netzgeführte Direktumrichter und Drei-Punkt Spannungszwischenkreisumrichter [6-7] zum Einsatz, welche allerdings prinzipielle Nachteile aufweisen:

- Die Skalierbarkeit der Schaltungen ist stark eingeschränkt und beschränkt sich im Wesentlichen auf die direkte Reihen- und Parallelschaltung von Halbleitern. Dies limitiert die maximal erreichbaren Anlagenleistungen.
- Die zur Erhöhung der Verfügbarkeit notwendige Redundanz kann nur durch aufwändige technische Maßnahmen erreicht werden und erfordert eine umfangreiche Überdimensionierung des Umrichters.
- Zur Einhaltung der Netzanschlussbedingungen sind aufwändige Filteranlagen zur Kompensation von Oberschwingungen und Blindleistung notwendig.

Durch den Einsatz des M3C können die genannten Nachteile vermieden werden, so dass zusammen mit der DFIG ein flexibles, leistungsfähiges und in der Größe beliebig skalierbares Generatorsystem entsteht. Dies ermöglicht den Einsatz z.B. in Windkraftanlagen, Pumpspeicherkraftwerken sowie drehzahlvariablen Wärmekraftwerken, die flexibel und effizient auf Angebotsschwankungen von regenerativen Energiequellen reagieren müssen.

2.2 Skalierbarkeit des M3C

Durch die Reihenschaltung der Zellen in den Umrichterzweigen kann der M3C beliebig in der Spannung skaliert werden. Zur Erhöhung der Zweigspannung, um höhere Ein- und

Ausgangsspannungen zu erreichen kann einfach eine größere Anzahl von Zellen in Reihe geschaltet werden. Das Spannungsniveau der einzelnen Zellen ändert sich dadurch nicht, so dass sich die Auslegung der Halbleiterschalter und des Kondensators nicht ändern. Weiter erlaubt die Skalierbarkeit daher die Umsetzung von Hoch- und Mittelspannungsumrichtern mit Bauteilen niedriger Spannungsklassen.

Zur Erhöhung der Stromtragfähigkeit können Halbleiter auf Zellebene parallelisiert werden. Alternativ dazu können ganze Umrichterzweige oder M3Cs über zusätzliche Drosseln zusammengeschaltet werden, um die geforderten Ströme bei vorhandener Zellauslegung zu erreichen.

2.3 Redundanz des M3C

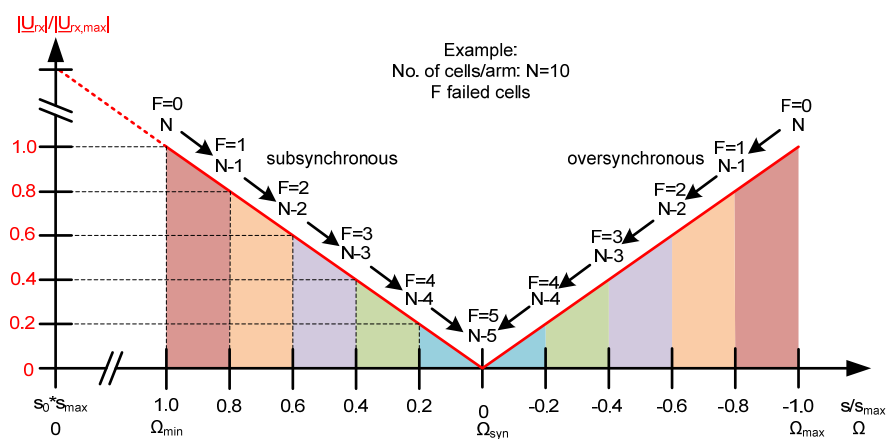


Abb. 2: Reduzierung der Ausgangsspannung des M3C bei Zellfehlern [1]

Um den Weiterbetrieb des M3Cs im Fehlerfall (z.B. Halbleiterdefekte) zu sichern, können einzelne defekte Zellen mit einem Überbrückungsschalter aus dem Zweig herausgeschaltet werden (Abb. 1). Durch eine oder mehrere zusätzlich installierte Zellen pro Zweig kann die defekte Zelle im Fehlerfall ersetzt werden. Damit kann weiterhin die volle Zweigspannung gebildet und die volle Umrichterleistung erreicht werden.

Alternativ dazu kann der M3C ohne zusätzliche Zellen mit einer geringeren Ausgangsspannung weiterbetrieben werden. Bei der Rotorkreispeisung der DFIG reduziert sich in diesem Fall der nutzbare Drehzahlbereich geringfügig (Abb. 2). Bei höheren Zellenzahlen N pro Zweig fällt dieser Effekt aber nicht besonders ins Gewicht und kann für die meisten Anwendungen bis zum nächsten geplanten Wartungstermin toleriert werden. Vorteil ist dabei, dass im verbleibenden Drehzahlbereich keine Einschränkung der Leistung erfolgt, da weiterhin der volle Rotorstrom zur Verfügung steht.

2.4 Spannungsqualität des M3C

Der M3C erzeugt aufgrund seiner Zellenstruktur fein gestufte Zweigspannungen, die zu nahezu sinusförmigen Ein- und Ausgangsspannungen führen. Dies lässt insbesondere bei höherer Anzahl von N Zellen pro Zweig unerwünschte Oberschwingungsfilter auf der Netzseite entbehrlich werden. Weiterhin ist zu beachten, dass Oberschwingungen im Rotorstrom ausgelöst durch eine nichtideale Umrichterspeisung zu Zwischenharmonischen auf der Netzseite führen, welche nicht gefiltert werden können und das Netz sowie die parallel angeschlossenen Verbraucher belasten. Diese Probleme können durch die Benutzung des M3Cs nahezu gänzlich vermieden werden.

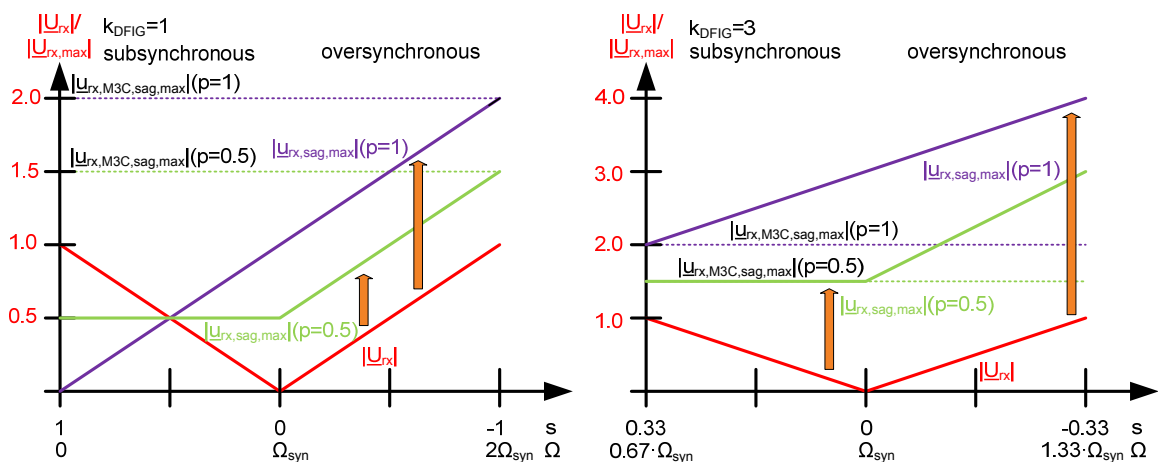


Abb. 3: Verhalten der DFIG und des M3Cs bei dreiphasigen Netzspannungseinbrüchen [1]

2.5 Verhalten bei Netzspannungsfehlern

Bei Netzspannungseinbrüchen treten bei der DFIG im Rotorkreis gefährliche Überspannungen auf [8], die vom Umrichter oder über Kurzschließer⁷ beherrscht werden müssen. Der M3C hat hier im Vergleich zu anderen Umrichtertopologien Vorteile, da er die für die Eingangsseite nicht mehr benötigte Zweigspannung der Rotorspannung zuschlagen kann. Diese kann dann im Extremfall bei einem vollständigen dreiphasigen Spannungseinbruch temporär doppelt so groß werden wie im Normalbetrieb. Abb. 3 stellt die Zusammenhänge beim dreiphasigen Spannungseinbruch für die Wicklungszahlenverhältnisse $k_{DFIG}=1$ und $k_{DFIG}=3$ dar. Die roten Linien stellen die Rotorspannung im Normalbetrieb da, die dann auf die grüne (50% Spannungseinbruch) oder lila (100% Spannungseinbruch) Linie wechselt. Gestrichelt sind die jeweils maximal erreichbaren Ausgangsspannungen des M3C während des Spannungseinbruchs

⁷ engl. crow bar

dargestellt. Man sieht, dass bei $k_{\text{DFIG}}=1$ alle Fehler prinzipiell ohne Kurzschließer beherrschbar sind, bei höheren Windungszahlenverhältnissen gilt das jedoch nur noch eingeschränkt. Ggf. kann jedoch ein Kurzschließer mit höherem Widerstand verwendet werden, was den Kurzschlussstrom und die Stoßmomente auf der Welle reduziert. Weitere Fehlerfälle (z.B. ein- und zweiphasige Spannungseinbrüche) müssen noch gesondert untersucht werden.

3 Zusammenfassung und Ausblick

Die Untersuchungen lassen eine nahezu ideale Eignung des Modularen Multilevel Matrix Umrichters für die Rotorkreispeisung von doppeltgespeisten Asynchrongeneratoren erwarten und heben prinzipielle Einschränkungen bisher verwendeter Umrichter auf. Damit steht ein beliebig skalierbares, fehlertolerantes und netzfreundliches Generatorsystem für den Einsatz in flexiblen drehzahlvariablen Kraftwerken zur Verfügung. In weiteren Forschungsarbeiten soll zusätzlich der experimentelle Nachweis der genannten Vorteile erbracht werden.

Literaturverzeichnis

- [1] F. Kammerer, M. Gommeringer, J. Kolb, M. Braun: *Benefits of Operating Doubly Fed Induction Generators by Modular Multilevel Matrix Converters*; PCIM Europe, 14.-16.Mai 2013 Nürnberg
- [2] B. Hopfensperger, D.J. Atkinson, R.A. Lakin: *Stator-flux-oriented control of a doubly fed induction machine with and without position encoder*. Electric Power Applications, IEE Proceedings, 147(4):241 –250, jul 2000
- [3] F. Kammerer, J. Kolb, M. Braun: *A novel cascaded vector control scheme for the Modular Multilevel Matrix Converter*; IECON 2011 Melbourne, Nov. 2011
- [4] F. Kammerer, J. Kolb, M. Braun: *Fully decoupled current control and energy balancing of the Modular Multilevel Matrix Converter*; EPE-PEMC 2012 ECCE Europe, Novi Sad, Serbia, 2012
- [5] F. Kammerer, J. Kolb, M. Braun: *Optimization of the passive components of the Modular Multilevel Matrix Converter for Drive Applications*; PCIM Europe, Nuremberg, Germany, 2012.
- [6] A. Bocquel, J. Janning: *Analysis of a 300 MW variable speed drive for pump-storage plant applications*; In Power Electronics and Applications, 2005 European Conference on, pages 10 pp. – P.10, 0-0 2005.
- [7] PCS 8000 AC Excitation: *AC Excitation for hydro pump energy storage plants*; ABB, 2010-07-27
- [8] J. Lopez, P. Sanchis, X. Roboam, L. Marroyo: *Dynamic behavior of the doubly fed induction generator during three-phase voltage dips*; Energy Conversion, IEEE Transactions on, 22(3):709 – 717, sept. 2007.

Innovative Konzepte und Anwendungen von Modulare Multilevelumrichtern in zukünftigen Energiesystemen

Johannes Kolb, Felix Kammerer, Mario Gommeringer, Michael Braun

Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Elektrotechnisches Institut (ETI),

76131 Karlsruhe, Deutschland, E-mail: johannes.kolb@kit.edu, Telefon: +49(0)721/608-46251

Kurzfassung

Modulare Multilevelumrichter bieten aufgrund der Serienschaltung von identischen leistungselektronischen Zellen zahlreiche Vorteile in verschiedensten Anwendungen für zukünftige Energiesysteme. Sie ermöglichen insbesondere im Hochspannungsbereich flexible und skalierbare Lösungen zur effizienten Umwandlung von elektrischer Energie bis weit in den Megawattbereich hinein. Durch die Erzeugung von mehrstufigen Spannungen mit geringen Oberschwingungen werden Filtermaßnahmen minimiert und die Qualität der Stromeinprägung deutlich erhöht. Neben der Kopplung unterschiedlicher elektrischer Netze sowie der Anbindung von elektrischen Maschinen bzw. Generatoren eignen sich Modulare Multilevelumrichter besonders zur Integration von Batterien für die großtechnische Speicherung von elektrischer Energie. Diese Schaltungstopologie bildet damit eine mögliche Schlüsseltechnologie zur Bewältigung der technischen Herausforderungen in zukünftigen elektrischen Energiesystemen, insbesondere bei der Einbindung von regenerativen Energiequellen.

Stichworte

Leistungselektronik, Modulare Multilevelumrichter, Energieumwandlung, -verteilung, -speicherung

1 Einleitung und Grundlagen

Modulare Multilevelumrichter (MMC¹) bestehen aus einer beliebigen Anzahl von identischen Zellen, welche zu sogenannten Zweigen in Serie geschaltet werden, siehe Abb. 1. Jede Zelle beinhaltet einen Kondensator als Energiespeicher sowie eine daran angekoppelte Halb- oder Vollbrücke, welche durch leistungselektronische Halbleiterschalter wie z. B. IGBTs² oder MOSFETs³ mit antiparallel-geschalteter Diode gebildet wird. Durch die Ansteuerung dieser Schalter kann

¹ MMC = Modular Multilevel Converter

² IGBT = Insulated-Gate Bipolar Transistor

³ MOSFET = Metal Oxide Semiconductor Field-Effect Transistor

eine Zelle an ihren Klemmen entweder die positive Kondensatorspannung, die Spannung null oder bei Vollbrücken auch die negative Kondensatorspannung erzeugen. Durch die Serienschaltung der Zellen ergibt sich dann als Summe der einzelnen Zellspannungen ein feingestufteter, von der Anzahl der Zellen abhängiger, treppenförmiger Spannungsverlauf.

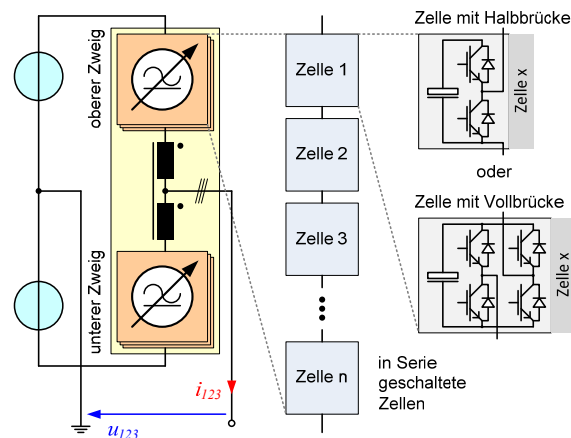


Abb. 1: Grundlegende Schaltungsstruktur von MMCs durch die Serienschaltung von identischen Zellen

Die Struktur der Zweige bietet folgende Vorteile im Vergleich zu konventionellen Konzepten [1]:

- Der streng modulare Aufbau mit identischen Zellen erleichtert die Fertigung und den Aufbau des Gesamtsystems und erlaubt ein Höchstmaß an Flexibilität und Skalierbarkeit von MMCs in der Spannung und Leistung.
- Hochspannungsumrichter können aufgrund der Serienschaltung der Zellen aus konventionellen Niederspannungs-Bauteilen aufgebaut werden.
- Durch die mehrstufige Spannungserzeugung enthalten die Spannungen und Ströme einen geringen Oberschwingungsgehalt, wodurch der Filteraufwand minimiert wird bzw. Filter vollkommen entbehrlich werden.
- Einzelne Zellen lassen sich ggf. im Fehlerfall durch Bypassschalter überbrücken, wodurch eine hohe Redundanz des Gesamtsystems erreicht werden kann.
- Niedrige Schaltfrequenzen in den Halbleiterschaltern erzeugen nur geringe Schaltverluste, was zu einem hohen Wirkungsgrad bei der Energieumwandlung beiträgt.

2 Schaltungsstrukturen und Anwendungen

Durch die Verschaltung der Zweige zu bestimmten Strukturen werden die unterschiedlichen Anwendungen von MMCs realisiert.

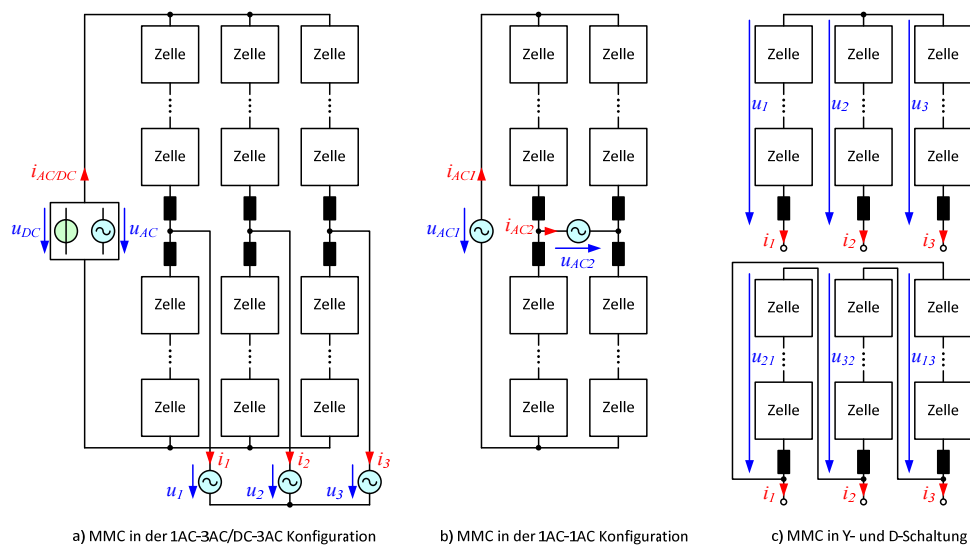


Abb. 2: Schaltungsstrukturen von MMCs zur Kopplung unterschiedlicher Netze, zur Speisung von Drehstrommaschinen sowie zur Blindleistungskompensation und Batterieanbindung in Drehstromnetzen

Bei der Hochspannungsgleichstromübertragung (HGÜ) wird die Umwandlung elektrischer Energie aus dem Drehstromnetz in Gleichstrom bzw. umgekehrt mit Hilfe der DC-3AC-Variante in Abb. 2a) realisiert. Diese Schaltung kann auch zur frequenz- und spannungsvariablen Speisung von elektrischen Drehstrommaschinen oder zur Anbindung von Generatoren an ein DC-Verteilnetz eingesetzt werden [1], [2]. Außerdem ermöglicht diese Schaltung unter der Voraussetzung, dass Vollbrücken in den Zellen eingesetzt werden, die Kopplung von ein- und dreiphasigen Netzen, z. B. für die Bahnstromversorgung.

Die 1AC-1AC-Variante in Abb. 2b) erlaubt die Kopplung von zwei unterschiedlichen Wechselspannungssystemen, z. B. für die Speisung von Transformatoren bei Mittelfrequenz.

Die beiden Schaltungen nach Abb. 2c) werden zur Einspeisung von Blindleistung in Kompensationseinrichtungen und zur Stabilisierung von Übertragungsnetzen eingesetzt. Sie erlauben die gezielte, dynamische Einspeisung von Oberschwingungsströmen und können Unsymmetrien in Drehstromnetzen ausgleichen. Darüber hinaus werden diese Schaltungen zur Anbindung von Batteriespeichern an Drehstromnetze verwendet, siehe Abschnitt 2.1.

Der Modulare Multilevel Matrix Umrichter (M3C) dient zur direkten Kopplung von zwei Drehstromsystemen, siehe Abb. 3. Diese Variante ist insbesondere für die Speisung von elektrischen Maschinen bei niedriger Frequenz geeignet, da sie im Vergleich zum DC-3AC-MMC in diesem Bereich keine aufwändige Symmetrierung der in den Zellen gespeicherten Energien erfordert. Besondere Vorteile dieser Schaltung ergeben sich bei der Kombination mit der doppelt-

gespeisten Asynchronmaschine (DFIG⁴), wo der M3C zur Speisung des Rotorkreises eingesetzt werden kann [3]. Eine weitere Variante des 3AC-3AC-Direktumrichters ist der sog. „Hexverter“, welcher die reduzierte Form des M3Cs mit nur sechs statt neun Zweigen zwischen den Klemmen der beiden Drehstromsysteme aufweist, siehe Abb. 3.

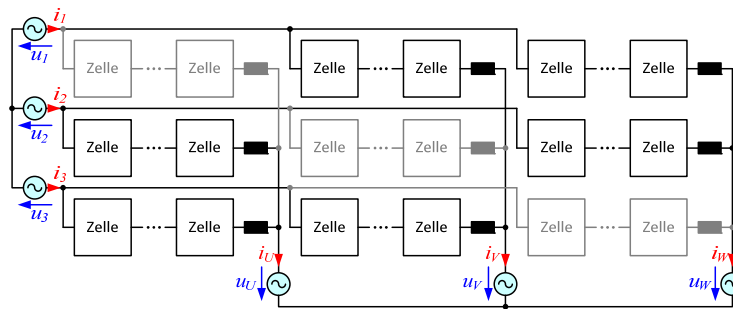


Abb. 3: Matrix- (M3C-) oder „Hexverter“-Schaltung als 3AC-3AC Direktumrichter

2.1 Integration von Batterien für elektrische Speichersysteme

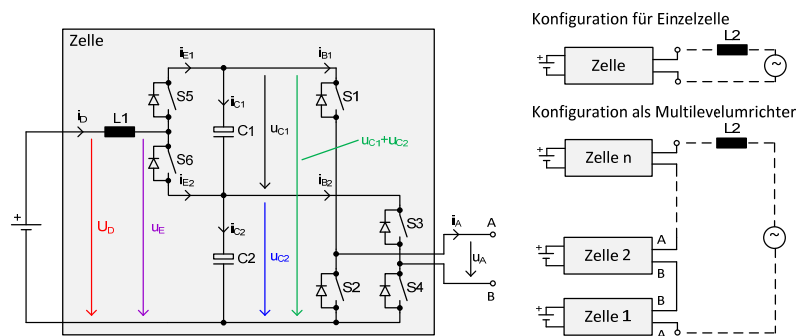


Abb. 4: Neue Zellschaltung für die effiziente Anbindung von Batterien [4]

Zusätzlich zur Umwandlung von elektrischer Energie kann die MMC-Topologie zur Integration von Batteriespeichern auf Ebene der Zellen eingesetzt werden. Anstatt die Batterien direkt oder über einen DC/DC-Steller an den Kondensator zu koppeln bietet die Schaltung gemäß Abb. 4 eine vorteilhafte Lösung [4]. Durch diese Schaltung wird die verlustbehaftete Belastung der Batterie mit Wechselströmen vermieden, in dem die Batterie mit Hilfe einer Halbbrücke von der pulsierenden Energie in der Zelle entkoppelt wird. Diese Halbbrücke ist nur an eine Teilspannung der Zelle angeschlossen, wodurch die Batterieanbindung äußerst effizient bei minimiertem Schaltungsaufwand erfolgt. Durch die Serienschaltung der Zellen auf der Wechselstromseite können

⁴ DFIG = Doubly Fed Induction Generator

Batteriespeichersysteme mit Anbindung an Mittel- und Hochspannungsnetze flexibel und skalierbar im großtechnischen Maßstab realisiert werden.

3 Aufbau des Prototyps und Messergebnisse

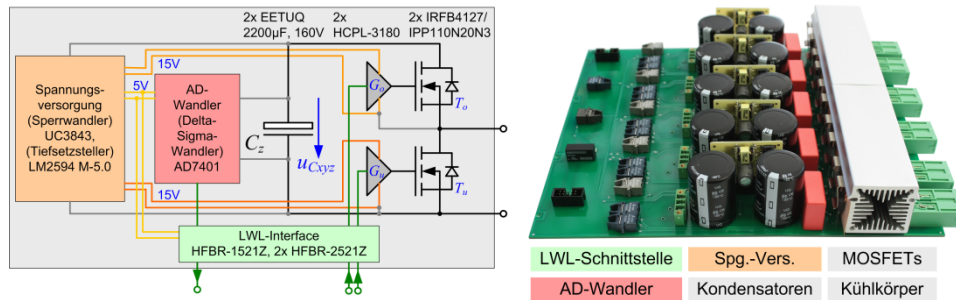


Abb. 5: Schaltplan einer Zelle und Foto einer Zweigplatine mit fünf Zellen [2], [5]

Für die Untersuchung der verschiedenen MMC-Anwendungen wurde am Elektrotechnischen Institut ein Niederspannungsprototyp, siehe Abb. 5 entwickelt [2], [5]. Dieser erlaubt die Validierung der Steuer- und Regelverfahren im Labormaßstab, welche sich dann auf Systeme höherer Spannung und Leistung problemlos hochskalieren lassen.

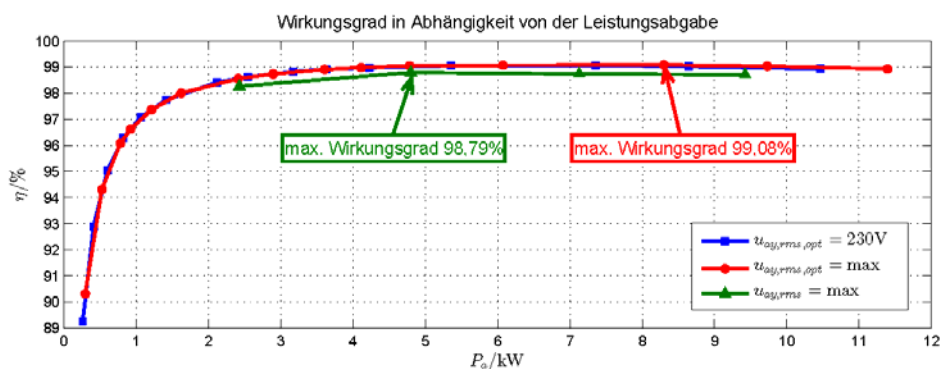


Abb. 6: Wirkungsgrad des MMC-Prototyps in der DC-3AC-Variante in Abhängigkeit von der Leistung [5]

Abb. 6 zeigt den Wirkungsgrad des Niederspannungsprototyps in der DC-3AC-Schaltung in Abhängigkeit von der abgegebenen Leistung. Durch verschiedene Optimierungen sind Wirkungsgrade über 99% erreichbar. Die hohe Qualität der erzeugten Spannungen bzw. Ströme ist in Form der feingestufteten Verläufe in den Messungen von Abb. 7 ersichtlich, was die Vorteile des modularen Konzepts der MMCs verdeutlicht.

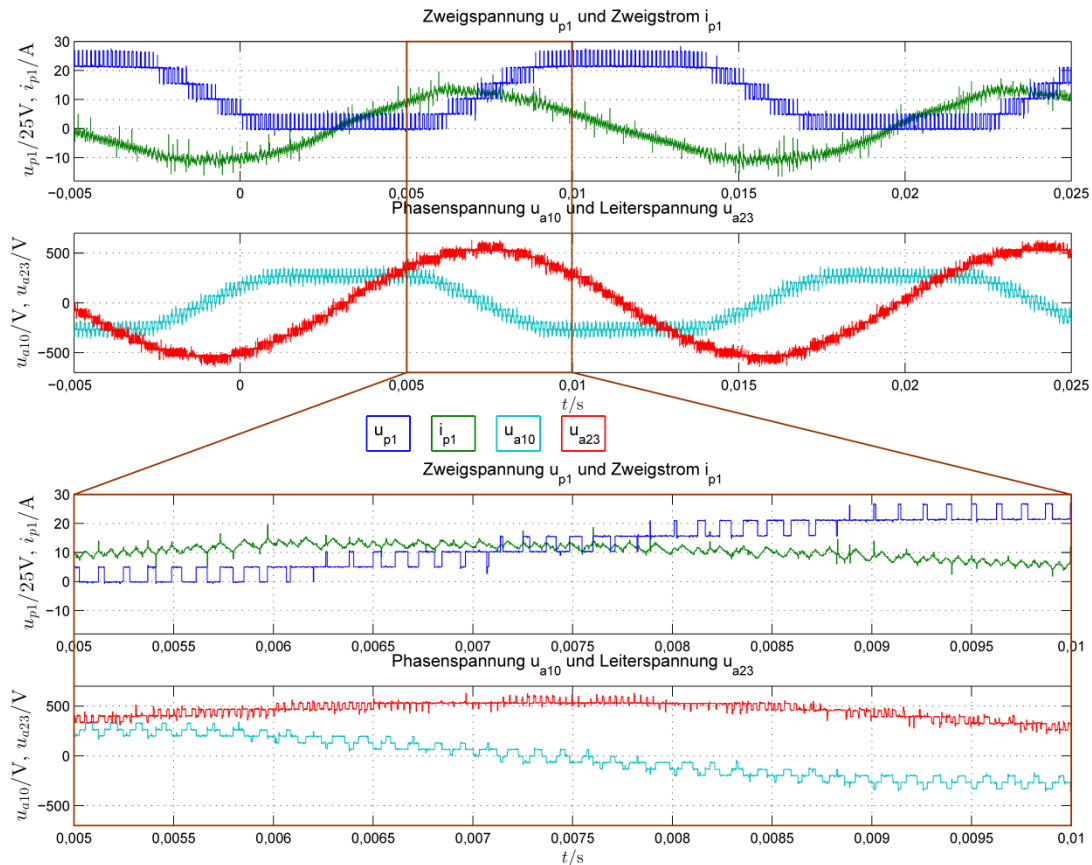


Abb. 7: Gemessene Spannungs- und Stromverläufe am MMC-Prototyp

Literaturverzeichnis

- [1] J. Kolb, F. Kammerer, M. Braun: *Modulare Multilevelumrichter für Antriebssysteme – Chancen und Herausforderungen*; SPS/IPC/DRIVES 2011, Elektrische Automatisierung - Systeme und Komponenten, Nürnberg
- [2] J. Kolb, F. Kammerer, M. Braun: *Dimensioning and Design of a Modular Multilevel Converter for Drive Applications*; EPE-PEMC 2012 ECCE Europe, Novi Sad, Serbia
- [3] F. Kammerer, M. Gommeringer, J. Kolb, M. Braun: *Benefits of Operating Doubly Fed Induction Generators by Modular Multilevel Matrix Converters*; PCIM Europe, 14-16 May 2013, Nuremberg, Germany
- [4] M. Gommeringer, F. Kammerer, J. Kolb, M. Braun: *Novel DC-AC Converter Topology for Multilevel Battery Energy Storage Systems*; PCIM Europe, 14-16 May 2013, Nuremberg, Germany
- [5] J. Kolb, F. Kammerer, P. Grabherr, M. Gommeringer, M. Braun: *Boosting the Efficiency of Low Voltage Modular Multilevel Converters beyond 99%*; PCIM Europe, 14-16 May 2013, Nuremberg, Germany

Mikrokalorimetrische Untersuchungen zur elektrochemischen Lithiumbulkabscheidung

Matthias J. Schmid¹, Katrin R. Bickel¹, Petr Novák², Rolf Schuster¹

¹Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Physikalische Chemie,
76131 Karlsruhe, Deutschland, E-Mail: matthias.schmid2@kit.edu, Telefon: +49(0)721/608-
48084

²Electrochemistry Laboratory, Paul Scherrer Institut, Schweiz

1 Einleitung

Lithiumionenbatterien dominieren dank ihrer hohen Energiedichte den Markt für portable Elektronik und spielen auch in aktuellen Entwicklungen in der Automobilindustrie eine große Rolle.^{1,2} In den Bereichen Produktionskosten, Lebensdauer und Sicherheit existieren allerdings noch immer Herausforderungen. Eine mögliche Gefahr für Anwender ist das Überhitzen des Akkus, was z. B. durch einen internen Kurzschluss verursacht werden kann. Überladen des Akkus sowie Betrieb mit zu hoher Stromdichte und bei zu niedriger Temperatur führen zur Bildung von Lithiumdendriten, die die Elektroden verbinden und somit die Batterie kurzschließen.³

Thermodynamische Daten können dabei helfen, die ablaufenden Prozesse besser zu verstehen. Die elektrochemische Mikrokalorimetrie erlaubt es, direkt die Entropie von Halbzellenreaktionen zu bestimmen, und ermöglicht so Aussagen über an der Reaktion beteiligte Moleküle und Atome.

2 Methode

Für unsere Versuche verwenden wir eine elektrochemische Zelle mit einer Gegen- und einer Referenzelektrode aus Platin und einer Arbeitselektrode aus Nickel in einer Glovebox. Details zur Kalorimetrieapparatur finden sich in Ref. [4,5]. Wir verwenden einen kommerziellen Elektrolyt für Lithiumionenbatterien, LiPF₆ in Ethylencarbonat:Dimethylcarbonat (1:1).

In elektrochemischen Reaktionen ist die Reaktionsentropie unmittelbar mit der ausgetauschten Wärme verknüpft. Wir messen die Wärmeentwicklung elektrochemischer Halbzellenreaktionen, in diesem Fall der Lithiumbulkabscheidung, auf der Rückseite einer ca. 50 μm dicken Elektrode mit Hilfe eines PVDF-Temperatursensors.^{4,5} Die Verwendung von kurzen, 10 ms langen Potentialpulsen ermöglicht die nahezu verlustfreie Messung der entstandenen Wärme am Sensor, da auf dieser Zeitskala der Wärmeabfluss in den Elektrolyten vernachlässigbar ist.

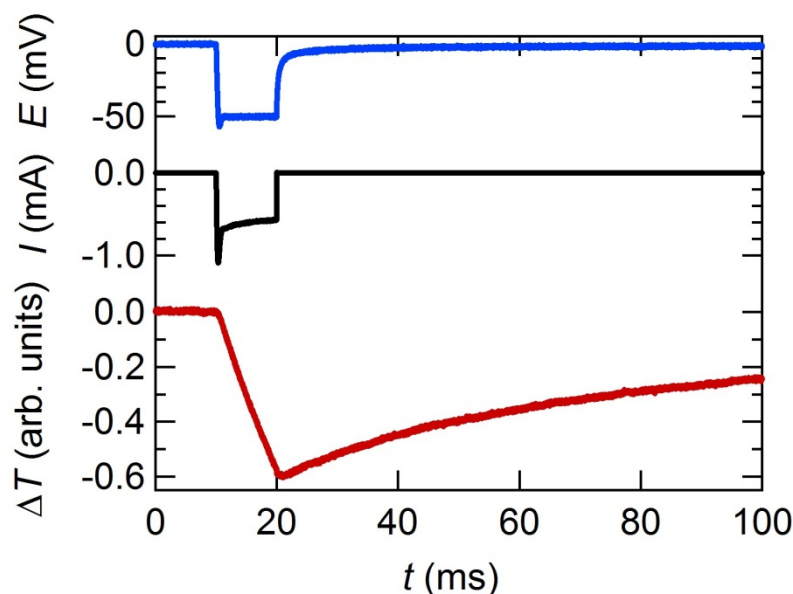


Abb. 1: Potential-, Strom- und Temperaturtransiente eines typischen Pulsexperimentes.

Abbildung 1 zeigt die Potential-, Strom- und Temperaturtransiente eines typischen Pulsexperiments, in diesem Fall für die Lithiumbulkabscheidung. Die Reaktion wird bei $t = 10$ ms über eine Dauer von 10 ms durch einen Potentialpuls eingeschaltet. Während des Pulses registriert der Temperatursensor einen linearen Anstieg der Elektroden­temperatur. Nach Pulsende relaxiert das Temperatursignal auf den Ausgangswert. Zur Kalibrierung der ermittelten Temperaturänderung vergleichen wir den Wärmeeintrag mit dem Wärmeeintrag bei einer Reaktion mit bekannter Entropie, z. B. mit dem Redoxpaar $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}/[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$.⁶

3 Ergebnisse

Wie bereits in Abbildung 1 zu erkennen, kühlt sich die Elektrode bei der Abscheidung von Lithium ab. Dies ist gleichbedeutend mit einer Entropieerhöhung in der Halbzelle aufgrund der Reaktion. Eine positive Reaktionsentropie erscheint zunächst kontraintuitiv, da das Lithiumatom

aus der ungeordneten, flüssigen Phase in die geordnete, feste Phase übergeht und hierbei die Ordnung des Systems erhöht werden sollte. Betrachtet man allerdings die Solvathülle des Lithiumions, die bei der Reaktion abgestreift und wodurch Lösungsmittel freigesetzt wird, ist der Entropiegewinn erklärbar. Die reversible Wärme für die Lithiumbulkabscheidung, die durch Pulsreihen mit unterschiedlicher Amplitude und Extrapolation auf ein verschwindendes Überpotential berechnet werden kann, beträgt $48 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$. Mit Hilfe dieses Wertes konnte zudem die Koordinationszahl von Lithium im Elektrolyten bestimmt werden.

Literaturverzeichnis

- [1] Scrosati, B.; Garche, J. *Journal of Power Sources* **2010**, *195*, 2419.
- [2] Manthiram, A. *The Journal of Physical Chemistry Letters* **2011**, *2*, 176.
- [3] Whitehead, A. H.; Perkins, M.; Owen, J. R. *Journal of The Electrochemical Society* **1997**, *144*, L92.
- [4] Etzel, K. D.; Bickel, K. R.; Schuster, R. *Review of Scientific Instruments* **2010**, *81*.
- [5] Schuster, R.; Rösch, R.; Timm, A. E. *Z. Phys. Chem.* **2007**, *221*, 1479.
- [6] Boudeville, P. *Inorganica Chimica Acta* **1994**, *226*, 69.

Kontinuierliche Entfernung von CO₂ aus Synthesegasen unter Hochtemperatur und Hochdruckbedingungen

Martin Bublinski, Hans Leibold, Helmut Seifert

Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Technische Chemie, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Deutschland, E-mail:martin.bublinski@kit.edu, Telefon: +49(0)721/608-26544

Kurzfassung

Membranverfahren trennen Gasgemische kontinuierlich, selektiv und energieeffizient und sind somit eine interessante Alternative zu herkömmlichen, energieintensiven Gasreinigungsverfahren mittels Wäschern. Allerdings steigen insbesondere für Hochtemperaturanwendungen die material- und prozesstechnischen Anforderungen an das Membransystem und grenzen die Materialauswahl stark ein. Bisher existiert noch kein hochtemperaturtaugliches, kontinuierliches Abscheideverfahren für die selektive Abscheidung von CO₂ aus Synthesegas im kommerziellen Maßstab. In dieser Arbeit wird die Herstellung von temperaturstabilen Membranen aus Hydrotalcit vorgestellt, mit denen CO₂ selektiv unter Hochtemperaturbedingungen abgeschieden werden kann. An reinen und mit Kaliumcarbonat dotierten Hydrotalciten wurden mit einem Sorptions-/Druckreaktor CO₂-Sorptionsgleichgewichtsdaten im Temperatur- und Druckbereich zwischen 200–500 °C bzw. 20–80 bar aufgenommen. Dabei wurden maximale CO₂-Kapazitäten von 1,2 mol/kg für reines Hydrotalcit und 2,0 mol/kg für dotiertes Hydrotalcit ermittelt. Weiter wurden erste Hydrotalcit-Membranen auf Aluminiumoxid-Substraten synthetisiert und unter dem Rasterelektronenmikroskop (REM) analysiert. Die REM-Bilder zeigen eine riss- und defektarme Oberfläche und Schnittfläche der Membranschicht, die es in Zukunft mit Selektivitäts- und Permeabilitätsuntersuchungen zu charakterisieren gilt.

Stichworte

CO₂-Abscheidung, Membranverfahren, Hydrotalcit

1 Einleitung

Das vom Karlsruher Institut für Technologie (KIT) entwickelte bioliq®-Verfahren wandelt ungenutzte Restbiomasse (z.B. Stroh) in synthetische Kraftstoffe und chemische Grundprodukte um (Abb. 1) [1–3]. Dabei wird die Biomasse in dezentralen Anlagen zerkleinert und in einer Schnellpyrolyse zu einem sogenannten bioSyncrude pyrolysiert. Die energetisch verdichtete

Biomasse wird anschließend zu einer zentral gelegenen Hochdruck-Flugstrom-Vergasungsanlage transportiert und dort bei Temperaturen über 1200 °C vergast. Im Anschluss wird das Roh-Synthesegas in einer Heißgasreinigung von Partikeln, Sauer gasen (z.B. HCl, H₂S), Stickstoffverbindungen (z.B. NH₃) und Restorganik bei hohen Temperaturen zwischen 800 °C und 500 °C und hohem Druck (bis zu 80 bar) gereinigt. Dabei werden im Gegensatz zur herkömmlichen Gasreinigung mit Wäschern Druck- und Temperatursenken vermieden. Somit entfallen für anschließende Syntheseprozesse die notwendige energieintensive Aufheizung und Verdichtung des gereinigten Synthesegases. Die CO₂-Abscheidung aus dem Synthesegasstrom erfolgt bisher noch auf Basis eines konventionellen Waschverfahrens auf niedrigerem Temperatur- und Druckniveau. Ein kontinuierliches, trockenes Hochtemperatur-Hochdruck-CO₂-Abschneidverfahren im kommerziellen Maßstab existiert bisher nicht.

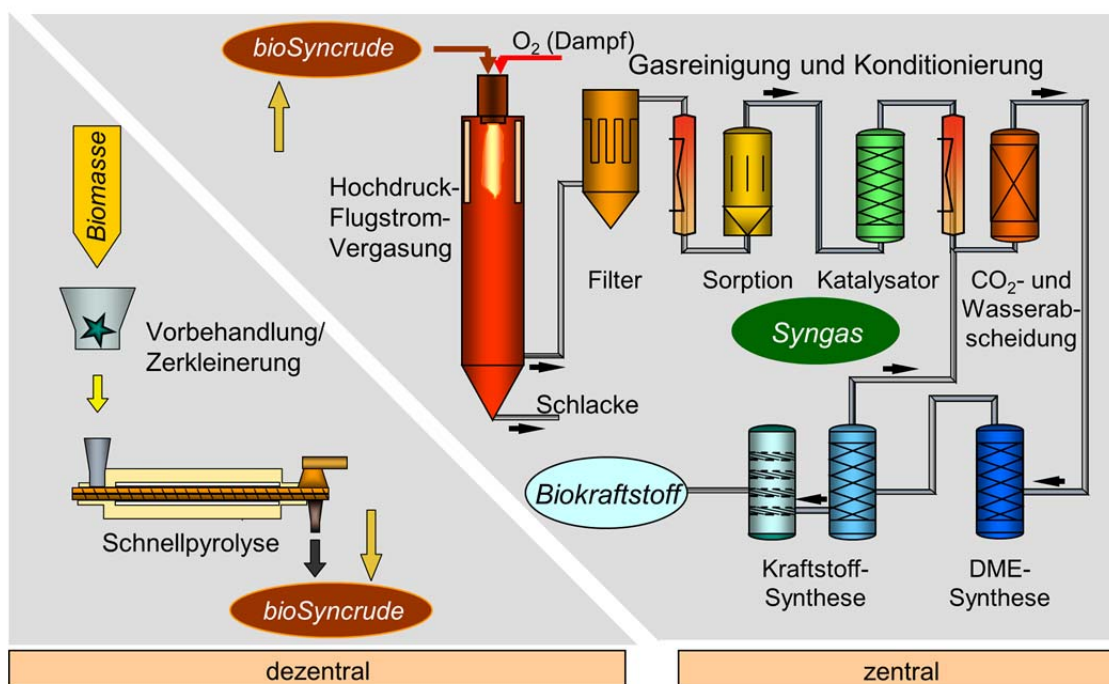


Abb. 1: Der bioliq[®]-Prozess.

Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines sorptionsunterstützten Membranverfahrens mit Hydrotalciten, mit dem kontinuierlich und selektiv CO₂ unter Hochtemperatur- und Hochdruckbedingungen aus vorgereinigtem Synthesegas abgetrennt werden kann. Hierzu gilt es zuerst die CO₂-Sorptionseigenschaften von Hydrotalciten in Abhängigkeit von Temperatur (< 500 °C), Druck (< 80 bar), Dotierung und Gasatmosphäre zu ermitteln. Im Anschluss daran werden Membranen aus Hydrotalcit synthetisiert und hinsichtlich Membrandicke, Membranstruktur, Selektivität und Permeabilität charakterisiert.

2 CO₂-Sorptions an Hydrotalciten

Die CO₂-Sorptionsgleichgewichte an kommerziellem Hydrotalcit MG70 (Firma Sasol) werden mit Hilfe eines Sorptions-/Druckreaktor bestimmt (Abb. 2).

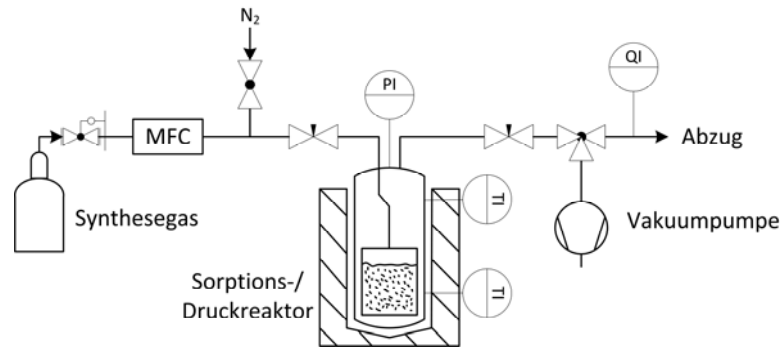


Abb. 2: Fließbild des Sorptions-/Druckreaktors.

Der Reaktor, mit einem Volumen von 0,6 l, kann von außen über eine elektrische Heizung auf maximal 500 °C beheizt werden und ist für Drücke bis zu 80 bar ausgelegt. Im Reaktor befinden sich zwei Temperaturmessstellen und ein Drucksensor. Das Sorbens wird in einem Probenkorb in den Reaktor eingebracht und mit CO₂-haltigem Modellgas beaufschlagt. Die CO₂-Ausgangskonzentration wird anschließend in einem Infrarot-Gasanalysator analysiert und die CO₂-Sorptionskapazität des Sorbens über eine Massenbilanz ermittelt. Zudem kann der Reaktor mit Stickstoff gespült sowie mit einer Vakuumpumpe evakuiert werden.

In Abb. 3 sind die mit Hilfe der statistischer Versuchsplanung ermittelten CO₂-Sorptionskapazitäten von reinem Hydrotalcit und mit Kaliumcarbonat dotiertem (35 Gew.-%) Hydrotalcit in trockenem Modellgas (20 Vol.-% CO₂, 80 Vol.-% N₂) in Abhängigkeit der Kalzinierungstemperatur (200–500 °C), der Sorptionstemperatur (200–500 °C) und dem Sorptionsdruck (20–80 bar) dargestellt.

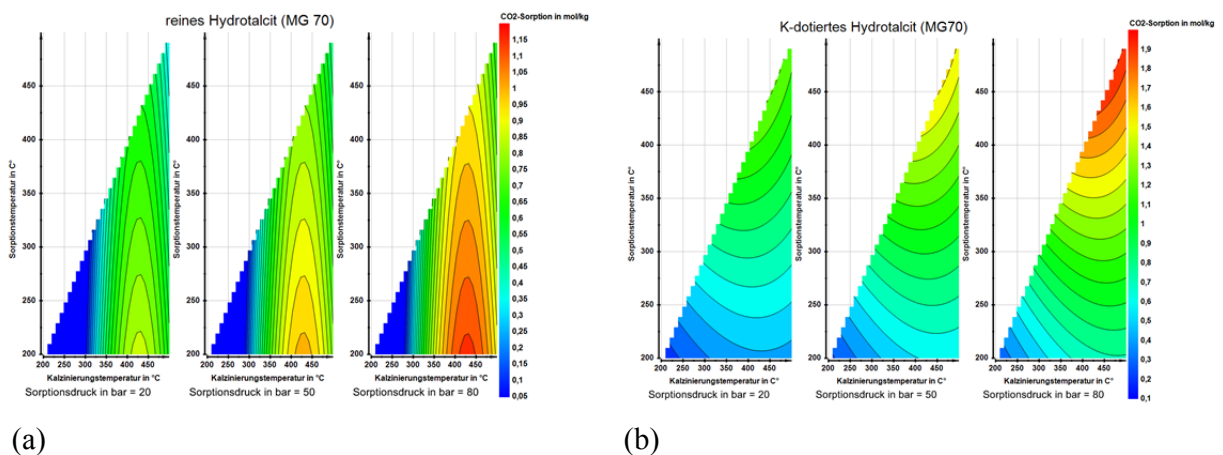


Abb. 3: CO₂-Sorptionskapazitäten von Hydrotalcit (a) und K-dotiertem Hydrotalcit (b) in trockenem Modellgas (20 Vol.-% CO₂, 80 Vol.-% N₂) in Abhängigkeit der Kalzinierungstemperatur, der Sorptionstemperatur und dem Sorptionsdruck, ermittelt mit Hilfe der statistischen Versuchsplanung.

Beim reinen Hydrotalcit durchläuft die CO₂-Sorptionskapazität mit steigender Kalzinierungstemperatur ein Maximum bei 425 °C und nimmt kontinuierlich mit steigender Sorptionstemperatur ab. Weiter ist ein Anstieg des CO₂-Sorptionsvermögens mit steigendem Druck zu erkennen. Die CO₂-Sorptionskapazität wird demnach für eine Kalzinierungstemperatur von 425 °C, einer Sorptionstemperatur von 200 °C und einem Sorptionsdruck von 80 bar mit 1,2 mol/kg maximal.

Durch Dotierung des Hydrotalcits mit Kaliumcarbonat hat die Kalzinierungstemperatur nur noch einen geringen Einfluss auf die CO₂-Aufnahme. Mit steigendem Druck und steigender Sorptionstemperatur steigt hingegen die CO₂-Sorptionskapazität auf bis zu 2,0 mol/kg an. Somit ergibt sich im Vergleich zum reinen Hydrotalcit eine um den Faktor zwei erhöhte CO₂-Aufnahme. Insbesondere der gegenläufige Einfluss der Sorptionstemperatur auf die CO₂-Sorptionskapazitäten der beiden Sorbentien lässt auf einen veränderten Sorptionsmechanismus durch den Dotiervorgang schließen. Die aus der Literatur bekannte Kombination aus Physi- und Chemisorption [4; 5] scheint sich im dotierten Fall zugunsten des chemisorptiven Anteils zu verschieben. Aktuell wird dieses Verhalten mittels Röntgendiffraktometrie (XDR), Raman- und Infrarotspektroskopie näher untersucht, um Aufschlüsse über den veränderten Bindungsmechanismus zu erhalten.

3 Membransynthese

Laut Zielsetzung soll CO₂ kontinuierlich aus Synthesegas mit Hilfe einer sogenannten Lösungs-Diffusions-Membran aus Hydrotalcit entfernt werden. Eine Trennung über den Moleküldurchmesser (Molekularsieb) wird hier nicht angestrebt. Die Membran ist schematisch in Abb. 4 dargestellt. Der Feedstrom besteht aus vorgereinigtem Synthesegas (CO, H₂, CO₂). Über die Membran wird selektiv CO₂ abgeschieden, sodass das Retentat aus reinem Synthesegas (CO, H₂) besteht. Der selektive Transport des CO₂ durch die Membran lässt sich auf die Prozesse CO₂-Sorption an der Membranoberfläche, Transport (Diffusion) durch die Membran und Desorption auf der Permeatseite zurückführen [6]. Als treibende Kraft ist hierfür ein Gefälle des chemischen Potentials über die Membranschicht notwendig, welches in dieser Arbeit in Form eines Druckgradienten realisiert wird.

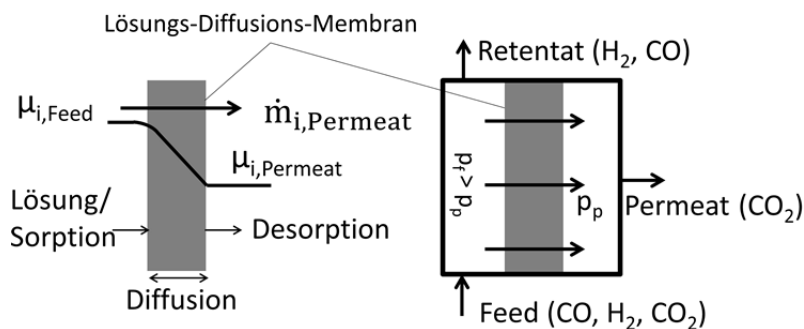


Abb. 4: Schematische Darstellung einer Lösungs-Diffusions-Membran.

Eine wichtige Anforderung ist hierbei die Dichtigkeit der Membran. So müssen Leckageströme über Löcher und Risse in der Membranschicht (von der Feed- zur Permeatseite) unbedingt vermieden werden. In diesem Fall wäre eine selektive Trennung stark eingeschränkt.

Für die Membransynthese wird Hydrotalcit über einen Ausfällungsprozess synthetisiert und mittels Tauchbeschichtung auf einem Aluminiumoxid-Substrat abgeschieden. Nach der Trocknung bildet sich eine dichte Membranschicht von etwa 20 μm aus (Abb. 5), die eine nahezu porrenfreie Oberfläche und Schnittfläche unter dem Rasterelektronenmikroskop aufweist.

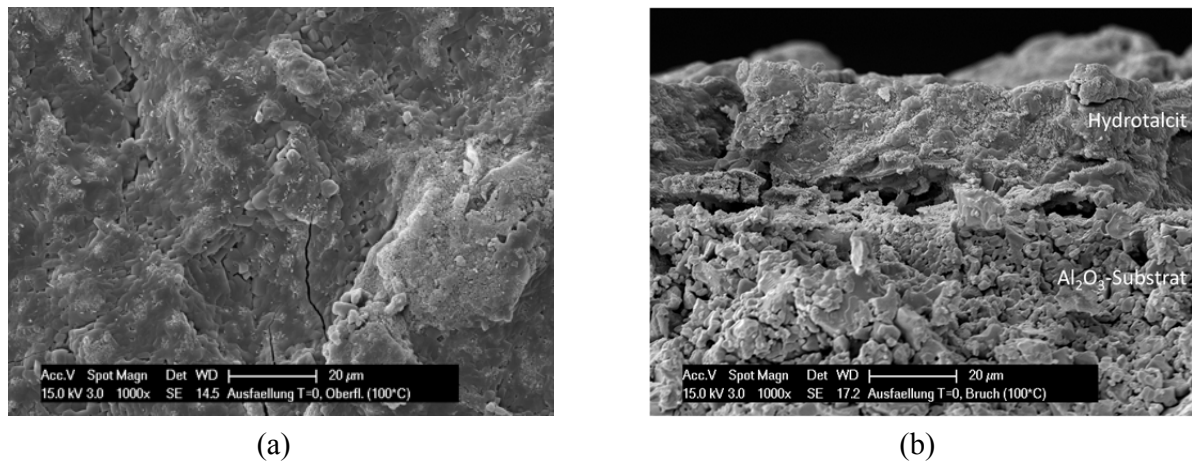


Abb. 5: Beschichtete Substratoberfläche mit Hydrotalcit (a), Querschnitt durch Al_2O_3 -Träger mit Hydrotalcit-Beschichtung.

4 Zusammenfassung und Ausblick

Mit Hilfe eines Sorptions-/Druckreaktors wurden CO_2 -Sorptionsgleichgewichte an reinem und mit Kaliumcarbonat dotiertem Hydrotalcit in trockener Synthesegasatmosphäre im Temperatur- und Druckbereich zwischen 200–500 $^\circ\text{C}$ bzw. 20–80 bar untersucht. Weiter wurde eine dichte Membran aus Hydrotalcit auf einem Aluminiumoxidträger hergestellt, mit der CO_2 kontinuierlich unter Hochtemperatur- und Hochdruckbedingungen abgeschieden werden soll.

Im Folgenden gilt es systematisch die Membransynthese fortzuführen, bezüglich Rissbildung und Schichtdicke zu optimieren und die Membran mittels Permeabilitäts- und Selektivitätsmessungen zu charakterisieren. Zudem gilt es den Membranprozess und den CO_2 -Transport durch die Membran modelltheoretisch zu beschreiben und mit den experimentell ermittelten Messwerten zu validieren.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1: Der bioliq [®] -Prozess.	2
Abb. 2: Fließbild des Sorptions-/Druckreaktors.	3
Abb. 3: CO ₂ -Sorptionskapazitäten von Hydrotalcit (a) und K-dotiertem Hydrotalcit (b) in trockenem Modellgas (20 Vol.-% CO ₂ , 80 Vol.-% N ₂) in Abhängigkeit der Kalzinierungstemperatur, der Sorptionstemperatur und dem Sorptionsdruck, ermittelt mit Hilfe der statistischen Versuchsplanung.	3
Abb. 4: Schematische Darstellung einer Lösungs-Diffusions-Membran.	4
Abb. 5: Beschichtete Substratoberfläche mit Hydrotalcit (a), Querschnitt durch Al ₂ O ₃ -Träger mit Hydrotalcit-Beschichtung.	5

Literaturverzeichnis

- [1] Dahmen, N., Dinjus, E. Synthetische Chemieprodukte und Kraftstoffe aus Biomasse. *Chemie Ingenieur Technik*. 82 (2010) 1147–1152.
- [2] Dahmen, N., Henrich, E., Dinjus, E., Weirich, F. The bioliq[®] bioslurry gasification process for the production of biosynfuels, organic chemicals, and energy. *Energy, Sustainability and Society*. 2 (2012) 1–44.
- [3] Dahmen, N., et al. State of the art of the bioliq process for synthetic biofuels production. *Environmental Progress & Sustainable Energy*. 31 (2012) 176–181.
- [4] Hutson, N. D., Speakman, S. A., Payzant, E. Andrew. Structural Effects on the High Temperature Adsorption of CO₂ on a Synthetic Hydrotalcite. *Chemistry of Materials*. 16 (2004) 4135–4143.
- [5] Lwin, Y., Abdullah, F. High temperature adsorption of carbon dioxide on Cu–Al hydrotalcite-derived mixed oxides: kinetics and equilibria by thermogravimetry. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. 97 (2009) 885–889.
- [6] Melin, T., Rautenbach, R. *Membranverfahren*. Springer. 3. Auflage, (2007).

Sensitivity analysis of semi-transparent PV window for the prediction of the total energy consumption

Transmittance or efficiency?

Evelise Leite Didoné and Andreas Wagner

Karlsruher Institut für Technologie, Fachgebiet Bauphysik & Technischer Ausbau (fbta), Institut für Entwerfen und Bautechnik (IEB), 76131 Karlsruhe, Deutschland, E-mail: evelise.didone@kit.edu, Telefon: +49(0)157714-19697

Abstract

The aim of this research is to evaluate the influence of the visible transmittance and the power conversion efficiency (PCE) of semi-transparent photovoltaic (PV) windows on the total energy consumption of office buildings. For this study, semi-transparent PV modules with different transmittances (0.10, 0.20, 0.25 and 0.30) and efficiencies (3%, 5%, 7% and 9%) were used. The evaluation was based on computer simulations and divided into two steps. The first step was the modeling of the PV module and the window system using Optics 6 and Window 7 programs. The second step was the daylight and thermal-energetic performance simulation. Wherefore Daysim/RADIANCE was used for the investigation of the available annual daylight using window integrated PV panels. The output data was integrated into EnergyPlus which provided the total energy consumption. To obtain the energy generated by semi-transparent PV window an energy balance of the window system was set up. The simulations were accomplished for two Brazilian cities in two different climatic zones: Fortaleza/CE which has a tropical climate and Florianopolis/SC which has a subtropical climate. As comparison the German city Frankfurt was used. The results show that the cell efficiency has a higher influence on the final energy consumption than the transmittance of the PV window

Keywords

Energy efficiency, semi-transparent PV window, building simulation, sensitivity analysis

1 Introduction

Semi-transparent solar cells are a young photovoltaic technology which has been developed in the last years. Its target applications is the integration into the building envelope, which is particularly interesting since buildings have large surface areas for harnessing sunlight and are

one of the major energy consumers, around 48%. The semi-transparent devices have been identified as promising candidates for power-generating window applications because they can be integrated with conventional see-through elements such as building glasses [1].

Currently, diverse technologies of semi-transparent solar cells, such as polymer solar cells (OPV) and dye-sensitized solar cells (DSSC) present different visible transmittances and power conversion efficiencies (PCE) [1, 2, 3]. These factors can influence the total energy consumption for lighting and air conditioning according to building's orientation and climate. As research on window integration semi-transparent PV is scarce yet, this study aims to evaluate the influence of the visible transmittance and the power conversion efficiency of semi-transparent photovoltaic (PV) on the total energy consumption in office buildings.

2 Method

2.1 Building model

For the simulations, a representative model for Brazilian office buildings was chosen. The building characteristics, materials and internal heat loads were obtained from previous studies [4]. For the simulations a room with a base area of 8 m x 11 m and a height of 2.7 m was used (Fig. 1). The building is occupied from 8 am to 6 pm with an average occupancy of 14.7 m²/person. The internal gains are 8 W/m² for lighting and 9.7 W/m² for equipment. The HVAC system is a window unit with a coefficient of performance (COP) of 2.8 and a set point for heating of 18 °C and of 24 °C for cooling. An automatic dimming system to control artificial lighting was used in order to ensure that artificial lighting was turned down or turned off when daylight reached 500 lux.

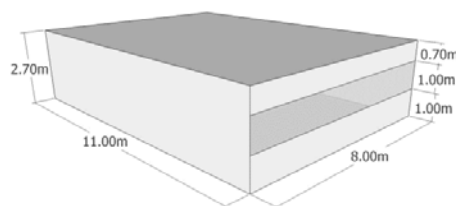


Fig. 1: Scheme of the model geometry.

2.2 Semi-transparent PV window model

The semi-transparent PV window used consists of a double glazed window with an encapsulated solar cell layer between the panes. The window structure is composed of two glass panes of 3 mm thickness separated by a 12 mm wide air gap. The PV cell is placed at the inner side of the exterior glass pane (Fig. 2). Fig. 3 shows a scheme of the window which was used for the thermodynamical calculations that are explained in section 2.4.2. The encapsulated PV cell was

modeled and integrated on the outer glass sheet as a thin film by the program Optics 6. Optical and thermal characteristics of the module were modeled with the program WINDOW 7 [5].

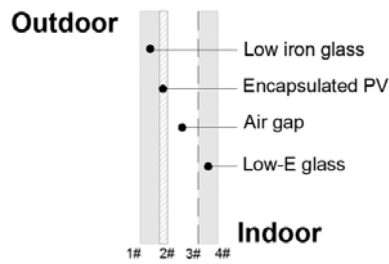


Fig. 2: Schematic of the PV window.

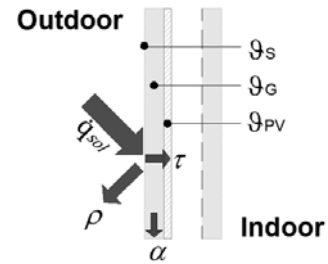


Fig. 3: Detailed scheme for solar radiation balance.

For the sensitivity analysis different efficiencies and transmittances were chosen. The values were based on different semi-transparent PV technologies found in literature [1, 2, 3]. As efficiencies were used: 3%, 5%, 7% and 9%; and as transmittances: 0.10, 0.20, 0.25 and 0.30. Thus a total of 4 window systems are formed and 16 combinations have to be simulated. Tab. 1 presents the windows' properties for different transmittances.

Tab. 1: Windows' properties.

Semi-transparent PV window	PV transmittance	U-Factor [W/(m ² .K)]	VT	SHGC
[A]	0.10	1.67	0.08	0.13
[B]	0.20	1.67	0.16	0.18
[C]	0.25	1.67	0.20	0.20
[D]	0.30	1.67	0.23	0.22

2.3 Building locations

The simulations were carried out for two Brazilian capital cities, Fortaleza/CE and Florianopolis/SC and compared with Frankfurt in Germany. These cities were selected based on their geographic location and climate differences (Tab. 2). The weather data for the cities were obtained from the website of the U.S. Department of Energy [<http://apps1.eere.energy.gov>].

Tab. 2: Geographical positions of the cities.

City	Latitude	Longitude	Altitude	Region/Country
Fortaleza/CE	3°78' (S)	38°53' (W)	25 m	Northeast/Brazil
Florianopolis/SC	27°67'(S)	48°55' (W)	5 m	South/Brazil
Frankfurt (Main)	50°05' (N)	8°60' (E)	113 m	Germany

2.4 Building analysis

The analysis of the building with integrated PV window was divided into two parts: energy consumption and electricity generation. The energy benefit of a BIPV system is based on electricity saving for artificial lighting, the HVAC system and electricity generation from the PV window.

2.4.1 Energy consumption

The building's energy consumption was obtained by an integrated computer simulation using two programs: Daysim/RADIANCE and EnergyPlus. Daysim was used to evaluate the dynamic daylight behavior and to obtain the required artificial lighting used within the integrated simulation with EnergyPlus, which gives the overall energy consumption.

2.4.2 Energy generation

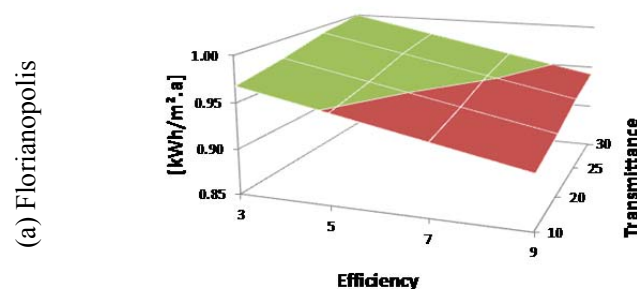
It is not possible to directly integrate a model for semi-transparent PV windows into EnergyPlus. Therefore it was necessary to separate the thermodynamic energy balance of the glazing system and the calculation of the energy yield of the PV from the simulation of the whole environment to obtain the total energy consumption. Fig. 3 shows the scheme used for the thermodynamical calculations to determine the temperatures inside the window [6]. The generated electricity can then be calculated by multiplying the result of Equation 1 by the window area.

$$\dot{q}_{el} = \dot{q}_{sol} (1 - \alpha)(1 - \rho)\eta_{PV}[1 + K (\vartheta_{PV} - 25)] \quad [1]$$

Here α is the absorption, ρ the reflection, η_{PV} the solar cell efficiency, K the temperature coefficient of maximum power output (obtained from the PV manufacturer), ϑ_{PV} the solar cell temperature [$^{\circ}\text{C}$], \dot{q}_{sol} the solar radiation [W/m^2] and \dot{q}_{el} the generated electricity [W/m^2].

3 Results

The influence of the transmittance and the efficiency on the final energy consumption can be seen in Fig. 4 for a north oriented room for the three selected cities. In the graphics the z value equals the total energy consumption, the x-axis is the efficiency and the y-axis is the transmittance. For a better visualization the z-values are as well colored according to their value.



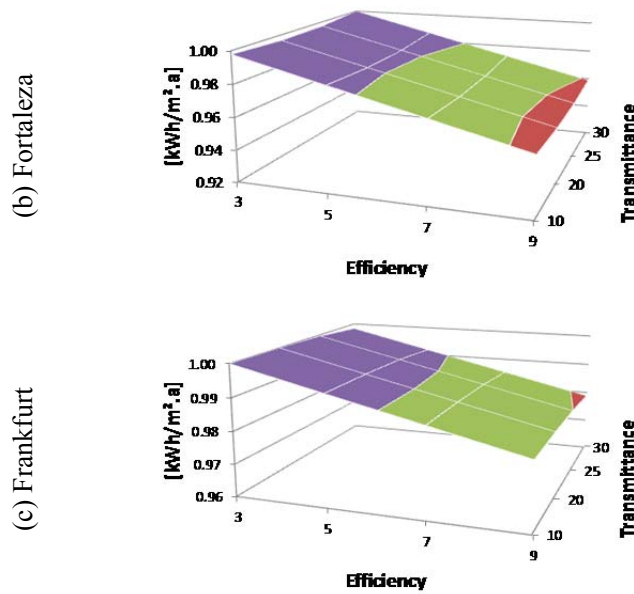


Fig. 4: Normalized energy consumption for North orientation

Tab.3 presents the change of the energy consumption between a transmittance of 10% and 30% and an efficiency of 3% and 9%, based on transmittance of 10% and an efficiency of 3%.

Tab. 3: Change of the energy consumption: transmittance and efficiency.

	Florianopolis		Fortaleza		Frankfurt	
	Transmittance	Efficiency	Transmittance	Efficiency	Transmittance	Efficiency
North	-3.3%	5.9%	-0.2%	4.1%	0.2%	2.0%
East	-0.8%	5.3%	-1.7%	4.8%	0.7%	3.2%
South	-1.5%	2.9%	-2.9%	3.4%	0.7%	4.8%
West	-4.1%	5.1%	-3.3%	5.1%	-0.7%	3.5%

For the Brazilian cities, with an increased transmittance increases the energy consumption for all orientations. This means lower transmittances reduce the energy demand for cooling which is predominant for the overall energy consumption. In Frankfurt this behavior is only observed for the West orientation. The reduction of the total energy consumption due to higher cell efficiency is influenced by the solar irradiation and accordingly different for each orientation. In Florianopolis the North orientation presents the highest value with a reduction of 5.9%, while the South orientation achieves only 2.9%.

4 Conclusions

The evaluation of semi-transparent PV windows in office buildings shows that the influence of the transmittance and the efficiency on the total energy consumption can be regarded independent

of each. For all studied cases, the efficiency presented a higher influence than the transmittance on the final energy consumption. Finally, the actual influence of the transmittance is depending on the climate and the orientation and cannot be predicted in a simple manner. For the determination of the optimal transmittance a simulation should be done.

List of Figures

Fig. 1: Scheme of the model geometry.....	2
Fig. 2: Schematic of the PV window.....	3
Fig. 3: Detailed scheme for solar radiation balance.....	3
Fig. 4: Normalized energy consumption for North orientation.....	5

List of Tables

Tab. 1: Windows' properties.....	3
Tab. 2: Geographical positions of the cities.....	3
Tab. 3: Change of the energy consumption: transmittance and efficiency.....	5

References

- [1] K.S. Chen, J.F. Salinas, H.L. Yip, L. Hou, A.K.Y. Jen. Semi-transparent polymer solar cell with 6% PCE, 25% average visible transmittance and a color rendering index close to 100 for power generating window applications. *Energy & Environmental Science*. 2012.
- [2] A. Colsmann, A. Puertz, A. Bauer, J. Hanisch, E. Ahlswede, U. Lemmer. Efficient Semi-Transparent Organic Solar Cells with Good Transparency Color Perception and Rendering Properties. *Advanced Energy Materials*. Materials Views. 2011.
- [3] Farbstoffsolarzellen und -module. Fraunhofer ISE. 2011.
- [4] M.V. Santana. Influence of constructive parameters on energy consumption of office buildings located in Florianopolis-SC. Dissertation. Federal University of Santa Catarina, 2006 (In Portuguese).
- [5] WINDOW 7 /OPTICS 6. LBNL: Window & Daylighting Software. National Fenestration Rating Council (NFRC). 2011.
- [6] W.P. Wah, Y. Shimoda, M. Nonaka, M. Inoue, M. Mizuno. Field study and modeling of semi-transparent PV in power, thermal and optical aspects. *Journal of Asian Architecture and Building Engineering*. P. 556. 2005.

An Integrated Method for ICT Supported Energy Efficiency Improvement in Manufacturing

Hendro Wicaksono

*Karlsruhe Institute of Technology, Institute of Information Management in Engineering,
76131 Karlsruhe, Germany, E-mail: hendro.wicaksono@kit.edu, Phone: +49(0)721/608-45741*

Abstract

Energy and resource efficiency have been developing into one of the most crucial issues of the 21st century. Manufacturers are demanded to improve their energy efficiency by regulating their energy consumption. Energy management system helps the manufacturers to improve their energy efficiency. Most of the manufacturing companies face problems in implementing the energy management standards mostly due to the lack of ICT support, especially to help to evaluate the current energy performance. This paper presents an ICT based holistic approach to help manufacturing companies in the implementation of energy management system. The approach uses an ontological knowledge base containing the structures and rules representing best practices as reference of energy efficiency to support the qualitative evaluation. In the approach, we also develop measurement figures called Energy Performance Indicators (EPI) to determine the energy efficiency degrees in different resource units and organizational parts of the company. The knowledge management approach and EPI support quantitative and qualitative energy efficiency evaluation of manufacturing operations. Furthermore this paper introduces the method to improve the energy efficiency in production process planning.

Keywords

Energy Efficiency, Energy Management, Knowledge Management, EPI, Ontology

1 Introduction

Manufacturing that contributes 22% of GDP is one the key industries in Europe. Around 70% of jobs in European Union directly and indirectly depend on manufacturing. In 2005 the energy consumption in industry was around 17-18% of total energy consumption in European Union countries, and more than 90% was contributed by manufacturing industry [1]. The energy efficiency in manufacturing is considered as a crucial factor for the economic and environmental sustainability. Due to the today's market situation, customers dominate the manufacturers. The

manufacturers are demanded to fulfil the varied and complex customer requirements. The manufacturers who fail to satisfy the customers' requirements will not have a strong competitiveness in the market. They will lose profit because of decreasing sales on their respective market. The complex and high précised products are often demanded by customers. This makes the situation even more difficult for the manufacturers [2].

A common framework for manufacturers to cope this situation is through a corporate energy management. Most of the manufacturing companies face problems in implementing the energy management standards. The energy consuming production processes, building infrastructures, as well as power plants are documented and managed separately and in unstructured manner. Management has low visibility to usage of energy in the operation, due to the knowledge gap between managers and operators [3]. Best practices to avoid energy wasting are known by some employees. The other employees do not have access to this best practice knowledge. There are also no relations between the collected energy consumption and operational events, business processes, and resources in the company. Therefore the allocation of energy cost to produced goods and services is not accurate or useful in understanding the true cost of the product. Furthermore the existing corporate reporting for KPIs related to energy is time consuming and often not accurate [3]. There is no mechanism that indicates the energy performance of different organization parts within the company. In the implementation of energy management system, ICT has a potential role to accelerate the evaluation process against the objectives due to more automatic and intelligent measurements, data collection, data processing and analysis.

2 Research Objective and Approaches

Based on the described problem, this work aims to develop an approach utilizing information and communication technology to supports a holistic evaluation of energy efficiency in manufacturing. The approach considers both qualitative and quantitative evaluation. The evaluation is performed by employing a knowledge base, which is accessible by all of personals and systems in the company. The utilization of EPI (Energy Performance Indicator) helps the quantitative evaluation of energy efficiency in different organization units of manufacturing. The solution approach is depicted in Figure 1.

The data collector and analyser module collects the different data from company's IT systems, such as energy and sensor data (temperature, humidity, etc.) from Energy Monitoring and Data Acquisition (EMDA) System, product, production process and resource data from ERP and Manufacturing Execution System (MES). The knowledge base is represented using OWL ontology and SWRL rules. It contains relations between products, processes, manufacturing resources, building infrastructures, and stakeholders involved in the energy management.

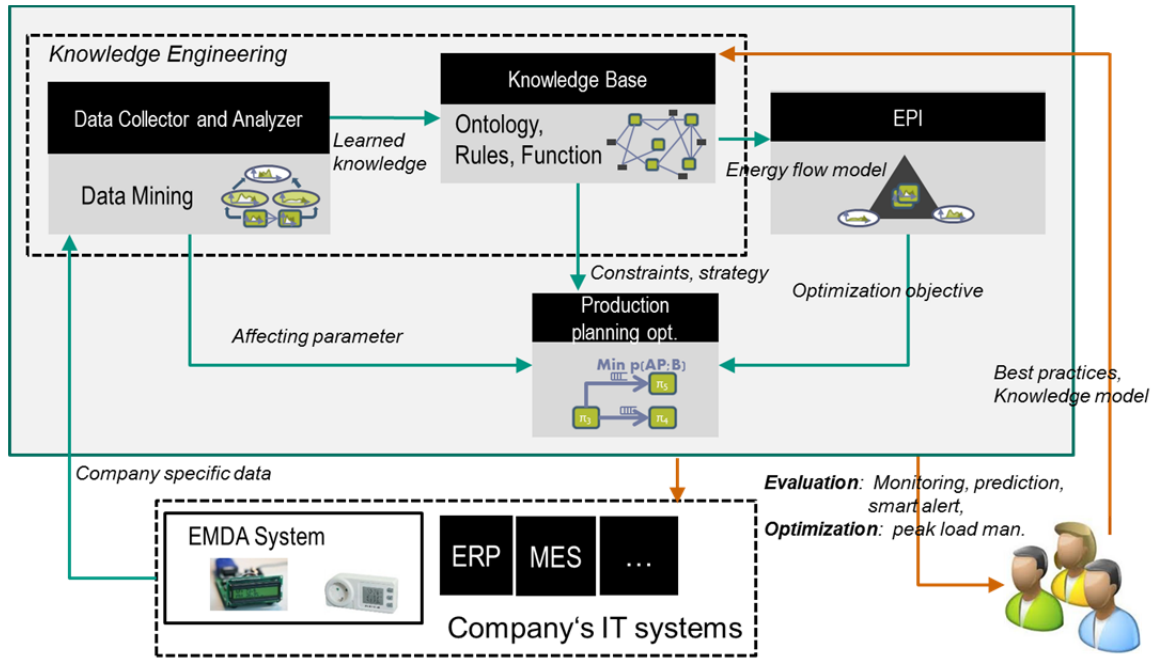


Figure 1: Solution Approach

Rules representing the energy usage patterns are learned from collected data using data mining. The rules allow the identification of energy usage anomalies or inefficiencies. Knowledge engineer of the company could also models the common best practices of energy management with rules. These rules are stored in the knowledge base as a reference of energy efficiency qualitative evaluations. The collected data are used to assign the parameter values of the mathematical model that calculates the EPI. The production planning optimization module is responsible to help the production planners to perform production planning that consider not only the costs but also energy efficiency. The module contains an optimization algorithm for finding the optimal production schedule that takes the rules as the constraints and the maximum EPI as the objective function

3 Knowledge Base Generation Method

The method to generate the knowledge base is depicted in Figure 2. The ontological classes as well as their attributes and relation definitions representing automation devices; for instance sensors, energy meters, building environments, production facilities, products and resources; are created manually by experts. The ontology containing these hand-crafted elements builds the knowledge base corresponding to the manufacturing energy management domain knowledge. It contains only the ontological classes or *Tbox* elements that describe the knowledge structurally and terminologically. It provides a common conceptual vocabulary in the manufacturing energy management domain. The domain knowledge represents the meta model of a manufacturing

energy management system, therefore it owns the validity for any manufacturing company and does not contain any instance-specific information. It also includes SWRL rules corresponding to common practices of energy management in manufacturing. The domain knowledge is added with company-specific rules. Some rules are created by the knowledge engineers in the company. Other rules are created semi-automatically by applying data mining algorithms. The algorithms generate association and classification rules from the hidden knowledge that is extracted from the collection of energy, production and energy-related infrastructure data. The rules are converted to SWRL format and integrated into the ontology [4]. The Abox knowledge elements are created semi-automatically based on factory configuration and layout. For this purpose, we have developed a method for interpreting the semantic information from building and factory construction drawings [5]. This will result in an instance of the manufacturing energy management domain ontology containing company-specific knowledge elements.

4 EPI Calculation

To develop energy efficiency metric for a single manufacturing company, first, it is important to define the system boundaries and a model that covers the different organization levels of production. In our work we develop CPAT, which is based on UPN model [6], and considers the

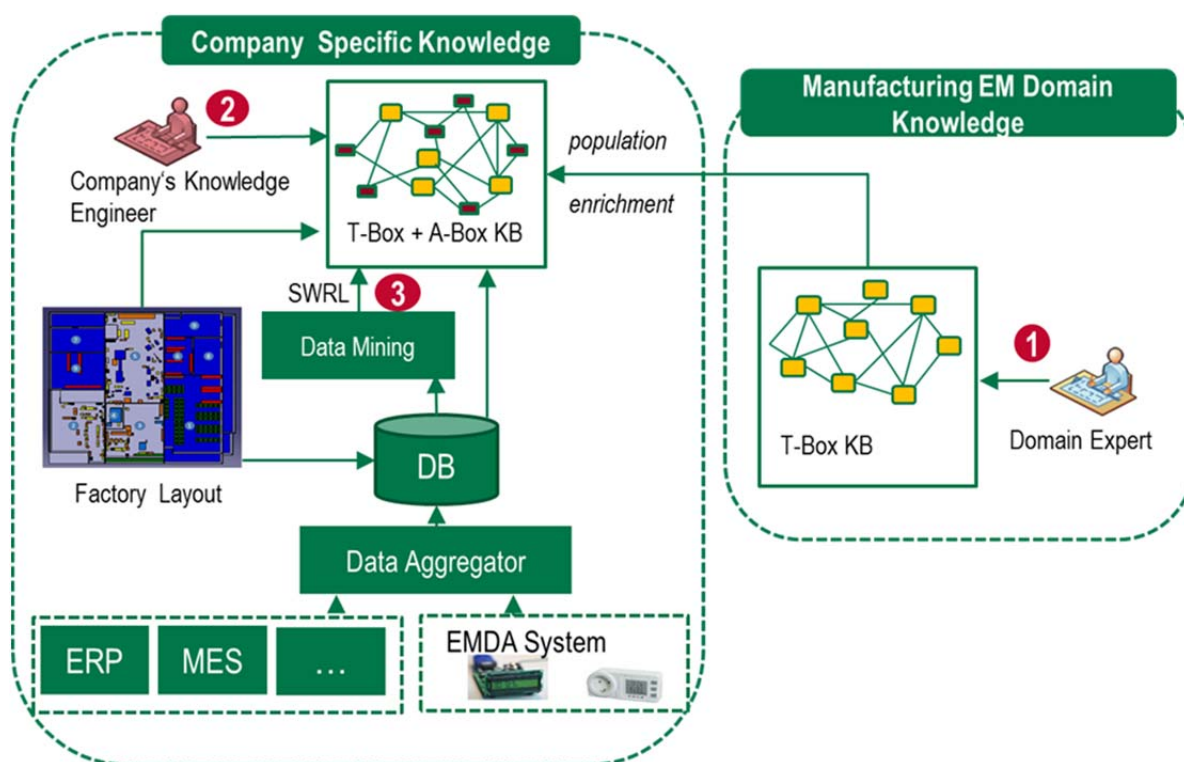


Figure 2: Knowledge Base Generation Methods [4]

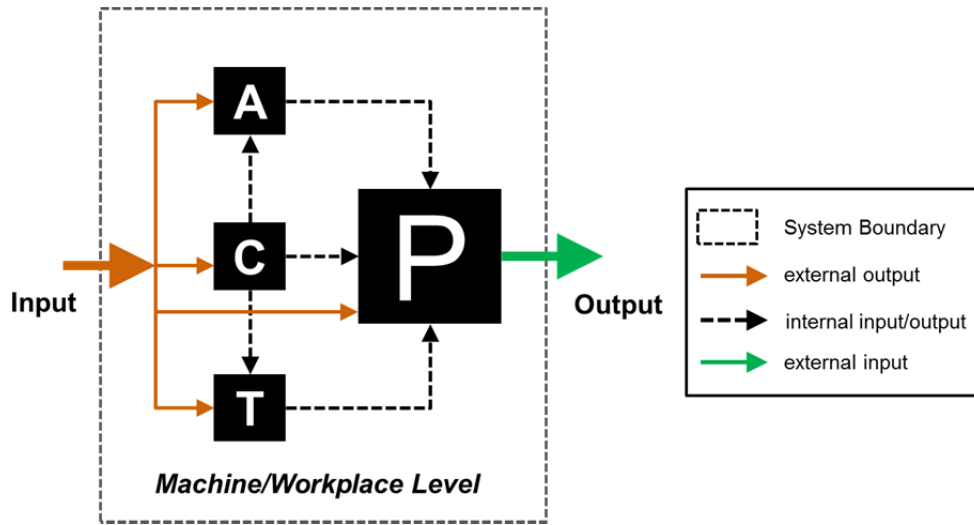


Figure 3: Energy flow model and system boundary for EPI calculation in machine level

machine, production line and factory level. The basic elements of the CPAT model are energy conversion (C), production (P), ancillary (A), and transport (T) facilities. Figure 3 illustrates the boundaries of different manufacturing organization levels. It can be seen, that the inputs of a production facilities are made up from direct and an indirect ones. The direct inputs are from utility companies or conversion facilities. The indirect inputs are provided due to the fact that the production facility receives the outputs of ancillary and transportation facility. Therefore the energy cost of a production facility is also ascribed with the output of the connected ancillary and transport facilities. Equation (1) calculates the EPI for the machine level. The calculations for the production line and factory levels are also performed similarly [7].

$$EPI_k = \frac{V_k}{P_k + \sum_{i=1}^m \alpha_i A_i + \sum_{j=1}^n T_j} \quad [1]$$

V_k is the output value generated by machine k [€], P_k denotes the input of production facility k [€]. α_i is the ratio of use input ancillary facility = $[0,1]$, A_i denotes the input ancillary facility i to each production facility [€], and T_j is the used transport facility j [€].

5 Summary

This paper presents integrated method to support evaluation (qualitative and quantitative) of energy performance that employs ICT. The method can help the check phase of energy management system. The approach uses a knowledge base that provides the structured and formalized knowledge as references of best practices in the company related to energy efficiency. It also creates manufacturing energy management domain ontology. The company specific

knowledge can be learned using data mining procedure. By using the data mining, the previously unknown relations among products, manufacturing processes, facilities, resources and energy consumption are revealed and incorporated into knowledge base. The approach contains the development of EPI to measure the energy consumption's performance of different manufacturing organization units. The approach helps production planners to plan their production by considering the energy efficiency. The approach also improves the awareness of the stakeholders to make decision by strongly taking considerations whether their decision affects the energy efficiency in the company.

References

- [1] Manufuture, *A vision for 2020. Assuring the future of manufacturing in Europe*, 2004, <http://www.manufuture.org>, Access Date: 11/10/2012
- [2] S. Kinkel, *Anforderungen an die Fertigungstechnik von morgen – Wie verändern sich Variantenzahlen, Losgrößen, Materialeinsatz, Genauigkeits-anforderungen und Produktlebenszyklen tatsächlich?* Fraunhofer Institut ISI, Mitteilungen aus der Produktionsinnovationserhebung Nr. 37, September 2005
- [3] L. Meyer, *Automated Surveillance, Management and Optimisation of Energy Utilisation. Efficiency Days Track*, Hannover Messe April 8th, 2011
- [4] H. Wicaksono, S. Rogalski, and J. Ovtcharova, *Ontology Driven Approach for Intelligent Energy Management in Discrete Manufacturing*, Proceeding 4th International Conference on Knowledge Engineering and Ontology Development, 4-7 October 2012, Barcelona, pp. 108-114,2012
- [5] H. Wicaksono, K. Aleksandrov, and S. Rogalski, *An Intelligent System for Improving Energy Efficiency in Building Using Ontology and Building Automation Systems*, Kongoli, F. (Ed.), Automation, Publisher: InTech, Open Access Publisher, pp. 531-548, 2012
- [6] C. Fünfgeld, *Energiekosten im Betrieb*, Solar Promotion GmbH-Verlag, Munich, 2000
- [7] H. Wicaksono, K. Aleksandrov, S. Rogalski, J. Ovtcharova, *An ICT Supported Holistic Approach for Qualitative and Quantitative Energy Efficiency Evaluation in Manufacturing Company*, Competitive Manufacturing for Innovative Products and Services, Proceeding, APMS 2012 International Conference Advances in Production Management Systems, Rhodes Island, Greece, 2012

Intelligent knowledge generation for energy management in buildings

Hendro Wicaksono, Preslava Dobрева

*Karlsruhe Institute of Technology, Institute for Information Management in Engineering,
76131 Karlsruhe, Germany, E-mail: hendro.wicaksono@kit.edu, preslava.dobрева@kit.edu,
Telefon: +49(0)721/608-46622*

Summary

Energy consumption in buildings is currently representing a significant percentage of the whole energy consumption on earth. The EU responds to this trend by dedicated policy making and financially supporting research activities in the field of efficiency improvement without decreasing inhabitants comfort. This paper describes a method for intelligent energy management in public buildings, going behind classical data-driven approaches commonly used by BMS solutions. An ontology based approach for energy analysis offering extended concept for automated population, self-learning mechanisms and integration to other systems. Furthermore we demonstrate how the energy performance analysis is improved using the ontology based approach.

Keywords

energy efficiency in public building, knowledge management, ontology development, ontology population

1 Introduction

As buildings have important share in the whole energy consumption (1), systems for energy management are acknowledged as main source for energy savings or costs reduction (2). However together with the comprehensive improvement of energy efficiency, modern building automation systems have great potential to improve also quality of life and safety. Established technologies on the market offer user friendly way to control and monitor building conditions (digitalSTROM and WPC offer energy measurement and sensors by using small chips that consume less than 10 mW (3), however this does not come alone with optimal energy usage or prediction of the behavior. A second weakness is that existing technologies related to energy control within buildings consider the building as a stand-alone element and no interfaces for future possible integration to bigger analytical systems are considered.

Furthermore, energy savings in buildings can be increased by developing integrated knowledge management techniques that not only drive classical data management, but are able to

“create” knowledge and understand the complex system of the building as a live organism that can be connected to other similar ones, in order to increase the efficiency impact.

In this paper we propose a framework for intelligent energy management in buildings by connecting building automation systems. The framework provides intelligent analysis on relations between energy consumption, behavior model (activities and events in the building), building related information (geometry, boundary conditions, etc.) and surrounding factors, such as temperature, weather condition, occupant habits. We also introduce the ontology modeling method that is aligned with existing building information modeling standard called Industry Foundation Class (IFC).

2 Related Work

The importance of introducing feedback mechanisms in the energy consumption analysis has been recognized by the Electric Power Research Institute USA that conducted research of electricity consumption feedbacks in household at 2009. Research showed that real-time feedback allows users to monitor their energy consumption and/or control appliances and this “awareness” increase their involvement in the saving techniques. Additionally, building automation technologies may offer different functionalities, but do not support occupancy metering or dynamic factors.

In order to create representative states of the building, ontologies could be used (4). Ontologies are also utilized to support complex interoperation, alignment with specific building automation Standard entities (the IFC Standard), for, knowledge sharing, conceptual information integration and validation tasks in building automation environment. Recent research highlighted the efficiency of using ontology for semantic enhanced content management in complex data management structures of the building environment (5).

3 Concept

The proposed framework allows the users to have an integrated view of energy consumption in the entire building. With the help of building automation system and other metering devices, the energy consumption can be evaluated in different detail levels and quality, for instance, energy consumption per appliance, per group of appliances, per zone in the building, or per user event. Therefore, energy consumption can be evaluated based on activities or events that occurred in the building, so occupants can get an exact overview of their behavior-specific energy consumption. The improvement can be achieved by combining different functions such as energy monitoring, data analysis, as well as manual and automatic controlling using building automation system. Figure 1 depicts the designed approach of ontology population as knowledge base.

The **knowledge base** is the center point of the energy management framework and it is represented in OWL (Web Ontology Language), a W3C specified knowledge representation language (6). Two types of ontologies have been developed - one generic ontology representing a common information model for building energy management, and then it is populated and extended with building specific information resulting more building specific ontologies corresponding to the specific buildings

The **generic ontology** is created by a building information modeling expert. It represents domain knowledge for building holistic energy management and contains definitions, terminologies (T-box), and taxonomies that are aligned with IFC, applicable in any building. The generic ontology is then instantiated and enriched with building specific information. Data collector module collects energy and sensor data from different building automation systems installed in the building. It contains interface to communicate with different building automation logic control units or gateways via SOAP. The module is also responsible to collect occupant activities or behavior in the building. For this, a web-based interface to model occupant activities is developed.

Creation of specific populated ontology

In order to allow visual representation of energy consumption data, we perform necessary **data pre-processing** such as removing erroneous values, data transformation, data selection and data conversion. The data are prepared to enable an energy consumption analysis in different criteria based on relation between rooms, appliances, time, and user events. Therefore it allows a data-driven analysis that is conducted directly on the collected data by performing SQL-query, simple calculation, or visualization, for instance, energy consumption per time unit and each appliance. The data is provided in such a form to enable the execution of data mining algorithm for finding the energy usage pattern.

A building plan is usually drawn in 2D using CAD software applications, such as AutoCAD. Unfortunately, 2D-drawings contains only geometrical information, for instance, lines, points, curves, circles, etc. the CAD layouts cannot describe any semantics of building components contained in the drawing. And more, different AutoCAD versions provide different representations of the geometrical and object-related information which makes difficult any concept for automated extraction of data. However we developed a method that interprets semi-automatically **semantics from 2D-drawings** (from all AutoCAD and IFC versions files) which and populate the ontology. The tool combines user input with pattern matching methods. First, A CAD drawing is exported to DXF. Then we import the primitives in our tool OntoCAD from the exported construction layout files. The primitives are extracted and clustered in layers like they were in AutoCAD. This vector based data representation is the basis for the viewer and the

pattern matching algorithms. An important user input at the beginning is the mapping of the ontology specific data and object properties with the OntoCAD functions, for instance the computation of the object position. The implemented pattern matching and classification algorithms recognize building elements based on user defined templates. The user selects an object that can directly be populated in the ontology or he can choose to search for similar objects and then populate all of them at once. He has the possibility to directly validate the result and if necessary apply some corrections to the results. The results are continuously and automatically saved to the ontology.

To support the **ontology population from IFC drawing**, we develop a method to map the IFC entity to OWL class explicitly. We use class annotation to perform the mapping. All class annotation correspond IFC entity, for instance IfcWall to OWL class Wall. The explicit IFC-OWL class mapping accelerates the ontology population process from IFC drawing containing semantic information. If we have an entity in our IFC drawing, by querying the ontology using SPARQL, we can find the corresponding OWL class. The following SPARQL statement finds the OWL class Wall, if we have the IFC entity IfcWall.

In knowledge base represented in ontology, all conditions of energy wasting and anomalies are represented as SWRL. Periodically data acquisition module requests **real-time data from building automation gateway**. These data contain states given by all installed building automation devices. SWRL rules are used to decide whether these incoming data correspond to complex states, e.g. energy inefficiency and anomaly condition. We develop a rule engine based on SWRLJessBridge to support the execution of SWRL rules combined with Protégé API that provides functionality in managing OWL ontology. First the attribute values of relevant ontological instance are set to values corresponding to incoming data. After that the rule engine executes the SWRL rules and automatically assign individuals to the ontology classes defined in the rule's consequent. SPARQL is used to evaluate whether energy inefficient condition or energy usage anomaly occurs. Which appliances cause the energy wasting can be retrieved as well. It is performed by querying all individuals of EnergyInefficient or UsageAnomaly class. If individuals of these classes are found, the affected individuals are visualized and marked in the visualization and analysis tool. With this mechanism, user can have more awareness in order to avoid energy wasting.

The resulted ontology allows a knowledge-driven analysis. It means the analysis is not conducted directly on the data, but by utilizing ontology that representing knowledge.

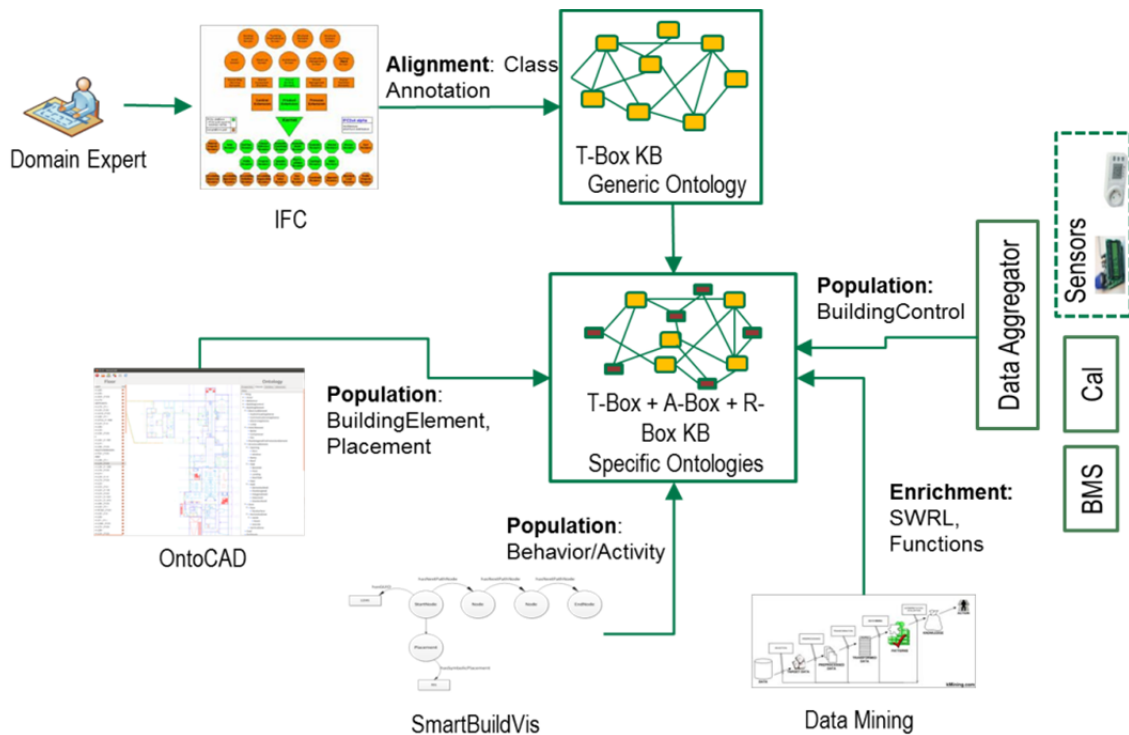


Figure1: Ontology population

4 Conclusion and Outlook

In this paper we have presented a system of comprehensive intelligent energy analysis in building. In the developed system, we combined classical data-driven energy analysis with novel knowledge-driven energy analysis that supported by ontology. The analysis is performed on information collected from building automation devices. The ontology supported analysis approach provides intelligent assistance to improve energy efficiency in households or public buildings, by strongly considering individual user behavior and current states in the building. Users do not have to read the whole energy consumption data or energy usage profile curves in order to understand their energy usage pattern. The system will understand the energy usage pattern, and notify user when energy inefficient conditions occur.

We have presented also an approach to develop the ontology as the knowledge base of the intelligent energy management system. There are different methods and steps to generate the ontology. We differentiated between generic ontology as generic information model and building specific ontology containing the building specific information. The generic ontology is aligned with IFC to allow interoperability of our system with existing industry standards. We introduced the main resources of the ontology representing the main elements in energy management in building. We presented briefly a tool called OntoCAD to perform semi-automatic extraction of

semantic information and population of building elements in the ontology from CAD drawings. We also introduced our approach to model occupant behavior and building states that affect the energy performance of the building. In this work, we also integrated SWRL rules that are extracted from different data, i.e. energy consumption, sensor data, and behavior using data mining algorithms.

The approach described in this paper can be adopted in more complex systems such as production systems by integrating the generic ontology with other ontologies in production system domain. Additional relations ontological components representing knowledge in production system, for example product, production tasks, machine related information should be created.

Literature

- [1] C.a.Balaras, A.G.Gaglia, E.Georgopoulou, S.Mirasgedis, Y.Sarafidis, and D.P.Ladas. European residential buildings and empirical assessment of the Hellenic building stock, energy consumption , emissions and potencial energy savings". *Building and Environment*, vol.42, no.3. 2007, pp. 1298-1314.
- [2] D.Simthson. www.modbs.co.uk. *Financing a route to reducing energy costs*. [Online] February 07, 2013.
http://www.modbs.co.uk/news/fullstory.php/aid/11483/Financing_a_route_to__reducing_energy_costs_.html.
- [3] Watteco. WPC Product Description. 2009.
- [4] C.Reinisch, W.Granzer, F.Praus, W.Kastner. Integration of Heterogeneous Building Automation Systems using Ontologies. *Proceedings of 34th Annual Conference of the IEEE Industrial Electronics Society (IECON 2008)*. 2008, pp. 2736-2741.
- [5] Wicaksono, H., Aleksandrov, K. and Rogalski, S. An Intelligent System for Improving Energy Efficiency in Building Using Ontology and Building Automation Systems. [book auth.] F. (Ed.) Kongoli. *Automation*. s.l. : Open Access Publisher, 2012, pp. 531-548.
- [6] M. Smith. C Welly. D McGuinness. OWL Web Ontology Language Guide, In: W3C Recommendation.2004.

Simulation der ^{90}Y Handexposition des Personals in der Nuklearmedizin

Christoph Blunck¹, Frank Becker¹, Manfred Urban²

¹Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Nukleare Entsorgung

76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Deutschland, E-mail: christoph.blunck@kit.edu, Telefon:
+49(0)721/608-28797

²WAK Rückbau- und Entsorgungs-GmbH, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Deutschland

1 Einleitung

Beim Umgang mit offenen Radionukliden in Technik, Medizin und Forschung können insbesondere in Quellnähe wegen der geringen Durchdringungsfähigkeit der Betastrahlung stark inhomogene und kleinräumig nur schwer quantifizierbare Beta-/Photonenstrahlungsfelder hoher Dosisleistung auftreten. Erheblich lokale, inhomogen verteilte Dosen der Haut sind möglich. Hieraus entsteht die Forderung, die Richtungsäquivalentdosis $H'(0,07)$ für Beta- und Photonenstrahlung bzw. die Oberflächenpersonendosis $H_p(0,07)$ der Hand einigermaßen aussagekräftig zu ermitteln. Üblicherweise werden dazu kleinvolumige Detektoren wie Thermolumineszenzdetektoren (TLDs) bzw.- Fingerringdosimeter verwendet. Die Ermittlung der Teilkörperdosis für die Hand in inhomogenen Beta- und Photonenfeldern mit Hilfe von TLDs ist jedoch mit großen Unsicherheiten behaftet. In Folge ist zu erwarten, dass die Qualität der durch Messung in inhomogenen Feldern ermittelten Teilkörperdosen sehr stark von den jeweiligen, individuell unterschiedlichen Trage- und Expositionsbedingungen abhängen und damit nur begrenzt objektiv sind. Dies gilt grundsätzlich für alle Betastrahlungsfelder in Technik, Medizin und Forschung. Ein typisches Beispiel für eine nuklearmedizinische Anwendung, die zu einer Strahlenexposition des medizinischen Personals in inhomogenen Beta- und Photonenfeldern führt, ist die Radiosynoviorthese als Behandlungsmethode für die Erneuerung der Gelenkschleimhaut. Zur Therapie wird der Betastrahler ^{90}Y appliziert. Untersuchungen haben gezeigt, dass die Jahresgrenzwerte für die Teilkörperdosis der Haut des in der Nuklearmedizin tätigen Personals überschritten werden können [1]. Da die Messung die Dosis je nach Trageort um mehrere Faktoren unterbewerten kann, wird dies jedoch oft nicht registriert.

Präventiver Strahlenschutz am Arbeitsplatz erfordert eine möglichst gute Kenntnis des Strahlenfeldes und der auftretenden Ortsdosisleistungen, um auf dieser Basis konkrete Strahlenschutzmaßnahmen zu ermöglichen. Eine in der Dosimetrie häufig gestellte Aufgabe ist die Untersuchung von verschiedenen konkreten Expositionsszenarien. So können Empfehlungen

bezüglich optimalen Handhabungen und angemessenen Abschirmungen gegeben werden. Die Analyse der Strahlenfelder und der darin potentiell auftretenden Teilkörperdosen ist aufgrund der Inhomogenität der auftretenden Strahlenfelder messtechnisch sehr aufwendig oder gar nicht möglich. So ist beispielsweise die Verteilung der Dosisleistung $H_p(0,07)$ auf der gesamten Hand zurzeit messtechnisch nicht vollständig erfassbar.

Ein wichtiges Instrument, um die Strahlenfelder und die darin potentiell auftretenden Teilkörperdosen analysieren zu können, ist die numerische Simulation mit Monte-Carlo-Codes, wie dem MCNPX Code [2]. Mit diesem können Expositionsszenarien modelliert und über Strahlentransportrechnungen simuliert werden. Die Verwendung geeigneter Handphantome ermöglicht die Bestimmung der Oberflächenpersonendosis $H_p(0,07)$. Die Unsicherheiten, die bei der Messung aufgrund der Inhomogenität des Strahlenfeldes bei der Ermittlung der maximalen Hautdosis auftreten, sind dabei nicht vorhanden. Der Einsatz von Simulationen mit Handmodellen zur Untersuchung von typischen Expositionsszenarien in der Nuklearmedizin fand in den letzten Jahren vermehrt Einsatz [3, 4, 5, 6]. Die Studien beschränkten sich auf die Simulation statischer Szenarien. Ziel der hier vorgestellten Arbeit besteht deshalb darin, die Verteilung der Dosis $H_p(0,07)$ auf der Hand bei Bewegungsabläufen in inhomogenen, zeitvarianten Strahlenfeldern zu simulieren. Anhand von Videoaufzeichnungen werden reale Arbeitsabläufe aus der Nuklearmedizin modelliert und mit dem MCNPX Code simuliert. Die Motivation ist dabei zum einen, die bei der Ermittlung der maximalen Hautdosis mit Fingerringen vorhandenen Unsicherheiten mit der Simulation zu reduzieren. Zum anderen könnte mit dieser Methode eine prospektive Dosisabschätzung erfolgen, was während der Planung und der Übung von routinemäßigen als auch von notwendigen speziellen Arbeitsabläufen in einem inhomogenen Strahlenfeld sehr hilfreich ist. Die präventive Dosisabschätzung liefert die Chance zur Optimierung der Verfahrensweise hinsichtlich des Strahlenschutzes und führt damit zu einer Dosisersparung.

2 Methodik

Die Modellierung geschieht mithilfe von mathematischen Handmodellen, die aus einfachen geometrischen Objekten zusammengesetzt sind. Analog zu einer realen Hand bilden diese Objekte die starren Glieder einer kinematischen Kette, die durch Gelenke miteinander verbunden sind. Die Steuerung der Hand und damit die Modellierung eines Expositionsszenarios kann in einem interaktiven Programm vorgenommen werden. Zusätzlich kann die Modellierung weitestgehend automatisch mit den 3D-Informationen eines Multikamerasystems erfolgen (siehe Abbildung 1). Die Rekonstruktion einer aufgenommenen Handstellung orientiert sich an den Koordinaten der Daumen- und Fingerkuppen, sowie an drei weiteren auf der Mittelhand. Das Anbringen von reflektierenden Markern ermöglicht eine automatische Lokalisierung und

Verfolgung der entsprechenden Positionen in den Bildern eines Multi-Kamerasystems. Die Berechnung der Koordinaten und die Rekonstruktion der Handstellung werden daraufhin ebenfalls automatisch durchgeführt. Analog dazu erfolgt auch die Positionierung der Strahlenquelle, in diesem Falle der mit ^{90}Y gefüllten Spritze, anhand der Koordinaten bestimmter Punkte des realen Szenarios. Bei der Betrachtung einer Handhabungssequenz werden wie bei der Bildwiederholungsrate eines Videos zeitlich äquidistante Momente herausgegriffen und nur diese modelliert und mit dem MCNPX Code simuliert. Die Abtastrate wird dabei je nach Zielsetzung, Geschwindigkeit der Bewegung und des räumlichen Dosisleistungsgradienten im Strahlenfeld individuell festgelegt.

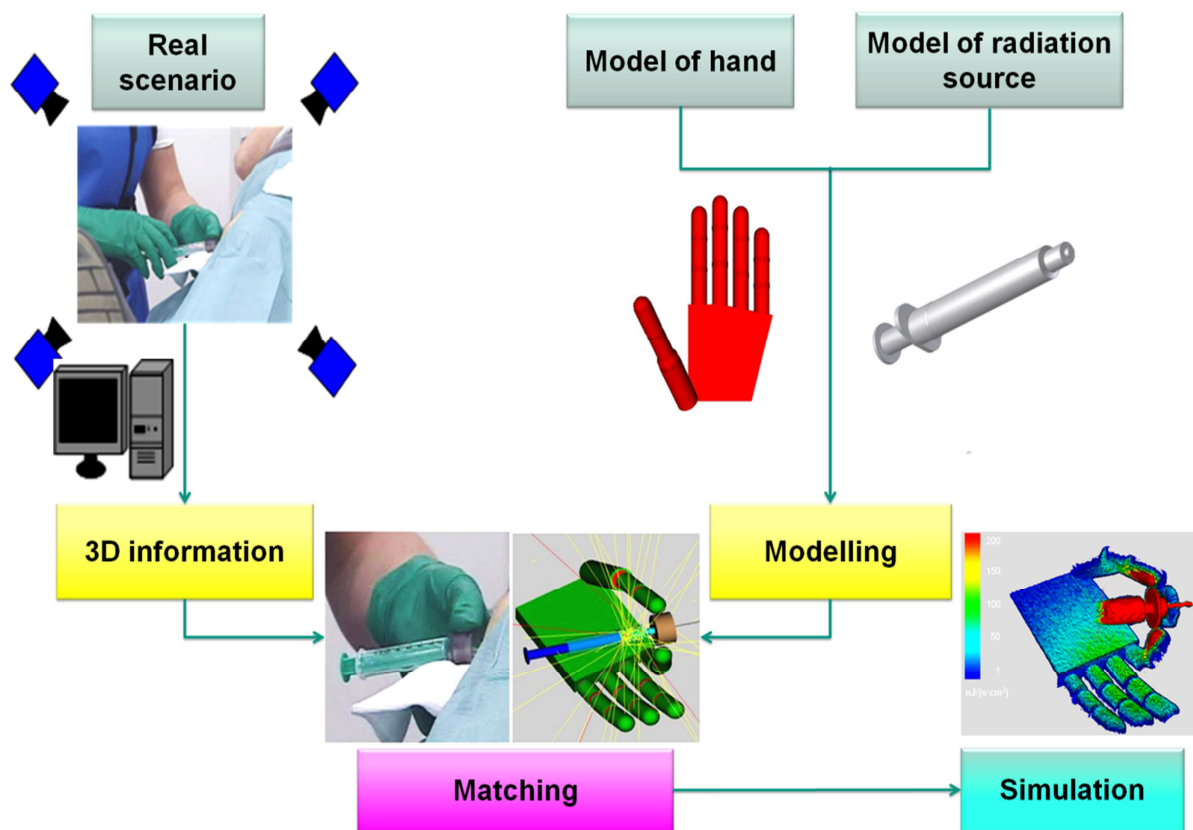


Abb. 1: Ein Expositionsszenario wird mit den Informationen (Bilder eines Multikamerasystems und die damit berechneten 3D-Koordinaten von markierten Punkten auf der Hand) des realen Szenarios modelliert. Die reale Handstellung wird dabei mit Hilfe einer inversen Kinematik Prozedur auf das Computermodell übertragen. Nach der Modellierung des Expositionsszenarios, kann dieses mit einem Monte-Carlo-Code für Strahlentransportrechnungen simuliert werden. Diese Simulation liefert die gewünschten Informationen, wie die in der Grafik unten rechts gezeigte Verteilung der Energiedeposition auf der Hand.

3 Ergebnisse und Ausblick

Anwendungen der Methodik bei Handhabungen mit ^{90}Y , unter anderem bei der Applikation im Rahmen einer Radiosynoviorthese zeigten, dass die Simulationen grundsätzlich dazu geeignet sind, die Verteilung der Dosis an den Händen zu bestimmen. Zwar können sich die simulierten Dosiswerte an einzelnen Positionen um mehr als den Faktor 2 von den gemessenen Dosiswerten unterscheiden, insgesamt liefert der direkte Vergleich zwischen gemessenen und simulierten Dosiswerten gleicher Handhabungen jedoch eine gute Übereinstimmung. Aufgrund der hohen Messunsicherheiten¹ sind Abweichungen zwischen Simulation und Messung ohnehin immer zu erwarten.

Ein Vorteil der Simulation gegenüber den Messungen ist, dass letztere mit den operationellen Dosisgrößen, wie der Oberflächenpersonendosis, immer nur einen Schätzwert für die nicht messbaren Körperdosen liefern. Mit der Simulation sind diese dagegen direkt bestimmbar. Für zukünftige Anwendungen wäre auch eine Erweiterung des Handmodells zu einem beweglichen Ganzkörpermodell denkbar. Dies würde bei geeigneter Gewebe- und Organdifferenzierung auch die Ermittlung der effektiven Dosis ermöglichen.

Die vorgestellte Methodik, Körperdosisgrößen bei der Handhabung von Radionukliden zu simulieren, lässt sich prinzipiell auch auf andere Bereiche ausweiten. Auch im Hinblick auf den Ausstieg aus der Kerntechnik sind der Strahlenschutz und die Dosimetrie ein wichtiges Thema. Bei der Planung von Arbeiten im Rückbau oder in Endlagern sind der präventive Strahlenschutz und eine prospektive Dosisabschätzung notwendig. Numerische Simulationen können dazu einen wichtigen Beitrag leisten.

Literaturverzeichnis

- [1] A. Rimpler, I. Barth. Beta radiation exposure of medical staff and implications for extremity dose monitoring. *Radiation Protection Dosimetry*, 125(1-4):335-339. 2007.
- [2] D. Pelowitz. MCNPX USER'S MANUAL Version 2.6.0 Los Alamos National Laboratory, LA-CP-07-1472. 2007.
- [3] Ch. Blunck, F. Becker, L. Hegenbart, B. Heide, J. Schimmelpfeng and M. Urban. Radiation Protection in Inhomogeneous Beta-Gamma Fields and Modelling of Hand Phantoms with MCNPX. *Radiation Protection Dosimetry*, 134(1):13-22. 2009.

¹ Aufgrund der nicht exakt vorhersehbaren Expositionsbedingungen (Zusammensetzung, Energiespektrum und die Einfallrichtung der Strahlung) sind Abweichungen zwischen dem Messwert und dem wahren Wert der Dosis nicht zu verhindern. Die Anforderungen an ein Personendosimeter sind deshalb nicht die exakte Messung der Dosisgröße, sondern, dass die Abweichungen innerhalb bestimmter Grenzen liegen. Je nach Dosisbereich sind damit Abweichungen zwischen 30 und 100 % zulässig [7].

- [4] D. Ilas, K. Eckermann, S. Sherbini and H. Karagiannis. Monte carlo assessments of absorbed doses to the hands of radiopharmaceutical workers due to photon emitters. *Nuclear Technology*, 168(1):164-168. 2009.
- [5] S. Sherbini, D. Ilas, K. Eckermann and J. DeCicco. Correction factors applied to finger dosimetry: a theoretical assessment of appropriate values for use in handling radiopharmaceuticals. *Health Physics*, 10168(1):1-12. 2011.
- [6] P. Ferrari, M. Sans-Merce, A. Carnicer, L. Donadille, M. Fulop, M. Ginjaume, G. Gualdrini, F. Mariotti and N. Ruiz. Main results of the Monte Carlo studies carried out for nuclear medicine practices within the ORAMED project, *Radiation Measurements*, 46(11):1287-1290. 2011.
- [7] Strahlenschutzkommission. Anforderungen an Personendosimeter. Empfehlungen der Strahlenschutzkommission. 2011.

Verteilung und Bedarf elektrischer Speicher im deutschen Energiesystem

Optimierung des Speicher- und Kraftwerksparks bis 2040 unter Berücksichtigung von Netzrestriktionen

Sonja Babrowski, Patrick Jochem, Wolf Fichtner

Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Industriebetriebslehre und Industrielle Produktion (IIP), Hertzstraße 16, 76187 Karlsruhe, Deutschland, E-Mail: Sonja.Babrowski@kit.edu, Telefon: +49(0)721/608-44676

Kurzfassung

Der Bedarf Elektrizität kurzzeitig zu speichern nimmt mit zunehmendem Anteil der volatilen Erneuerbaren Energien am Erzeugungsmix zu. Da in Deutschland die Erzeugungs- und Lastzentren geographisch entfernt voneinander liegen, muss gleichzeitig mehr Elektrizität über weite Strecken transportiert werden. Dadurch kann es zu Netzengpässen kommen. Speicher können sowohl zum Engpassmanagement als auch zur Speicherung der überschüssigen Erzeugung aus Erneuerbaren Energien eingesetzt werden. Für die Installation von Speichern sind aber neben technischen auch ökonomische Kriterien entscheidend, die sowohl von möglichen alternativen Technologien als auch von der Entwicklung der momentan hohen Investitionen für Speicher abhängen. Um den zukünftigen Kurzzeitspeicherbedarf möglichst ganzheitlich abschätzen zu können, werden Ausbau-optionen für Speicher in das optimierende Energiesystem PERSEUS-NET-TS implementiert. PERSEUS-NET-TS ist ein myopisches Stoff- und Energieflussmodell mit einem integrierten Nodal Pricing Ansatz zur Berücksichtigung von Netzengpässen. Über eine gemischt-ganzzahlige Optimierung wird der Ausbau und Einsatz des Kraftwerksparks in Deutschland bis 2040 unter Berücksichtigung der DC-Lastflüsse berechnet und damit auch der Aufbau und die Allokation von Speicherkraftwerken. Zentrales Ergebnis dabei ist, dass bis 2040 knapp 9 GW Speicherleistung aufgebaut werden. Diese werden erzeugungsnah aufgebaut, helfen aber gleichzeitig zu einer besseren Netz-auslastung, die sich in einem Angleichen der Knotenpreise zeigt.

Stichworte

Elektrische Speicher, Energiesystemmodellierung, Optimierung, PERSEUS

1 Einleitung

Nach den Zielen der Bundesregierung sollen bis 2040 60 % der Bruttostromerzeugung aus Erneuerbaren Energien (EE) bestehen [1]. Wegen der volatilen Einspeisung von Wind- und Solarstrom wird dies nicht ohne eine Anpassung des Übertragungsnetzes und entweder einem zusätzlichen (Reserve-) Kraftwerkspark, mit zum Teil geringen Volllaststunden, oder Speicherkraftwerken funktionieren. Bislang wurde Elektrizität überwiegend zum Zeitpunkt und am Ort erzeugt, an dem sie benötigt wurde. Mit dem Aufbau großer Windparks in der Nord- und Ostsee verändert sich dies. Erzeugte Elektrizität muss zukünftig durch Speicherung und Transport mit der Nachfrage sowohl im Zeitverlauf als auch im Ort in Einklang gebracht werden. Für die zeitliche Verlagerung sind Speicherkraftwerke eine Alternative zur Abschaltung von EE und der Vorhaltung großer Erzeugungskapazitäten. Gleichzeitig können Speicher zum Netzengpassmanagement dienen und zu einer verbesserten Auslastung der vorhandenen Leitungskapazitäten führen.

Um mögliche Alternativen und Netzengpässe gleichzeitig zu berücksichtigen wird der Aufbau und Einsatz von Speichersystemen im Kontext des zukünftigen Energiesystems im Folgenden mittels des Energiesystemmodells PERSEUS-NET-TS berechnet.

2 PERSEUS-NET-TS

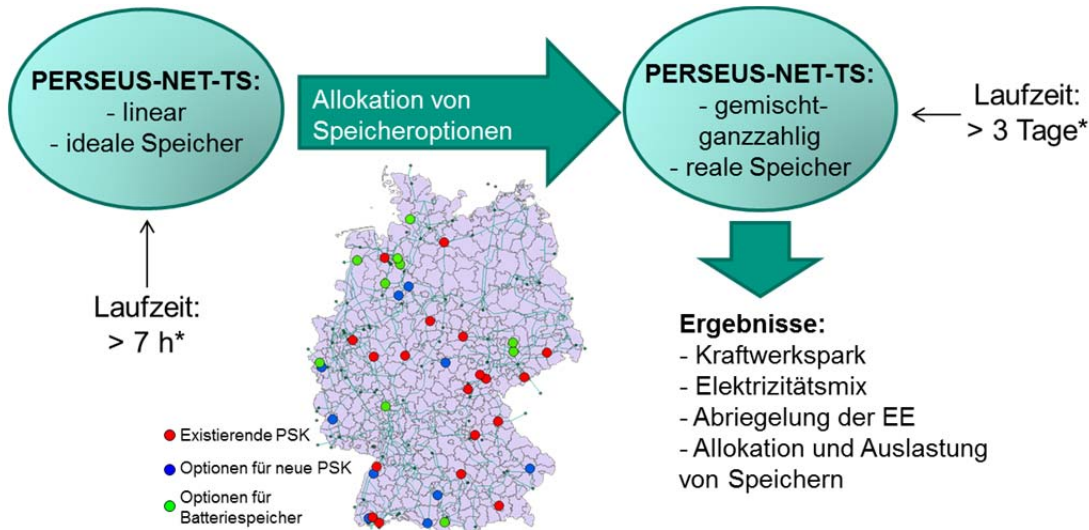
Bei PERSEUS-NET-TS handelt es sich um ein bottom-up Modell des deutschen Energiesystems, das je nach Einstellung linear oder gemischt-ganzzahlig optimiert wird. Es ist ein myopisches Nachfolgemodell von PERSEUS-NET [2] mit einem Fokus auf Kurzzeitspeicherkraftwerke. Neben dem Kraftwerkspark ist über einen DC-lastflussbasierten Nodal Pricing Ansatz das Hoch- und Höchstspannungsnetz (220 und 380 kV) integriert. Bis zu dem Zeithorizont von 2040 berechnet PERSEUS-NET-TS in fünf Jahres Schritten die Investitions- und Einsatzplanung des resultierenden Kraftwerkspark. Dabei stehen dem Modell Optionen zum Aufbau von Kohle-, Steinkohle-, GuD- und Gaskraftwerken, sowie von Speicherkraftwerken zur Verfügung. Diese Optionen sind den im Modell abgebildeten 442 Netzknoten zugeordnet. Über 550 modellierte Leitungstrassen verbinden diese Netzknoten. Größere Kraftwerke (> 100 MW) des aktuellen Kraftwerkspark sind unmittelbar spezifischen Netzknoten zugeordnet. Die Leistung kleinere Anlagen ist nach NUT3-Regionen (Kreisebene) zusammengefasst und ausgehend vom Mittelpunkt der Region invers zur Distanz auf die zwei nahegelegensten Netzknoten des Übertragungsnetzes umgelegt. Bestandsanlagen gehen 40 Jahre nach ihrer Inbetriebnahme vom Netz. Die Elektrizitätsnachfrage wird ebenfalls über die NUT3-Regionen auf die Netzknoten umgelegt und unter Berücksichtigung der Einwohnerzahl und des BIPs berechnet [2]. Die Deckung der exogen vorgegebenen stündlichen Nachfrage für eine Winter- und eine

Sommerwoche ist die treibende Kraft der Optimierung. Die Nachfrage muss an jedem Knoten zu jedem Zeitpunkt unter Berücksichtigung der Netzrestriktionen, sowie techno-ökonomischer Restriktionen des Kraftwerksparks gedeckt werden. Die Elektrizität kann dabei mit den am Netzknoten vorhandenen Kraftwerken erzeugt werden oder von einem der Nachbarknoten über das Übertragungsnetz zu dem Knoten geleitet werden. Dabei wird für jede der berechneten Perioden über die Zielfunktion eine Minimierung der Systemausgaben angestrebt. Es werden zum einen die Kosten für alle in den Kraftwerken verwendeten Brennstoffe berücksichtigt. Kosten für CO₂-Zertifikate werden hierbei ebenfalls mit eingerechnet und sind wie die Brennstoffkosten dem World Energy Outlook 2012 [3] entnommen. Des Weiteren werden die bei der Stromerzeugung anfallenden variablen Kosten berücksichtigt, sowie Laständerungskosten für unterschiedliche Prozessniveaus in aufeinanderfolgenden Stunden für ein Teil der thermische Kraftwerke (Nuklear, Steinkohle und Braunkohle). Dazu kommen noch die anfallenden Fixkosten für den in der betrachteten Periode jeweils resultierenden Kraftwerkspark, sowie die Investitionen für den Aufbau von Neuanlagen. Die Investitionen für die endogene Aufbaupentscheidung der thermischen Kraftwerke sind aus der Leitstudie 2010 [4] übernommen und bleiben über den Zeithorizont unverändert. Für den Batteriespeicheraufbau, der ab 2020 zugelassen wird, wurden für diese Arbeit Investitionen in Höhe von 1000 € in 2020 angenommen die bis 2040 auf 700 €/kW sinken. Zudem wird analog zu [5] von einem fixen Verhältnis von Leistung zu Speicherkapazität (kW zu kWh) von 1 zu 5 ausgegangen.

3 Vorgehensweise

Durch die Verwendung von PERSEUS-NET-TS kann berechnet werden, wo und welche Kraftwerke aufgebaut werden. Soll bei Speichersystemen eine gleichzeitige Ein- und Ausspeicherung vermieden werden setzt dies allerdings die Verwendung von Binärvariablen voraus. Dadurch wird die Optimierung gemischt-ganzzahlig und es wird eine Binärvariable für jede betrachtete Stunde und jedem Speicher benötigt. Bei 336 berücksichtigten Stunden (zwei Wochen) je Periode erhöht sich die Rechenzeit mit jeder implementierten Speicheroption signifikant. Über ein gleichzeitiges Ein- und Ausspeichern kann der Wirkungsgrad der Speichersysteme verwendet werden um Elektrizität zu „vernichten“. Dies kann für die Optimierung sinnvoll erscheinen um das Herunterfahren von thermischen Kraftwerken mit Laständerungskosten zu vermeiden oder um die hinterlegten Ziele für die Einspeisung der EE zu erreichen. Zur Vermeidung der gleichzeitigen bidirektionalen Nutzung von Speichern wurde bei der hier vorliegenden Arbeit ein zweistufiger Ansatz gewählt. Zunächst wird mit idealen Speichern gerechnet, die einen Wirkungsgrad von 100 % aufweisen. Gleichzeitiges Ein- und Ausspeichern spielt somit keine Rolle und es kann linear mit kurzen Rechenzeiten optimiert werden. In diesem Schritt werden ca. 350 über Deutschland verteilten Netzknoten mit Optionen zum Aufbau von

Batteriespeicherkraftwerken ausgestattet. Zusätzlich werden insgesamt 30 Pumpspeicherkraftwerke (PSK) berücksichtigt, wovon 10 die momentan in der Planungsphase sind, als Ausbauoption integriert sind.



* Bei Nutzung von 6 Kernen auf einem Rechner der Konfiguration:
Windows Server 2008 R2 Enterprise; Intel(R) Xeon(R) CPU E5-1650 @ 3,20 GHz 3,20 GHz; 96 GB RAM; 64 Bit-Betriebssystem

Abb. 1: Vorgehensweise zur Vorauswahl möglicher Speicherallokationen

Der in der linearen Optimierung von PERSEUS-NET-TS resultierende Kraftwerkspark für 2040 wird hinsichtlich der Standorte von endogen zugebauten idealen Speichern analysiert. Diese Speicherstandorte werden nun der gemischt-ganzzahligen Optimierung als Standortoptionen für den Aufbau von realen Batterie- und Pumpspeicherkraftwerken mit Wirkungsgraden von ungefähr 80 % vorgegeben (vgl. Abb.1). Die im Folgenden vorgestellten Ergebnisse beziehen sich auf das erneute Durchrechnen von PERSEUS-NET-TS als gemischt-ganzzahliges Optimierungsproblem.

4 Ergebnisse

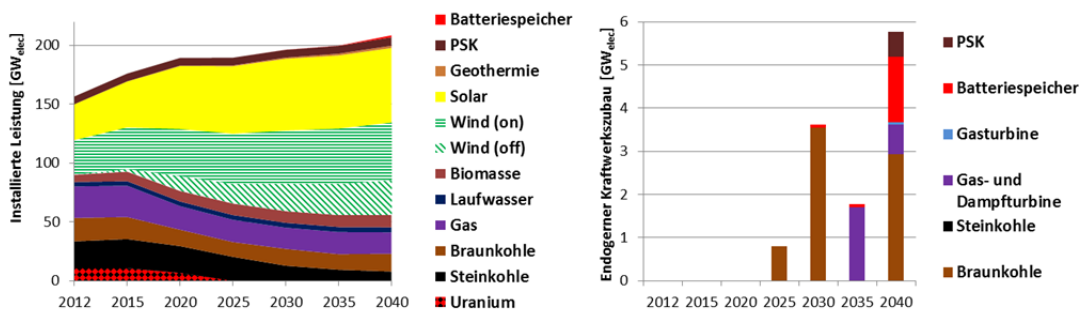


Abb.2: Installierte Leistung (links) und endogener Kraftwerkszubau (rechts)

Die Entwicklung des Kraftwerksparks stellt ein zentrales Ergebnis von PERSEUS-NET-TS dar. Die Entwicklung der EE ist dabei der Leitstudie 2011 [6] entnommen und wird exogen vorgegeben. Insgesamt erhöht sich die installierte Leistung in Deutschland bis 2040, der thermische Kraftwerkspark geht aber zurück (vgl. Abb.2, links).

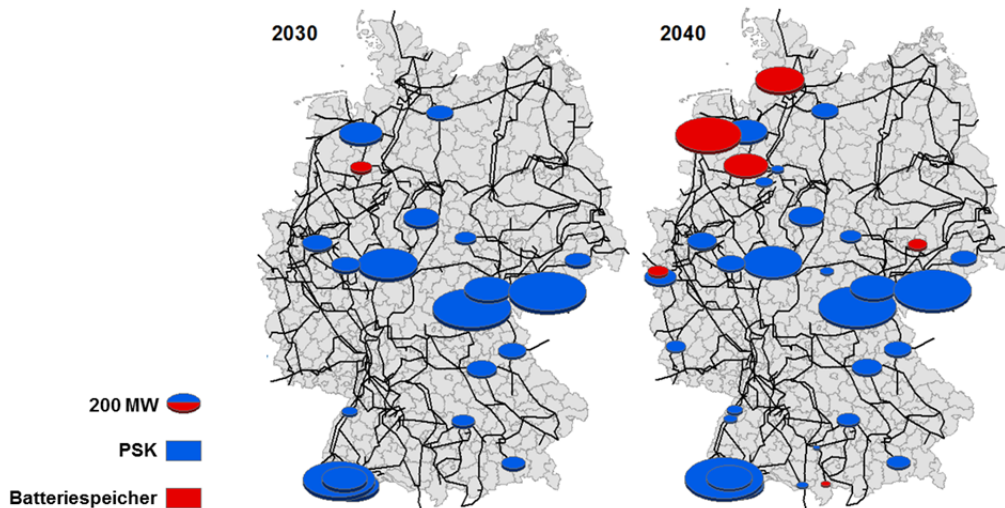


Abb.3: Installierte Speicherkapazität

Der Ausbau von Speichern setzt im Wesentlichen erst 2040 bei einem Einspeiseziel von 60 % EE und Preisen von 700 €/kW ein, stellt aber mit knapp 9 GW nur einen kleinen Teil (ca. 4 %) der installierten Leistung dar. Davon sind 1,7 GW Batteriespeicher. Betrachtet man aber nur die endogen installierten Kraftwerke, also den Neubau von thermischen Kraftwerken und Speichern, stellen Speicher bis 2040 19 % der neu installierten Leistung dar (vgl. Abb.2, rechts). Die meisten Batteriespeicher werden im Nordwesten nahe der Küste und damit nahe der Einspeisung durch Offshore Windparks der Nordsee zugebaut (vgl. Abb.3).

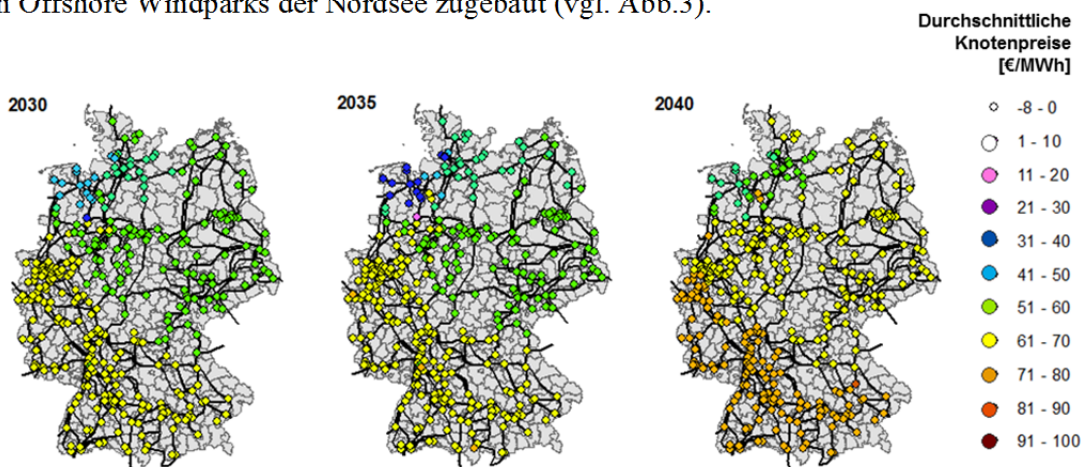


Abb.4: Durchschnittliche Knotenpreise

Allerdings zeigt die Entwicklung der Knoten-preise (Nodal Prices), dass Speicher gleichzeitig zum Engpassmanagement eingesetzt werden. So ist die Engpassituation und daraus resultierend die niedrigeren Preise im Nordwesten 2040 nach dem Speicheraufbau in dieser Region weniger gravierend als noch 2035 oder 2030 (vgl. Abb.4). Das gilt, obwohl im Modell auch 2040 noch weitere offshore Windkraftanlagen in der Nordsee ans Netz gehen.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Durch die Zunahme an EE ist der Aufbau von Speichersystemen zukünftig im deutschen Energiesystem aus gesamtwirtschaftlicher Sicht sinnvoll. Der Speicheraufbau sollte dabei erzeugungsnah erfolgen. Durch einen Speicheraufbau an kritischen Punkten im Netz können Speicher auch Netzentlastend sein. Eine genauere Analyse des Zusammenspiels zwischen Speichern, Kraftwerken und dem Netz ist Gegenstand weiterer wissenschaftlicher Arbeiten mit PERSEUS-NET-TS.

Literaturverzeichnis

- [1] Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi). Energiekonzept für eine umweltschonende, zuverlässige und bezahlbare Energieversorgung. 2010.
- [2] A. Eßer-Frey. Analyzing the regional long-term development of the German power system using a nodal pricing approach. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie (KIT). 2012.
- [3] Internationale Energie Agentur (IEA). *World Energy Outlook. 2012.*
- [4] Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU). Langfristszenarien und Strategien für den Ausbau der erneuerbaren Energien in Deutschland bei Berücksichtigung der Entwicklung in Europa und global - Leitstudie. 2010.
- [5] Verband deutscher Elektrotechnik Elektronik Informationstechnik e.V. (VDE). Energiespeicher für die Energiewende – Speicherbedarf und Auswirkungen auf das Übertragungsnetz für Szenarien bis 2050. Studie. 2012.
- [6] Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU). Langfristszenarien und Strategien für den Ausbau der erneuerbaren Energien in Deutschland bei Berücksichtigung der Entwicklung in Europa und global - Leitstudie. 2011.

2 Modellbeschreibung

Modelleigenschaften

Das dynamische Simulationsmodell ist deskriptiv und ermöglicht die Darstellung eines unvollkommenen Marktes ohne perfekte Voraussicht der Akteure. Es bildet ausschließlich die Wirkungszusammenhänge des Elektrizitätsmarktes ab und ist somit ein Ein-Sektor-Modell. Die Angebotsseite für elektrische Energie ist detailliert anhand der techno-ökonomischen Parameter der Erzeugungstechnologien abgebildet, während die Elektrizitätsnachfrage nach ökonomischen Sektoren gegliedert exogen in das Modell einfließt. Ein endogener Mechanismus der Preiselastizität der Nachfrage ist berücksichtigt. Die geographische Systemgrenze ist Deutschland. Die Kapazität zum Elektrizitätsaustausch mit dem benachbarten Ausland ist aggregiert abgebildet. Das Modell ist in der Lage, Energieszenarien für den Zeitraum zwischen dem Jahr 2000 und dem Jahr 2050 mit einer täglichen dynamischen Auflösung und einem fixen stündlichen Profil zu simulieren. Dabei dienen die ersten zehn Jahre als Validierungszeitraum. Die in dem Modell berücksichtigten umweltpolitischen Instrumente sind Einspeisevergütungen für erneuerbare Energien nach EEG, Zuschlagszahlungen für Elektrizität aus Kraft-Wärme-Kopplung nach KWKG, der CO₂-Zertifikatspreis und Investitionssubventionen für den Kraftwerksneubau.

Mathematische Darstellung

Der deutsche Elektrizitätsmarkt wird in dem vorgestellten Modell anhand von Differentialgleichungssystemen beschrieben. Beispielhaft wird hier die Gleichung für die Elektrizitätsnachfrage der ökonomischen Sektoren angeführt.

Gl. 1: Elektrizitätsnachfrage nach Sektoren

$$D_{s,t} = D_{s,0} + \int (D_{s,t-1} * (\frac{Pperc_{s,t}}{Pref_{s,t}})^{\eta_s}) * dt$$

mit

- $D_{s,t}$ Nachfrage der Sektor s zum Zeitpunkt t
- $Pperc_{s,t}$ Wahrgenommener Endverbraucherpreis des Sektors s zum Zeitpunkt t
- $Pref_{s,t}$ Referenz-Endverbraucherpreis des Sektor s zum Zeitpunkt t
- η_s Preiselastizität der Nachfrage des Sektor s

Um den Umfang und die Zielgrößen des Simulationsmodells darzustellen, werden in Tab. 1 die wichtigsten Eingabe- und Ausgabewerte zusammengefasst.

Tab. 1: Wichtige Eingabe- und Ausgabewerte des dynamischen Simulationsmodells

Eingabewerte	Ausgabewerte
<ul style="list-style-type: none"> • Elektrizitätsnachfrage • Brennstoffpreise • Investitionen • Kraftwerkspark 2000 • Technologieparameter • Politikinstrumente 	<ul style="list-style-type: none"> • Elektrizitätspreise auf Grenzkostenbasis • Elektrizitätserzeugungskapazitäten • Elektrizitätserzeugung nach Technologieklasse • CO₂-Emissionen

Modellvalidierung

In der Literatur werden zwei Bereiche der Validierung von systemdynamischen Modellen unterschieden: Strukturvalidierung und Verhaltensvalidierung [4]. Für letztere werden neben der optischen Überprüfung der dynamischen Verhaltensmuster insbesondere Prognosegütemaße aus der Statistik eingesetzt, welche den Fehler zwischen simulierter und beobachteter (historischer) Zeitreihe messen [5].

Neben der häufig betrachteten Mittleren Absoluten Abweichung (Mean Absolute Error MAE) und der Wurzel der Mittleren Quadratischen Abweichung (Root Mean Square Error RMSE) bzw. deren Verhältnis zum Mittelwert der historischen Zeitreihe (pRMSE) wird zur tiefergehenden Fehleranalyse der Theilsche Ungleichheitskoeffizient herangezogen (Gl. 2) [6]. Durch dessen Umformung lässt sich der Mittlere Quadratische Fehler (Mean Square Error MSE) zerlegen in die Komponente Mittelwertfehler (Gl. 3), Varianzfehler (Gl. 4) und Kovarianzfehler (Gl. 5). Bei einer guten Prognose sollten der Mittelwertfehler und der Varianzfehler gegen null streben, der Kovarianzfehler, welcher den unsystematischen Fehler beschreibt, gegen eins.

Gl. 2: Theilscher Ungleichheitskoeffizient

$$U = \frac{\sqrt{\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (S_t - A_t)^2}}{\sqrt{\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (A_t)^2}}$$

mit
 S simulierter Wert
 A historischer Wert
 n Anzahl simulierter Werte
 t Zeit

Gl. 3: Mittelwertfehler

$$U_m = \frac{(\bar{S} - \bar{A})}{\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (S_t - A_t)^2}$$

mit
 \bar{S} arithmetisches Mittel der simulierten Werte
 \bar{A} arithmetisches Mittel der historischen Werte

Gl. 4: Varianzfehler

$$U_S = \frac{(s_S - s_A)^2}{\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (S_t - A_t)^2}$$

mit
 s_S Standardabweichung der simulierten Werte
 s_A Standardabweichung der historischen Werte

Gl. 5: Kovarianzfehler

$$U_c = \frac{2 * (1 - r_{SA}) * s_S * s_A}{\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (S_t - A_t)^2}$$

mit
 r_{SA} Korrelationskoeffizient der simulierten und historischen Werte

Tab. 2 zeigt die Anwendung der statistischen Prognosegütemaße MAE, pRMSE und die Fehlerzerlegung mittels des Theilschen Ungleichheitskoeffizienten für die Simulationsergebnisse der Variablen Elektrizitätspreis Tagesbasis, Elektrizitätspreis Future, Installierte Kapazität und Elektrizitätserzeugung im Vergleich zu ihren historischen Werten [7]. Es lässt sich feststellen, dass der Mittelwertfehler der analysierten Werte stets weniger als 10 % beträgt und der pRMSE bis

auf zwei Ausnahmen ebenfalls in diesem Bereich liegt. Beim Elektrizitätspreis Future wird mit Blick auf den Varianz- und Kovarianzfehler deutlich, dass der Fehler fast ausschließlich unsystematischen Ursprungs ist. Dies können insbesondere Spekulationseffekte an der Börse für Elektrizität sein, die in den Systemgrenzen dieses Modells nicht berücksichtigt sind.

Tab. 2: Ausgewählte Ergebnisse der Modellvalidierung

Variable	Jahr(e)	MAE	pRMSE	U _m	U _s	U _c
Elektrizitätspreis Tagesbasis	2008 sortiert	3,51 €/MWh	4,93 %	4,21 %	5,35 %	90,44 %
Elektrizitätspreis Future 3 Jahre	2006-2008	5,97 €/MWh	14,21 %	< 0,01 %	6,93 %	93,07 %
Installierte Kapazität gesamt	2000-2009	1501 MW	1,52 %	7,22 %	21,24 %	71,55 %
Steinkohle		600 MW	2,68 %	0,73 %	3,75 %	95,52 %
Erdgas		986 MW	5,69 %	5,69 %	22,69 %	71,62 %
Wind Onshore		372 MW	2,67 %	7,43 %	4,44 %	91,83 %
Elektrizitätserzeugung	2000-2009	5,99 TWh	4,99 %	3,30 %	12,72 %	83,99 %
Steinkohle		4,81 TWh	8,81 %	0,24 %	8,52 %	91,24 %
Erdgas		2,82 TWh	14,38 %	7,25 %	57,45 %	35,30 %

Bei der Elektrizitätserzeugung aus Windkraftanlagen auf dem Festland fällt bei eingehender Analyse auf, dass ein großer Anteil des Fehlers durch den Varianzfehler verursacht wird. Erklärt werden kann dies durch die variierende Güte der jeweiligen Windjahre. Da das Modell von einer gleichbleibenden Güte der Windjahre ausgeht, wird diese Schwankung nicht abgebildet.

3 Ergebnisse und Diskussion

Zur modellgestützten Analyse des Energiesystems können Szenarien definiert werden, welche verschiedene Entwicklungspfade ausgewählter Einflussgrößen hinsichtlich der deutschen „Energiewende“ beschreiben. Dabei werden Politiken, Brennstoffpreise und Elektrizitätsnachfrage von Deutschland als abhängig vom Wirtschaftswachstum dargestellt. Der Analysezeitraum erstreckt sich vom Jahr 2000 bis zum Jahr 2050. Es werden drei Szenarien unterschieden, die mit den in Tab. 3 wiedergegebenen Werten im systemdynamischen Modell simuliert werden.

In Szenario 1 wird eine Referenzsituation unterstellt. Dies bedeutet moderates Wirtschaftswachstum und die Fortführung der bestehenden Politiken für erneuerbare Energien und Kraft-Wärme-Kopplung. Die Brennstoffpreise für fossile Energieträger entwickeln sich gemäß den Szenarien deutscher Forschungsinstitute aus dem Jahr 2010 [8]. Szenario 2 ist gekennzeichnet durch geringes Wirtschaftswachstum, aber erfolgreiche Energieeffizienzmaßnahmen im Haushaltssektor und leicht steigende Brennstoffpreise. Der Fokus der Vergütungen richtet sich auf die Windkraft, welche angesichts knapper Finanzen als am vielversprechendsten hinsichtlich der

politischen Ausbauziele für erneuerbare Energien angesehen wird. Szenario 3 schließlich ist charakterisiert durch höheres Wirtschaftswachstum, steigende Elektrizitätsnachfrage und deutliche Aufschläge bei den Brennstoffpreisen. Die Vergütungen für alle erneuerbaren Energien bleiben auf dem Niveau des Jahres 2010.

Tab. 3: Entwicklung der Eingangsparameter in den definierten Szenarien

Parameter		Einheit	Szenario 1	Szenario 2	Szenario 3
Jährliche Wachstumsrate Elektrizitätsnachfrage 2010-2050	Haushalte	% / a	+ 0,25	-0,75	+0,50
	Industrie		- 0,25	-0,50	+1,00
	GHD		+0,50	-0,25	+1,50
Brennstoffpreise 2010-2050	Steinkohle	%	+ 300	+100	+600
	Erdgas		+ 500	+144	+950
	Biomasse		+ 500	+300	+800
EEG-Degression 2010-2050	Wind Onshore	% / a	1,5	0,0	0,0
	Wind Offshore		7,0	0,0	0,0
	Photovoltaik		9,0	9,0	0,0
	Biomasse		2,0	2,0	0,0
CO ₂ -Zertifikatspreis 2010-2050		%	+ 233	0	+500

Für die Analyse der Ergebnisse werden im Rahmen dieser Arbeit die Entwicklungen der Ausgabewerte für den durchschnittlichen Elektrizitätspreis an der Börse und den Anteil erneuerbarer Energien an der Elektrizitätserzeugung vorgestellt.

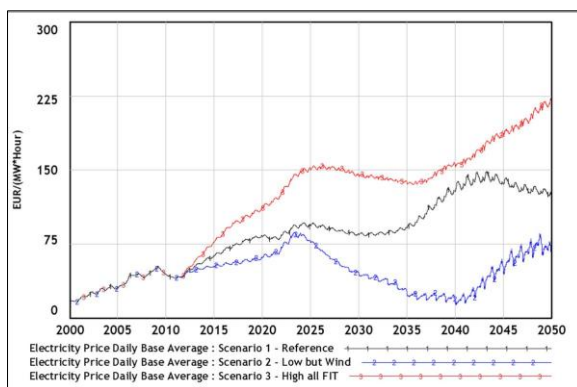


Abb. 2: Entwicklung der durchschnittlichen Elektrizitätspreise in den Szenarien

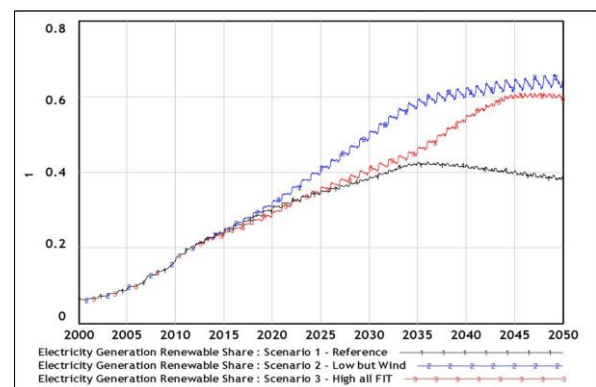


Abb. 3: Entwicklung des Anteils erneuerbarer Energien in den Szenarien

Aus Abb. 2 und Abb. 3 ist zu erkennen, dass im Referenzszenario bei einer mittleren Preisentwicklung für Elektrizität der Zielerreichungsgrad für den Anteil erneuerbarer Energien am geringsten ist, er beträgt im Zeitraum 2030 bis 2050 etwa 40 % und hat ab dem Jahr 2035 sogar

eine fallende Tendenz. Das Szenario 2 zeigt die Auswirkungen einer sinkenden Nachfrage nach elektrischer Energie: bei den im Vergleich niedrigsten Preisen wird der größte Anteil an erneuerbarer Elektrizitätserzeugung erreicht, der jedoch mit etwas über 60 % nicht an die gesetzten Ziele für das Jahr 2050 heranreicht. Szenario 3 schließlich weist eine ähnlich hohe Zielerreichung des Anteils Erneuerbarer Energien auf, die sich jedoch zu einem späteren Zeitpunkt einstellt als im Szenario 2. Außerdem wirken sich im dritten Szenario die steigenden Brennstoffpreise fossiler Energieträger stark auf den Elektrizitätspreis aus, so dass hier das im Vergleich höchste Niveau erreicht wird.

Aus den mit dem dynamischen Simulationsmodell berechneten Szenarien des deutschen Elektrizitätsmarkts lassen sich drei grundlegende Schlussfolgerungen ziehen:

- 1) Eine sinkende Elektrizitätsnachfrage hat den stärksten Effekt im Hinblick auf die Zielsetzungen der deutschen "Energiewende".
- 2) Höheres Wirtschaftswachstum ermöglicht die finanzielle Unterstützung von erneuerbaren Energien zur Kompensation einer steigenden Elektrizitätsnachfrage.
- 3) In keinem der dargestellten Szenarien werden die Ausbauziele für erneuerbare Energien im Jahr 2050 erreicht.

Literaturverzeichnis

- [1] A. Ford. *Cycles in competitive electricity markets: a simulation study of the western United State*, *Energy Policy* 27: 637-658. 1999.
- [2] K.-O. Vogstad. *A system dynamics analysis of the Nordic electricity market: The transition from fossil fuelled toward a renewable supply within a liberalised electricity market*, Thesis, Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway. 2004.
- [3] J. W. Forrester. *Industrial Dynamics*, Cambridge, MIT Press. 1961.
- [4] J. W. Forrester, and P. M. Senge. *Tests for building confidence in System Dynamics Models*, *TIMS Studies in the Management Sciences* 14: 209-228. 1980.
- [5] P. Andres, and M. Spiwoks. *Prognosegütemaße - State of the Art der statistischen Ex-Post-Beurteilung von Prognosen*, *Sofia-Studien zur Institutionenanalyse*, Darmstadt. 2000.
- [6] J. D. Sterman. *Business Dynamics - Systems Thinking and Modeling for a Complex World*, New York, Jeffrey J. Shelstad, The McGraw-Hill Companies, Inc. 2000.
- [7] Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie. *Energiedaten - Nationale und Internationale Entwicklung*, Berlin. 2011.
- [8] EWI, Prognos, and GWS. *Energieszenarien für ein Energiekonzept der Bundesregierung*, Studie im Auftrag des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie, Basel/Köln/Osnabrück. 2010.

An Experimental Comparison of the Combustion Characteristics of Standard Jet A-1 and Synthetic Jet Fuels

Robbin Bhagwan^a, Nikolaos Zarzalis^a, Peter Habisreuther^a, Fabio Turrini^b

^aKarlsruher Institut für Technologie, Engler Bunte Institut, Verbrennungstechnik

76131 Karlsruhe, Deutschland, E-mail: chitkara.robbin@kit.edu, Telefon: +49(0)721/608-

42127 ^bAvio S.p.A, Rivalta di Torino, Italy.

Abstract

ALFA-BIRD (Alternative Fuels and Biofuels for Aircraft Development) was a project co-funded by the European Union in the 7th Framework Programme for Research and Technological Development. Its objective was to investigate and develop a variety of alternative fuels for the use in aeronautics, motivated by the need to ensure a sustainable growth of the civil aviation, regarding the impact of fossil fuels on climate change, and in the context of oil prices that are highly volatile and increasing in the long term. As a partner of the project, KIT has studied the combustion characteristics of lean, turbulent and partially premixed swirled flames of synthetic jet fuels along with a standard Jet A-1 fuel.

Keywords

Alternative fuels, emissions, air-blast atomization, lean extinction limits

1 Introduction

Today, the ever-increasing demand and cost of crude oil required for the production of aviation fuel motivates researchers to develop synthetic jet fuels based on biomass, coal and other possible resources. The consistent policy issues with oil producing nations (e.g. Middle East) have forced industrialized and developing countries to explore their own resources for fuel and energy. In the European Union, many projects such as SWAFEA (Sustainable Way for Alternative Fuels and energy for Aviation), ALFABIRD (Alternative Fuels and Biofuels for Aircraft Development) and ECATS (Environmentally Compatible Air Transport System) etc. have been initiated with collaboration of industries, research labs and academia [1–4]. The major challenge with the new fuels is that they need to be compatible with the existing methods of fuel production, blending, transportation, delivery onto aircraft and consumption. Otherwise, proposing any significant change in the characteristics of aviation fuel asks for

altogether new regulatory procedures and infrastructure starting from production, transport, storage and the consumption units. The expense of this makes the option too difficult to implement in a running system. Any synthetic fuel capable of being used along with current Jet A-1 fuel with existent infrastructure is called a ‘drop in’ fuel. One important criterion for new synthetic fuels to be considered as ‘drop in’ is that they must possess similar characteristics to those of current jet fuels and must be approved via the ASTM D7566 standard. The first ever approved synthetic aviation fuel was fully synthetic jet fuel (FSJF) from SASOL [5]. Royal Dutch Shell also using the Fischer Tropsch process produced an aviation fuel component from natural gas, which fits the approved class of jet fuel components, known as Fischer Tropsch synthetic paraffinic kerosene (FT-SPK) [6]. In the first stage of ALFABIRD project, a reference fuel, base fuel and about 12 blends of candidate synthetic components were tested and the most interesting 4 fuels were taken forward for larger scale testing. The four fuels, FT-SPK, FT-SPK + 20% hexanol, FT-SPK + 50% naphthenic cut and FSJF (Fully Synthetic Jet Fuel from SASOL) were tested in detail for their different technical and handling aspects in the ALFABIRD project. These four fuels were analyzed in detail by Pidol et al. [7] for their physical and chemical characteristics. They concluded that the neat FT-SPK fails the ASTM D7566 standard due to its low density and low aromatic content. To enhance the properties of FT-SPK, 20% hexanol and 50% naphthenic cut were separately added in it. Within ALFABIRD project, KIT was responsible for evaluating combustion related performance for these fuels. The fuels used in this work were procured and blended by Institute of French Petroleum (IFP). This paper reports comparison of extinction limits and emissions performances of partially premixed turbulent flames at varied combustor conditions of the following synthetic fuels:

- a. FT-SPK, which mainly consists of paraffins. Naphthenes and aromatics are present in very small quantities.
- b. Blend of 20% hexanol and 80% FT-SPK by volume.
- c. Blend of 50% “naphthenic cut” and 50% FT-SPK by volume. Naphthenic cut mainly consists of naphthenes; whereas paraffin and aromatics together constitute up to maximum of 10% by volume.
- d. Fully synthetic jet fuel (FSJF)

2 Experimental setup

The measurements were performed at Pressurized EXhaust (PEX) rig located at Engler Bunte Institute, Karlsruhe Institute of Technology. Fig. 1 shows the rig, which includes the ceramic combustor, the burner, the gas probe and other important components used in the measurements. A thick ceramic cylinder made of compound alumina (Al_2O_3) is used as

combustor. Ceramic reduces the heat losses from the flame and results in near adiabatic conditions inside the combustor. Pressure transducer P 82R from Halstrup-Walcher is used to measure the static pressure of the combustion air before it enters the combustor. Ignition is performed by an electric igniter. After a stable flame is established in the combustor, the igniter is withdrawn out of the combustor. Hot gases produced in the combustor exit through a cylindrical cooling tower equipped with water spraying nozzles. A regulating valve (not shown here) at the end of cooling tower controls the pressure inside the combustor. To visually inspect the presence of the flame during the ignition and measurements, a glass window of 20 mm diameter is used.

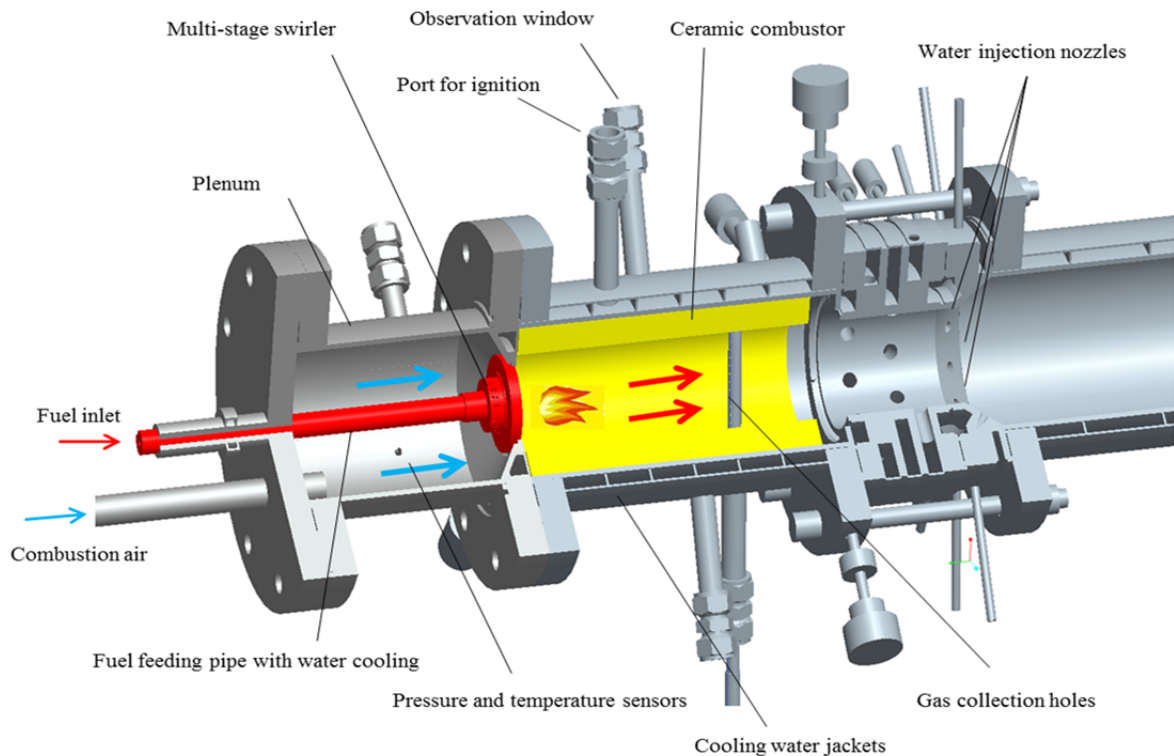


Figure 1: Pressurized exhaust gas rig at EBI, KIT.

3 Measurements of gaseous species

Exhaust gas samples were collected using an oil cooled suction probe which was placed at a distance of $x/D_0 = 4.2$ downstream of the burner where x is the axial distance from burner exit and D_0 is the combustor diameter. The suction probe was maintained at a temperature of 433 K with the help of an oil thermostat, which ensures the quenching of the reactions within the probe. The collected gas samples flowed to the exhaust gas analyzers through electrically heated hoses. Unlike many other measurements reported in the past, the sample lines used in the present work were undiluted and had multi-collection ports spread over the whole

diameter of the combustor. The material used to make the sample lines was chosen to be stainless steel and any sharp bends were avoided in the gas sampling line. To measure the mole fractions of CO, CO₂ and NO_x in the exhaust gas sample, first the water vapor was removed from the gas sample with the help of a drier and then the gas sample was fed to the measurement devices. Mole fractions of CO₂ and CO were detected by ‘Advance Optima’ of Hartmann & Braun, which is a Non-Dispersive Infrared (NDIR) gas analyzer. NO_x were detected with a chemical luminescence detector (CLD) from Eco-Physics. Using a wet exhaust gas sample (without the removal of water in the exhaust gas sample), the unburned hydrocarbons (UHC) were detected with a Flame Ionization Detector (FID). The formations of CO and NO_x are compared in terms of the emission indices. EI_x unambiguously expresses the ratio of mass of pollutant x formed to the mass of fuel burned. The unit of g/kg fuel burned is used to avoid usage of small numbers. Calculations of emission indices are done following the guidelines provided by the Society of Automotive Engineers (SAE) [8]. Equations 1 and 2 are used for the calculations of emission indices, where α and [f(s)] are the functions of the composition of fuel under consideration and the humidity of the combustion air respectively.

$$EI_{CO} = \left[\frac{[CO]}{[CO] + [CO_2] + [C_xH_y]} \right] \left[\frac{10^3 \cdot M_{co}}{M_C + \alpha \cdot M_H} \right] [f(s)] \dots (1)$$

$$EI_{NOx} = \left[\frac{[NOx]}{[CO] + [CO_2] + [C_xH_y]} \right] \left[\frac{10^3 \cdot M_{NO_2}}{M_C + \alpha \cdot M_H} \right] [f(s)] \dots (2)$$

4 Results

The Fig. 2 and Fig. 3 show the influence of air inlet temperature on the emissions performances of investigated fuels. Very low levels of both CO and NO_x have been observed for the all fuels. Under the tested operating conditions, there were not many significant differences observed concerning NO_x and CO formation of the investigated fuels. The Fig. 4 shows the influence of air inlet temperature on the lean blow out (LBO) limits of investigated fuels. Effect of increase in temperature is clearly visible on all the fuels, as with the increase in temperature of inlet air from 523 K to 573 K, the LBO limits either remained constant or declined and then further increase of 50 K (573 K to 623 K), the LBO limits increased. This effect could be attributed to the balancing of following two effects:

- a. Faster evaporation of droplets with increase in inlet temperature of air (negative effect on flame stability due to better premixing) [9]
- b. Faster reaction kinetics with increase in temperature.

From initial temperature rise, 523 K to 573 K, first one effect seems to be larger, however from 573 K to 623 K, the second effect could have been dominant.

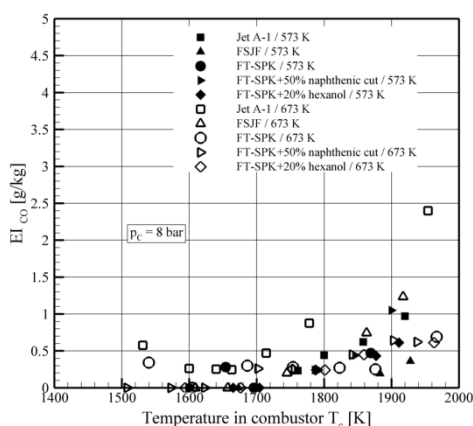


Figure 2: Comparison of CO performance

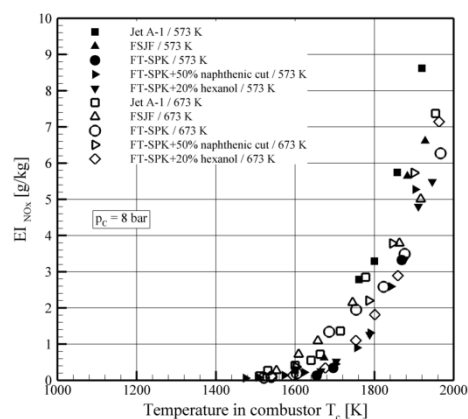


Figure 3: Comparison of NOx performance

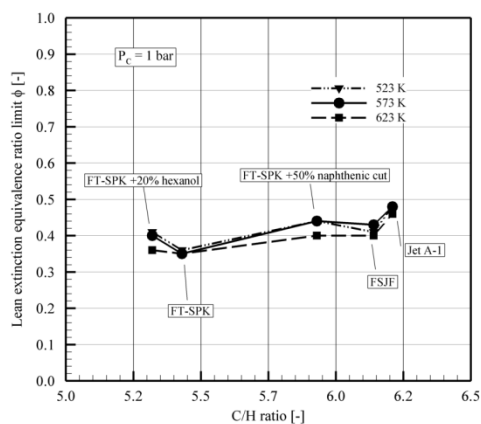


Figure 4: Comparison of lean extinction limits

5 Conclusions

1. All investigated synthetic jet fuels have almost similar NOx emissions characteristics at tested operating conditions, however concerning CO emissions performance; some interesting results have been obtained and reported.

2. With addition of either hexanol or naphthenic cut in FT-SPK, the lean extinction limits of FT-SPK worsened and reasoning for the observed deviations of synthetic jet fuels from Jet A-1 calls for further research activities involving these fuels.

Bibliography

- [1] Web link, <http://www.tecc-project.eu>.
- [2] Web link, <http://www.alfa-bird.eu-vri.eu>.
- [3] Web link, <http://www.swafea.eu>.
- [4] Web link, <http://www.ecats-network.eu/aviation-environment/alternatives-fuels-engine-technology>.
- [5] Web link, <http://www.sasol.com>.
- [6] Web link, <http://www.shell.com>.
- [7] Pidol L. et al., SAE Paper No. 2011-01-2791. SAE AeroTech Congress & Exhibition, Toulouse, France, 2011.
- [8] Aerospace Recommended Practice, ARP 1533, SAE.
- [9] Schmittel P., Untersuchungen zum Stabilisierungsmechanismus von eingeschlossenen turbulenten Flammen mit innerer Rückströmzone, Dissertation, EBI, 2001.

Large Eddy Simulation of DTBP Pool Fires

F. Zhang, N. Sebbar, I. Auzmendi-Murua, P. Habisreuther, L. Zhang, and H. Bockhorn

*Karlsruhe Institute of Technology, Engler-Bunte-Institute, Division of combustion technology,
76131 Karlsruhe, Germany, E-mail: feichi.zhang@kit.edu, Phone: +49(0)721/608-42808*

Abstract

This work represents a numerical study on the Di-tert-butyl peroxide (DTBP) pool fires with help of the large eddy simulation (LES). The objective is to assess the predictability of flame propagations in self-sustaining pool fires by using such CFD (computational fluid dynamics) tool. It has been shown that the complex flow field and reaction progress generated by a pool fire can be resolved adequately by using the LES turbulence model in combination with a combustion model. The comparison of measured and simulated mean temperature showed a reasonable agreement. The LES simulations have been performed for single and multiple pool fire arrangements in order to characterize the interaction between the individual pool flames and to obtain the safety distance for storage of DTBP in adjacently located vessels.

Keywords

Large eddy simulation (LES), Di-tert-butyl peroxide (DTBP) pool fire, Turbulent combustion

1 Introduction

In storage facilities, the design and implementation of surrounding systems that collect and drain accidentally released liquid hydrocarbons is a usual practice. Fires and especially pool fires are among the most frequent accidents in process facilities. For example, pool fires can occur during the transportation or storage of hazardous materials like liquid hydrocarbon fuels or peroxides, which can potentially lead to loss of life and extensive property damage.

A pool fire is defined as a moderately turbulent diffusion flame controlled by buoyancy forces. Flame impingement and thermal radiation are the main hazardous characteristics of pool fires. The flow field governing a pool fire is continuously driven by buoyant forces which are due to the large density change across the reaction zone. In vicinity of the burner exit, the flammable vapors are accelerated during burning the fuel/air mixture which leads to a laminar low-momentum flow covered by large coherent motions (ring vortices). Further downstream, the velocity continues to increase due to buoyancy and thermal expansion due to heat release from

combustion reaction. The previously generated coherent flow becomes unstable in this case and breaks down which results in transition of the flow from laminar to turbulent flow regime. As the flow is highly unsteady (transition from laminar to turbulent flow) and accompanied by complex combustion reactions, its numerical modeling constitutes a great challenge.

Large eddy simulation (LES) [01] is a time resolved method which becomes a popular method for numerical modeling of turbulent combustion flows in recent years. This is attributed to the need for more predictive simulation methods and the tremendous progress in computational powers. Its major advantage is that the large-scale energy containing motion of the turbulence is resolved directly, whereas the small-scale vortices, which exhibit more universal features, are modeled. Therefore, the LES method has been considered as suitable for modeling buoyancy driven pool fires where the flows are dominated by large coherent vortices.

2 Combustion Modeling

The unified turbulent flame-speed closure (UTFC) combustion model [02] is used to account for the combustion reaction and its interaction with the turbulent flow. This approach views the entire turbulent flame as a collection of predefined reaction layers with different stoichiometries and considers the interactions of these flame sheets with the turbulent flow by means of the turbulent flame speed. Concentrations of the reacting species are pre-defined by calculations of one-dimensional premixed reaction zones, which are projected distinctly to the control variables mixture fraction ξ , its variance ξ'^2 , and reaction progress variable θ . The chemical scalars are then saved in a look-up table in dependence on these variables. Transport equations for the control parameters are solved during the CFD computation, which are searched by the look-up table in order to find mass fractions of species through multidimensional interpolation.

3 Experimental and Numerical Setups

The considered case represents burning of liquid DTBP fuel (highly inflammable) from a single vessel with a diameter of $D = 6$ cm which leads to a self-propagating, buoyancy-driven pool flame. The experimental work has been carried out by Schälke et al. [03], which includes measurement of the time mean flame temperature with thermocouples and determination of the flame length by means of the visible images obtained from a VHS video recording.

The computational domain has been chosen to be consisting of a part of the vessel (depth = 2 cm) and a large cylindrical domain (length = 34 D, diameter = 20 D) downstream where mixing and combustion take place (see Fig.1 on the left). Due to the simple geometry of the domain and in order to achieve best accuracy, the computational grid was built up in a block-structured way employing hexahedral shaped elements, as shown in Fig.1 on the right. The mesh is

systematically refined along the near-wall and the shear layer regions. The mass burning rate for DTBP is $0.1837 \text{ kg/m}^2/\text{s}$ which has been used as the inlet boundary according to the experiment. The pool fire establishes under ambient condition (temperature = 300 K, static pressure = 1 atm).

The open source CFD code OpenFOAM [04] has been used to solve the filtered transport

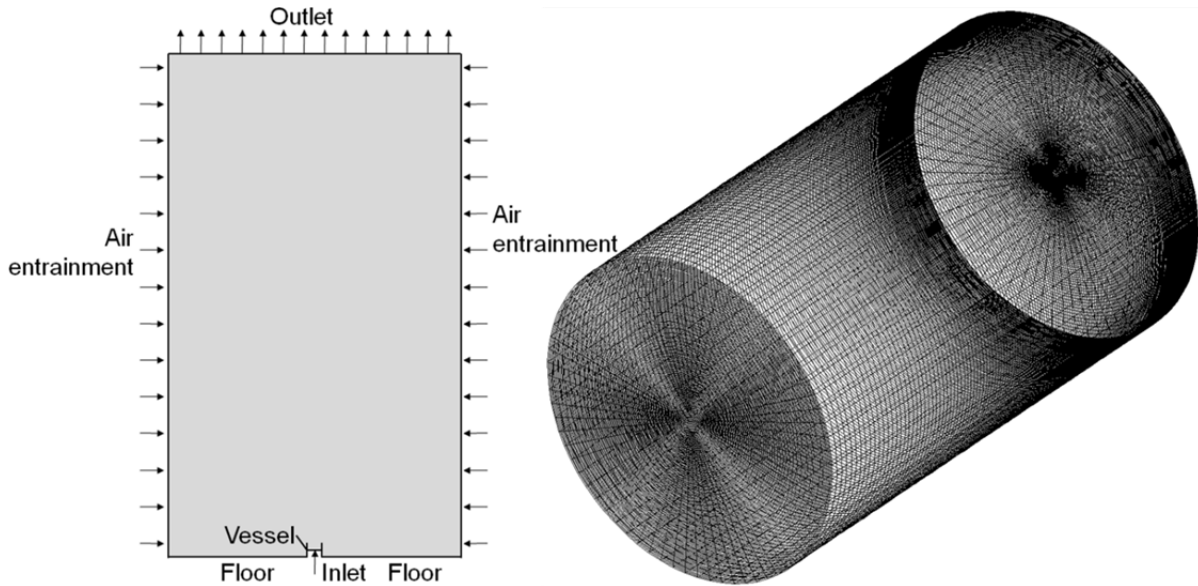


Figure 1: Computational domain and grid used for the LES simulation.

equations for mass, momentum, energy, and additional scalars in LES, employing the finite volume method with a cell-centered storage arrangement. A fully time-implicit compressible formulation was applied, together with a second order interpolation scheme to account for spatial discretisation of the convective flux terms. The UTFC combustion model proposed in the last section has been implemented into the code. The Smagorinsky model [01] was used for the sub grid scale modeling assuming a constant turbulent Schmidt/Prandtl number $Sc_t=Pr_t=0.7$. The influence of buoyancy according to large density gradients by passing through the flame front has been included by means of the gravitational force in the momentum equation.

4 Results and Perspective

4.1 Single Pool Fire Arrangement

Fig.2 shows a snapshot of instantaneous contours (passing through the centerline axis) of the velocity component in main flow direction u , the mixture fraction ξ , the temperature T and the reaction progress variable θ . As a pool fire is intrinsically a diffusion flame where the mixing progress dominates the combustion, contours of T and θ (on the right side of Fig.2) are strongly correlated with the ξ field. Large ring vortices are generated in the shear layer between the jet and

the surrounding air, which can be identified by the recirculation region in contours of u . The formation and break down of these coherent flows belongs to instability phenomena occurring by transition from laminar to turbulent flow regime.

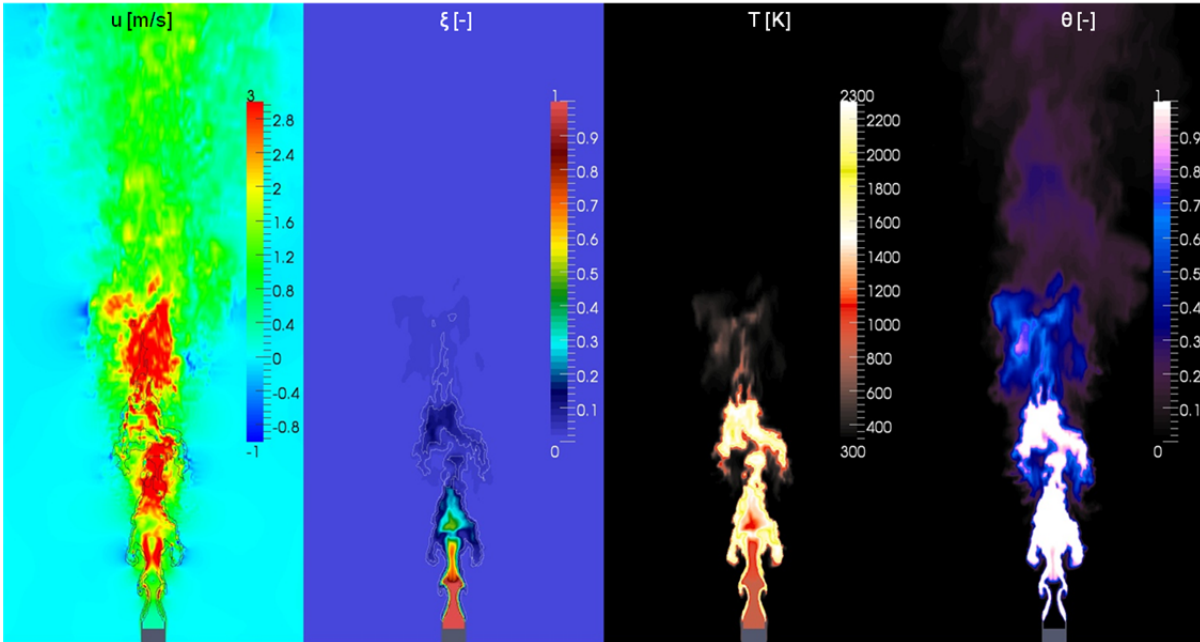


Figure 2: Instantaneous contours of a single pool DTBP flame.

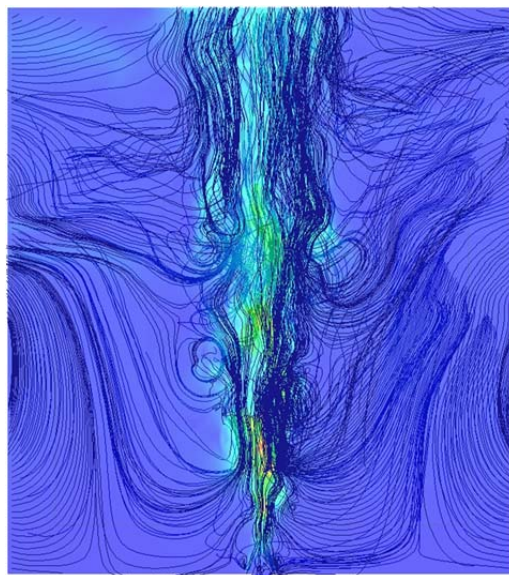


Figure 3: Trajectories of the flow fields generated by a single buoyant pool fire.

Fig.3 presents instantaneous three-dimensional streamlines for the flow field together with contours of the axial velocity in the background. The flow traces are not highly turbulent in general. An overall suction of air into the flame can be clearly detected, which is attributed to formation of the large ring vortices.

In Fig.4, the time mean temperature given by LES and thermocouple measurement are compared for different profiles, which are indicated in contour-plot of the calculated mean

temperature on the right side of Fig.4. Although the instantaneous flame exhibits a maximum temperature value by approx. 2350 K in LES, its maximal mean value is only about 1700 K due to the periodical coherent flow motion. There is a reasonable agreement between computational and experimental results. However, the predicted value by LES is about 200 K higher than the measured data in regions with high temperatures. This is attributed to the heat loss due to thermal radiation which is not included in the LES until now.

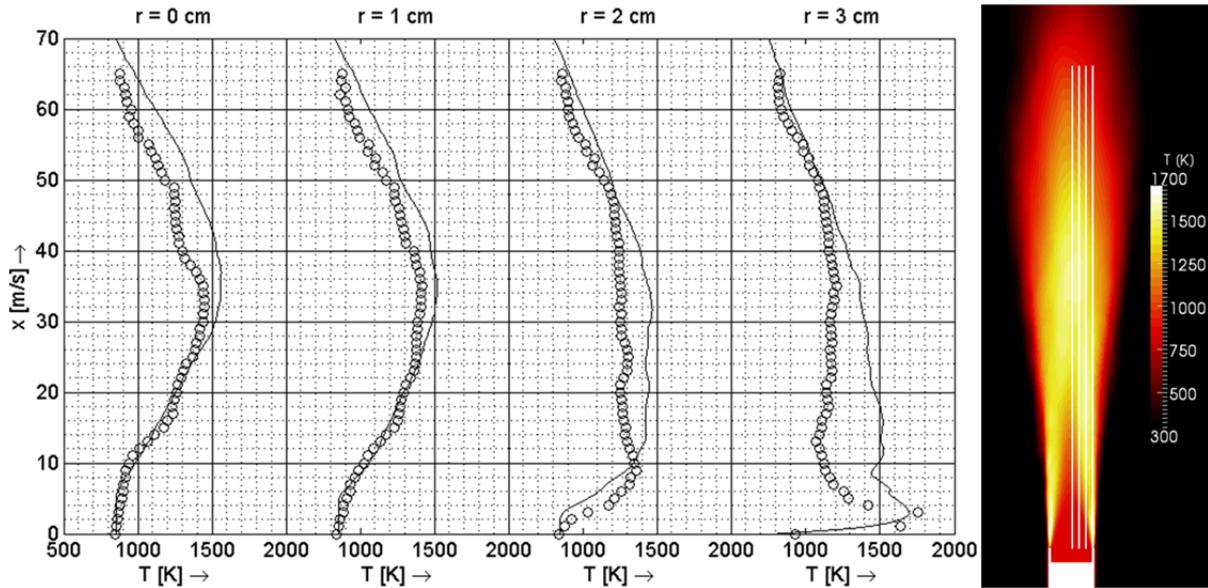


Figure 4: Comparison of calculated and measured time mean temperature.

4.2 Multiple Pool Fire Arrangement

In order to study interactions of adjacently located single pool fires, LES computations have been carried out to simulate pool fires generated by multiple vessels filled by liquid DTBP, which are arranged diagonally opposite to each other. Fig.5 shows isosurfaces of the source term for the

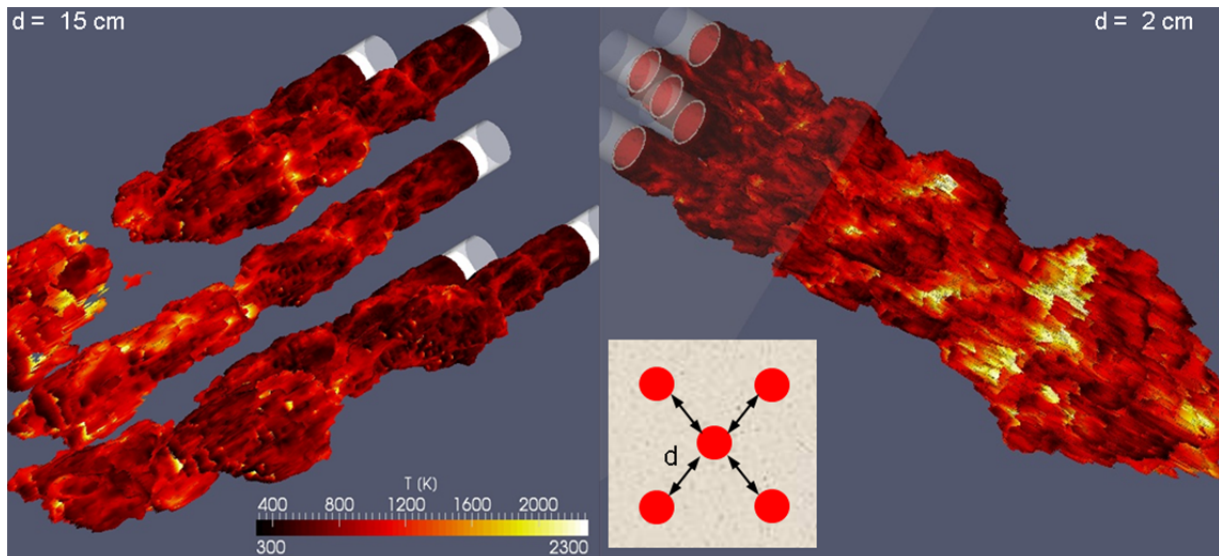


Figure 5: LES of pool fires with a multiple vessel arrangement.

progress variable which represents the reaction zone or the flame surface, respectively. The pool flames from each vessel burn independently, as they are located with a distance of $d = 15$ cm to each other (see Fig.5 on the left). On the other hand, the individual pool fires from the vessels evolve together and merge into a large flame, which burns much faster than each individual one, as shown on the right of Fig.5. This should be avoided while designing storage devise for DTBP.

4.3 Conclusion and Perspective

The LES methodology has proved to be a suitable tool for numerical modeling of buoyancy driven pool fires. The large coherent flow motion generated by burning the vaporized DTBP fuel, which is of highly non-stationary characteristic, has been resolved with a good accuracy. The safety distance between adjacently arranged pool fires has been assessed by means of LES simulations of multiple pool fires, which interact with each other.

For future work, LES will be used to simulate pool flames in real-scale with a large pool diameter ($D = 3.2$ m). In addition, the thermal radiation plays an important role in case of pool fires, which is not accounted for until now and leads to an over-predicted flame temperature in the current study. The thermal radiation will be included in the LES modeling in future.

List of Figure:

Fig.1: Computational domain and grid used for the LES simulation..	3
Fig.2: Instantaneous contours of a single pool DTBP flame.	4
Fig.3: Trajectories of the flow fields generated by a single buoyant pool fire.	4
Fig.4: Comparison of calculated and measured time mean temperature.	5
Fig.5: LES of pool fires with a multiple vessel arrangement.	5

References:

- [1] J. Fröhlich. *Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen*. Teubner Verlag, 2006.
- [2] F. Zhang, P. Habisreuther, M. Hettel and H. Bockhorn. *Numerical computation of combustion induced noise using compressible LES and hybrid CFD/CAA methods*. *Acta Acustica united with Acustica* 98, 120-134, 2012.
- [3] S. Schälike, K. D. Wehrstedt, and A. Schönbacher. *Flame Heights of Di-tert-butyl Peroxide Pool Fires - Experimental Study and Modelling*, *CHEMICAL ENGINEERING TRANSACTIONS*, VOL. 26, 2012, ISBN 978-88-95608-17-4; ISSN 1974-9791.
- [4] OpenCFD Ltd. *OpenFOAM User Guide, Version 2.0.1, 2011*.



ISSN 1869-9669
ISBN 978-3-7315-0097-1

