

Entwicklung und Einsatz der FTIR- Emissionsspektrometrie zur passiven Fernerkundung von heißen Abgasen

Klaus Schäfer, Carsten Jahn, Edgar Flores Jardines, Selina Utzig
*Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Institut für Meteorologie und Klimaforschung,
Atmosphärische Umweltforschung, Garmisch-Partenkirchen*

Das IMK-IFU

Motivationen und Zielstellungen

Messmethode / abtastende abbildende FTIR-Emissionsspektrometrie
Spektren-Inversions-Software MAPS mit Linie-für-Linie-Berechnungen

Kalibriermethoden / Bestimmung der ILS

Ergebnisse von Untersuchungen

Arbeiten an der VDI/DIN-Richtlinie 4211, Blatt 2

Mitglied der Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher
Forschungszentren

- naturwissenschaftliche Grundlagenforschung
- Vorsorgeforschung
- industrielle Vorlaufforschung
- Produkt- und Verfahrensentwicklung

Betrieb von Großgeräten, die auch externen Nutzern zur
Verfügung stehen

Forschungsbereiche mit Forschungsprogrammen

- Energie
 - Erneuerbare Energien
 - Kernfusion
 - Nukleare Sicherheitsforschung
 - Rationelle Energieumwandlung und –nutzung
 - Energiesystemanalyse
- Erde und Umwelt
 - Atmosphäre und Klima
- Schlüsseltechnologien
 - Wissenschaftliches Rechnen und GridKa
 - Nano- und Mikrosysteme
 - BioGrenzflächen
- Struktur der Materie
 - Astroteilchenphysik
 - Synchrotronstrahlungsquelle ANKA

Programm Atmosphäre und Klima

- Dynamik und Wolkenbildungsprozesse in der Troposphäre
- Wechselwirkungen zwischen Bio-, Hydro- und Atmosphäre
- Spurengas- und Aerosolprozesse in der Troposphäre
- Zusammensetzung und Dynamik der oberen Troposphäre und Stratosphäre

Instrumente:

- Laborexperimente – u.a. Aerosol-Messkammer AIDA
 - Feld-Messprogramme
 - Lokale, regionale und globale Modellierung
 - Entwicklung von Messgeräten und –verfahren
 - Anwendungen bei Luftreinhaltung, Katastrophenvorsorge, Klimavorhersage
 - nationale, internationale Verbundvorhaben; Kooperationen mit Industrie
-

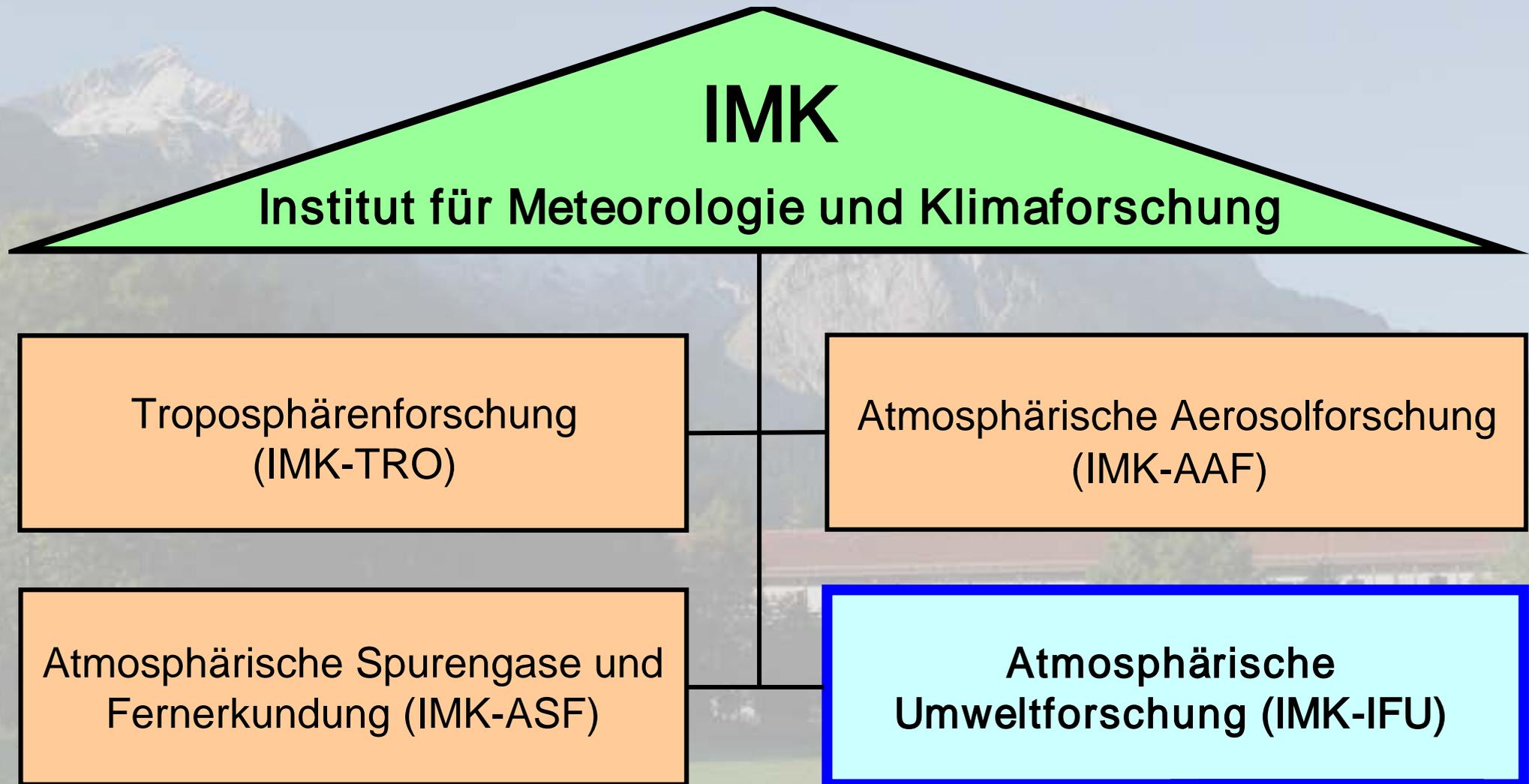
Entwicklung zum Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Universität Karlsruhe (TH) und Forschungszentrum Karlsruhe –
Exzellenz-Universität und nationales Helmholtz-Zentrum

- Verbindung der Zielsetzungen
- Zusammenführung der Kapazitäten in Forschung, Lehre und Innovation

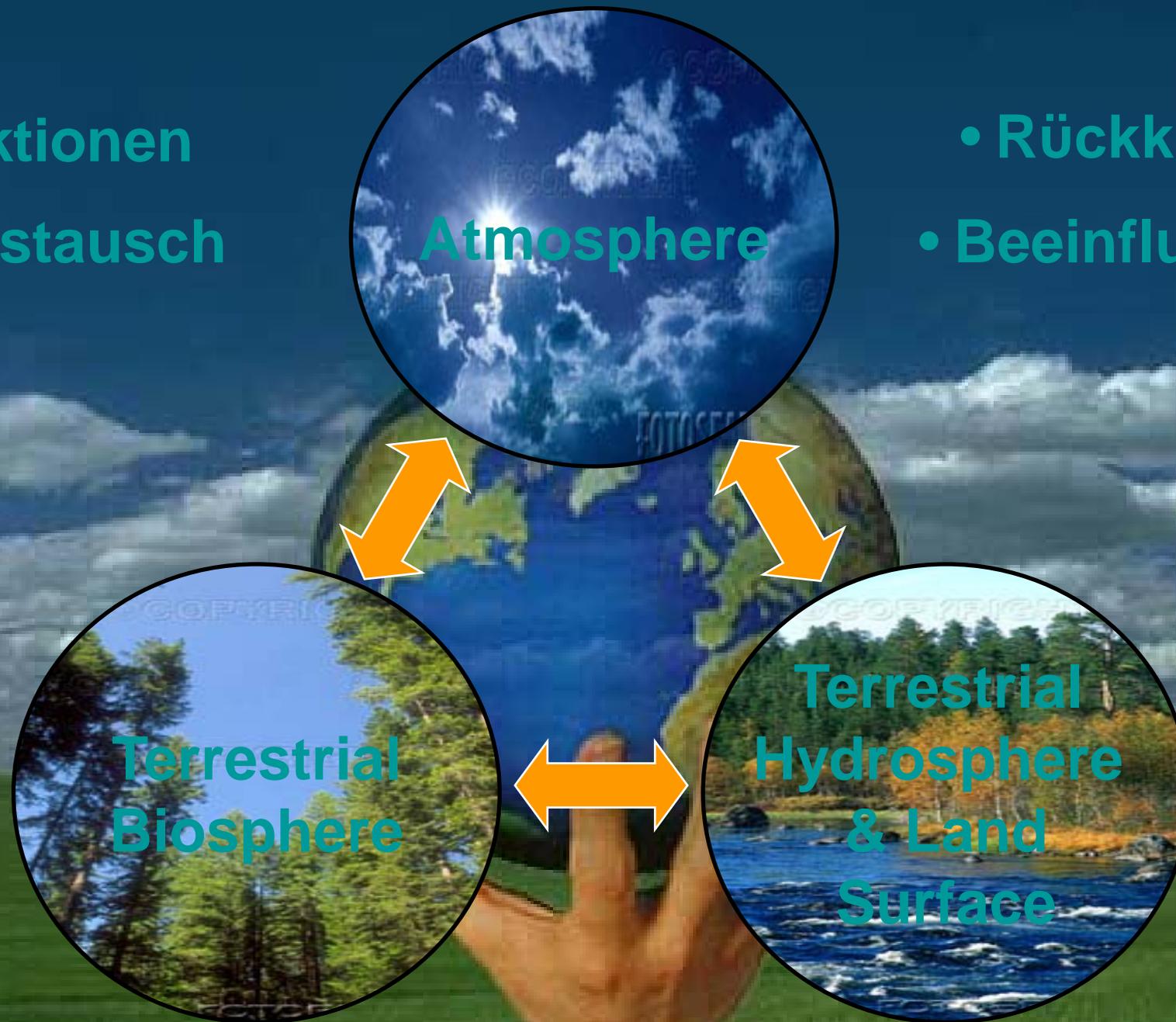
Profilbildung auf zwei Ebenen bzw. in zwei Richtungen

- Ebene der Kompetenzfelder (u.a. Atmosphäre und Klima)
 - Ebene von KIT-Zentren: Energie, NanoMikro, Elementarteilchen- und Astroteilchenphysik, Klima und Umwelt (u.a. Urbane Systeme, Atmosphärische Prozesse)
-

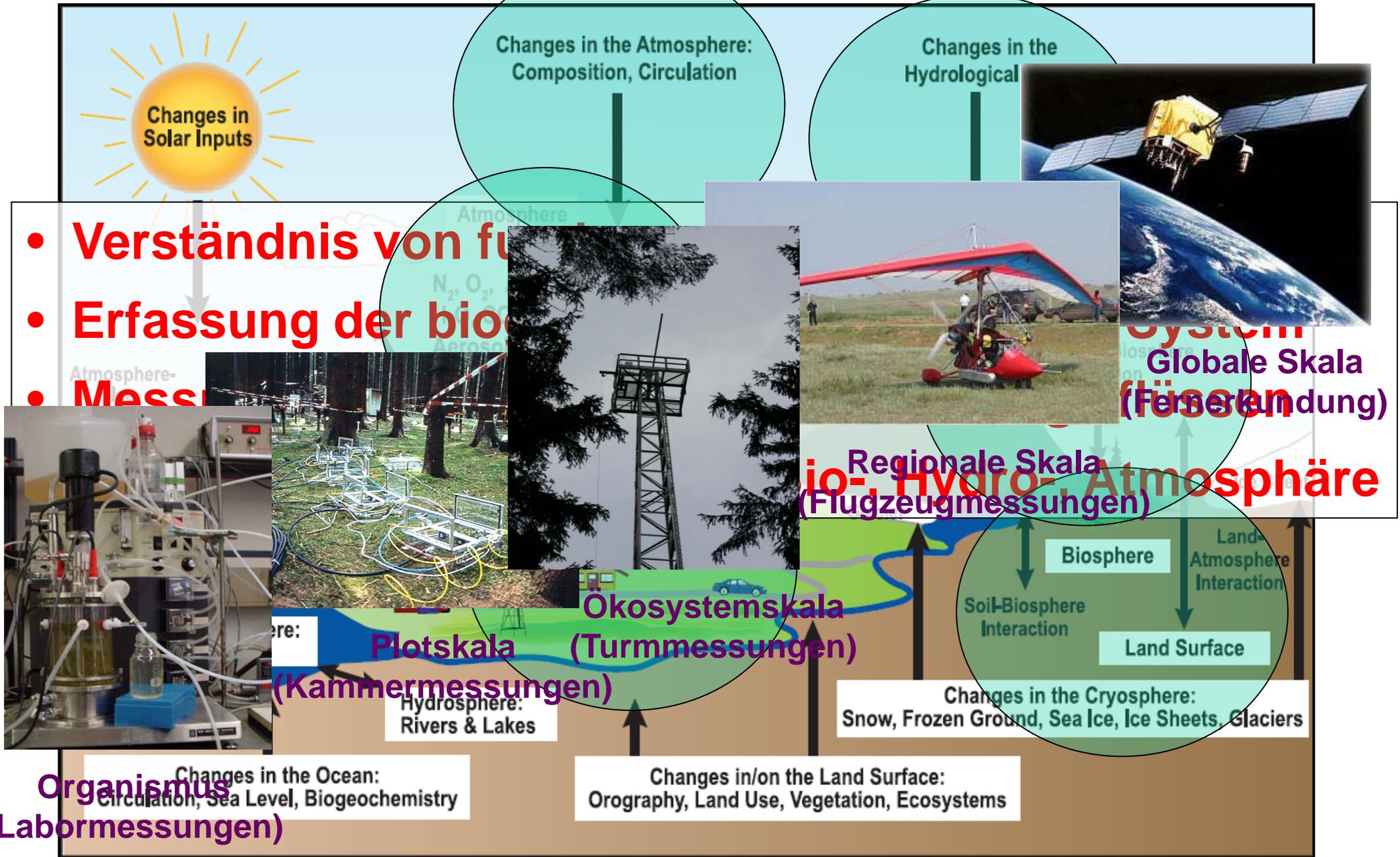


- Interaktionen
- Austausch

- Rückkopplung
- Beeinflussung



Die Herausforderung:



Grundfinanzierung und Drittmittel - Stand Dezember 2008



54	Mitarbeiter
32	Wissenschaftler
11	Ingenieure und Techniker
11	Mitarbeiter Infrastruktur
18	Doktoranden/Diplomanden (u.a. Italien, China, Australien)
4	Postdoc / Gäste
3	HiWi / Prak / FÖJ
<hr/>	
80	Personen total



Risk Habitat Megacity

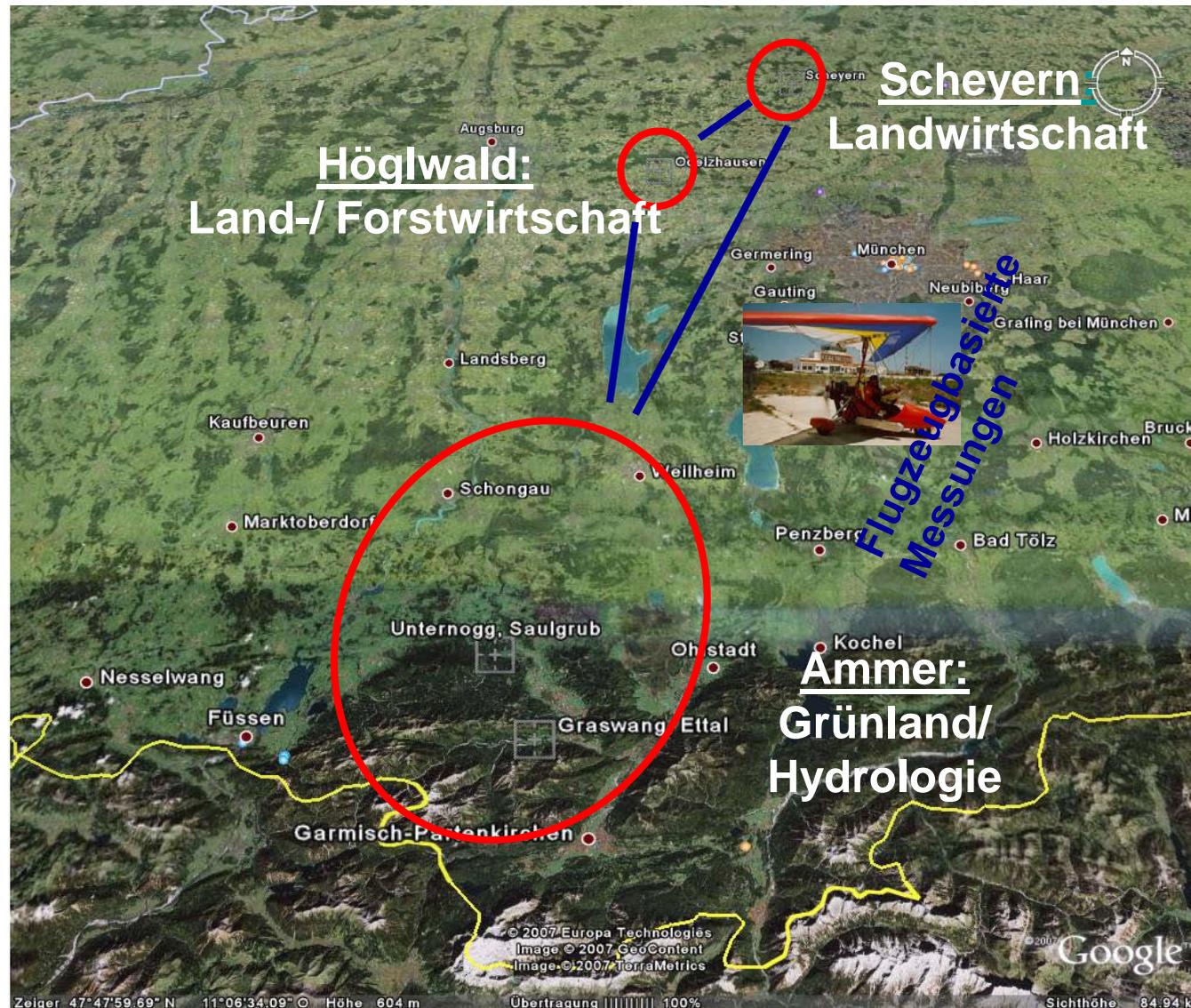
¿sostenibilidad en riesgo?

A Helmholtz Research Initiative 2007 - 2013

- Luftqualität
- Gesundheit
- Nachhaltige Entwicklung der Mega-Städte
- Risiko-Management
- Integrierte Forschung
- Anwendungen

mit **GFZ, UFZ, HMGU, DLR – Santiago de Chile**

TERENO - Terrestrial Environmental Observatories



- Förderung seit 2008
- mit FZJ, UFZ, GFZ, DLR
- Ausbauinvestition für IMK-IFU
- Ammer, Höglwald

Langzeit Messungen

- Treibhausgase
- Aerosol
- Strahlung

Zugspitze,
2965 m

UFS,
2675 m

Garmisch, 734 m

Forschungszentrum Karlsruhe in der Helmholtz-Gemeinschaft



Problemstellungen

Zahlreiche Maßnahmen zu

- Emissionsreduktionen (Schutz der Gesundheit) und
 - effektivem Energieeinsatz (Schutz des Klimas)
- wurden erfolgreich umgesetzt; aber

NO_2/NO_x -Verhältnis in Umgebungsluft steigt kontinuierlich

Hoher Anteil des Feinstaubs stammt aus dem Hintergrund

Wie können die Grenzwerte der EU-Richtlinien für NO_2 und PM_{10} von 2010 an erfüllt werden?

Sind die Grenzwerte für den Schutz der Gesundheit ausreichend?

Problemstellungen

Emissionen aus unzugänglichen Quellen

Eingangsgrößen für Emissionskataster

Beitrag zur lokalen Luftbelastung

Anteil am globalen Konzentrationsanstieg der Treibhausgase

Schornsteine

- Emissionsindizes von CO, NO, NO₂, N₂O, CH₄, HCl, CO₂
- Bestimmung unbekannter Emissionen
- Bestimmung des Flusses gekoppelt mit Doppler-LIDAR
- Erfassung der Ausbreitung der Abgase

Fackeln

- Bestimmung der Abhängigkeit der Emissionen (CH_4 , CO , NO , CO_2)
von unterschiedlichen Betriebszuständen der Anlagen
 - Nachweis der Veränderung der Verbrennungseffektivität bei
verschiedenen Maßnahmen
 - Erfassung der Ausbreitung der Abgase
-

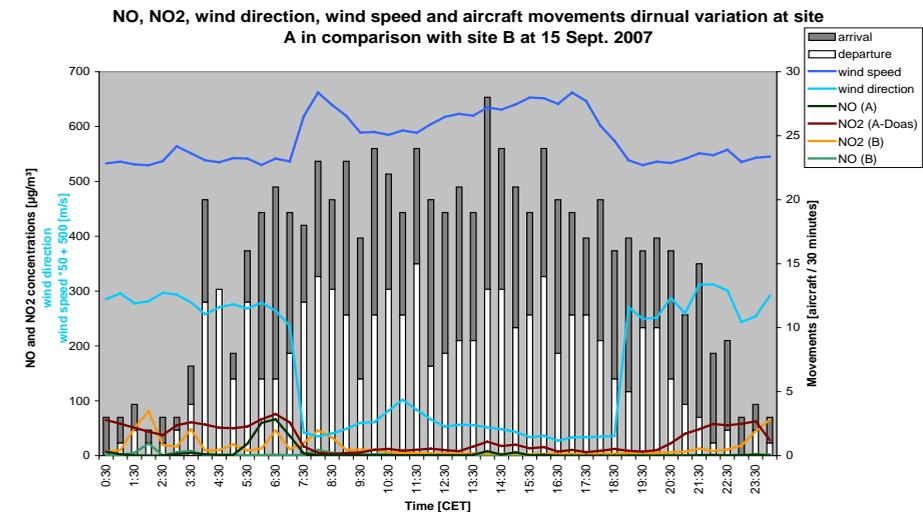
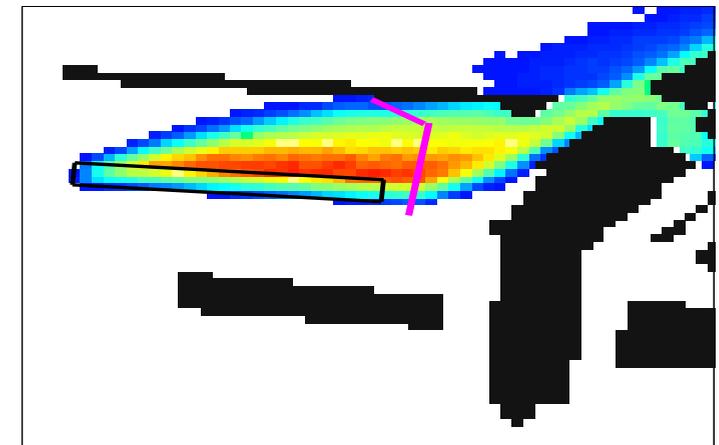
Flugzeugtriebwerke

- Schnelle Abgasanalyse bei der Entwicklung
- Bestimmung der CO_2 -, CO- und NO-Emissionsindizes von Triebwerken und Auxiliary Power Unit (APU) am stehenden Flugzeug
- Bestimmung dieser Emissionsindizes auf Flughäfen
- Nachweis der Veränderung der Emissionen durch verschiedene Emissionsreduktionsmaßnahmen (z.B. verringerter Schub)
- Rückschlüsse auf den Zustand der Triebwerke durch Bestimmung von Veränderungen in der Zusammensetzung der Abgase
- chemische, thermische und geometrische Konfiguration der Abgasstrahlen

Network of Excellence:

Environmentally Compatible Air Transport
System (ECATS)

- *Verbesserung der Luftqualität auf Flughäfen: Flugzeugemissionen (Datenbank für EI), inverse Dispersionsmodellierung für die Bestimmung von Emissionsraten, Datenbank für Modellierung (Wärme-Insel-Effekte)*
- *Erfassung der Wirksamkeit von Emissionsreduktionsmaßnahmen*
- *Kooperation mit Betreibern und Verantwortlichen (Coordination action: Aircraft Emissions and Reduction Technologies – AERONET III)*



Zielstellung: Bestimmung der Flugzeugemissionen

Messungen der Emissionsindizes der Abgaskomponenten der
Flugzeuge im operationellen Betrieb, u.a. auf Flughäfen

keine Installationen am Flugzeug erlaubt

keine Beeinträchtigungen des Flugbetriebes gestattet

Zusammensetzung der Flugzeugabgase

heterogene Verteilung und chemische Umwandlungen

Emissionen höhenabhängig

Zielstellung: Bestimmung der Ausbreitung von Abgasstrahlen der Flugzeuge

Wechselwirkung der Abgasstrahlen mit der Umgebungsluft

Physik – Flugzeugeinflüsse, Auftrieb (Temperatur), turbulente
Durchmischung (Impuls), Stabilität der Atmosphäre,
meteorologische Einflüsse (Wind, Temperatur)

Chemie – NO_x und O_3 , Bildung sekundärer Partikel

kann noch nicht vollständig beschrieben werden

Einfluss auf die Anwendung kleinräumiger **Chemie-Transport-Modelle**

Zielstellung: Bestimmung der Zusammensetzung und Temperatur von Turbinen-Abgasen für die Charakterisierung des Turbinen-Zustandes

Abgas-Analyse gibt Informationen über mögliche Störungen im Turbinen-Betrieb – **Abgas-Analyse als Bestandteil der Wartung**

Zusammensetzung – Öl-Leckagen, Defekte an Bauteilen

Temperatur-Asymmetrien – Überhitzung von Bauteilen

Turbinen-Entwicklung – Einhaltung aktueller Abgas-Richtwerte

schnelle Abgas-Analyse zur Reduzierung des Aufwandes bei

Turbinen-Tests

bisher üblich:

Messung der Emissionen von Flugzeugtriebwerken nach den **Vorschriften der ICAO** bei der Zertifizierung von neuen Triebwerken

Probenahme und in situ Messverfahren für CO₂, NO, NO_x, CO, UHC, Ruß

Messungen im Prüfstand

LTO-Zyklus: 7, 30, 85 und 100 % des maximalen Schubs

Datenbank der Emissionsindizes

hier neu:

Berührungslose Messung der **Emissionsindizes** der Flugzeuge auf Flughäfen,
d.h. Bestimmung der **Emissionsquellstärken** am Ort der Abgasfreisetzung
unter operationellen Bedingungen:

Geringe operationelle Kosten

Einfache Handhabung

Online Messergebnisse

Keine Probenahme

Kein Risiko von Schäden am Flugzeug

Methoden

Längenmittelnde optische Fernsondierungsverfahren

- FTIR-Absorptions-Spektrometrie, auch offene White-Spiegelanordnungen (CO, CO₂, CH₄, N₂O)
- DOAS (NO, NO₂, O₃, NH₃, BTX, HCHO)
- FTIR-Emissions-Spektrometrie für heiße Abgase (passiv: CO, NO, CO₂; NO₂)

Forschungszentrum Karlsruhe in der Helmholtz-Gemeinschaft



Messverfahren FTIR-Emissions-Spektrometrie

- passive Messung: Erfassung der IR-Strahlungs-Emission des Abgases
- Messung direkt hinter dem Düsenausgang zur Bestimmung der Emissionsindizes
- Auswertung spektraler Signaturen von CO, NO, NO₂, CO₂, VOC
- Messzeiten ca. eine Minute
- maximaler Abstand zum Abgas ca. 200 m

Messsysteme:

- FTIR-Spektrometer spektrale Auflösung 0,2 cm⁻¹ mit Teleskop (K300, OPAG)
- Drehspiegelsystem zur Ausrichtung des Blickfeldes

Forschungszentrum Karlsruhe in der Helmholtz-Gemeinschaft

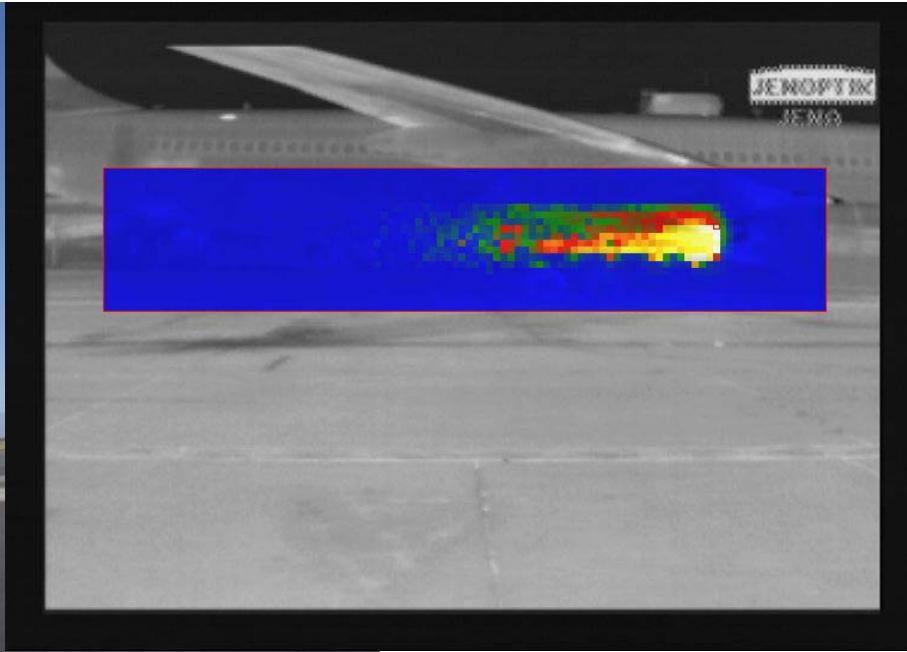


Forschungszentrum Karlsruhe in der Helmholtz-Gemeinschaft



Weiterentwicklung der Messtechnik für die Bestimmung von Emissionsindizes: Scannierendes abbildendes IR Gasmesssystem (SIGIS)

Zusammenarbeit mit UNAM, Mexiko



Flores-Jardines, Edgar: Turbine exhausts monitoring with Fourier Transform Infrared emission spectroscopy. Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften / Caracterización de las emisiones de turbinas de avión usando espectroscopía FTIR pasiva con un sistema de visualización (Dr. rer. nat.), Centro de Ciencias de la Atmosfera, Universidad Nacional Autónoma de México, Mexico City, 2007

- abtastendes Drehspiegelsystem zur Erfassung Abgasstrahl
- gekoppelt mit Infrarot-Kamera zur Abbildung Abgasstrahl

Abtastendes abbildendes Messsystem:

Schnelles Auffinden des heißesten Punktes im Abgasstrahl

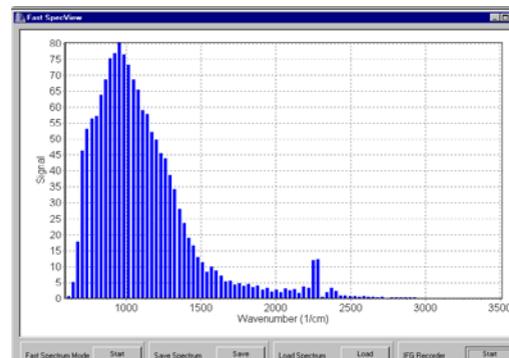
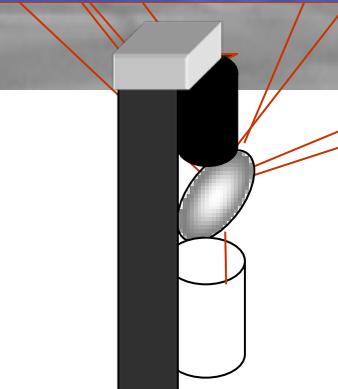
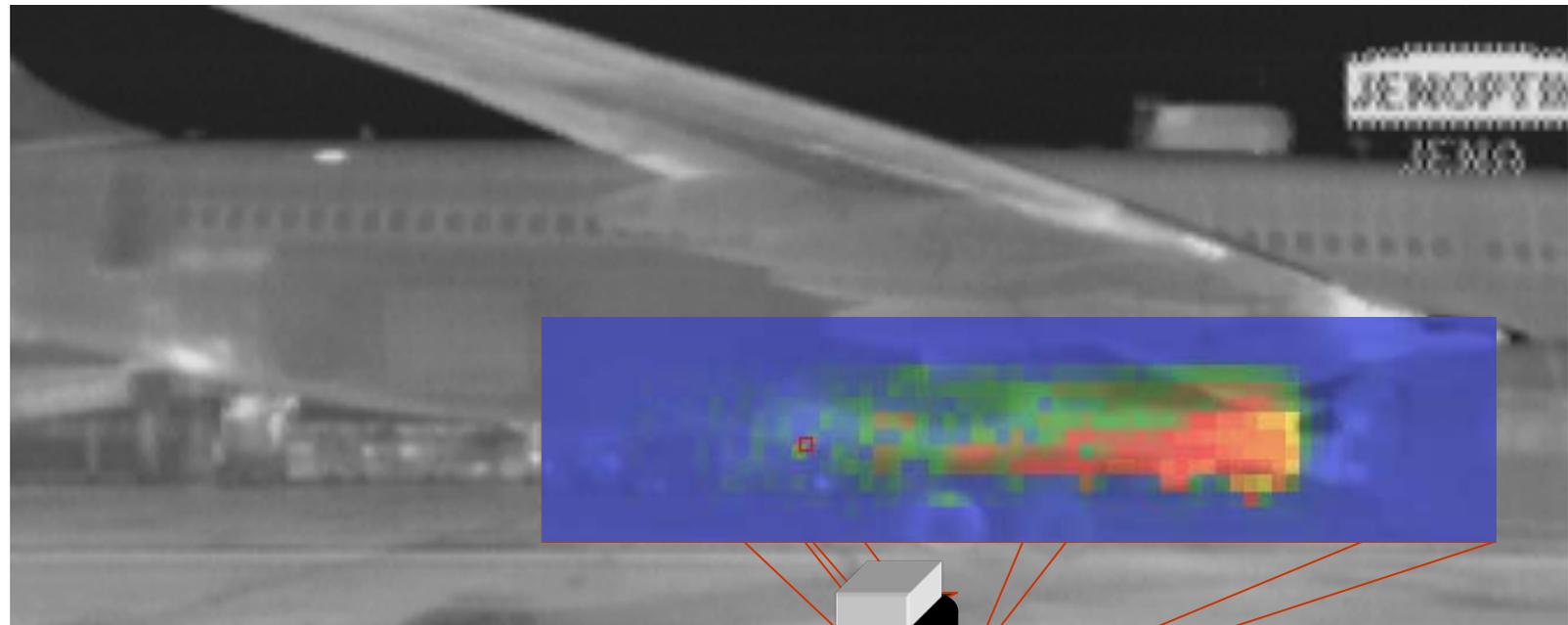
Bestimmung der Verteilung von Temperatur und Abgaskomponenten

- **niedrig aufgelöste Spektren** für Informationen über die Temperatur (z. B. 56 cm^{-1})
- **hoch aufgelöste Spektren** für die Konzentrations-Bestimmung ($0,2 \text{ cm}^{-1}$)

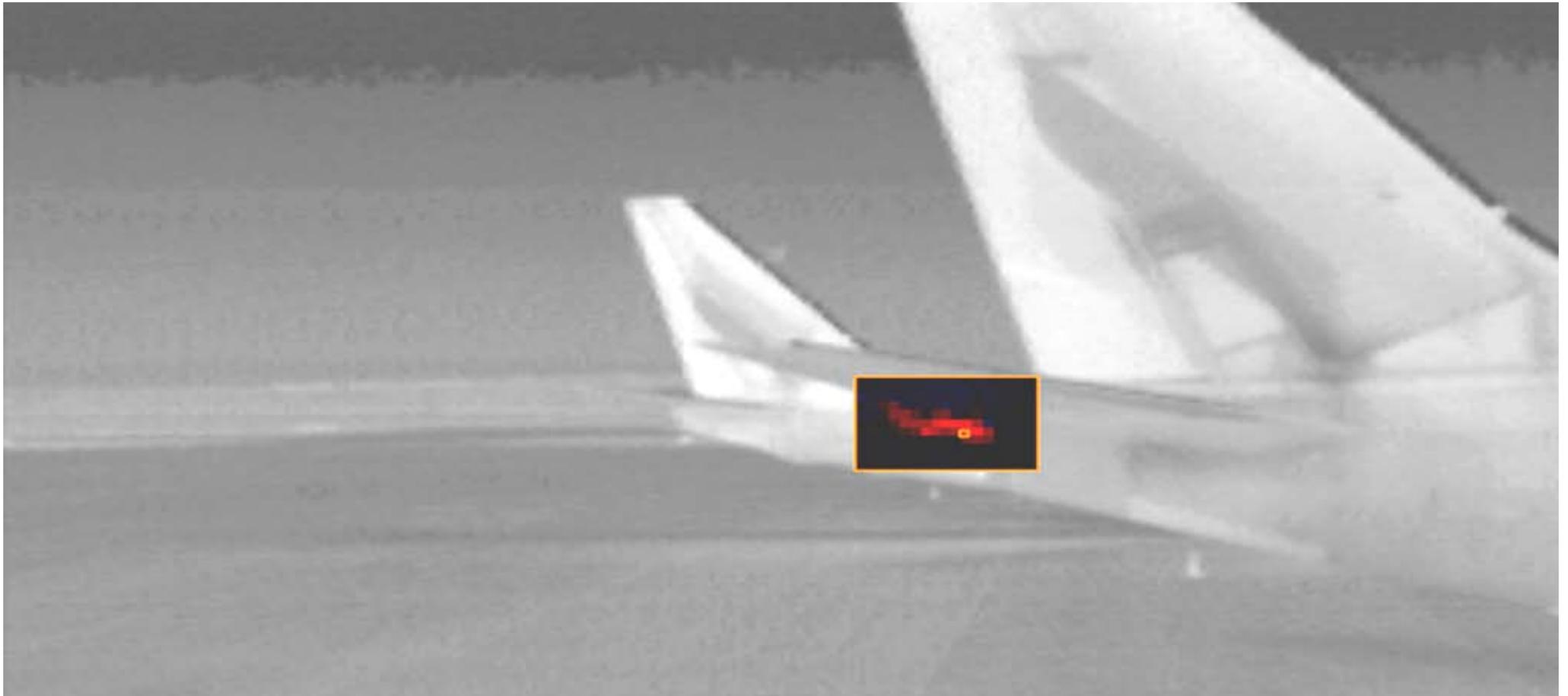
Scanning Infrared Gas Imaging System (SIGIS)



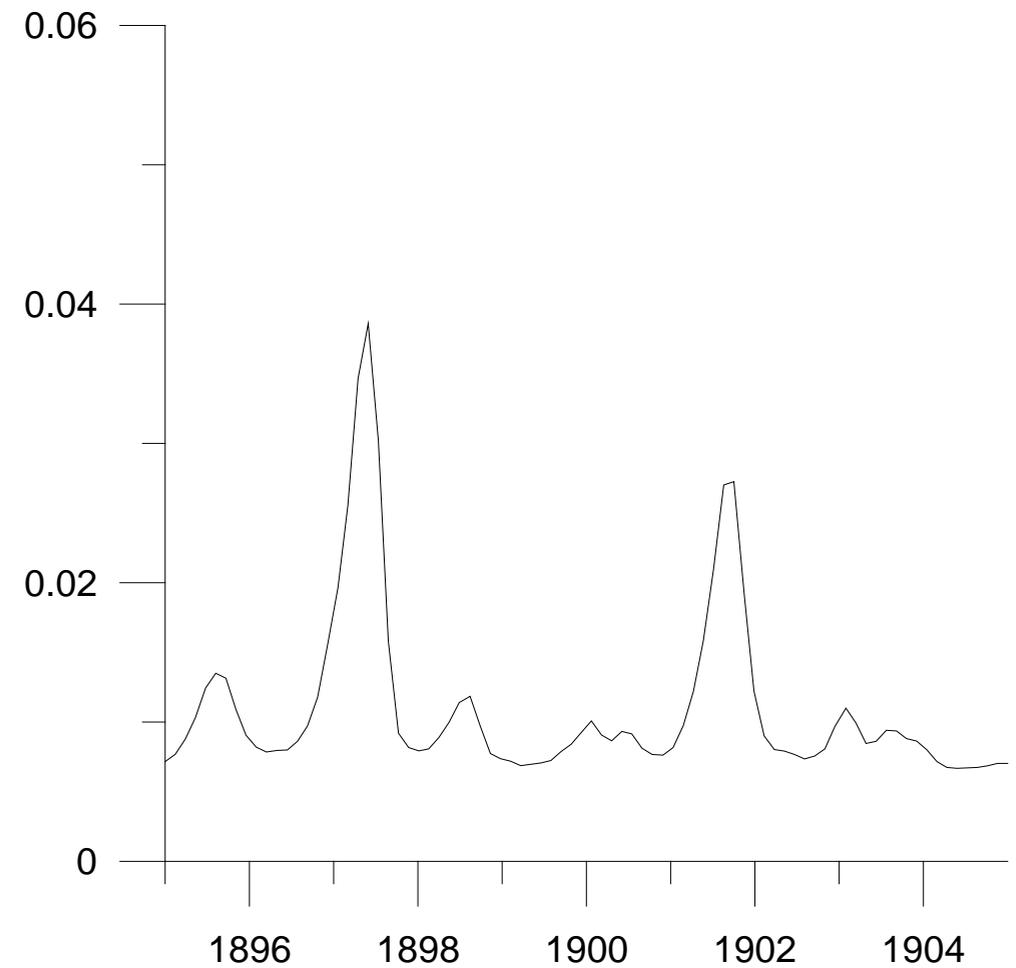
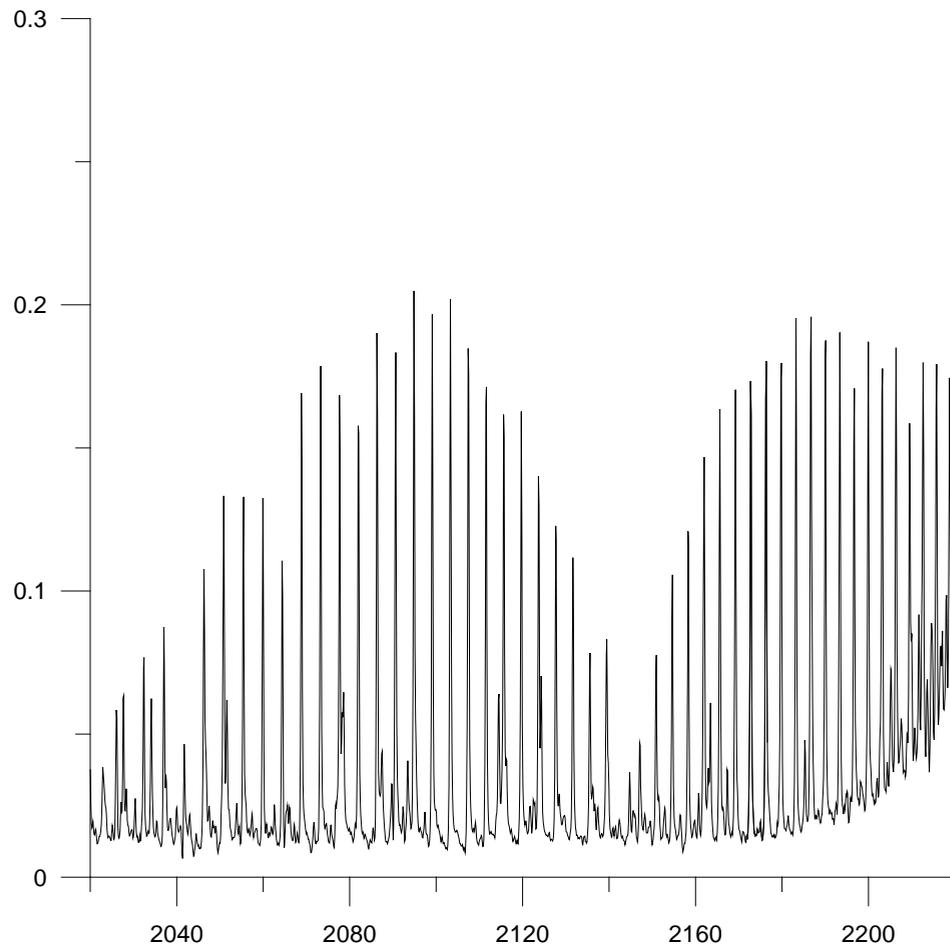
Abtasten des Abgasstrahls des Triebwerks unterlegtes IR-Kamera-Bild



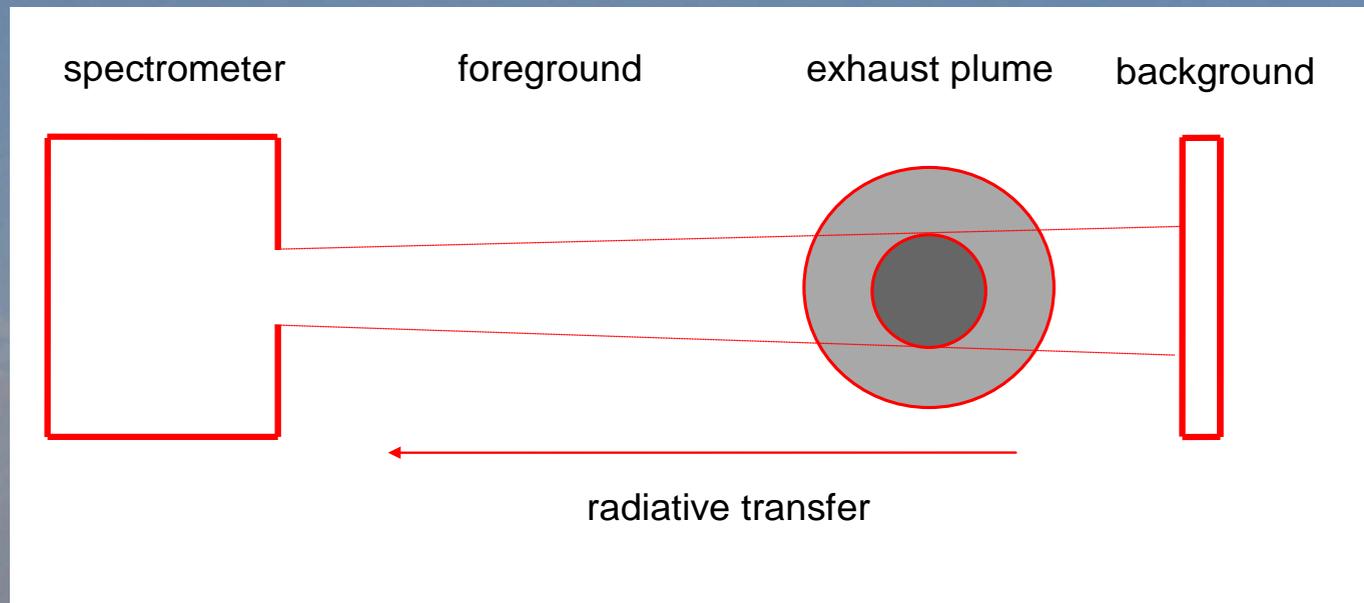
Abtasten des Abgasstrahls der APU
unterlegtes IR-Kamera-Bild



Gemessene Spektren des Abgasstrahls einer Turbine



Messprinzip



$$I = I_b \tau_p \tau_f + I_p \tau_f + I_f$$

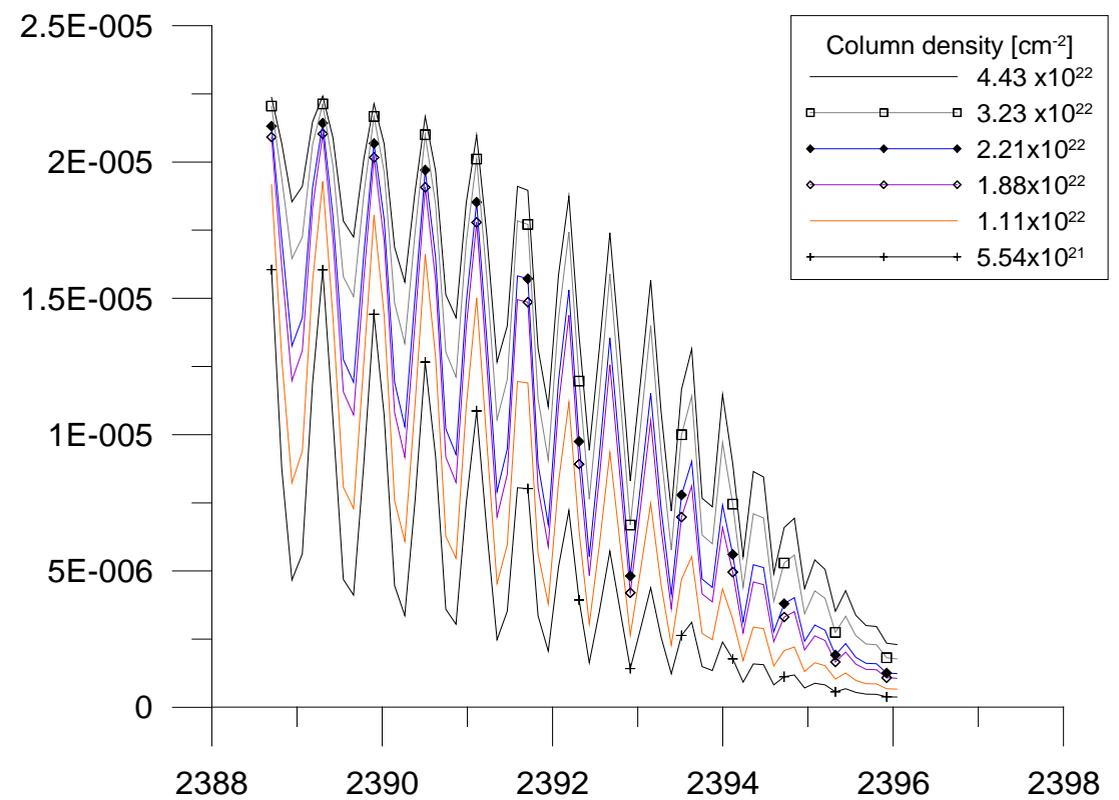
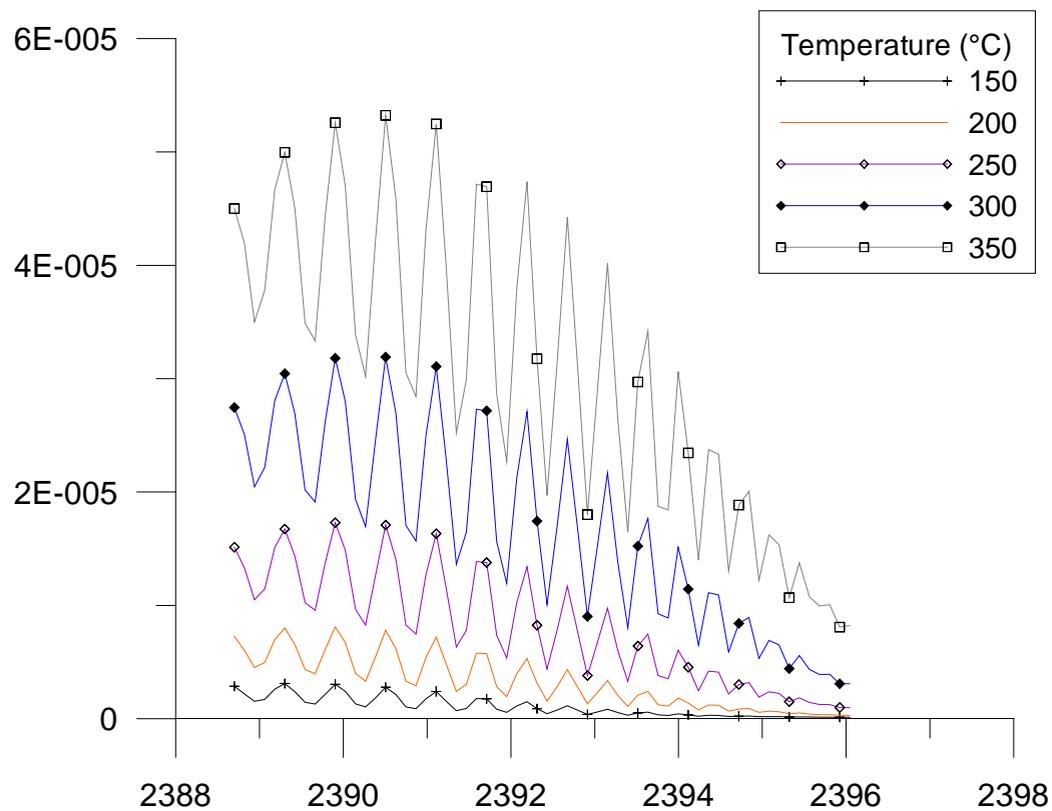
$$\tau_{\Delta\nu}(L) = \left\{ \int_{\Delta\nu} \prod_{i=1}^N \exp[-k_i(\nu) n_i L] d\nu \right\} \exp[-k_a(\Delta\nu) n_a L]$$

Spektrenauswertung

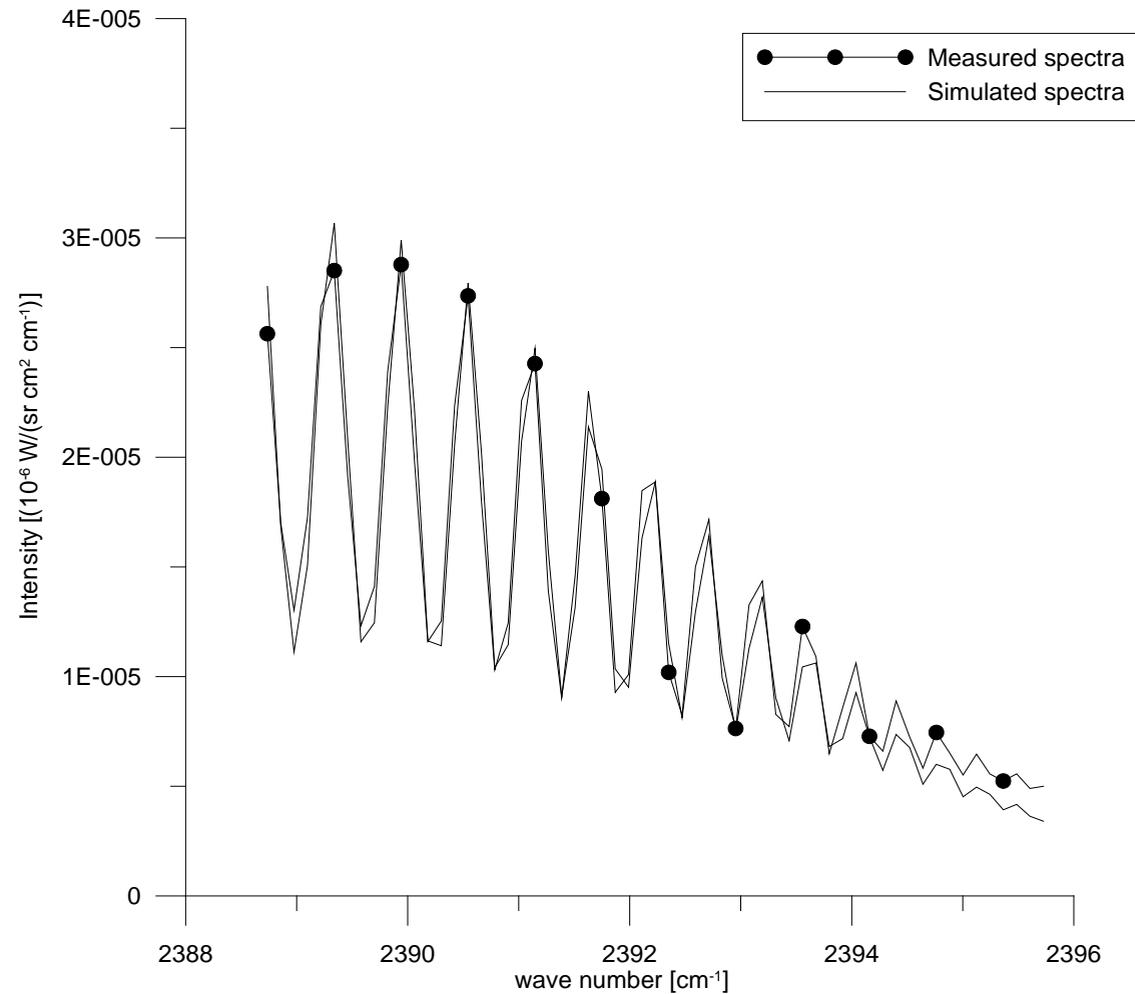
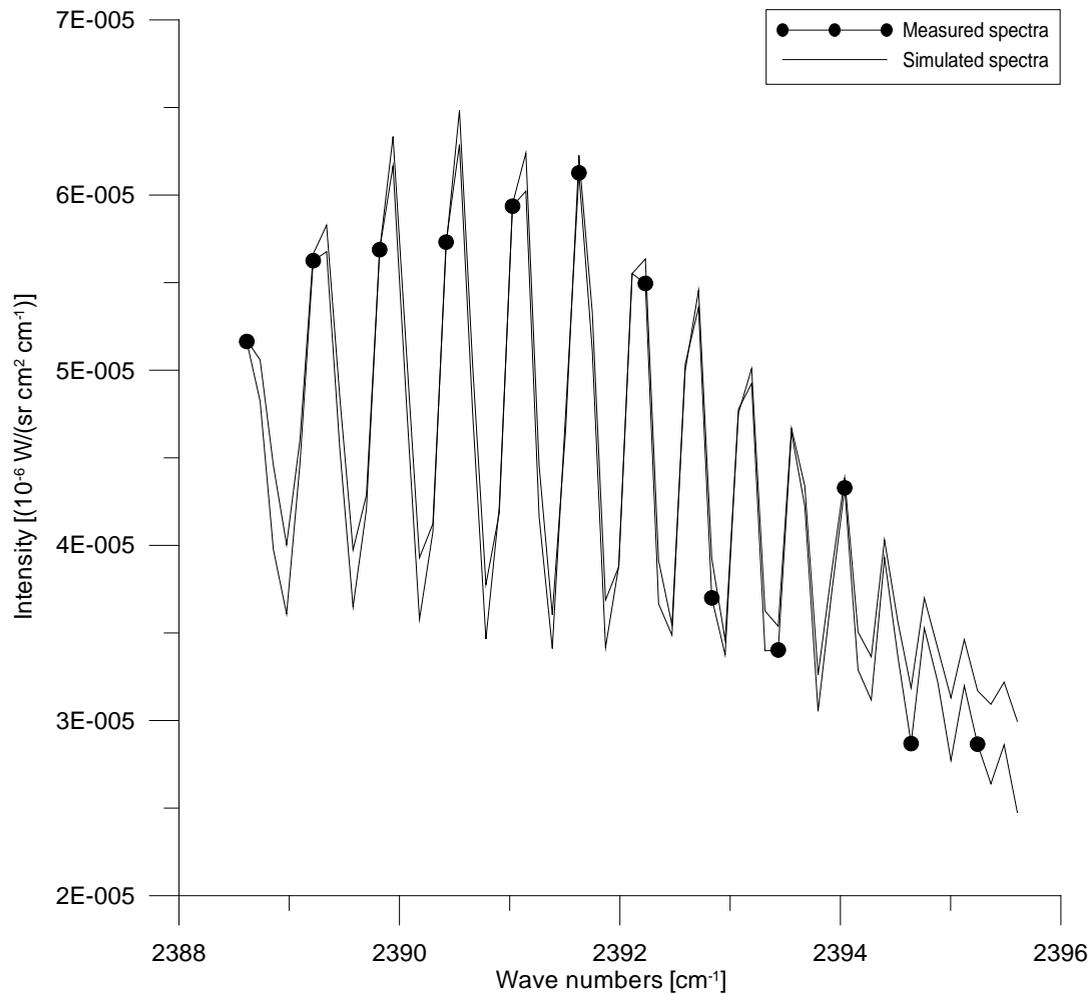
Simulation des Strahlungstransports im Abgas und der umgebenden Atmosphäre mit einem “line-by-line” Programm und dem HITRAN-Spektrallinien-Katalog (HITEMP)

Software MAPS (Multicomponent Air Pollution Software) für die Berechnung synthetischer Spektren sowie die Bestimmung der Konzentration von Abgaskomponenten und der Temperatur

Temperatur- und Konzentrations-Abhängigkeit der Spektren des Abgasstrahls einer Turbine

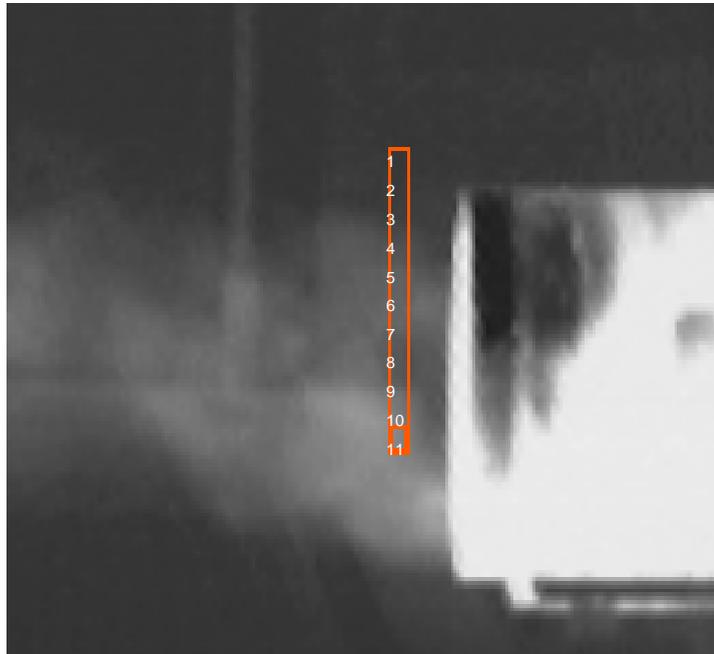


Gemessene und simulierte Spektren des Abgasstrahls einer Turbine

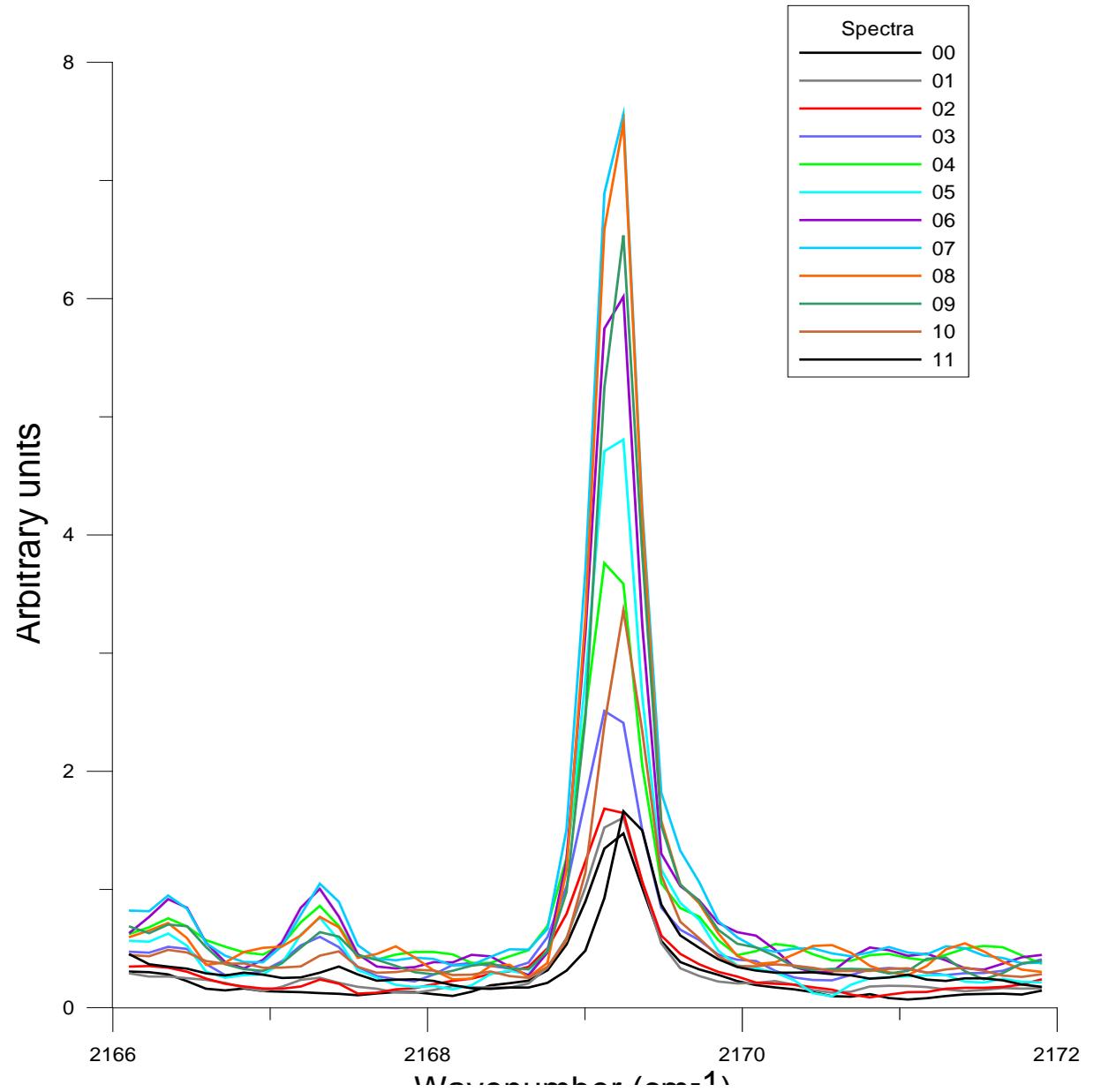


Vergleich verschiedener Messverfahren mittels Brenner

- Einsatz eines mit Kerosin betriebenen Brenners zum Vergleich mit in situ Messverfahren
 - gleichzeitig
 - im gleichen Abgasvolumen
- Brenner
 - Abgasrohr-Durchmesser 37 cm
 - Leistung ca. 150 kW
 - Temperatur des Abgases im Abgasrohr ca. 270° C
 - Einblasen frischer Luft in den Brenner mit einem Ventilator
 - Injektion von Kalibriergasen CO und NO mit verschiedenen Flussraten
- Abgasprobenahme und in situ Analyse der Zusammensetzung mittels HORIBA PG-250 im Zentrum des Abgasstrahls für CO₂, CO, NO, NO₂, UHC, SO₂ und O₂

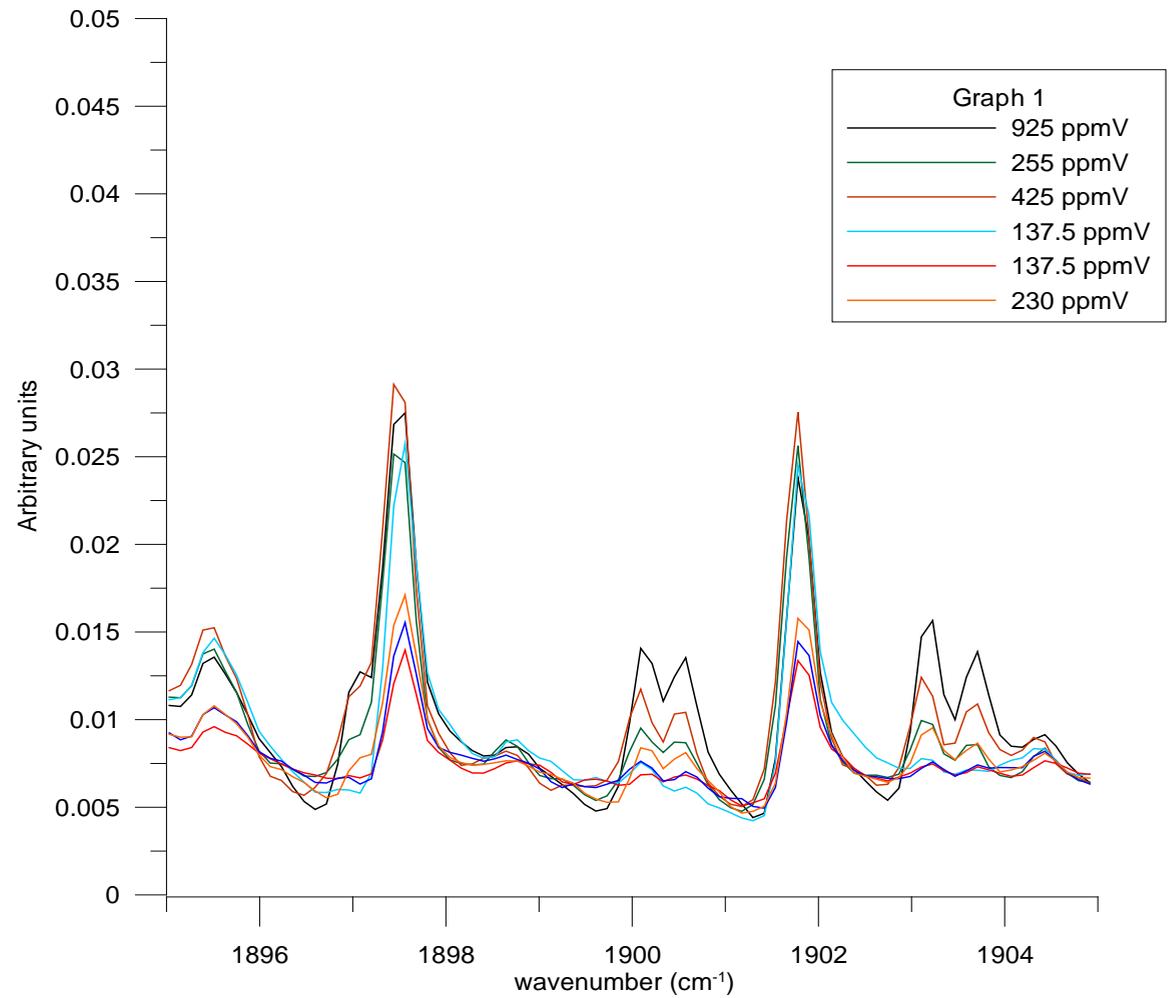


CO Injektion

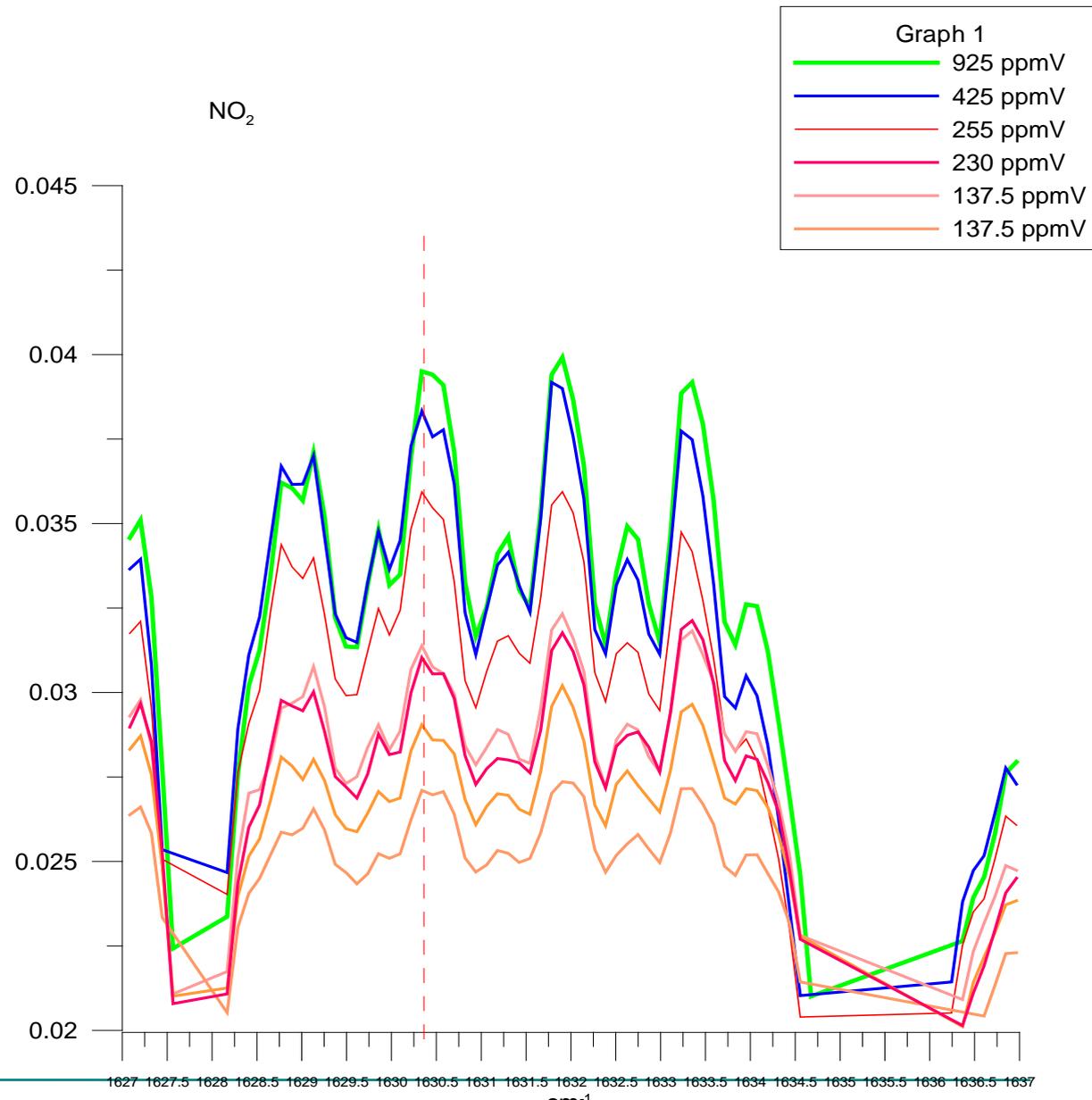




NO Injektion



Nachweis von NO_2 in den spektralen Fenstern von 1628 bis 1634 cm^{-1} bei verschiedenen NO Injektionsflüssen (100, 137,5, 230, 255, 425 und 925 ppmV)



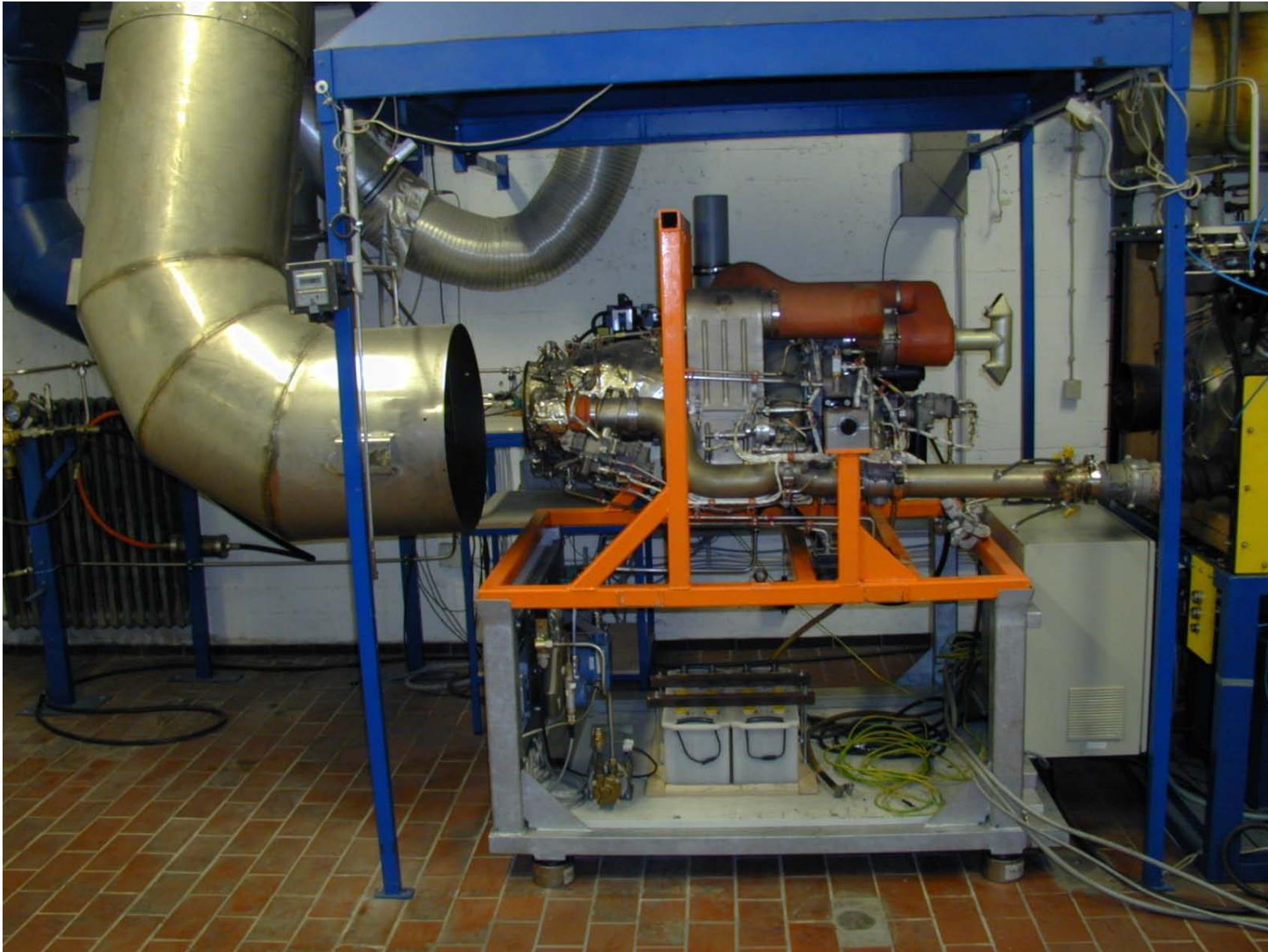
Ergebnisse des Vergleichs

- Unterschiede in den gemessenen CO₂-Konzentrationen bis zum Faktor 2:
Einflüsse von Wind auf die Abgastemperatur, Abgasfahnengeometrie und CO₂-Konzentrationen im Vordergrund
- In situ Daten für CO stimmen mit den CO-Injektionen überein
- Differenzen zwischen CO-Konzentrationen von FTIR und in situ Messungen ca. 10 %
- FTIR-Daten ca. 10 % geringer als in situ Messergebnisse für NO
- In situ Messergebnisse ca. 20 bis 50 % geringer als die NO-Injektionen:
Bildung von NO₂ aus NO im Abgas

Vergleich verschiedener Messverfahren mittels Turbine

- Auxiliary Power Unit GTCP36-300 (Airbus A320) im Labor
- 80 - 140 kg Kerosin pro Stunde
- Leistung 220 - 160 kW
- CO in verschiedenen Flussraten in das Abgas injiziert
- DOAS und FTIR Absorptionsspektrometrie auf dem Dach des Laborgebäudes für die Bestimmung der Zusammensetzung des Abgases installiert
- Passiv FTIR und in situ Messtechniken an der Turbine zwischen Düsenausgang und Abgasrohr eingesetzt:
Probleme mit verschiedenen Sondierungsvolumen

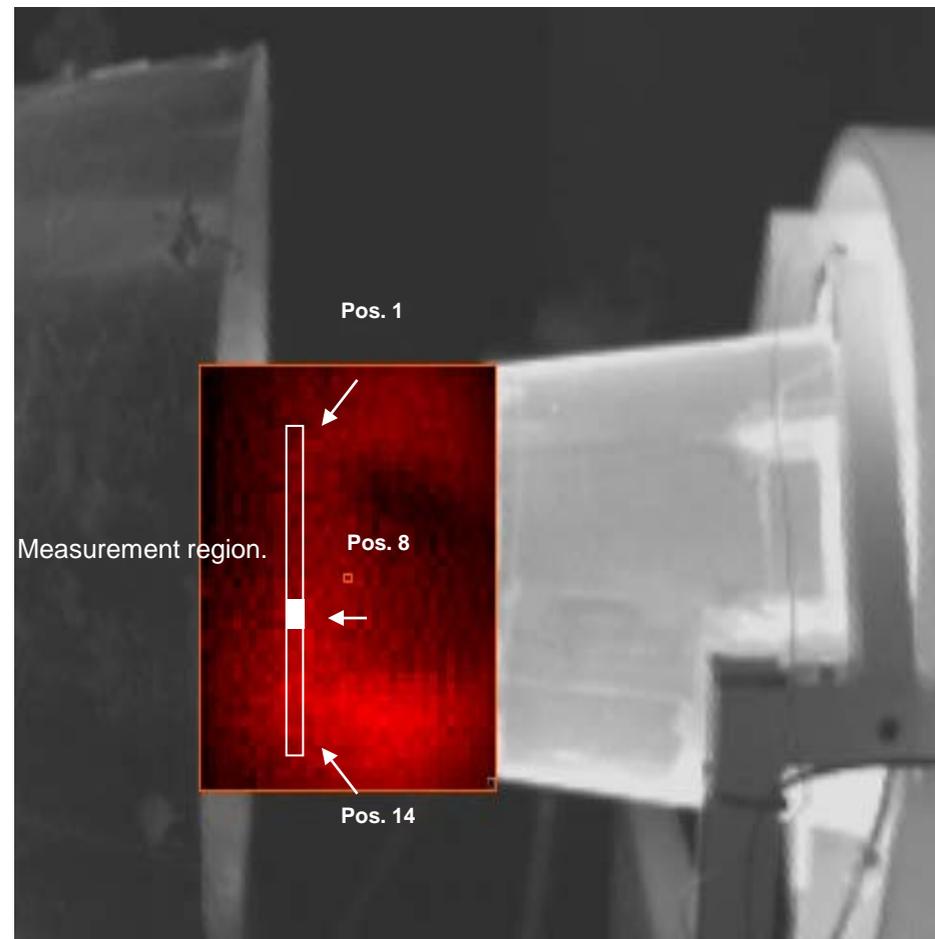
Forschungszentrum Karlsruhe
in der Helmholtz-Gemeinschaft



Ergebnisse des Vergleichs

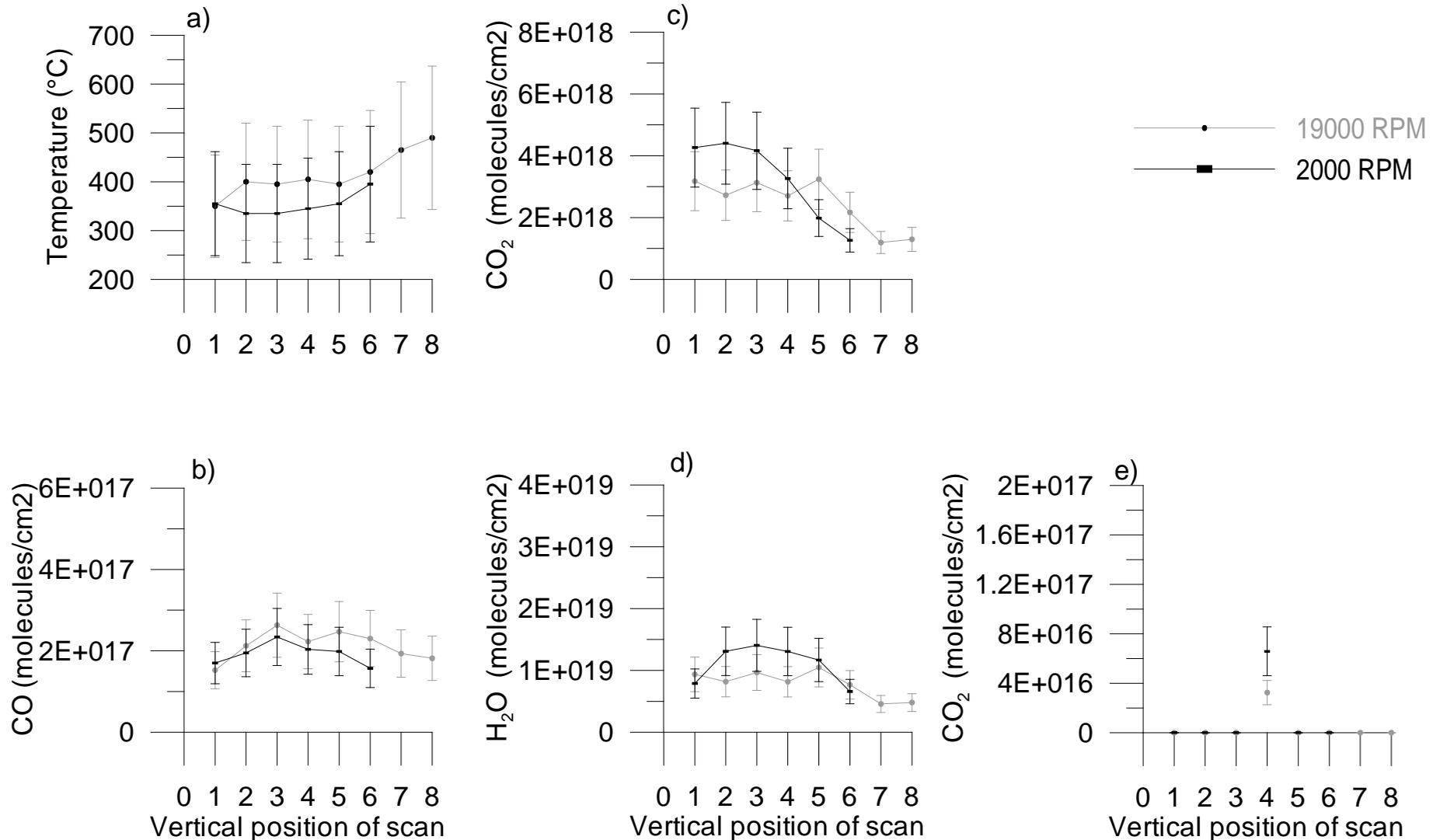
- Gemessene NO-Konzentrationen zeigen eine klare Abhängigkeit vom Schub der Turbine
 - Messungen auf dem Dach vom Wind beeinflusst
 - Abweichungen zwischen den NO- und CO-Konzentrations-Messergebnissen von DOAS, FTIR und in situ Messungen geringer als $\pm 20\%$
 - Probleme mit der homogenen Durchmischung und den chemischen Umwandlungen der injizierten Kalibriergase CO und NO beim Vergleich von FTIR und in situ Messergebnissen hinter dem Düsenausgang
-

Messung einer Turbine Gnome 1200 im Prüfstand



Abgas-Analyse der Turbine Gnome 1200

Fehlerbalken 8 C für die Temperatur und 4% für die Konzentration



Messungen auf Flughäfen

- während **Tests von Flugzeug-Triebwerken**

Berlin, Oberpfaffenhofen, München, London-Heathrow,
Frankfurt/Main, Wien-Schwechat

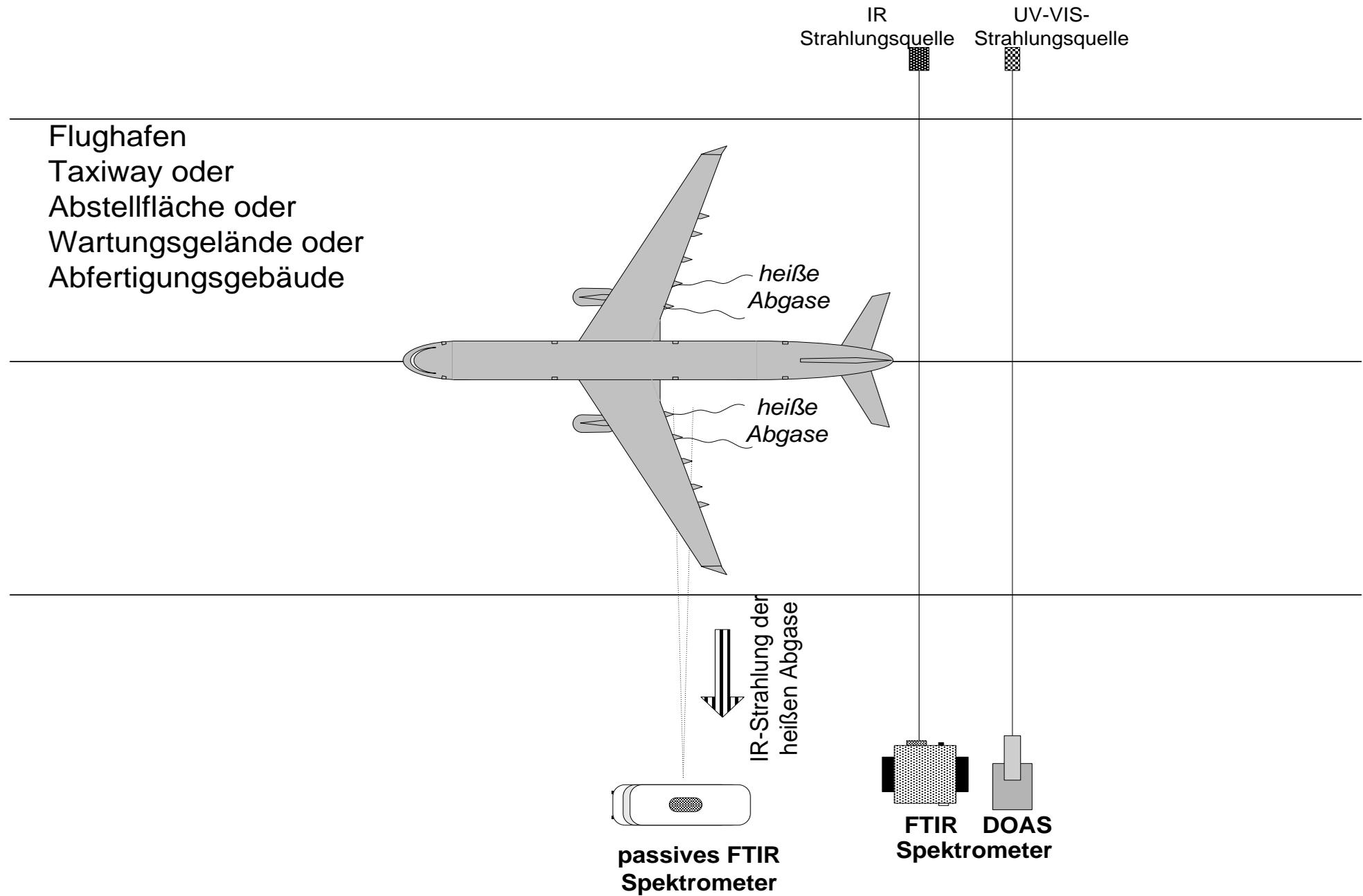
- **Start und Leerlauf der Triebwerke** nach der Abfertigung

Frankfurt/Main, London-Heathrow, Zürich, Paris CDG, Budapest

- **Extra Stopp** der Flugzeuge auf der Rollbahn (Leerlauf - Idle)

Wien-Schwechat

Forschungszentrum Karlsruhe in der Helmholtz-Gemeinschaft



Maximaler Abstand zum Abgasstrahl 200 m

Mittlerer Emissionsindex EI eines Moleküls X in g/kg Kerosin:

$$EI(X) = EI(CO_2) \times \frac{M(X)}{M(CO_2)} \times \frac{Q(X)}{Q(CO_2)}$$

M : Molekulargewicht

Q : Konzentration (Mischungsverhältnis, Säulendichte etc.), Differenz zum Hintergrund

$EI(CO_2) = 3.159$ g/kg, berechnet aus der stöchiometrischen Verbrennung von Kerosin

$EI(NO_x) = EI(NO) \times 46/30 + EI(NO_2)$, bezogen auf die Masse von NO_2

Vergleich der Triebwerks-Messergebnisse von ca. 100 verschiedenen Flugzeugen im Leerlauf mit den Angaben der ICAO-Datenbank

CO-Emissionsindex höher (maximal 30 %)

NO_x-Emissionsindex geringer (bis ca. 50 %)

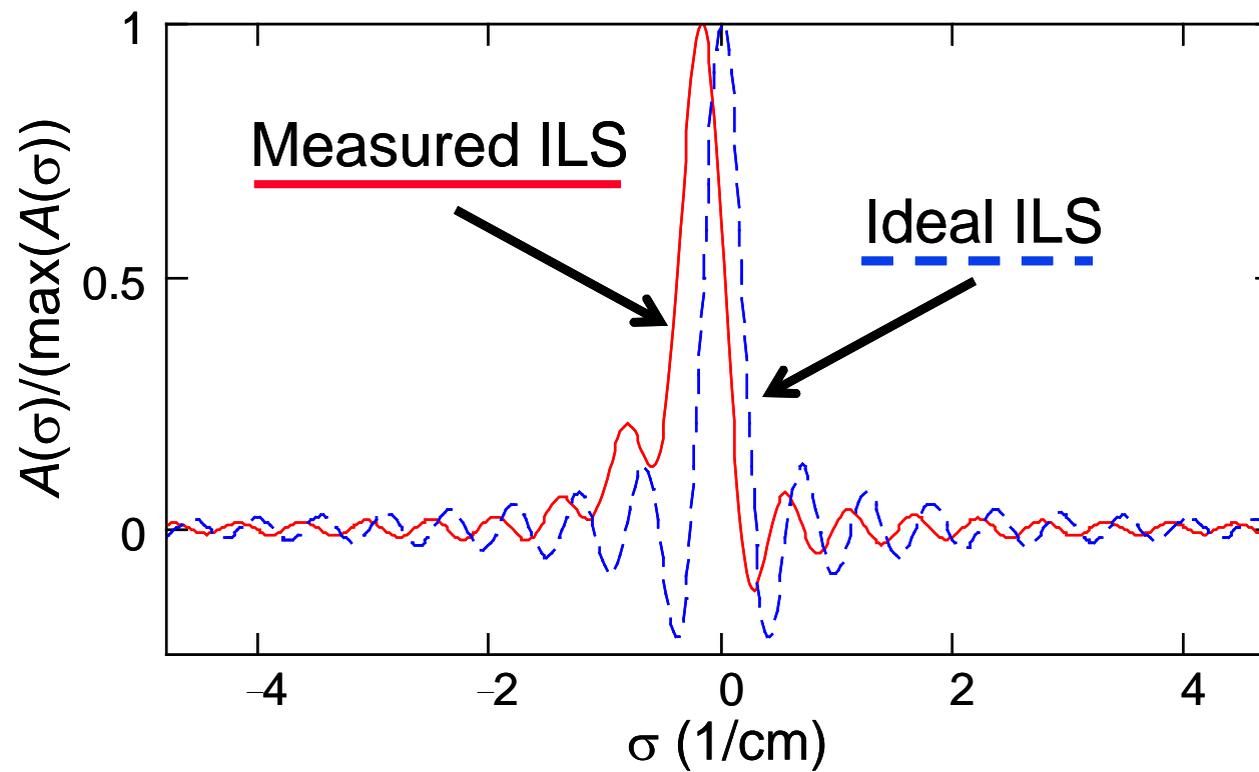
Wegen Treibstoffeinsparungen ist der Schub der Triebwerke bei Idle geringer als 7 % des Maximums

Daten gleicher APU-Typen haben eine große Schwankungsbreite

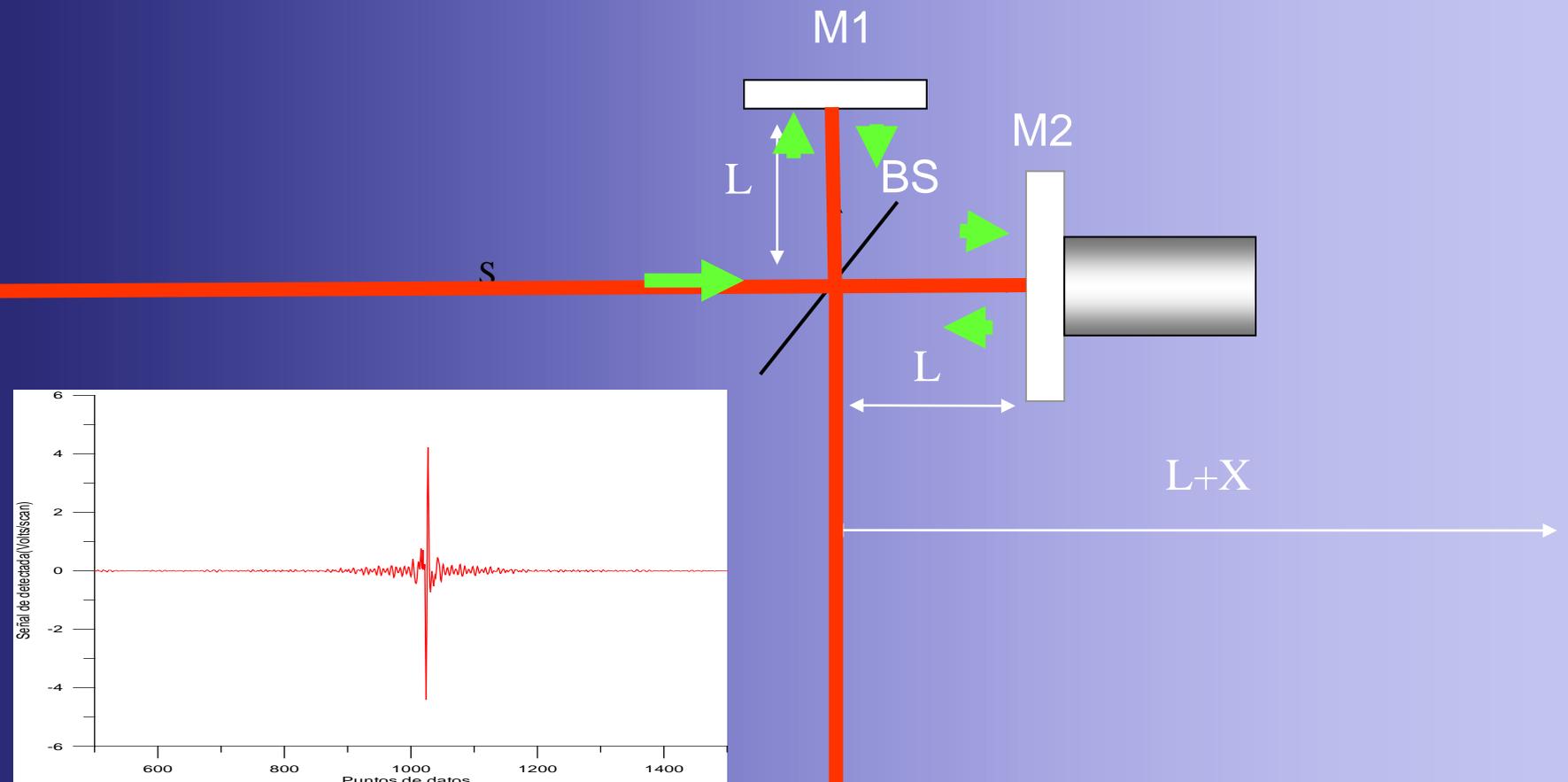
NO-Emissionen der APU auf Flughäfen sind eine ernst zu nehmende Luftbelastung

Kalibrierungs-Methode

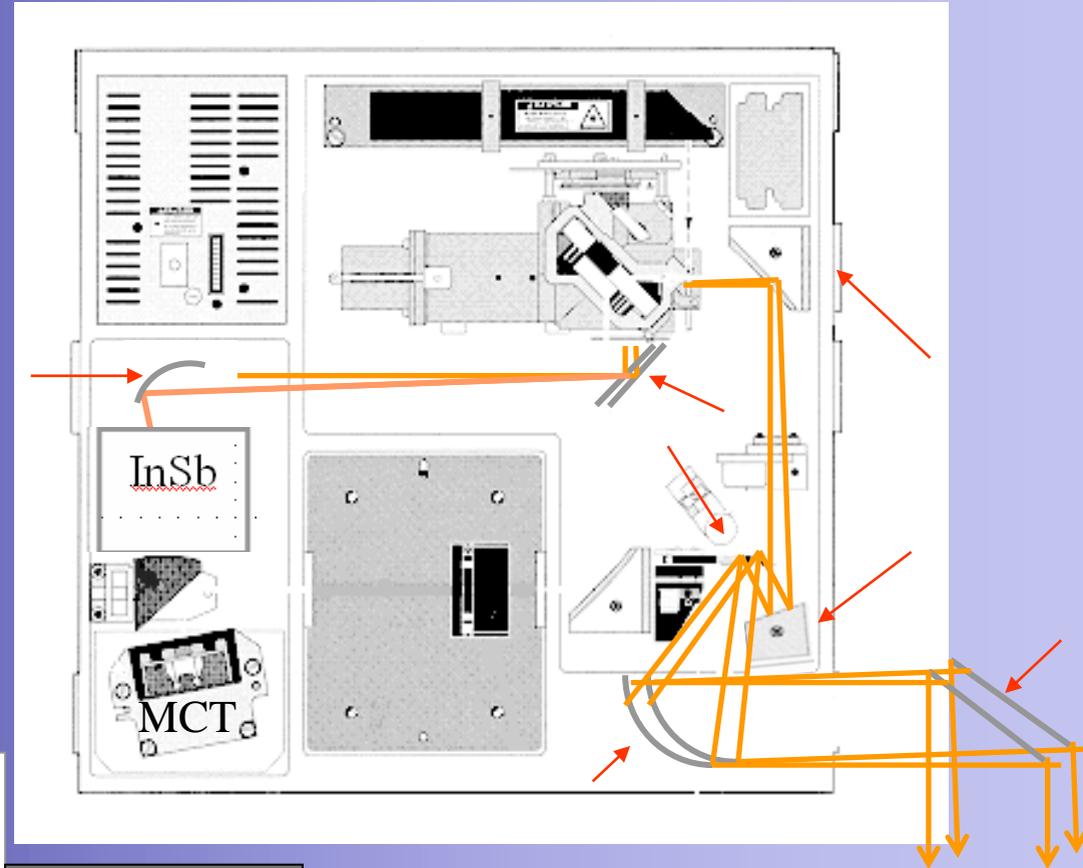
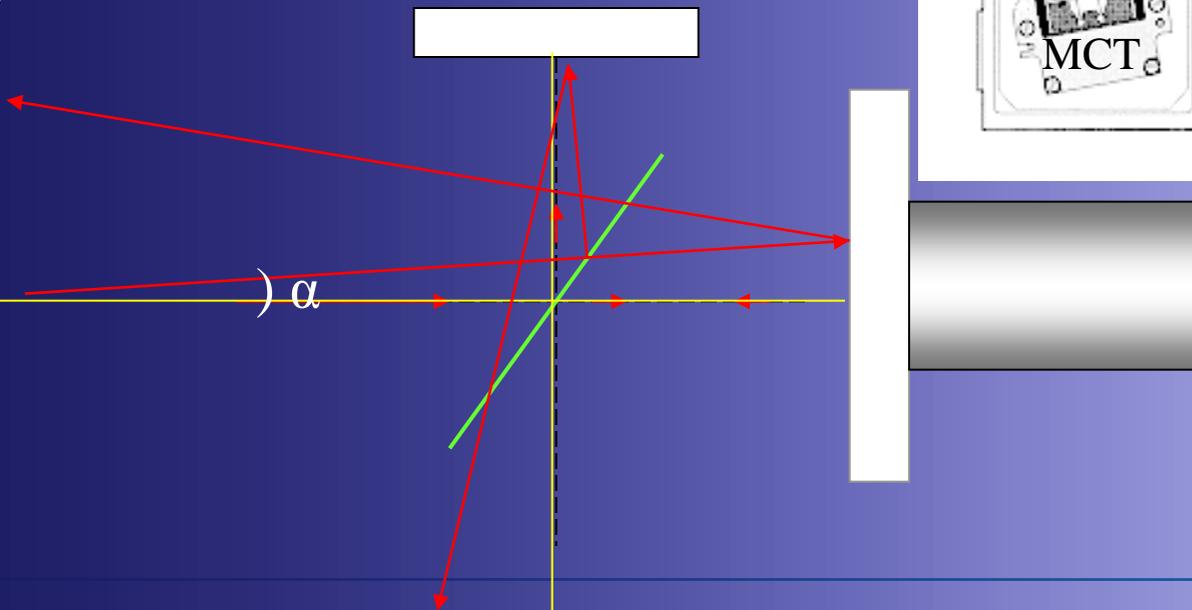
Bestimmung des instrumentellen Linien-Profiles (ILS)



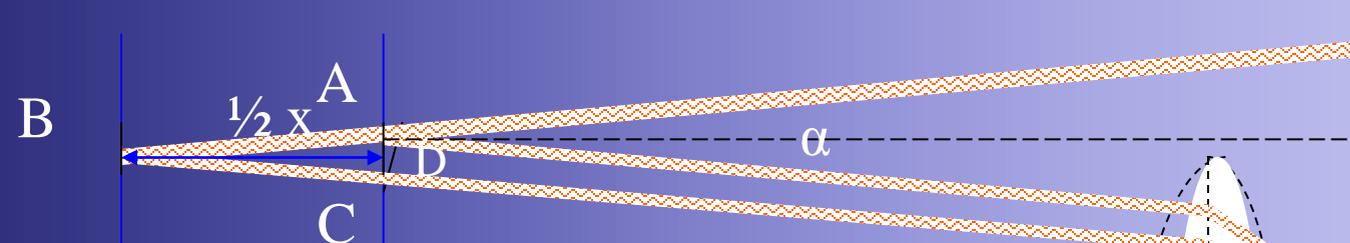
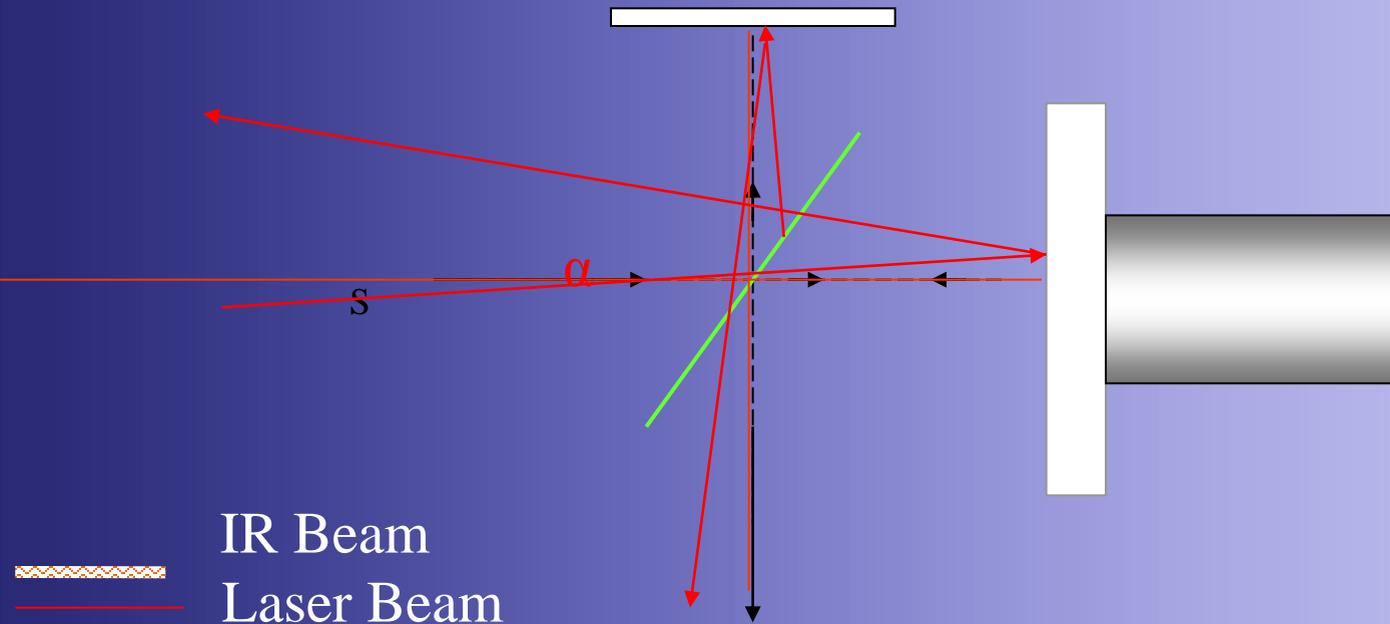
Ideales Interferometer mit perfekt kolimierter Strahlung:
Instrumentelles Linienprofil A_0 ist die Fourier- transformierte der
Funktion, die die endliche Bewegung des Spiegels beschreibt



— Laser
— IR



Phasen-Fehler – falsche Abtastpunkte



Die Wegdifferenz x_α zwischen den beiden Strahlen ist:

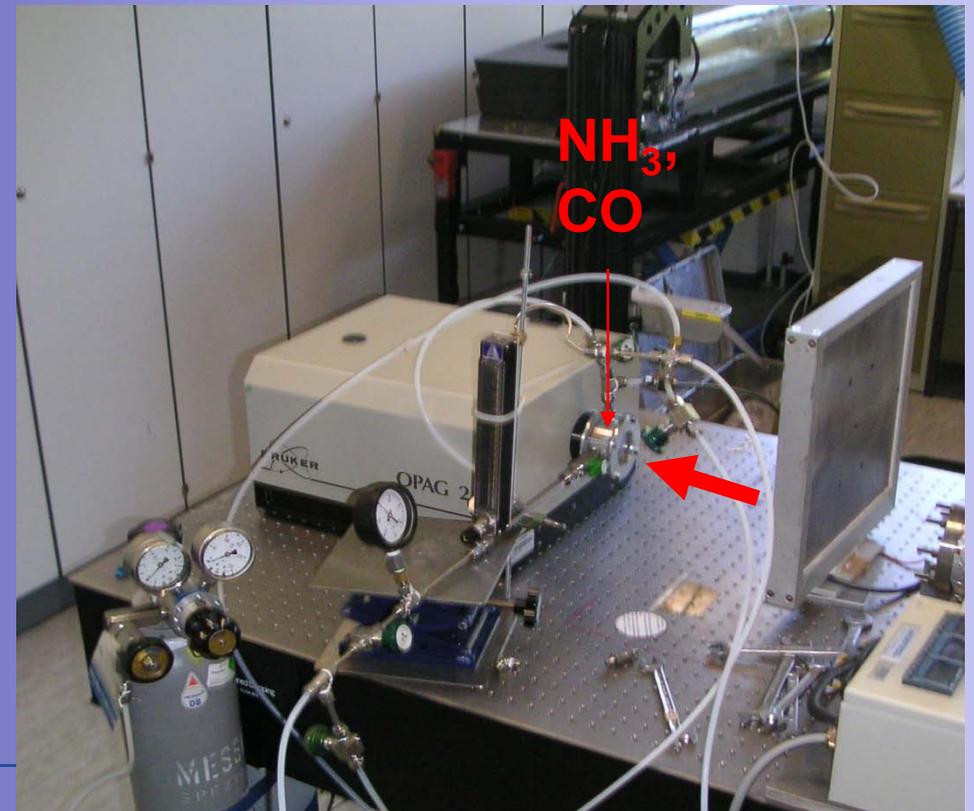
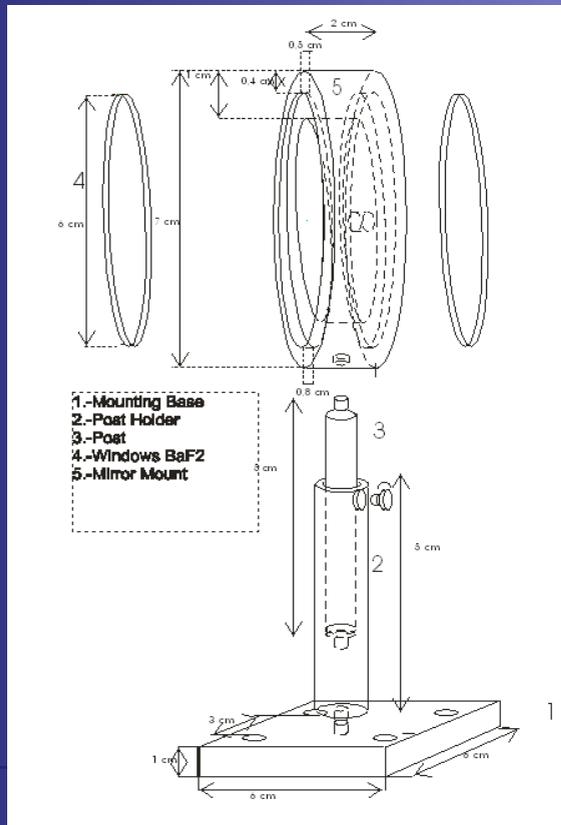
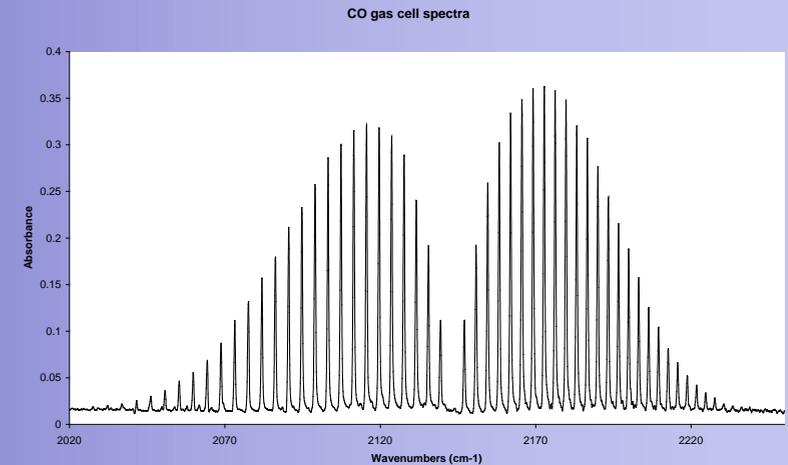
$$x_\alpha = (AB + BC) - AC = x \cos \alpha$$

M1

M2

Transmission eines Gases

Material der Zelle: Edelstahl
Optische Dicke: 1 cm
Gesichtsfeld: 5 cm
Fenstermaterial: BaF₂



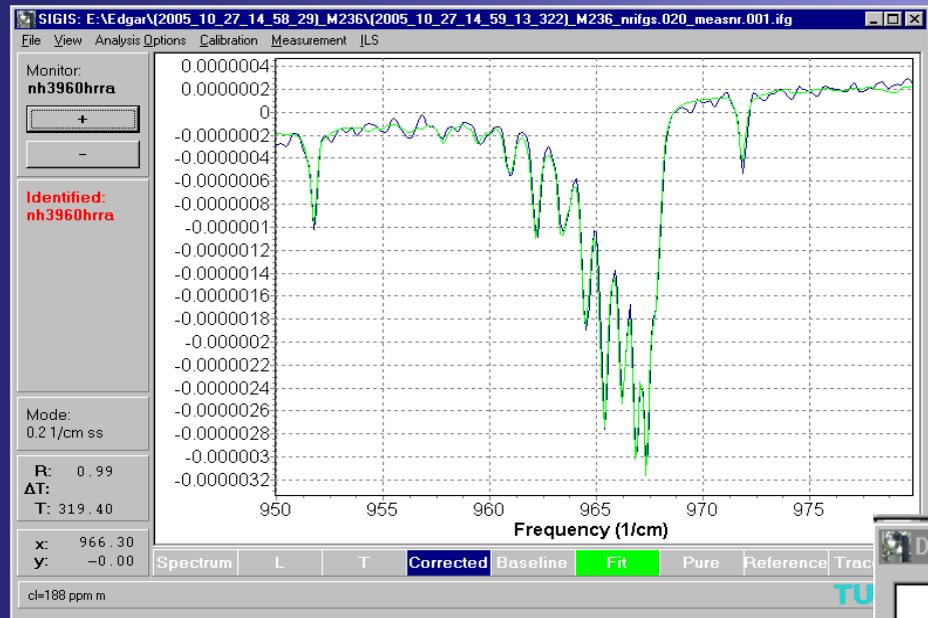
Kalibrierungs-Methode

Absorptionsmessung:

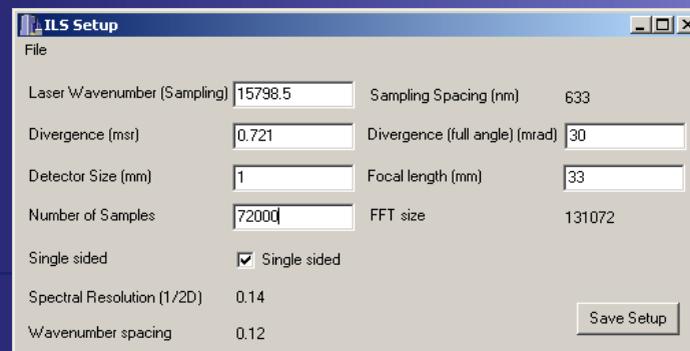
- Messung eines Gases mit klar getrennten Linien (CO, NH₃)
 - Messung mit einer spektralen Auflösung kleiner als der Linienbreite
 - Gaszelle mit 2 % CO in N₂, Messung bei Umgebungstemperatur
 - Bestimmung der realen ILS durch Minimierung der Differenz zwischen gemessenem und simuliertem Spektrum unter Verwendung eines ILS-Modells – Software-Modul in MAPS
-

ILS determination

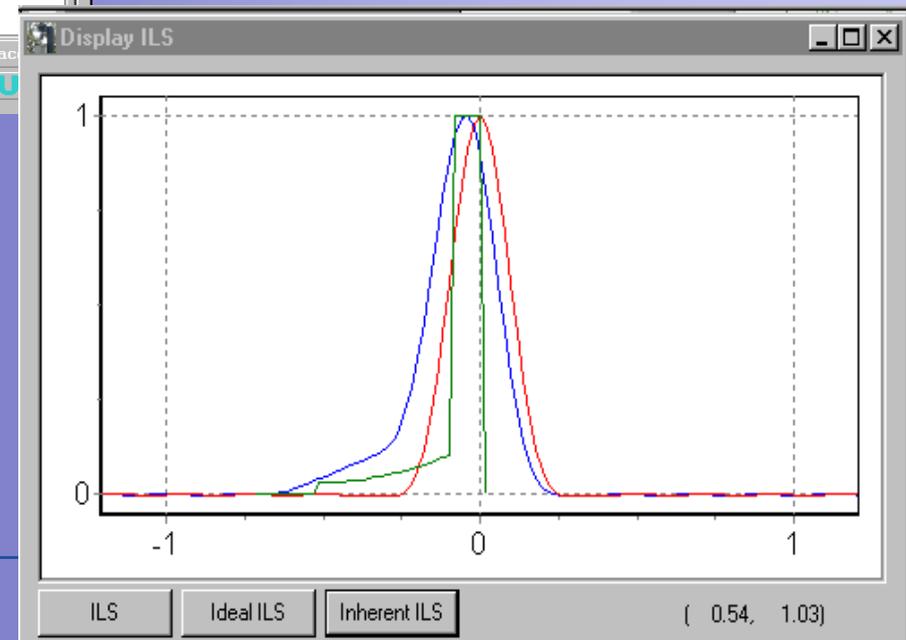
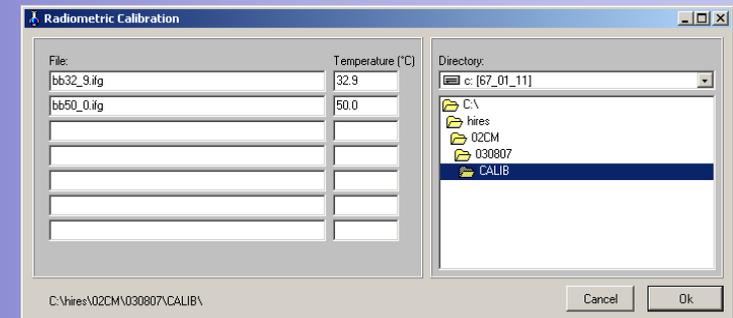
User Interface



ILS Visualization



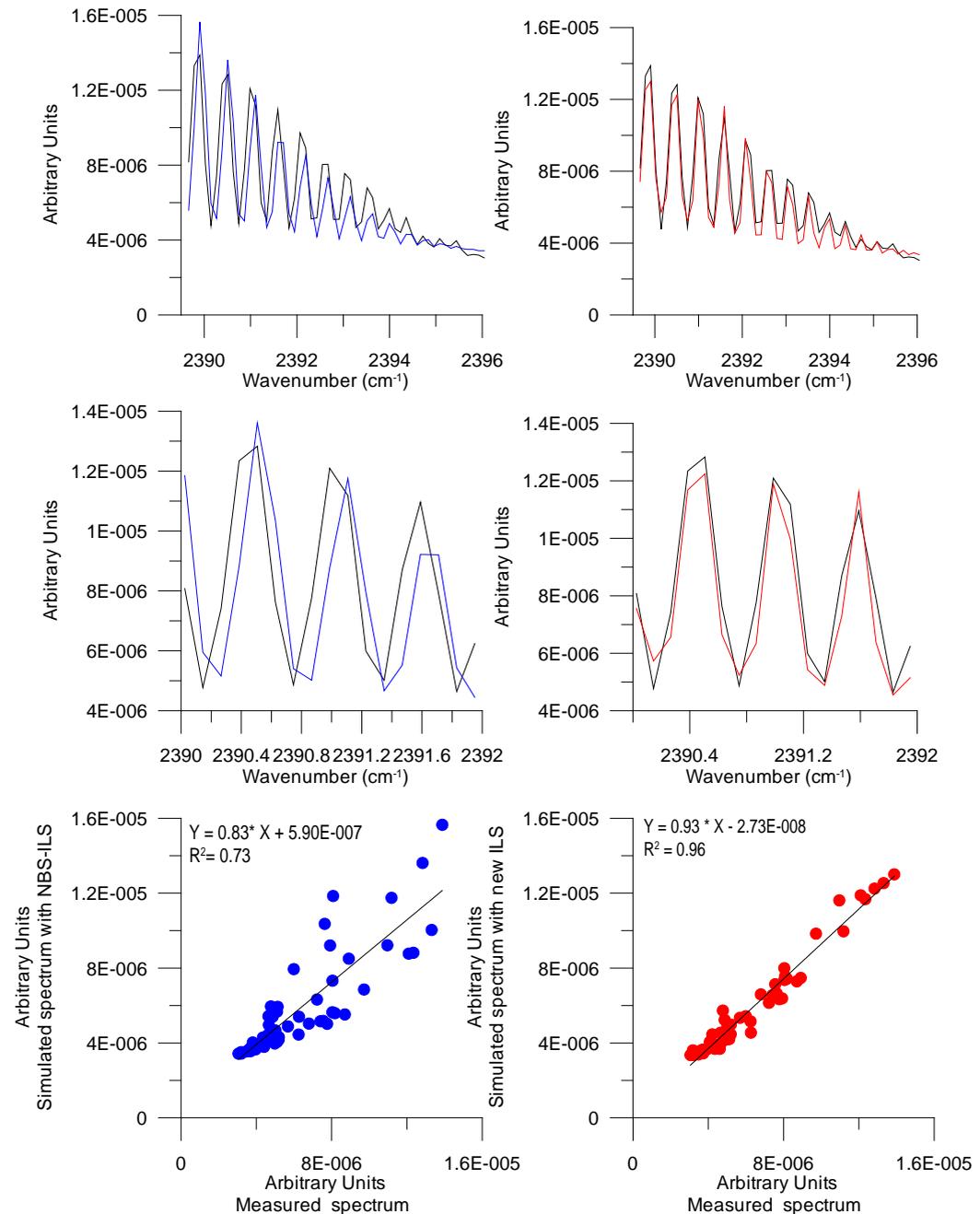
Calibration



Simulation eines Abgas-Spektrums
mit MAPS und Verwendung von
zwei verschiedenen ILS

Spektren-Simulation mit Norton-
Beer-Strong Apodisation
(blau), Korrelationsfaktor 0,68

Spektren-Simulation mit der
experimentell bestimmten ILS (rot),
Korrelationsfaktor 0,94



Diskussion

operationell anwendbar und Voraussetzung für gute Messergebnisse

auch Kontrolle der **korrekten optischen Justage** des FTS

Zur weiteren Verbesserung der Genauigkeit der Messergebnisse muss die Hoch-Temperatur-Datenbank **HITEMP** weiter entwickelt werden

Schlussfolgerungen

Vorteile der FTIR-Emissions-Spektrometrie im Vergleich zu den Standard-Messmethoden für Abgase:

- **Abgas-Visualisierung** mit einer gekoppelten Infrarot-Kamera
- Rückschlüsse auf **Temperatur-Anomalien** mit einer Messung der Strahlungstemperatur-Verteilung
- Messung der Abgas-Zusammensetzung wird nicht durch Schall- und Vibrationseinflüsse auf die Spektrometer beeinträchtigt

Arbeiten an der VDI/DIN-Richtlinie 4211, Blatt 2 „Messungen in der Atmosphäre nach dem Passiv-FTIR-Prinzip“

Die **Schwerpunkte** sind derzeit:

- **Grundlagen des Verfahrens**

Prinzip der Fernerkundung, Strahlungstransport-Modell, Strahlungstemperatur

- **Messsysteme**

FTIR-Spektroskopie, Radiometrische Kalibrierung, Messanordnungen

- **Fernerkundung von Gasen bei Umgebungstemperaturen**

Grundlagen, Identifikation von Gasen, Quantifizierung, Ausführungsbeispiele

- **Fernerkundung von Gasen bei hohen Temperaturen**

Grundlagen, Quantifizierung der Temperatur, Quantifizierung der Zusammensetzung, Ausführungsbeispiele

- **Fernerkundung der Atmosphäre (mit Sonnenstrahlung)**

Danksagung

Die Autoren danken für die finanzielle Unterstützung im Rahmen der EU-Projekte AEROJET 2 (BRPR CT-98-0618), ARTEMIS (1999-RD.10429) und AEROTEST (AST3-CT-2004-502856).

Die Untersuchungsergebnisse werden im EU-Network of Excellence ECATS (Environmentally Compatible Air Transport System), Vertragsnummer 12284, angewendet.

Ohne die sehr gute Zusammenarbeit mit den Flughafenverwaltung von Frankfurt/Main, London-Heathrow, Vienna, München, Zürich, Paris CDG und Budapest sowie Deutsche Lufthansa AG, British Airways, Austrian Airlines Group und SWISS wären diese Ergebnisse nicht möglich gewesen.
