

**Prozesssimulation
biologischer Abbauprozesse
im Bereich der Abfallwirtschaft**

Vom Promotionsausschuss der
Technischen Universität Hamburg-Harburg
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor-Ingenieurin (Dr.-Ing.)
genehmigte Dissertation

von

Anna Deipser

aus

Hamburg

2014

Gutachter:

Prof. Dr. rer. nat. An-Ping Zeng (Prüfungsausschussvorsitzender)

PD Dr.-Ing. habil. Ina Körner (1. Gutachterin)

Prof. Dr.-Ing. Gerhard Schmitz (2. Gutachter)

Tag der mündlichen Prüfung: 4. Juli 2014

Diese Dissertation wurde erstellt am

Institut für Abwasserwirtschaft und Gewässerschutz (AWW)
an der Technischen Universität Hamburg-Harburg
Leiter des Instituts: Prof. Dr.-Ing. Ralf Otterpohl

Gruppe Biokonversion und Emissionsminderung (BIEM)
Gruppenleiterin: PD Dr.-Ing. habil. Ina Körner
www.tuhh.de/aww

Herausgeber / Editor

Gesellschaft zur Förderung und Entwicklung der Umwelttechnologien an der
Technischen Universität Hamburg-Harburg e.V. (GFEU)
c/o Technische Universität Hamburg-Harburg
Institut für Abwasserwirtschaft und Gewässerschutz
Eißendorfer Straße 42
21071 Hamburg
Telefon: +49 (0)40 42878 3207
Fax: +49 (0)40 42878 2684
www.gfeu.org

ISBN 978-3-942768-13-9
urn:nbn:de:gbv:830-tubdok-12814

Alle Rechte vorbehalten.
Nachdruck, auch auszugsweise, ist nur mit Genehmigung der Autorin gestattet.

© Anna Deipser, 2014

Hamburger Berichte zur Siedlungswasserwirtschaft
Band 88

Vorwort

Die Verwertung organischer Abfälle ist ein wichtiger Bestandteil der Kreislaufwirtschaft. Wesentliche Verwertungsverfahren sind die Kompostierung und die Vergärung. Die bei der Kompostierung, Vergärung und auch bei der Deponierung ablaufenden Prozesse basieren auf komplexen biochemischen und physikalischen Vorgängen. Mischkonsortien von Mikroorganismen führen aerobe und/oder anaerobe Ab- und Umbauprozesse durch. Alle drei Verfahren können mit dem in dieser Arbeit beschriebenen Instrument simuliert werden. Das entwickelte Simulationstool ist aber auch für andere Bereiche z. B. für die energetische Verwertung Nachwachsender Rohstoffe (NawaRos) und in der Abwasserwirtschaft nutzbar.

Das Ziel war die Bereitstellung einer Simulationssoftware für die hinreichend genaue Prognose von Prozessverläufen unter Berücksichtigung variabler anwendungsspezifischer Rahmenbedingungen. Das entstandene Simulationsprogramm *SimuCF* ist daher für vielfältige Anwendungen in Praxis, Forschung und Ausbildung anwendbar. Eine komplexe und ausreichend genaue Prozesssimulation ist bei der Prozessplanung, -kontrolle und -optimierung ein wichtiges Instrument. Zuverlässige Prozesssimulationen können einen wesentlichen Beitrag zur effizienten und sicheren Nutzung von Bioressourcen leisten.

In dem des Simulationsprogramms zu Grunde liegenden Simulationsmodell wurden die vielfältigen Kenntnisse über die biologischen Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft zusammengeführt. Verwendet wurden fast ausschließlich mathematische und physikalische Zusammenhänge und Reaktionsgleichungen aus der Chemie, Biochemie, Mikrobiologie und Physik. Es wurden kaum empirisch gewonnene Gleichungen aus der Fachliteratur genutzt. Hierdurch erlangt das Modell Allgemeingültigkeit und ist nicht auf spezifische Anwendungen beschränkt. Eine hohe Flexibilität aufgrund der Integration vieler Zusammenhänge in das Modell ermöglicht den Einsatz auf vielen Gebieten. Es konnte gezeigt werden, dass Tendenzen und Größenordnungen im Vergleich von Empirik und Simulation trotz der vielen Einflüsse nahe beieinander liegen. Um mit Hilfe des Simulationsmodells verlässliche Ergebnisse zu gewinnen, sind vor allem gute Kenntnisse zur Zusammensetzung des Ausgangssubstrats und der Umweltbedingungen wichtig.

Ina Körner

INHALTSVERZEICHNIS

1	<i>Einführung</i>	1
2	<i>Stand der Forschung</i>	4
2.1	Simulationsmodelle der aeroben biologischen Abfallbehandlung	4
2.2	Simulationsmodelle der anaeroben biologischen Abfallbehandlung	7
2.3	Empirische Simulationen der biologischen Abfallbehandlung	8
2.4	Simulationsmodelle für Abfalldeponien.....	9
2.5	Simulationsmodelle in der Abwassertechnik	9
2.6	Zusammenfassung des Forschungsstandes	9
3	<i>Grundlagen und Entwicklung des Simulationsmodells</i>	12
3.1	Empirische, deterministische und stochastische Modelle	12
3.2	Entwicklung des Simulationsmodells	14
3.3	Simulationsprogramm	14
3.4	Modellverifikation und Modellvalidierung.....	15
3.5	Modellthema biologische Abfallbehandlung	15
3.6	Input, Simulationsmodell und Output	16
4	<i>Biologische Abfallbehandlung</i>	20
4.1	Kompostierung.....	24
4.2	Vergärung	26
5	<i>Fachspezifisches Grundwissen für die Modellentwicklung</i>	29
5.1	Mikroorganismen	29
5.2	Temperatur.....	37
5.3	Sauerstoffgehalt und Substratstruktur	40
5.4	Durchströmungseigenschaften	42
5.5	Wassergehalt	42
5.6	Nährstoffe	45

5.7	pH-Wert	50
5.8	Gasbildungspotential und Atmungsaktivität	52
5.9	Schwermetalle	54
6	Simulationsprogramm	57
6.1	Simulationsmodell	58
6.1.1	Abbaukinetik und Implementierung	60
6.1.2	Modellmoleküle	66
6.1.3	Stöchiometrische Modellreaktionen	68
6.1.4	Molare Reaktionsenthalpieänderungen.....	71
6.1.5	Thermodynamik.....	75
6.1.6	Be- und Entfeuchten von Luft.....	90
6.1.7	Wasserhaushalt.....	94
6.1.8	Sauerstoffgehalt und Substratstruktur	102
6.1.9	Stickstoff- und Schwefelreaktionen	111
6.1.10	pH-Wertbildung	118
6.1.11	Lösungs-, Transport- und Diffusionsprozesse.....	122
6.1.12	Verweilzeit und Raumbelastung	122
6.1.13	Schwermetallhemmung.....	124
6.1.14	Eingesetzte Stoffwerte	125
6.2	Eingabewerte (Input)	126
6.2.1	Eingabe der Belüftung.....	127
6.2.2	Eingabe der Isolation und des Wassermantels	128
6.2.3	Eingabe des Chargenbetriebs.....	129
6.2.4	Eingabe der betrachteten Abbauzeit.....	129
6.2.5	Automatische Materialmengenveränderungen durch das Programm	130
6.2.6	Eingabe der Verzögerungsphasen	131
6.2.7	Eingabe der Material- und Reaktorform	131
6.2.8	Eingabe der Materialien	134
6.2.9	Aufruf der Laborversuche.....	137
6.2.10	Eingabe der Wasserzufuhr und Wasserabfuhr	139
6.3	Ausgabewerte (Output)	140
6.3.1	Ausgabe von Werten im zeitlichen Verlauf.....	140
6.3.2	Ausgabe von Werten des Wasserhaushalts	142
6.3.3	Ausgabe von Werten der Wasserphase.....	143
6.3.4	Ausgabe von Werten der Gasphase	143

6.3.5	Ausgabe des Gasbildungspotentials und der Atmungsaktivität	144
6.3.6	Ausgabe von Werten des Materials	144
6.3.7	Ausgabe der erreichten Abbaurate und Methanbildung.....	145
6.3.8	Ausgabe von Stickstoff- und Schwefelwerten	147
6.3.9	Ausgabe der Essigsäurekonzentration, Raumbelastung und Verweilzeit...	148
6.3.10	Ausgabe von weiteren Endwerten	148
6.3.11	Ausgabe der Materialentnahme bei Chargenbetrieb	148
6.3.12	Speicherung von Simulationen	149
6.4	Zusammenfassende Charakterisierung des Simulationsprogramms.....	149
7	Anwendung des Simulationsprogramms	153
7.1	Gaszusammensetzung bei unterschiedlichen Betriebsarten	154
7.1.1	Simulationsergebnis Kompostierung und Vergärung.....	156
7.1.2	Quasi-kontinuierlicher Chargenbetrieb mit und ohne Belüftung.....	157
7.1.3	Mehrtägiger Chargenbetrieb in der Anlaufphase mit und ohne Belüftung ..	159
7.1.4	Simulationsergebnis Vergärung mit Lufteintrag	161
7.1.5	Gasemissionen bei der Kompostierung und Vergärung in der Realität	166
7.2	Simulationsergebnisse einzelner Parameter.....	169
7.2.1	Simulationsergebnisse zur Gasentstehung.....	169
7.2.2	Simulationsergebnisse zur Wasserstoffproduktion	170
7.2.3	Simulationsergebnisse zu Sauerstoffverbrauch und Gasbildung.....	172
7.2.3.1	Simulationsergebnisse zu Gasbildungspotential und Atmungsaktivität	173
7.2.3.2	Simulationsergebnisse zur Methanproduktion	175
7.2.4	Simulationsergebnisse zum Wassergehalt	176
7.2.5	Simulationsergebnisse zum Temperaturverlauf.....	179
7.2.6	Simulationsergebnisse zum pH-Wertverlauf	184
7.2.7	Simulationsergebnisse der Nährstoffbilanzen.....	185
7.2.8	Simulationsergebnisse zu Ammonium, Nitrat, Nitrit und Sulfat.....	187
7.2.9	Simulationsergebnisse zu Stickstoff- und Schwefelemissionen.....	189
7.2.10	Simulationsergebnisse zur Schwermetallhemmung	191
7.3	Simulationsergebnisse physikalischer Parameter	192
8	Vergleich der Kompostierungssimulation mit einem Laborversuch	198
8.1	Parameter des Laborversuchs und Simulation der Kompostierung.....	198
8.2	Laborwerte und Simulationsergebnisse im Vergleich.....	200
8.3	Simulationsergebnisse physikalischer Parameter des Laborversuchs	201

9	<i>Empirische Ergebnisse aus der Literatur im Vergleich zur Simulation...</i>	203
9.1	Vergleich: Stickstoff in der Kompostierung.....	203
9.2	Vergleich: Parameter großtechnischer Biogasanlagen	208
9.3	Vergleich: Methanbildung der im Programm vorgegebenen Substrate.....	214
9.4	Vergleich: Ermittlung von Methanbildungspotentialen im Labortest.....	218
9.5	Simulation eines weiteren Anwendungsgebiets (belüftete Deponie).....	225
10	<i>Beurteilung des Simulationsmodells und Diskussion</i>	235
11	<i>Zusammenfassung</i>	238
12	<i>Ausblick auf weitere Anwendungen des Simulationsprogramms</i>	248
13	<i>Literaturverzeichnis</i>	249
14	<i>Anhang</i>	275
14.1	Liste der Simulationsparameter (Input)	275
14.2	Die graphischen Simulationsergebnisse physikalischer Parameter	277
14.3	Biogausausbeute verschiedener Substrate	282
14.4	Laborversuchsergebnisse der Modellabfälle	283

ABKÜRZUNGS- UND SYMBOLVERZEICHNIS

a	Setzung (Vorgabe) (high-%)
A	wirksame Oberfläche (A_O) oder Grund- bzw. Auflagefläche (A_u)
AbfAbfV	Abfallablagerungsverordnung
AbwV	Abwasserverordnung
AC _{eq}	Essigsäureäquivalent (einschließlich organischer Carbonsäuren und VFA) (Mol)
aer.	aerob (Anwesenheit von Sauerstoff für den mikrobiologischen Abbau)
anaer.	anaerob (Abwesenheit von Sauerstoff für den mikrobiologischen Abbau)
A_O	wirksame Oberfläche (m^2)
AT ₄	Sauerstoff-Respiration über einen Zeitraum von 4 Tagen (mg O ₂ /g TS)
A_u	Grund- bzw. Auflagefläche (m^2)
b	maximale Breite bzw. Durchmesser der Materialschüttung (m) (Material bzw. Feststoff, enthält Substrat) bei Über- bzw. Unterschreitung von 0 °C (kJ)
BImSchG	Bundes-Immissionsschutzgesetz
BImSchV	Bundes-Immissionsschutzverordnung
BioAbfV	Bioabfallverordnung
B _R	Raumbelastung („space charge“) (kg/(m ³ ·d)) (d: Tag oder andere Zeiteinheit)
BSB ₅	biologischer Sauerstoffbedarf in fünf Tagen (mg/l)
C	Kohlenstoff
Ca	Calcium
°C	Gradeinheit auf der Celsiusskala
CaCO ₃	Calciumcarbonat (Kalk)
Ca(HCO ₃) ₂	Calciumhydrogencarbonat
C ₂ H ₅ -COOH	Propionsäure
C ₆ H ₁₂ O ₆	Glucose
C ₇₀ H ₁₁₀ O ₂₀ N ₂₀ S	Modellprotein
CH ₃ -COOH	Essigsäure
CH ₃ -OH	Methanol
CH ₄	Methan
C/N	Kohlenstoff/Stickstoff
CO ₂	Kohlendioxid
CO ₃ ²⁻	Carbonat
cp _D	spezifische Wärmekapazität Wasserdampf (kJ/(kg·K))
cp _L	spezifische Wärmekapazität der trockenen Luft (kJ/(kg·K))
cp _M	spezifische Wärmekapazität trockenes Material (kJ/(kg·K))
cp _W	spezifische Wärmekapazität Wasser (kJ/(kg·K))
cs	Substratkonzentration (Masse/Volumen) (Substrat: mikrobiologisch abbaubare Substanz)
CSB	chemischer Sauerstoffbedarf (mg/l)
d	day bzw. Tag (Zeiteinheit)
d _r	Rohrdurchmesser (m)
DepV	Deponieverordnung
d _h	hydraulischer Durchmesser (m)
Δ	Änderung, Differenz
DM	dry mass, dry solid matter
EEG	Erneuerbare Energien Gesetz
et al.	et alii (und andere)

fas	freies Porenvolumen („free air space“) (Vol.-% TS)
$f_{d(it)}$	Faktor Dichteanstieg
$f_{d(it-1)}$	Faktor Dichteanstieg ($f_{d(0)} = 1$)
fk	Faktor Wasserhaltekapazität (%)
FS	feuchtes Material (Wasser und Trockensubstanz) (kg)
$f_{s(it)}$	Faktor aus Porenvolumen und Setzung
$f_{s(it-1)}$	Faktor aus Porenvolumen und Setzung ($f_{s(0)} = fas$ (Vol.-% TS))
g	Gramm
g_F	Fallbeschleunigung (m/s^2)
GB ₂₁	Gasbildungsrate über einen Zeitraum von 21 Tagen im Gärtest (l/kg TS)
Gew.-%	Gewichtsprozent
GP ₂₁	Gasbildungsrate über einen Zeitraum von 21 Tagen im Gärtest (l/kg TS)
Gr	Grashof-Zahl (Das Produkt Gr-Pr wird auch als Rayleigh-Zahl Ra bezeichnet.)
GWP	Global Warming Potential
h_0	Höhe zum Zeitpunkt 0
H ₂	Wasserstoff (Wasserstoffmolekül)
H ₂ CO ₃	Kohlensäure
H ₂ O	Wasser
H ₂ S	Schwefelwasserstoff
HCO ₃ ⁻	Hydrogencarbonat
h_{it}	Höhe zum Zeitpunkt it (entspricht h_r)
h_r	Anströmlänge (m) (sinkende Materialhöhe oder Mieten-/Reaktorhöhe)
HRT	Hydraulische Verweilzeit („Hydraulic Retention Time“) (d) (d: Tag oder andere Zeiteinheit)
h_S	Schmelzenthalpie Wasser (333,1 kJ/kg)
ΔH_{Abb}	Änderung durch mikrobiell erzeugte Energie (molare Enthalpieänderungen Tab. 6-2)
$\Delta \dot{H}_{Abl}$	Änderung durch Enthalpieänderung der trockenen Zuluft/Abluft
$\Delta \dot{H}_{Abl}$	Enthalpieänderung der trockenen Zuluft/Abluft p. Z. (kJ/d) (d: Tag)
$\Delta \dot{H}_{WL}$	Änderung durch Enthalpieänderung des Wassers der Zuluft/Abluft
$\Delta \dot{H}_{WL}$	Enthalpieänderung des Wassers der Zuluft/Abluft p. Z. (kJ/d) (d: Tag)
i. N.	im Normzustand bei 0 °C bzw. 273,15 K und 1013,25 mbar (DIN 1343)
it	Zeitschritt
l	Liter
K	Gradeinheit auf der Kelvinskala und Kalium
k	Steigung der Kurve beeinflussende Konstante (Abbau und Verzögerungen)
kf	Wasserdurchlässigkeit (berechneter Durchlässigkeitskoeffizient) (m/d) (d: Tag)
kf ₀	Durchlässigkeitsbeiwert (10^{-4} m/s)
kg	Kilogramm
K. (allg.)	allgemeine unspezifische Kohlenhydrate
K _S	Substratkonzentration, bei der die Wachstumsgeschwindigkeit ihren halben maximalen Wert erreicht
K _L	Löslichkeitsprodukt
KrWG	Kreislaufwirtschaftsgesetz
LP	Verzögerungsfaktor pro Zeitschritt
M	Molmasse (kg/kmol)
m	Masse allgemein und auch Meter
m ²	Quadratmeter

m^3	Kubikmeter
\dot{m}_{trL}	Massenfluss trockene Zuluft (kg/d)
\dot{m}_{Abl}	Massenfluss trockene Abluft (Summe der Gase) (kg/d)
\dot{m}_{Di}	Massenfluss Wasserdampfzufuhr (kg/d)
\dot{m}_{Do}	Massenfluss Wasserdampfabfuhr (kg/d)
m_{Abl}	Masse trockene Abluft (Summe der Gase) (kg)
Massen-%	Massenprozent
max.	maximal
m_{Di}	Masse Wasserdampfzufuhr (kg)
m_{Do}	Masse Wasserdampfabfuhr (kg)
m_{esW}	einsickerndes Wasser in das Material p. Z. (kg/d) (d: Tag)
m_{Ev}	Wasserverlust durch Evaporation (kg)
m_{fM}	Gesamtmasse des feuchten Materials (kg)
Mg	Megagramm, Tonne
m_G	Gesamtmasse Feststoff bzw. Flüssigkeit (kg)
m_{Gx}	Gasmasse (kg)
M_{Gx}	Gasmolmasse (kg/kmol)
m_{Ko}	Masse Kondensat aus der Luft (kg)
m_M	Masse Material trocken (kg)
$m_{oTS/TS}$	Masse der organischen bzw. der gesamten Trockensubstanz (kg) (m_{oTS} : $m_{TSa} + m_{TSn} + m_{TSstr}$ bzw. m_{TS} : $m_{TSa} + m_{TSn} + m_{TSstr} + m_{TSu}$)
m_R	Masse Niederschlag (z. B. Regenwasser) (kg)
m_{stW}	Masse stehendes Wasser bzw. „run off“ (kg)
m_{Sw}	Masse Sickerwasser (kg)
m_{trL}	Masse trockene Zuluft (kg)
m_{TSa}	Masse abbaubare Trockensubstanz (kg)
m_{TSn}	Masse nicht abbaubare organische Trockensubstanz (Anteil im Material) (kg)
m_{TSstr}	Masse nicht abbaubare organische Trockensubstanz (Strukturmaterial) (kg)
m_{TSu}	Masse anorganische Trockensubstanz (z. B. Sand) (kg)
m_{TSun}	Masse nicht abbaubare Trockensubstanz (inkl. anorganische Trockensubstanz) (kg)
m_W	Masse Wasser im Material (kg)
$m_{W(it)}$	Masse Wasser im Material p. Z. (kg)
$m_{W(it-1)}$	Masse Wasser im Material vor Änderung (kg)
m_{WaA}	Masse Wasser im Material am Anfang (kg)
m_{WAb}	Masse Wasserentstehung durch Abbau (kg)
m_{WZu}	Masse Wasserzugabe (kg)
m_x	Masse Einzelkomponente (kg)
M^σ	spezifische Ausstrahlung (W/m^2)
N	Stickstoff
NMVOG	non methane volatile organic compounds
N_2	Distickstoff (Stickstoffmolekül)
N_2O	Distickstoffoxid (Lachgas)
n_{Gx}	Gasstoffmenge (kmol)
NH_3	Ammoniak
NH_4^+	Ammonium
NO_2^-	Nitrit
NO_3^-	Nitrat
Nu	Nußelt-Zahl

Nu_{Platten}	Nußelt-Zahl für senkrechte Platten bei freier Konvektion
Nu_{Rohre}	Nußelt-Zahl für Rohre bei erzwungener Konvektion
O	Sauerstoff
O_2	Sauerstoffmolekül
org.	organisch
o_{TS}	organische Trockensubstanz (kg) ($m_{\text{TSa}} + m_{\text{TSn}} + m_{\text{TSstr}}$)
p	Druck allgemein
P	Phosphor
p	Gesamtdruck (1,013 bar)
p_{at}	Atmosphärendruck (bar)
p_{D}	Wasserdampfdruck (bar)
p_{DS}	Wasserdampfsättigungsdruck (bar)
p_{DSi}	Wasserdampfsättigungsdruck bei Belüftungstemperatur (t_{Be}) (bar)
p_{DSo}	Wasserdampfsättigungsdruck Gasaustritt (bar)
p_{DSu}	Wasserdampfsättigungsdruck Umgebung (bar)
pH	Protonenaktivitätsexponent (Bezeichnung für den negativen dekadischen Logarithmus der Protonenaktivität)
ppm	parts per million (10^{-6})
Pr	Prandtl-Zahl
p. Z.	pro Zeitschritt
$\Delta U_{\text{fM(it)}}$	Änderung der inneren Energie des feuchten Materials p. Z.
$U_{\text{fM(it-1)}}$	Innere Energie des feuchten Materials vor Änderung
$U_{\text{fM(it)}}$	Innere Energie des feuchten Materials (kJ)
U_{fMaA}	innere Energie des feuchten Materials am Anfang (kJ)
$\Delta \dot{Q}_{\text{Kv}}$	Änderung durch Konvektion (Kontakt Umwelt und Belüftung)
$\Delta \dot{Q}_{\text{L}}$	Änderung durch Wärmeleitung über die Oberfläche (Umgebung, Wassermantel und stehendes Wasser)
ΔQ_{SE}	Änderung durch Schmelz- bzw. Erstarrungsenergiezu- bzw. abfuhr bei Über- bzw. Unterschreitung von 0 °C
$\Delta \dot{Q}_{\text{Str}}$	Änderung durch Wärmestrahlung
\dot{Q}_{Kv}	Wärmestrom durch Konvektion (W)
\dot{Q}_{L}	Wärmestrom durch Wärmeleitung (W)
\dot{Q}_{LstW}	Wärmestrom durch Wärmeleitung des stehenden Wassers (W)
\dot{Q}_{LWm}	Wärmestrom durch Wärmeleitung des Wassermantels (W)
\dot{Q}_{LWmU}	Wärmestrom durch Wärmeleitung des Wassermantels bzw. der Umgebung (W)
\dot{Q}_{Str}	Wärmestrahlung (W)
R	universelle Gaskonstante (8314,3 J/(kmol·K))
RA_4	Sauerstoff-Respiration über einen Zeitraum von 4 Tagen (mg O_2 /g TS)
R_{D}	Gaskonstante von Wasserdampf (461 J/(kg·K))
Re	Reynold-Zahl
RH	relative Feuchte (%)
R_{L}	Gaskonstante von Luft (287 J/(kg·K))
S	Schwefel
s	maximale wirksame Schichtdicke (m)
S^{2-}	Sulfid
SO_4^{2-}	Sulfat
t	Temperatur (°C)
T	Temperatur (K bzw. (273,15 °C + t (°C)))

$t_{1,2}$	Temperaturdifferenz (°C)
t_{Be}	Temperatur der Belüftungsluft (°C)
$t_{(Bt)}$	Bezugstemperatur bei Mischung Material und Wasser (°C)
t_g	Trockensubstanzgehalt (Gew.-%)
t_M	Temperatur des trockenen Materials (°C)
t_{Mi}	Temperatur Mischung Material und Wasser (°C)
t_{MiaA}	Temperatur Mischung Material und Wasser am Anfang (°C)
t_{MiZu}	Temperatur Mischung Material, Wasser und Wasserzugabe (°C)
TOC	Total Organic Carbon: gesamter organisch gebundener Kohlenstoff (kg oTS oder TS)
TrinkwV	Trinkwasserverordnung
TS	Trockensubstanz (kg) ($m_{TSa} + m_{TSn} + m_{TSstr} + m_{TSu}$)
TSa	Trockensubstanz des abbaubaren Substrats (wird durch Abbau über die Zeit verringert)
TSn	nicht abbaubarer organischer Anteil
TSstr	wahlweise zugegebenes nicht abbaubares organisches Material (Strukturmaterial)
TSu	anorganische Fraktion (z. B. Sand)
TSun	Summe nicht abbaubarer organischer Anteil (TSn), wahlweise zugegebenes nicht abbaubares organisches Material (TSstr) (Strukturmaterial) und anorganische Fraktion (TSu) (z. B. Sand)
t_U	Temperatur der Umgebung (vorgegeben) (°C)
T_U	Temperatur der Umgebung (vorgegeben) ($273,15 \text{ °C} + t_U \text{ °C}$) (K)
t_w	Temperatur des Wassers im Material (°C)
t_{wZu}	Temperatur des zugeführten Wassers (vorgegeben) (°C)
V	Volumen allgemein und auch Volt
V_{Abl}	Gasvolumen insgesamt (Abluft) (m^3)
V_{Be}	Belüftungsluftmenge (m^3/d) (d: Tag oder andere Zeiteinheit)
V_{Be}	Luftvolumen Belüftung (m^3)
VFA	volatile fatty acids
VOC	volatile organic compounds
Vol.-%	Volumenprozent
V_{FS}	Durchgangsgeschwindigkeit des feuchten Materials insgesamt (Wasser und Trockensubstanz) (m^3/d)
V_{FS}	Volumen feuchtes Material insgesamt (Wasser und Trockensubstanz) (m^3)
V_G	Gasgeschwindigkeit (m/s)
V_G	Gesamtvolumen einer Feststoff- bzw. Flüssigmasse (m^3)
V_{Gx}	Gasvolumen (m^3)
V_R	Volumen des Reaktors (m^3)
V_r	Volumenreduktion der gesamten Trockensubstanz über die Zeit (m^3)
V_{TS}	Volumen der gesamten Trockensubstanz (m^3)
V_{TSa}	Volumen abbaubare Trockensubstanz (m^3)
V_{TSn}	Volumen nicht abbaubare organische Trockensubstanz (Anteil im Material) (m^3)
V_{TSstr}	Volumen nicht abbaubare organische Trockensubstanz (Strukturmaterial) (m^3)
V_{TSu}	Volumen anorganische Trockensubstanz (z. B. Sand) (m^3)
V_W	Volumen Wasser im Material (m^3)
W	Wassermasse (kg)
weight-%	Gewichtsprozent
wg	Wassergehalt (Gew.-%)
Y	Feuchtebeladung der Luft (kg/kg)
Y_{Abl}	Feuchtebeladung der Abluft (kg/kg)

Y_{trL}	Feuchtebelastung der Zuluft (kg/kg)
z	Abbauzeit (entspricht der Verweilzeit) (d) (d: Tag oder andere Zeiteinheit) bzw. Gesamtzeit
z_{sw}	Beginn des Sickerwasseraustritts (d) (d: Tag)
α	Wärmeübergangskoeffizient ($W/(m^2 \cdot K)$)
γ	räumlicher Ausdehnungskoeffizient des Fluids (feuchte Luft) (bei Gasen: $1/T_U$) ($1/K$)
Δt	Temperaturdifferenz zwischen Oberfläche und Fluid ($^{\circ}C$)
η	dynamische Viskosität Fluid (Pa·s)
$\lambda_{\mu m}$	Wellenlänge (μm)
λ	spezifische Wärmeleitfähigkeit ($W/(m \cdot K)$)
λ_{fL}	spezifische Wärmeleitfähigkeit feuchte Luft ($W/(m \cdot K)$)
λ_{fM}	spezifische Wärmeleitfähigkeit feuchtes Material ($W/(m \cdot K)$)
μ	Wachstumsrate (1/Zeit)
μ_{max}	maximale Wachstumsrate (1/Zeit)
ξ_x	Massenanteil Einzelkomponente
π	Verhältnis von Kreisumfang zu Kreisdurchmesser (3,14159)
ρ_{fL}	Dichte feuchte Luft (kg/m^3)
ρ_G	Gesamtdichte Feststoff bzw. Flüssigkeit (kg/m^3)
ρ_{TSa}	Dichte abbaubare Trockensubstanz (kg/m^3)
ρ_{TSn}	Dichte nicht abbaubare organische Trockensubstanz (Anteil im Material) (kg/m^3)
ρ_{TSstr}	Dichte nicht abbaubare organische Trockensubstanz (Strukturmaterial) (kg/m^3)
ρ_{TSu}	Dichte anorganische Trockensubstanz (z. B. Sand) (kg/m^3)
ρ_{TSun}	Dichte nicht abbaubare Trockensubstanz (inkl. anorganische Trockensubstanz) (kg/m^3)
ρ_W	Dichte Wasser (kg/m^3)
ρ_x	Dichte Einzelkomponente (kg/m^3)
σ	Stefan-Boltzmann-Konstante ($5,6704 \cdot 10^{-8} W/(m^2 \cdot K^4)$)
Σ	Summe
φ	relative Feuchte der Luft
φ_i	relative Feuchte der Belüftungsluft ($0 \leq \varphi_i \leq 1$)
φ_o	relative Feuchte der austretenden Abluft ($0 \leq \varphi_o \leq 1$)
ψ_{trL}	Druckanteil trockene Luft

TABELLENVERZEICHNIS

Tab. 4-1:	Baumusterkategorien nach dem Hygiene-Baumusterprüfsystem	23
Tab. 5-1:	Temperaturlinien verschiedener Mikroorganismenarten	38
Tab. 5-2:	Hemmende bis toxische Konzentrationen verschiedener Stoffe in der flüssigen Phase bei der Vergärung	55
Tab. 6-1:	Freie Standard Bildungsenthalpieänderungen für biochemische Reaktionen nach Gibbs ohne Ionisierung	73
Tab. 6-2:	Simulationsmodell-Reaktionen für die molare Enthalpieänderung	74
Tab. 6-3:	Eingabeparameter für die Datenbankvorlage des Simulationsprogramms	135
Tab. 6-4:	Substrate und deren Hauptbestandteile	136
Tab. 6-5:	Abfälle und deren Hauptbestandteile	136
Tab. 6-6:	Materialeigenschaften und Inhaltsstoffe der im Simulationsmodell verwendeten Substrate	137
Tab. 6-7:	Materialeigenschaften und Inhaltsstoffe der im Simulationsmodell dargestellten Laborversuche E1, E2, E3, E4, E5 und E6	138
Tab. 6-8:	Belüftungsraten der im Simulationsmodell dargestellten Laborversuche E1, E2, E3, E4, E5 und E6	139
Tab. 6-9:	Umrechnungstabelle für geschätzte Substratmengen und Abbauezeiten	141
Tab. 7-1:	Simulationsergebnis: Fünf Abfallarten (100 kg FS) und deren Organikgehalt, TOC, C/N-Verhältnis und pH-Wert vor Abbaubeginn	172
Tab. 7-2:	Simulationsergebnis: Sauerstoffverbrauch und Gasbildung von fünf Abfallarten in 100 kg FS am Anfang, nach 90 Tagen und nach 180 Tagen mit den pH-Werten und den zugehörigen maximierten Abbauraten	174
Tab. 7-3:	Simulationsergebnis: Methanbildung nach Hartmann (1983) und höchste Methanbildung von fünf Abfallarten aus 100 kg FS bei maximierter Abbaurate	176
Tab. 9-1:	Simulationsergebnis: Methanbildung nach Hartmann (1983) und erzielte Methanbildung und Biogasproduktion von fünf Abfallarten aus 100 kg FS im Batchbetrieb mit den zugehörigen Abbauraten	216
Tab. 9-2:	Simulationsergebnis: Methanbildung nach Hartmann (1983) und erzielte Methanbildung und Biogasproduktion von fünf Abfallarten aus 100 kg FS im quasi-kontinuierlichen Betrieb mit den zugehörigen Abbauraten	217
Tab. 14-1:	Laborversuchsergebnisse von Kohlendioxid- und Sauerstoffanteil, pH-Wert, Temperatur und Wassergehalt des im Simulationsmodell dargestellten Laborversuchs E1	283
Tab. 14-2:	Laborversuchsergebnisse von Kohlendioxid- und Sauerstoffanteil, pH-Wert, Temperatur und Wassergehalt des im Simulationsmodell dargestellten Laborversuchs E2	284

Tab. 14-3:	Laborversuchsergebnisse von Kohlendioxid- und Sauerstoffanteil, pH-Wert, Temperatur und Wassergehalt des im Simulationsmodell dargestellten Laborversuchs E3	285
Tab. 14-4:	Laborversuchsergebnisse von Kohlendioxid- und Sauerstoffanteil, pH-Wert, Temperatur und Wassergehalt des im Simulationsmodell dargestellten Laborversuchs E4	286
Tab. 14-5:	Laborversuchsergebnisse von Kohlendioxid- und Sauerstoffanteil, pH-Wert, Temperatur und Wassergehalt des im Simulationsmodell dargestellten Laborversuchs E5	287
Tab. 14-6:	Laborversuchsergebnisse von Kohlendioxid- und Sauerstoffanteil, pH-Wert, Temperatur und Wassergehalt des im Simulationsmodell dargestellten Laborversuchs E6	288

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

Abb. 3-1:	Übersichtsdarstellung der Eingabewerte (Input) des Simulationsmodells aerober und anaerober Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft	17
Abb. 3-2:	Übersichtsdarstellung des Simulationsmodells (Datenverarbeitung) zur Entwicklung einer Software für die Prozesssimulation aerober und anaerober Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft	18
Abb. 3-3:	Übersichtsdarstellung der Ausgabewerte (Output) des Simulationsmodells aerober und anaerober Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft	19
Abb. 5-1:	Anaerober Abbau von organischem Material durch verschiedene Mikroorganismengruppen (1) Primärfermentierer, (2) Sekundärfermentierer, (3) hydrogenotrophe, (4) acetoklastische und (5) methylotherme methanogene Archaeen, (6) homoacetogene Bakterien, (7) syntroph acetatoxidierende Bakterien	31
Abb. 5-2:	Wachstumskurve einer statischen Bakterienkultur	35
Abb. 6-1:	Schematische Darstellung des Blockdiagrammaufbaus des Simulationsprogramms zur Prozesssimulation aerober und anaerober Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft.....	57
Abb. 6-2:	Beispielhafte Darstellung der im Simulationsmodell verwendeten Abbaufunktionen: Abbaufunktionen der Kohlenhydrate, Proteine und Fette bei einer Materialmenge von 70 kg, also geringer Materialmengenverzögerung, (oben) und dazugehörige resultierende Abbauraten mit und ohne Verzögerungsphase (unten)	63
Abb. 6-3:	Im Simulationsmodell eingesetzter Faktor zur Berücksichtigung des Temperatureinflusses auf den mikrobiologischen Abbau unter anaeroben Milieubedingungen	71
Abb. 6-4:	Verwendeter Wasserdampfdrucksättigungsdruck im Simulationsprogramm in Abhängigkeit von der Temperatur	92
Abb. 6-5:	Wassersituation im betrachteten System des Simulationsmodells	95
Abb. 6-6:	Im Simulationsmodell angenommene Wasserhaltekapazität als prozentualer Faktor in Abhängigkeit vom Wassergehalt	98
Abb. 6-7:	Im Simulationsmodell eingesetzter Faktor für den mesophilen Temperaturbereich zur Berücksichtigung der temperaturabhängigen Nitrifikation und Denitrifikation	114
Abb. 6-8:	Henry Koeffizient für die Kohlendioxidlöslichkeit in Wasser im Simulationsmodell	121
Abb. 6-9:	Zuordnung der Abmaße der Reaktoren und der Mieten im Simulationsprogramm.....	132
Abb. 6-10:	Berechnungen der Größen der Reaktoren und Mieten im Simulationsmodell	133
Abb. 6-11:	Übersichtsdarstellung des Simulationsmodells zur „Prozesssimulation biologischer Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft“	152

Abb. 7-1:	Frontansicht des Programms zur „Prozesssimulation biologischer Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft“	154
Abb. 7-2:	Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung, Substrattemperatur und Abbaurate mit optimaler Belüftung (oben) und ohne Belüftung (unten)	156
Abb. 7-3:	Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung, Substrattemperatur und Abbaurate im quasi-kontinuierlichen Chargenbetrieb mit optimaler Belüftung (oben) und ohne Belüftung und Lufteintrag (unten) mit Kalkzugabe.....	158
Abb. 7-4:	Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung, Substrattemperatur und Abbaurate im zehntägigen Chargenbetrieb (Anlaufphase) mit optimaler Belüftung (oben) und ohne Belüftung ohne Lufteintrag durch das Material (Mitte) und ohne Belüftung mit Lufteintrag durch das Material (unten).....	160
Abb. 7-5:	Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung und Abbaurate bei anaerober Betriebsweise über 180 Tage in der Anfangsphase bis zum 20. Tag, nicht verzögert	162
Abb. 7-6:	Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung und Abbaurate bei anaerober Betriebsweise über 180 Tage in der Anfangsphase bis zum 20. Tag, stark verzögert.....	163
Abb. 7-7:	Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung und Abbaurate bei anaerober Betriebsweise über 180 Tage in der Anfangsphase bis zum 20. Tag mit geringem Lufteintrag (konstant 0,5 l/h), stark verzögert.....	164
Abb. 7-8:	Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung, Substrattemperatur und Abbaurate bei anaerober Betriebsweise mit optimaler Zwischenbelüftung zwischen dem 20. und 80. Tag.....	165
Abb. 7-9:	Entwicklung der Gaszusammensetzung bis zur Absterbephase in einer Mülldeponie nach Farquhar und Rovers (1973) als Beispiel für den Vergärungsverlauf	168
Abb. 7-10:	Simulationsergebnis: Vergleich der Kohlendioxidproduktion bei aerober Betriebsweise mit optimaler Belüftung und anaerober Betriebsweise und der Methanproduktion bei anaerober Betriebsweise und mit optimaler Zwischenbelüftung	169
Abb. 7-11:	Simulationsergebnis: Vergleich der molekularen Wasserstoffproduktion bei aerober Betriebsweise mit konstanter Belüftung von 0,005 m ³ /h und anaerober Betriebsweise mit konstanter Zwischenbelüftung von 0,05 m ³ /h	171
Abb. 7-12:	Simulationsergebnis: Vergleich der Wassergehaltsänderungen bei 100 l Zugabe am Anfang und 1 l täglich bei aerober Betriebsweise, 100 l täglich bei anaerober Betriebsweise und mit programmierter automatischer Wassergehaltseinstellung auf 50 Gew.-% bei aerober Betriebsweise	178
Abb. 7-13:	Simulationsergebnis: Vergleich der Temperaturverläufe bei aerober und anaerober Betriebsweise Kompostierung und Vergärung	179
Abb. 7-14:	Prinzipieller Verlauf des Kompostierungsprozesses.....	180

Abb. 7-15:	Simulationsergebnis: Vergleich der Temperaturverläufe bei 100 kg und 1000 kg Material ohne Belüftung und ohne mikrobiologische Abbauprozesse bei -40 °C und 40 °C Außentemperatur ohne Isolierung in 30 Tagen	182
Abb. 7-16:	Simulationsergebnis: Vergleich der Temperaturverläufe bei 100 kg Material ohne Belüftung und bei unterschiedlicher Belüftung mit 20 °C Belüftungstemperatur und ohne mikrobiologische Abbauprozesse bei -40 °C und 40 °C Außentemperatur ohne Isolierung in 180 Tagen	183
Abb. 7-17:	Simulationsergebnis: Vergleich der pH-Wert-Verläufe bei aerober und anaerober Betriebsweise Kompostierung und Vergärung mit und ohne Kalk und anaerob mit optimaler Zwischenbelüftung und mit Lufteintrag durch Wenden	184
Abb. 7-18:	Simulationsergebnis: Gesamt-Stickstoff (N)-, Schwefel (S)- und Kohlenstoff (C)-Bilanz des abbaubaren Substrats mit optimaler Belüftung (oben) und ohne Belüftung (unten)	186
Abb. 7-19:	Simulationsergebnis: Schwermetallauswaschung in drei Tagen unter anaeroben Bedingungen mit optimaler Zwischenbelüftung zwischen dem 20. und 80. Tag, dargestellt durch den Wassergehalt, Kohlendioxidanteil, Sickerwassermenge, pH-Wert, Substrattemperatur und Abbauraten	192
Abb. 8-1:	Simulationsergebnis: Im Laborversuch E6 analysierte Werte des Wassergehalts, des Kohlendioxid- und Sauerstoffanteils mit pH-Wert und Substrattemperatur (oben) im Vergleich zu Werten der Simulation des Laborversuchs (unten).....	200
Abb. 8-2:	Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (f _{as}), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbauraten in der Simulation des Laborversuchs E6.....	202
Abb. 9-1:	Simulationsergebnis: Ammonium-N, Nitrat-N, produzierter Distickstoff-N und Ammoniak-N mit Substrattemperatur und pH-Wert in der Simulation des Laborversuchs E6.....	205
Abb. 9-2:	Simulationsergebnis: Gesamt-Stickstoff (N)-Bilanz des abbaubaren Substrats im simulierten Laborversuch E6.....	207
Abb. 9-3:	Biogaskennzahlen der Bioabfallvergärungsanlagen Nottensdorf, Kehlheim und Karlsruhe im Vergleich	209
Abb. 9-4:	Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung des produzierten Biogases und Abbauraten von Bioabfall in der Simulation einer Biogasanlage im Batchbetrieb.....	211
Abb. 9-5:	Simulationsergebnis: Methan-, Kohlendioxid-, Schwefelwasserstoffemissionen und pH-Wert im quasi-kontinuierlichen Chargenbetrieb einer simulierten Biogasanlage nach der Anlaufphase.....	212
Abb. 9-6:	Biogasbildungspotential der Substrate Bioabfall, Fett und Leimwasser bezogen auf die organische Trockensubstanz in Abhängigkeit von der Versuchszeit	219
Abb. 9-7:	Simulationsergebnis: Biogasbildungspotential der Substrate Bioabfall, Fette, Proteine und Kohlenhydrate bezogen auf die organische Trockensubstanz in Abhängigkeit von der Zeit	220

Abb. 9-8:	Simulationsergebnis: Methanbildungspotential der Substrate Bioabfall, Fette, Proteine und Kohlenhydrate bezogen auf die organische Trockensubstanz in Abhängigkeit von der Zeit	221
Abb. 9-9:	Simulationsergebnis: Biogasbildungspotential der Substrate Bioabfall, Fette, Proteine und Kohlenhydrate bei 100 %iger Abbaubarkeit bezogen auf die organische Trockensubstanz in Abhängigkeit von der Zeit	222
Abb. 9-10:	Simulationsergebnis: Methanbildungspotential der Substrate Bioabfall, Fette, Proteine und Kohlenhydrate bei 100 %iger Abbaubarkeit bezogen auf die organische Trockensubstanz in Abhängigkeit von der Zeit	223
Abb. 9-11:	Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung und Abbaurate einer mit dem Simulationsprogramm simulierten belüfteten Deponie	228
Abb. 9-12:	Gaszusammensetzung in einem Deponiesimulationsreaktor im Laborversuch zur Simulation einer belüfteten Altdeponie	229
Abb. 9-13:	Simulationsergebnis: Sulfatkonzentrationen, Schwefelwasserstoffemissionen und pH-Werte einer mit dem Simulationsprogramm simulierten belüfteten Deponie	232
Abb. 9-14:	Simulationsergebnis: Ammonium-N-, Nitrat-N- und Nitrit-N-Konzentrationen einer mit dem Simulationsprogramm simulierten belüfteten Deponie.....	233
Abb. 14-1:	Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurate bei optimaler Belüftung.....	277
Abb. 14-2:	Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurate unter anaeroben Bedingungen.....	277
Abb. 14-3:	Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurate bei einer geringen konstanten Belüftungsrate von 0,005 m ³ /h	278
Abb. 14-4:	Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurate bei einer hohen konstanten Belüftung von 0,5 m ³ /h	278
Abb. 14-5:	Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurate unter anaeroben Bedingungen mit konstanter Zwischenbelüftung von 0,05 m ³ /h zwischen dem 20. und 80. Tag	279
Abb. 14-6:	Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurate bei optimaler Belüftung und 20-tätigem Chargenbetrieb	279

Abb. 14-7:	Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurate unter aeroben Bedingungen mit einer Belüftungsrate von 0,07 m ³ /h und mit Wasserzugabe.....	280
Abb. 14-8:	Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurate unter anaeroben Bedingungen mit Wasserzugabe.....	280
Abb. 14-9:	Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurate bei optimaler Belüftung und hoher Setzung	281

FORMELVERZEICHNIS

Gl. 5-1:	Wachstumsgeschwindigkeit einer kontinuierlich betriebenen Bakterienkultur.....	37
Gl. 6-1:	Abbaukinetik als Funktion im Simulationsmodell.....	61
Gl. 6-2:	Änderungseinflüsse auf die innere Energie des Systems p. Z. im Simulationsmodell.....	77
Gl. 6-3:	Wärmestrom durch Wärmeleitung p. Z.....	78
Gl. 6-4:	Wärmestrom des Wassermantels bzw. der Umgebung p. Z. im Simulationsmodell.....	79
Gl. 6-5:	Wärmestrom des stehenden Wassers p. Z. im Simulationsmodell.....	80
Gl. 6-6:	Wärmestrom durch Konvektion p. Z. im Simulationsmodell.....	80
Gl. 6-7:	Wärmeübergangskoeffizient bei freier Konvektion p. Z. im Simulationsmodell.....	81
Gl. 6-8:	Wärmeübergangskoeffizient bei erzwungener Konvektion p. Z. im Simulationsmodell.....	83
Gl. 6-9:	Wärmestrahlung (spezifische Ausstrahlung).....	85
Gl. 6-10:	Enthalpieänderung der trockenen Abluft p. Z. im Simulationsmodell.....	87
Gl. 6-11:	Enthalpieänderung des Wassers der Abluft p. Z. im Simulationsmodell.....	87
Gl. 6-12:	Innere Energie des feuchten Materials am Anfang im Simulationsmodell.....	88
Gl. 6-13:	Temperatur des Materials p. Z. im Simulationsmodell.....	89
Gl. 6-14:	Temperatur des Materials nach Wasserzugabe im Simulationsmodell.....	90
Gl. 6-15:	Feuchtebeladung der Zuluft und Abluft als Massenverhältnis p. Z.....	90
Gl. 6-16:	Relative Feuchte der Luft allgemein.....	91
Gl. 6-17:	Wasserdampf-sättigungsdruck zwischen 5 °C und 95 °C als Funktion.....	91
Gl. 6-18:	Feuchtebeladung der Luft über Dampfdruck und relative Feuchte allgemein.....	92
Gl. 6-19:	Kondensatbildung p. Z.....	93
Gl. 6-20:	Schmelz- und Erstarrungsenergie p. Z. im Simulationsmodell.....	94
Gl. 6-21:	Wassermengenänderungen im Material p. Z. im Simulationsmodell.....	96
Gl. 6-22:	Berechnung Trockensubstanzgehalt am Anfang im Simulationsmodell.....	96
Gl. 6-23:	Wasserdampfzu- und abfuhr p. Z. im Simulationsmodell.....	97
Gl. 6-24:	Wasserdurchlässigkeit p. Z. im Simulationsmodell.....	99
Gl. 6-25:	Einsickerndes Wasser in das Material p. Z. im Simulationsmodell.....	100
Gl. 6-26:	Stehendes Wasser bzw. der Abfluss („run off“) p. Z. im Simulationsmodell.....	101
Gl. 6-27:	Sickerwasseraustritt im Simulationsmodell.....	101

Gl. 6-28:	Wassergehalt im Material p. Z. im Simulationsmodell.....	102
Gl. 6-29:	Thermische Zustandsgleichung für ideale Gase allgemein.....	104
Gl. 6-30:	Trockene Luftmasse der Belüftungsluft allgemein.....	104
Gl. 6-31:	Berechnung der Feststoff- bzw. Flüssigvolumina p. Z. im Simulationsmodell	106
Gl. 6-32:	Berechnung der Gesamtmaterialmasse p. Z. im Simulationsmodell.....	107
Gl. 6-33:	Berechnung der Gesamtmaterialdichte p. Z. im Simulationsmodell.....	107
Gl. 6-34:	Freies Porenvolumen und die Volumenreduktion p. Z. im Simulationsmodell	110
Gl. 6-35:	Gas/Wasser-Gleichgewichtszustände von Ammoniak/Ammonium p. Z.	118
Gl. 6-36:	Gas/Wasser-Gleichgewichtszustände von Schwefelwasserstoff/Sulfidionen p. Z.....	118
Gl. 6-37:	Bestimmung des pH-Wertes p. Z. im Simulationsmodell	120
Gl. 6-38:	Hydraulische Verweilzeit allgemein	123
Gl. 6-39:	Raumbelastung im Simulationsmodell	124
Gl. 6-40:	Abbaurrate in Gewichtsprozent im Simulationsmodell	146
Gl. 6-41:	Prozentual erreichte Methanbildung im Simulationsmodell.....	146

1 Einführung

In der Bundesrepublik Deutschland fielen im Jahr 2011 etwa 387 Mio. Mg Abfälle an. Davon waren etwa 50 Mio. Mg Siedlungsabfälle (Hausmüll, hausmüllähnliche Gewerbeabfälle, Sperrmüll, Kehricht) (Statistisches Bundesamt, 2011). Im Kreislaufwirtschaftsgesetz (KrWG, 2012) hat der Gesetzgeber die Förderung der Kreislaufwirtschaft zur „Schonung der natürlichen Ressourcen“ festgeschrieben und gleichzeitig den Grundsatz „Vermeidung vor Verwertung vor Beseitigung“ aufgestellt (KrWG, 2012). Nach der 5-Stufigen Hierarchie der europäischen Gesetzgebung (Richtlinie 2008/98/EG) gilt die Abfallvermeidung als die beste Lösung, gefolgt von der Vorbereitung zur Wiederverwendung, dem stofflichen Recycling und der sonstigen Verwertung wie die thermische Nutzung. Die Beseitigung der Abfälle wie die Deponierung, weltweit noch die häufigste Variante, ist in Europa als letzte Option vorgesehen und nur, wenn die anderen Wege nicht möglich sind (Richtlinie 2008/98/EG).

Die getrennte Einsammlung der organischen Abfälle bzw. Erfassung in Sortieranlagen zur Aufbereitung und effizienten stofflichen und energetischen Verwertung wird daher in Europa zunehmend angestrebt und z. B. durch das Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU) im Ressourceneffizienzprogramm und in der Europäischen Union (EU) mit der Leitinitiative „Ressourcenschonendes Europa“ unterstützt. In Deutschland waren im Jahr 2011 etwa 50 % der Haushalte an die Biotonne angeschlossen (BGK, 2012). Ab 1. Januar 2015 sollen Bioabfälle verpflichtend getrennt gesammelt werden (KrWG, 2012). Laut BMU betrug im Jahr 2008 die Verwertungsquote von getrennt eingesammelten Bioabfällen - also kompostierbare Abfälle aus der Biotonne sowie biologisch abbaubare Garten- und Parkabfälle - 99,5 %, das entspricht 8,2 Mio. Mg (Statistisches Bundesamt, 2011).

Die aerobe Behandlung biogener Abfälle erfolgt in Deutschland vornehmlich in Kompostierungsanlagen. Aber auch in Anlagen zur mechanisch-biologischen Abfallvorbehandlung (MBA) finden Behandlungen durch Belüftung, zum Teil mit anaeroben Vorbehandlungen, statt. Die anaerobe Verwertung durch Vergärung in Biogasanlagen gewinnt wegen der Energiegewinnung zunehmend an Bedeutung und wird maßgeblich durch das Erneuerbare Energien Gesetz (EEG, 2012) forciert. In Deutschland gab es 2012 laut Fachverband Biogas e. V. insgesamt 7.515 Biogasanlagen. Auch Verfahrenskombinationen finden immer häufiger Anwendung, da Vor- und Nachteile der Verfahren auf diese Art teilweise genutzt bzw. kompensiert werden können wie die energetische Nutzung des Biogases, die Einsparungen bei der aktiven Belüftung und die stoffliche Gewinnung von Kompost. Überwiegend anaerobe Abbauprozesse findet man auch in Deponien, in denen unabgebaute biogene Materialien abgelagert wurden. Bei Lufteintritt finden aber auch dort aerobe Abbauprozesse statt.

Die Umsetzungsprozesse werden in Kompostierungsverfahren, Biogasanlagen und Kombinationen von beidem beschleunigt. Bei der Deponierung biogener Abfälle erfolgen sie aufgrund der Emissionen häufig unerwünscht, weshalb die Ablagerung unvorbehandelter organischer Abfälle mit einem organischen Anteil von über 5 Gew.-% in Deutschland seit 2005 nicht mehr zugelassen ist (Abfallablagerungsverordnung (AbfAbIV, 2006), Deponieverordnung (DepV, 2012)).

Viele verfahrenstechnische Prozesse sind auch noch heute aufgrund ihrer Komplexität nicht vollständig wissenschaftlich verstanden und beschreibbar. Trotzdem sind in vielen technischen Bereichen, auch in der Abfallwirtschaft, komplexe Zusammenhänge in der Planung und im Betrieb von Anlagen und deren Optimierung zu berücksichtigen. Ein Hilfsmittel zur Bewältigung dieser Aufgaben ist die Anwendung von Simulationsprogrammen. Diese enthalten jedoch häufig komplexe mathematische Modelle oder empirisch gewonnene mathematische Funktionen bzw. Kombinationen von beidem und sind häufig nicht einfach in der Anwendung und Nutzung.

Grundsätzlich sollte es möglich sein, die mikrobiologischen und biochemischen Prozesse aerober und anaerober Abbauvorgänge am Computer soweit zu simulieren, dass Aussagen über Prozesse oder über Prozessverbesserungen bzw. -optimierungen mit geringem Aufwand getroffen werden können. Dazu gehört die Darstellung der qualitativen und quantitativen Emissionen während der unterschiedlichen Phasen des Abbaus, als auch die Berechnung gängiger Prozesswerte wie die Gasbildungsrate bzw. der Sauerstoffverbrauch über eine bestimmte Anzahl von Tagen, die Verweilzeit und die Raumbelastung, die einen Vergleich mit empirisch gewonnenen Werten ermöglichen.

Ein Simulationsprogramm, das die wesentlichen Stoff- und Energiebilanzen berücksichtigt und so aerobe, anaerobe und kombinierte Prozesse am Computer nachvollziehbar bzw. planbar macht, könnte nicht nur empirische Versuche und analytische Messungen stark reduzieren. Auch der Einsatz für Versuchsplanungen und Kostenabschätzungen, zum Beispiel für Forschungsprojekte, für Optimierungen, Fehler- und Sensitivitätsanalysen einzelner Parameter könnte arbeitserleichternd und damit Zeit und Kosten sparend sein. Mit einer graphischen Visualisierung der Ergebnisse wäre das Programm zudem auch für weitere Anwendungen wie die Ausbildung von Fachpersonal verwendbar.

Ziel dieser Arbeit war es daher, ein Simulationsprogramm zu erstellen, das die komplexen Zusammenhänge der wichtigsten biologischen Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft unter aeroben und anaeroben Milieubedingungen, also die Verrottung und Vergärung biogener Abfälle, und kombinierter Verwertungsverfahren simulieren kann. Das Programm sollte für einen möglichst umfangreichen Einsatz ausgelegt sein, um eine vielfältige Anwendung und Nutzung in der Praxis, Forschung und Ausbildung zu ermöglichen. Der anfängliche

Gesamtaufwand der Erstellung eines komplexen Simulationsmodells mit den enthaltenen Werteermittlungen, auch später in den Anwendungen für reale Anlagen, soll dann im Ergebnis Arbeits- und Planungszeiten und damit Kosten verringern.

Dieses berücksichtigend wurde ein bisher noch nicht verwirklichtes, umfangreiches und flexibles Simulationsprogramm erstellt, das die Prognose und Darstellung der komplexen mikrobiologischen Abbauprozesse mit den dazugehörigen physikalischen Zusammenhängen im Bereich der Abfallwirtschaft anhand eines Simulationsmodells beinhaltet, in dem überwiegend mathematische Grundgleichungen bzw. physikalische Gesetzmäßigkeiten und stöchiometrische Stoffberechnungen angewendet werden. Nach Vorgabe der Anfangsbedingungen durch den Anwender werden zeitdiskret iterativ Werte in ständiger Neuberechnung mit den vorgegebenen und während des Laufs änderbaren Parametern unter Berücksichtigung gegebener Abhängigkeiten erzeugt. Die so generierten Ergebnisse ermöglichen es, die komplexen Prozesse schneller und besser zu verstehen und die Ausgabe für die Praxis und für die Planung nutzbar zu machen.

2 Stand der Forschung

Es gibt zahlreiche Veröffentlichungen über Simulationen und Modellierungen biologischer Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft und Abwassertechnik. Hierzu gehören Gas-, Wasser- und andere Stofftransportvorgänge, die Milieubedingungen, zu denen auch die Wärmesituation und der Wasserhaushalt gehören, und Energiefragen. Zur Übersicht werden im Folgenden die Arbeiten aufgeführt, die entweder Zusammenfassungen über Veröffentlichungen zum Thema Simulationen und Modellierungen im Bereich der Abfallwirtschaft beinhalten oder sich mit Teilfragen des entwickelten und dargestellten Simulationsmodells beschäftigen.

2.1 Simulationsmodelle der aeroben biologischen Abfallbehandlung

Der Schwerpunkt vorhandener Veröffentlichungen zum Thema Simulationen und Modellierungen in der biologischen Abfallverwertung liegt bei der Kompostierung (z. B. Haug, 1980, Bach et al., 1987, Nakasaki et al., 1990, Kaiser und Soyez, 1990, Soyez et al., 1995, Hamelers, 2004, Lin, 2006, Woodford, 2009). Ausführliche Übersichten über Simulationen und Modellierungen aerober biologischer Abbauprozesse mit den dazu gehörenden physikalischen und chemischen Milieubedingungen und den Problemen und Einschränkungen sind in Fletcher et al. (2000), Scholwin (2005) und Mason (2006) zu finden. Einen Überblick über Prozessmodellierungen, die für den Gesamtprozess der Kompostierung bedeutsam sind, und Modelle und Modellausschnitte für die wesentlichen Teilprozesse des Kompostierungsprozesses werden in Scholwin (2005) ausführlich dargestellt und diskutiert. Scholwin (2005) stellt fest, dass für die aerobe biologische Abfallbehandlung viele deterministische Modelle existieren. Sie sind eine mehr oder weniger starke Vereinfachung der real ablaufenden Teilprozesse. Wesentliche physikalische Zusammenhänge wurden jedoch häufig vernachlässigt. Die biologischen Zusammenhänge sind hingegen oft auf einem sehr hohen theoretischen Niveau modelliert. So wurden beispielsweise Annahmen über Zellkonzentrationen oder Wachstumsraten getroffen, die messtechnisch nicht mit vertretbarem Aufwand erfasst werden können (Scholwin, 2005). Kaiser (1999) hat die Mikroorganismen in vier Gruppen eingeteilt und für jede Gruppe spezifische Konstanten ermittelt. Die Sterberate wurde von Stombough und Nokes (1996) durch einen zusätzlichen Term aus spezifischer Absterberate und Organismenkonzentration berücksichtigt. Einfachere Modelle vernachlässigen das Mikroorganismenwachstum und berechnen den biologischen Abbau auf der Basis empirischer Formeln, die aus Labor- oder Umweltdaten abgeleitet wurden. Beispiele für die Ermittlung der Reaktionskinetik des Sauerstoffverbrauchs (Kohlendioxidproduktion bzw. Kohlenstoffemissionen) bei der Kompostierung unter Laborbedingungen sind z. B. bei Stark (1995),

Krogmann (1994) und Nakasaki et al. (1987a) zu finden. Sehr stark vereinfachende Modelle sind von Das (1995), Di Chio et al. (1999), Beyer et al. (2001), Higgins und Walker (2001) und Keener et al. (2002) entwickelt worden.

Für den komplexen Kompostierungsprozess ist keine Arbeit bekannt, in der ein vollständiges deterministisches Modell entwickelt wurde. Aufgrund der Heterogenität der organischen Abfälle und der vielschichtigen physikalischen, biologischen und biochemischen Vorgänge ist ein derartiges Modell auch nicht realistisch, weshalb Vereinfachungen in unterschiedlichem Umfang vorgenommen werden müssen. Die Komplexität der Modelle kann dabei aber sehr unterschiedlich sein. Die komplexesten deterministischen Modellierungen für den biologischen Abbauprozess umfassen den Gesamtprozess vom Zellwachstum bis zum Zellsterben (z. B. die Modelle von Haug (1993) und Kaiser (1999)).

Strömungssimulationsmodelle der Belüftung

Aufgrund der heterogenen porösen Lagerungsstruktur organischer Abfälle bei der aeroben biologischen Behandlung ist die Darstellung und mathematische Beschreibung der Luftströmung durch die Abfallmatrix kaum möglich. Im Bereich der biologischen Abfallbehandlung finden für die Luftströmung bei zwangsbelüfteten Systemen ausschließlich sehr stark vereinfachende Modelle Anwendung (Scholwin, 2005). Von vielen Autoren wird die Luftströmung nur indirekt, und zwar in der Massenbilanzierung des Gasstromes erfasst (Haug, 1993, Kaiser, 1999, Mohee et al., 1998). Auf diese Weise ergibt sich der feuchte Massenstrom des Abgases aus dem feuchten Massenstrom der Zuluft, vermindert um die Sauerstoffzehrungsrate und zuzüglich der Kohlendioxidfreisetzung und Wasserdampfaufnahme. Diese Bilanzgleichung findet auf den gesamten Abfallkörper oder auf einzelne Schichten Anwendung.

Simulationsmodelle der Thermodynamik

Nicht spezifisch für die Abfallbehandlung, aber zu berücksichtigen, sind der Wärmeübergang und Trocknungsvorgänge. Da die Temperatur einen entscheidenden Einfluss auf die Abbautätigkeit der Mikroorganismen hat, ist die Berechnung der Thermodynamik in vielen Modellen Hauptbestandteil (z. B. Keener et al., 2002, Lomax et al., 1984, Hsieh et al., 1997). Zur Berechnung wird die dem System mit der Zuluft zugeführte Wärmemenge, die mit der Abluft abgeführte Wärmemenge, die aus dem biologischen Abbau freigesetzte Wärmemenge und die Wärmemenge, die dem System durch Wärmeleitung verloren geht, berücksichtigt (Mohee et al., 1998, Kaiser, 1999). Der Detaillierungsgrad reicht bis in den Bereich der Einzelpore und des Einzelpartikels (Hamelers, 1993). Zur Erfassung des Gesamtgeschehens wird z. T. auch hier der Abfall insgesamt in kleinere Einheiten unterteilt und diese getrennt

aber auf gleiche Weise berechnet (z. B. Finger et al., 1976, Seki und Komori, 1987, Stark et al., 1992, VanderGheynst et al., 1997). Die für die Thermodynamik zu berücksichtigende Wärmefreisetzung kann aus der stöchiometrischen Berechnung des Abbauprozesses erfolgen oder sie kann empirisch aus Messungen abgeleitet werden (Scholwin, 2005).

Die wesentlichen thermodynamischen Einflüsse bestehen in der biologischen Abfallbehandlung aus Wärmeleitung, Wärmestrahlung und Konvektion:

- Die Wärmeleitung findet in einer Abfallschüttung innerhalb des Materials und zur Wand des Kompostierungsbehälters bzw. zur Umgebung statt. Ein Modell für die Wärmeleitung durch poröse Schüttungen wurde von Krischer und Kast (1992) entwickelt und von Dach (1998) auf Abfälle angewendet.
- Wärmestrahlung ist nur in Bereichen mit Kontakt zur Gasphase und Luft möglich (Krischer und Kast, 1992 bzw. auch VDI-Wärmeatlas, 2006). Für den biologischen Abfallbehandlungsprozess bedeutet das, dass Wärmestrahlung über die Oberfläche zur Umwelt und innerhalb der gasgefüllten Poren möglich ist. Die Wärmestrahlung wird als unbedeutend im Vergleich zu Wärmeleitung und Konvektion angesehen (Das, 1995, Haug, 1993, Kaiser, 1999, Young, 1990). Von Dach (1998) wird die Wärmestrahlung in den Poren in dem von Krischer und Kast (1992) übernommenen Modell für die Wärmeleitung berücksichtigt.
- Die Konvektion ist der Wärmetransport, der mit dem Stofftransport im strömenden Gas verbunden ist. Nach Auffassung der meisten Autoren (z. B. Das, 1995, Haug, 1993, Stark et al., 1992) ist die Konvektion der Hauptaustragsweg von Wärme bei der biologischen Abfallbehandlung.

Simulationsmodelle des Wasserhaushalts

Der Wasserhaushalt der biologischen Abfallbehandlung wird neben vorhandenem und zugeführtem Wasser (Materialwassergehalt, Bewässerung, Niederschlag, Wassergehalt der Zu- und Abluft) und abgeführtem Wasser (Sickerwasser, Wassergehalt der Abluft, Kondensat) im Wesentlichen aus Verdunstungs- und Kondensationsprozessen im Substrat bestimmt. Geringere Wassermengen werden durch den mikrobiellen Abbau (metabolisches Wasser) freigesetzt. Bilanziert wurde der Wasserhaushalt zur Modellierung des biologischen Abbauprozesses von verschiedenen Autoren (Nakasaki et al., 1987a, Haug, 1993, Stombaugh und Nokes, 1996, Hsieh et al., 1997, Das und Keener, 1997, Mohee et al., 1998, Kaiser, 1999). Berücksichtigt wurden der Wassergehalt im Material, die Wasseranteile in der Zu- und Abluft und die spezifische Wärmefreisetzung beim biologischen Abbau für Systemausschnitte oder für das Gesamtsystem (zeitdiskret oder summiert).

2.2 Simulationsmodelle der anaeroben biologischen Abfallbehandlung

Es gibt eine Vielzahl mathematischer Modelle zur Beschreibung der anaeroben Vergärung (kontinuierliche und diskontinuierliche Nass- und Trockenfermentation) unter Berücksichtigung biologischer und physikalisch-chemischer Vorgänge. Eine Übersicht ist u. a. in Demirel und Yenigun (2002), Gall (1999), Husain (1998), Mata-Alvarez et al. (2000) und Pavlostathis und Giraldogomez (1991) zu finden.

Ziel der Modellierungen ist es fast durchgängig, den Biogasertrag berechnen zu können (z. B. Beba und Atalay, 1986, Hashimoto, 1982, Gunaseelan, 2004, Hashimoto, 1984, Chen, 1983, Mather, 1986, Moller et al., 2004) und andere wirtschaftliche, technische und rechtliche Betrachtungen (u. a. über Stoff- und Energiebilanzen) zu ermöglichen (z. B. Biogas2000, 2000, Langhans, 1997a, Langhans, 1997b, Mähnert, 2007, Mertens et al., 1997 und Mertens, 2001 (kombinierte Kompostierungs- und Vergärungsanlage), KTBL, 2012). Die Modelle sind meistens sehr spezifisch auf die Kinetik einzelner Prozessgrößen ausgerichtet (z. B. Methanproduktion, pH-Wert, Ammoniumgehalt, Schwefelwasserstoffemission, Gehalt an flüchtigen Carbonsäuren) und entstammen häufig der Abwasserreinigung (Klärschlammvergärung) und der Vergärung von Gülle im ländlichen Bereich (Nassvergärung).

Die „Arbeitsgruppe der „International Water Association (IWA)“ zur Modellierung der anaeroben Vergärung“ verfasste zur Vereinheitlichung das ADM1-Modell (IWA Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1)), das insgesamt 19 Prozessschritte und 24 lösliche Komponenten für die Nassvergärung berücksichtigt (Batstone et al., 2002). Seitdem wurden das ADM1-Modell oder Teile daraus bereits mehrfach auch auf komplexe Prozesse angewendet (z. B. Blumensaat und Keller, 2005, Batstone und Keller, 2003, de Gracia et al., 2006, Jeong et al., 2005, Nopens et al., 2009).

Die Modelle für die anaerobe Verwertung flüssiger und fester Substrate enthalten unterschiedliche Schwerpunkte und Differenzierungen. Das Bakterienwachstum und der Substratverbrauch wird z. T. getrennt für die Acidogenese und Methanogenese (Moletta et al., 1986) betrachtet, sowie auf einzelne Substratkomponenten wie flüchtige Fettsäuren (Vavilin und Lokshina, 1996) oder Produktkomponenten wie die Pyruvatbildung durch *Escherichia coli* (Zelic et al., 2004) bezogen. Die kontrollierte Versorgung der Mikroorganismen mit Nährstoffen konnte dabei bisher nicht modelliert werden (Amon et al., 2003).

Eine Substrat- und Produkthemmung durch z. B. Acetat und Propionat bei der anaeroben Vergärung in Batch-Versuchen wurde durch ein Modell mit Hemmung durch undissoziierte Säuren berücksichtigt (Mosche und Jordening, 1999).

Für das Wachstum der Mikroorganismen bei der Methangärung ist die Verwendung der Monod-Gleichung möglich, da alle Abbaustufen auf enzymatische Reaktionen zurückgeführt

werden können. Auch Modelle aus der anaeroben Abwasserreinigung haben gezeigt, dass für die Methanogenese die Abbaukinetik sehr gut durch die Monod-Gleichung beschrieben werden kann (Kroiss, 1986, Linke und Kalisch, 1983). Aber auch Reaktionen erster Ordnung für Gleichgewichtszustände und die Gleichungen nach Haldane, Michaelis-Menten, Contois und Arrhenius finden Anwendung.

Wegen der Novellierung des Erneuerbare Energien Gesetzes (EEG, 2012) gewinnt die Vergärung von nachwachsenden Rohstoffen (NawaRos) - vor allem aufgrund des Energiepflanzenbonus - zunehmend an Bedeutung. Literaturangaben zu Biogas- und Methanausbeuten aus Gülle und NawaRos weisen große Schwankungsbreiten auf und sind oft aufgrund unterschiedlicher Bezugsgrößen, Normierungen, Verfahren oder Prozesstemperaturen nicht miteinander vergleichbar (Wilfert und Schattauer, 2003, FNR, 2009). Von Mähnert (2007) wurde hierzu ein Modell zur Biogasproduktion aus nachwachsenden Rohstoffen und Gülle bei jeder beliebigen Mischung und Fermenterraumbelastung im meso- und thermophilen Bereich entwickelt, das jedoch noch auf Reproduzierbarkeit hin überprüft werden muss. Zudem sind für das Modell substrat- und prozessspezifische Parameter wie die maximal mögliche Biogausbeute, Zulaufkonzentrationen, Dichte des Biogases und die Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten für weitere Substrate und Temperaturen ergänzend im Labor zu bestimmen.

Aufgrund der Substratvielfalt und der komplexen Zusammenhänge der anaeroben Abbauvorgänge, vor allem auch die Versorgung von Mikroorganismen mit Nährstoffen in Feststoffen, können Modelle bisher jedoch noch nicht die Laborversuche ersetzen. Die existierenden dynamischen Modelle zur Beschreibung des Stoffumsatzes lassen sich zudem nur eingeschränkt für Probleme in der Wirklichkeit wie der Planung und Dimensionierung von Biogasanlagen verwenden (Radke, 2000, Amon et al., 2003).

2.3 Empirische Simulationen der biologischen Abfallbehandlung

Es gibt viele Veröffentlichungen zu Laborversuchen der Kompostierung (z. B. Fertig, 1981, Krogmann, 1994, Körner et al., 2003) und Vergärung (z. B. Spendlin, 1991, Gunaseelan, 1997, Mukengele et al., 2006). Hier werden empirische Untersuchungen zur Optimierung bzw. Ermöglichung des jeweiligen Prozesses in unterschiedlichen Maßstäben geschildert. Problematisch ist dabei die Vergleichbarkeit zwischen den Veröffentlichungen, da Wertangaben, Stoff- und Parameterbetrachtungen und Versuchsbedingungen variieren. Hinzu kommen mögliche Fehler, die bei der Analyse von Gasen, Sickerwasser und Feststoffen, vor allem bei Inhomogenitäten des Schüttgutes (wie Abfälle, Bioabfall, Kompost und Gärresten), entstehen. Denn die Art der Analyse (Messmethode), die weiteren Komponenten in der Probe (Probenmatrix), die Probenahme (Schwierigkeiten der repräsentativen Probenahme) und

die unterschiedlichen verwendeten Geräte (Qualität der Geräte) haben Einfluss auf die Genauigkeit der Messergebnisse. Entsprechend unübersichtlich sind häufig die Ergebnisse.

2.4 Simulationsmodelle für Abfalldeponien

Auch für Abfalldeponien gibt es zahlreiche Veröffentlichungen, in denen vor allem Gas-, Wasser- und Stofftransportvorgänge in unterschiedlichen Deponiearten und -regionen mathematisch und empirisch untersucht wurden (z. B. Pommier et al., 2008, Haarstrick et al., 2004, Haarstrick et al., 2001, El Fadel et al., 1996, Findikakis et al., 1988, Findikakis und Leckie, 1979). Für die mathematischen Modellierungen gibt es viele erprobte Softwareprogramme (z. B. Help, Rohaldep, Bowahald, Hydrus, Stanmod, SiWaPro DSS, Smart), die vor allem der Sickerwasserprognose dienen. Der Schwerpunkt liegt hier bei raum- und zeitdiskreten Berechnungen möglicher Emissionen. Die Genauigkeit und Komplexität der Modelle ist dabei sehr unterschiedlich.

2.5 Simulationsmodelle in der Abwassertechnik

Viele Veröffentlichungen über Simulationen und Modellierungen, einschließlich Expertensystemen, gibt es im Bereich der Abwasserreinigung (u. a. Abwasserreinigungsverfahren und Klärschlammwässerung) (z. B. Übersicht in Hunze, 2005). Aufgrund thematischer Überschneidungen mit Behandlungsverfahren in der Abfallwirtschaft können diese mitberücksichtigt werden. Die Nitrifikation in hochbelasteten Abwässern wurde z. B. von Pirsing (1996) anhand einer reaktionstechnischen Untersuchung mathematisch modelliert. Larsen-Vefring (1993) simulierte die Nitrifikation und andere Stoffumwandlungen im Biofilm. Kalyuzhnyi et al. (1998) entwickelten ein mathematisches Modell zur Beschreibung des Wachstums der konkurrierenden Populationen von sulfatreduzierenden und methanbildenden Mikroorganismen.

2.6 Zusammenfassung des Forschungsstandes

Zusammenfassend kann bezüglich des im Folgenden entwickelten und dargestellten Simulationsmodells festgestellt werden, dass für die aerobe Behandlung die thermophile Phase in Modellen bisher wenig berücksichtigt wurde, ebenso die passive Belüftung. Temperaturkorrekturfaktoren sind in fast allen Modellen enthalten. Korrekturfaktoren für die Feuchtigkeit, Sauerstoffverfügbarkeit und freiem Porenvolumen sind in einigen Modellen zu finden. Empirische Korrekturfaktoren bestehen für die Feuchtigkeit und für das Kohlenstoff/Stickstoff (C/N)-Verhältnis. Theoretische Korrekturfaktoren werden für die Temperatur und Sauerstoffverfügbarkeit eingesetzt.

Die mathematischen Modelle des Kompostierungsprozesses basieren im Wesentlichen auf Wärme- und Massenbilanzen bezogen auf die Zeit in ausgesuchten Fällen. Ein deterministischer Ansatz ist immer vorhanden, stochastische Einflüsse sind seltener eingebaut. Die Energie aus biologischen Abbauprozessen wurde in allen Veröffentlichungen nach einer Reaktion erster Ordnung, nach Monod (mit Inhibition nach Haldane), Michaelis-Menten, Contois, Arrhenius oder aufgrund empirisch gewonnener Werte mit Wärmeübergangsfaktoren modelliert. Kein Modell kann die Maximums- oder Durchschnittstemperatur oder spontan auftretende kurzzeitige Temperaturanstiege zeitgenau und temperaturgenau vorherbestimmen.

Der Vergleich mathematischer Modellierungen des Kompostierungsprozesses zeigt, dass weitere Daten zur spezifischen Abbaubarkeit von Substraten wünschenswert wären. Damit verbunden wären auch Daten zur Temperatur- und Feuchtigkeitsentwicklung beim Abbau unterschiedlicher Substrate im Zusammenhang mit den verschiedenen Hafteigenschaften von Wasser hilfreich.

Die Modelle für die anaerobe Verwertung flüssiger und fester Substrate sind überwiegend auf die mögliche Methanbildung oder auf unerwünschte Emissionspotentiale (z. B. Geruch und Schwefelwasserstoff) ausgerichtet.

Aufgrund der Substratvielfalt und der komplexen Zusammenhänge der aeroben und anaeroben Abbauprozesse können Modelle bisher jedoch noch nicht die Laborversuche ersetzen. Die existierenden dynamischen Modelle zur Beschreibung des Stoffumsatzes lassen sich zudem nur eingeschränkt für Probleme in der Wirklichkeit verwenden.

Abgeleitete Neuerungen für das Simulationsmodell

Das zu entwickelnde Simulationsmodell sollte die Einschränkungen bisheriger Simulationen und Modelle verringern. So findet keine strikte Prozesstrennung zwischen aeroben und anaeroben Verfahren statt. Zudem sind viele Betriebsvarianten möglich (Kapitel 6.4). Auch thermophile Bedingungen und die passive Belüftung werden berücksichtigt. Korrekturfaktoren sind als änderbare Annahmen integriert und betreffen die Luftwassersättigung beim Austritt aus dem System, die Temperatur, die Sauerstoff- und die Nährstoffverfügbarkeit (Stoffumsatz). Die maximale Temperatur und zeitdiskrete Temperaturverläufe, also auch spontan auftretende kurzzeitige Temperaturanstiege, sind zeit- und temperaturgenau prognostizierbar. Auch andere Prozessparameter werden für jeden Zeitschritt neu berechnet, so dass nicht nur Summenwerte das Ergebnis sind, sondern der zeitdiskrete Prozessverlauf. Berücksichtigt werden bei den voreinstellbaren unterschiedlichen Betriebsmöglichkeiten die thermodynamischen Einflüsse Wärmeleitung, Wärmestrahlung und Konvektion für unter-

schiedliche Bedingungen und Außentemperaturen. Die Abbaukinetik setzt sich aus verschiedenen Einflüssen zusammen und die Wassersituation des Modellsystems ist umfangreich einstellbar. Der Aufbau des Simulationsmodells ist so gestaltet, dass nur wenige mathematische Beschreibungen von Zusammenhängen eingesetzt wurden. Die Entwicklungen werden vorrangig durch Korrelationen ermittelt, die zu einem zeitdiskreten Prozessverlauf führen. Das Ergebnis ist ein erweiterbares Simulationsprogramm mit den wesentlichen Werten der biologischen Abfallbehandlung, wobei auch ähnliche Anwendungsgebiete nicht ausgeschlossen sind.

3 Grundlagen und Entwicklung des Simulationsmodells

Eine Simulation umfasst alle Handlungsschritte zur Analyse von Systemen, die für die theoretische oder formelmäßige Erfassung zu kompliziert sind. Kern der Simulation ist das Simulationsmodell. Deshalb beginnt die Simulation mit einer Modellfindung. Wird ein neues Modell entwickelt, spricht man von einer Modellierung. Da im Allgemeinen nicht alle Aspekte der untersuchten Realität in Modellen abbildbar sind, wird Modellbildung oftmals auch als Reduktion, Konstruktion oder Abstraktion bezeichnet. Das Simulationsmodell stellt also eine Abstraktion des zu simulierenden Systems dar. Grundsätzlich wird zwischen empirischen, deterministischen und stochastischen Modellen unterschieden. Ist ein Modell für die zu lösende Problemstellung gefunden, müssen die Parameter hinsichtlich der gewünschten Zielsetzung eingestellt und ggf. geeignet variiert werden. Die Simulationsergebnisse können dann z. B. für Analysen, Planungen, Erklärungen, Prognosen und Optimierungen verwendet werden und zum Verständnis von komplexen Zusammenhängen beitragen.

Simulationen sind auch Grenzen gesetzt. So sollte eine Simulation auch wirtschaftlich vertretbar sein. Ein Simulationsmodell muss daher so einfach wie möglich und so umfangreich wie nötig sein. Die Komplexität kann dabei sehr unterschiedlich sein. Sie ist von der Zahl der Eingangsvariablen und der Anzahl empirischer Faktoren abhängig. Mit steigender Beschreibungsgenauigkeit nimmt die Zahl der empirischen Faktoren ab und die Anzahl der Eingangsvariablen zu. Die Reduktionen beeinträchtigen die Genauigkeit der Simulationsergebnisse, weshalb Modelle im Allgemeinen nur eine grobe Vereinfachung der Realität darstellen. Eine weitere Grenze folgt daraus, dass ein Modell nur in einem bestimmten Kontext Ergebnisse liefert, die sich auf die Realität übertragen lassen. In anderen Parameterbereichen können die Resultate falsch oder gar absurd sein. Daher ist die Validierung (Gültigkeitsprüfung) der Modelle für den jeweiligen Anwendungsfall ein wichtiger Bestandteil der Simulationstechnik. Weitere Grenzen resultieren bei der Anwendung von Simulationsprogrammen aus Ungenauigkeiten der Eingabedaten (z. B. Schätzungen aufgrund fehlender Daten, Messfehler, ungleiche Einheiten und Bezüge oder ungenaue Angaben), sowie subjektiven Einflüssen (Vorkenntnisse, Erfahrungen, Einschätzungen, Zielvorgaben u. Ä.).

3.1 Empirische, deterministische und stochastische Modelle

Es wird, wie schon erwähnt, zwischen empirischen, deterministischen und stochastischen Modellen unterschieden. Die Zuordnung erfolgt auf Basis des Hauptthemas und der Mehrzahl einzelner Detailzusammenhänge. Eine eindeutige Zuordnung eines Modells zu einer der Gruppen ist meistens nicht möglich, da fast ausschließlich Modelle mit gemischten Methoden existieren, das heißt, dass mindestens ein Einflussfaktor mit einer Methode aus einer ande-

ren Gruppe ermittelt wurde. Obwohl qualitativ keine generellen Unterschiede zwischen den Modellgruppen festgestellt werden können, geht der Trend aufgrund eines immer weiter wachsenden Prozessverständnisses zu deterministischen Modellen hin, wobei empirische Modelle meistens erheblich einfacher zu handhaben sind (Scholwin, 2005).

Die Modellgruppen im Einzelnen:

- Empirische Modelle beruhen auf Daten und aus Erkenntnissen, die durch Beobachtungen eines Prozesses gewonnen wurden. Sie beschreiben den Prozess formal, ohne den Versuch, die Grundlagen und Grundzusammenhänge, die zum Prozessergebnis führen, zu erkennen. Ein allgemein gültiges empirisches Modell erfordert die Analyse von Daten, die die gesamte mögliche Bandbreite aller relevanten Einzelparаметer umfassen. Dies scheint z. B. für die Kompostierung nicht möglich zu sein (Scholwin, 2005). Zu den empirischen Modellen gehören neben Labor- und Feldversuchen auch Regressionsmodelle, Fuzzy Logic Modelle und Modelle auf Basis neuronaler Netze. Diese könnten z. B. eine Kontrolle des Kompostierungsprozesses anhand der wichtigsten Einflussgrößen unter Beachtung der Komplexität und der Unbestimmtheit ermöglichen. Die Begrenzung liegt dann jedoch in der Vielfalt und der unterschiedlichen Zusammensetzung der zu behandelnden Materialien (Lin, 2006).
- Deterministische Modelle beruhen auf anerkannten Gesetzmäßigkeiten. Für die biologische Abfallbehandlung sind dieses im Wesentlichen physikalische, chemische und biochemische Gesetze und Reaktionen. Der Gesamtprozess wird in Teilprozesse zerlegt, welche durch Gesetze und Reaktionen beschrieben werden können. Dabei werden in der Regel Vereinfachungen vorgenommen, die den Prozessverlauf mit einer für den Anwendungsfall hinreichenden Genauigkeit darstellen und gleichzeitig den Modellierungsaufwand und die Zahl der Eingangsgrößen minimieren. Die Gültigkeit deterministischer Modelle kann in Abhängigkeit von den vorgenommenen Vereinfachungen zwischen vollständig und sehr einsatzspezifisch liegen (Scholwin, 2005).
- Stochastische Modelle beruhen auf der Analyse von großen Datenmengen und treffen Voraussagen auf der Basis von Eintrittswahrscheinlichkeiten und Standardabweichungen. Damit wird anhand von historischen Daten ein Prozessergebnis vorhergesagt, das den zu den historischen Daten gehörenden Prozessergebnissen entspricht. Aufgrund der Ableitung des Modells von konkreten Daten ist es mit empirischen Modellen vergleichbar. Die Gültigkeit ist in der Regel auf die Bandbreite dieser Daten beschränkt (Scholwin, 2005). Sofern zufallsabhängige Prozesse simuliert werden, können sich statistische Auswertungen anschließen.

Das zu entwickelnde Simulationsmodell ist im Wesentlichen den deterministischen Modellen zuzuordnen.

3.2 Entwicklung des Simulationsmodells

Die Entwicklung des Simulationsmodells ist komplex, da viele Zusammenhänge zu berücksichtigen sind. Der Umfang und die Detailgenauigkeit bestimmen am Ende die Wertigkeit des Simulationsmodells. In der vorliegenden Arbeit wurde daher angestrebt, möglichst viele Zusammenhänge zu integrieren und eine hohe Flexibilität zu erhalten, um damit den Einsatz für viele Anwendungsfälle zu gewährleisten.

In den folgenden Kapiteln 3.3 bis 3.6 wird die Vorgehensweise im Einzelnen beschrieben.

3.3 Simulationsprogramm

Es wird ein Programm mit LabVIEW™ 7.0 (Laboratory Virtual Instrumentation Engineering Workbench) von National Instruments geschrieben, ein Programmiersystem mit der graphischen Programmiersprache „G“ ohne Modellier- oder Simulationsmodule, das die Grundlagen der aeroben und anaeroben biologischen Abbauprozesse (z. B. Kompostierung, Vergärung und Kombinationen) mit den dazugehörigen wesentlichen physikalischen und chemischen bzw. biochemischen Bedingungen und Reaktionen simuliert. Dabei werden fast ausschließlich mathematische und physikalische Zusammenhänge und Reaktionsgleichungen aus den Grundlagengebieten der Chemie, Biochemie, Mikrobiologie und Physik verwendet und keine empirisch gewonnenen mathematischen Gleichungen zur Beschreibung von Zusammenhängen aus der speziellen Fachliteratur. Änderungen und Ergänzungen sollen aufgrund des Programmaufbaus in allen Bereichen auch zukünftig einfach durchführbar sein.

LabVIEW™ von National Instruments für das Betriebssystem Windows®

Das im Wesentlichen zur Erfassung, Auswertung und Darstellung von Messwerten und zur Steuerung und Regelung von Anlagen entwickelte Programmiersystem LabVIEW™ von National Instruments für das Betriebssystem Windows® ermöglicht eine Erweiterung mit Prozessregelungs- und Prozesskontrollelementen. Die vor allem in der Mess-, Regel- und Automatisierungstechnik eingesetzte Programmierungsumgebung enthält graphische Programmiererelemente, die in virtuellen Instrumenten zusammengesetzt werden. Die sogenannten VIs bestehen jeweils aus einem Frontpanel und einem Blockdiagramm. Das Frontpanel mit der Frontansicht ist die Benutzeroberfläche, über die Ein- und Ausgabewerte unterschiedlich dargestellt werden können (Abbildung 7-1). Das Blockdiagramm enthält den gra-

phischen Programmcode mit den Eingabewerten aus dem Frontpanel (Abbildung 6-1). Der Programmcode wird kompiliert, wodurch die Leistung mit anderen Programmierhochsprachen vergleichbar ist.

3.4 Modellverifikation und Modellvalidierung

Die Modellverifikation, also die Überprüfung auf korrekte Implementation des formalen konzeptuellen Modells durch systematische Programmtests, wird regelmäßig während des Programmierens durchgeführt. Dabei werden Ein- und Ausgabewerte nachgerechnet und logische Verknüpfungen auf Richtigkeit überprüft. Durch Eingabe von Extremwerten wird die Stabilität des Programms kontrolliert.

Eine operationale Modellvalidierung (Plausibilitätstests, Sensitivitätsanalysen, Kalibrierungen, Outputvergleiche und prognostische Gültigkeitsprüfungen) soll am Ende Aufschluss über die Qualität der Simulationsergebnisse und somit des Simulationsmodells („model quality“) geben. Eine qualitative und quantitative Prognose von Werten wird erwartet. Computergenerierte Zufallsereignisse (z. B. für abbauspezifische Ereignisse, Regenfälle, Temperaturereignisse, Belüftungsschwankungen) sind nicht vorgesehen, jedoch sollen ausgewählte Ereignisse zeitgenau oder kontinuierlich im Programm (eintragbare Optionen) vorgegeben werden können.

3.5 Modellthema biologische Abfallbehandlung

Die zu berücksichtigenden unterschiedlichen Arten der biologischen Abfallbehandlung werden für die Modellfindung und –entwicklung charakterisiert und beschrieben. Der Aufbau der Software zur Simulation biologischer Abbauvorgänge wird erläutert und simulierte Ergebnisse beispielhaft mit denen durchgeführter Versuche und empirischen Werten aus Veröffentlichungen verglichen.

Für eine Simulation erforderlich sind wie schon erwähnt stimmige Stoff- und Prozessangangsdaten (Initialisierungsparameter). Je genauer diese sind, desto präziser können die simulierten Ergebnisse sein. Eine ausgelagerte Materialdatenbank mit Stoffdaten biologisch verwertbarer Substrate ist daher vorgesehen und im Programm integriert. Wegen des komplexen Analysen- bzw. Rechercheaufwands ist die Datenbank aber nur unvollständig Bestandteil dieser Arbeit (nur etwa 100 Substrate sind mit den bekannten Eigenschaften voringetragen).

Das Programm ist in englischer Sprache gehalten. Eine Übersicht des Simulationsmodells ist in Kapitel 6.4 und Abbildung 6-11 zu finden.

3.6 Input, Simulationsmodell und Output

In den folgenden drei Abbildungen ist das Simulationsmodell zusammenfassend dargestellt. Anhand dieser Parameter sollen die komplexen Zusammenhänge der mikrobiologischen Behandlung von Materialien, die Kohlenhydrate, Proteine und/oder Fette enthalten, in dem zu entwickelnden Simulationsmodell berechnet werden. Prognosen, Prozessdarstellungen und -optimierungen aerober, anaerober und aerob-anaerob kombinierter mikrobiologischer Abbauvorgänge und die Darstellung des Verbleibs von Nährstoffen (Kohlenstoff, Stickstoff und Schwefel) sollen daraufhin möglich sein. Da keines der am Markt derzeit verfügbaren Simulations-Softwareprodukte (z. B. Powersim, Modelica, Matlab/Simulink, Comsol Multiphysics, AspenPlus, Simba) hierfür geeignet schien, wurde ein Simulationsprogramm (Kapitel 3.3) erstellt. Die folgenden Abbildungen zeigen die Eingabeparameter (Input) (Abbildung 3-1), das Simulationsmodell (Datenverarbeitung) (Abbildung 3-2) und die Ausgabeparameter (Output) (Abbildung 3-3) in der Übersicht. Die Erläuterungen im Einzelnen erfolgen in Kapitel 6.



Abb. 3-1: Übersichtsdarstellung der Eingabewerte (Input) des Simulationsmodells aerober und anaerober Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft



Abb. 3-2: Übersichtsdarstellung des Simulationsmodells (Datenverarbeitung) zur Entwicklung einer Software für die Prozesssimulation aerober und anaerober Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft

<p>Werteausgabe (Output)</p> <p>Graphen zur Wertedarstellung „physikalische Parameter“, „N/S/C-Bilanzen“, „Stickstoff“, „Schwefel / Stickstoff“, „Gas / Wasser“, „Gas (Vol.-%)“, im Einzelnen:</p> <p>Physikalische Parameter Abbaurrate (Gew.-%), Belüftung (m³/d), Wassergehalt (Gew.-%), Temperatur (°C), freies Porenvolumen (Vol.-%), Volumenabnahme (Vol.-%), Höhenabnahme (m), Reduktion der organischen Trockensubstanz (Gew.-%), Wasserdurchlässigkeit (m/d)</p> <p>N/S/C-Bilanzen Stickstoff/Schwefel/Kohlenstoff im Feststoff, Wasser und Gas (Massen-%)</p> <p>Stickstoff Ammonium-N (NH₄⁺-N) (mg/l), Nitrat-N (NO₃⁻-N) (mg/l), Nitrit-N (NO₂⁻-N) (mg/l), Ammoniak-N (NH₃-N) (g/d)</p> <p>Schwefel / Stickstoff Distickstoffoxid (N₂O) (m³/d), produziertes Distickstoffgas (N₂) (m³/d), Ammoniak (NH₃) (m³/d), Gesamtstickstoff im Wasser (N) (g/l), Ammonium (NH₄⁺) (g/l), Nitrat (NO₃⁻) (mg/l), Nitrit (NO₂⁻) (mg/l), Schwefelwasserstoff (H₂S) (m³/d), Schwefel im Wasser (S) (mg/l), Sulfat-S (SO₄²⁻-S) (mg/l), pH-Korrel.</p> <p>Gas / Wasser Methan (CH₄) (m³/d), Wasserstoff (H₂) (m³/d), Kohlendioxid (CO₂) (m³/d), Sauerstoff (O₂) (m³/d), pH-Wert, Essigsäureäquivalent (AC_{eq}) (g/l), C/N-Verhältnis, Sickerwasser (kg/d), Oberflächenwasser (kg/d), Wasser im Material (kg/d)</p> <p>Gas (Vol.-%) Sauerstoff (O₂), Kohlendioxid (CO₂), Distickstoff (N₂), Methan (CH₄), Wasserstoff (H₂), Distickstoffoxid (N₂O), Ammoniak (NH₃), Schwefelwasserstoff (H₂S)</p> <p>Wasserphase max. Stickstoff (N) (g), max. Schwefel (S) (g), Sauerstoffverbrauch (mg/l) der letzten x Tage ab Bezugstag y, pH-Werte max. Ammonium-N (NH₄⁺-N) (g), Nitrat-N (NO₃⁻-N) (g), Nitrit-N (NO₂⁻-N) (g), max. Schwefelwasserstoff-S (H₂S-S) (mg), Sulfat-S (SO₄²⁻-S) (mg)</p> <p>Abbaurrate in Prozent bezogen auf das abbaubare Trockengewicht bzw. wahlweise Gesamttrockengewicht</p> <p>Methanbildung in Prozent bezogen auf die Edukte Essigsäure, Wasserstoff und Kohlendioxid (mögliche Methanbildung)</p> <p>Sickerwasseranfall und Oberflächenwasser bzw. Ablauf am Ende des betrachteten Zeitraums</p> <p>Kondensatbildung am Ende des betrachteten Zeitraums mit Wahl zur Rückführung des Kondenswassers (kg) in den Prozess</p> <p>Gasphase Abluftstrom insgesamt und wahlweise nur produziertes Gas (m³) Biogas (m³/Mg oTS, l/(m³·d), m³/FS) Kohlendioxid, Wasserstoff, Methan, Ammoniak, Schwefelwasserstoff (auch ppm) und Distickstoffoxid (m³) produziertes Kohlendioxid (kg), Summe veratmeten Sauerstoffs (kg), Summe produzierten Stickstoffs (m³) Kohlenstoffemissionen (C, CH₄-C, CO₂-C in g/kg oTS bzw. TS)</p> <p>Gasbildungspotential für den anaeroben Prozess (der letzten x Tage ab Bezugstag y): produziertes Gas und Methan und Wasserstoff insgesamt in l/kg oTS wahlweise TS</p> <p>Atmungsaktivität für den aeroben Prozess (der letzten x Tage ab Bezugstag y): veratmeter Sauerstoff in mg O₂/g oTS wahlweise TS</p> <p>weitere Ausgabewerte Stickstoff und Schwefel: Prozent oTS wahlweise TS am Anfang und Ende des Prozesses max. Essigsäurekonzentration (AC_{eq} g/kg oTS wahlweise TS) und metabolisches H₂O Raumbelastung (kg oTS wahlweise TS/(m³·d) und Verweilzeit (d) Wärmegewinn durch Abbau bei Isolierung / Wärmeverlust durch freie Konvektion bei Nichtisolierung in GJ/d Hygienisierung ja/nein (mind. 7 Tage 65 °C oder 14 Tage 55 °C) organische Trockensubstanz (Gew.-%), Total Organic Carbon (TOC) (kg oTS, Massen-%), C/N-Verhältnis N/S/C-Bilanzendwerte in der Feststoff-, Wasser- und Gasphase (Massen-%)</p>
--

Abb. 3-3: Übersichtsdarstellung der Ausgabewerte (Output) des Simulationsmodells aerober und anaerober Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft

4 Biologische Abfallbehandlung

Bioabfälle sind alle Abfälle tierischer oder pflanzlicher Herkunft, die durch Mikroorganismen, bodenbürtige Lebewesen oder Enzyme abgebaut werden können. Hierzu gehören gemäß der Bioabfallverordnung (BioAbfV, 2012) organische Siedlungsabfälle, Markt- und Garten- bzw. Parkabfälle, Abfälle aus der Nahrungs- und Futtermittelindustrie, Abfälle aus der Verarbeitung nachwachsender Rohstoffe und sonstige Abfälle mit wesentlichen Anteilen biologisch abbaubarer Materialien.

Bioabfall beinhaltet also im Wesentlichen:

- Grüngut (Baum-, Strauch- und Blumenschnitt, Wurzeln, Topfpflanzen u. Ä.)
- Obst (Abfälle von Äpfeln, Pflaumen, Weintrauben, Pfirsichen, Aprikosen u. Ä.)
- Gemüse (Abfälle von Lauch, Möhren, Kartoffeln, Paprika, Zucchini, Kohl, Salat, Bohnen, Tomaten, Radieschen, Zwiebeln, Rettich, Mais u. Ä.)
- Südfrüchte (Abfälle von Zitrusfrüchten, Bananen, Melonen, Kiwis u. Ä.)
- Papier (Hygiene- und Zeitungspapier, Kaffeefilter mit Kaffeesatz, Teebeutel mit Teeblättern u. Ä.)
- Speisereste (Abfälle von gekochtem Fleisch, Fisch, Wurst, Käse, Gemüse, Kuchen, Knochen u. Ä.)
- und Feinmüll (Katzenstreu, Staubsaugerstaub, Kaffeesatz u. Ä.)

Neben dem Problem, dass Glas in Form kleiner Scherben, Aluminiumreste oder andere kleine Teile von Störstoffen auch nach Sortierungsschritten im Kompost bleiben und damit die Einsetzbarkeit beeinträchtigen, werden auch Schadstoffe, vor allem Schwermetalle (z. B. Zink, Blei, Kupfer, Nickel, Chrom, Cadmium und Quecksilber) und organische Schadstoffe wie Dioxine und Furane, polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe und polychlorierte Biphenyle durch diese eingetragen. Besonders problematisch sind Metallteile, da bei zeitweise niedrigen pH-Werten im sauren Milieu Metalle gelöst und ausgewaschen werden können. Durch mikrobiologische Abbauvorgänge (KTBL und UBA, 2002) und Sorptionen an Huminstoffen kann es zur Anreicherung von Schwermetallen kommen (z. B. Zachäus und Laude, 1997, Scheffer und Schachtschabel, 1998). Auch scheinbar harmlose Kunststofffolien bringen Schwermetalle in den Kompost, wenn z. B. farbige Aufdrucke vorhanden sind (z. B. Gronauer et al., 1997). In Deutschland sind Schwermetalle in den Kompost- und Gärprodukten bei Einhaltung der Bioabfallverordnung (BioAbfV, 2012) und geeigneten Inputmaterialien nicht in problematischen Konzentrationen enthalten (FNR, 2009).

Für das Jahr 2008 wurden in der Abfallstatistik bundesweit 1923 Kompostierungs- und Vergärungsanlagen mit Behandlung biogener Abfälle ausgewiesen. Davon waren 289 Bioabfallkompostierungsanlagen, 665 Grünabfallkompostierungsanlagen und 969 Biogas- und Vergärungsanlagen. Die Behandlung von 7,7 Mio. Mg der gesamten Bioabfälle erfolgte also in 954 Kompostierungsanlagen und 3,9 Mio. Mg in 969 Biogas- und Vergärungsanlagen. Es

wurden demnach rund 11,6 Mio. Mg Bioabfälle, gemäß Anhang 1 Bioabfallverordnung (BioAbfV, 2012) aus der Biotonne, biologisch abbaubare Garten- und Parkabfälle, Marktabfälle und weitere biologisch abbaubare Abfälle aus verschiedenen Herkunftsbereichen, in Kompostierungsanlagen und Vergärungsanlagen (Biogasanlagen) verwertet. Davon wurden 4,2 Mio. Mg über die Biotonne und rund 4,5 Mio. Mg an Garten- und Parkabfällen getrennt erfasst. Aus den Bioabfällen wurden rund 3,8 Mio. Mg Bioabfallkomposte und rund 2,9 Mio. Mg Bioabfallgärsubstanzen hergestellt, die in verschiedenen Bereichen Verwendung fanden. (Statistisches Bundesamt, 2011)

Kompostierungsanlagen unterliegen der freiwilligen Güteüberwachung durch die Bundesgütegemeinschaft Kompost (BGK). Diese zertifiziert die Komposte mit dem RAL-Gütesiegel und diversifiziert sie hinsichtlich ihrer Eigenschaften z. B. in Substrat- oder in Mulchkomposte. Von den Kompostierungsanlagen unterliegen z. Zt. 440 Anlagen mit einer Anlagenkapazität von 7,5 Mio. Mg (75 %) der RAL-Gütesicherung Kompost. Von den Bioabfall-Vergärungsanlagen unterliegen 84 der Gütesicherung Gärprodukt mit einer Kapazität von 2,4 Mio. Mg. (Stand: April 2011, BGK, 2012)

Der allgemeine Trend geht hin zu gekoppelten aerob-anaerob Verfahren. Gefördert wird die Ergänzung bestehender Kompostierungsanlagen mit einer Vergärungsstufe. Bei derartigen Verfahrenskombinationen entstehen nutzbares Biogas und wertvoller Kompost, der zur Bodenverbesserung verwendet werden kann. Ziel wird zukünftig also, neben der Abfallbehandlung zur Reduktion von Emissionen, die Energiegewinnung (EEG, 2012) bzw. Minimierung des Energieverbrauchs sein. Die Optimierung von Verfahren zum wirtschaftlichen Betreiben von Anlagen wird daher zunehmend wichtiger werden. (BGK, 2012)

Hygiene

Bei der biologischen Abfallbehandlung wie der Kompostierung und Vergärung sollte eine Hygienisierung des Substrats erfolgen. Krankheitserreger sind mesophile Organismen mit optimalem Wachstum bei etwa 37 °C. Normalerweise reicht es aus, die Substrattemperatur zur Hygienisierung über einen Zeitraum von mindestens einer Woche über 65 °C zu halten. Eine Hygienisierung kann aber beispielsweise auch bei 55 °C über mindestens zwei Wochen erfolgen (BioAbfV, 2012).

Problematisch kann die Abtötung von sporenbildenden Krankheitserregern sein. Diesem Problem kann man jedoch durch einen langsamen Temperaturanstieg in der Anlaufphase entgegen wirken (z. B. Schlegel, 1992, Krogmann, 1994).

Das Erreichen der thermophilen Phase ist nicht nur bezüglich der Abtötung pathogener Keime, sondern auch im Hinblick auf eine sichere Inaktivierung von Pflanzensamen und ver-

mehrungsfähigen Pflanzenteilen relevant (z. B. Haug, 1993). Die genannten Temperaturen und Einwirkzeiten reichen in der Regel dafür aus (BGK, 2003). Für die biologische Behandlung tierischer Nebenprodukte gelten weitere hygienerechtliche Vorschriften (Kern et al., 2010).

Das im Folgenden beschriebene Hygiene-Baumusterprüfsystem kann zur Beurteilung gängiger Kompostierungs- und Vergärungsverfahren als hygienisch geprüfte Baumuster herangezogen werden (BGK, 2003).

Hygiene-Baumusterprüfsystem der Bundesgütegemeinschaft Kompost

Das Hygiene-Baumusterprüfsystem (HBPS) ist ein Regelwerk der Bundesgütegemeinschaft Kompost zur Feststellung von Kompostierungs- und Vergärungsverfahren als hygienisch geprüfte Baumuster. Zweck des Hygiene-Baumusterprüfsystems ist der Nachweis, dass die in Kompostierungs- bzw. Vergärungsanlagen eingesetzten Behandlungsverfahren im Hinblick auf die Anforderungen der Hygiene grundsätzlich geeignet und wirksam sind. Der Nachweis der grundsätzlichen hygienischen Wirksamkeit von Verfahren der biologischen Abfallbehandlung kann gemäß des Hygiene-Baumusterprüfsystems durch Baumusterprüfungen oder durch Konformitätsprüfungen erbracht werden (BGK, 2003).

Bei Anlagen zur Behandlung von Bioabfällen (Kompostierung, Vergärung) muss entsprechend § 3 Abs. 5 BioAbfV innerhalb von 12 Monaten nach Inbetriebnahme der Anlage eine „direkte Prozessprüfung“ gemäß Anhang 2 Nr. 2.2.1 BioAbfV durchgeführt werden. Bei Einsatz neuer Verfahren oder wesentlicher technischer Änderungen der Verfahren oder der Prozessführung ist diese Prüfung zu wiederholen. Die Anforderungen betreffen auch bestehende Anlagen, bei denen die zuständige Behörde anstelle der direkten Prozessprüfung eine Konformitätsprüfung nach den Vorgaben des Hygiene-Baumusterprüfsystems zugelassen hat (BGK, 2003).

Bei den RAL-Gütesicherungen für Kompost (RAL-GZ 251) und für Gärprodukte (RAL-GZ 245) sind nach BGK (2003) neben den durch Änderung der Betriebsgenehmigung festgestellten wesentlichen Änderungen auch solche Änderungen relevant, die sich aus Abweichungen von dem festgestellten Baumuster ergeben. Dies gilt insbesondere für diejenigen Anlagen, die keine direkte Prozessprüfung sondern eine Konformitätsprüfung durchgeführt haben. Abweichungen von dem festgestellten Baumuster führen zur Aberkennung des Gütezeichens.

In der Tabelle 4-1 sind die Beschreibungen von Baumusterkategorien nach dem Hygiene-Baumusterprüfsystem aufgeführt.

Tab. 4-1: Baumusterkategorien nach dem Hygiene-Baumusterprüfsystem (BGK, 2003)

Baumuster-Kat.	Verfahren	Beschreibung
1	Boxen- und Containerverfahren	Die Intensivrotte erfolgt in einem abgeschlossenen zwangsbelüfteten Raum. Kompostierungsanlagen betreiben in der Regel mehrere solche als Box, Container oder Rottezelle bezeichneten Module. Die Module können optional mit Umsetzaggregate betrieben werden. Die Prozesssteuerung erfolgt individuell für jede Box/Container.
2	Brikollare	Aufbereiteter Kompostrohstoff wird zu Presslingen verarbeitet und auf Platten gestapelt. Die Rotte verläuft statisch (d. h. ohne Umsetzung) in einer geschlossenen Halle.
3	Tunnel- und Zeilenverfahren	Die Intensivrotte findet in Tunnel ähnlichen „Silos“ statt. Bei der Tunnel- und Zeilenkompostierung können einzelne Segmente des Rottekörpers getrennt voneinander gesteuert werden. Bei nach oben offener Zeilenkompostierung findet normalerweise eine Umsetzung des Materials in Intervallen statt. Beim Tunnelverfahren sind die Zeilen nach oben verschlossen, Umsetzvorgänge sind optional.
4	Trommelverfahren	Eine Intensivrottephase findet in absätzig oder kontinuierlich betriebenen Rottetrommeln statt. Durch Drehbewegung der Trommel wird außerdem eine Materialdurchmischung und – zerkleinerung vorgenommen. Die Verweilzeit in der Trommel kann bis zu 7 Tagen betragen. Im Anschluss an die Behandlung in der Trommel findet in der Regel eine Mietenkompostierung statt.
5	eingehauste Mietenkompostierung	Die Kompostierung wird in geschlossenen Hallen durchgeführt. Als Mietenkörper werden i. d. R. Tafelmieten aufgebaut, die druck- oder saugbelüftet werden. Umsetzungen und Materialtransport erfolgen i. d. R. mittels automatischen Aggregaten.
6	offene und überdachte Mietenkompostierung	Kompostrohstoffe werden zu Dreiecks- oder Tafelmieten aufgebaut und mit oder ohne Überdachung kompostiert. Hierbei kommen unterschiedliche Umsetzaggregate zur Anwendung.
7	Miete eingehaust (Membranabdeckung)	Kompostrohstoffe werden im Freien zu Dreiecks- oder Tafelmieten aufgebaut und mit einer Folie abgedeckt. Die Mieten werden i. d. R. belüftet.
8	Vergärungsverfahren thermophil	Thermophile Verfahren können sowohl ein- oder zweistufig, nass oder trocken, kontinuierliche oder diskontinuierliche betrieben werden. Die mittlere Betriebstemperatur beträgt zwischen 50 °C und 55 °C. Eine zusätzliche Vor- oder Nachbehandlung ist nicht erforderlich.
9	Vergärungsverfahren mesophil	Grundsätzlich können sich mesophile Verfahren der gleichen Betriebsweise bedienen wie die thermophilen Verfahren. Die mittlere Betriebstemperatur beträgt rund 35 °C (Spanne: 32 °C bis 42 °C). Vor- bzw. Nachschaltung einer thermischen Behandlung bei ≥ 60 °C für einen Zeitraum von mindestens einer Stunde.

4.1 Kompostierung

Die Kompostierung von Siedlungsabfällen ist eine intensiviertere Form des natürlichen Abbaus von Pflanzenresten und tierischen Produkten in den obersten Bodenschichten und in Streuauflagen in großtechnischen Anlagen. Hierbei sind viele Organismen in Folge beteiligt (Bakterien, Pilze, höhere Einzeller, Nematoden, Insekten u. a.). Der entstehende Humus besteht aus aliphatischen und aromatischen Bausteinen mit zahlreichen funktionellen Gruppen und ist aufgrund seiner Struktur ein wichtiger Bestandteil für die Qualität der Bodenstruktur und für die Fruchtbarkeit eines Bodens (Senesi und Brunetti, 1996). Angaben der genauen Reaktionsgleichungen sind aufgrund des unspezifischen Ausgangsmaterials und der Vielzahl von Abbauschritten nicht möglich. Da nicht alle Stoffe im Kompost abbaubar sind bzw. die Verweilzeiten zu gering sind, endet der kontrollierte Rotteprozess mit einer Ansammlung von nicht vollständig umgewandelten Stoffen (z. B. Krogmann, 1994, Fischer et al., 2001).

Die Qualitätsanforderungen an die Komposte sind je nach Anwendungsgebiet sehr unterschiedlich. Nach der Bioabfallverordnung (BioAbfV, 2012) werden Qualitätskriterien für Komposte hinsichtlich der Gehalte an Schwermetallen wie z. B. Blei, Cadmium, Chrom, Kupfer, Nickel, Quecksilber und Zink festgelegt. Eine Deklaration der Gesamtgehalte an Nährstoffen sowie des löslichen Anteils an Stickstoff (N), Phosphor (P) und Kalium (K) ist bei gütegesicherten Komposten vorgeschrieben (BGK, 2012).

Verfahren der Kompostierung

Der allgemeine Kompostierungsverlauf in einer Kompostierungsanlage beinhaltet Schritte zur Auf- und Nachbereitung des Substrats sowie den eigentlichen Kompostierungsprozess. Dieser kann in Vor-, Haupt- und Nachrotte unterteilt werden (z. B. Krogmann, 1994, Krogmann und Körner, 2000, Fischer et al., 2001, Körner, 2009). Als Vorrotte wird der erste Teil der Intensivrotte bezeichnet, wenn er in einem separaten Technologieschritt erfolgt und im Wesentlichen der Hygienisierung dient. Die Hauptrotte folgt danach oder bezeichnet die Intensivrotte insgesamt. Sie gilt als beendet, wenn die wesentlichen Abbauvorgänge stattgefunden haben. Die anschließende Nachrotte umfasst hauptsächlich die Stabilisierung sowie die Reifephase.

In Deutschland ist bei Abfallanlagen nach der 4. und 30. Bundes-Immissionsschutzverordnung (4. BImSchV, 2013 und 30. BImSchV, 2009) mit einer Jahresdurchsatzkapazität von über 6.570 mg/a bis 87.600 mg/a ein förmliches (normales) Genehmigungsverfahren nach § 10 des Bundes-Immissionsschutzgesetzes (BImSchG, 2013) vorgeschrieben und unter 6.570 mg/a i. d. R. ein vereinfachtes Genehmigungsverfahren nach § 19 des Bundes-Immissionsschutzgesetzes (BImSchG, 2013), das fast regelmäßig eine Kompostierung in

geschlossenen Systemen vorsieht. Anforderungen im Hinblick auf eine Überdachung oder Einhausung der Anlagen hängen im Wesentlichen von der Art und Zusammensetzung der biogenen Abfälle sowie von der Lage der Flächen im Hinblick auf bebaute bzw. bewohnte Gebiete ab (Krogmann, 1994, Krogmann und Körner, 2000, Mertens, 2001).

Aufgrund einer gesteigerten biologischen Aktivität mit höheren Geruchsemissionen erfordert die Intensivrotte einen größeren technischen Aufwand im Vergleich zur Nachrotte. Aus diesem Grund werden die geschlossenen Systeme häufig nur für die Intensivrotte genutzt, während die Nachrotte in offenen Mieten stattfindet. Für die offene Betriebsweise wird in Deutschland meistens die Mietenkompostierung eingesetzt. Die Mieten werden in der Regel natürlich belüftet und die entstehende Abluft und das Abwasser entweichen in die Umgebung. Geschlossene Systeme hingegen ermöglichen eine Erfassung der Abluft und des Abwassers. Flüssige Emissionen können in Form von Sickerwasser und Kondenswasser entstehen, vor allem bei zu feuchten Substraten. Bei offenen Mieten kann zusätzlich das Eindringen von Niederschlägen zur Sickerwasserbildung führen. Kondenswasser fällt besonders bei zwangsbelüfteten Systemen mit Abluftefassung infolge der Abkühlung der warmen Prozessabluft beim Austritt aus dem Rottesystem an (z. B. Krogmann, 1994, Weißenfels, 2001, Scholwin, 2005, Körner, 2009).

Prozesswasser aus der Kompostierung in genehmigungsbedürftigen Anlagen muss nach der 4. Bundes-Immissionsschutzverordnung (4. BImSchV, 2013) in Deutschland erfasst und getrennt gesammelt werden. Die Erfassung und Behandlung des Abwassers ermöglicht eine Kontrolle im Hinblick auf die Verunreinigung natürlicher Gewässer und des Bodens. Es kann den Inhaltsstoffen entsprechend zur Befeuchtung der Substrate wiederverwendet oder einer Abwasseraufbereitung zugeführt werden. Ebenfalls nach der 4. Bundes-Immissionsschutzverordnung (4. BImSchV, 2013) dürfen in der Abluft bestimmte Emissionsgrenzwerte nicht überschritten werden. Durch die Behandlung der Abluft können Schadstoffe und schlecht riechende Stoffwechselprodukte des Rotteprozesses (wie Methyl-Mercaptane, Methyl-Sulfide, Amine und Ammoniak) verringert werden (z. B. Bidlingmaier und Grauenhorst, 1996, Heining, 1998, Dammann, 2005).

Vernachlässigt man die zusätzlichen Lösungs-, Transport- und Diffusionsvorgänge und betrachtet nur das Wachstum der Mikroorganismen bei der Kompostierung, kann zwischen diskontinuierlich (z. B. unbelüftete Mietenkompostierung oder Boxenkompostierung) und kontinuierlich betriebenen Systemen, also vollständig durchmischten Reaktoren, unterschieden werden (Finstein und Morris, 1975). Ein anderes Unterscheidungskriterium ist die Art der Bewegung des Substrats (Krogmann und Körner, 2000). Es werden die drei Varianten statisch, also nicht mehr bewegt nach Aufsetzen der Miete, kontinuierlich bewegt über längere

Intervalle und hin und wieder bewegt bzw. umgesetzt zur Homogenisierung, Auflockerung oder Belüftung unterschieden.

Für die Planung und den Bau einer Kompostierungsanlage gibt es also eine Vielzahl von Optionen und unterschiedlichen Verfahrensschritten. Das Simulationsprogramm berücksichtigt alle Verfahrensoptionen, die das Material betreffen - also nicht Verfahren der Abluft- oder Abwasserreinigung - und es wird von einem Reaktor bzw. einer Miete mit Raumkontinuität im Material ausgegangen.

4.2 Vergärung

Die Vergärung ist die mikrobielle Umsetzung organischer Substanzen unter anaeroben Bedingungen. Wie bei der Kompostierung ist auch bei der Vergärung die Angabe der genauen Reaktionsgleichungen aufgrund des undefinierten Ausgangsmaterials nicht möglich. Allgemein sind Abfälle für die Vergärung ungeeignet, die eine schlechte Mischbarkeit mit Wasser aufweisen, eine sehr heterogene Zusammensetzung oder einen hohen Anteil an Cellulose haben (z. B. Spendlin, 1991). Wie auch bei der Kompostierung enthält der Reststoff noch 30 % bis 50 % der ursprünglich vorhandenen organischen Substanz (z. B. Maurer und Winkler, 1980), von denen etwa 12 % holzige Komponenten aus Bioabfällen sein können (bifa-Umweltinstitut, 2010). Der Holzanteil kann aussortiert und getrocknet thermisch verwertet werden (Kern et al., 2010). Mit einem Heizwert von über 12 MJ/kg (Kern und Raussen, 2005, Gottschall et al. 2008) liegt der Wert bei mindestens 11 MJ/kg nach § 8 Absatz 3 des Kreislaufwirtschaftsgesetzes (KrWG, 2012), so dass zwischen stofflicher und energetischer Verwertung gewählt werden kann.

Im Gegensatz zur Kompostierung ist der Gewinn von Energie - vorrangig Methangas - das Hauptziel der Vergärung. Die Vergütungen und Definitionen hierzu sind in dem Gesetz für den Vorrang erneuerbarer Energien (EEG, 2012) geregelt.

Verfahren der Vergärung

Bei Vergärungsanlagen unterscheiden sich die Inputmaterialien je nach Anlagentechnik erheblich. Bei Feststoffgehalten von etwa 8 % bis 15 % Trockensubstanz wird von Nassvergärung gesprochen, bei höheren Feststoffgehalten ab 20 % Trockensubstanz von Trockenvergärung (z. B. Weiland, 2001b). Das Simulationsmodell berücksichtigt nur die Trockenverfahren, weshalb diese hier ausschließlich berücksichtigt werden.

Der Anlageninput bei Trockenverfahren besteht im Wesentlichen aus häuslichen und gewerblichen biogenen Abfällen. Grünabfälle und Gülle werden bei Trockenverfahren kaum verwertet (z. B. Emberger, 1993, Kern, 1999, Weiland, 2001b).

Bei Perkolationsverfahren wird das nach Durchlaufen des Materials entstandene Sickerwasser wieder zugegeben (z. B. Weiland, 2004, Kern et al., 2010). Die Vorteile sind die Durchfeuchtung des Materials mit wenig Frischwasserbedarf und die Energie- und Nährstoffrückführung.

Grundsätzlich unterscheidet man zwischen ein- und zweistufigen (Trennung der Hydrolyse und der Säurebildung von der Acetogenen- und Methanphase) und meso- und thermophilen Vergärungsverfahren (z. B. Weiland, 2001b, Widmann, 1999, Kern et al., 2010).

Ein einphasiger Reaktor stellt ein kompliziertes biochemisches System dar, denn die erzeugten Stoffwechselprodukte können für einzelne Mikroorganismengruppen toxisch sein und den Abbauvorgang verlangsamen. Eine Trennung der einzelnen Stufen macht den Gesamtprozess überschaubarer und regelbarer. Zweistufige Verfahren sind dadurch prozessstabiler, erfordern aber einen höheren baulichen und apparativen Aufwand (z. B. Emberger, 1993, Weiland, 2001b). Ausführliche Verfahrensvergleiche zur Vergärung von Bioabfall sind auch in Schön (1994), Gessler (1995), Scherer (1995) und Krull et al. (1995) zu finden.

Mesophil betriebene Anlagen werden etwa bei Temperaturen zwischen 30 °C bis 42 °C (auch 33 °C - 37 °C) betrieben. Die thermophile Vergärung findet etwa bei Temperaturen zwischen 50 °C und 60 °C (auch 55 °C - 60 °C) statt (z. B. Weiland, 2001b, BGK, 2003).

Wird der Gärreaktor mit dem abzubauenen Substrat befüllt und nach einer bestimmten Verweilzeit vollständig entleert, handelt es sich um einen diskontinuierlichen Prozess (Batchbetrieb). Im kontinuierlichen Betrieb wird ständig oder in kurzen Intervallen (quasi-kontinuierlich) frisches Substrat zugeführt und vergorenes Material entnommen. Durch die Parallelschaltung mehrerer diskontinuierlich betriebener Reaktoren, kann ein quasi-kontinuierlicher Betrieb eingestellt werden (z. B. Hofenk, 1984, Weiland, 2001b).

Die wesentlichen Produkte der Vergärung sind der Gärrückstand und das energetisch nutzbare Biogas. Der Gärrückstand kann entweder nachgegärt, kompostiert (ggf. zur Hygienisierung mit einer Heißrottephase) oder bei thermophiler Betriebsweise direkt verwertet werden. Das entstehende Faulgas enthält neben Kohlendioxid (CO₂: 25 Vol.-% - 55 Vol.-%) und Methan (CH₄: 45 Vol. % - 75 Vol.-%) noch andere Gase in geringen Mengen, vor allem Ammoniak (NH₃) und Schwefelwasserstoff (H₂S) aus den Proteinen und der Reduktion von Nitraten (NO₃⁻) und Sulfaten (SO₄²⁻) (FNR, 2009). Die Aufbereitung des Biogases richtet sich nach der Verwendung, wobei die aus der Deponiegas- und Klärgasreinigung und -verwertung bekannten Verfahren eingesetzt werden können. Aufgrund des hohen Wasser-

gehalts im Biogas ist mindestens eine Wasserdampfabscheidung (Kondensation) vor einer Nutzung durchzuführen. Die Gasproduktion beträgt im Allgemeinen 100 bis 150 m³/Mg FS Abfall bei einem mittleren Methangehalt von 60 Vol.-%, wobei 40 - 85 % der organischen Substanz abgebaut werden. Bei Substraten zur Energiegewinnung beträgt die Biogasproduktion durchschnittlich 600 m³ pro Tonne abgebauter organischer Trockensubstanz mit einem Methangehalt von 55 Vol.-% bis 70 Vol.-% (Weiland, 2001b).

Vor allem die Gase Wasserdampf, Kohlendioxid, Methan und Distickstoffoxid (Lachgas) gehören neben Ozon in der Troposphäre zu den klimawirksamen Treibhausgasen (Forster et al., 2007, Kehres et al., 2010). Der GWP-Wert (Global Warming Potential: Potentieller Beitrag eines Stoffs an der Erderwärmung relativ bezogen auf das Treibhauspotential von Kohlendioxid (GWP = 1)) von Methan beträgt 25 und von Distickstoffoxid 298 in einem Zeitraum von 100 Jahren (Forster et al., 2007). Ozonerstörend wirken u. a. leichtflüchtige Fluor- und Chlorkohlenwasserstoffe, die auch in Abfällen enthalten sind (Deipser und Stegmann, 1994, Deipser et al., 1996, Deipser und Stegmann, 1997a, Deipser und Stegmann, 1997b, Deipser, 1998). Die Emissionsreduzierung in die Atmosphäre sollte daher verfahrenstechnisch berücksichtigt werden.

Wie bei Kompostierungsanlagen gibt es auch für die Planung und den Bau einer Vergärungsanlage eine Vielzahl von Optionen und unterschiedlichen Verfahrensschritten. Das Simulationsprogramm berücksichtigt auch hier alle Verfahrensoptionen, die das Material betreffen - also nicht Verfahren der Abluft- oder Abwasserreinigung - und es wird von einem Reaktor mit Raumkontinuität im Material ausgegangen.

5 Fachspezifisches Grundwissen für die Modellentwicklung

Der Verlauf mikrobiologischer Prozesse wird entscheidend durch die Milieubedingungen bestimmt. Grundsätzlich wird in der biologischen Abfallbehandlung zwischen aeroben und anaeroben Bedingungen unterschieden, also zwischen Kompostierung und Vergärung.

Die wichtigsten Einflussfaktoren - und daher im Simulationsmodell zu berücksichtigen - sind das Verhalten der Mikroorganismen, die Temperatur, der Sauerstoffgehalt und die Substratstruktur, die Durchströmungseigenschaften des Materials bei Belüftung, der Wassergehalt, die Nährstoffe und der pH-Wert. Durch Änderung dieser Parameter kann der Prozess der biologischen Abfallbehandlung maßgeblich beeinflusst werden (z. B. Kämpfer und Weißenfels, 2001, Krogmann, 1994, Spendlin, 1991). Wichtig zur Charakterisierung des Materials sind auch das Gasbildungspotential und die Atmungsaktivität.

Die im Folgenden dargestellten Zusammenhänge sind daher im Simulationsmodell zu beachten und müssen in der Simulation wiedergegeben werden.

5.1 Mikroorganismen

Die Abbauprozesse der biologischen Abfallbehandlung sind auch in der Natur weit verbreitet. Durch kontrollierte und standardisierte Bedingungen können diese mikrobiologischen Abbauprozesse aber optimiert werden, was bei der Kompostierung und Vergärung mit unterschiedlicher Zielsetzung erreicht wird.

Die Umsetzungsprozesse erfolgen durch verschiedene Mikroorganismen, also mikroskopisch kleinen Lebewesen, wobei einzellige Organismen mit relativ einfacher biologischer Differenzierung überwiegen. Unterteilt werden die Mikroorganismen in Prokaryoten, also Organismen, deren Zellen keinen durch eine Membran getrennten Zellkern aufweisen wie Bakterien und Archaeen, die weder Cytoskelett noch Zellorganellen besitzen, und Eukaryoten wie Pilze und Algen, deren Zellen durch einen typischen Zellkern charakterisiert sind. Sie ernähren sich entweder autotroph, also ausschließlich von anorganischen Stoffen, heterotroph, also von Substanzen oder Stoffwechselprodukten anderer Organismen, oder mixotroph (beides). Je nach Sauerstoffbedarf wird zwischen Aerobiers und Anaerobiers unterschieden. Bezüglich des Verhältnisses zum Sauerstoff lassen sich vier Gruppen von Mikroorganismen unterscheiden (Schlegel, 1992):

Aerobiers und Anaerobiers

- strikt bzw. obligat aerobe Mikroorganismen
(auf Sauerstoff angewiesen)
- strikt bzw. obligat anaerobe Mikroorganismen
(nur im sauerstofffreien Milieu lebensfähig)
- fakultativ anaerobe Mikroorganismen
(können zur Energiegewinnung von Atmung
auf Gärung umschalten)
- aerotolerante Mikroorganismen
(können Sauerstoff zur Energiegewinnung nicht nutzen, aber tolerieren)

Hydrolyse des Substrats

Zu den wichtigsten Lösungs-, Transport- und Diffusionsvorgängen zählen die Hydrolyse des Substrats und der Gasaustausch bzw. die Gasversorgung des Systems. Die Hydrolyse kann, abhängig von den Milieubedingungen, bei aeroben und anaeroben oder chemischen Verfahren stattfinden (Kleber und Schlee, 1991, Kern et al., 2010). Wie in der Monod-Beziehung erfasst hängt die Geschwindigkeit der Hydrolyse von der Biomasse, also dem Gemisch aus Substraten, lebender und abgestorbener Mikroorganismen, Abbauprodukten und nicht abbaubaren Materialien, ab. Nähert sich die Geschwindigkeit der Hydrolyse dem Maximalwert, wird sie von Änderungen der Biomasse nur wenig beeinflusst. Bei schwer abbaubaren Substanzen dauert die Hydrolyse länger (Haug, 1980, Weiland, 1989).

Die meisten Biopolymere können relativ leicht und schnell gespalten werden. Nur die Lignocellulose enthaltenden Materialien werden langsam und unvollständig abgebaut, da das Lignin anaerob nur schwer gespalten werden kann und damit sehr stark hemmend auf die enzymatische Hydrolyse der Bestandteile eines Lignocellulose-Komplexes, der Polysaccharide, Cellulose und Hemicellulose, wirkt (Weiland, 1989, Fischer et al., 2001).

Methanogene Archaeen

Unter anaeroben Milieubedingungen werden die Substratpolymere durch Primärfermentierer zu Oligomeren und Monomeren (Zucker, Aminosäuren, Purine, Pyrimidine, Fettsäuren und Glycerin) hydrolysiert (Penger, 2012). Die entstandenen Monomere werden von der gleichen bakteriellen Gruppe zu kürzeren Fettsäuren, Succinat, Alkoholen und Lactat fermentiert (Abbildung 5-1). Einige dieser entstandenen Abbauprodukte wie Acetat, Wasserstoff und Kohlendioxid können direkt von methanogenen Archaeen zu Methan und Kohlendioxid umgesetzt werden. Aus den übrigen Intermediaten werden von Sekundärfermentierern Vorläuferverbindungen für die Methanogenese produziert (Penger, 2012).

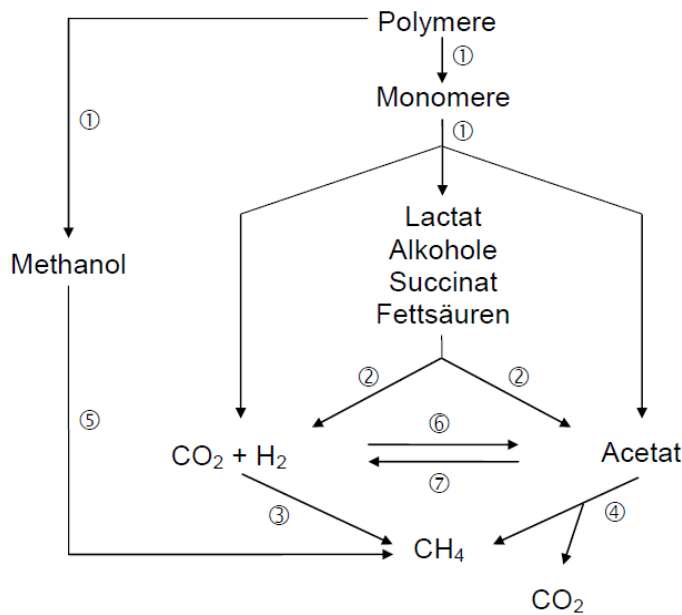


Abb. 5-1: Anaerober Abbau von organischem Material durch verschiedene Mikroorganismengruppen (1) Primärfermentierer, (2) Sekundärfermentierer, (3) hydrogenotrophe, (4) acetoklastische und (5) methylotrophe methanogene Archaeen, (6) homoacetogene Bakterien, (7) syntroph acetatoxidierende Bakterien (Penger, 2012)

Die hydrogenotrophen methanogenen Archaeen bilden Methan aus Kohlendioxid und Wasserstoff, die acetoklastischen methanogenen Archaeen setzen Acetat zu Methan und Kohlendioxid um und die methylotrophen methanogenen Archaeen verwenden Methanol als Substrat. Der homoacetogene Stoffwechselweg ($4 \text{ H}_2 + 2 \text{ CO}_2 \leftrightarrow \text{CH}_3\text{COOH} + 2 \text{ H}_2\text{O}$) ermöglicht die Bildung von Acetat aus Wasserstoff und Kohlendioxid (Schink, 1997). Die syntroph acetatoxidierenden Bakterien wiederum können Acetat zu Wasserstoff und Kohlendioxid in der Gegenwart von Wasser umsetzen.

Für das Simulationsmodell relevant sind vor allem die hydrogenotrophen, die acetoklastischen und die methylotrophen methanogenen Archaeen. Aber auch die homoacetogenen und syntroph acetatoxidierenden Bakterien werden berücksichtigt (Kapitel 6.1.3).

Organismen der Kompostierung

Der Kompostierungsprozess kann in mehrere, durch spezifische Temperaturen charakterisierte Phasen unterteilt werden (siehe auch Abbildung 7-14). Die drei Hauptphasen (Vorrotte, Haupt- bzw. Intensivrotte und Nachrotte), zu denen es zahlreiche Veröffentlichungen gibt (z. B. Glathe et al., 1985, Grabbe und Schuchardt, 1993, Kuchta et al., 1995, Rüprich, 1990, Gieß, 1994, Pöhle, 1994, Fischer et al., 2001), sind:

Phase 1: Vorrotte

Die erste Phase (Anlaufphase) des Prozesses wird von mesophilen Mikroorganismen mit einem tolerierten Temperaturbereich von 10 °C bis 45 °C (siehe Tabelle 5-1) bestimmt. Diese Phase dauert unter optimalen Bedingungen etwa 12 bis 24 Stunden. Mit steigenden Temperaturen und nach einer beschleunigten Vermehrung sterben diese ab oder bilden Dauerformen (Sporen). Gleichzeitig wachsen die thermophilen Mikroorganismen, deren tolerierter Temperaturbereich zwischen 25 °C und 80 °C (siehe Tabelle 5-1) liegt.

Phase 2: Haupt- bzw. Intensivrotte

In der zweiten Phase nimmt die Anzahl der thermophilen Mikroorganismen zu, denn über 45 °C hinaus vermehren sich diese zügig, wobei der optimale Temperaturbereich bei etwa 50 °C bis 55 °C (siehe Tabelle 5-1) liegt. Bei weiterer Temperaturerhöhung nimmt das Wachstum ab, weil die Mikroorganismen bei zu hohen Temperaturen (> 80 °C) nicht mehr aktiv sein können (Strom, 1985, Krogmann, 1994).

Phase 3: Nachrotte

Durch die Abnahme der thermophilen Mikroorganismen kühlt das Material langsam ab und unterhalb von etwa 45 °C treten erneut mesophile Mikroorganismen auf.

Es findet also eine temperatur- und nährstoffabhängige Sukzession von Mikroorganismen statt, weshalb das Animpfen des Rohkomposts oder die Rückführung von Fertigkompost zur Anreicherung mit Mikroorganismen in der Regel keine zeitliche Verkürzung des Prozesses bewirkt.

Kompost-Rottegrad

Die Verwendung von Kompost ist von seinem Rottegrad (Abbaugrad) abhängig. Bewertet wird damit der Grad des Abbaus verfügbaren Substrats, erkennbar an der Temperaturabnahme. Unterschieden werden nach BGK (2012) bis zu fünf Rottegrade (siehe auch Abbildung 7-14):

- Rottegrad I bis II: Kompostrohstoff (mechanisch aufbereiteter Müll vor der Rotte)
- Rottegrad III: Frischkompost (hygienisierter und in Rotte befindlicher Kompost)
- Rottegrad IV: Fertigkompost (hygienisierter, in später Rotte befindlicher Kompost)
- Rottegrad V: Spezialkompost (weiterbehandelter Frisch- oder Fertigkompost)

Ein zu frischer Kompost hemmt das Wachstum von Pflanzen, da die Mikroorganismen beim Abbau der leicht abbaubaren Stoffe die Wurzelbildung behindern.

Organismen der Vergärung

Im Unterschied zur Kompostierung sind bei der Vergärung vergleichsweise wenige Organismengruppen an dem Prozess beteiligt, die zudem größtenteils gleichzeitig vorhanden sind. Die Abbauprodukte sind also gleichzeitig die Edukte anderer Bakterienarten (KWS, 2007). Eine Animpfung eines neu beschickten Reaktors mit Material aus einem gut eingefahrenen Prozess ist daher sinnvoll, vor allem wenn Methan als Zielprodukt des Stoffwechsels zügig erzeugt werden soll.

Die wesentlichen vier Stufen der Vergärung, die hier ausführlicher beschrieben werden, da anaerobe Abbauprozesse fast immer - also auch bei der Kompostierung - stattfinden, können im Einzelnen wie folgt charakterisiert werden (z. B. Braun, 1982, Koepp-Bank, 1989, Zehnder, 1989, Sahm, 1981, Sahm, 1990, Schlegel, 1992, Emberger, 1993, Thomé-Kozmiensky, 1995, Kämpfer und Weißenfels, 2001):

1. Stufe: Hydrolyse (hydrolytische Phase)

In dieser Stufe werden die Makromoleküle (Polysaccharide und andere Kohlenwasserstoffe, Proteine und Fette) in ihre niedermolekularen Bestandteile durch extrazelluläre Enzyme von fakultativ und strikt anaeroben Mikroorganismen aufgespalten. Es entstehen überwiegend einfache wasserlösliche Monomere und Dimere. Die Hydrolyse kann bei schwer angreifbaren Biopolymeren wie Cellulose, Lignocellulose oder Lignin geschwindigkeitsbestimmend sein. Bei der Trockenfermentation stellt die gesamte Hydrolyse den geschwindigkeitsbestimmenden Schritt dar (Schön, 1994).

2. Stufe: Acidogenese (acidogene Phase)

Die in der ersten Stufe gebildeten Mono- und Dimere werden von den gleichen Mikroorganismen weiter verwertet. Hauptsächlich gebildet werden die Carboxylsäuren Acetat, Propionat (Hauptendprodukt) und Butyrat, aber auch Milchsäuren und Alkohole. In geringen Mengen entstehen Wasserstoff und Kohlendioxid. Je höher der Wasserstoff-Partialdruck ist, desto weniger reduzierte Produkte wie Essigsäure oder Wasserstoff werden gebildet (siehe auch Wasserstoffhemmung). Werden die entstandenen Säuren nicht weiter abgebaut, übersäuert das Material und Mikroorganismen werden bei $\text{pH} < 4$ gehemmt. Das Temperaturop-

timum liegt bei etwa 30 °C und der optimale pH-Wert bei etwa 6 (5,3 - 6,7) (Mudrack und Kunst, 1991).

Da an der Hydrolyse (1. Stufe) dieselben Organismen beteiligt sind wie an der Acidogenese (2. Stufe), können diese beiden Phasen theoretisch zusammen durchgeführt werden. Es ist jedoch sinnvoll, diese beiden Prozesse zu trennen, da die Hydrolyse bei hochmolekularen Verbindungen der geschwindigkeitsbestimmende Schritt ist.

Propionsäure, Hauptendprodukt der Acidogenese

Die Propionsäuregärung ist der mikrobielle Abbau von Glucose ($C_6H_{12}O_6$) oder Lactat zu Propionsäure (C_2H_5-COOH) als Hauptendprodukt der Acidogenese. Propionsäure kann auf zwei unterschiedlichen Wegen gebildet werden: von Propionsäurebakterien, die Glucose oder Lactat als C-Quelle verwerten können (Propionat-Succinat-Weg) und von Mikroorganismen, die nur Lactat als C-Quelle nutzen können (Acrylat-Weg) (Lexikon der Chemie, 2000).

3. Stufe: Acetogenese (acetogene Phase)

In der Acetogenese (Essigsäurebildung) werden die gebildeten Säuren und Alkohole zu Essigsäure, Wasserstoff und Kohlendioxid weiter abgebaut. Diese Reaktionen können jedoch nur dann exotherm verlaufen, wenn der Wasserstoff-Partialdruck niedrig ist (siehe auch Wasserstoffhemmung). So kann Propionat nur verwertet werden, wenn der Wasserstoff-Partialdruck in der Gasphase unter 0,1 bar sinkt. Ethanol kann nur bei einem Wasserstoff-Partialdruck unter 0,15 bar zu Essigsäure und Wasserstoff abgebaut werden. Damit der Prozess nicht zum Erliegen kommt, muss der hier gebildete Wasserstoff also weiter umgesetzt werden.

4. Stufe: Methanogenese (methanogene Phase)

Die strikt anaeroben Methanbildner, die zu den Archaeen gehören und somit zu den Prokaryoten zählen und weder ein Cytoskelett noch Zellorganellen besitzen, setzen die Essigsäure (CH_3COOH) und das Kohlendioxid (CO_2) mit molekularem Wasserstoff (H_2) zu Methan (CH_4) um. Es wird jedoch nur ein Teil des gebildeten Kohlendioxids verwertet, entsprechend der vorhandenen Menge an Wasserstoff. Das Temperaturoptimum liegt zwischen ca. 35 °C bis 45 °C (Zehnder, 1978) und der optimale pH-Wert bei etwa 7 (6,6 - 7,8) (Präve et al., 1994). Es gibt aber auch thermophile Methanbildner, die ihr Temperaturoptimum zwischen 55 °C und 65 °C haben (Spendlin, 1991). Auf plötzliche Temperaturänderungen (> 3 °C) reagieren

die Methanbildner, besonders die thermophilen, sehr empfindlich (Winter, 1985). Die Methanbildner haben lange Generationszeiten und sind daher geschwindigkeitsbestimmend. Die durchschnittliche Generationszeit beträgt 3 Tage (z. B. Seyfried und Saake, 1986).

Wasserstoffhemmung

Die strikt anaeroben Methanbildner und die Wasserstoff produzierenden Mikroorganismen sind voneinander abhängig. Die Methanbildnern verwerten den produzierten Wasserstoff direkt, so dass der Wasserstoff-Partialdruck sinkt. Das wiederum ist für die Wasserstoff produzierenden Mikroorganismen vorteilhaft, denn ihr Wachstum wird durch einen zu hohen Wasserstoff-Partialdruck stark gehemmt (Spendlin 1991, Schlegel, 1992). Im Simulationsmodell wird eine hemmende Wirkung von Wasserstoff bei einem Wasserstoff-Partialdruck von über 0,15 bar und höhere und niedrigere Drücke aufgrund einer ungleichmäßigen Druckverteilung angenommen und berücksichtigt (Kapitel 6.2.5).

Wachstumskurve einer statischen Bakterienkultur

Bei diskontinuierlich betriebenen Verfahren setzt sich die Wachstumskurve aus einer Anlauf- oder Lag-Phase, einer exponentiellen logarithmischen Phase, einer stationären Phase und einer Absterbe-Phase zusammen (Schlegel, 1992). Diese typische Wachstumskurve hat einen sigmoiden Verlauf und ist bekannt als die „Wachstumskurve einer statischen Bakterienkultur“ (Abbildung 5-2). Sie lässt sich auf Abbauprozesse in mikrobiologisch abbaubaren Abfällen wie der Kompostierung und Vergärung übertragen, wenn Diffusions-, Transport- und Lösungsprozesse eine untergeordnete Rolle spielen.

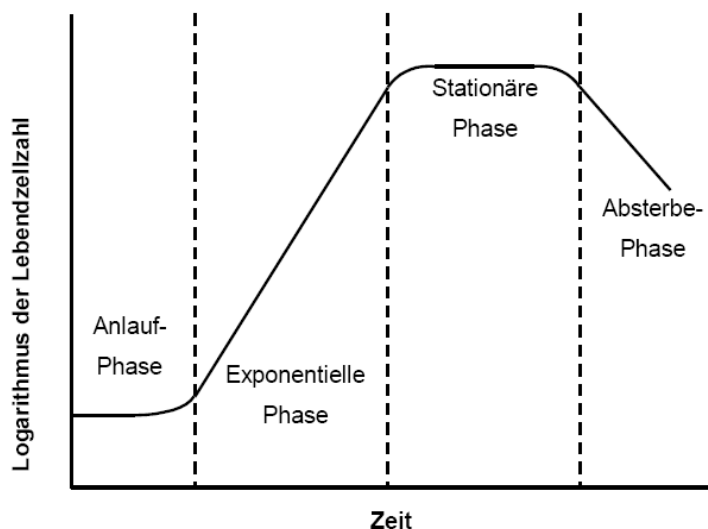


Abb. 5-2: Wachstumskurve einer statischen Bakterienkultur (Schlegel, 1992)

Die Anlaufphase ist in Abhängigkeit von den äußeren Bedingungen unterschiedlich lang und stellt die Phase dar, in der sich die Mikroorganismen auf das Substrat einstellen müssen. Es folgt die Phase des exponentiellen Wachstums, in der die Teilungsrate der Mikroorganismen maximal ist. Die exponentielle Phase ist abhängig von den spezifischen Milieubedingungen wie pH-Wert, Temperatur, Wassergehalt, Belüftung, Verwertbarkeit einzelner Substrate und Nährstoffverhältnisse und den entsprechenden Anforderungen einzelner Mikroorganismenarten. In der folgenden stationären Phase bleibt die Mikroorganismenanzahl konstant, das heißt, dass einige Mikroorganismen sterben, weitere neu entstehen und Speicherstoffe verbraucht werden. Verursacht wird die stationäre Phase meistens durch Substratbegrenzung oder durch eine zu hohe Populationsdichte, aber auch durch einen zu geringen Sauerstoff-Partialdruck oder durch die Ansammlung toxischer Stoffwechselprodukte. In der anschließenden Absterbephase ist die Anzahl der absterbenden Mikroorganismen höher als die der sich neu bildenden Mikroorganismen (Schlegel, 1992, Brock und Madigan, 1991, Menkel, 1992).

Der Kurvenverlauf ist übertragbar auf die Abbautätigkeit der Mikroorganismen und damit der Menge abgebauten Substrats, wobei der Auf- und Abbau von Mikroorganismenzellen inbegriffen ist. Bei sinkender Lebendmikroorganismenzahl am Ende findet kaum noch Substratumsatz statt, weshalb die entsprechende Summenkurve abgebauten Substrats dann stagniert.

Monod-Kinetik bei kontinuierlich betriebenen Kulturen

Bei kontinuierlich betriebenen Kulturen lässt sich die Wachstumsgeschwindigkeit nach der Monod-Beziehung darstellen (Gleichung 5-1). Die Monod-Kinetik ist ein Geschwindigkeitsmodell zur Beschreibung der Abhängigkeit der spezifischen Wachstumsrate von der limitierenden Substratkonzentration. Sie ergibt sich aus der Betrachtung des mikrobiellen Wachstums als Resultat aller in der Zelle ablaufenden Enzymreaktionen.

Die Wachstumsrate kontinuierlich betriebener Kulturen kann prinzipiell auch auf Abbauvorgänge in der mikrobiologischen Abfallbehandlung wie der Kompostierung und Vergärung übertragen werden, denn aufgrund von Diffusions-, Transport- und Lösungsprozessen wie der Hydrolyse werden ständig Substrate nachgebildet bzw. neu zur Verfügung gestellt.

$$\mu = \mu_{max} \cdot \frac{c_S}{K_S + c_S}$$

μ : Wachstumsrate (1/Zeit)

μ_{max} : maximale Wachstumsrate (1/Zeit)

K_S : Substratkonzentration, bei der die Wachstumsgeschwindigkeit ihren halben maximalen Wert erreicht (Masse/Volumen)

c_S : Substratkonzentration (Masse/Volumen)

Gl. 5-1: Wachstumsgeschwindigkeit einer kontinuierlich betriebenen Bakterienkultur

Ist die Substratkonzentration (c_S) wesentlich höher als die Substratkonzentration, bei der die Wachstumsgeschwindigkeit ihren halben maximalen Wert erreicht hat (K_S), so liegt eine Reaktion nullter Ordnung vor, d. h. die Wachstumsgeschwindigkeit (μ) der Mikroorganismen ist unabhängig von der Substratkonzentration und nahezu maximal. Ist die Substratkonzentration (c_S) wesentlich kleiner als K_S , so liegt eine Reaktion erster Ordnung, also eine exponentielle Wachstumsgeschwindigkeit vor, was bedeutet, dass die Wachstumsgeschwindigkeit der Mikroorganismen (μ) abhängig von der Substratkonzentration (c_S) ist (Lexikon der Chemie, 2000). Nicht erfasst wird die spezifische Abfolge von Mikroorganismenarten (z. B. Sukzession bei der Kompostierung) oder die unterschiedlichen Mikroorganismenarten in den unterschiedlichen Stufen der Vergärung.

5.2 Temperatur

Bei biologischen Abbauprozessen, so auch bei der Kompostierung und Vergärung, wird Wärme durch die mikrobiellen Abbauprozesse freigesetzt und teilweise wird Energie für Reaktionen und für den Zellstoffwechsel benötigt. Der innerhalb einer Organismenzelle stattfindende oxidative Abbau von monomeren Komponenten erzeugt Energie. Diese wird jedoch nur teilweise von den Organismen für die Stoffwechsellätigkeit, Wachstum und Vermehrung verbraucht. Die überschüssige Energie, die sich während des Abbauprozesses verändert, wird daher in Form von Wärme freigesetzt (z. B. Schlegel, 1992, Krogmann, 1994, Krogmann und Körner, 2000). Welche konkreten Materialtemperaturen daraus resultieren, hängt von der eventuell vorhandenen Belüftung und Isolierung (Anfangs- und Umgebungstemperatur) des Systems sowie von den Eigenschaften des zu behandelnden Materials und dessen Masse ab. Bei einer Umgebungstemperatur von mindestens 10 °C - 15 °C und einer Substrattemperatur von bis zu ca. 75 °C sind immer ausreichend Organismen vorhanden, die einen Abbau mehr oder weniger schnell vollziehen (Körner et al., 1999). Da sich organische Abfälle wegen der hohen Porosität und der geringen Wärmeleitfähigkeit der Luft bei Wassergehalten um 50 Gew.-% wie ein Dämmstoff verhalten, kann es aber auch einen

Wärmestau (Farkasdi, 1961a) geben mit einem Anstieg der Materialtemperatur von bis zu 85 °C oder sogar 90 °C. Im Extremfall kann es zur Selbstentzündung kommen (Buggeln und Rynk, 2002). Die Mikroorganismen sterben aber bei zu hohen Temperaturen im Normalfall ab, wodurch es zu einer Temperaturenniedrigung kommt und sich der Prozess wieder stabilisiert.

Im Folgenden werden die Temperatureinflüsse aufgrund ihrer Wichtigkeit differenzierter dargestellt.

Temperaturtoleranzen

Die Mikroorganismen in der biologischen Abfallbehandlung können für die unterschiedlichen Verfahren der Kompostierung und Vergärung in tolerierte Temperaturbereiche klassifiziert werden. Hinsichtlich der tolerierten Temperaturgrenzen werden die Mikroorganismen in psychro-, meso- und thermophile Arten eingeteilt (z. B. Schlegel, 1992, Helfer und Merrettig-Bruns, 2001, Krämer, 2007) (Tabelle 5-1):

Tab. 5-1: Temperaturtoleranzen verschiedener Mikroorganismenarten (Glathe et al., 1985)

	Minimum (°C)	Optimum (°C)	Maximum (°C)
psychrophil	0 – 10	15 – 20	25 – 30
mesophil	10 – 15	25 – 35	35 – 45
thermophil	25 – 45	50 – 55	75 – 80

Die Temperatur kann ggf. entsprechend der gewünschten Mikroorganismen-Vergesellschaftung (Actinomyceten, Hefen, Pilze, Algen, Prokaryoten u. a.) eingestellt werden. Aufgrund der Toleranzen und Mikrohabitate sind die Temperaturstufen „psychrophil“ (Nennwert 20 °C), „mesophil“ (Nennwert 35 °C) und „thermophil“ (Nennwert 55 °C) jedoch nur Richtwerte, d. h. auch Zwischentemperaturen ermöglichen Mikroorganismen-Vergesellschaftungen der anderen Temperaturbereiche.

Temperaturen bei der Kompostierung

Hoppenheidt und Wallnöfer (1995) geben an, dass bei der aeroben Behandlung etwa die Hälfte der frei werdenden Energie als Wärme abgegeben wird und der Rest als Energiequelle für den Zellstoffwechsel dient. Diese wird nach dem Absterben der Mikroorganismen durch den Abbau freigesetzt und führt so ebenfalls zur Wärmeentwicklung.

Es muss zudem auch bezüglich der Temperaturentwicklung zwischen diskontinuierlichen, kontinuierlichen und quasi-kontinuierlichen Prozessen unterschieden werden. Während bei den diskontinuierlich betriebenen Verfahren die Temperatur von dem mesophilen in den thermophilen Bereich steigt und dann wieder abfällt, entfällt bei den kontinuierlich betriebenen Prozessen häufig der mesophile Temperaturanstieg am Anfang. Bei kontinuierlich betriebenen Prozessen kann die Abbaurate auch dadurch höher sein (Finstein und Morris, 1975, Haug, 1980).

Kranert (1988) stellte in Versuchen mit Klärschlamm und temperaturgesteuerter Belüftung fest, dass bei höheren Temperaturen im Rottegut verbunden mit einer niedrigeren Belüftung, bezogen auf den verbrauchten Sauerstoff, mehr Energie freigesetzt wird. Dies wird mit einer geänderten Mikroorganismenpopulation begründet, die gleichzeitig andere chemische Verbindungen abbaut. Bei niedrigeren Temperaturen wird bezogen auf den verbrauchten Sauerstoff weniger Wärme freigesetzt, was wiederum mit einer geänderten Mikroorganismenpopulation begründet wird. Insgesamt zeigen die Versuche von Kranert (1988) mit Klärschlamm den typischen Temperaturverlauf einer Batch-Kultur, also mit einer ausgeprägten exponentiellen Phase, in der die besonders leicht abbaubaren Stoffe abgebaut werden.

Mudrack und Kunst (1991) definieren einen Stoff als biologisch leicht abbaubar, wenn in der Biomasse alle für diesen Stoffwechselweg spezifischen Enzyme in ausreichender Konzentration vorhanden sind. Nakasaki et al. (1987b) zeigten, dass im Rotteverlauf zunächst die leicht abbaubaren Substanzen (z. B. Zucker, Fette, Stärke, Proteine, Hemicellulosen und Cellulose) und später die schwerer abbaubaren Substanzen (z. B. Lignin, Wachse, Harze, Gerbstoffe und hochmolekulare Huminstoffe) abgebaut werden. Die Mischpopulation der Mikroorganismen ändert sich dabei.

Temperaturen bei der Vergärung

Die bei der Vergärung aktiven Organismengruppen haben unterschiedliche und jeweils schmale Temperaturoptima (Tabelle 5-1). Die Temperaturen bei der Vergärung sind also ein Kompromiss zwischen den Optima der beteiligten Mikroorganismen und der Energiebilanz der Vergärung (Faulstich et al., 1995, Spendlin, 1991), denn die Temperatur wird in der Regel durch Isolierungen und aktives Beheizen eingestellt.

Das Temperaturoptimum der versäuernden Bakterien liegt bei etwa 30 °C (Mudrack und Kunst, 1991). Die meisten Methanbildner haben ein Temperaturoptimum bei 35 °C - 45 °C, also im mesophilen Bereich (Zehnder, 1978). Anaerobe Versuche zur Sickerwasserreinigung zeigten, dass die Abbauraten der Methanbildner unterhalb von 20 °C nahezu mit den optimalen Temperaturbereichen vergleichbar sind, wenn eine ausreichend lange Adaptationsphase

vorliegt (Mennerich, 1988). Im thermophilen Temperaturbereich reagieren die Methanbildner auf plötzliche Temperaturänderungen sehr empfindlich. Im mesophilen Bereich können bei der Vergärung Schwankungen von ± 3 °C noch toleriert werden (Winter, 1985).

5.3 Sauerstoffgehalt und Substratstruktur

Für die biologische Abfallbehandlung wie der Kompostierung und Vergärung sollte das Substrat materialspezifisch ausreichend zerkleinert werden, um eine möglichst große Angriffsfläche und damit Abbaueffizienz für die Mikroben zu erhalten. Dabei ist der Zerkleinerungsgrad bei der Vergärung im Allgemeinen deutlich höher als bei der Kompostierung, da die Durchlüftbarkeit nicht beachtet werden muss. Für die Kompostierung werden von Golueke (1977) für holzige Materialien Partikelgrößen $< 0,01$ m und für Lebensmittel Partikelgrößen $> 0,025$ m empfohlen, damit die Durchlüftbarkeit des Substrats noch gewährleistet ist. Partikelgrößen $> 0,01$ m vermindern jedoch den Sauerstofftransport zum Substrat, so dass die Prozesskinetik wesentlich beeinträchtigt wird. Partikelgrößen mit einem Radius $< 0,001$ m sind klein genug, um eine Limitierung der Prozesse durch zu geringe Sauerstoffdiffusion zu vermeiden (Haug, 1980).

Sauerstoff kann durch aktive Belüftung (Saug- und/oder Druckbelüftung), durch natürliche Belüftung (Diffusion und Konvektion) und zu einem geringen Teil auch durch Umsetzen des Substrats eingetragen werden, wobei es jedoch immer zur Ausbildung mehr oder weniger ausgeprägter Sauerstoff-Gradienten kommt, denn in Partikeln ab $0,001 - 0,002$ m Größe sind anaerobe Nischen zu erwarten (Golueke, 1977).

Trotz ausreichender Belüftung können daher in einem heterogenen grobkörnigen Material wie Bioabfall und innerhalb der Substratpartikel anaerobe Mikrohabitate entstehen, in denen als Endprodukte eines anaeroben Stoffwechsels geruchsintensive niedermolekulare Carbon-säuren, Carbonylverbindungen und Alkohole entstehen (z. B. Pöhle, 1994, Kuchta et al., 1995, Heining, 1998, Kobelt, 1996).

Haug (1980) stellte fest, dass bei passiv belüfteten Mieten durch den „Kaminzugeffekt“ (natürliche Konvektion) die wirksame Belüftung erfolgt und das Wenden des Materials vorrangig dem Erhalt des freien Porenvolumens dient. Partikel mit einem Durchmesser zwischen $0,002$ m und $0,02$ m reichen aus, um die natürliche Konvektion und den stöchiometrischen Sauerstoffbedarf von Mieten mit einer Höhe von 1 m bis 3 m zu decken.

Eine Kompostmiete mit unzureichender Sauerstoffversorgung kann durch tägliches Wenden wieder aerob werden. Die Belüftung durch Oberflächendiffusion, also ohne Umlagerung, ist gering und wirkt nur bis zu einer Tiefe von $0,05$ m bis $0,10$ m. Der Belüftungsbeitrag zu einer Kompostmiete liegt daher unter 5% (Poincelot, 1977).

Sauerstoffversorgung bei der Kompostierung

Bei der Kompostierung müssen gleichzeitig genügend Wasser und Luftsauerstoff zur Verfügung gestellt werden (siehe Kapitel 5.5). Dadurch ergibt sich ein Optimierungsproblem, denn die für den Sauerstoffgehalt optimierte Luftzufuhr kann zum Austrocknen des Komposts führen, wodurch Stoffwechselprozesse zum Erliegen kommen können. Ein zu hoher Wassergehalt kann wiederum zu unerwünschten anaeroben Verhältnissen führen.

Finstein et al. (1986) beschreiben, dass sich das Verhältnis aus gebildetem Kohlendioxid und verbrauchtem Sauerstoff während des Kompostierungsprozesses ändern kann, weil sich der Oxidationszustand des Substrats und die Mikroorganismen verändern. Sauerstoffmangel kann das Verhältnis durch fermentative Kohlendioxidbildung ebenfalls verschieben. Bedingt durch den großen Unterschied des Diffusionskoeffizienten von Sauerstoff in Gas und Wasser kann es zu anaeroben Zonen kommen, auch wenn in den Makroporen ausreichend Sauerstoff vorhanden ist (Finstein et al., 1986). Weiterhin geben Finstein et al. (1986) und Bach et al. (1984) an, dass auch Reaktionen von Kohlendioxid und Ammonium/Ammoniak zu einer Verschiebung des Verhältnisses von gebildetem Kohlendioxid und verbrauchtem Sauerstoff führen können.

Für eine ausreichende Sauerstoffversorgung ist zudem die Substratstruktur von größter Bedeutung. Wichtige Strukturparameter sind das freie Porenvolumen, welches 20 - 30 Vol.-% betragen sollte, die Partikelgrößen und deren Festigkeit (Bidlingmaier, 1983, Golueke, 1977, Krogmann, 1994). Die den Kompost verlassende Abluft kann durch zu geringen Substratkontakt noch Sauerstoffgehalte zwischen 5 Vol.-% (Strom et al., 1980) und 18 Vol.-% (de Bertoldi et al., 1983) aufweisen.

Sauerstoffgehalt bei der Vergärung

Für das Wachstum und die Produktivität der Mikroorganismen bei der Vergärung ist die Abwesenheit von Sauerstoff erforderlich. Sauerstoff führt jedoch nicht sofort zum Absterben bzw. zu einer irreversiblen Hemmung der Methanbildner, denn sie können in aerober Umgebung kurze Zeit überleben (Kiener und Leisinger, 1983, Kaltschmitt und Hartmann, 2001). Der kurzzeitige aerobe Abbau kann sogar für die Vergärung vorteilhaft sein, da günstigere Randbedingungen für die nachfolgende Methanbildung geschaffen werden (Spendlin, 1991).

Auch eine kontinuierliche geringe Luftzufuhr z. B. bei Undichtigkeiten des Reaktors führen nicht zwangsläufig zu Störungen der Vergärung, da der Sauerstoff von fakultativ anaeroben Mikroorganismen schnell veratmet wird (Faulstich et al., 1995).

5.4 Durchströmungseigenschaften

Aus der Strömungs- und Trocknungstechnik ist bekannt, dass eine homogene Durchströmung von ungebundenen Feststoffen in der Realität nicht der Fall ist (Fortes und Okos, 1980, Krischer und Kast, 1992). Qualitative Beobachtungen der Feuchte- und Temperaturverteilungen sowie der Gasströmungen in Simulationen des Kompostierungsprozesses zeigen Bereiche, die erheblich intensiver durchströmt werden als andere (Scholwin, 2005). Vermutlich können die Ergebnisse von Durchströmungsversuchen, die von Lyczkowski (1982) an Kugelpackungen ermittelt wurden, auf die Durchströmung organischer Abfälle weitgehend übertragen werden (Scholwin, 2005). Demzufolge kann angenommen werden, dass sich auch bei der biologischen Abfallbehandlung ein Strömungsprofil ausbildet. Die Verteilung der Strömungsgeschwindigkeit ist bei einer angenommenen Kugelpackung von dem wirksamen Korndurchmesser, dem Wandabstand, dem durchströmten Radius bzw. Durchmesser und dem Gesamtvolumenstrom des Gases abhängig (Scholwin, 2005). Die höchsten Strömungsgeschwindigkeiten und damit die größten Luftmengenströme sind im Abstand etwa eines Korndurchmessers von der Wand zu erwarten. Über diese korngroßenbedingte bevorzugte Randströmung hinaus werden in Abfällen die Inhomogenität, die örtliche Verteilung von Feststoffen, deren Lagerungsdichte und Wassergehalt einen Einfluss auf die Durchströmung haben, die nach bisherigen Kenntnissen aber nicht erfasst werden können (Scholwin, 2005). Um die Randgängigkeit zu berücksichtigen, hat Das (1995) in seinem raumdiskreten Modell für den Kompostierungsprozess die Luftmassenströme in Materialabschnitten, die an der Behälterwand angeordnet sind, erhöht.

Für die Vergärung sind die Durchströmungseigenschaften des Materials hinsichtlich des Gasaustauschs und Stofftransports relevant. In speziellen Verfahren wie dem Perkolationsverfahren sind die Strömungsbedingungen für das Wasser durch das Material für einen optimalen Stoffaustausch besonders wichtig (Weiland, 2001b).

5.5 Wassergehalt

Der Wassergehalt ist in der biologischen Abfallbehandlung wie der Kompostierung und Vergärung besonders zu beachten, da bei zu großer Trockenheit mikrobiologische Abbauvorgänge nicht mehr stattfinden und bei zu hohem Wassergehalt Vernässungen mit anaeroben Zonen und Sickerwasser entstehen können (Fischer et al., 2001). Aufgrund optimaler Wassergehalte für mikrobiologische Abbauvorgänge sollte durch Wasserzugabe oder Wasserverlustkontrolle der Wasseranteil im Material eingestellt werden. Die Wasserzugabe kann z. B. durch natürlichen Regen oder künstliche Beregnung und Wasserzugabe erfolgen. Aber

auch durch Kondensat- oder Sickerwasserrückführung kann einer Vertrocknung vor allem wegen Verdunstung vorgebeugt werden (Krogmann, 1994, Weißenfels, 2001).

Mit zunehmendem mikrobiologischen Abbau steigt der Wasseranteil durch Abnahme der Trockensubstanz relativ an. Durch die Wasserbildung bei mikrobiologischen Abbauprozessen (metabolisches Wasser) nimmt der Wassergehalt absolut zu.

Wasser ist in biogen-organischen Abfällen auch in vielfältiger Form gebunden z. B. durch Oberflächenkräfte, Kapillarkräfte, Bindungskräfte über Haupt- und Nebervalenzen und Wechselwirkungskräfte in Lösungen und kolloidalen Systemen (Kröll und Kast, 1989). Der Wassergehalt von Bioabfällen liegt im Allgemeinen für Lebensmittelabfälle im Bereich zwischen 40 Gew.-% und 75 Gew.-% und zwischen 40 Gew.-% und 85 Gew.-% für Grünabfälle. Bei Gewerbeabfällen ist häufig mit noch feuchteren Substraten zu rechnen (Bidlingmaier, 1983).

Da das Wachstum der Mikroorganismen nur in wässriger Lösung stattfindet, muss die Oberfläche des abzubauenen Substrats von Wasser umhüllt sein. Während der minimal zu tolerierende Wassergehalt von dem Wasserbedarf der Mikroorganismen abhängt, wird der maximal zu tolerierende Wassergehalt bei aeroben Prozessen vor allem von der Konkurrenz zwischen Sauerstoff und Wasser in den Poren bestimmt (Finstein et al., 1986).

Materialfeuchte

Die Verdunstung ist für die aerobe und anaerobe biologische Abfallbehandlung relevant, vor allem wegen des Wasseraustrags bei Belüftung oder Gasbildung. Sie erfolgt bei jeder Temperatur und findet nur an der Oberfläche von Flüssigkeiten mit Kontakt zur Gasphase statt (VDI-Wärmeatlas, 2006). Je größer die Oberfläche und höher die Temperatur ist, desto mehr Wasser geht durch Verdunstung verloren. An der Oberfläche von Feststoffen mit Gaskontakt herrscht wie bei Flüssigkeiten der zur Temperatur gehörende Sättigungsdampfdruck, wenn der Porendurchmesser mehr als 1 µm beträgt (VDI-Wärmeatlas, 2006). In engeren Poren kann sich eine konkave Flüssigkeitsoberfläche ausbilden, so dass eine Dampfdruckabsenkung auftritt (hygroskopische Materialien).

Trägt man die bei konstanter Temperatur im Gleichgewicht gemessene relative Luftfeuchtigkeit über dem Wassergehalt des Materials auf, so erhält man die Sorptionsisotherme. Die sogenannte Gleichgewichts-Materialfeuchte nimmt mit zunehmender relativer Luftfeuchtigkeit und sinkender Temperatur zu (VDI-Wärmeatlas, 2006).

Im Bereich geringer Material-Feuchtebeladung ist das Wasser durch starke chemische und chemisch-physikalische Kräfte gebunden (sogenanntes Hydratwasser oder oberflächenadsorbiertes Wasser). Dieser Teil des Wassers steht für biochemische Reaktionen nicht zur

Verfügung (z. B. Kröll und Kast, 1989). Bei höherer Material-Feuchtebelastung liegt das Wasser in Wasseransammlungen oder in Kapillaren kondensiert vor und kann Enzyme und Substrate lösen. Deshalb können dort biochemische Reaktionen ablaufen (z. B. Kröll und Kast, 1989).

Wassergehalte bei der Kompostierung

Zu Beginn der Rotte liegt der optimale Wassergehalt für die Kompostierung im Bereich von 40 Gew.-% bis 70 Gew.-%. Während der Kompostierung ändert sich der optimale Wassergehalt aufgrund von strukturellen und chemischen Veränderungen des Substrats (z. B. Krogmann, 1994, Thomé-Kozmiensky, 1995, Kämpfer und Weißenfels, 2001, Körner et al., 1999, Körner, 2009). Dabei ist das jeweilige Optimum sehr stark von dem Substrat abhängig, wobei holzige Materialien eine höhere Wasserhaltekapazität aufweisen (Bidlingmaier, 1983, Kutzner und Jäger, 1994). Bei Wassergehalten unter etwa 12 Gew.-% bis 25 Gew.-% findet keine mikrobielle Aktivität mehr statt (Bidlingmaier, 1983, Schuchardt, 1988, Golueke, 1989). Bei Wassergehalten über 70 Gew.-% kommen aerobe Prozesse ebenfalls zum Erliegen, da das Wasser in den Poren Sauerstoff verdrängt (Krogmann, 1994, Faulstich, 1995). Eine Sickerwasserbildung kann zu den unterschiedlichsten Phasen der Kompostierung erfolgen und hängt nicht von der Kompostierungszeit und auch nicht von der Abbaurate ab, jedoch von dem Wassergehalt und insbesondere von der Art des Substrats (Körner, 2009).

Bei der Kompostierung wird nur wenig Wasser gebildet (metabolisches Wasser). Inwieweit sich der Wassergehalt während der Kompostierung verändert, hängt besonders von den Temperaturen und der Belüftung ab. Wird das Material nur zur ausreichenden Sauerstoffversorgung belüftet, trocknet es kaum. Steigt die Temperatur durch die Abbauprodukte an, sinkt der Wassergehalt durch Verdunstung entsprechend. Korrekturen des Feuchtigkeitsgehalts während des Kompostierungsprozesses sind technisch kompliziert. Daher sollte der Wassergehalt zu Beginn richtig eingestellt werden (z. B. Krogmann, 1994, Körner, 2009).

Wassergehalte bei der Vergärung

Auch bei der Vergärung ist eine bakterielle Aktivität bei Wassergehalten unterhalb von etwa 12 Gew.-% bis 25 Gew.-% nicht möglich. Mit zunehmendem Wasseranteil steigt das Biogasbildungspotential an und erreicht das Optimum bei ca. 91 Gew.-% - 98 Gew.-% (Kaltwasser, 1980). Allerdings steigt mit dem Wassergehalt auch die zu behandelnde Masse deutlich an, so dass verfahrenstechnisch immer ein Kompromiss für die Einstellung dieses Milieufaktors gefunden werden muss.

Das Simulationsmodell berücksichtigt nur die Trockenfermentation mit einem Wassergehalt von maximal 80 Gew.-% (Abbildung 6-6). Die Simulation der Nassfermentation (Wassergehalt > 80 Gew.-%) wäre durch Umprogrammierung möglich.

5.6 Nährstoffe

Im Allgemeinen sind in Abfällen alle essenziellen Nährstoffe, die Mikroorganismen bei der aeroben biologischen Behandlung für ihren Stoffwechsel benötigen, in ausreichenden Mengen vorhanden (Glathe und Farkasdi, 1966), jedoch teilweise mit Ausnahme von Stickstoff (Körner, 2009). Auch bei der Vergärung von Hausmüll, Bioabfall und Klärschlamm enthält das Substrat in der Regel alle notwendigen Nährstoffe wie Schwefel, Phosphor, Kalium, Magnesium, Kalk und weitere Mikronährstoffe in den erforderlichen Konzentrationen (Spendlin, 1991). Spurenelemente wie Eisen, Nickel, Kobalt, Selen, Molybdän und Wolfram sind für das Wachstum und Überleben von Mikroorganismen ebenfalls notwendig (Braun, 1982, Scherer, 2001).

Der Bioabfall enthält in den Pflanzen und tierischen Bestandteilen u. a. Proteine, die zum Teil durch Düngung der Felder und Fütterung in der Landwirtschaft entstanden sind. Proteine beinhalten in den Molekülen Stickstoff und Schwefel, die sich im Verlaufe der Verwertung oder Behandlung in unterschiedlichen anorganischen Verbindungen wiederfinden lassen. Die Konzentrationen und Verteilungen der Proteine sind in den Resten, Abschnitten und Fragmenten verschieden. So variiert z. B. die Stickstoffverteilung in der vollständigen Rübenpflanze deutlich (Khoshnavaz, 1992). Sowohl Ammonium/Ammoniak als auch Schwefelwasserstoff wirken ab bestimmten Konzentrationen auf anaerobe Mikroorganismen hemmend (FNR, 2009). Enthaltene Schwermetalle können durch Sulfidionen gebunden und ausgefällt werden (Braun, 1982, Kaltschmitt und Hartmann, 2001), was im Hinblick auf die nötigen Spurenelemente nicht nur vorteilhaft ist. Bei der Kompostierung wird überschüssiger Stickstoff als Ammoniak über die Abluft ausgetragen (Golueke, 1977). Stickstoffmangel kann bei der Kompostierung und auch bei der Vergärung zu einer Verschlechterung der Abbauleistungen führen (Golueke, 1977, Faulstich et al., 1995). Niedrige Stickstoff- und Phosphorkonzentrationen reduzieren die Methanisierungsrate und führen zu einer Anreicherung von organischen Säuren (Glauser et al., 1987). Hohe Salzkonzentrationen können toxisch wirken. Die Toxizität steigt von Calcium, Magnesium, Natrium, Kalium bis Ammonium an (McCarty und McKinney, 1961).

Im Folgenden werden die Nährstoffe Stickstoff und Schwefel und deren wesentlichen Reaktionsmöglichkeiten beschrieben. Beide sind wegen der Bildung von toxischen und geruchsintensiven Stoffen und der Möglichkeit, über die Wasser- und Gasphase zu entweichen, für die

biologische Abfallbehandlung besonders wichtig. Der Verbleib anderer Nährstoffe wie Phosphor und Kalium ist im Simulationsmodell nicht berücksichtigt.

Nährstoff Stickstoff

Ob ausreichend Stickstoff vorhanden ist, wird aufgrund der Abhängigkeit meistens über das C/N-Verhältnis überprüft. Vernachlässigt werden darf dabei nicht die zeitlich variierende Verfügbarkeit der beiden Elemente Kohlenstoff und Stickstoff (Körner et al., 1999). Aufgrund der Bildung von hochpolymeren Huminstoffmolekülen nimmt die Verfügbarkeit beider Elemente während der biologischen Behandlung ab (Körner et al., 1999). In Bioabfällen liegen die C/N-Verhältnisse im Allgemeinen zwischen 10 und 25, in Gartenabfällen zwischen 20 und 60 und in Küchenabfällen zwischen 12 und 20 (Bidlingmaier, 1995).

C/N-Verhältnis für die Kompostierung

Es gibt eine Vielzahl von Veröffentlichungen, die sich mit dem Einfluss des C/N-Verhältnisses befassen. Nakasaki und Akiyama (1988) ermittelten, dass der Abbau organischer Abfallbestandteile beschleunigt werden kann, wenn das C/N-Verhältnis durch Beimischung von leicht abbaubaren kohlenstoffhaltigen Komponenten (z. B. Methanol, Ethanol, Essigsäure, Glycol oder Glycerin) auf einen optimalen Wert angepasst wird.

Für die Kompostierung wird für viele Bioabfälle ein C/N-Verhältnis zwischen 20 und 40 als günstig angegeben (Glathe und Farkasadi, 1966, Golueke, 1977). Für holzige Substrate ist dagegen eher ein C/N-Verhältnis von 35 bis 40 optimal, da die mikrobielle Verfügbarkeit der Kohlenstoffverbindungen geringer ist (Golueke, 1977, Krogmann, 1994). Wenn das C/N-Verhältnis geringer ist als das Optimum, so wird überschüssiger Stickstoff als Ammoniak über die Abluft ausgetragen (Golueke, 1977). Das C/N-Verhältnis sollte daher nicht unter 20 sinken. Ist zu viel Kohlenstoff vorhanden, verlängert sich die Anlaufphase des Rotteprozesses (Golueke, 1977, Faulstich et al., 1995). Das optimale C/N-Verhältnis von 35 liegt im Hausmüll in der Regel vor. In gewerblichen Abfällen ist jedoch häufig eine einseitige Zusammensetzung vorzufinden (Thomé-Kozmiensky, 1995, Kämpfer und Weißenfels, 2001).

C/N-Verhältnis für die Vergärung

Bei der Vergärung liegt das C/N-Optimum zwischen 10 und 30 (Faulstich et al., 1995). Es wurden aber auch C/N-Optima im Bereich von 16 bis 45 festgestellt (Glauser et al., 1987). Zu hohe Stickstoffkonzentrationen können durch Abbau des organischen Stickstoffs (Ammonifikation) zu einer Anreicherung von Ammonium führen, was sich ab einer bestimmten Kon-

zentration toxisch auf die Mikroorganismen-Mischpopulation auswirken kann (Faulstich et al., 1995).

Bei C/N-Verhältnissen über dem Optimalbereich liegt ein Stickstoffmangel vor, was sowohl bei der Kompostierung als auch bei der Vergärung zu einer Verschlechterung der Abbauleistungen führen kann (Golueke, 1977, Faulstich et al., 1995).

Stickstoffreaktionen

Die wesentlichen Stickstoffreaktionen in der biologischen Abfallbehandlung sind die Ammonifikation, die Nitrifikation, die Denitrifikation und die Stickstoffimmobilisierung (Körner, 2009). Die Anaerobe Ammonium Oxidation (Anammox) wird als weitere Reaktionsmöglichkeit von Stickstoff (z. B. van Loosdrecht und Jetten, 1998, Jetten et al., 2001) im Simulationsmodell berücksichtigt.

Die Ammonifikation, die Nitrifikation, die Anaerobe Ammonium Oxidation und die Nitratatmung, also die Denitrifikation und Nitratammonifikation, werden im Folgenden ausführlicher beschrieben, wobei nur jeweils die letzten Reaktionsschritte von einer Abfolge verschiedenster Umsetzungsprozesse (siehe Körner, 2009) im Simulationsmodell berücksichtigt werden. Auch die dargestellten Reaktionen verlaufen häufig nicht bis zu den Endprodukten, so dass die Zwischenprodukte bei fehlenden Edukten oder ungünstigen Milieubedingungen (siehe Körner, 2009) entweichen können. Im Simulationsprogramm werden nicht alle, aber einige wichtige Milieueinflüsse berücksichtigt (siehe Kapitel 6.1.9).

Ammonifikation

Der mikrobiologische Abbau von organischen Stickstoffverbindungen zu Ammonium bzw. Ammoniak wird als Ammonifikation bezeichnet (Kapitel 6.1.3, Modellreaktionen 2 und 7). Eine Ammonifikation ist immer zu erwarten, wenn Mikroorganismen Proteine als Energie- und Kohlenstoffquelle nutzen (Körner, 2009). Sie kann durch eine Vielzahl sehr unterschiedlicher aerober und anaerober Mikroorganismen wie Bakterien, Archaeen und Pilzen durchgeführt werden (Robertson und Kuenen, 1992, Schlegel, 1992). Die Ammonifikation beginnt mit der Proteolyse, in der Aminosäuren von den Proteinen abgespalten werden. Danach erfolgt die Desaminierung, wobei Ammoniak bzw. Ammonium als Hauptabbauprodukte entstehen. Neben Aminosäuren können auch Amine und Säureamide desaminiert werden (Schlegel, 1992). Ob die Ammonifikationsprodukte Ammoniak/Ammonium im Substrat verbleiben oder aus dem System ausgetragen werden, bestimmen vor allem chemisch-physikalische Bedingungen (siehe Gleichung 6-35).

Nitrifikation

Als autotrophe Nitrifikation wird die Oxidation von Ammoniak (NH_3) über Nitrit (NO_2^-) zu Nitrat (NO_3^-) durch im Boden oder in anderen Feststoffen und im Wasser lebende Bakterien bezeichnet (Schlegel, 1992). Daran beteiligt sind zwei Bakteriengruppen: die Gruppe der Nitritbildner und die der Nitratbildner. Die erste Organismengruppe oxidiert Ammonium (NH_4^+) zu Nitrit, die zweite Nitrit zu Nitrat ($\text{NH}_4^+ + 2 \text{O}_2 \rightarrow \text{NO}_2^- + 2 \text{H}_2\text{O}$, $2 \text{NO}_2^- + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{NO}_3^-$) (Kapitel 6.1.9, Reaktionsgleichungen 1 und 2) (Lexikon der Chemie, 2000). In humushaltigen Feststoffen verläuft die Nitrifikation ungehindert, wenn ihr nicht andere Einflüsse wie Sauerstoffmangel oder niedrige pH-Werte entgegenwirken. Die heterotrophe Nitrifikation ist weitgehend unerforscht (Körner, 2009).

Anaerobe Ammonium Oxidation (Anammox)

Die autotrophe anoxische Ammoniumoxidation mit Nitrit ist unabhängig von dem organischen Substrat als Elektronendonator, im Gegensatz zur heterotrophen Denitrifikation, die ein besonderes C/N-Verhältnis benötigt (Annahme $\text{C/N} \geq 6,67$ (0,15 kg N/kg C)). Bei der anaeroben Ammonium Oxidation (Anammox) wird Ammonium mit Nitrit unter anaeroben Bedingungen zu molekularem Stickstoff (N_2) umgesetzt ($\text{NH}_4^+ + \text{NO}_2^- \rightarrow \text{N}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$) (Kapitel 6.1.9, Reaktionsgleichung 4) (Schmidt et al., 2002).

Anammox Reaktionen wurden vor allem bei der Behandlung von Abwässern aus dem kommunalen Bereich, aus Deponien und aus industriellen Anlagen beobachtet (Fux et al., 2003, Furukawa et al., 2005, Dominguez et al., 2005).

Die Nitratatmung ist eine Form der anaeroben Atmung, bei der anstelle von Sauerstoff Nitrat als terminaler Elektronenakzeptor dient (Lexikon der Chemie, 2000). Sie ermöglicht verschiedenen aeroben Mikroorganismen eine Energiegewinnung unter anaeroben Bedingungen. Hierbei wird Nitrat über Nitrit und weiteren Zwischenstufen entweder zu molekularem Stickstoff (N_2) (Denitrifikation) oder zu Ammoniak (NH_3) (Nitratammonifikation) reduziert (Lexikon der Chemie, 2000). An den Reaktionen sind die dissimilatorische Nitrat- und die Nitritreductase (Enzyme) beteiligt. Die Nitratatmung wird durch molekularen Sauerstoff (O_2) unterdrückt (Lexikon der Chemie, 2000).

Denitrifikation

Die heterotrophe Denitrifikation, eine unter anaeroben Bedingungen ablaufende enzymatische Reduktion von Nitrat über Nitrit und Distickstoffoxid zu molekularem Stickstoff, erfolgt

durch Denitrifikanten ($\text{NO}_3^- + 2 \text{H}^+ \rightarrow \text{NO}_2^- + \text{H}_2\text{O}$, $2 \text{NO}_2^- + 6 \text{H}^+ \rightarrow \text{N}_2\text{O} + 3 \text{H}_2\text{O}$, $\text{N}_2\text{O} + 2 \text{H}^+ \rightarrow \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O}$) (Kapitel 6.1.9, Reaktionsgleichungen 5 - 7) (Lexikon der Chemie, 2000). In Abwesenheit von Sauerstoff nutzen Denitrifikanten Nitrat als Elektronenakzeptor für die Energiegewinnung durch Elektronentransportphosphorylierung (anaerobe Atmung) (Lexikon der Chemie, 2000). Die an der Denitrifikation beteiligten dissimilatorischen Nitrat- und Nitritreductasen sind an Partikel gebunden und werden unter aeroben Bedingungen induziert. Von einigen Denitrifikanten kann neben Nitrat auch Nitrit als Elektronenakzeptor verwendet werden (Lexikon der Chemie, 2000).

Die heterotrophe Denitrifikation benötigt eine organische Kohlenstoffquelle. Im Simulationsprogramm wird zur Begrenzung der Denitrifikation ein C/N-Verhältnis von $\text{C/N} \geq 6,67$ (0,15 kg N/kg C) angenommen (hergeleitet aus z. B. Golueke, 1977, Faulstich et al., 1995, Nakasaki et al., 1992).

Nitratammonifikation

Die assimilatorische Nitratammonifikation bezeichnet die Reduktion von Nitrat zu Ammonium bei der Nitratatmung ($\text{NO}_3^- + 10 \text{H}^+ \rightarrow \text{NH}_4^+ + 3 \text{H}_2\text{O}$) (Kapitel 6.1.9, Reaktionsgleichung 8) (Lexikon der Chemie, 2000). Nitrat dient anstelle von Sauerstoff als Elektronenakzeptor. Zur Nitratammonifikation sind verschiedene aerobe Bakterien (z. B. Bacillus- und Aerobacter-Arten) unter anaeroben Bedingungen befähigt (Lexikon der Chemie, 2000). Das gebildete Ammonium dient als Stickstoffquelle für die Synthese zelleigener organischer Stickstoffverbindungen, vor allem von Aminosäuren (z. B. Glutamat, Glutamin) (Lexikon der Chemie, 2000). Ammoniak wird entsprechend dem $\text{NH}_3/\text{NH}_4^+$ -Verteilungsverhältnis zwischen Luft und Wasser ausgeschieden.

Die assimilatorische Nitratammonifikation kann unter verschiedensten Milieubedingungen stattfinden. Die Anwesenheit von Ammonium kann limitierend wirken (Körner, 2009).

Nährstoff Schwefel

Schwefel ist ein essentielles Spurenelement und damit ein wichtiger Mineralstoff (FNR, 2009) nicht nur für Mikroorganismen. In der Biosphäre ist Schwefel in vielfältiger Form zu finden (aus Lexikon der Chemie, 2000). Schwefel steht Pflanzen vor allem als Sulfat aus dem Boden zur Verfügung, weshalb Sulfatmangel zu Ertragsverlusten in der Landwirtschaft führen kann (Leustek und Saito, 1999).

Die wichtigsten bakteriellen Schwefelreaktionen in Feststoffen und Wasser sind unter aeroben Milieuverhältnissen die Schwefeloxidation (Sulfatentstehung) und unter anaeroben Be-

dingungen die Desulfurikation (Sulfatatmung), die daher ausführlicher dargestellt werden (aus Lexikon der Chemie, 2000, Heldt, 1996) und im Simulationsmodell berücksichtigt wurden.

Schwefeloxidation (Sulfatentstehung)

Unter aeroben Milieubedingungen kann Schwefelwasserstoff durch Bakterien zu Sulfat oxidiert werden ($2 \text{H}_2\text{S} + 5 \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{SO}_4^{2-} + 2 \text{H}_2\text{O}$) (Kapitel 6.1.9, Reaktionsgleichung 3) (Lexikon der Chemie, 2000, Schlegel, 1992).

Die Synthese schwefelhaltiger Aminosäuren erfolgt bei Pflanzen und Mikroorganismen durch assimilatorische Sulfatreduktion (aus Lexikon der Chemie, 2000).

Desulfurikation (Sulfatatmung)

Desulfurikation bzw. Sulfatatmung ist eine Form der anaeroben Atmung, bei der anstelle von molekularem Sauerstoff (O_2) Sulfat (SO_4^{2-}) als terminaler Elektronenakzeptor dient ($\text{SO}_4^{2-} + 8 \text{H}^+ \rightarrow \text{S}^{2-} + 4 \text{H}_2\text{O}$) (Kapitel 6.1.9, Reaktionsgleichung 9) (Lexikon der Chemie, 2000, Schlegel, 1992). Der gebildete Schwefelwasserstoff (H_2S) wird in das Umgebungsmedium ausgeschieden (dissimilatorische Sulfatreduktion). Schwefelwasserstoff wirkt auf Methanbildner toxisch (Mudrack und Kunst, 1991). Als Wasserstoffdonoren wirken Alkohole, organische Säuren und andere Verbindungen. Da das organische Endprodukt (meistens Essigsäure) ausgeschieden wird, ist die Sulfatatmung eine unvollständige Oxidation (z. B. $2 \text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow 2 \text{CH}_3\text{COOH} + \text{H}_2\text{S} + 2 \text{H}_2\text{O}$) (Lexikon der Chemie, 2000).

Desulfurikanten können in Konkurrenz zu den Methanbakterien treten (Mudrack und Kunst, 1991). Von wirtschaftlicher Bedeutung ist die anaerobe Korrosion von Eisen und anderen Schwermetallen durch den von Desulfurikanten in Gegenwart von Sulfat gebildeten Schwefelwasserstoff und Wasserstoff (Lexikon der Chemie, 2000). Bei hohen Schwefelwasserstoffgehalten können die Schwefelwasserstoffkonzentrationen in dem entstehenden Biogas z. B. durch Adsorptionskatalyse, oxidative Gaswäsche oder mikrobielle Oxidation reduziert werden (Thomé-Kozmiensky, 1989, Dammann, 2005).

5.7 pH-Wert

Bei der mikrobiologischen Abfallbehandlung (z. B. Kompostierung oder Vergärung) ergibt sich der pH-Wert in der Wasserphase des Substrats bzw. im Sickerwasser hauptsächlich aus den Reaktionen basischer oder saurer Stoffwechselprodukte und dem natürlichen Puffersystem Kohlendioxid/Hydrogencarbonat ($\text{CO}_2/\text{HCO}_3^-$) (Braun, 1982). Bei dem Kalk

(CaCO₃)-Kohlensäure (H₂CO₃)-Gleichgewicht bzw. der Calciumcarbonatsättigung des Wassers wird der pH-Wert zwischen 7,35 bis 7,45 konstant gehalten. Hydrogencarbonat (HCO₃⁻) reagiert als Ampholyt (pK_S = 6,52, pK_B = 7,48) (Lexikon der Chemie, 2000). Bei stark stickstoffreichen Substraten wirkt auch das gebildete Ammonium puffernd (Lexikon der Chemie, 2000, Braun, 1982).

Der pH-Wert ist ein wichtiger Parameter für das Wachstum von Mikroorganismen. Ein pH-Wert im neutralen Bereich entspricht den Verhältnissen in der Zelle und ist daher vorteilhaft. Es werden aber auch pH-Werte zwischen 5 und 9 von Mikroorganismen toleriert. Durch stoffwechselbedingte Verschiebungen der Milieubedingungen kann das Wachstum der Mikroorganismen beeinträchtigt werden (z. B. Schlegel, 1992).

pH-Wert bei der Kompostierung

Bei der Kompostierung liegt der optimale pH-Bereich zwischen 7 und 8 (Körner et al., 1999). Nach einer anfänglichen Versäuerung durch die Bildung organischer Säuren in der mesophilen Phase und durch die Bildung basisch wirksamer Stoffwechsel- und Reaktionsprodukte (z. B. Ammonium, Carbonate, Pyridin, Pyranzin) stellt sich ein pH-Wert in diesem Bereich im Allgemeinen schnell ein (Finstein und Moris, 1975, Nakasaki et al., 1990, Krogmann, 1994). Zeitliche und räumliche Schwankungen des pH-Wertes wirken sich nicht negativ auf den Kompostierungsprozess aus (Finstein und Moris, 1975, Haug, 1993). Mit zunehmender biologischer Aktivität kann sich der pH-Wert bis in den Bereich von 8 und 9 einstellen (Nakasaki et al., 1990). Nakasaki et al. (1990) u. a. konnten zudem zeigen, dass der Sauerstoffanteil in der zugeführten Luft entscheidenden Einfluss auf den Abbau der organischen Säuren hat. Das wird durch den Unterschied des pH-Wertes bei der Kompostierung und Vergärung besonders deutlich.

Die pH-Werte von biogenen Materialien an Kompostierungsanlagen können Werte im leicht sauren Bereich haben. Das kann bedeuten, dass anaerobe Zonen bestehen, in denen ein Abbau der organischen Säuren nicht effizient ablaufen kann, weil die Sauerstoffversorgung lokal nicht ausreicht. Die Sauerstoffkonzentration in der Abluft kann dabei sogar ca. 18 Vol.-% bis 20 Vol.-% betragen (Golueke, 1977, Krogmann und Körner, 2000).

pH-Wert bei der Vergärung

Der pH-Wert bei der Vergärung resultiert ebenfalls aus der Reaktion basischer oder saurer Stoffwechselprodukte und dem natürlichen Puffersystem Kohlendioxid/Hydrogencarbonat (CO₂/HCO₃⁻) (Braun, 1982). Da das Puffersystem der entsprechenden organischen Säuren um pH 4,8 liegt, ist eine kontinuierliche Säureabfuhr notwendig. Das pH-Optimum der Säure-

rebuildner liegt im Bereich von 4,5 bis 6,3 (Wellinger et al., 1991). Die Methanbildner arbeiten optimal im Bereich von pH 6,8 bis 7,5 (Braun, 1982). Eine starke Hemmung der Methanbildung tritt unterhalb von pH-Wert 6 ein (Wellinger et al., 1991, Präve et al., 1994). Eine Initiierung des pH-Wertes ist in der Regel nicht erforderlich, jedoch sollte auf die Verhinderung einer Versäuerung zu Beginn des Prozesses geachtet werden (Kaltschmitt und Hartmann, 2001). Durch unterschiedliche Abbaugeschwindigkeiten der Mikroorganismen und ein Überangebot leicht abbaubarer Substrate können mehr Säuren entstehen, als abgebaut werden können (FNR, 2009). Auch durch Temperaturabsenkungen aufgrund von Materialzugaben oder technischen Problemen können Versäuerungen durch Hemmung der Methanbildner entstehen (Kloss, 1986).

5.8 Gasbildungspotential und Atmungsaktivität

Die Bestimmung des Gasbildungspotentials und der Atmungsaktivität dient neben vielen anderen Methoden (LAGA-Methodensammlung, 2008, Helfer und Merrettig-Bruns, 2001, Jörg, 2001) der Charakterisierung von Substraten und Materialien hinsichtlich ihrer mikrobiologischen Abbaubarkeit bzw. ihres Restabbaupotentials. Hierfür gibt es international verschiedene Messmethoden, die sich vor allem hinsichtlich der Versuchsdauer, der Probenmenge und der Versuchstemperatur unterscheiden. Vergleichbar sind nur die Ergebnisse der gleichen Methode.

Das beim anaeroben Abbau organischer Substanzen entstehende Biogas enthält im Wesentlichen Methan (CH_4) und Kohlendioxid (CO_2). Daneben kann es auch geringe Anteile an Schwefelwasserstoff (H_2S) und Wasserstoff (H_2) enthalten. Vor allem bei der aeroben Behandlung enthält die Abluft zudem Wasser (H_2O), Distickstoff (N_2) und Sauerstoff (O_2). Ammoniak (NH_3) und Distickstoffoxid (Lachgas) (N_2O) können ebenfalls auftreten (siehe auch Kapitel 7.1.5). Die Zusammensetzung des Biogases ist hauptsächlich von dem Substrat und den Milieubedingungen abhängig (z. B. FNR, 2009). Die Menge und Zusammensetzung des gebildeten Biogases kann Aufschluss über die Verwertbarkeit und Lagerungsfähigkeit von Materialien geben.

Bestimmung der Atmungsaktivität

Eine Methode zur Bestimmung des mikrobiologischen Abbaupotentials unter aeroben Milieubedingungen ist die Bestimmung der Atmungsaktivität von Materialien. Hierfür wird u. a. ein Labortestverfahren eingesetzt, das die Sauerstoff-Respiration über einen Zeitraum von 4 Tagen (AT_4 bzw. RA_4) bei 20 °C im Sapromaten ermittelt. Der mikrobiologische Sauer-

stoffverbrauch wird meistens in Masse Sauerstoff pro Gewicht der organischen Trockensubstanz oder der Trockensubstanz insgesamt (mg O₂/g oTS oder TS) angegeben.

Die Länge der Versuchszeit, die Temperatur, der pH-Wert und die Substratmenge haben dabei neben der biochemischen Zusammensetzung großen Einfluss auf die Gasbildung (Heerenklage et al., 2007, Bekker, 2007). Die Bestimmung der Atmungsaktivität im Sapro-maten wird auch zur Beurteilung des Abbaugrads von Materialien in Altdeponien eingesetzt (Heerenklage und Stegmann, 2005).

Bestimmung des Gasbildungspotentials

Das Gasbildungspotential wird i. d. R. in Gasvolumen, also produziertes Gas insgesamt oder einzelne Gase z. B. Methan, pro Gewicht organischer Trockensubstanz oder der gesamten Trockensubstanz (l/kg oTS oder TS) angegeben und über 21 Tage bei 35 °C im Labortest-verfahren (GP₂₁ bzw. GB₂₁) ermittelt. Die Versuchsdurchführung erfolgt nach DIN 38414-S8 (1985) und VDI-Richtlinie 4630 „Vergärung organischer Stoffe - Substratcharakterisierung, Probenahme, Stoffdatenerhebung, Gärversuche“ (2006).

Weitere genormte Messmethoden sind die DIN EN ISO 11734 (1998) und der Hohenheimer Gärtest (Helffrich und Öchsner, 2003).

Die produzierte Biogasmenge von kommunalem Bioabfall aus der getrennten Sammlung beträgt etwa 100 m³/Mg FS (Schmelz, 2000) (siehe auch Anhang 14.3, Institut für Energetik und Umwelt gGmbH (IE), 2007). Im Rahmen der Co-Vergärung werden Biogaserträge zwischen 80 m³ und 150 m³ je Tonne Feuchtsubstanz erreicht, wobei die höheren Werte in Bio-abfallvergärungsanlagen mit fetthaltigen Co-Substraten erzielt werden (Schmelz, 2000).

Das produzierte Biogas kann energetisch verwertet werden. Zur Berechnung der Wirtschaftlichkeit einer Biogasanlage gibt es Programme wie den Biogasrechner (KTBL, 2012). Auch technische und rechtliche Belange sollen darin berücksichtigt werden.

Der Heizwert des Biogases ist im Wesentlichen von dem Methangehalt abhängig (Bekker, 2007). Der Heizwert von Methan beträgt 35,8 MJ/m³ (nach Kern et al., 2010: 10 kWh/m³, also 167 MJ/m³). Der durchschnittliche Heizwert von Biogas beträgt 21,5 MJ/m³ bei 60 Vol.-% Methan und 40 Vol.-% Kohlendioxid (Thomé-Kozmiensky, 1995) bzw. zwischen 5 kWh/m³ und 7,5 kWh/m³, also 83 MJ/m³ und 125 MJ/m³ (Kern et al., 2010).

Bei mikrobiologisch stabilisierten Materialien sollte die Atmungsaktivität (RA₄ bzw. AT₄) ≤ 5 mg O₂/g TS und die Gasbildungsrate im Gärtest (GP₂₁ bzw. GB₂₁) ≤ 20 l/kg TS sein (z. B. 30. Bundes-Immissionsschutzverordnung (§ 16) (30. BImSchV, 2009), Anhang 2 Abfallablagerungsverordnung (AbfAbIV, 2006)). Bei frischen Materialien liegt der Wert der At-

mungsaktivität (RA_4 bzw. AT_4) i. d. R. unter $100 \text{ mg O}_2/\text{g TS}$ (Wallmann et al., 2003). Zielvorgabe für das Ende der Deponienachsorge ist eine Gasbildungsrate im Gärtest (GP_{21} bzw. GB_{21}) $\leq 10 \text{ l/kg TS}$ und eine Atmungsaktivität (RA_4 bzw. AT_4) $\leq 2,5 \text{ mg O}_2/\text{g TS}$.

5.9 Schwermetalle

Schwermetalle sind Metalle mit einer Dichte $> 5 \text{ mg/cm}^3$. Die wichtigsten Gebrauchsschwermetalle sind Eisen, Kupfer, Blei, Zink, Zinn, Nickel, Chrom, Wolfram, Molybdän, Cadmium, Cobalt, Niob, Tantal, Plutonium, Uran, Vanadium, Quecksilber, Silber, Gold, Platin und Lanthanoide (aus Lexikon der Chemie, 2000).

Die Schwermetallkonzentrationen, ab denen eine Hemmung von Mikroorganismen angenommen werden muss, sind in der Literatur unterschiedlich beschrieben (FNR, 2009). Orientierungswerte sind der Tabelle 5-2 zu entnehmen. Sie beziehen sich auf hemmende bis toxische Schwermetallkonzentrationen in Wasser bei der Vergärung.

Die Toxizität von Salzen (Tabelle 5-2) nimmt von Calcium, Magnesium, Natrium, Kalium bis Ammonium zu (McCarty und McKinney, 1961). Der aus Schwefel entstehende Schwefelwasserstoff bewirkt schon in geringen Konzentrationen (23 mg/l) eine signifikante Hemmung der Methanbildner (Mudrack und Kunst, 1985). Weitere hemmende bis toxische Konzentrationen sind der Tabelle 5-2 zu entnehmen.

Tab. 5-2: Hemmende bis toxische Konzentrationen verschiedener Stoffe in der flüssigen Phase bei der Vergärung

	Stoffkonzentrationen mit hemmender Wirkung (Toxizität) (mg/l)					
Chrom	28-200	130	100-300 (500)	200-2100	120-300 (260-500)	120-300 (200-500)
Nickel	50-200	10	100-300 (500)	62-1000	10-300 (500)	10-300 (30-1000)
Kupfer	5-100	40	150-200 (300)	89-1200	40-250 (170-300)	40-250 (170-300)
Zink	3-100	400	150 (250)	111-4300	250-400 (250-600)	150-400 (250-600)
Cadmium	70	180 (CdCO ₃)	k. A.	73-290	150-600 (k. A.)	k. A. (20-600)
Blei	8-30	340	k. A.	650	340 (340)	300-340 (340)
Eisen	k. A.	1750 (FeCO ₃ / Fe ₂ (CO ₃) ₃)	k. A.	9800	k. A.	k. A.
Natrium	5000-14000	6000-30000	k. A.	k. A.	k. A.	k. A.
Kalium	2500-5000	3000	k. A.	k. A.	k. A.	k. A.
Calcium	2500-7000	2800 (CaCl ₂)	k. A.	k. A.	k. A.	k. A.
Magnesium	1000-1500	2400 (MgCl ₂)	k. A.	k. A.	k. A.	k. A.
Ammonium	k. A.	2700-10000	k. A.	k. A.	k. A.	k. A.
Ammoniak	k. A.	150	k. A.	k. A.	k. A.	k. A.
Schwefel	k. A.	50 (H ₂ S) 100 (S ²⁻) 160 (Na ₂ S)	k. A.	k. A.	k. A.	k. A.

k. A.: keine Angaben
(Toxizitätswerte sind in
Klammern angegeben.)

Rinzema et al.
(1988)
Steiner und
Müller (1988)
Hickey et al.
(1989)
ATV (1990)

Kaltschmitt und Hartmann
(2001)

Köhler (1966)

Braun (1982)

Scherber und
Steiner
(1982)

Konzeli-
Katsiri und
Kartsonas
(1986)

Die hemmende Wirkung der Schwermetalle geht vor allem von den gelösten Metallen aus (Spendlin, 1991, Kaltschmitt und Hartmann, 2001, FNR, 2009). Der Anteil der gelösten Metalle hängt u. a. von dem pH-Wert, dem Redoxpotential, der Salinität, dem Gehalt der Sulfidionen (S²⁻), Komplexbildungsvermögen und der Materialstruktur ab. Der pH-Wert ist wiederum abhängig von der Puffer- und Kationenaustauschkapazität z. B. durch Tonmineral- und Huminstoffgehalte und vor allem von dem Carbonat-Bicarbonat-Kohlensäure-Verhältnis (FNR, 2009). Die Materialstruktur ergibt sich aus Faktoren wie Korngrößen, Korngrößenverteilung und Feinkornanteil, Porenvolumina, Fremdstoffe, Wassergehalt, Verkittungen und Partikelporositäten. Die Stabilität der Komplexe steigt mit zunehmendem pH-Wert an (FNR, 2009). In Gegenwart von Schwefelwasserstoff und Kohlendioxid kommt es zu Fällungsreak-

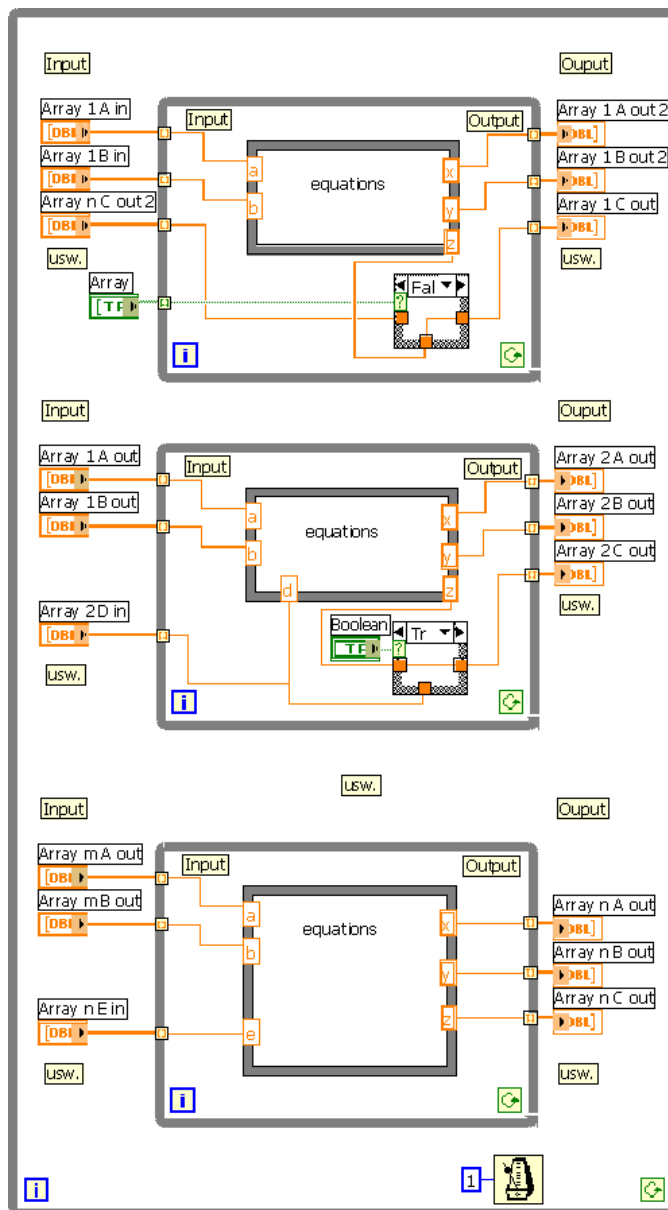
tionen, deren Produkte schwer lösliche Metallsulfide und Carbonate sind (Braun, 1982, FNR, 2009).

Zur Reduzierung der Schwermetalle diskutiert u. a. Langhans (1998) Möglichkeiten der Schwermetallausschleusung aus suspendierten Feststoffen unter Ausnutzung der von dem pH-Wert abhängigen Löslichkeit von Schwermetallen. Spezielle reaktionskinetische Untersuchungen sind aber meistens nur für spezielle Mono-Substrate z. B. aus der Industrie (Witty, 1984) oder für die anaerobe Abwasserreinigung z. B. von Scherber und Steiner (1982) und Wiesmann (1988) durchgeführt worden. Weiterhin wurde die Sorption von Schwermetallen an Huminstoffen nachgewiesen (z. B. Zachäus und Laude, 1997, Scheffer und Schachtschabel, 1998), die ebenfalls eine Verringerung der gelösten Schwermetalle zur Folge hat.

Neben der hemmenden Wirkung der Schwermetalle ist also die Umweltschädlichkeit bei der Ausbringung der verbleibenden Feststoffe (z. B. Kompost und Gärreste) zu berücksichtigen. Aufgrund von Auswaschungs- und Abbauvorgängen können Böden und Gewässer mit Schadstoffen belastet werden. Grenzwerte zur Ausbringung der verbleibenden Feststoffe sind in der Bioabfallverordnung (BioAbfV, 2012) zu finden.

6 Simulationsprogramm

Das Computerprogramm zur „Prozesssimulation biologischer Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft“ (Verrottungs- und Vergärungsprozesse) besteht im Wesentlichen aus Iterationsschleifen, in denen Reaktionsgleichungen, physikalische Funktionen und andere Vorgaben abgearbeitet werden. Die sich gegenseitig beeinflussenden Parameter werden für jeden Zeitschritt neu berechnet (Abbildung 6-1). Durch Rückführungen von Ausgabewerten werden die Berechnungen solange durchgeführt, bis ein stabiler Zustand erreicht ist.



Erläuterungen zum Blockdiagramm

Das Programm besteht aus einer Endlos-Iterationsschleife mit einer minimalen Abarbeitungszeit und einer auf 1000 Durchläufe begrenzten Iteration zur automatischen Ausschaltung des Programms. Sie enthält weitere Iterationsschleifen und logische Regulatoren und Begrenzungen.

Während des Programmlaufs werden die vorgegebenen Werte für die Berechnungen verwendet. Durch Umrechnung aller nicht physikalischen Parameter in Mol können mit den Abbau- und Hemmungsfunktionen Wertearrays (zweidimensional angeordnete gleichartige Daten) für die vorgegebene Zeit gebildet werden. Davon abhängig entwickeln sich die chemischen und physikalischen Parameter wie Temperatur, Wassergehalt und pH-Wert, ebenfalls in Arrays zusammengefasst.

Die weiteren Einflüsse wie Strömungsverhältnisse, Wärmeentwicklungen und Grenzwerte für Reaktionen werden in Folgeiterationsschleifen (ca. 50) mit den entsprechenden Funktionen und Vorgaben abgearbeitet.

Die umfangreichen logischen Regelungen zum Beispiel zur Einhaltung der vorgegebenen Verfahren und Materialien finden entsprechend ihrer Aufgaben in oder außerhalb der Iterationsschleifen statt.

Die Einstellung eines stabilen Prozesses benötigt mehrere Iterationsläufe aller Schleifen, wobei Ausgabe-Arrays einer Schleife wiederum Eingabe-Arrays in andere Schleifen sein können.

Abb. 6-1: Schematische Darstellung des Blockdiagrammaufbaus des Simulationsprogramms zur Prozesssimulation aerober und anaerober Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft

Durch eine Vielzahl von Ein- und Ausgabewerten sind die wesentlichen Prozessgrößen mikrobiologischer Abbauvorgänge im Bereich der Abfallwirtschaft integriert. Grenzwerte und unterschiedliche Einheiten und Bezüge können auch nachträglich grundsätzlich durch entsprechende Programmierung berücksichtigt werden. Ebenso Berechnungsarten, Vorgaben und angenommene Werte. Auch die verwendeten Funktionen können bei neuen Erkenntnissen oder anderen Erfordernissen ersetzt oder ergänzt werden und es sind weitere Funktionen für die Berücksichtigung anderer Einflüsse bei Bedarf einfügbar.

Alle Werte sind Fließkommazahlen und im Allgemeinen mit einer Genauigkeit von zwei Stellen hinter dem Komma (DBL) dargestellt. Die Einheiten sind entsprechend angepasst. In den graphischen Darstellungen werden die Ordinatenzahlen daher ebenfalls mit einer Genauigkeit von zwei Stellen hinter dem Komma angegeben.

Durch die einzelnen Berechnungen pro Zeitschritt in den Iterationsschleifen, die jeweils eine Zeiteinheit darstellen, entstehen Entwicklungen, Energie- und Massenströme. Der prinzipielle Aufbau ist schematisch der Abbildung 6-1 zu entnehmen.

Die Grundlage für jede Simulation ist die Eingabe der Materialzusammensetzung. Nach der Zuordnung des eingegebenen Materials zu den Substratgruppen allgemeine unspezifische Kohlenhydrate (allg.), Stärke, Aminosäuren, Hemicellulose, Fette, Wachse, Proteine, Cellulose und Lignin werden die unterschiedlichen Abbaubarkeiten der jeweiligen Gruppen im Programm berücksichtigt. Die Vielzahl von Molekülzusammensetzungen und -variationen und Abbaubarkeiten innerhalb der Gruppen bleibt unberücksichtigt. Anschließend werden die abbaubaren Anteile der Substratgruppen Kohlenhydrate (allg.), Stärke, Aminosäuren, Hemicellulose, Fette, Wachse, Proteine, Cellulose und Lignin drei übergeordneten Substratgruppen, den Kohlenhydraten, Proteinen und Fetten zugewiesen. Hinzu kommt die Gruppe des nicht abbaubaren organischen Materials und die anorganischen Stoffe, so dass insgesamt fünf Substanzgruppen im Simulationsmodell berücksichtigt werden.

Durch Berechnung oder Eingabe der anderen wichtigen Faktoren wie Wassergehalt, Zuschlagsstoffe und Schüttungs- bzw. Reaktorform, einschließlich der Anfangs- und Umgebungsrandbedingungen wie Temperaturen, Luftfeuchtigkeit, Porenvolumen, Isolation und Dichten, kann auf Basis der im Folgenden beschriebenen Gleichungen und Berechnungen, die sich auf jeweils einen Zeitschritt beziehen, eine Simulation durchgeführt werden.

6.1 Simulationsmodell

Das numerische Simulationsmodell kann je nach Verwendungszweck als Prognose-, Optimierungs-, Erklärungs- oder Gestaltungsmodell bezeichnet werden. Das Prognosemodell gibt zukünftige Systemzustände unter gegebenen (alternativen) Annahmen wieder, als

Optimierungsmodell werden optimale Systemzustände ermittelt, das Erklärungsmodell gibt reales Systemverhalten richtig wieder und als Gestaltungsmodell dient es der Entscheidungsfindung beim Entwurf von Systemen und der Maßnahmenauswahl in der Projektplanung. Weiterhin ist das Modell den immateriellen, formalen und mathematischen Simulationsmodellen zuzuordnen.

Der Kern des Simulationsmodellsystems ist eine einschichtige Feststoffmenge mit niedrigem bis hohem Wassergehalt. Die Abgrenzung zur Umgebung erfolgt durch Vorgabe der Form der Feststoffmenge, die durch äußere Wände erzwungen sein kann. Wahlweise kann eine Isolierung (kein Wärmeverlust oder –gewinn durch Wärmeleitung und –strahlung des Wassermantels oder Feststoffs an die Umgebung) oder ein temperierender Wassermantel vorgegeben werden. Aufgrund des Energie- und Massenflusses in und aus dem System ist das Simulationsmodellsystem thermodynamisch den offenen und instationären Systemen zuzuordnen. Aber auch das geschlossene und stationäre System wird bei entsprechenden Vorgaben simuliert.

Das Simulationsmodell ist deterministisch und zeitvariant. Es enthält empirische Erfahrungswerte und ermöglicht die Eingabe von zeitgenauen Zufallsereignissen. Zeitkontinuierlich ist es bei einer Auflösung von einem Tag (durch Umrechnung auch Stunden, Wochen bzw. Monate). Darüber hinaus ist es zeitdiskret und liefert somit auch un stetige Kurvenverläufe. Die räumliche Verteilung der Zustandsgrößen ist unberücksichtigt (raumkontinuierlich). Das System ist daher als einräumiger Reaktor mit vollkommen durchmischem Feststoff zu betrachten. Die zeitliche Darstellung ermöglicht aber auch Rückschlüsse auf Zustände bei ungleichmäßigen physikalischen Feststoffeigenschaften. Das bedeutet, dass sich die Gesamtentwicklung aus kleineren Räumen unterschiedlicher zeitlicher Entwicklung zusammensetzt, die den Verlauf des Gesamtprozesses beeinflussen. Eine Feststofftrennung zu einem beliebigen Zeitpunkt ermöglicht zudem eine Betrachtung des anderen als den Gesamtprozess bestimmenden Milieus (aerob oder anaerob) und Zwischenstufen durch Belüftungsvariationen.

Im Simulationsmodell wird davon ausgegangen, dass in Mikrohabitaten - entgegen dem Hauptprozess - je nach Sauerstoffvorkommen aerober und anaerober Stoffwechsel möglich ist. Dadurch können Entwicklungen in geringeren Zeiträumen stattfinden, als es die spezifischen einzelnen Wachstumszeiten der Kulturen der unterschiedlichen Mikroorganismenarten im Labor erwarten lassen. Denn bis auf den Anfang des Prozesses sind zu jedem Zeitpunkt bereits alle Arten vorhanden und können milieu- und prozessentsprechend zügig wirksam werden.

Die Simulationsberechnungen anhand des Simulationsmodells beginnen wie in Kapitel 6 beschrieben mit der Zerlegung des Feststoffs in abbaubare und unabbaubare Anteile. Die

abbaubaren Substanzen werden den drei Hauptgruppen Kohlenhydrate, Proteine und Fette zugeordnet. Die nicht abbaubaren Anteile werden nochmals in organisches (z. B. Lignin) und anorganisches Material (z. B. Sand) unterteilt. Es erfolgt dann eine Reduktion auf jeweils ein Modellmolekül (siehe auch Kapitel 6.1.2): Kohlenhydrate ($C_6H_{12}O_6$: leicht abbaubar), Proteine ($C_{70}H_{110}O_{20}N_{20}S$: mäßig abbaubar) und Fette (C_2H_5-COOH : schwer abbaubar). Unterschiedliche Molekülzusammensetzungen und Abbaubarkeiten innerhalb der Gruppen bleiben unberücksichtigt.

6.1.1 Abbaukinetik und Implementierung

Die biochemische Kinetik beschäftigt sich mit Geschwindigkeiten biochemischer Reaktionen in Abhängigkeit von bestimmten Parametern wie z. B. Substratkonzentration, Temperatur, Sauerstoffgehalt und pH-Wert. Die Mehrzahl von Untersuchungen zur Reaktionsgeschwindigkeit enzymkatalysierter Reaktionen bezieht sich auf homogene Systeme, in denen das lösliche Substrat und die abbauenden Mikroorganismen im Wasser gleichmäßig verteilt und gut durchmischt sind wie z. B. in Kläranlagen. Die mikrobiologische Behandlung von festen Abfallstoffen zählt jedoch zu den heterogenen Systemen mit limitiertem Wasser- und Sauerstoffgehalt. In diesen heterogenen Systemen sind Substrat und Mikroorganismen nicht immer von Flüssigkeit und dem Prozess entsprechenden geeigneten Gaskonzentrationen umgeben.

Während bei den homogenen Systemen die Wachstumsrate der Mikroorganismen nach der Monod-Gleichung vor allem von der Substratkonzentration, der Temperatur und dem pH-Wert abhängig ist, kann die Wachstumsrate der Mikroorganismen bei der biologischen Feststoffbehandlung, aufgrund der Komplexität des Systems, durch eine Vielzahl weiterer Lösungs-, Transport- und Diffusionsvorgänge begrenzt werden (Haug, 1980).

Die Vorgänge im Einzelnen erweitert nach Haug (1980) sind:

- Hydrolyse des Substrats
- Freisetzung der extrazellulären Enzyme und Transport zum Substrat
- Diffusion des gelösten Substrats zur und in die Zelle
- Übergang der Gase von der Gas- in die Flüssigphase und umgekehrt
- Transport von Gasen (z. B. Sauerstoff, Wasserstoff) durch Poren
- Diffusion von Gasen zur und in die Zelle
- Aerober/anaerober Abbau von Substraten in der Zelle
- Diffusion der Produkte aus der Zelle in die Gas- oder Flüssigphase
- Transport durch das Gas-, Flüssig- und Feststoffgemisch und Systemaustritt.

Abbaurrate

Die Lösungs-, Transport- und Diffusionsvorgänge berücksichtigend, aber in Anlehnung an Monod (1949), wird in dem Simulationsmodell eine theoretische Abbaurrate für die drei Substratgruppen Kohlenhydrate, Proteine und Fette vorgegeben, wobei 50 % der Kohlenhydrate nach $k = 15$ % der Gesamtzeit, 50 % der Proteine nach $k = 25$ % und 50 % der Fette nach $k = 30$ % der Gesamtzeit abgebaut werden. Eine zusätzliche Wachstumsverzögerung der Mikroorganismengruppen der Essigsäure-, Wasserstoff-, Kohlendioxid- und Methanbildner wird mit $k = 50$ % simuliert. Diese Werte ergaben Kurvenverläufe in den durchgeführten Simulationen, die am besten mit empirischen Ergebnissen übereinstimmten (siehe Kapitel 7). Es erfolgt eine Differenzierung in Zeitschritte, wodurch eine Aufteilung der Substratmenge in Abbaumengen pro Zeiteinheit durch Multiplikation mit der Gesamtmolmenge der jeweiligen Substratgruppe erfolgen kann (Gleichung 6-1).

$$\text{Abbaumenge (\%)} = (100 + k) \cdot \frac{x}{(x + k)} \cdot LP \quad (\text{Werte begrenzt zwischen 0 und 100})$$

$$x = \frac{100}{\text{Gesamtzeitschritte}} \cdot \text{Zeitschritt} \quad (\text{Werte begrenzt zwischen 0 und 100})$$

$k = 15\%$ (Kohlenhydrate), 25% (Proteine), 30% (Fette), 50% (Essigsäure-, Wasserstoff-, Kohlendioxid - und Methanbildner)

$$LP = \frac{(100 + k)}{100} \cdot \frac{y}{(y + k)} \quad (\text{Werte begrenzt zwischen 0 und 1})$$

$$y = \frac{100}{\text{Verzögerungszeit}} \cdot \text{Zeitschritt} \quad (\text{Werte} \geq 0)$$

Verzögerungszeit = ein Zehntel der Materialgesamtmenge multipliziert mit der vorgegebenen Verzögerungszeit

$$\text{spezifische Abbaumenge (Mol)} = \frac{\text{Abbaumenge (\%)}}{100} \cdot \text{Gesamtmolmenge Stoffgruppe (Mol)}$$

LP: Verzögerungsfaktor pro Zeitschritt

k: Steigung der Kurve beeinflussende Konstante (Abbau und Verzögerungen)

Gl. 6-1: Abbaukinetik als Funktion im Simulationsmodell

Je länger die Gesamtzeit und die Verzögerungsphasen sind, desto linearer wird die Abbaurrate (Funktion nullter Ordnung). Umgekehrt wird die Kurve unlinear (Funktion erster Ordnung)

und Kombinationen (nullter und erster Ordnung)) bis hin zu einem sigmoiden Kurvenverlauf. Die Abbaufunktionen und die Verzögerungsfunktionen sind getrennt jeweils erster Ordnung (exponentieller Verlauf) und für die Kohlenhydrate, Proteine und Fette unterschiedlich. Die resultierenden Kurven aus dem Produkt der Abbau- und Verzögerungsfunktion ergeben dann Funktionen nullter und erster Ordnung und durch Verzögerungen einen sigmoiden Verlauf. Multipliziert mit den Gesamtmaterialmengen der Kohlenhydrate, Proteine und Fette und aufgrund der gegebenen Milieubedingungen resultiert die Gesamtabbaurrate.

Die Abbaurrate ist also eine resultierende Funktion verschiedener Faktoren und berücksichtigt folgende Einflüsse:

- substratspezifischer Abbau Kohlenhydrate, Proteine und Fette
- substratspezifische Hemmungen Kohlenhydrate, Proteine und Fette
- Gesamtmaterialmenge (Lösungs-, Transport- und Diffusionsvorgänge)
- Grenzwerte
- Gesamtabbauzeit

Die unterschiedlichen substratspezifischen Verzögerungsfunktionen der Kohlenhydrate, Proteine und Fette sind abhängig von der Gesamtmaterialmenge. Die Materialmengenverzögerung berücksichtigt die unterschiedliche Verfügbarkeit von Nährstoffen aufgrund der Materialmenge (Lösungs-, Transport- und Diffusionsvorgänge) und der gegebenen Verzögerungszeit. Das Programm verlängert automatisch diese Zeit, um einen optimalen Betriebspunkt zu finden. Grenzwerte (Kapitel 6.2) dürfen dann nicht mehr überschritten werden. Dieser Suchvorgang wiederholt sich mehrmals (Iteration).

Die Abbaufunktionen der Kohlenhydrate, Proteine und Fette sind von der vorgegebenen Gesamtabbauzeit abhängig. Auch diese kann durch entsprechende virtuelle Schalterwahl von dem Programm automatisch gesucht werden. Es wird dann nach der kürzesten Zeit für eine maximale Abbaurrate von mindestens 80 Gew.-% gesucht.

In der Abbildung 6-2 sind die im Simulationsmodell verwendeten Abbaufunktionen beispielhaft und verallgemeinert dargestellt. In der Abbildung 6-2 oben sind die Abbaufunktionen der Kohlenhydrate, Proteine und Fette mit geringer Materialmengenverzögerung (70 kg) aus dem Programm und in der Abbildung 6-2 unten die dazugehörige resultierende Abbaurrate mit und ohne Verzögerungsphase abgebildet.

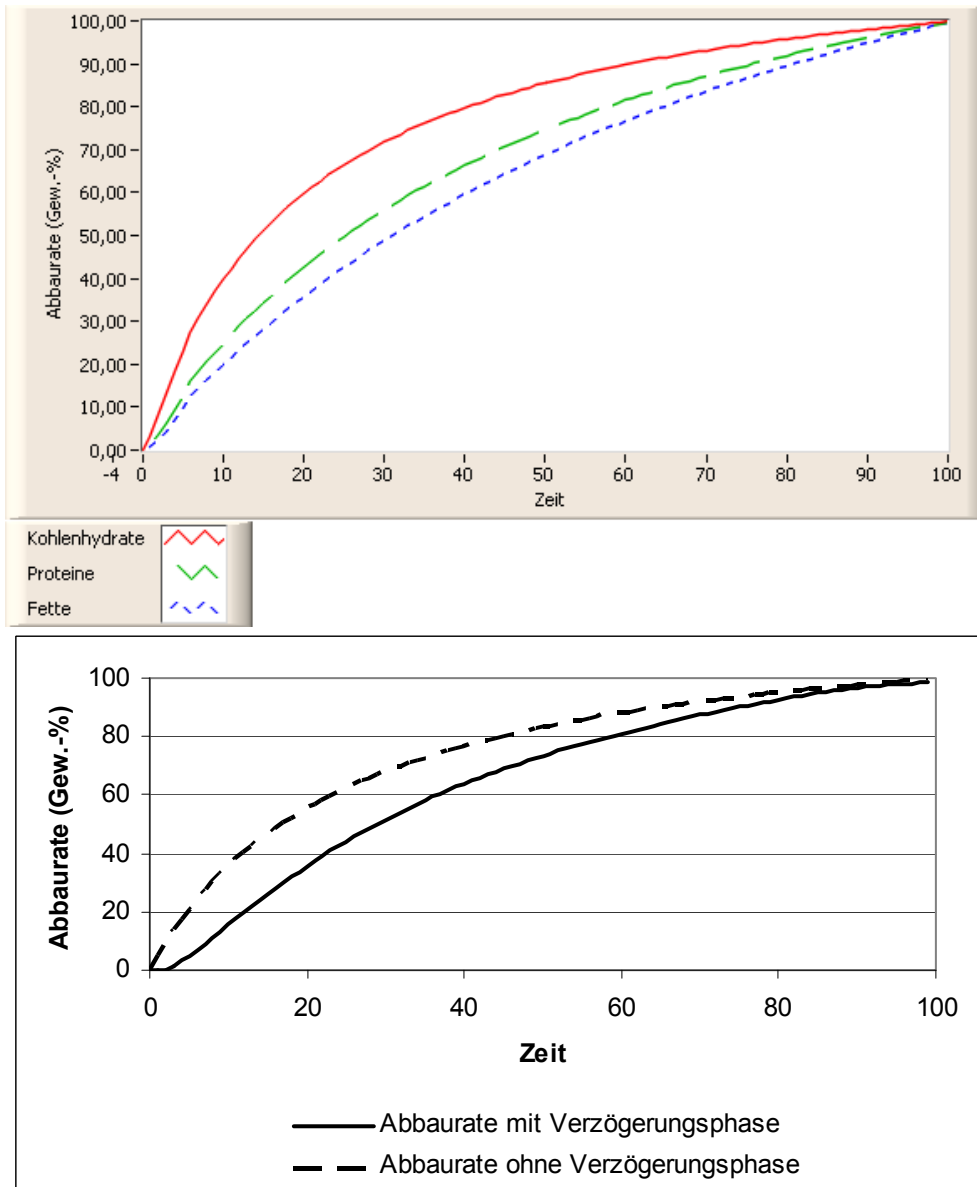


Abb. 6-2: Beispielhafte Darstellung der im Simulationsmodell verwendeten Abbaufunktionen: Abbaufunktionen der Kohlenhydrate, Proteine und Fette bei einer Materialmenge von 70 kg, also geringer Materialmengenverzögerung, (oben) und dazugehörige resultierende Abbaurrate mit und ohne Verzögerungsphase (unten)

Die Verzögerungen sind als Faktoren zwischen 0 und 1 simuliert (LP siehe Gleichung 6-1). Bei Faktor 0 findet kein Abbau statt und nur bei Faktor 1 findet ein vollständiger Abbau in der vorgegebenen Zeit statt. Im Gegensatz zur thermischen Verwertung (Verbrennung) wird bei der biologischen Abfallverwertung (stoffliche Verwertung) die organische Substanz aber nie ganz oxidiert (aus Kämpfer und Weißenfels, 2001), so dass eine Verzögerungsphase länger als eine Zeiteinheit den realen Verhältnissen entspricht. Die Zeiträume für einen vollständigen mikrobiologischen Abbau betragen mehrere Jahre, Jahrzehnte und Jahrhunderte (z. B. Heyer et al., 2001).

Zeitdiskrete Werteverläufe

Die Berechnungen der Stoffmengen, der Massen, des Wasserhaushalts und der Thermodynamik werden im Simulationsmodell für jeden Zeitschritt anhand der in Kapitel 6.1.3 dargestellten Gleichungen (Modellreaktionen 1 bis 11 und Reaktionsgleichungen 1 bis 11) durchgeführt. Auf diese Weise entstehen die Stoffmengen-, Massen-, Wasser- und Energiebilanzen. Berücksichtigt werden die zugeführten Stoffe (Luftzufuhr, Stoff-, Material- und Wasserzugabe), der Feststoff einschließlich Wasser als Miete oder im Reaktor und die Emissionen (Gasaustritt, Stoff-, Material- und Wasserverlust). Durch Zusammenführung der berechneten Ergebnisse in Werte-Zeit-Arrays und der Regelung mit logischen Boolean (ja/nein)-Zeit-Arrays erfolgt die Übernahme in andere Iterationsschleifen, zu denen Abhängigkeiten der einzelnen Parameter bestehen. Die Simulationsergebnisse werden auf diese Weise in mehreren Durchläufen ermittelt (siehe Abbildung 6-1). Durch den Bezug auf die Zeiteinheit entstehen dann die Stoff-, Volumen-, Massen- und Energieströme.

Chargen- und quasi-kontinuierlicher Betrieb

Für den Chargen- bis hin zum quasi-kontinuierlichen Betrieb, werden die Faktoren für den Abbau, die den Faktor für die Verzögerungsphasen schon beinhalten, zu den vorgegebenen Zeitpunkten addiert. Die Gesamtmolmengen der drei Substratgruppen Kohlenhydrate, Fette und Proteine werden dann mit diesem neuen Faktor, nach Teilung der Molmengen durch die Anzahl der Chargen, multipliziert. Dadurch entsteht bei jeder erneuten Zugabe von Substrat eine Berücksichtigung der vorangegangenen Abbauvorgänge und des daraus resultierenden Restsubstrats mit dem dazugehörigen Stand des mikrobiellen Abbaus.

Simulation der Anlaufphase

Die Simulation der Anlaufphase für den Chargen- bis hin zum quasi-kontinuierlichen Betrieb erfolgt durch Einfügung eines Verzögerungsfaktors am Anfang der dargestellten Zeitskala ggf. über mehrere Chargenzugaben und -entnahmen hinweg und allgemein durch Eintrag von Sauerstoff, also dem Sauerstoffanteil in der Luft im freien Porenvolumen des Feststoffs am Anfang.

Da in der Anlaufphase des Batch- oder Chargen- bzw. quasi-kontinuierlichen Betriebs eine zusätzliche Wachstumsverzögerung einzelner Mikroorganismengruppen (Essigsäure-, Wasserstoff-, Kohlendioxid- und Methanbildner) - aufgrund einer materialmengenabhängigen Vielzahl von Lösungs-, Transport- und Diffusionsvorgängen, die Einfluss auf das verwertbare Substratangebot für die Mikroorganismen und auf die Freisetzung der entstehenden Produk-

te haben, zu erwarten ist - wurde ein weiterer Faktor eingefügt. Die Funktion entspricht der Abbau- und Verzögerungsfunktion, jedoch mit $k = 50 \%$. Das bedeutet, dass nach 50 % der Gesamtzeit 50 % des jeweiligen Substrats verwertet bzw. freigesetzt wird. Die Gesamtzeit entspricht für den aeroben Betrieb 10 Gew.-% der feuchten Gesamtmaterialmasse als dimensionslose Zahl. Für den anaeroben Betrieb wird diese nochmals mit der vorzugebenden Verzögerungsphasenzeit, die im Programm änderbar ist, multipliziert, um die geringeren Abbaugeschwindigkeiten anaerober Mikroorganismen einzubeziehen. Im Chargenbetrieb wird die Verzögerungsphasenzeit auf die Gesamtabbauzeit begrenzt.

Sind zudotierbare Stoffe bzw. Anfangsgehalte von Kalk, Ammonium, Nitrat, Sulfat und/oder Methanol vorgegeben, bleibt eine Adaptionszeit der Mikroorganismen für die weitere Umsetzung dieser Stoffe unberücksichtigt.

Die Werte und Vorgaben können nachträglich durch Umprogrammierung geändert werden. Für die durchgeführten Simulationen (Kapitel 7, 8 und 9) ergaben sie jedoch die stimmigsten Ergebnisse.

Simulation des passiven Lufteintrags

Die Simulation des passiven Eintrags von Luft im Chargen- bzw. quasi-kontinuierlichen Betrieb erfolgt durch die simulierte Zugabe des Sauerstoffs, der sich im freien Porenvolumen in der Luft befindet. Dadurch können anaerobe Abbauvorgänge verzögert und aerobe unterstützt werden. Das Umsetzen von Kompostschüttungen wird in der gleichen Weise simuliert. Der Lufteintrag erfolgt dann an vorzugebenden Zeitpunkten. Wegen der ungleichmäßigen Durchströmung bzw. Korn- und Porengrößenverteilung wird angenommen, dass 40 % des Sauerstoffs in dem sich verändernden freien Porenvolumen („free air space“ (fas)) unverbraucht entweicht. Der Rest steht der simulierten mikrobiellen Verwertung zur Verfügung (siehe auch Kapitel 6.1.8).

In der gleichen Weise wird im Simulationsmodell auch die dauerhafte passive Belüftung durch Diffusion an der Oberfläche (Poincelot, 1977) (siehe Kapitel 5.3) bis zu einer Tiefe von 0,1 m berücksichtigt. Die passive Belüftung durch freie Konvektion („Kaminzugeffekt“) kann ebenfalls simuliert werden (Kapitel 6.1.8).

Einstellung eines stabilen Simulationsergebnisses und Prozessoptimierung

Alle Prozesse (Batch-, Chargen- bis hin zum quasi-kontinuierlichen Betrieb) können Simulationsergebnisse ergeben, die nicht zu einem stabilen Zustand führen. Das bedeutet, dass ein Prozess unter bestimmten Voraussetzungen instabil sein kann, denn das Simulationsmodell

liefert zu jeder möglichen Vorgabe ein dem entsprechendes Ergebnis. Sichtbar wird dies durch sich permanent ändernde Ausgabewerte. Durch Modifikation von Parametern muss dann ein stabiler Zustand gefunden oder ggf. durch entsprechende Vorgabe im Programm automatisch gesucht werden. Angezeigt wird als Hilfe die Überschreitung von Grenzwerten (Kapitel 6.2), jedoch keine Handlungsanweisungen, denn diese werden bei entsprechender Vorgabe automatisch von dem Programm durchgeführt. Auf diese Weise erfolgt auch eine Prozessoptimierung, wobei dann zusätzlich die zu optimierenden Parameter verändert werden können.

6.1.2 Modellmoleküle

Die abbaubaren Bestandteile in den Materialien im Bereich der Abfallwirtschaft sind den Kohlenhydraten, Proteinen oder Fetten zuzuordnen. Die drei Gruppen können folgendermaßen beschrieben werden:

Kohlenhydrate

Die Kohlenhydrate sind organische Verbindungen, die aus Kohlenstoff, Sauerstoff und Wasserstoff zusammengesetzt sind (z. B. Stärke, Zellulose, Zucker). Sie dienen der Erhaltung und dem Aufbau der Zellstrukturen sowie der Energieversorgung (Kaltwasser, 1980).

Die vielfach in Pflanzen vorkommenden carbocyclischen Kohlenhydrate, also die ringförmigen Kohlenstoffverbindungen, die ausschließlich Kohlenstoffatome als Ringglieder enthalten (Lexikon der Chemie, 2000), lassen sich unterteilen in die Gruppe der

- Monosaccharide (z. B. Glucose, Galactose, Fructose)
- Oligosaccharide (z. B. Saccharose, Trehalose, Maltose, Cellobiose, Gentiobiose, Lactose, Raffinose) und
- Polysaccharide (z. B. Cellulose, Hemicellulose, Stärke, Pektin).

Die Glucose (Summenformel: $(C_6H_{12}O_6)_n$) ist im Pflanzenbereich weit verbreitet und vor allem in Früchten, Samen, Knollen, Wurzeln und Pflanzenfasern enthalten (Bidlingmaier, 1983).

Lignin (siehe auch Kapitel 5.1), neben der Cellulose und Hemicellulose der Hauptbestandteil der Pflanzen, ist nicht in den Pflanzenstoffwechsel mit eingebunden und erfüllt nur mechanische Funktionen (Schlegel, 1992). Lignin reichert sich daher i. d. R. im Substrat an, wodurch die Stickstoffimmobilisierung zunimmt (Grabbe, 1988).

Proteine

Proteine sind ein Hauptbestandteil des alle Zellen aufbauenden Protoplasmas. Sie bestehen aus komplex zusammengesetzten Riesenmolekülen, die aus folgenden Elementen aufgebaut sind: Kohlenstoff (C): 50 - 55 Massen-%, Wasserstoff (H): 6,6 - 7,3 Massen-%, Sauerstoff (O): 19 - 24 Massen-%, Stickstoff (N): 15 - 19 Massen-%, Schwefel (S): 0,3 - 2,4 Massen-% sowie teilweise aus Phosphor (P), Kalium (K) und Metallen (Kaltwasser, 1980). Aufgrund der Vielfalt der Molekülzusammensetzungen gibt es keine allgemeine Summenformel.

Fette

Die Fette (Lipide) (Summenformel: $C_n(H_{2n+1})-COOH$) kommen in großen Mengen im Tier- und Pflanzenreich vor und sind vor allem in Samen, Fleisch und Fäkalien vorhanden (Bidlingmaier, 1983). Die natürlich vorkommenden Fette sind Gemische zahlreicher Triglyceride (Ester des Glycerins) mit Fettsäuren wie z. B. Buttersäure, Capronsäure, Palmitinsäure, Stearinsäure, Ölsäure und Linolsäure.

Die drei Substratgruppen Kohlenhydrate, Proteine und Fette werden in dem Simulationsmodell jeweils durch ein Modellmolekül vertreten:

Das gewählte Modellmolekül als Vertreter der Kohlenhydrate ist die Glucose $C_6H_{12}O_6$ mit $M = 180 \text{ kg/kmol}$. Es wird angenommen, dass die Kohlenhydrate im Verhältnis leicht abbaubar sind, denn nach Ottow (1997) oder Bekker (2007) steigt die mikrobielle Abbaubarkeit in der Reihenfolge Zucker, Stärke, Proteine, Hemizellulosen, Fette, Wachse, Cellulose und Lignin.

Das gewählte Modellmolekül als Vertreter der Proteine ist ein theoretisches berechnetes Molekül $C_{70} H_{110} O_{20} N_{20} S$ mit $M = 1582 \text{ kg/kmol}$ und einer angenommenen Bildungsenthalpie von $418,68 \text{ kJ/mol}$. Es enthält nach Kaltwasser (1980) 53 % Kohlenstoff, 7 % Wasserstoff, 20 % Sauerstoff, 18 % Stickstoff und 2 % Schwefel. Das Modellmolekül ähnelt dem für Klärschlamm verwendeten Modellmolekül (z. B. $C_{70} H_{135} O_{38} N_{18} S$). Es wird angenommen, dass die Proteine im Verhältnis mäßig abbaubar sind.

Das gewählte Modellmolekül als Vertreter der Fette ist die Propionsäure C_2H_5-COOH mit $M = 74 \text{ kg/kmol}$. Es wird angenommen, dass die Fette im Verhältnis schwer abbaubar sind. Ihre hemmende Wirkung bei der Vergärung (z. B. Witty, 1984) bleibt in dem Simulationsmodell unberücksichtigt, jedoch hat sie Einfluss auf den pH-Wert.

Die unterschiedlichen Abbaubarkeiten der organischen Anteile unter aeroben und anaeroben Milieubedingungen können im Simulationsprogramm neben der vorgegebenen zusätzlichen Wachstumsverzögerung einzelner Mikroorganismengruppen (Essigsäure-, Wasserstoff-, Kohlendioxid- und Methanbildner, siehe auch Kapitel 6.1.1) durch Vorgabe der prozentualen Abbaubarkeit von Kohlenhydraten, Proteinen und Fetten berücksichtigt werden. Es wird in der Vorgabe und den späteren Simulationen davon ausgegangen, dass die Kohlenhydrate (allg.), Stärke, Aminosäuren und Hemicellulose zu 70 %, Fette und Wachse zu 45 %, Proteine und Cellulose zu 50 % abgebaut werden können und Lignin (siehe auch Kapitel 6.1.2) gar nicht abgebaut werden kann (nach z. B. Haug, 1980, Bidlingmaier, 1983). Die Abbaubarkeiten von nicht genannten Substratgruppen oder abweichende Annahmen können durch Addition zu einer diesen entsprechenden Substratgruppe simuliert werden. Auch milieubedingte unterschiedliche Abbaubarkeiten von Substraten (aerob/anaerob) können auf diese Weise einkalkuliert werden.

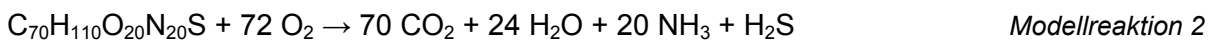
6.1.3 Stöchiometrische Modellreaktionen

Für die Berechnungen der Stoff- und Energiemengen bis hin zur Mineralisierung werden im Modell folgende Reaktionen - den unterschiedlichen Sauerstoffverhältnissen entsprechend - eingesetzt (nach Lexikon der Chemie, 2000, Schlegel, 1992 und z. B. Mudrack und Kunst, 1991, Klass, 1984, Gottschall, 1990, Bidlingmaier, 1983, Braun, 1982, Märkl et al., 1980):

Aerobe Reaktionen



Glucose + Sauerstoff → Kohlendioxid + Wasser



Modellprotein + Sauerstoff → Kohlendioxid + Wasser + Ammoniak + Schwefelwasserstoff



Propionsäure + Sauerstoff → Kohlendioxid + Wasser



Essigsäure + Sauerstoff → Kohlendioxid + Wasser

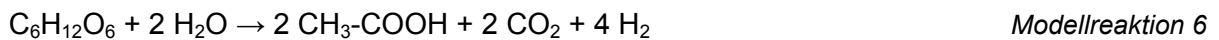


Methanol + Sauerstoff → Kohlendioxid + Wasser

Ist der rechnerisch zur Verfügung gestellte Sauerstoff (siehe Kapitel 6.1.8) nach den Reaktionsgleichungen 1 bis 3 (Kapitel 6.1.9) verbraucht, werden die verbleibenden Mole der rechnerisch zur Verfügung gestellten Kohlenhydrate, Proteine und Fette (Kapitel 6.1.1) in den

folgenden Modellreaktionen im Simulationsmodell weiter umgesetzt. Hierbei wird zwischen aerober und anaerober Betriebsweise nicht unterschieden. Der Ablauf aller Reaktionen wird also durch die rechnerisch zur Verfügung gestellten Moleküle seitens der Edukte begrenzt.

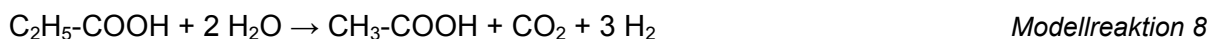
Acidogenese/Acetogenese



Glucose + Wasser → Essigsäure + Kohlendioxid + Wasserstoff

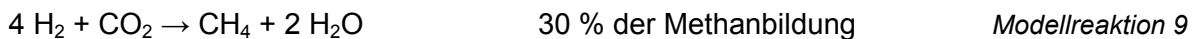


Modellprotein + Wasser → Essigsäure + Kohlendioxid + Wasserstoff + Ammoniak + Schwefelwasserstoff

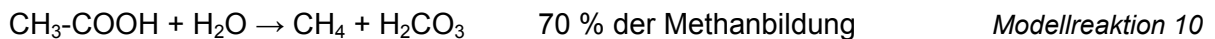


Propionsäure + Wasser → Essigsäure + Kohlendioxid + Wasserstoff

Methanogenese



Wasserstoff + Kohlendioxid → Methan + Wasser (hydrogenotrophe Methanogenese)



Essigsäure + Wasser → Methan + Kohlensäure (acetoklastische Methanogenese)



Kohlensäure + Wasserstoff → Methan + Wasser

Die geschwindigkeitsbestimmende Reaktion ist die Methanbildung aus Essigsäure (Märkl et al., 1983) (acetoklastische Methanogenese). Obwohl die Methanbildung aus dem Salz der Essigsäure (Acetat) energetisch am ungünstigsten ist, werden rund 70 % des Methans aus Acetat und nur rund 30 % aus Wasserstoff und Kohlendioxid gebildet (Mudrack und Kunst, 1991) (hydrogenotrophe Methanogenese).

Für die Berechnungen werden im Simulationsmodell die Molmengen eingesetzt und entsprechend der Gleichungen zu dem Gesamtvorrat des jeweiligen Stoffs addiert oder subtrahiert. Auf diese Weise können die Volumina, Massen und Konzentrationen über die spezifischen Molmassen für jeden Zeitpunkt berechnet und ausgegeben werden. Unberücksichtigt sind bei diesen Berechnungen die unterschiedlichen Dissoziationszustände.

Verteilung zwischen Gas- und Wasserphase

Die Berechnung der Verteilungskoeffizienten von Ammoniak und Schwefelwasserstoff zwischen der Gas- und Wasserphase erfolgt anhand der Gleichungen 6-35 und 6-36 (siehe Kapitel 6.1.9). Die Verteilung von Kohlendioxid zwischen der Gas- und Wasserphase erfolgt anhand einer empirisch ermittelten Funktion (siehe Kapitel 6.1.10).

Es wird davon ausgegangen, dass die Löslichkeiten der molekularen Gase Sauerstoff, Stickstoff, Methan und Wasserstoff in Wasser vernachlässigbar gering sind.

Berücksichtigter Temperatureinfluss auf den mikrobiologischen Abbau

Mesophile Mikroorganismen haben ihr Temperaturoptimum zwischen 30 °C und 40 °C. Die thermophilen Mikroorganismen hingegen bei Temperaturen zwischen 50 °C und 60 °C (siehe Kapitel 4.2). Die höhere Aktivität von Mikroorganismen im thermophilen Temperaturbereich kann zu größeren Biogaspotentialen führen (Kaltschmitt und Hartmann, 2001). Für Bioabfall ist zum Beispiel im thermophilen Betrieb von einer 5 % bis 10 % höheren Biogasmenge berichtet worden. Beim anaeroben Abbau von Fett im thermophilen Temperaturbereich kann die Aktivität der Mikroorganismen auch durch verschiedene chemisch-physikalische Effekte gesteigert werden. Durch höhere Diffusionskoeffizienten, niedrigere Viskositäten und eine gesteigerte Wasserlöslichkeit bei zunehmenden Temperaturen können verbesserte Bedingungen für den Stofftransport zum Beispiel von Fetten geschaffen werden (Reimann und Märkl, 2001).

Auch bei der aeroben mikrobiologischen Abfallbehandlung gibt es einen mesophilen und thermophilen Temperaturbereich (Kapitel 5.2). Bei den diskontinuierlich betriebenen Kompostierungsverfahren steigt die Temperatur von den mesophilen in den thermophilen Bereich und fällt dann wieder ab (Abbildung 7-14). Bei kontinuierlich betriebenen Kompostierungsverfahren entfällt der mesophile Temperaturanstieg am Anfang (z. B. Körner, 2009, Weißenfels, 2001, Krogmann, 1994). Die Abbaurate ist bei den diskontinuierlich betriebenen Kompostierungsverfahren höher (Finstein und Morris 1975, Haug, 1980). Temperaturen über 60 °C gelten für Pilze als limitierend (Finstein und Morris 1975). Eine Wärmeproduktion kann von Pilzen also nur in der mesophilen Phase erfolgen (Rüpprich, 1990).

Um den Einfluss der Temperatur auf die aerobe und anaerobe biologische Abfallbehandlung (Kapitel 5.2) in das Simulationsmodell einzubeziehen, wird im Simulationsmodell bei anaerober Betriebsweise die Produktbildung in der Acetogenese (Modellreaktionen 6 - 8) durch Multiplikation der Edukte Glucose, Modellprotein und Propionsäure mit einem Faktor berücksichtigt. Der Faktor ist temperaturabhängig und zeigt als Funktion den in der Abbildung 6-3 gezeigten Verlauf. Der Kuvverlauf wurde aus den Angaben in der Literatur entwickelt und

berücksichtigt empirische Messungen. Die Einbeziehung des anaeroben Faktors kann im Simulationsprogramm ausgeschaltet werden.

Besonders ist, dass der Kufenverlauf der Temperatur sich in dem Simulationsprogramm aus den Eingaben und den daraus berechneten Bedingungen pro Zeitschritt entwickelt und nicht als Funktion vorgegeben wird.

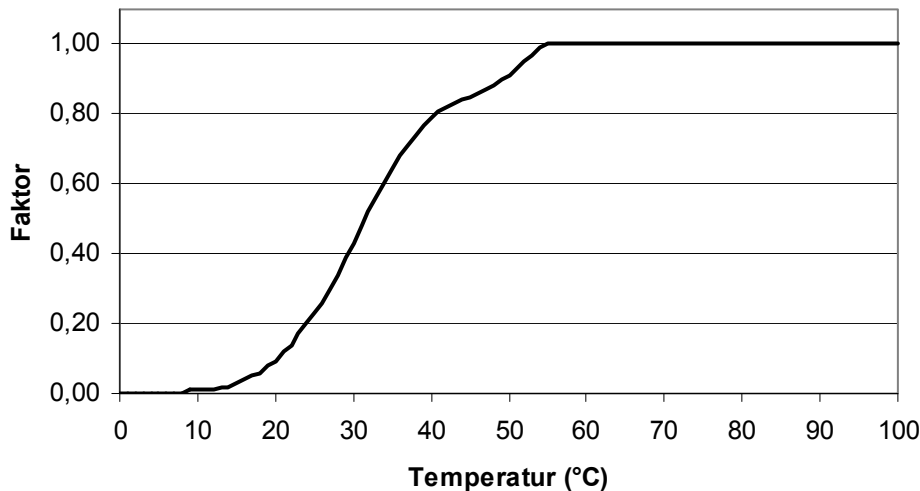


Abb. 6-3: Im Simulationsmodell eingesetzter Faktor zur Berücksichtigung des Temperatureinflusses auf den mikrobiologischen Abbau unter anaeroben Milieubedingungen

Unter aeroben Bedingungen wird das Temperaturoptimum mesophiler Mikroorganismen anders berücksichtigt. Ab 40 °C werden nur 10 % des zur Verfügung stehenden Substrats in der Acetogenese (Modellreaktionen 6 - 8), durch Multiplikation der Edukte (Glucose, Modellprotein und Propionsäure) mit 0,1, abgebaut. Alle anderen Reaktionen sind nur indirekt als Folge geringerer Produktbildung betroffen. Sauerstoffreaktionen sind also bis auf die Reaktionsgleichung 2 (Kapitel 6.1.9) im Simulationsmodell temperaturunabhängig.

Die dargestellten Einschränkungen ergaben in der Simulation Ergebnisse, die mit empirischen Messungen vergleichbar sind (siehe Kapitel 7, 8 und 9). Eine Änderung oder Erweiterung der Zusammenhänge kann im Simulationsprogramm aber nachträglich erfolgen.

6.1.4 Molare Reaktionsenthalpieänderungen

Auch bei der biologischen Abfallbehandlung werden die Naturstoffe mit höherem Energieinhalt in Abbauprodukte mit niedrigerem Energieinhalt umgewandelt, wobei Energie frei wird. Diese Energie wird von den Mikroorganismen zur Erhaltung ihres Lebens verbraucht und z. T. an die Umgebung in Form von Wärme abgegeben (exotherme Reaktionen). Andere

Reaktionen, die Energie benötigen, können mit Hilfe dieser Energie erst erfolgen (endotherme Reaktionen) (aus Lexikon der Chemie, 2000). Die Enthalpie eines Moleküls umfasst die Bindungsenergie und die Energie aufgrund struktureller Unterschiede der Moleküle (Breuer, 1985). Eine negative Enthalpieänderung charakterisiert eine exotherme und eine positive Enthalpieänderung eine endotherme Reaktion. Über die Berechnungen der Enthalpieänderungen chemischer Reaktionen kann die Energiemenge, die von den Mikroorganismen für ihren Lebenserhalt verbraucht oder in Form von Wärme frei wird, angegeben werden.

Nach dem Lexikon der Chemie (2000) unterscheidet man zwischen der molaren Reaktionswärme Q_V bei konstantem Volumen (isochor) der Reaktionsmischung und der molaren Reaktionswärme Q_P bei konstantem Druck (isobar). Bei Q_P ist von dem reagierenden System aufgrund der Änderung seines Volumens um ΔV eine Volumenarbeit $p \cdot \Delta V$ zu leisten, die zu Lasten der freigesetzten Wärme geht. Große Volumenänderungen treten bei Gasreaktionen mit Stoffmengenänderungen auf. Setzt man die Gültigkeit des idealen Gasgesetzes (Zustandsgleichung) voraus, gilt $p \cdot \Delta V = \Delta n \cdot R \cdot T$. Für Reaktionen in flüssiger und fester Phase sind die Volumeneffekte und damit die Unterschiede zwischen Q_V und Q_P etwa 10^3 -mal kleiner als für Gase (aus Lexikon der Chemie, 2000). Allgemein ist die Ursache für das Auftreten von Reaktionswärme der Unterschied zwischen den inneren Energien und den Enthalpien der Ausgangs- und Endstoffe. Verläuft die Reaktion irreversibel, ist die Reaktionswärme Q_V gleich der molaren Reaktionsenergie und die Reaktionswärme Q_P gleich der molaren Reaktionsenthalpie (Thermodynamik, 1. Hauptsatz). Diese lassen sich für ideale Systeme durch Addition aus den tabellierten Standardbildungsenthalpien berechnen (aus Lexikon der Chemie, 2000).

Im Simulationsmodell wird zur Vereinfachung von konstantem Druck ausgegangen. Die Volumenänderungsarbeit bleibt bis auf Kohlendioxid unberücksichtigt, da die Reaktionen überwiegend in flüssiger und fester Phase stattfinden. Die Volumenänderungsarbeit der betrachteten Gase liegt bei ca. 1 % der Bildungsenthalpien (aus Lexikon der Chemie, 2000). Geht man davon aus, dass die Volumenänderungsarbeit von Flüssigkeiten und Feststoffen noch etwa 10^3 -mal kleiner angesetzt werden kann, ist eine Vernachlässigung vertretbar.

Die relevanten und im Simulationsmodell berücksichtigten Standard Bildungsenthalpien (Bezugstemperatur 298 K (25 °C)) sind in der folgenden Tabelle 6-1 mit Werten aus CRC (2006) (freie Bildungsenthalpieänderungen ($\Delta_f G$) ohne Ionisierung nach Gibbs) aufgeführt:

Tab. 6-1: Freie Standard Bildungsenthalpieänderungen für biochemische Reaktionen nach Gibbs ohne Ionisierung (CRC, 2006)

	Molare freie Bildungs- enthalpieänderung (kJ/mol)	Molare freie Bildungs- enthalpieänderung (kcal/mol)
Ammoniak (g)	81	19
Sauerstoff (g)	0	0
Wasser (l)	-157	-38
Wasserstoff (g)	80	19
Glukose (l)	-436	-104
Methan (g)	109	26
Schwefelwasserstoff (g)	20	5
Kohlendioxid (aq)	-547	-131
Kohlendioxid (g)	-394	-94
Acetat/Propionat (l)	-250	-60
Methanol (l)	-16	-4

g: gasförmig, aq: gelöst in Wasser, l: flüssig, 1 kcal = 4,1868 KJ

Um die vielen Reaktionen energetisch darstellen zu können, sind weitere Vereinfachungen vorgenommen worden. Die berücksichtigte Reaktionswärme einer jeden Reaktion in dem Simulationsmodell setzt sich aus der Addition der freien Bildungsenthalpieänderungen der Edukte und Produkte zusammen, denn auch die Edukte werden bei Substraten aus der Abfallwirtschaft in der Regel erst gebildet. Die freien Bildungsenthalpieänderungen, die vor der Bildung des Hauptedukts entstehen, fließen bei aerober Milieuvorgabe als Faktor zwei ein. Bei anaeroben Milieuverhältnissen wird von einer Kompensation durch Energie benötigende Reaktionen ausgegangen.

Es hat sich in den durchgeführten Simulationen gezeigt, dass - in Abhängigkeit von der Abbaurrate - durch diese Annahmen realistische und mit empirischen Messungen vergleichbare Ergebnisse erzielt werden. Eine Änderung dieser und noch folgender Annahmen ist aufgrund des flexiblen Programmaufbaus aber durch Umprogrammierung möglich.

Die relevanten und im Simulationsmodell berücksichtigten Reaktionen für die Wärmebildung sind in Tabelle 6-2 aufgeführt. In den Berechnungen sind die freien Standard Bildungsenthalpieänderungen der Edukte mit berücksichtigt, da auch diese bei Substraten aus der Ab-

fallwirtschaft in der Regel erst entstehen. In der Methanogenese sind sie daher also nicht einbezogen. Auch die Sauerstoffmoleküle der aeroben Reaktionen und die Wassermoleküle der Reaktionen in der Acidogenese und Acetogenese werden zur Verfügung gestellt und fließen daher bei den Berechnungen nicht mit ein. Für den anaeroben Glucoseabbau wurde ein Korrekturfaktor (1,67) eingesetzt, der das breite Spektrum des anaeroben Kohlenhydrat-abbaus (Weiland, 1989) berücksichtigt. Berechnungsdifferenzen entstehen durch Auf- und Abrunden.

Tab. 6-2: Simulationsmodell-Reaktionen für die molare Enthalpieänderung

Simulationsmodell-Reaktionen für die molare Enthalpieänderung	ΔH_{Abb} (kJ/mol)	ΔH_{Abb} (kcal/mol)
Aerobe Reaktionen		
$\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6 + 6 \text{O}_2 \rightarrow 6 \text{CO}_2 + 6 \text{H}_2\text{O}$ (-104) $\rightarrow 6 \cdot (-94) + 6 \cdot (-38)$	-3747	-895
$\text{C}_{70}\text{H}_{110}\text{O}_{20}\text{N}_{20}\text{S} + 72 \text{O}_2 \rightarrow 70 \text{CO}_2 + 24 \text{H}_2\text{O} + 20 \text{NH}_3 + \text{H}_2\text{S}$ (-100) $\rightarrow 70 \cdot (-94) + 24 \cdot (-38) + 20 \cdot 19 + 5$	-30166	-7205
$\text{C}_2\text{H}_5\text{-COOH} + 3,5 \text{O}_2 \rightarrow 3 \text{CO}_2 + 3 \text{H}_2\text{O}$ (-60) $\rightarrow 3 \cdot (-94) + 3 \cdot (-38)$	-1905	-455
$2 \text{CH}_3\text{-OH} + 3 \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{CO}_2 + 4 \text{H}_2\text{O}$ ($2 \cdot (-4) \rightarrow 2 \cdot (-94) + 4 \cdot (-38)$) / 2	-724	-173
Acidogenese/Acetogenese		
$\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6 + 2 \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2 \text{CH}_3\text{-COOH} + 2 \text{CO}_2 + 4 \text{H}_2$ ($(-104) \rightarrow 2 \cdot (-60) + 2 \cdot (-94) + 4 \cdot 19$) $\cdot 1,67^*)$	-2353	-562
$\text{C}_{70}\text{H}_{110}\text{O}_{20}\text{N}_{20}\text{S} + 90 \text{H}_2\text{O} \rightarrow 15 \text{CH}_3\text{-COOH} + 40 \text{CO}_2 + 84 \text{H}_2 + 20 \text{NH}_3 + \text{H}_2\text{S}$ (-100) $\rightarrow 15 \cdot (-60) + 40 \cdot (-94) + 84 \cdot 19 + 20 \cdot 19 + 5$	-11593	-2769
$\text{C}_2\text{H}_5\text{-COOH} + 2 \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{-COOH} + \text{CO}_2 + 3 \text{H}_2$ (-60) $\rightarrow (-60) + (-94) + 3 \cdot 19$	-653	-156
$2 \text{CH}_3\text{-OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{-COOH} + 2 \text{H}_2$ ($2 \cdot (-4) \rightarrow (-60) + 2 \cdot 19$) / 2	-59	-14
Methanogenese		
$4 \text{H}_2 + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + 2 \text{H}_2\text{O}$ s.o. $\rightarrow 26 + 2 \cdot (-38)$	-205	-49
$\text{CH}_3\text{-COOH} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{CO}_3$ s.o. $\rightarrow 26 + (-131)$	-440	-105
$\text{H}_2\text{CO}_3 + 4 \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + 3 \text{H}_2\text{O}$ s.o. $\rightarrow 26 + 3 \cdot (-38)$	-364	-87

Anmerkung: Berechnungsdifferenzen entstehen durch Auf- und Abrunden.

*): Korrekturfaktor

Die Simulationsmodell-Reaktionen für die molare Enthalpieänderung geben also Wärme - nach Abzug der für den Ablauf der Reaktionen bzw. für die Stoffbildungen benötigten Energie - an die Umgebung ab.

6.1.5 Thermodynamik

Nach dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik bleibt die Gesamtenergie eines abgeschlossenen Systems, bei dem keine Energie und Masse zu- oder abgeführt wird, konstant. Die Energie des Systems (E) kann in innere Energie (U), potentielle Energie (E_{pot}) und kinetische Energie (E_{kin}) unterteilt werden. Bei Änderung gilt: $\Delta E = \Delta(U + E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}})$ (aus VDI-Wärmeatlas, 2006). Die innere Energie ist der im Inneren des Systems gespeicherte Anteil der Energie, der durch Zu- oder Abfuhr von Wärme und Arbeit verändert werden kann (z. B. Schmitz, 2011). In den meisten Anwendungen aus dem Bereich der Wärmeübertragung und so auch in dem Simulationsmodell spielt die Änderung der potentiellen und der kinetischen Energie des Systems keine Rolle, so dass $\Delta E = \Delta U$ gesetzt werden kann.

Auch die Energiezu- oder -abfuhr durch Arbeit ist in diesem Simulationsmodell nicht relevant. Aufgrund der möglichen Gasbildung, Belüftung und Wasserzu- und -abfuhr und Substratmengenänderungen kann das Simulationsmodell bei entsprechenden Vorgaben ein offenes instationäres System sein. Die innere Energie (U) des betrachteten geschlossenen Systems wird durch Zu- oder Abfuhr von thermischer Energie (Wärme) verändert.

Die Enthalpie (H) ist allgemein ohne Arbeit die Summe der inneren Energie (U) und dem Produkt aus Druck (p) und Volumen (V), also der Energie, die zur Aufrechterhaltung des Strömungsprozesses notwendig ist: $H = U + p \cdot V$ (aus VDI-Wärmeatlas, 2006).

Damit das instationäre System des Simulationsmodells nach dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik beschrieben werden kann, wird ein Bilanzraum mit konstantem Volumen und Druck pro Zeitschritt (p. Z.) betrachtet, an dessen Ein- und Ausgangsquerschnitt die Massen konstant bleiben. Für dieses Kontrollvolumen gelten dann stationäre Bedingungen, die mit den folgenden Gleichungen beschrieben werden können. Ein positives Vorzeichen ist in diesen Gleichungen jeweils mit Massen- oder Energieaufnahme verbunden und ein negatives entsprechend mit Massen- oder Energieabgabe.

Die Massen- und Energien werden im Simulationsprogramm durch den Bezug auf die Zeiteinheit zum Massen- bzw. Energiestrom umgerechnet. Ein Zeitschritt kann durch Umrechnung die Einheit Stunden, Tage, Wochen und Monate haben. Die Basiseinheit ist der Tag.

Zur Berechnung, nicht nur der Thermodynamik, werden die Abmaße des Materials bzw. der Schüttung oder des Reaktors benötigt. In Kapitel 6.2.7 sind in einer Übersicht die im Simulationsmodell verwendeten Strecken, Flächen- und Volumenberechnungen (Dreiecks-, Tafel-

oder Trapezmiete, Zylinder-, Trommel-, kugelförmiger Reaktor und Boxenform) aufgeführt. Die in diesem Simulationsprogramm eingesetzten Stoffwerte sind in Kapitel 6.1.14 zusammengefasst.

Änderungen der inneren Energie des Systems

Für die thermodynamischen Berechnungen des Simulationsmodells müssen das System und die Systemgrenzen festgelegt werden. Aufgrund der Energie- und Massenströme in den und aus dem betrachteten Feststoff ist das Simulationsmodell thermodynamisch ein offenes instationäres System mit geringen Drücken und sich ideal verhaltenden Gasen. Durch die im Simulationsprogramm unterschiedlichen Reaktor- und Schüttungsformen mit und ohne Um-mantelung und Isolierung, bis hin zur Temperierung, entstehen jeweils verschiedene zu be-achtende thermische Einflüsse. Auch durch Wasserzugabe und Belüftung können extreme Bedingungen entstehen, die zu folgerichtigen Simulationsergebnissen führen sollen. Als Bei-spiel wäre stehendes Wasser auf dem Material bei Wasserzugabe zu nennen. Die Tempera-tur des Wassers hat dann auch Einfluss auf die Wärme des Materials. Ebenso die Umgebungstemperatur bei fehlender Isolierung. Hinzu kommen unterschiedliche Strö-mungsbedingungen am Rand des betrachteten Systems und im Material durch aktive oder passive Belüftung. Eine Wärmeänderung erfolgt auch aufgrund des Abbaus organischer Substanz durch Mikroorganismen. Die durch den Stoffwechsel der Mikroorganismen produzierte Energie wird zum Teil verbraucht (Biomassewachstum und -erhalt) und zum Teil in Form von Wärme an die Umgebung abgegeben.

Die Änderungen der inneren Energie ($\Delta U_{fM(it)}$) pro Zeitschritt (p. Z.) des im Simulationsmodell betrachteten Systems, also des feuchten Materials, resultiert aus den Änderungen durch die Wärmeleitung ($\Delta \dot{Q}_L$), Konvektion ($\Delta \dot{Q}_{KV}$) und Wärmestrahlung ($\Delta \dot{Q}_{Str}$), aus dem Wärmegewinn bzw. –verlust durch die trockene Abluft ($\Delta \dot{H}_{Abl}$) und des Wassers in der Abluft ($\Delta \dot{H}_{WL}$), aus der Erwärmung des Materials durch mikrobiologischen Abbau (molare freie Bildungsenthalpie-änderungen) (ΔH_{Abb}), aus der Wärme des Materials vor einer Änderung ($U_{fM(it-1)}$) und der Schmelz- bzw. Erstarrungsenergie (ΔQ_{SE}) (Gleichung 6-2).

$$\Delta U_{fM(it)} = U_{fM(it-1)} \pm \Delta \dot{Q}_L \pm \Delta \dot{Q}_{Kv} \pm \Delta \dot{Q}_{Str} \pm \Delta \dot{H}_{Abl} \pm \Delta \dot{H}_{WL} \pm \Delta H_{Abb} \pm \Delta Q_{SE}$$

- $\Delta U_{fM(it)}$: Änderung der inneren Energie des feuchten Materials p. Z.
 $U_{fM(it-1)}$: Innere Energie des feuchten Materials vor Änderung
 $\Delta \dot{Q}_L$: Änderung durch Wärmeleitung über die Oberfläche (Umgebung, Wassermantel und stehendes Wasser)
 $\Delta \dot{Q}_{Kv}$: Änderung durch Konvektion (Kontakt Umwelt und Belüftung)
 $\Delta \dot{Q}_{Str}$: Änderung durch Wärmestrahlung
 $\Delta \dot{H}_{Abl}$: Änderung durch Enthalpieänderung der trockenen Zuluft/Abluft
 $\Delta \dot{H}_{WL}$: Änderung durch Enthalpieänderung des Wassers der Zuluft/Abluft
 ΔH_{Abb} : Änderung durch mikrobiell erzeugte freiwerdende Energie (molare freie Bildungsenthalpieänderungen Tab. 6-2)
 ΔQ_{SE} : Änderung durch Schmelz- bzw. Erstarrungsenergiezu- bzw. abfuhr bei Über- bzw. Unterschreitung von 0 °C

Gl. 6-2: Änderungseinflüsse auf die innere Energie des Systems p. Z. im Simulationsmodell

Wärmeübertragung

Befinden sich die Körper, zwischen denen Wärme durch Kontakt übertragen wird, relativ zueinander in Ruhe, so spricht man von Wärmeübertragung durch Leitung. Befinden sich die Körper, zwischen denen Wärme übertragen wird, relativ zueinander in Bewegung, so spricht man, thermodynamisch nicht ganz korrekt, von Wärmeübertragung durch Konvektion (aus VDI-Wärmeatlas, 2006). Beide Fälle unterscheiden sich nicht grundsätzlich voneinander, da die Wärme an der Kontaktfläche der Körper stets durch molekularen Transport übertragen wird, so dass für den stationären Zustand eines Zeitschritts an der Kontaktfläche das Erfahrungsgesetz nach Fourier gilt (aus VDI-Wärmeatlas, 2006).

Bei Abfällen mit hohem Wassergehalt ist aufgrund der außerordentlich hohen Enthalpie des Wasserdampfes, der durch Konvektion bedingte Wärmetransport aus dem System verhältnismäßig hoch.

Unberücksichtigt bleibt in dem Simulationsmodell die Wärmeleitung durch den Baustoff der Reaktorumwandung. Es wird davon ausgegangen, dass die Umgebungstemperatur oder die Temperatur des Wassers im Wassermantel (Temperierung) direkte Materialoberflächenberührung hat. Die Auflagefläche bei Dreiecks-, Tafel- und Trapezmiete und Zylinderreaktor bzw. Boxenform bleibt dabei unberücksichtigt.

Die Wärmeleitung des Baustoffs wäre jedoch im Simulationsmodell bei Bedarf durch Programmierung ergänzbar. Die spezifische Wärmeleitfähigkeit üblicher Baustoffe könnte hierzu aus Baustofftabellen wie zum Beispiel Schneider (2012) entnommen werden.

Wärmeleitung

Die Energieübertragung durch Wärmeleitung (\dot{Q}_L) wird als Wärmeübertragung zwischen zwei Punkten unterschiedlicher Temperatur definiert, ohne dass ein Massentransfer zwischen diesen Punkten erfolgt (aus VDI-Wärmeatlas, 2006). Die durch Wärmeleitung ab- bzw. zugeführte Energie pro Zeitschritt wird im Simulationsmodell mit der stationären Lösung der Wärmeleitungsgleichung nach dem Erfahrungsgesetz von Fourier und dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik berechnet (Gleichung 6-3):

$$\dot{Q}_L = \frac{\lambda \cdot A \cdot (t_1 - t_2)}{s}$$

- \dot{Q}_L : Wärmestrom durch Wärmeleitung (W)
- λ : spezifische Wärmeleitfähigkeit (W/(m·K))
- A: wirksame Oberfläche (A_o) oder Grund- bzw. Auflagefläche (A_u) (m^2)
- $t_{1,2}$: Temperaturdifferenz ($^{\circ}C$)
- s: maximale wirksame Schichtdicke (m)

Gl. 6-3: Wärmestrom durch Wärmeleitung p. Z.

Bei üblichen Wassergehalten und Temperaturen liegt die spezifische Wärmeleitfähigkeit (λ) von Bioabfällen bei 0,1 bis 0,5 W/(m·K) (Kranert, 1988). Die spezifischen Wärmeleitfähigkeiten verschiedener Schlämme werden mit Werte zwischen 0,026 und 0,88 W/(m·K) angegeben (Rahman, 1984). Für die Simulation wurde eine spezifische Wärmeleitfähigkeit von $\lambda_{FM} = 0,6$ W/(m·K) für feuchtes Material gewählt. Der Wärmestrom durch Wärmeleitung wird im Simulationsprogramm von Watt ($W = J/s$) in Kilo-Joule pro Zeiteinheit (kJ/d) (d: Tag oder andere Zeiteinheit) umgerechnet.

Wärmeleitung der Umgebung, des Wassermantels und des stehenden Wassers

Die wirksame Oberfläche im Simulationsprogramm ist die Fläche, die mit der Umgebungsluft oder dem Reaktor-Wassermantel in Berührung kommt (A_o) (gesamte Oberfläche ohne Auflagefläche bei Dreiecks-, Tafel- und Trapezmiete und Zylinderreaktor bzw. Boxenform). Die maximale wirksame Schichtdicke (s) ist die Hälfte der im Programm angegebenen Breite oder des Durchmessers (b) der Materialschüttung bei Wärmeleitung zwischen dem feuchten Material und der Umgebung oder des Wassermantels. Bei Wärmeleitung aufgrund stehenden Wassers auf dem Material ist die maximale wirksame Schichtdicke die Schüttungshöhe, die sich mit der Zeit verringert (h_r) (siehe Abbildung 6-10). Die Temperaturdifferenz wird jeweils zwischen dem feuchten Material und der Umgebung, dem Wasser im Mantel und ggf.

dem stehenden Wasser pro Zeitschritt neu berechnet. Wenn keine Isolation im Simulationsprogramm vorgegeben ist, wird die Wärmeleitung zwischen dem Wasser im Mantel oder dem feuchten Material und der Umgebung wirksam. Mit Isolation wird die Umgebungstemperatur nicht berücksichtigt.

Die Erwärmung oder Abkühlung des Materials aufgrund des Wassermantels erfolgt durch Wärmeleitung (\dot{Q}_{LWm}) über die gesamte wirksame Oberfläche (A_O) (ohne Auflagefläche bei Dreiecks-, Tafel- und Trapezmiete und Zylinderreaktor bzw. Boxenform) des Materials. Zur Abschätzung der benötigten Energiemenge, also der Differenz zwischen Abkühlung und Erwärmung und der gewünschten Temperatur, wird bei Bedarf die Wassermasse im Mantel automatisch durch das Programm erhöht und damit die übertragbare Wärme. Die zur Temperaturregelung benötigte Wassermasse wird angezeigt. Ist kein Wassermantel vorhanden, wird die Energiedifferenz berechnet und angezeigt.

Wärmeleitung des Wassermantels oder der Umgebung

Der Wärmestrom durch Wärmeleitung des Wassermantels bzw. der Umgebung (\dot{Q}_{LWmU}) pro Zeitschritt wird im Simulationsmodell wie folgt berechnet (Gleichung 6-4):

$$\dot{Q}_{LWmU} = \frac{\lambda_{fM} \cdot A_O \cdot (t_1 - t_2)}{b/2}$$

\dot{Q}_{LWmU} : Wärmestrom durch Wärmeleitung des Wassermantels bzw. der Umgebung (W)

λ_{fM} : spezifische Wärmeleitfähigkeit feuchtes Material (W/(m·K))

A_O : wirksame Oberfläche (m²)

$t_{1,2}$: Temperaturdifferenz Wassermantel bzw. Umgebung und Material (°C)

b : maximale Breite bzw. Durchmesser der Materialschüttung (m)

Gl. 6-4: Wärmestrom des Wassermantels bzw. der Umgebung p. Z. im Simulationsmodell

Die spezifische Wärmeleitfähigkeit (λ) beträgt im Simulationsprogramm wiederum $\lambda_{fM} = 0,6 \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ für feuchtes Material.

Wärmeleitung des stehenden Wassers

Wird bei der Wasserzugabe mehr Wasser zugegeben als einsickern kann, kommt es in Behältnissen zu stehendem Wasser auf dem Material. Die tragende Oberfläche des Materials (A_U) wird dadurch mit der Temperatur des zugegebenen Wassers abgekühlt oder

erwärmt. Dies geschieht über Wärmeleitung (\dot{Q}_{LstW}) pro Zeitschritt im Simulationsmodell wie folgt (Gleichung 6-5):

$$\dot{Q}_{LstW} = \frac{\lambda_{fM} \cdot A_u \cdot (t_1 - t_2)}{h_r}$$

\dot{Q}_{LstW} : Wärmestrom durch Wärmeleitung des stehenden Wassers (W)

λ_{fM} : spezifische Wärmeleitfähigkeit feuchtes Material (W/(m·K))

A_u : Grund- bzw. Auflagefläche (m²)

$t_{1,2}$: Temperaturdifferenz Wasserzugabe und Material (°C)

h_r : (sinkende) Höhe des Materials (m)

Gl. 6-5: Wärmestrom des stehenden Wassers p. Z. im Simulationsmodell

Konvektion

Unter Wärmeübertragung infolge von Konvektion (\dot{Q}_{Kv}) wird der Wärmetransport von einem Fluid an eine feste Wand oder umgekehrt verstanden. Die kleinsten Teilchen wie Moleküle, Atome und Ionen führen als Träger der Masse die Energie infolge ihrer Strömung mit. Bei freier Konvektion entsteht die Strömung ungezwungen und häufig aufgrund von Dichteunterschieden, die meistens als Folge von Temperaturunterschieden auftreten. Bei erzwungener Konvektion wird die Strömung vorgegeben (aus VDI-Wärmeatlas, 2006). Der spezifische gesamte Wärmeübergangskoeffizient könnte nur experimentell bestimmt werden und hängt z. B. bei der Oberfläche (A_o) einer Kompostmiete von der Windgeschwindigkeit und der relativen Luftfeuchtigkeit ab. Zur Vereinfachung wird im Simulationsmodell von freier Konvektion bei Materialkontakt mit der Umgebung ausgegangen (kaum Wind) und von erzwungener Konvektion bei Belüftung (Gleichung 6-6). Die Wärmeübergangskoeffizienten (α) werden pro Zeitschritt jeweils über eine Nußeltbeziehung bestimmt.

$$\dot{Q}_{Kv} = \alpha \cdot A \cdot (t_1 - t_2)$$

\dot{Q}_{Kv} : Wärmestrom durch Konvektion (W)

α : Wärmeübergangskoeffizient (W/(m²·K))

A : wirksame Oberfläche (A_o) bei freier Konvektion bei Materialkontakt mit der Umgebung (m²)
und Grund- bzw. Auflagefläche (A_u) bei erzwungener Konvektion durch die Belüftung (m²)

$t_{1,2}$: Temperaturdifferenz (°C)

Gl. 6-6: Wärmestrom durch Konvektion p. Z. im Simulationsmodell

Wärmeübertragung bei freier Konvektion

Der Wärmeübergangskoeffizient (α) wird bei freier Konvektion im Simulationsmodell nach Grigull (aus Gieck und Gieck, 1995) für senkrechte Platten pro Zeitschritt berechnet (Gleichung 6-7).

$$\alpha = \frac{Nu \cdot \lambda}{h_r}$$

$$Nu_{Platten} = 0,55 \cdot \sqrt[4]{Gr \cdot Pr}, \quad \text{wenn } 1700 < Gr \cdot Pr \leq 10^8$$

$$Nu_{Platten} = 0,13 \cdot \sqrt[3]{Gr \cdot Pr}, \quad \text{wenn } Gr \cdot Pr > 10^8$$

$$Gr = \frac{g_F \cdot \gamma \cdot \Delta t \cdot \rho_{fL}^2 \cdot h_r^3}{\eta^2}$$

α : Wärmeübergangskoeffizient (W/(m²·K))

Nu: Nußelt-Zahl

$Nu_{Platten}$: Nußelt-Zahl für senkrechte Platten bei freier Konvektion

λ : Wärmeleitfähigkeit des Fluids (W/(m·K)) (feuchte Luft: $\lambda_{fL} = 0,024$ W/(m·K))

h_r : Anströmlänge (m) (sinkende Materialhöhe oder Mieten-/Reaktorhöhe)

g_F : Fallbeschleunigung (m/s²)

γ : räumlicher Ausdehnungskoeffizient des Fluids (feuchte Luft) (bei Gasen: $1/T_U$) (1/K)

T_U : Temperatur der Umgebung (vorgegeben) (273,15 °C + t_U °C) (K)

Δt : Temperaturdifferenz zwischen Oberfläche und Fluid (°C)

ρ_{fL} : Dichte feuchte Luft (kg/m³)

η : dynamische Viskosität Fluid (Pa·s)

Pr: Prandtl-Zahl

Gr: Grashof-Zahl (Gr · Pr: Rayleigh-Zahl (Ra))

Gl. 6-7: Wärmeübergangskoeffizient bei freier Konvektion p. Z. im Simulationsmodell

Unberücksichtigt bleiben also die verschiedenen möglichen Radien der Reaktorformen. Der Wärmeübergangskoeffizient bei waagerechtem Rohr wäre z. B. bei geringer Grashof-Zahl ($Gr \cdot Pr < 10^5$) etwas kleiner und bei einem vertikalen Zylinder etwas größer. Der sehr viel höhere Fehler durch die vereinfachenden Annahmen wie kaum Wind und konstante Umgebungstemperatur relativiert jedoch die Ungenauigkeit. Daher sind auch andere für definierte Bedingungen präzisere Gleichungen wie die nach Klan (aus VDI-Wärmeatlas, 2006) nicht sinnvoll, denn für die Stabilisierung des Simulationsmodells (Iterationen) sollten Nullwerte für die Nußelt-Zahl auch ohne Temperaturgleichheit möglich sein.

Die Wärmeübertragung bei freier Konvektion wird auf die wirksame Oberfläche (A_o) bei Materialkontakt mit der Umgebung bezogen. Ausgenommen ist also die Grund- bzw. Auflagefläche (A_u).

Aufgrund der Systembegrenzungen (wirksame Höhe bzw. Durchmesser beträgt minimal 0,06 m und maximal 90 m, die Temperaturdifferenz minimal 0 °C und maximal 130 °C) liegen die Werte der Rayleigh-Zahl im gültigen Bereich ($Gr \cdot Pr > 1700$) und sind für eine Abschätzung hinreichend genau. Die maximale Nußelt-Zahl für freie Konvektion beträgt im Simulationsprogramm $Nu \leq 7,5$.

Wärmeübertragung bei erzwungener Konvektion

Der Wärmeübergang durch die aktive Belüftung resultiert aus einem Fließprozess bei erzwungener Konvektion. Berücksichtigt werden soll mit dieser Gleichung die abkühlende Wirkung bei starker Belüftung. Bei Annahme, dass die Strömung durch das poröse Material in vielen dünnen senkrechten Röhren stattfindet, wird der Wärmeübergang durch die Form „Rohr“ simuliert. Hierfür wird die Reynolds-Zahl benötigt, über die die Strömungsart ermittelt werden kann. Unterhalb einer Reynolds-Zahl von $Re = 2300$ ist die Rohrströmung laminar, oberhalb dieser Grenze wird sie als turbulent bezeichnet. Mit Sicherheit liegt turbulente Strömung aber erst ab $Re > 10^4$ vor. Im Übergangsbereich $2300 < Re < 10^4$ beeinflussen die Art der Zuströmung und die Form des Rohreinlaufs die Strömungsform (aus VDI-Wärmeatlas, 2006), die in der Simulation aber unberücksichtigt bleiben.

Aufgrund eines maximalen gedachten Rohrdurchmessers von 0,01 m und einer minimalen Rohrlänge von 0,06 m, ist das Verhältnis von Rohrdurchmesser (d_r) und Höhe (h_r) maximal $d_r/h_r = 0,17$ und somit immer $\leq 0,17$. Da im Regelfall in der Simulation das Verhältnis sogar $\leq 0,1$ ist, kann die Wärmeübertragung als Strömung durch lange Rohre nach Gnielinski berechnet werden. Aufgrund angenommener thermisch ausgebildeter Laminarströmung (lange Rohre), konstanter Wandtemperatur und erzwungener Konvektion wird der Wärmeübergangskoeffizient im Simulationsmodell daher bei aktiver Belüftung mit der mittleren Nußelt-Zahl über die Länge h_r nach Gnielinski (aus VDI-Wärmeatlas, 2006) bestimmt.

Mit einer maximalen Abweichung von $< 1\%$ für kreisförmige Rohrquerschnitte im gesamten Bereich $0 < Re \cdot Pr \cdot d_r/h_r < \infty$ (aus VDI-Wärmeatlas, 2006) wird die folgende Gleichung zur Bestimmung der mittleren Nußelt-Zahlen pro Zeitschritt im Simulationsmodell eingesetzt (Gleichung 6-8):

$$Nu_{Rohre} = \left[3,66^3 + 0,7^3 + \left(\left(1,615 \cdot \left(Re \cdot Pr \cdot \frac{d_r}{h_r} \right)^{\frac{1}{3}} \right) - 0,7 \right)^3 \right]^{\frac{1}{3}} \quad \text{bei laminarer Strömung (Re < 2300)}$$

$$Re = \frac{v_G \cdot d_r \cdot \rho_{fL}}{\eta}$$

$$d_r = d_h \cdot \frac{fas}{100} \quad (0,001 \text{ bis } 0,01 \text{ m})$$

$$v_G = \frac{V_{Be}}{A_u \cdot 24 \cdot 3600}$$

Nu_{Rohre} : Nußelt-Zahl für Rohre bei erzwungener Konvektion

h_r : Anströmlänge (m) (sinkende Materialhöhe oder Mieten-/Reaktorhöhe)

d_r : Rohrdurchmesser (m)

d_h : hydraulischer Durchmesser (m)

fas : freies Porenvolumen („free air space“) (Vol.-% TS)

v_G : Gasgeschwindigkeit (m/s)

V_{Be} : Belüftungsluftmenge (m³/d) (d: Tag oder andere Zeiteinheit)

A_u : Grund- bzw. Auflagefläche (m²)

ρ_{fL} : Dichte feuchte Luft (kg/m³)

η : dynamische Viskosität Fluid (Pa·s)

Pr : Prandtl-Zahl

Re : Reynold-Zahl

Gl. 6-8: Wärmeübergangskoeffizient bei erzwungener Konvektion p. Z. im Simulationsmodell

Das Rohr hat im Simulationsmodell den Durchmesser des Porenvolumenanteils multipliziert mit einem angenommenen hydraulischen Durchmesser von 0,01 m. Der hydraulische Durchmesser (d_h) ist eine theoretische Größe, um Berechnungen an Rohren oder Kanälen mit nicht kreisförmigen Querschnitten zu vereinfachen (aus VDI-Wärmeatlas, 2006). Er ist der Quotient aus dem vierfachen Strömungsquerschnitt und dem vom Fluid (hier Luft) berührten Umfang eines betrachteten Querschnitts. Damit Diffusionsprozesse im Mikromilieu stattfinden können, wird von einer nicht bestimmten aber geringen Korngröße ausgegangen (siehe Kapitel 5.3). Durch die Multiplikation mit dem Porenvolumenanteil werden indirekt die unterschiedlichen Korngrößenverteilungen und die sehr stark variierenden Kornformen berücksichtigt.

Die maximale Reynold-Zahl liegt im Simulationsprogramm im turbulenten Bereich bei 49383 und $Re \cdot Pr \cdot d_r/h_r = 8230$. Jedoch sind diese Werte nur aufgrund der Vielzahl von Variationsmöglichkeiten und daher theoretisch erreichbar. In der Wirklichkeit sind die kleinsten Abmaße und der größte Belüftungsstrom physikalisch nicht darstellbar.

Im Simulationsprogramm wird zudem von einem minimalen Bereich $Re \cdot Pr \cdot d_r/h_r \leq 0,1$ nach Hausen (aus Gieck und Gieck, 1995) für eine Wärmeübertragung bei laminarer Strömung ausgegangen. Liegt der Wert darunter, wird die Nußelt-Zahl und damit der Wärmeübergang auf 0 gesetzt. Bei normalen Abmaßen und Bedingungen liegt die Reynold-Zahl deutlich im laminaren Strömungsbereich unter $Re \leq 2058$ und $Re \cdot Pr \cdot d_r/h_r \leq 343$. Die maximale Nußelt-Zahl für erzwungene Konvektion beträgt im Simulationsprogramm dann $Nu \leq 10,7$. Im Regelfall liegt sie bei 0 oder etwa 3,7.

Die Wärmeübertragung bei erzwungener Konvektion wird auf die Grund- bzw. Auflagefläche (A_u) bezogen, um die wirksame Oberfläche durch das poröse Material für die gedachten Röhren zu beschreiben. Die Höhe des Materials bleibt hierbei unberücksichtigt, um den Fehler durch die Erwärmung bzw. Abkühlung beim Durchfließen des Materials zu relativieren.

Wärmestrahlung

Alle materiellen Körper emittieren und absorbieren bei Temperaturen $T > 0$ K Energie durch Wärmestrahlung (thermische Strahlung), wobei sich diese Prozesse bei undurchsichtigen Körpern, wie im Simulationsmodell das Substrat, auf dessen Oberfläche konzentrieren. Wärmestrahlung ist elektromagnetische Strahlung im Wellenlängenbereich von ungefähr 0,1 - 1000 μm , deren Ausbreitung nicht an ein Trägermedium gebunden ist (aus VDI-Wärmeatlas, 2006). Als Folge der Emission und Absorption findet zwischen verschiedenen temperierten Oberflächen eine Energieübertragung statt, die thermodynamisch die Bedeutung eines Wärmestromes hat. Im thermischen Gleichgewicht ist der resultierende Wärmestrom null (aus VDI-Wärmeatlas, 2006). Das bedeutet, dass bei nicht ummanteltem Substratmaterial Energie durch Strahlung abgegeben wird, wenn die Umgebungstemperatur niedriger ist, und umgekehrt aufgenommen wird, vor allem wenn z. B. die Sonne scheint.

Der Energiestrom (Strahlungsleistung), der von der Oberfläche eines Körpers bestimmter Temperatur ausgestrahlt wird, setzt sich aus Beiträgen für jeden Wellenlängenbereich und jedes Raumwinkelelements, bezogen auf die projizierte Fläche, zusammen. Für die komplizierte Wellenlängenabhängigkeit der Ausstrahlung realer Oberflächen, ein Charakteristikum des jeweiligen Materials, sind nur grobe Vereinfachungen möglich (aus VDI-Wärmeatlas, 2006). Nur für den Schwarzen Körper (ein idealisierter Strahler, der alle auftretende Strahlung absorbiert) kann bei einer vorgegebenen Temperatur (T) die spektrale spezifische Aus-

strahlung, also der auf die Oberfläche des Schwarzen Körpers bezogene Energiestrom, nach der Gleichung von Max Planck berechnet werden (aus VDI-Wärmeatlas, 2006). Für reale Körper ist die spektrale Berechnung der Ausstrahlung, auch unter vereinfachenden Annahmen, durch Lösen der elektromagnetischen Feldgleichungen sehr aufwendig. Daher wird die Ausstrahlung von Oberflächen realer Körper durch einen Emissionsgrad auf die Ausstrahlung des Schwarzen Körpers zurückgeführt (aus VDI-Wärmeatlas, 2006). Durch Integration der Max Planck Gleichung über die Wellenlänge ($\lambda_{\mu m}$) erhält man die spezifische Ausstrahlung (M^σ) des Schwarzen Körpers gemäß der Gleichung von Stefan-Boltzmann (Gleichung 6-9):

$$M^\sigma = \int_0^\infty M_{\lambda_{\mu m}}^\sigma (\lambda_{\mu m}, T) d\lambda_{\mu m} = \sigma \cdot T^4$$

- M^σ : spezifische Ausstrahlung (W/m^2)
- σ : Stefan-Boltzmann-Konstante ($5,6704 \cdot 10^{-8} W/(m^2 \cdot K^4)$)
- T : thermodynamische Temperatur (K)
- $\lambda_{\mu m}$: Wellenlänge (μm)

Gl. 6-9: Wärmestrahlung (spezifische Ausstrahlung)

Die spezifische Ausstrahlung eines Schwarzen Körpers ist abhängig von seiner Temperatur und kann zur schnellen Ermittlung der Strahlungsemission einer Tabelle entnommen werden (aus VDI-Wärmeatlas, 2006).

Die weiteren Strahlungsgrößen Absorptionsgrad, Reflexionsgrad und Transmissionsgrad, die zur Charakterisierung der Strahlungseigenschaften von Körperoberflächen gebraucht werden, sind nicht auf die Schwarzkörper-Strahlung, sondern auf die Bestrahlungsstärke der auf eine Oberfläche einfallenden Strahlung bezogen (aus VDI-Wärmeatlas, 2006). Die Bestrahlungsstärke einer Oberfläche ist dabei der aus dem Halbraum einfallende, über alle Wellenlängen summierte, flächenspezifische Strahlungsenergiestrom (aus VDI-Wärmeatlas, 2006). Reale Körper absorbieren im Gegensatz zum Schwarzen Körper nur einen Teil der einfallenden Strahlung. Dieser absorbierte Strahlungsenergiestrom wird in innere Energie des Körpers umgewandelt, der Rest wird reflektiert bzw. durchgelassen (transmittiert) (aus VDI-Wärmeatlas, 2006).

Wegen der vielen Unbekannten und der Komplexität der Wärmestrahlung wird im Simulationsmodell eine Konstante verwendet. Der Tabellenwert für die spezifische Ausstrahlung (M^σ) liegt für 0 °C bei 314 W/m^2 und für 50 °C bei 617 W/m^2 . Da die spektrale

spezifische Ausstrahlung realer Körper grundsätzlich unterhalb der des Schwarzen Körpers gleicher Oberflächentemperatur liegt (aus VDI-Wärmeatlas, 2006), wurde die Konstante auf 400 W/m^2 (ca. 10 % der Konvektion) für die Aufnahme und Abgabe von Wärmestrahlung (\dot{Q}_{Str}) festgelegt. Die Wärmestrahlung wird bei Vorgabe einer vorhandenen Isolation im Simulationsmodell nicht berücksichtigt. Ohne Isolation wirkt sie auf das Wasser im Wassermantel bzw. direkt auf das feuchte Material als Wärmeverlust oder -gewinn ein.

Zu beachten ist, dass der Temperaturabfall an der Oberfläche von Kompost bei kühlerer Umgebungsluft überwiegend auf Energieverluste durch Strahlung und Konvektion zurückzuführen ist. Bei abgekühlter Oberfläche ist der Energieverlust durch Wärmeleitung bestimmender Faktor (Krogmann, 1994).

Erwärmung der trockenen Abluft

Die spezifische Wärmekapazität idealer Gase ist ein Maß für die Energiespeicherfähigkeit eines Moleküls. Sie ist definiert als die Wärme, die pro Mengeneinheit isobar einem idealen Gas zugeführt werden muss, um eine gewisse Temperaturänderung zu erzielen. Bei der spezifischen Wärmekapazität idealer Gase muss unterschieden werden zwischen der spezifischen isobaren Wärmekapazität (bei konstantem Druck) und der spezifischen isochoren Wärmekapazität (bei konstantem Volumen) (aus VDI-Wärmeatlas, 2006). Im Simulationsmodell wird für Gase von konstantem Druck (isobare Wärmekapazität) im System ausgegangen.

Die trockene Gasmasse (m_{Abl}), die das System verlässt, erfährt eine Temperaturänderung. Bei Belüftung wird von der Erwärmung oder Abkühlung der Luft auf die Temperatur des Materials (t_{MiZu}) ausgegangen. Entsprechend verlässt anaerob das gebildete Gas mit der Materialtemperatur (t_{MiZu}) das System.

Die Enthalpieänderung ($\Delta\dot{H}_{\text{Abl}}$) des trockenen Luftmassenflusses (\dot{m}_{trL} , \dot{m}_{Abl}) (m_{trL} und m_{Abl} siehe Gleichung 6-29 und 6-30) wird im Simulationsmodell pro Zeitschritt wie folgt berechnet (Gleichung 6-10):

$$\Delta \dot{H}_{Abl} = \dot{m}_{trL} \cdot c_{pL} \cdot t_{Be} - \dot{m}_{Abl} \cdot c_{pL} \cdot t_{MiZu}$$

$\Delta \dot{H}_{Abl}$: Enthalpieänderung der trockenen Zuluft/Abluft p. Z. (kJ/d) (d: Tag)

\dot{m}_{trL} : Massenfluss trockene Zuluft (kg/d)

\dot{m}_{Abl} : Massenfluss trockene Abluft (Summe der Gase) (kg/d)

c_{pL} : spezifische Wärmekapazität der trockenen Luft (kJ/(kg·K))

t_{Be} : Temperatur der Belüftungsluft (°C)

t_{MiZu} : Temperatur Mischung Material, Wasser und Wasserzugabe (°C)

Gl. 6-10: Enthalpieänderung der trockenen Abluft p. Z. im Simulationsmodell

Die spezifische Wärmekapazität der trockenen Abluft (c_{pL}) beträgt im Simulationsprogramm 1,00 kJ/(kg·K).

Erwärmung des Wassers der Abluft

Die spezifische Wärmekapazität der Flüssigkeiten ist eine Funktion der Temperatur. Die Abhängigkeit vom Druck kann in der Regel vernachlässigt werden. Im Gegensatz zum idealen Gas ist es wegen der weitgehenden Inkompressibilität von Flüssigkeiten unerheblich zwischen isobarer und isochorer Wärmekapazität zu unterscheiden (aus VDI-Wärmeatlas, 2006). Im betrachteten Temperaturfenster, also bei niedrigen Temperaturen (maximal bis unter dem Normsiedepunkt bzw. 80 °C) besteht eine näherungsweise lineare Abhängigkeit von der Temperatur (aus VDI-Wärmeatlas, 2006).

Die Enthalpieänderung ($\Delta \dot{H}_{WL}$) des Wassers in der Luft (Wasserdampffluss) (\dot{m}_{Di} , \dot{m}_{Do}) (m_{Di} und m_{Do} siehe Gleichung 6-23) pro Zeitschritt wird im Simulationsmodell wie folgt berechnet (Gleichung 6-11):

$$\Delta \dot{H}_{WL} = \dot{m}_{Di} \cdot c_{pD} \cdot t_{Be} - \dot{m}_{Do} \cdot c_{pD} \cdot t_{MiZu}$$

$\Delta \dot{H}_{WL}$: Enthalpieänderung des Wassers der Zuluft/Abluft p. Z. (kJ/d) (d: Tag)

\dot{m}_{Di} : Massenfluss Wasserdampfzufuhr (kg/d)

\dot{m}_{Do} : Massenfluss Wasserdampfabfuhr (kg/d)

c_{pD} : spezifische Wärmekapazität Wasserdampf (kJ/(kg·K))

t_{Be} : Temperatur der Belüftungsluft (°C)

t_{MiZu} : Temperatur Mischung Material, Wasser und Wasserzugabe (°C)

Gl. 6-11: Enthalpieänderung des Wassers der Abluft p. Z. im Simulationsmodell

Die spezifische Wärmekapazität des Wasserdampfs (c_{pD}) beträgt im Simulationsprogramm 1,86 kJ/(kg·K).

Innere Energie des Materials am Anfang

Die im System vorhandene thermische Energie bzw. innere Energie (U_{fMaA}) setzt sich aus der inneren Energie der Masse des trockenen Feststoffs (m_M) und des Wassers im Feststoff (m_{WaA}) zusammen. Da beide Phasen vermischt vorliegen und aufgrund der angenommenen Raumkontinuität, wird die im Material vorhandene mittlere innere Energie im Simulationsmodell folgendermaßen berechnet (Gleichung 6-12):

$$U_{fMaA} = (m_M \cdot c_{pM} + m_{WaA} \cdot c_{pW}) \cdot t_{MiaA}$$

- U_{fMaA} : Innere Energie des feuchten Materials am Anfang (kJ)
- c_{pM} : spezifische Wärmekapazität trockenes Material (kJ/(kg·K))
- c_{pW} : spezifische Wärmekapazität Wasser (kJ/(kg·K))
- m_M : Masse Material trocken (kg)
- m_{WaA} : Masse Wasser im Material am Anfang (kg)
- t_{MiaA} : Temperatur Mischung Material und Wasser am Anfang (°C)

Gl. 6-12: Innere Energie des feuchten Materials am Anfang im Simulationsmodell

Die spezifische Wärmekapazität des trockenen Materials beträgt im Simulationsprogramm $c_{pM} = 1,05$ kJ/(kg·K) und für das Wasser im Material $c_{pW} = 4,19$ kJ/(kg·K).

Unberücksichtigt sind Änderungen der spezifischen Wärmekapazität während des Prozesses, da sie im Verhältnis zu anderen Einflüssen nicht relevant sind. Die Bestimmung bzw. Berechnung ist zudem für Materialien im Bereich der Abfallwirtschaft aufgrund vieler Einflüsse kaum zu verallgemeinern. So steigt die spezifische Wärmekapazität des Kompostierungsmaterials z. B. mit zunehmendem Wassergehalt und abnehmendem Alter bzw. sinkendem mineralischen Anteil im Kompost an (Kranert, 1981, Kranert, 1988).

Temperatur des Materials

Die Temperatur der Mischung (t_{Mi}) (Wasser- und trockenes Material (Feststoff bzw. Substrat), auch bei Chargenzugaben) pro Zeitschritt wird im Simulationsmodell wie folgt ermittelt (Gleichung 6-13):

$$t_M = \frac{U_{fM(it)}}{cp_M \cdot (m_M + m_W)} + t_{(Bt)}$$

$$t_W = \frac{U_{fM(it)}}{cp_W \cdot (m_M + m_W)} + t_{(Bt)}$$

$$t_{Mi} = \frac{m_M \cdot cp_M \cdot t_M + m_W \cdot cp_W \cdot t_W}{m_M \cdot cp_M + m_W \cdot cp_W}$$

- t_{Mi} : Temperatur Mischung Material und Wasser (°C)
 m_M : Masse Material trocken (kg)
 m_W : Masse Wasser im Material (kg)
 cp_M : spezifische Wärmekapazität trockenes Material (kJ/(kg·K))
 cp_W : spezifische Wärmekapazität Wasser (kJ/(kg·K))
 t_M : Temperatur des trockenen Materials (°C)
 t_W : Temperatur des Wassers im Material (°C)
 $t_{(Bt)}$: Bezugstemperatur bei Mischung Material und Wasser (°C)
 $U_{fM(it)}$: Innere Energie des feuchten Materials (kJ)

Gl. 6-13: Temperatur des Materials p. Z. im Simulationsmodell

Die Temperatur, die das Material annimmt, wird zusammengefasst also aus der Summe der zu- und abgegebenen Energien ($U_{fM(it)}$), zuzüglich der Bezugstemperatur ($t_{(Bt)}$), für jeden Zeitschritt einzeln bestimmt. Die Bezugstemperatur bei Mischung von Material und Wasser ist verfahrensspezifisch. Es kann die vorgegebene Materialtemperatur bei fehlender Isolation sein, die vorhandene Materialtemperatur bei Isolation oder die Temperatur des Wassermantels beim Temperieren des Reaktors. Die Berechnung der Masse des trockenen Materials (m_M) wird in Gleichung 6-32 berechnet und die des Wassers im Material (m_W) in Gleichung 6-21.

Mischungstemperatur nach Wasserzugabe

Die Temperatur der Mischung bei Wasserzugabe (t_{MiZu}) wird nach Berechnung der Temperatur des feuchten Materials dann nach Gleichung 6-13 zu den vorgegebenen Zeitpunkten wie folgt berechnet (Gleichung 6-14):

$$t_{MiZu} = \frac{m_M \cdot cp_M \cdot t_{Mi} + m_W \cdot cp_W \cdot t_{Mi} + m_{WZu} \cdot cp_W \cdot t_{WZu}}{m_M \cdot cp_M + m_W \cdot cp_W + m_{WZu} \cdot cp_W}$$

- t_{MiZu} : Temperatur Mischung Material, Wasser und Wasserzugabe (°C)
- m_M : Masse Material trocken (kg)
- m_W : Masse Wasser im Material (kg)
- m_{WZu} : Masse Wasserzugabe (kg)
- cp_M : spezifische Wärmekapazität trockenes Material (kJ/(kg·K))
- cp_W : spezifische Wärmekapazität Wasser (kJ/(kg·K))
- t_{Mi} : Temperatur Mischung Material und Wasser (°C)
- t_{WZu} : Temperatur des zugeführten Wassers (vorgegeben) (°C)

Gl. 6-14: Temperatur des Materials nach Wasserzugabe im Simulationsmodell

6.1.6 Be- und Entfeuchten von Luft

Feuchte Luft ist ein Gemisch aus trockener Luft und Wasserdampf (aus VDI-Wärmeatlas, 2006). Zur Ermittlung der Feuchtebeladung (Y_{trL} und Y_{Abl}) der eingetragenen trockenen Luft (m_{trL}) bzw. der aus dem System strömenden Abluft (m_{Abl}) pro Zeitschritt wird die Masse des zu diesem Zeitpunkt zugehörigen Wassergehalts des Gasmisches (m_{Di} und m_{Do}) durch die Masse des jeweiligen trockenen Gasmisches geteilt (Gleichung 6-15).

$$Y_{trL} = \frac{m_{Di}}{m_{trL}} \quad Y_{Abl} = \frac{m_{Do}}{m_{Abl}}$$

- Y_{trL} : Feuchtebeladung der Zuluft (kg/kg)
- Y_{Abl} : Feuchtebeladung der Abluft (kg/kg)
- m_{Di} : Masse Wasserdampfzufuhr (kg)
- m_{Do} : Masse Wasserdampfabfuhr (kg)
- m_{trL} : Masse trockene Zuluft (kg)
- m_{Abl} : Masse trockene Abluft (Summe der Gase) (kg)

Gl. 6-15: Feuchtebeladung der Zuluft und Abluft als Massenverhältnis p. Z.

Die Bildung von Eisnebel wird im Simulationsmodell nicht berücksichtigt und die Gasphase wird als ideales Gasmisch angesehen. Weiterhin wird die Masse der trockenen Luft wie bei fast allen Prozessen (aus VDI-Wärmeatlas, 2006) im Simulationsmodell als thermodynamisch unveränderlich betrachtet.

Zur Berechnung der Feuchtebelastung und damit der Masse Wasser in der Luft müssen weitere Berechnungen durchgeführt werden, die im Folgenden erläutert werden. Die Berechnung der trockenen Luftmasse ist in Gleichung 6-30 dargestellt.

Die im Simulationsmodell (Gleichung 6-16) in Prozent anzugebende relative Feuchte der Belüftungsluft (φ) ist das Verhältnis des tatsächlichen Wasserdampfdrucks (p_D) in der feuchten Luft zum Wasserdampf-sättigungsdruck (p_{DS}) bei einer bestimmten Temperatur (aus VDI-Wärmeatlas, 2006):

$$\varphi = \frac{p_D}{p_{DS}} \quad (0 \leq \varphi \leq 1)$$

- φ : relative Feuchte der Luft
- p_D : Wasserdampfdruck (bar)
- p_{DS} : Wasserdampf-sättigungsdruck (bar)

Gl. 6-16: Relative Feuchte der Luft allgemein

Der Wasserdampf-sättigungsdruck (p_{DS}) wurde dem Mollier-h,Y-Diagramm (aus VDI-Wärmeatlas, 2006) bei einem Gesamtdruck von 1,013 bar entnommen und für den Temperaturbereich zwischen 5 °C und 95 °C dann wie folgt als Funktion dargestellt (Gleichung 6-17):

$$p_{DS} = 0,0087 \cdot e^{(0,0504 \cdot t \text{ } ^\circ\text{C})}$$

- p_{DS} : Wasserdampf-sättigungsdruck (bar)
- t: Temperatur (°C)

Gl. 6-17: Wasserdampf-sättigungsdruck zwischen 5 °C und 95 °C als Funktion

Für den im Simulationsmodell im Wesentlichen betrachteten Temperaturbereich zwischen 10 °C und 80 °C ist die Genauigkeit sichtbar ausreichend (Abbildung 6-4).

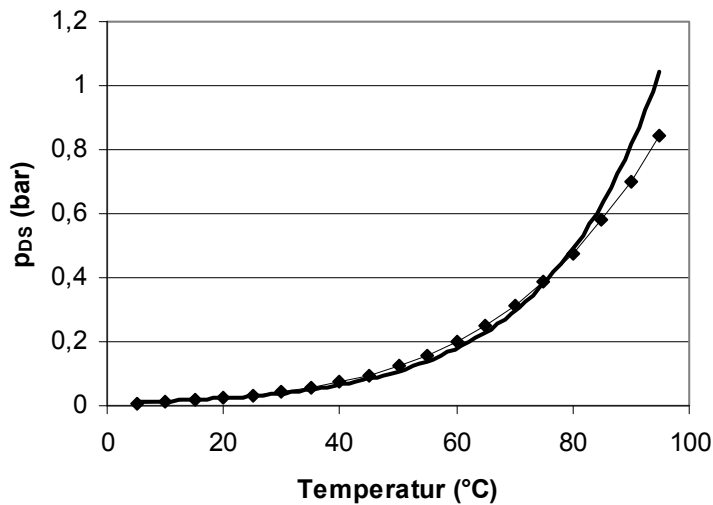


Abb. 6-4: Verwendeter Wasserdampf-sättigungsdruck im Simulationsprogramm in Abhängigkeit von der Temperatur

Die Feuchtebeladung (Y) und damit die Masse der trockenen Luft und des Luftwassers wird dann allgemein aus der Beziehung der relativen Feuchte (φ), des Gesamtdrucks (p) und des Wasserdampf-sättigungsdrucks (p_{DS}) wie folgt (Gleichung 6-18) berechnet (aus VDI-Wärmeatlas, 2006):

$$Y = \frac{R_L}{R_D} \cdot \frac{p_D}{p - p_D} = 0,622 \cdot \frac{\varphi \cdot p_{DS}}{p - \varphi \cdot p_{DS}}$$

- Y: Feuchtebeladung der Luft (kg/kg)
- p_D : Wasserdampfdruck (bar)
- p_{DS} : Wasserdampf-sättigungsdruck (bar)
- p: Gesamtdruck (1,013 bar)
- φ : relative Feuchte der Luft ($0 \leq \varphi_i \leq 1$)
- R_L : Gaskonstante von Luft (287 J/(kg·K))
- R_D : Gaskonstante von Wasserdampf (461 J/(kg·K))

Gl. 6-18: Feuchtebeladung der Luft über Dampfdruck und relative Feuchte allgemein

Kondensat

Das Kondensat berechnet sich aus der Differenz des Wassergehalts in der austretenden feuchten Abluft (Feuchtebeladung) und dem Wassergehalt bei Umgebungstemperatur und Wasserdampf-sättigung. Die Umgebungstemperatur muss im Simulationsprogramm vorge-

geben werden. Eine Abkühlung der Abluft auf Umgebungstemperatur wird dabei vorausgesetzt.

Das entstehende Kondenswasser (m_{Ko}) berechnet sich anhand des Dampfsättigungsdrucks (p_{DSo}) bei der Temperatur des Materials multipliziert mit der relativen Feuchte der Abluft nach verlassen des Materials (φ_o) und des Dampfsättigungsdrucks der Umwelt (p_{DSu}), also der Außenluft der Umgebung, und der Masse der trockenen Abluft als Summe der Gase (m_{Abl}) für jeden Zeitschritt wie folgt (Gleichung 6-19):

$$m_{Ko} = m_{Abl} \cdot 0,622 \cdot \left(\frac{\varphi_o \cdot p_{DSo}}{p - \varphi_o \cdot p_{DSo}} - \frac{p_{DSu}}{p - p_{DSu}} \right)$$

- m_{Ko} : Masse Kondensat aus der Luft (kg)
- m_{Abl} : Masse trockene Abluft (Summe der Gase) (kg)
- p_{DSo} : Wasserdampfsättigungsdruck Gasaustritt (bar)
- p_{DSu} : Wasserdampfsättigungsdruck Umgebung (bar)
- φ_o : relative Feuchte der austretenden Abluft ($0 \leq \varphi_o \leq 1$)
- p : Gesamtdruck (1,013 bar)

Gl. 6-19: Kondensatbildung p. Z.

Solange das Material einen höheren Wassergehalt als 50 Gew.-% hat, wird angenommen, dass die Luft am Ausgang wasserdampfgesättigt ist. Unter einem Wert von 50 Gew.-% sinkt die Abluftfeuchte (φ_o) von 100 Gew.-% (also 1) auf den doppelten Wert des Wassergehalts. Da die von der Luft mitgeführte Wassermasse unterhalb eines Wassergehalts von 50 Gew.-% des Materials schwer zu berechnen ist, weil viele unbekannte Randbedingungen mitwirken (Kornoberflächengrößen, -formen, Luftgeschwindigkeiten, Drücke, Hafteigenschaften usw.), scheint eine Berücksichtigung der Wasserdampf ungesättigten Abluft anhand dieser Vereinfachung in dem Simulationsmodell ausreichend. Diese Annahmen könnten aber im Programm durch Umprogrammierung geändert und ggf. durch weitere Einflussgrößen ergänzt werden.

Schmelz- und Erstarrungsenergie

Es wird im Simulationsmodell vorausgesetzt, dass das Material einen Wärmegrad von 10 °C am Anfang der Simulation nicht unterschreitet. Die Umgebungs- und Belüftungstemperatur kann im Simulationsprogramm zwischen -40 °C und 80 °C vorgegeben werden. Da alle Einstellungen zu weitestgehend richtigen Simulationsergebnissen führen sollen, muss die

Schmelz- bzw. Erstarrungsenergie (Q_{SE}), vor allem bei fehlender Isolierung, einbezogen werden. Die bei der Erstarrung bzw. Verflüssigung abgegebene bzw. zugeführte Energie wird hierzu im Simulationsmodell auf die Wassermasse im Material bezogen und für jeden Zeitschritt aus dem Wasseranteil im Feststoff (m_W), der Wasserdampfzufuhr aufgrund der Luftfeuchte (m_{Di}) und dem ggf. einsickernden Wasser (m_{esW}) berechnet (Gleichung 6-20). Die Schmelzenthalpie von Wasser (h_S) beträgt 333,1 kJ/kg (aus VDI-Wärmeatlas, 2006).

$$Q_{SE} = h_S \cdot (m_W + m_{Di} + m_{esW})$$

Q_{SE} : Schmelz- bzw. Erstarrungsenergiezu- bzw. abfuhr bei Über- bzw. Unterschreitung von 0 °C (kJ)

h_S : Schmelzenthalpie Wasser (333,1 kJ/kg)

m_W : Masse Wasser im Material (kg)

m_{Di} : Masse Wasserdampfzufuhr (kg)

m_{esW} : einsickerndes Wasser in das Material (kg)

Gl. 6-20: Schmelz- und Erstarrungsenergie p. Z. im Simulationsmodell

6.1.7 Wasserhaushalt

Der Feststoff bzw. das Material, also das Substrat, besteht aus unterschiedlich großen und unterschiedlich geformten, gequollenen und plastischen Feststoffpartikeln, Wasser und freien Porenräumen (Abbildung 6-5). Das Haftwasser, also das an den Partikeln adsorbierte Wasser, das deshalb auch als Adsorptionswasser bezeichnet wird, befindet sich zwischen und in den Partikelhohlräumen auf Makro- und Mikroebene (z. B. Kuntze et al., 1994, Scheffer und Schachtschabel, 1998). Dieser Wasseranteil, der nicht als Sickerwasser anhand der Schwerkraft das Substrat verlässt, setzt sich zusammen aus durch Oberflächenspannung gehaltenes Zwickelwasser zwischen den Partikeln, ermöglicht durch Kohäsionskräfte im Wasser und zwischen den Partikeln, aus durch Kapillarkräfte (Ladungskräfte) gehaltenes und steigendes Kapillarwasser und aus Wasser, dass durch Ladungskräfte, also Bindungskräfte über Haupt- und Nebervalenzen, an der Oberfläche und im Partikel gehalten wird (Adsorptionswasser). Hinzu kommen Wechselwirkungskräfte in Lösungen und kolloidalen Systemen (z. B. Kröll und Kast, 1989). Zwischen den flüssigen und festen Phasen sind Hohlräume, die mit Gas unterschiedlicher Zusammensetzung gefüllt sind. Einige mit Gas oder Flüssigkeit gefüllte Zwischenräume sind der Belüftung oder Befeuchtung zugänglich, aber aufgrund der wirkenden Kräfte nicht alle (siehe auch Kapitel 5.3 und Kapitel 5.5). Zur Vereinfachung berücksichtigt das Simulationsmodell nur ein Drei-Phasen-Gemisch (Feststoff-, Wasser- und Gasphase).

Zur Simulation des Wassergehalts wird eine Bilanz der Wasser ab- und zugeführten Massen (m_w) für jeden Zeitschritt erstellt. Die berücksichtigten Wassermassen sind das Wasser im Material am Anfang (m_{waA}), zurückgeführtes Kondensat (m_{ko}) (z. B. bei der Kompostierung), der zu- (m_{Di}) und abgeführte Wasserdampf (m_{Do}) durch Belüftung oder Gasbildung, Niederschlag (z. B. Regen) (m_R) und Evaporation (m_{Ev}) (kontinuierlich und zeiteinheitsspezifisch) und Wasser (m_{Wzu}), das zur Einstellung des Wassergehalts durch Vorgabe der Gesamtwasserzugabemenge, also durch Addition zu den Niederschlagsmengen (z. B. Regenmengen) oder automatisch durch das Programm berechnet, zugegeben werden kann.

In der Einstellung „automatische Wasserzugabe“ wird im Simulationsprogramm der Wassergehalt auf 50 Gew.-% am Anfang oder mindestens auf 50 Gew.-% während des gesamten Prozesses (durch Umprogrammierung bei Bedarf änderbar) mit Anzeige der Wasserzugabemengen eingestellt.

Des Weiteren sind das Wasser, das beim mikrobiologischen Abbau des Substrats entsteht (m_{wAb}), das Sickerwasser (m_{sw}) und das stehende Wasser bzw. der Abfluss („run off“) (m_{stW}) berücksichtigt (Abbildung 6-5).

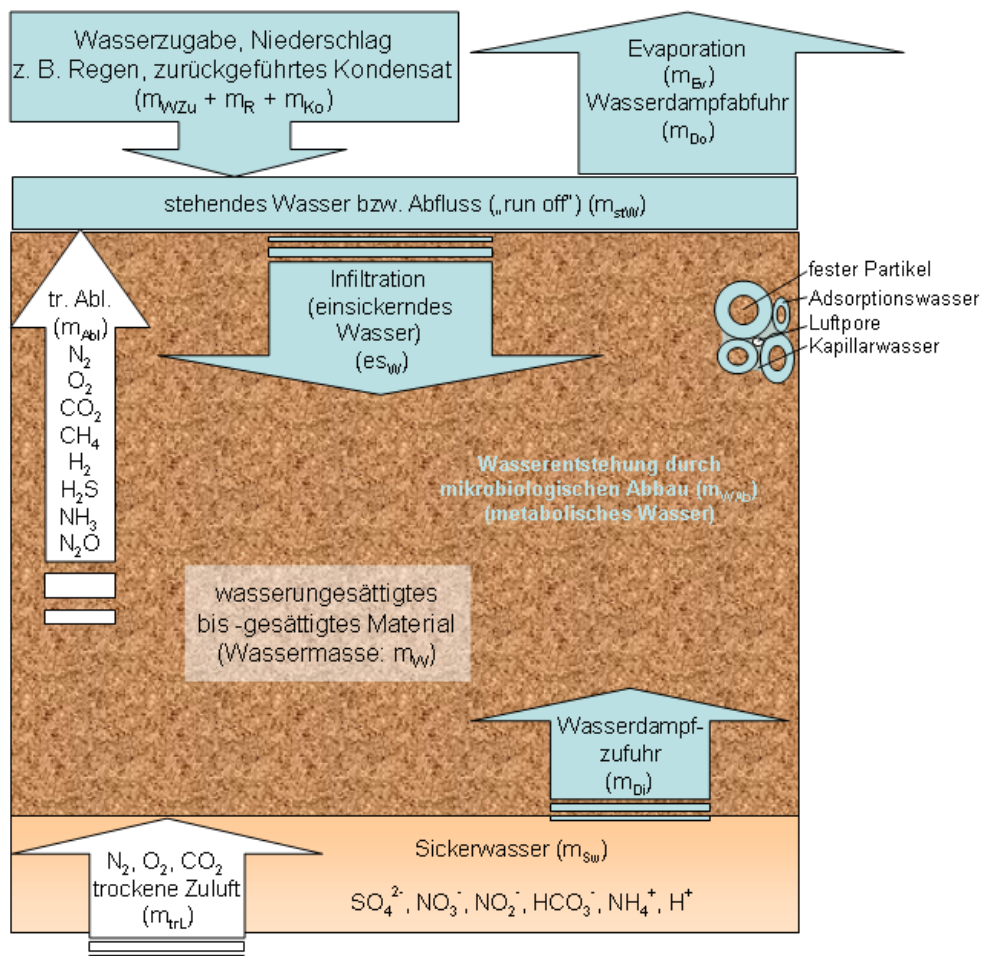


Abb. 6-5: Wassersituation im betrachteten System des Simulationsmodells

Die Gleichung zur Ermittlung der Wassermasse (m_W) im Material (Wassergehalt) pro Zeitschritt lautet im Simulationsmodell (Gleichung 6-21):

$$m_{W(it)} = m_{Wa(it-1)} + m_{WAb} + m_{Ko} + m_{Di} + m_R + m_{WZu} - m_{Do} - m_{Ev} - m_{Sw} - m_{stW}$$

- $m_{W(it)}$: Masse Wasser im Material p. Z. (kg)
- $m_{Wa(it-1)}$: Masse Wasser im Material vor Änderung (kg)
- m_{WAb} : Wasserentstehung durch Abbau (kg)
- m_{Ko} : Kondensat aus der Luft (zurückgeführtes Kondensat) (kg)
- m_{Di} : Wasserdampfzufuhr (kg)
- m_R : Niederschlag (z. B. Regenwasser) (kg)
- m_{WZu} : Wasserzugabe (kg)
- m_{Do} : Wasserdampfabfuhr (kg)
- m_{Ev} : Wasserverlust durch Evaporation (kg)
- m_{Sw} : Sickerwasser (kg)
- m_{stW} : stehendes Wasser bzw. „run off“ (kg)

Gl. 6-21: Wassermengenänderungen im Material p. Z. im Simulationsmodell

Die Werte werden im Einzelnen wie folgt ermittelt:

Wasser im Material

Die Wassermasse im Material am Anfang (m_{WaA}) und die Trockensubstanz (TS im Programm DM) werden im Simulationsmodell aus der Angabe zum prozentualen Trockensubstanzgehalt (tg im Programm %DM) und der Feuchtsubstanz (FS) wie folgt berechnet (Gleichung 6-22):

$$wg = 100 - tg$$

$$m_{WaA} = \frac{wg}{100} \cdot FS$$

$$TS = \frac{tg}{100} \cdot FS$$

- m_{WaA} : Masse Wasser im Material am Anfang (kg)
- TS: Trockensubstanz (kg)
- FS: feuchtes Material (Wasser und Trockensubstanz) (kg)
- wg: Wassergehalt (Gew.-%)
- tg: Trockensubstanzgehalt (Gew.-%)

Gl. 6-22: Berechnung Trockensubstanzgehalt am Anfang im Simulationsmodell

Die Berechnung des Wassergehalts (wg in Gew.-%) kann zu jedem Zeitpunkt des Prozesses mit bekannter Masse Wasser im Material (m_W) (siehe Gleichung 6-21) berechnet werden (siehe Gleichung 6-28). Der Trockensubstanzgehalt (tg in Gew.-%) wird entsprechend daraus abgeleitet.

Wasserdampfzu- und abfuhr

Die Wasserdampfzufuhr berechnet sich aus der Masse der trockenen Belüftungsluft (m_{trL}) und der im Simulationsprogramm vorgegebenen Belüftungsluftfeuchte (φ_i) mit dem Wasserdampfsättigungsdruck bei der vorgegebenen Belüftungslufttemperatur (p_{DSi}). Die Masse des abgeführten Wasserdampfs wird im Simulationsprogramm aus der Summe der austretenden trockenen Gase (m_{Abl}), der ermittelten Abluftfeuchte (φ_o) (unterhalb eines Wassergehalts von 50 Gew.-% im Material sinkt die Abluftfeuchte (φ_o) von 100 Gew.-% (also 1) auf den doppelten Wert des Wassergehalts (siehe Gleichung 6-19)) und dem Wasserdampfsättigungsdruck bei Materialtemperatur (p_{DSo}) pro Zeitschritt nach Gleichung 6-23 berechnet:

$$m_{Di} = m_{trL} \cdot \frac{R_L}{R_D} \cdot \frac{\varphi_i \cdot p_{DSi}}{p - \varphi_i \cdot p_{DSi}}$$

$$m_{Do} = m_{Abl} \cdot \frac{R_L}{R_D} \cdot \frac{\varphi_o \cdot p_{DSo}}{p - \varphi_o \cdot p_{DSo}}$$

- m_{Di} : Masse Wasserdampfzufuhr (kg)
- m_{Do} : Masse Wasserdampfabfuhr (kg)
- m_{trL} : Masse trockene Zuluft (kg)
- m_{Abl} : Masse trockene Abluft (Summe der Gase) (kg)
- R_L : Gaskonstante von Luft (287 J/(kg·K))
- R_D : Gaskonstante von Wasserdampf (461 J/(kg·K))
- p_{DSi} : Wasserdampfsättigungsdruck bei Belüftungstemperatur (t_{be}) (bar)
- p_{DSo} : Wasserdampfsättigungsdruck Gasaustritt (bar)
- φ_i : relative Feuchte der Belüftungsluft ($0 \leq \varphi_i \leq 1$)
- φ_o : relative Feuchte der austretenden Abluft ($0 \leq \varphi_o \leq 1$)
- p : Gesamtdruck (1,013 bar)

Gl. 6-23: Wasserdampfzu- und abfuhr p. Z. im Simulationsmodell

Niederschlag (z. B. Regen) und Evaporation

Niederschlagswasser und Evaporation sind Werte, die in dem Simulationsmodell nicht simuliert werden. In dem in dieser Arbeit entwickelten Simulationsprogramm besteht aber die

Möglichkeit, Werte einzulesen, die als Wasserzugabe (z. B. Regen) oder Entnahme (z. B. Evaporation) berücksichtigt werden. Hierzu können jeweils Werte zu beliebigen Zeitpunkten (zeitdiskret) oder für jeden Zeitschritt gleichermaßen (kontinuierlich) vorgegeben werden, die zuvor z. B. anhand regionaler Klimadaten bzw. Evaporationsberechnungen oder mit Simulationen dafür vorgesehener Programme ermittelt wurden.

Auch können Niederschlagswerte in Form von Regen, Hagel oder Schnee und andere Wetterwerte (Sonneneinwirkungszeiten, Temperatur- und Windwerte) z. B. regional bei Wetterstationen erfragt werden und diese anschließend als Eingabewerte in Programmen zur Berechnung von Evaporationswerten (Verdunstung von unbewachsenen Böden oder Wasseroberflächen) bei unterschiedlichen Wassergehalten verwendet werden (z. B. NASIM mit KALIMOD (Leutnant, 2008), KALYPSO (TU Hamburg Harburg – Institut für Wasserbau (2003 und 2008), SWIM (bfg, 2008), SIMPEL (Hörmann, 1997) und VAMOS (Bornhöft, 1993)).

Wasserhaltekapazität

Die Wasserhaltekapazität organischer Feststoffe liegt substratabhängig bei etwa 50 Gew.-% bis 90 Gew.-% der Frischsubstanz (Kutzner und Jäger, 1994). Im Simulationsmodell wird davon ausgegangen, dass durchschnittlich unterhalb von 20 Gew.-% wegen Trockenheit von dem Material kein Wasser gebunden wird und über 80 Gew.-% wegen Wassersättigung des Materials kaum Wasser angenommen wird.

Zur Simulation dieses Verhaltens wurde im Simulationsmodell ein Faktor (fk) in Abhängigkeit vom Wassergehalt (wg) eingefügt. Diese Funktion ist in Abbildung 6-6 bildlich dargestellt.

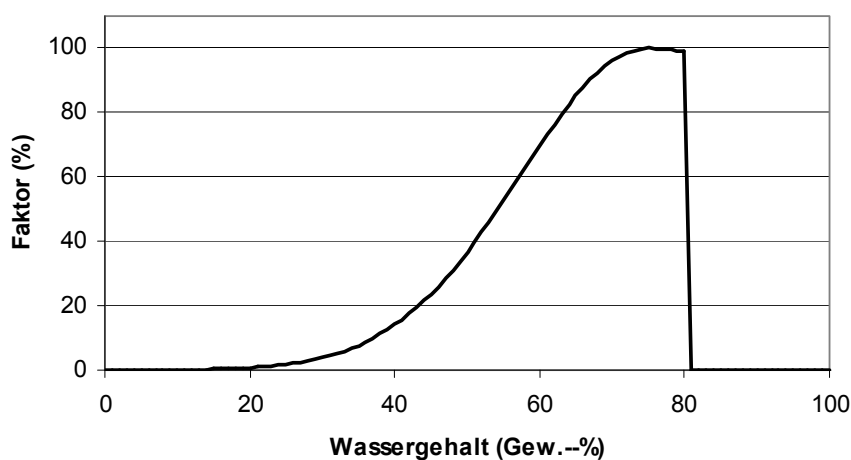


Abb. 6-6: Im Simulationsmodell angenommene Wasserhaltekapazität als prozentualer Faktor in Abhängigkeit vom Wassergehalt

Unberücksichtigt sind die Veränderungen der Wasserhaltekapazität während des zunehmenden Abbaus (Humifikation) und Unterschiede bei verschiedenen Substraten (siehe auch Kapitel 5.5). Eine nachträgliche Spezifizierung und Erweiterung des Faktors der Wasserhaltekapazität ist aber im Simulationsmodell durch Umprogrammierung möglich.

Wasserdurchlässigkeit

Der Durchlässigkeitsbeiwert (kf_0) ist in der gesättigten und ungesättigten Strömung der wichtigste Parameter (z. B. Scheffer und Schachtschabel, 1998). Der vorgegebene Durchlässigkeitsbeiwert von 10^{-4} m/s entspricht nach der Bewertung der Durchlässigkeit (Permeabilität) von Böden nach DIN 18130 einem Mittelwert von sandigem Kies mit wenig Feinkorn. Die unterschiedliche Wasserverfügbarkeit (Saugspannung) bei Ent- und Bewässerung (Hysteresiseffekt) (z. B. Scheffer und Schachtschabel, 1998) bleibt in dem Simulationsmodell unberücksichtigt.

Die Wasserdurchlässigkeit, also der berechnete Durchlässigkeitskoeffizient (kf) für biogene Materialien, wird unter Berücksichtigung des freien Porenvolumens (Porosität) (fas), des festgelegten Durchlässigkeitsbeiwertes (kf_0) und des vorgegebenen Faktors der Wasserhaltekapazität (fk) (Abbildung 6-6) mit Werten zwischen 0 bis ca. 100 m/d (d: Tag) im Simulationsmodell pro Zeitschritt wie folgt simuliert (Gleichung 6-24):

$$kf = kf_0 \cdot \frac{fas}{100} \cdot 3600 \cdot 24 \cdot (101 - fk) \cdot \frac{1}{5}$$

- kf: Wasserdurchlässigkeit (berechneter Durchlässigkeitskoeffizient) (m/d) (d: Tag)
- kf_0 : Durchlässigkeitsbeiwert (10^{-4} m/s)
- fas: freies Porenvolumen („free air space“) (Vol.-% TS)
- fk: Faktor Wasserhaltekapazität (%)

Gl. 6-24: Wasserdurchlässigkeit p. Z. im Simulationsmodell

Die beschriebene Berechnung der Wasserdurchlässigkeit (berechneter Durchlässigkeitskoeffizient (kf)) für biogene Materialien ergab in durchgeführten Simulationen Ergebnisse, die aufgrund von Erfahrungswerten auch in der Realität zu erwarten sind. Vor allem Tendenzen der Kurven und Zusammenhänge mit anderen Parametern wurden auf diese Weise in den Simulationen (Kapitel 7.3) stimmig angezeigt. Durch die Abhängigkeit von dem freien Porenvolumen (Porosität) bleibt der Anstieg der Wasserdurchlässigkeit bei erreichter Haltekapazität jedoch aus. Das Wasser, das dann noch zugegeben wird, erscheint als Sickerwasser im Simulationsmodell. Eine Änderung des Verlaufs der Wasserhaltekapazität oder eine Erweite-

rung durch Wahlmöglichkeit verschiedener Funktionen ist bei Bedarf durch Umprogrammierung möglich.

Aufgrund der Wasserdurchlässigkeit (kf) kann bei Wasserzugabe berechnet werden, wie viel Wasser in das Material einsickert (m_{esW}) bzw. als stehendes Wasser oder Abfluss („run off“) auf dem Material zeitabhängig verbleibt bzw. abfließt (m_{stW}) und wann und wie viel aufgrund der Schwerkraft als Sickerwasser (m_{sW}) am Boden nach dem Durchfließen des Materials austritt. Im Folgenden werden die im Simulationsmodell verwendeten Gleichungen hierzu beschrieben.

Einsickerndes Wasser

Wie viel Wasser pro Zeitschritt in das Material einsickert (m_{esW}) wird im Simulationsmodell anhand der Grund- bzw. Auflagefläche (A_u), der Wasserdurchlässigkeit (kf) und der Wasserdichte (ρ_W) wie folgt berechnet (Gleichung 6-25):

$$m_{esW} = A_u \cdot kf \cdot \rho_W \cdot 1000$$

m_{esW} : einsickerndes Wasser in das Material p. Z. (kg/d) (d: Tag)

A_u : Grund- bzw. Auflagefläche (m^2)

kf: Wasserdurchlässigkeit (berechneter Durchlässigkeitskoeffizient) (m/d)

ρ_W : Dichte Wasser (kg/m^3)

Gl. 6-25: Einsickerndes Wasser in das Material p. Z. im Simulationsmodell

Bei Temperaturen unter dem Gefrierpunkt (0 °C) wird im Simulationsmodell kein Wasserein- und austritt angenommen und simuliert. Relevant ist diese Annahme für folgerichtige Simulationsergebnisse.

Bei der Dreiecks-, Tafel- und Trapezmiete wird im Simulationsmodell von einem Abfluss ausgegangen, jedoch die gesamte Oberfläche (A_O) als Wasser aufnehmende Fläche angenommen statt der Grundfläche, also der maximalen Fläche bei Draufsicht (A_u).

Stehendes Wasser bzw. „run off“

Das stehende Wasser bzw. der Abfluss („run off“) (m_{stW}) wird im Simulationsmodell aus der Differenz des durch Niederschlag (z. B. Regen) (m_R) oder Bewässerung zugeführten Wassers (m_{WZu}) und des einsickernden Wassers (m_{esW}) pro Zeitschritt wie folgt berechnet (Gleichung 6-26):

$$m_{stW} = m_R + m_{WZu} - m_{esW}$$

m_{stW} : Masse stehendes Wasser bzw. „run off“ (kg)

m_R : Niederschlag (z. B. Regenwasser) (kg)

m_{WZu} : Wasserzugabe (kg)

m_{esW} : einsickerndes Wasser in das Material (kg)

Gl. 6-26: Stehendes Wasser bzw. der Abfluss („run off“) p. Z. im Simulationsmodell

Sickerwasseraustritt

Der Sickerwasseraustritt beginnt im Simulationsmodell erst, nachdem die Wassersättigung des Materials erreicht ist. Der Zeitpunkt (z_{sw}) wird aus der Materialhöhe (h_r) (siehe Abbildung 6-10) und dem berechneten Durchlässigkeitskoeffizienten (kf) folgendermaßen berechnet (Gleichung 6-27):

$$z_{sw} = \frac{h_r}{kf}$$

z_{sw} : Beginn des Sickerwasseraustritts (d) (d: Tag)

h_r : (sinkende) Höhe des Materials (m)

kf : Wasserdurchlässigkeit (berechneter Durchlässigkeitskoeffizient) (m/d)

Gl. 6-27: Sickerwasseraustritt im Simulationsmodell

Das Sickerwasser (m_{sw}) entsteht im Simulationsmodell also frühestens nach der berechneten Sickerwasseraustrittszeit (z_{sw}). Die Sickerwassermasse wird aus der Wassermasse im Material am Anfang (m_{waA}) und dem aus der Bilanz insgesamt zugeführten Wasser ermittelt (Summe der ein- und ausgehenden Wassermassen, siehe Gleichung 6-21). Aufgrund der Wasserhaltekapazität verlässt bei Erreichen des Grenzwertes, also bei einem Wassergehalt von 80 Gew.-%, ein Teil des Wassers den Feststoff, unter Berücksichtigung der sich über die Zeit verändernden Trockensubstanz (TS). Die maximale Sickerwassermasse (m_{sw}), die das Material verlässt, setzt sich im Simulationsmodell aus der Summe des von oben nachsickernden Wassers (m_{esW}) und das über der Menge der doppelten Trockensubstanz (TS) anfallende Wasser pro Zeitschritt, also bei großer Wassermengenzugabe, zusammen. Durch den Sickerwasseraustritt wird die Bilanz verändert und neu berechnet, so dass zeitdiskrete Werteverläufe (Kurven) entstehen.

Wassergehalt

Aus der Bilanz der Wasserströme wird im Simulationsmodell die Wassermasse im Material insgesamt (m_W) für jeden Zeitschritt berechnet (Gleichung 6-21). Mit diesem Wert wird dann der Wassergehalt (wg) pro Zeitschritt wie folgt ermittelt (Gleichung 6-28):

$$wg = 100 \cdot \frac{m_W}{m_W + TS}$$

wg: Wassergehalt (Gew.-%)

m_W : Masse Wasser im Material (kg)

TS: Trockensubstanz (kg)

Gl. 6-28: Wassergehalt im Material p. Z. im Simulationsmodell

Da sich die Masse Wasser im Material (m_W) und die Trockensubstanz (TS) im Simulationsmodell über die Zeit verändern, entsteht ein zeitdiskreter Werteverlauf des Wassergehalts (wg).

6.1.8 Sauerstoffgehalt und Substratstruktur

In dem Simulationsmodell wird davon ausgegangen, dass mit Atmosphärenluft aktiv und passiv belüftet wird und sich daher am Behandlungsanfang oder nach dem Umsetzen des Materials und bei fehlender Ummantelung dauerhaft die obere Schicht bis zu einer Tiefe von 0,1 m des Materials (entspricht einer passiven Belüftung durch Diffusion (Poincelot, 1977) siehe Kapitel 5.3) Luft mit atmosphärischer Zusammensetzung in den freien Porenvolumina befindet (Kapitel 6.1.1). Die Berechnung des verfügbaren Sauerstoffs, also dem molekularen Sauerstoff in der Gasphase, erfolgt im Simulationsmodell daher über die Umrechnung des prozentualen Sauerstoffgehalts der atmosphärischen Luft und einem prozentualen Anteil, der aufgrund fehlendem Substratkontakts unverbraucht entweicht (Kapitel 5.3). Der atomare Sauerstoff in den Molekülen der Materialien (Substrate) bleibt im Simulationsmodell unberücksichtigt.

Kaminzugeffekt

Die passive Belüftung durch freie Konvektion („Kaminzugeffekt“) kann im Simulationsmodell mit einem geringen Belüftungsstrom ($0 <$ abhängig von der Materialmenge, z. B. $0,005 \text{ m}^3/\text{h}$ bei 100 kg FS) simuliert werden.

Unterschiede der Luftmengenberechnung bei der aeroben und anaeroben Betriebsweise

Bei der aeroben Behandlung wird die Luft in den Poren am Anfang und nach dem Umsetzen des Materials und die Luft, die zur Belüftung zugeführt wird, berechnet. Bei der anaeroben Behandlung wird im Normalfall nur die Luft in den Poren am Anfang berücksichtigt. Es kann aber auch unter anaeroben Bedingungen Luftundichtigkeit und Bewegung des Materials in der Atmosphärenluft simuliert werden. Dazu muss bei Luftundichtigkeit ein beliebiger Luftstrom vorgegeben werden. Bei simulierter Bewegung des Materials in der Atmosphärenluft wird die Luft des freien Porenvolumens im Material an den vorbestimmten Zeitpunkten berücksichtigt. Unabhängig davon wird sowohl bei der aeroben als auch bei der anaeroben Behandlung bei simulierter fehlender Ummantelung angenommen, dass das freie Porenvolumen (V_{fas}) der oberen Materialschicht bis zu einer Tiefe von 0,1 m stetig neu mit Luft atmosphärischer Zusammensetzung gefüllt wird (passive Belüftung durch Diffusion).

Berechnung der Gasvolumina und -massen

Für die Berechnung der Gasvolumina und -massen aus den Molen und umgekehrt wird im Simulationsmodell die thermische Zustandsgleichung für ideale Gase (z. B. Lexikon der Chemie, 2000) verwendet (Gleichung 6-29):

$$p_{\text{at}} \cdot V_{\text{Gx}} = n_{\text{Gx}} \cdot R \cdot T$$

$$V_{\text{Gx}} = \frac{n_{\text{Gx}} \cdot R \cdot T}{p_{\text{at}}}$$

$$V_{\text{Abl}} = V_1 + V_2 + \dots + V_n$$

$$m_{\text{Gx}} = n_{\text{Gx}} \cdot M_{\text{Gx}}$$

$$m_{\text{Abl}} = m_1 + m_2 + \dots + m_n$$

$$p_{\text{at}} \cdot V_{\text{Gx}} = m_{\text{Gx}} \cdot R_{\text{Gx}} \cdot T$$

p_{at} :	Atmosphärendruck (bar)
V_{Gx} :	Gasvolumen (m^3)
V_{Abl} :	Gasvolumen insgesamt (Abluft) (m^3)
n_{Gx} :	Gasstoffmenge (kmol)
m_{Gx} :	Gasmasse (kg)
m_{Abl} :	Gasmasse insgesamt (Abluft) (kg)

- M_{Gx} : Gasmolmasse (kg/kmol)
 R : universelle Gaskonstante (8314,3 J/(kmol·K))
 R_{Gx} : z. B. Gaskonstante von Luft (287 J/(kg·K))
 T : Temperatur (K bzw. (273,15 °C + t (°C)))

Gl. 6-29: Thermische Zustandsgleichung für ideale Gase allgemein

Die universelle Gaskonstante (R) ist eine Naturkonstante für alle idealen Gase. Sie ist definiert durch das Molvolumen idealer Gase (22,4 l/mol) unter Normalbedingungen (Atmosphärendruck 101,325 kPa und 0 °C oder $T_0 = 273,15$ K). Ihr Wert beträgt 8314,3 J/(kmol·K) (aus Gieck und Gieck, 1995).

Der Sauerstoffgehalt in der Luft liegt bei 20,96 Vol.-%. Stickstoff hat einen Molanteil von 78,12 Vol.-% und Kohlendioxid einen Molanteil von etwa 0,035 Vol.-%. Die Molmasse des Gemisches mit weiteren Bestandteilen wie Argon wird mit 28,9583 kg/kmol und einer Gaskonstante von 0,28712 kJ/(kg·K) angegeben (aus VDI-Wärmeatlas, 2006).

Daraus berechnet sich der Massenanteil von Sauerstoff zu 23,16 Massen-%, von Stickstoff zu 75,53 Massen-% und Kohlendioxid zu 0,053 Massen-%.

Die in der Belüftungsluft enthaltene trockene Luftmasse (m_{trL}) wird im Simulationsmodell wie folgt berechnet (Gleichung 6-30) (siehe ergänzend auch Gleichung 6-16 und 6-17):

$$p_D = \varphi_i \cdot p_{DSi}$$

$$\psi_{trL} = \frac{p - p_D}{p}$$

$$m_{trL} = \frac{\psi_{trL} \cdot p_{at} \cdot V_{Be}}{R_L \cdot (273,15 + t_{Be})}$$

- m_{trL} : Masse trockene Zuluft (kg)
 φ_i : relative Feuchte der Belüftungsluft ($0 \leq \varphi_i \leq 1$)
 p_D : Wasserdampfdruck (bar)
 p_{DSi} : Wasserdampfsättigungsdruck bei Belüftungstemperatur (t_{Be}) (bar)
 p : Gesamtdruck (1,013 bar)
 ψ_{trL} : Druckanteil trockene Luft
 p_{at} : Atmosphärendruck (bar)
 V_{Be} : Luftvolumen Belüftung (m^3)
 t_{Be} : Temperatur der Belüftungsluft (°C)
 R_L : Gaskonstante von Luft (287 J/(kg·K))

Gl. 6-30: Trockene Luftmasse der Belüftungsluft allgemein

Die Multiplikation der trockenen Luftmasse (m_{trL}) mit dem Massenanteil des Sauerstoffs ergibt umgerechnet in Mol nach Multiplikation mit einem Faktor, der die Unbestimmbarkeit der Strömungsverhältnisse berücksichtigt, den für die stöchiometrischen Reaktionsgleichungen einzusetzenden Sauerstoff.

Faktor für die Unbestimmbarkeit der Strömungsverhältnisse

Der effektiv durchströmte Porenraum, durch den die Sauerstoffversorgung der Mikroorganismen gewährleistet wird, kann aufgrund des heterogenen Materials und der räumlichen und zeitlichen unbekanntem Verteilungen und Veränderungen der Struktur und damit der Strömungsverteilungen, nicht beschrieben werden (Scholwin, 2005). Bei einer losen Schüttung aus Kugeln wurde gezeigt, dass nur 41 % des luftgefüllten Porenvolumens wirklich durchströmt werden (Furnas, 1929).

In Anlehnung daran wird in dem Simulationsmodell angenommen, dass der Sauerstoffanteil, der sich in 40 % des sich über die Zeit verändernden freien Porenvolumens (f_{as}) befindet, die Schüttung unverbraucht verlässt (siehe auch Kapitel 6.1.1). Der verbleibende Sauerstoff steht den Mikroorganismen für den Verbrauch zur Verfügung.

Berechnung des Sauerstoffbedarfs für die optimale Belüftung

Über den für einen bestmöglichen Abbau einzuhaltenden Sauerstoffgehalt in der Abluft bei der Kompostierung existiert in der Literatur kein Konsens. Die angegebenen Werte schwanken zwischen 2 Vol.-% und 18 Vol.-% (Krogmann, 1994). Der Sauerstoffgehalt in der Abluft wird daher in dem Simulationsmodell minimiert, d. h. bei Einstellung der optimalen Belüftung im Programm ist er so gering wie möglich, ohne dass einzuhaltende Grenzwerte überschritten werden (siehe Kapitel 6.2). Dies und den Faktor für die Unbestimmbarkeit der Strömungsverhältnisse berücksichtigend wird der Sauerstoffbedarf und damit die Belüftungsmenge für die optimale Belüftung berechnet. In der Simulation beträgt der Restsauerstoff in der Abluft aufgrund des strömungsbedingten unverbrauchten Sauerstoffs bei einem Porenvolumen von 40 Vol.-% und einer Setzung von 1 Materialhöhen-% etwa 9 Vol.-%. Dieser Wert kann durch prozentuale Verringerung oder Erhöhung des Belüftungszuluftstroms verändert werden.

Substratstruktur

Die Substratstruktur setzt sich im Simulationsprogramm aus Anteilen Wasser, Feststoff und freiem Porenvolumen („free air space“ (f_{as})) zusammen (Abbildung 6-5). Das Porenvolumen

wird geringer, wenn der Korngrößenunterschied im Substrat, z. B. durch mikrobiologischen Abbau oder physikalische, chemische und mechanische Verwitterungsprozesse (Setzung), steigt.

Für die Berechnung des Gesamtvolumens (V_G), der Gesamtmasse (m_G), der Gesamtdichte (ρ_G) und des freien Porenvolumens (V_f) und der Volumenreduktion (V_r) über die Zeit werden die folgenden Gleichungen verwendet.

Berechnung der Feststoff- bzw. Flüssig-Einzelvolumina

Zur Berechnung der Feststoff- bzw. Flüssig-Einzelvolumina im Simulationsmodell, also das Volumen des abbaubaren Substrats (V_{TSa}), des nicht abbaubaren organischen Anteils (V_{TSn}), des wahlweise zugegebenen nicht abbaubaren organischen Materials (V_{TSstr}) (Strukturmaterial), der anorganischen Fraktion (V_{TSu}) (z. B. Sand) und des Wassers (V_W), werden für jeden Zeitschritt die Gleichungen 6-31 (siehe ergänzend auch Gleichungen 6-34) benötigt:

$$V_G = \frac{m_G}{\rho_G} = \frac{m_{TSa}}{\rho_{TSa}} + \frac{m_{TSn}}{\rho_{TSn}} + \frac{m_{Str}}{\rho_{Str}} + \frac{m_{TSu}}{\rho_{TSu}} + \frac{m_W}{\rho_W}$$

$$V_{TSa} = \frac{m_{TSa}}{\rho_{TSa}} \quad V_{TSn} = \frac{m_{TSn}}{\rho_{TSn}} \quad V_{TSstr} = \frac{m_{TSstr}}{\rho_{TSstr}} \quad V_{TSu} = \frac{m_{TSu}}{\rho_{TSu}} \quad V_W = \frac{m_W}{\rho_W}$$

- V_G : Gesamtvolumen einer Feststoff- bzw. Flüssigmasse (m^3)
- m_G : Gesamtmasse Feststoff bzw. Flüssigkeit (kg)
- ρ_G : Gesamtdichte Feststoff bzw. Flüssigkeit (kg/m^3)
- V_{TSa} : Volumen abbaubare Trockensubstanz (m^3)
- V_{TSn} : Volumen nicht abbaubare organische Trockensubstanz (Anteil im Material) (m^3)
- V_{TSstr} : Volumen nicht abbaubare organische Trockensubstanz (Strukturmaterial) (m^3)
- V_{TSu} : Volumen anorganische Trockensubstanz (z. B. Sand) (m^3)
- V_W : Volumen Wasser im Material (m^3)
- m_{TSa} : Masse abbaubare Trockensubstanz (kg)
- m_{TSn} : Masse nicht abbaubare organische Trockensubstanz (Anteil im Material) (kg)
- m_{TSstr} : Masse nicht abbaubare organische Trockensubstanz (Strukturmaterial) (kg)
- m_{TSu} : Masse anorganische Trockensubstanz (z. B. Sand) (kg)
- m_W : Masse Wasser im Material (kg)
- ρ_{TSa} : Dichte abbaubare Trockensubstanz (kg/m^3)
- ρ_{TSn} : Dichte nicht abbaubare organische Trockensubstanz (Anteil im Material) (kg/m^3)
- ρ_{TSstr} : Dichte nicht abbaubare organische Trockensubstanz (Strukturmaterial) (kg/m^3)
- ρ_{TSu} : Dichte anorganische Trockensubstanz (z. B. Sand) (kg/m^3)
- ρ_W : Dichte Wasser (kg/m^3)

Gl. 6-31: Berechnung der Feststoff- bzw. Flüssigvolumina p. Z. im Simulationsmodell

Berechnung der Gesamtmaterialmasse

Die Addition der verschiedenen Massen für jeden Zeitschritt, also der Trockensubstanz des abbaubaren Substrats (m_{TSa}), die durch Abbau über die Zeit kleiner wird, des nicht abbaubaren organischen Anteils (m_{TSn}), des wahlweise zugegebenen nicht abbaubaren organischen Materials (m_{TSstr}) (Strukturmaterial), der anorganischen Fraktion (m_{TSu}) (z. B. Sand) und des Wassers (m_W), ergibt im Simulationsmodell die Gesamtmasse (m_{fM}) pro Zeitschritt (Gleichung 6-32):

$$m_{fM} = m_{TSa} + m_{TSn} + m_{TSstr} + m_{TSu} + m_W$$

- m_{fM} : Gesamtmasse des feuchten Materials (kg)
- m_{TSa} : Masse abbaubare Trockensubstanz (kg)
- m_{TSn} : Masse nicht abbaubare organische Trockensubstanz (Anteil im Material) (kg)
- m_{TSstr} : Masse nicht abbaubare organische Trockensubstanz (Strukturmaterial) (kg)
- m_{TSu} : Masse anorganische Trockensubstanz (z. B. Sand) (kg)
- m_W : Masse Wasser im Material (kg)

Gl. 6-32: Berechnung der Gesamtmaterialmasse p. Z. im Simulationsmodell

Berechnung der Materialdichten

Da die Massen im Simulationsmodell unterschiedliche Dichten haben, wird über den Massenanteil (ξ_x), multipliziert mit der entsprechenden Dichte (ρ_x), die Gesamtmaterialdichte für jeden Zeitschritt berechnet (ρ_G) (Gleichung 6-33):

$$\rho_G = \sum (\xi_x \cdot \rho_x) \quad \sum_{x=1}^{x=n} \xi_x = 1$$

$$\xi_x = \frac{m_x}{m_G}$$

- ρ_G : Gesamtdichte Feststoff bzw. Flüssigkeit (kg/m^3)
- ξ_x : Massenanteil Einzelkomponente
- ρ_x : Dichte Einzelkomponente (kg/m^3)
- m_x : Masse Einzelkomponente (kg)
- m_G : Gesamtmasse Feststoff bzw. Flüssigkeit (kg)
- x : TSa, TSn, TSstr, TSu, TSun (TSn+TSstr+TSu), W

Gl. 6-33: Berechnung der Gesamtmaterialdichte p. Z. im Simulationsmodell

In der Gleichung 6-33 steht der Index x für die Trockensubstanz des abbaubaren Substrats (TSa) (wird durch Abbau über die Zeit kleiner), des nicht abbaubaren organischen Anteils (TSn), des wahlweise zugegebenen nicht abbaubaren organischen Materials (TSstr) (Strukturmaterial), der anorganischen Fraktion (TSu) (z. B. Sand) und für die Trockensubstanzsumme (TSun) des nicht abbaubaren organischen Anteils (TSn), des wahlweise zugegebenen nicht abbaubaren organischen Materials (TSstr) (Strukturmaterial) und der anorganischen Fraktion (TSu) (z. B. Sand), also TSa, TSn, TSstr, TSu und TSun ($TSun = TSn + TSstr + TSu$) und für Wasser (W).

Die Gleichung 6-33 wird im Simulationsmodell auch zur Berechnung der Dichten einzelner Fraktionen verwendet wie z. B. die Berechnung der Dichten ohne Wasseranteil (Trockensubstanzdichten) und die Berechnung der Dichten der Mischungen aus dem nicht abbaubaren organischen und anorganischen Anteil im jeweiligen Material und den Zugaben von Strukturmaterial, also nicht abbaubarem organischen Material mit der Dichte $\rho_{TSstr} = 0,3 \text{ kg/m}^3$ und anorganischen Feststoffen wie Sand mit der Dichte $\rho_{TSu} = 1,5 \text{ kg/m}^3$ zur Strukturverbesserung.

Berechnungen zum freien Porenvolumen und der Volumenreduktion

Die im Simulationsprogramm vorzugebenden Dichten, also der Schüttdichte des feuchten Materials und die Dichte des feuchten Strukturmaterials und die vorgegebenen Dichten des nicht abbaubaren organischen und anorganischen Zugabematerials, werden für die folgenden Berechnungen auf zwei Gruppen umgerechnet; die Fraktion des abbaubaren Substrats (ρ_{TSa}) und die des nicht abbaubaren (organischen und anorganischen) Materials (ρ_{TSun}), jeweils bezogen auf die Trockensubstanz unter Berücksichtigung des vorgegebenen Trockensubstanzanteils. Mit diesen beiden Dichten und den dazugehörigen Feststoffmassen können die sich über die Zeit verändernden Größen des freien Porenvolumens (Porosität) und der Volumenreduktion durchgeführt werden.

Das freie Porenvolumen („free air space“ (fas) bzw. Porosität) setzt sich im Simulationsmodell aus dem Volumen der gesamten Trockensubstanz (V_{TS}), also der Summe des abbaubaren (V_{TSa}) und nicht abbaubaren organischen Materials (V_{TSn} und V_{TSstr}) und dem anorganischen Anteil (V_{TSu}) zusammen ($V_{TS} = V_{TSa} + V_{TSn} + V_{TSstr} + V_{TSu}$), geteilt durch das Volumen des feuchten Materials insgesamt (Wasser und Trockensubstanz) (V_{FS}) ($V_{FS} = V_{TSa} + V_{TSn} + V_{TSstr} + V_{TSu} + V_W$) und multipliziert mit einem Faktor aus Porenvolumen und Setzung ($f_{S(it)}$), deren Anfangswerte im Simulationsprogramm vorgegeben werden müssen.

Die Volumenreduktion (V_r) wird im Simulationsmodell auf das Volumen der gesamten Trockensubstanz des Materials (V_{TS}), also der Summe des abbaubaren (V_{TSa}) und des nicht

abbaubaren organischen Materials (V_{TSn} und V_{TSstr}) und dem anorganischen Anteil (V_{TSu}) ($V_{TS} = V_{TSa} + V_{TSn} + V_{TSstr} + V_{TSu}$) bezogen (Gleichung 6-34) und für jeden Zeitschritt wie folgt berechnet:

$$fas = f_{s(it)} \cdot \frac{V_{TS}}{V_{FS}}$$

$$f_{s(it)} = f_{s(it-1)} \cdot \frac{a}{z} \cdot \frac{h_{it}}{h_0} \cdot f_{s(it-1)} \cdot \frac{1}{100}$$

$$V_{TS} = \frac{m_{TSa}}{\rho_{TSa}} + \frac{m_{TSun}}{\rho_{TSun}}$$

$$V_{FS} = \frac{m_{TSa}}{\rho_{TSa}} + \frac{m_{TSun}}{\rho_{TSun}} + \frac{m_W}{\rho_W}$$

$$V_r = \frac{f_{s(it)}}{f_{s(0)}} \cdot V_{TS}$$

$$\rho_{TSa} = f_{d(it)} \cdot \rho_{TSa}$$

$$\rho_{TSun} = f_{d(it)} \cdot \rho_{TSun}$$

$$f_{d(it)} = f_{d(it-1)} + f_{s(it-1)} \cdot 10^{-5}$$

fas: freies Porenvolumen („free air space“) (Vol.-% TS)

$f_{s(it)}$: Faktor aus Porenvolumen und Setzung

$f_{s(it-1)}$: Faktor aus Porenvolumen und Setzung ($f_{s(0)} = fas$ (Vol.-% TS))

a: Setzung (Vorgabe) (Materialhöhen-%)

z: Gesamtzeit

it: Zeitschritt

h_{it} : Höhe zum Zeitpunkt it

h_0 : Höhe zum Zeitpunkt 0

V_{TS} : Volumen der gesamten Trockensubstanz (m^3)

V_{FS} : Volumen feuchtes Material insgesamt (Wasser und Trockensubstanz) (m^3)

V_r : Volumenreduktion der gesamten Trockensubstanz über die Zeit (m^3)

m_{TSa} : Masse abbaubare Trockensubstanz (kg)

m_{TSun} : Masse nicht abbaubare Trockensubstanz (inkl. anorganische Trockensubstanz) (kg)

- m_W : Masse Wasser im Material (kg)
 $f_{d(it)}$: Faktor Dichteanstieg
 $f_{d(it-1)}$: Faktor Dichteanstieg ($f_{d(0)} = 1$)
 ρ_{TSa} : Dichte abbaubare Trockensubstanz (kg/m^3)
 ρ_{TSun} : Dichte nicht abbaubare Trockensubstanz (inkl. anorganische Trockensubstanz) (kg/m^3)
 ρ_W : Dichte Wasser (kg/m^3)

Gl. 6-34: Freies Porenvolumen und die Volumenreduktion p. Z. im Simulationsmodell

Dadurch, dass das Wasservolumen im Nenner steht, wird bei steigendem Wassergehalt das Porenvolumen kleiner. Somit hat Wasser ohne Feststoff erwartungsgemäß kein freies Porenvolumen.

Der Anfangswert des freien Porenvolumens (Vol.-% TS) und der Setzung (Materialhöhen-%) ist im Programm vorzugeben. Hierbei berücksichtigt das freie Porenvolumen den mikrobiellen Abbau des Substrats und die Setzung den physikalischen, chemischen und mechanischen Zersetzungsprozess. Da diese Werte schwer messbar bzw. vorhersehbar sind, können sie geschätzt werden. So sollte das freie Porenvolumen bei der Kompostierung 20 - 30 Vol.-% nicht unterschreiten (Bidlingmaier, 1983, Golueke, 1977, Krogmann, 1994). Als Beispiel für Setzungswerte können Messungen an Abfalldeponien herangezogen werden. So traten in Hausmülldeponien Setzungen bis zu 25 % der Deponiehöhe durch den anaeroben Abbau des organischen Substrats auf (Huitric, 1981). In aeroben Versuchsfeldern wurden Setzungen zwischen 4,5 % und 10 % festgestellt (Hudgins, 2000). Da auf Abfalldeponien kaum Setzungen durch mikrobiologischen Abbau stattfinden sollten, können diese Werte als Orientierung dienen. Es ist zu bedenken, dass der Abfall auf Deponien i. d. R. verdichtet eingebaut wird, auch um abdichtungsschädigende Setzungen zu minimieren.

Da das Simulationsmodell bei unterschiedlichen Vorgaben jeweils die Folgen darstellt, können diese Werte mit Hilfe des Programms auf den Prozess eingestellt und optimiert werden.

Berechnung der Setzungswerte in Prozent über die Zeit

Die Setzung in Prozent (a) ist der Endwert für den betrachteten Zeitraum (z) und wird vorgegeben. Das Porenvolumen (f_{as}) verringert sich um den Wert der Setzung in Prozent (a) durch die Anzahl der Zeitschritte insgesamt und in Abhängigkeit von dem Quotienten der neu berechneten Materialhöhe (h_{it} bzw. h_r) zur Materialhöhe am Anfang (h_0) pro Zeitschritt (it) (Gleichung 6-34). Die Materialdichten des abbaubaren (ρ_{TSa}) und nicht abbaubaren Materials (ρ_{TSun}) (inklusive dem anorganischen Anteil (ρ_{TSu})) nehmen um ein Hunderttausendstel

des gleichen prozentualen Wertes zu. Die maximale Dichte, bis zu der eine Setzung eingerechnet wird, beträgt 2 Mg/m^3 . Das entspricht bei einer Gesamtdichte von 1 Mg/m^3 einer simulierten Setzung von 50 Materialhöhen-% bei einem ausschließlich nicht abbaubaren oder nicht zerfallenden Material.

Bei der Berechnung sind die Verdichtung durch Strukturveränderung des abbaubaren Substrats aufgrund der mikrobiologischen Zersetzung und der physikalisch-chemische Zerfall des nicht abbaubaren und anorganischen Materials in Abhängigkeit von der Schüttungshöhe (h_r) (siehe Abbildung 6-10) und der Zeit (t und z) berücksichtigt. Diese Berechnungen führten zu Simulationsergebnissen, die mit empirischen Messergebnissen vergleichbar waren (siehe Kapitel 7.3). Aufgrund der vielen Einflüsse können die Ergebnisse aber nur als relative Tendenzen betrachtet werden.

Abschätzung des Maximalwertes der Materialdichte

Die Korndichten von Abfall sind von der Korngröße abhängig. Sie betragen zwischen 1 Mg/m^3 bei 0,2 m mittlerem Kornradius bis $2,1 \text{ Mg/m}^3$ bei 0,00047 m mittlerem Kornradius (Kraft, 2001). Da in dem Simulationsmodell von geringen Korngrößen ausgegangen wird, wurde annähernd die höchste Dichte für den maximalen Wert (2 Mg/m^3) gewählt. Für organisches Material kann als weitere Orientierung eine Dichte von $1,35 \text{ Mg/m}^3$ und für anorganisches Material $2,6 \text{ Mg/m}^3$ angenommen werden (Kranert, 1988, Dach, 1998, Holt, 1984).

6.1.9 Stickstoff- und Schwefelreaktionen

Die Stickstoff- und Schwefelkonzentrationen in den unterschiedlichen Phasen sind für die Praxis sowohl unter aeroben als auch unter anaeroben Milieubedingungen besonders wichtig (siehe auch Kapitel 5.6). Stickstoff und Schwefel können in bedeutenden Mengen über die Gas- oder Wasserphase in ungewünschten Verbindungen entweichen. So enthält die Abluft häufig noch Ammoniak und Schwefelwasserstoff, vor allem aus den Proteinen (siehe Kapitel 6.1.3, Modellreaktionen 2 und 7) und aus der Reduktion von Nitrit bzw. Nitrat und Sulfat. Ammonium, Nitrit, Nitrat und Sulfat treten im Sickerwasser auf und Ammoniak, Distickstoffoxid, Distickstoff und Schwefelwasserstoff in der Gasphase. Bei proteinreichen Ausgangsmaterialien können diese Emissionen erheblich sein (FNR, 2009). Sulfatreduzierende Mikroorganismen entziehen den Methanbildnern den Wasserstoff und Schwefelwasserstoff wirkt auf Methanbildner toxisch. Beides führt zu einer Reduktion der Methanbildung (z. B. Mudrack und Kunst, 1991). Verfahrenstechnische Probleme können durch Stickstoff und Schwefel aufgrund der korrosiven Wirkung und des Geruchs einiger Verbindungen entstehen (z. B. Heining, 1998, Dammann, 2005).

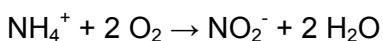
Untersuchungen in Bioreaktoren und an einem Kompostwerk ergaben, dass der Einfluss auf die Stickstoffdynamik hauptsächlich auf indirekte Zusammenhänge beruht (Jensen, 1996). Bei Mangelbelüftung wird die Rotte verzögert, wodurch weniger Stickstoff aus den Proteinen freigesetzt wird. Eine Überbelüftung bewirkt eine Rotteverzögerung durch Austrocknungseffekte. In Laborversuchen von Körner (2009) führte die stärkste Belüftung zu hohen Ammoniakausträgen. Die Stickstofffixierung bleibt in der Simulation unberücksichtigt, da nur die mengemäßig geringere asymbiotische Stickstofffixierung gegenüber der symbiotischen Fixierung für die Kompostierung prinzipiell relevant ist. Zudem wird bezweifelt, dass eine Stickstofffixierung während der Kompostierung auftritt (Körner, 2009). Auch gibt es keine Hinweise darauf, dass ein direkter Einbau von anorganischen Stickstoffverbindungen in die Huminstoffmatrix (Immobilisierung) möglich ist (Körner, 2009). Aus diesen Gründen wird die Immobilisierung von Distickstoff, Distickstoffoxid, Nitrat und Nitrit ebenfalls nicht simuliert.

Im Folgenden sind die im Simulationsmodell verwendeten Reaktionsgleichungen (siehe auch Kapitel 5.6) aufgeführt. Die genannten Reaktionsgleichungen werden in der aufgeführten Reihenfolge im Simulationsmodell berücksichtigt. Für die Berechnungen werden die Molmengen eingesetzt und entsprechend der Gleichungen zu dem Gesamtvorrat des jeweiligen Stoffs addiert oder subtrahiert. Ammonium/Ammoniak wird hierzu als Ammoniak und Sulfid/Schwefelwasserstoff als Schwefelwasserstoff gerechnet. Auf diese Weise können die Volumina, Massen und Konzentrationen mit Hilfe der Molmassen für jeden Zeitpunkt berechnet und ausgegeben werden.

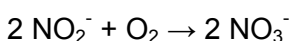
Aerobe Milieubedingungen

Im Simulationsmodell wird der nach Abbau von Kohlenhydraten, Fetten und Proteinen verbleibende Sauerstoff (siehe Kapitel 6.1.1, 6.1.3 und Kapitel 6.1.8) in den Reaktionsgleichungen 1 bis 3 nacheinander wie folgt verbraucht:

Nitrifikation



Reaktionsgleichung 1



Reaktionsgleichung 2

Temperatureinfluss bei der Nitrifikation und Denitrifikation

Die Angaben über das Temperaturoptimum der Nitrifikation variieren. Kuntze et al. (1994) geben einen Bereich von 15 °C bis 35 °C an. Versuche mit Müll-Faulschlamm-Gemischen zeigten eine Nitrifikation bei Temperaturen bis zu 50 °C und 55 °C. Der optimale Wirkungs-

grad thermophiler bzw. thermotoleranter Arten von nitrifizierenden Mikroorganismen soll zwischen 45 °C und 55 °C liegen (Farkasdi, 1961b). Körner (2009) stellte fest, dass die Nitrifikation am besten zwischen 30 °C und 40 °C und bei ausreichender Sauerstoffkonzentration abläuft. Die Nitratakkumulation tritt verstärkt zwischen 25 °C und 35 °C und bei hohen Sauerstoffgehalten auf. Die Nitrifikationsrate ist dann höher als die Denitrifikationsrate. Da für die meisten bekannten autotrophen Nitrifikanten ein mesophiles Temperaturoptimum angegeben wird, ist anzunehmen, dass bei höheren Temperaturen ein Rückgang der Diversität der Nitrifikanten in Verbindung mit einer Abnahme der Nitrifikationsaktivität stattfindet (Körner, 2009).

Das Temperaturoptimum der Denitrifikanten liegt nach Kuntze et al. (1994) bei 18 °C - 30 °C. Nach Casella und Rutili (1990) sind die meisten Denitrifikanten mesophil. Nach Körner (2009) können Denitrifikanten in einem Bereich zwischen 0 °C und 75 °C aktiv sein. Die besten Denitrifikationsergebnisse werden aber auch nach Körner (2009) im mesophilen Bereich zwischen 30 °C und 40 °C erzielt. Die Denitrifikanten können nach Casella und Rutili (1990) bei der Kompostierung bis in den thermophilen Bereich (Temperaturen um 60 °C) tätig sein. Die Milieubedingungen zur Bildung des Endproduktes Distickstoff entsprechen denen für mikrobiologische Abbauvorgänge allgemein erforderlichen Voraussetzungen (Körner, 2009).

Im Simulationsmodell werden diese Temperatureinflüsse mit Hilfe eines Faktors berücksichtigt. Entsprechend der Temperatur wird ein Faktor der in Abbildung 6-7 abgebildeten Funktion mit den Edukten der Reaktionsgleichungen 1, 2 und 7 multipliziert. Durch diese auf den mesophilen Temperaturbereich begrenzte Bildung von Nitrit, Nitrat und Distickstoff können im Simulationsmodell die Zwischenprodukte der Nitrifikation und Denitrifikation in Abhängigkeit von der zeitgleichen Anwesenheit der erforderlichen Edukte und des C/N-Verhältnisses (siehe Kapitel 5.6) auftreten.

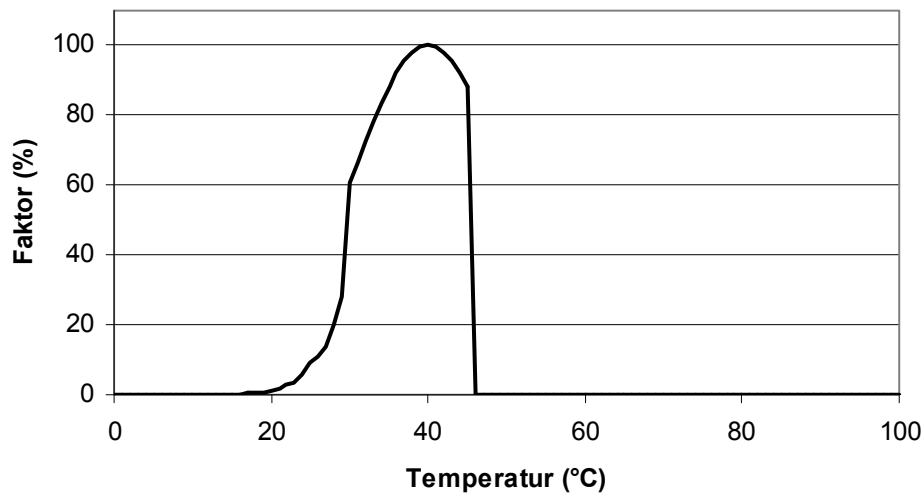


Abb. 6-7: Im Simulationsmodell eingesetzter Faktor für den mesophilen Temperaturbereich zur Berücksichtigung der temperaturabhängigen Nitrifikation und Denitrifikation

Im Simulationsmodell wird also der Temperatureinfluss auf die Nitrit- und Nitratbildung, als Endprodukte der Nitrifikation, aus Ammonium (Reaktionsgleichungen 1 und 2) und die Distickstoffbildung, als Endprodukt der Denitrifikation, aus Nitrat (Reaktionsgleichung 7) mit der Funktion in Abbildung 6-7 berücksichtigt. Wird aufgrund des Temperatureinflusses zum Beispiel weniger Nitrat gebildet, reichert sich Nitrit entsprechend an. Für den Ablauf der Reaktionen ist aber auch jeweils die zeitgleiche Anwesenheit von Sauerstoff bzw. Wasserstoff erforderlich. Die Berücksichtigung des Temperaturfaktors simuliert somit das vor allem bei der Kompostierung nur unter ungünstigen Bedingungen Auftreten der Denitrifikationsprodukte Distickstoffoxid und Distickstoff (Körner, 2009). Wegen der komplexen Einflüsse, die im Modell berücksichtigt und simuliert werden, können kurzfristige Konzentrationsspitzen auftreten (siehe Kapitel 7.2.8 und Kapitel 7.2.9), die aber auch in Laborversuchen festgestellt werden konnten (Körner, 2009).

Schwefeloxidation (Sulfatenstehung)

Mit dem nach den Modellreaktionen 1 bis 5 und den Reaktionsgleichungen 1 und 2 verbleibenden Sauerstoff wird im Simulationsmodell der Schwefel zu Sulfat oxidiert:



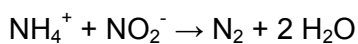
Der nach der Sulfatenstehung verbleibende Rest an Schwefelwasserstoff entweicht als Produkt der Remineralisation.

Ist der rechnerisch zur Verfügung gestellte Sauerstoff (siehe Kapitel 6.1.8) nach den Modellreaktionen 1 bis 5 (Kapitel 6.1.3) und den Reaktionsgleichungen 1 bis 3 verbraucht, werden im Simulationsmodell die entstandenen Mole unter anaeroben Milieubedingungen weiter umgesetzt.

Anaerobe Milieubedingungen

Unter anaeroben Milieubedingungen werden folgende Reaktionen im Simulationsmodell berücksichtigt:

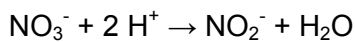
Anaerobe Ammonium Oxidation (Anammox)



Reaktionsgleichung 4

Denitrifikation

Nitrat wird über Nitrit und Distickstoffoxid zu molekularem Stickstoff wie folgt reduziert:

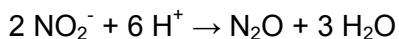


Reaktionsgleichung 5

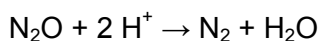
Und wenn $\text{C/N} \geq 6,67$

(0,15 kg N/kg C, siehe Kapitel 5.6) ist,

reagiert Nitrit weiter zum molekularen Distickstoff:

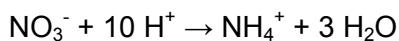


Reaktionsgleichung 6



Reaktionsgleichung 7

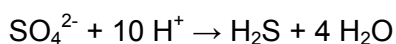
Nitratammonifikation



Reaktionsgleichung 8

Desulfurikation (Sulfatatmung)

Die Sulfatatmung wird wie folgt simuliert:



Reaktionsgleichung 9

Die Sulfatatmung ist im Simulationsmodell der Methanbildung vorgeschaltet, um die Konkurrenz um den Wasserstoff zu simulieren; denn bei stark sulfathaltigen Ausgangsmaterialien

können die sulfatreduzierenden Mikroorganismen den Methanbildnern den Wasserstoff entziehen (Mudrack und Kunst, 1991).

Im Simulationsmodell berücksichtigte hemmende Konzentrationen

Sowohl Ammonium/Ammoniak als auch Schwefelwasserstoff wirken ab bestimmten Konzentrationen auf anaerobe Mikroorganismen hemmend (FNR, 2009). So ist bei pH-Werten über 7,4 und Ammoniumkonzentrationen von 1500 - 3000 mg/l mit hemmenden Ammoniakkonzentrationen zu rechnen (McCarty und McKinney, 1961). Schwefelwasserstoff kann bereits ab Konzentrationen von 23 mg/l eine signifikante Hemmung der Methanbildung verursachen (Mudrack und Kunst, 1991).

Im Simulationsprogramm werden diese Einflüsse unter anaeroben Milieubedingungen als Abbau verzögernd berücksichtigt. Bei der durch das Programm simulierten automatischen Korrektur der Materialzusammensetzung wird bei Überschreitung der Grenzwerte der Proteingehalt reduziert (siehe Kapitel 6.2.5).

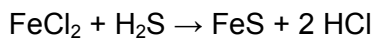
Sulfidfällung mit Eisenchlorid

Unter anaeroben Bedingungen kann dreiwertiges und zweiwertiges gelöstes Eisenchlorid mit Sulfidionen reagieren (Lexikon der Chemie, 2000). Abhängig von den Konzentrationen an freien Sulfidionen und dem Redoxpotential (< -200 mV) bilden sich schwer lösliche Eisensulfide. Diese niedrigen Redoxpotentiale werden in der stabilen Methanphase erreicht, weshalb in dieser Phase das Eisen als schwer lösliches Eisensulfid ausfällt ($\text{Fe}^{2+} + \text{S}^{2-} \rightarrow \text{FeS}$) (Spendlin, 1991).

Bei der Sulfidfällung wird dieser Effekt genutzt, um die Konzentrationen an freien Sulfidionen zu reduzieren. Prozessparameter wie der pH-Wert oder die Temperatur müssen nicht angepasst werden, wenn sich die Vergärung in der Methanphase befindet. Die Eisenionen können entweder in Form von Eisensalzen oder als Salzlösung direkt in den Vergärungsbehälter oder zu den Substraten gegeben werden. Geeignete Eisensalze sind Eisenchlorid (FeCl_2) oder Eisen(II)sulfat (FeSO_4). Auf diese Weise kann die Bildung von Schwefelwasserstoff stark verringert werden. Mit dieser Technik werden bevorzugt hohe Schwefelgehalte in der Abwassertechnik reduziert. Durch Zugabe von 3 - 5 g FeCl_2 je Kubikmeter Abwasser sind beispielsweise Schwefelwasserstoffkonzentrationen < 100 ppm möglich (Dichtl und Geschwind, 2001). Für eine Entschwefelung von Biogas sind deutlich höhere Zudosierungen von Eisenchlorid notwendig. Typische Restkonzentrationen im Gasstrom betragen etwa 100 bis 150 ppm Schwefelwasserstoff (H_2S) (Swedish Gas Center, 2001).

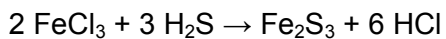
Simulation der Sulfidfällung mit Eisenchlorid

Die Sulfidfällung kann im Simulationsprogramm simuliert werden. Hierbei werden Schwefelwasserstoffemissionen durch Zugabe von Eisen(II)chlorid oder Eisen(III)chlorid vermindert. Die Simulation erfolgt nach diesen Reaktionen:



(Eisen(II)chlorid → Eisen(II)sulfid)

Reaktionsgleichung 10



(Eisen(III)chlorid → Eisen(III)sulfid)

Reaktionsgleichung 11

Es wird für das Simulationsmodell angenommen, dass nur die Hälfte des im Programm eingegebenen Eisenchlorids gelöst und wirksam wird.

Gas/Wasser-Gleichgewichtszustände

Die entstehenden und nach den oxidierenden Reaktionen am Ende der Berechnungen verbleibenden Gase Schwefelwasserstoff und Ammoniak sind teilweise in der wässrigen Phase gelöst. Zur Berechnung des bei konstantem Druck (Atmosphärendruck) von der Temperatur, dem pH-Wert, der Salzkonzentration und der Ionenstärke der Lösung abhängigen chemischen Gleichgewichts werden im Simulationsmodell die folgenden Funktionen verwendet:

Gas/Wasser-Gleichgewichtszustände von Ammoniak/Ammonium

In Wasser gelöstes Ammonium (NH_4^+ -N) liegt in einem chemischen Gleichgewicht mit dem gasförmigen Ammoniak (NH_3 -N) vor. Der Verteilungskoeffizient von Ammoniak zwischen der Gas- (NH_3 -N) und Wasserphase (NH_4^+ -N) ist bei Atmosphärendruck von der Temperatur (t), dem pH-Wert (pH), der Salzkonzentration und der Ionenstärke der Lösung abhängig (Gebel, 1991).

Wie viel Ammoniak aus der Wasserphase (NH_4^+ -N) in die Gasphase (NH_3 -N) entweicht, wird im Simulationsmodell für jeden Zeitschritt wie folgt berechnet (Gleichung 6-35, nach Gebel, 1991):

$$NH_3 - N = NH_4^+ - N \cdot \frac{10^{pH}}{e^{\frac{6344}{(273,15+t)}} + 10^{pH}}$$

NH₃-N: Ammoniak-N in der Gasphase

NH₄⁺-N: Ammonium-N in der Wasserphase

t: Temperatur (°C)

pH: pH-Wert

Gl. 6-35: Gas/Wasser-Gleichgewichtszustände von Ammoniak/Ammonium p. Z.

Gas/Wasser-Gleichgewichtszustände von Schwefelwasserstoff/Sulfidionen

Der Verteilungskoeffizient von Schwefelwasserstoff zwischen Gas- (H₂S_{Gas}) und Wasserphase (S²⁻) ist ebenfalls bei Atmosphärendruck von der Temperatur (t), dem pH-Wert (pH), der Salzkonzentration und der Ionenstärke der Lösung abhängig. Wie viele Sulfidionen aus der Wasserphase (S²⁻) in die Gasphase (H₂S_{Gas}) entweichen, wird im Simulationsmodell mit einem Salinitätsfaktor (Ionisierungskonstante) für Abwasser von 2·10⁻⁷ pro Zeitschritt wie folgt berechnet (Gleichung 6-36, aus Thistlethwayte, 1979):

$$H_2S_{Gas} = S^{2-} \cdot 0,5 \cdot \frac{1}{1 + 2 \cdot 10^{-7} \cdot 10^{(pH + 0,014598 \cdot t) - 36}}$$

H₂S_{Gas}: Schwefelwasserstoff in der Gasphase

S²⁻: Sulfidionen in der Wasserphase

t: Temperatur (°C)

pH: pH-Wert

Gl. 6-36: Gas/Wasser-Gleichgewichtszustände von Schwefelwasserstoff/Sulfidionen p. Z.

6.1.10 pH-Wertbildung

Der pH-Wert bezeichnet den negativen dekadischen Logarithmus der Protonenaktivität (Lexikon der Chemie, 2000). Für verdünnte Lösungen können die Aktivitäten durch die molaren Konzentrationen ersetzt werden. Eine neutrale wässrige Lösung hat den pH-Wert 7. Bleibt der pH-Wert bei Zugabe geringer Mengen starker Säure oder Base praktisch konstant, handelt es sich um eine Pufferlösung. Sie besteht üblicherweise aus einer gelösten Mischung einer mittelstarken Säure und ihrer korrespondierenden Base (Lexikon der Chemie, 2000). Ausgehend von dem Dissoziationsgleichgewicht (Säure + H₂O → Base + H₃O⁺) ergibt sich durch entsprechende Umstellung des Massenwirkungsausdrucks die Gleichung nach Henderson und Hasselbach: pH = pK_S + lg (C_{Base}/C_{Säure}) (Lexikon der Chemie, 2000).

Der pH-Wert ist u. a. abhängig von der Temperatur, der Calciumkonzentration, der Säurekapazität und der Chlorid- und Sulfatkonzentration (Lexikon der Chemie, 2000). Für wässrige Säure-Baselösungen lässt sich der pH-Wert bei Kenntnis der molaren Konzentrationen näherungsweise berechnen.

Da der pH-Wert für den Ablauf vieler chemischer Reaktionen und biologischer Prozesse außerordentliche Bedeutung hat (siehe auch Kapitel 5.7), kann dem Prozess zu seiner Einstellung und Konstanzhaltung (Pufferung) Kalk zugegeben werden. Eine Kalkzugabe ist jedoch immer nur dann sinnvoll, wenn keine Calciumcarbonatsättigung vorliegt, also das Wasser bei Kontakt mit Calcit, die am häufigsten auftretende trigonale Kristallform des Calciumcarbonats (CaCO_3), weder zur Auflösung noch zu Abscheidung von Calciumcarbonat neigt (Lexikon der Chemie, 2000).

Für das Simulationsmodell wird davon ausgegangen, dass keine Calciumverbindungen im Material enthalten sind, obgleich aus vielen Pflanzen, Lebewesen, Wasser und Böden Calcium in das Substrat eingetragen werden kann. So ist Calcium in Pflanzen wie Schachtelhalm, Zuckerrohr und Getreide enthalten, aber auch als Kalk z. B. in Eierschalen und Muscheln. Als Verwitterungsprodukt von Mineralien findet man Calciumsalze in allen natürlichen Gewässern. Sie bilden mit den Magnesiumsalzen die sogenannte Wasserhärte (Lexikon der Chemie, 2000).

Um Verfälschungen im Simulationsmodell auszugleichen, kann ein geschätzter oder gemessener Gehalt an Calciumverbindungen im Material durch simulierte Kalkzugabe berücksichtigt werden. Hierzu wird angenommen, dass nur maximal 90 % des Kalks zeitverzögert molekular pH-Wert wirksam werden, um ungleichmäßige Verteilung und unvollständige Auflösung aufgrund des inhomogenen Materials zu berücksichtigen. Die geringe Löslichkeit von Kalk in Wasser ($K_L = 0,87 \cdot 10^{-8}$ bei 25°C , d. h. es lösen sich $0,00009$ g Kalk in 100 g Wasser (aus Lexikon der Chemie, 2000)) und die sich über die Zeit ändernden Milieubedingungen z. B. bei Belüftung und mikrobieller Tätigkeit werden ebenfalls berücksichtigt. So übersteigt der wirksame molekulare Kalk in Anlehnung an die Bildungsgleichung von Calciumhydrogencarbonat ($\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2$): $\text{CaCO}_3 + \text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2 \rightarrow \text{Ca}(\text{HCO}_3)_2$ nicht dem gebildeten und zugeführten Kohlendioxid. Einzelne Reaktionen des Kalks und unterschiedliche Wertigkeiten werden auf diese Weise verallgemeinert pH-Wert wirksam.

Die Zeitverzögerung bis zur Reaktion des Kalks ist abhängig von der Materialmenge und dem vorgegebenen Hauptprozessmilieu. Unter aeroben Milieubedingungen wird im Simulationsmodell nur die Materialmenge berücksichtigt und unter anaeroben Milieubedingungen die Materialmenge multipliziert mit der vorgegebenen Verzögerungsphase (siehe Kapitel 6.1.1 und Gleichung 6-1). Die Kalkzugabe kann im Simulationsprogramm als Anfangsge-

halt eingestellt werden oder zeitgenau zu anderen Zeitpunkten in beliebigen Mengen erfolgen.

Da im Simulationsmodell die den pH-Wert beeinflussenden Faktoren nicht alle bekannt sind, kann der pH-Wert nur mit einigen Einflussgrößen berechnet werden. Das Simulationsprogramm gibt daher nur die Tendenzen und die Größenordnung des pH-Wertverlaufs wieder, aber keine sicheren Werte.

Berechnung des pH-Wertes im Simulationsmodell

Es wird von einer möglichen Versäuerung durch das Essigsäureäquivalent (AC_{eq}) mit einem pK_S -Wert von 4,75 ausgegangen. Das Essigsäureäquivalent (AC_{eq}) umfasst im Simulationsmodell die organischen Carbonsäuren einschließlich der leichtflüchtigen organischen Säuren (volatile fatty acids (VFA)). Es wird berechnet aus dem aufgrund der Abbauverzögerungen nicht abgebauten Rest der gebildeten Essigsäure (Kapitel 6.1.3, Modellreaktionen 6 - 8) und dem nicht abgebauten Anteil der Propionsäure. Der Versäuerung entgegen wirken das Puffersystem Kohlendioxid-Hydrogencarbonat ($CO_2 - HCO_3^-$) durch entstehendes Kohlendioxid (CO_2) und das gebildete Ammoniak (NH_3) (Anteil in der Wasserphase siehe Gleichung 6-35). Der Anteil des Hydrogencarbonats wird hierbei als konstanter Faktor mit 0,008 des entstehenden Kohlendioxids angenommen. Die nicht reagierende gelöste Kohlendioxidkonzentration verringert sich entsprechend um diesen Betrag. Der gebildete Schwefelwasserstoff (H_2S) (Anteil in der Wasserphase siehe Gleichung 6-36) ist säurewirksam (Christen, 1974) und der virtuell zugegebene Kalk ($CaCO_3$) basewirksam. Beide werden ebenfalls bei der Berechnung des pH-Wertes berücksichtigt. Die Konzentrationen sind in Mol gerechnet und werden für jeden Zeitschritt neu bestimmt (Gleichung 6-37):

$$pH = 4,75 + \log \frac{CaCO_3 + CO_2 + NH_3}{AC_{eq} + HCO_3^- + H_2S}$$

pH: pH-Wert

$CaCO_3$: Calciumcarbonat (Annahme: 90 % wirksam) (Mol)

CO_2 : gebildetes Kohlendioxid (Mol)

NH_3 : gebildetes Ammoniak (Mol)

AC_{eq} : Essigsäureäquivalent (einschließlich organischer Carbonsäuren und VFA) (Mol)

HCO_3^- : entstehendes Hydrogencarbonat (Mol)

H_2S : gebildeter Schwefelwasserstoff (Mol)

Gl. 6-37: Bestimmung des pH-Wertes p. Z. im Simulationsmodell

Das Henry-Daltonsche Gesetz

Zur Simulation des Gas/Wasser-Gleichgewichts von Kohlendioxid bzw. Hydrogencarbonat wird das Henry-Daltonsche Gesetz verwendet. Das Henry-Daltonsche Gesetz beschreibt die Löslichkeit von Gasen in Flüssigkeiten bei konstanter Temperatur. Die Löslichkeit eines Gases aus einem Gasgemisch ist dabei proportional zu seinem Partialdruck. Dieses Gesetz ist nur gültig bei idealem Verhalten der Gase und ungesättigten Lösungen (Lexikon der Chemie, 2000). Beides wird also im Simulationsmodell als gegeben angenommen.

Gas/Wasser-Gleichgewichtszustände von Kohlendioxid/Hydrogencarbonat

In Wasser löst sich Kohlendioxid beträchtlich. Bei 15 °C und Atmosphärendruck löst 1 Liter Wasser etwa 1 Liter Kohlendioxid. Etwa 0,1 % des so gelösten Kohlendioxids reagiert mit dem Wasser zu Kohlensäure gemäß der Gleichung: $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{CO}_3$ (Lexikon der Chemie, 2000).

Zur Bestimmung des realen Löslichkeitsverhaltens von Kohlendioxid bei unterschiedlichen Temperaturen muss der Henrysche Absorptionskoeffizient empirisch ermittelt werden (Sander, 1999). Die im Simulationsmodell verwendete Funktion nach Zheng et al. (1997) (in Sander, 1999) ist in Abbildung 6-8 dargestellt. Im Simulationsmodell wird das chemische Gleichgewicht von Kohlendioxid und Hydrogencarbonat bei niedrigen Drücken über das Molverhältnis in Abhängigkeit von der Temperatur als Faktor zur Bestimmung des Anteils in der Wasser- und damit in der Gasphase berücksichtigt.

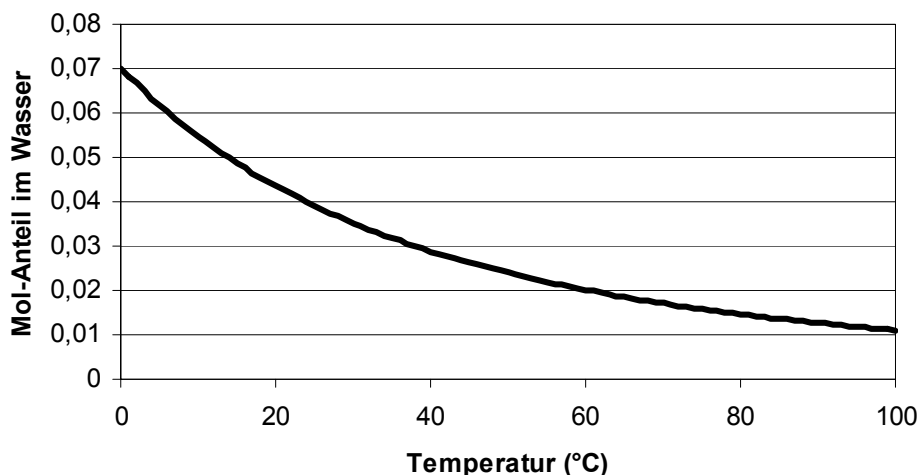


Abb. 6-8: Henry Koeffizient für die Kohlendioxidlöslichkeit in Wasser im Simulationsmodell (nach Zheng et al., 1997)

6.1.11 Lösungs-, Transport- und Diffusionsprozesse

Die Lösungs-, Transport- und Diffusionsprozesse sind in Abhängigkeit von der feuchten Materialgesamtmasse simuliert. Wegen der komplexen und nichtbestimmbaren Materialstruktur in der Schüttung fließen die Lösungs-, Transport- und Diffusionsprozesse als verzögernder Faktor mit ein (siehe Kapitel 6.1.1).

Unter aeroben Bedingungen werden 10 % der Materialgesamtmasse (Verzögerungsminimum ist zwei) mit den Mikroorganismenwachstumsverzögerungen multipliziert. Berücksichtigung findet hier der Anteil anaerob stattfindender Abbauprozesse in Mikrokompartimenten, die bei kleiner vorgegebener Mikroorganismenwachstumsverzögerung den Prozess beschleunigen und bei großer vorgegebener Mikroorganismenwachstumsverzögerung den Prozess entsprechend verlangsamen können.

Unter anaeroben Bedingungen werden ebenfalls 10 % der Materialgesamtmasse mit den Mikroorganismenwachstumsverzögerungen multipliziert, aber das Verzögerungsminimum ist die Gesamtabbauzeit. Die Verzögerungen der Abbauprozesse bis zum Erreichen der Methanphase werden also maßgeblich durch die Gesamtabbauzeit beeinflusst. Eine Methanbildung findet nicht mehr statt, wenn die Restsauerstoffkonzentration nach aerobem Sauerstoffverbrauch in Kilomol größer als ein Millionstel (10^{-6}) der Materialgesamtmasse ist. Auf diese Weise wird die hemmende Wirkung von Sauerstoff unter anaeroben Bedingungen auf die strikt anaeroben Mikroorganismen berücksichtigt (siehe Kapitel 5.1).

6.1.12 Verweilzeit und Raumbelastung

Bei der Vergärung sind wie in anderen Verfahren die hydraulische Verweilzeit (HRT) und die Raumbelastung (B_R) wichtige Verfahrenskenngrößen.

Die hydraulische Verweilzeit (HRT)

Die hydraulische Verweilzeit (HRT) ist die Dauer, die das Material im Reaktor verbleibt. Die Verweilzeit ergibt sich daher aus der Durchgangsgeschwindigkeit (v_{FS}) und dem Reaktorvolumen (V_R) (Gleichung 6-38).

$$HRT = \frac{V_R}{v_{FS}}$$

HRT: Hydraulische Verweilzeit („Hydraulic Retention Time“) (d) (d: Tag oder andere Zeiteinheit)

V_R : Volumen des Reaktors (m^3)

v_{FS} : Durchgangsgeschwindigkeit des feuchten Materials insgesamt (Wasser und Trockensubstanz) (m^3/d)

Gl. 6-38: Hydraulische Verweilzeit allgemein

Je kürzer die Verweilzeit ist, desto leichter müssen die organischen Substanzen abbaubar sein. Bei der Wahl der Verweilzeit ist auch die Generationszeit der verschiedenen Mikroorganismen zu berücksichtigen. Die Methanbildner haben zum Beispiel eine lange Generationszeit, d. h. sie verdoppeln sich innerhalb von mindestens vierzehn Tagen, während andere Mikroorganismen wesentlich kürzere Generationszeiten haben. Wird der zu verarbeitende Feststoff dann häufiger ausgetauscht als einmal in vierzehn Tagen, kann das zur Verminderung der Methanbildnerkonzentration führen und der Prozess kommt langsam zum Erliegen. Wird jedoch zum Beispiel dem Reaktor zur Methangewinnung nur gelöstes Substrat zugeführt und werden gleichzeitig Vorkehrungen zum Festhalten der Biomasse getroffen, an dem die Methanbildner haften, so kann die Verweilzeit wesentlich verkürzt werden. Dadurch sind geringere Reaktorvolumina erforderlich, was zu niedrigerer Heizenergie, weniger Platzbedarf und geringeren physikalischen Erschwernissen und somit Kosten führt (FNR, 2009).

Wenn die Verweilzeit also zu kurz ist, besteht die Gefahr, dass die Mikroorganismen ausgezogen werden und der Prozess nicht optimal läuft. Im Simulationsprogramm entspricht die Verweilzeit der Abbauezeit, so dass die Abbaubarkeit einzelner Substrate in der vorgegebenen Zeit ermittelt werden kann. Die gegenseitigen Einflüsse der Substrate in einer Mischung bleiben dabei unberücksichtigt.

In der Praxis werden in landwirtschaftlichen Biogasanlagen, abhängig von dem Substrat, Verweilzeiten von bis zu 120 Tagen gewählt (FNR, 2009). Die mittlere Verweilzeit liegt bei 50 Tagen, wobei Bioabfälle, abhängig von dem Cellulose- und Ligningehalt, mit einer Verweilzeit von etwa 20 Tagen deutlich darunter liegen können. Bei Abbauraten von über achtzig Prozent kann ein weiterer Anstieg durch Verlängerung der Verweilzeit kaum erreicht werden (Schmelz, 2000).

Die Raumbelastung (B_R)

Die Raumbelastung (B_R) gibt die Belastung des Reaktors mit organischer Trockensubstanz (m_{oTS} : $m_{TSA} + m_{TSn} + m_{TSstr}$) bezogen auf das Reaktorvolumen (V_R) an. Teilweise wird auch das gesamte zugeführte Material, also auch die anorganische Trockensubstanz (m_{TS} : $m_{TSA} + m_{TSn} + m_{TSstr} + m_{TSu}$) für die Berechnung der Raumbelastung verwendet. Im Simulationsprogramm kann zwischen organischer und gesamter (organischer und anorganischer) Trockensubstanz gewählt werden.

Im Simulationsmodell wird die Raumbelastung (B_R) wie folgt berechnet (Gleichung 6-39):

$$B_R = \frac{m_{oTS/TS}}{V_R \cdot z}$$

B_R : Raumbelastung („space charge“) ($\text{kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{d})$) (d: Tag oder andere Zeiteinheit)

$m_{oTS/TS}$: Masse der organischen bzw. wahlweise der gesamten Trockensubstanz (kg)

V_R : Volumen des Reaktors (m^3)

z : Abbauzeit (entspricht der Verweilzeit) (d) (d: Tag oder andere Zeiteinheit)

Gl. 6-39: Raumbelastung im Simulationsmodell

Die Raumbelastung liegt i. d. R. unter $10 \text{ kg oTS}/(\text{m}^3 \cdot \text{d})$, und zwar zwischen 2,6 und $3,5 \text{ kg oTS}/(\text{m}^3 \cdot \text{d})$ (FNR, 2009). Bei Überschreitung des verfahrensspezifischen Grenzwertes können Zwischenprodukte nicht schnell genug abgebaut werden, wodurch es zu einer Übersäuerung und somit zu einer Hemmung oder zu einem Erliegen des anaeroben Abbauprozesses kommen kann (Wellinger et al., 1991, Präve et al., 1994, Christ et al., 1998, Vollmer, 2004, FNR, 2009).

6.1.13 Schwermetallhemmung

Überschreitet die gemessene oder vermutete Schwermetallkonzentration den Grenzwert mindestens eines Schwermetalls (Kapitel 5.9), so kann eine allgemeine Hemmung und eine mögliche Auswaschung simuliert werden. Durch entsprechende Markierung im Programm wird die Wachstumsgeschwindigkeit der Mikroorganismenpopulationen verzögert (Kapitel 6.1.1), wodurch sich die Abbauzeit des Substrats verlängert. Abhängig von dem pH-Wert (< 5), der gleichzeitig entstehenden Sickerwassermenge ($> 0,1 \text{ kg}$) und der Materialgesamtmasse ($1 \% + 2$) können die Schwermetalle jedoch ausgewaschen und der Abbau entsprechend begonnen bzw. fortgeführt werden. Eine Auswaschung erfolgt also parallel zur

Sickerwasserbildung mit saurem pH-Wert, die länger als 1 % der Materialgesamtmasse addiert mit zwei, gerechnet als dimensionsloser Zeitschritt, andauern muss.

6.1.14 Eingesetzte Stoffwerte

Die im Simulationsmodell verwendeten allgemeinen Stoffwerte sind:

Wärmeleitfähigkeiten:

$$\lambda_{fL} = 0,024 \text{ W/(m}\cdot\text{K) feuchte Luft}$$

$$\lambda_{fM} = 0,6 \text{ W/(m}\cdot\text{K) feuchtes Material}$$

Dichten:

$$\rho_{fL} = 0,08 \text{ kg/m}^3 \text{ feuchte Luft}$$

$$\rho_W = 1000 \text{ kg/m}^3 \text{ Wasser}$$

$$\rho_{TSstr} = 0,3 \text{ kg/m}^3 \text{ Zugabe Strukturmaterial}$$

$$\rho_{TSu} = 1,5 \text{ kg/m}^3 \text{ Zugabe anorganisches Material (z. B. Sand)}$$

$$\rho_{Fe2} = 3160 \text{ kg/m}^3 \text{ Eisen(II)chlorid}$$

$$\rho_{Fe3} = 2900 \text{ kg/m}^3 \text{ Eisen(III)chlorid}$$

dynamische Viskosität:

$$\eta = 15 \cdot 10^{-6} \text{ (Pa}\cdot\text{s) feuchte Luft}$$

Prandtl-Zahl:

$$Pr = 1 \text{ für trockene Luft bis zu gesättigtem Wasserdampf}$$

Hydraulischer Durchmesser:

$$h_D = 0,01 \text{ m}$$

Wärmekapazitäten:

$$cp_M = 1,05 \text{ kJ/(kg}\cdot\text{K) Material (trocken)}$$

$$cp_W = 4,19 \text{ kJ/(kg}\cdot\text{K) Wasser}$$

$$cp_L = 1,00 \text{ kJ/(kg}\cdot\text{K) Luft (trocken)}$$

$$cp_D = 1,86 \text{ kJ/(kg}\cdot\text{K) Wasserdampf}$$

Fallbeschleunigung:

$$g_F = 9,81 \text{ m/s}^2$$

Wärmestrahlung:

$$M^\sigma = 400 \text{ W/m}^2 \text{ Material}$$

Drücke:

$$p = 1,013 \text{ bar Gesamtdruck}$$

$$p_{at} = 1,013 \text{ bar} = 101,325 \text{ kPa} = 10^5 \text{ N/m}^2 \text{ Atmosphärendruck}$$

Gaskonstanten:

$$R = 8314,3 \text{ J/(kmol}\cdot\text{K) universelle Gaskonstante}$$

$$R_L = 287 \text{ J/(kg}\cdot\text{K) Luft (trocken)}$$

$$R_D = 461 \text{ J/(kg}\cdot\text{K) Wasserdampf}$$

Durchlässigkeitsbeiwert:

$$kf_0 = 10^{-4} \text{ m/s (durchlässig)}$$

Molmasse:

$$M_L = 28,9583 \text{ kg/kmol Molmasse Luftmischung}$$

Schmelzenthalpie:

$$h_s = 333,1 \text{ kJ/kg Wasser}$$

6.2 Eingabewerte (Input)

Zu Beginn der Simulation müssen die Eingabewerte (Abbildung 3-1) bestimmt, überprüft und erforderlichenfalls angepasst werden.

Die Schüttdichte und die Dichte des Strukturmaterials werden teilweise bei der Materialwahl (siehe „Eingabe der Materialien“ bzw. „Aufruf der Laborversuche“) automatisch durch das Programm vorgegeben. Dies gilt auch für die Materialmengen, Feststoffanteile, Strukturmenge und Zuschlagsstoffe bzw. Anfangsbelastungen. Da diese Werte aber variieren können, ist auch bei Vorgabe eine Überprüfung und ggf. Anpassung sinnvoll.

Die Temperaturvorgabe der Luft (Umgebung), des Materials, der Belüftungsluft und des zufließenden Wassers sollten den angenommenen oder realen Verhältnissen entsprechen. Die richtige Temperatureingabe ist mitprozessbestimmend und entscheidet u. a. über die Abtötung von Keimen (Kapitel 5.2).

Zur Vereinfachung wird der Luftdruck der Belüftungsluft im Simulationsprogramm mit 1,01 bar vorgegeben. Die Luftanteile werden mit Hilfe des Luftdrucks auch bei Normierungsvorgabe zeitgenau in Masse umgerechnet. Der Luftdruck könnte aber zum Beispiel für eine Druckbelüftung eingebbar programmiert werden.

Auch die Angabe des Porenvolumens und die Setzung des Materials (prozentuale Abnahme des Porenvolumens und Zunahme der Dichte insgesamt ohne Berücksichtigung des mikrobiellen Abbaus, siehe Gleichung 6-34) zu Beginn des Abbauvorgangs sind vor allem für die aerobe Behandlung wichtig. Die Werte können ggf. geschätzt werden (Richtwerte sind im Programm vorgegeben).

Es wird davon ausgegangen, dass die Kohlenhydrate (allg.), Stärke, Aminosäuren und Hemicellulose zu 70 %, Fette und Wachse zu 45 % und Proteine und Cellulose zu 50 % abgebaut werden können und Lignin (siehe auch Kapitel 6.1.2) gar nicht abgebaut werden kann (nach z. B. Haug, 1980, Bidlingmaier, 1983). Diese Annahmen können im Programm geändert werden. Durch die Aufteilung der Materialzusammensetzung in neun Gruppen ist eine ergänzende Differenzierung in der Programmweiterentwicklung möglich.

Die unterschiedlichen Abbaubarkeiten unter aeroben und anaeroben Milieubedingungen können indirekt durch Addition zu einer entsprechenden Substratgruppe berücksichtigt werden. Lignin steht somit für nicht abbaubare organische Stoffe. Soll z. B. eine partielle Abbaubarkeit von Lignin simuliert werden, könnte die entsprechende Menge bei einer der anderen Kohlenhydratgruppen (unspezifische Kohlenhydrate (allg.), Stärke, Hemicellulose oder Cellulose) eingetragen werden.

Eine virtuelle Leuchtdiode gibt im Programm an, wenn die Ausgangssubstratzusammensetzung ein hohes (> 45) oder niedriges (< 10) Kohlenstoff-Stickstoffverhältnis (C/N) aufweist.

Eine Änderung kann durch Entnahme oder Zugabe von stickstoffhaltigen Substraten erfolgen.

Überschreitungen von Grenzwerten

In der Frontansicht des Programms werden die bei den Berechnungen berücksichtigten Überschreitungen von Grenzwerten durch virtuelle Leuchtdioden angezeigt. Für die aerobe Betriebsweise wird die Überschreitung von Grenzwerten des Wassergehalts (unter 12 Gew.-% bzw. über 70 Gew.-%), des freien Porenvolumens (≤ 10 Vol.-%), der Temperatur (< 10 °C bzw. > 80 °C) und des Sauerstoffgehalts (Kohlendioxidkonzentration ≥ 25 Vol.-% in der Abluft) signalisiert. Für die anaerobe Betriebsweise sind das entsprechend der Wassergehalt (< 25 Gew.-%), die Temperatur (< 10 °C bzw. > 80 °C), der pH-Wert (< 4 bzw. > 11) und die Überschreitung des hemmenden Gehalts an Wasserstoff (> 20 Vol.-%), Schwefelwasserstoff (≥ 23 mg/l) und Ammoniak (> 3000 mg/l bei einem pH-Wert über 7,4). Die Eingabewerte können daraufhin entsprechend angepasst werden.

Faktoren und Wertebezüge

Alle Faktoren, Einheiten und Wertebezüge der Eingabe- und Ausgabewerte können nachträglich im Simulationsprogramm bei einer Weiterentwicklung der Software angepasst bzw. ergänzt werden.

6.2.1 Eingabe der Belüftung

Die wichtigste Vorgabe besteht wegen der unterschiedlichen Mikroorganismen beim aeroben und anaeroben Abbau in der Wahl des Grundprozesses: Ohne Belüftung erfolgt schwerpunktmäßig ein anaerober Abbau (z. B. Vergärung) und mit Belüftung entsprechend ein aerober Abbau (z. B. Kompostierung). Zwischenstufen sind abhängig von der Luftmenge (Sauerstoffzufuhr). Auch beim anaeroben Abbauprozess kann eine Belüftung simuliert werden, so dass der Einfluss der Einstellungen zur Darstellung der unterschiedlichen Mikroorganismenvergesellschaftungen ermittelt werden kann.

Möchte man untersuchen, ob ein Wechsel zwischen aeroben und anaeroben Milieubedingungen sinnvoll sein könnte oder ist dieser anlagenbedingt vorgegeben, ist eine Simulation durch Trennung vor oder nach einem angegebenen Zeitpunkt möglich. Betrachtet wird dann der Abbau des zu diesem Zeitpunkt noch vorhandenen, nicht abgebauten Substrats. Dieser Vorgang ist reversibel.

Weiterhin kann eine Materialwende, also der Eintrag von einem Luftvolumen, das dem freien Porenvolumen entspricht, und eine zeitlich begrenzte Belüftung mit Vorgabe des Zeitraums simuliert werden.

Die Belüftungsmenge kann vielfältig variiert werden. Es wird von einem Durchfluss mit einer flussgeregelten Pumpe ausgegangen. Wegen der ungleichmäßigen Durchströmung wird angenommen, dass Sauerstoff in Höhe von 40 % des sich verändernden freien Porenvolumens unverbraucht entweicht. Der Rest steht für die simulierte mikrobielle Verwertung zur Verfügung (Kapitel 6.1.1 und 6.1.8).

Neben der Einstellung eines konstanten Durchflusses der Belüftungsluft, ist die Verwendung der optimalen Luftmenge aufgrund der stöchiometrischen Modellreaktionen (Kapitel 6.1.3) mit dem Programm simulierbar. Beide Einstellungen können prozentual erhöht oder abgesenkt werden.

Die Belüftung ist für jeden Zeitschritt auch einzeln variierbar. Die Eingabe kann durch direkte Vorgabe („manuell“) oder durch Einlesen einer Belüftungstabelle erfolgen. Hierfür vorgegeben sind die Belüftungsraten der im Simulationsmodell dargestellten Laborversuche (siehe Tabelle 6-8). Bei Bedarf kann ein konstanter Wert zu jeder Eingabe addiert oder subtrahiert werden. Auf diese Weise kann die Belüftung in den Simulationen optimal ausgetestet werden.

Ist weder eine aktive Belüftung, noch ein Wassermantel oder eine Isolierung vorgegeben, wird eine passive Belüftung über die Oberfläche simuliert. Das freie Porenvolumen bis zu einer Tiefe von 0,1 m der Oberfläche (A_0) wird als konstantes - durch Diffusion kontinuierlich erneuertes - Lufteintragsvolumen angenommen (Kapitel 6.1.1). Sauerstoff in Höhe von 40 % des sich verändernden freien Porenvolumens entweicht auch hier unverbraucht.

6.2.2 Eingabe der Isolation und des Wassermantels

Im Programm kann eingegeben werden, ob der Reaktor bzw. die Schüttung isoliert ist, Wärmeverluste zu erwarten sind oder über einen Wassermantel zusätzlich Wärme zu- bzw. abgeführt wird. Die Wassertemperatur im Wassermantel wird hierzu als konstante Temperatur oder als dem Material nachgeführte Temperatur simuliert. Die benötigte Energiemenge zur Temperaturregelung erfolgt in der Simulation durch Erhöhung der Wassermenge anstelle eines Thermostaten. Die Simulation eines Thermostaten könnte bei Bedarf durch Programmierung nachträglich ergänzt werden.

Die Isolation berücksichtigt den Temperaturunterschied zwischen der Außenfläche des Materials bzw. des Reaktors und der Umgebung. Die Luft kühlt bzw. wärmt durch Wärmeüber-

gang bei freier Konvektion (kaum Wind) (Kapitel 6.1.5). Ist Wasser im Mantel des Reaktors, wird der maximale Energieverlust bzw. –gewinn angezeigt.

Ist ein weitgehend konstanter Energieverlust des Materials anzunehmen, kann dieser im Programm eingegeben werden. Der Wert wird bei den Berechnungen für jeden Zeitschritt berücksichtigt.

Für Vergleiche und Optimierungen kann mit Hilfe eines virtuellen Schalters im Programm die Erwärmung durch den mikrobiellen Abbau ausgeschaltet werden. Das ermöglicht die Betrachtung des Temperaturverlaufs aufgrund der vorgegebenen physikalischen Bedingungen.

6.2.3 Eingabe des Chargenbetriebs

Wird der Prozess chargenweise betrieben, kann mit einer Auflösung von einem Tag (durch Umrechnung auch Stunden, Wochen bzw. Monate) diese Betriebsform alternativ mit und ohne Lufteintrag durch das freie Porenvolumen im Vergleich zur einmaligen Beschickung simuliert werden. Die vorgegebene Materialmenge wird dabei durch die Anzahl der Einträge geteilt, so dass am Ende die gleiche Materialmenge wie im Batchbetrieb betrachtet wird. Bei Eingabe von „1“, also Zugabe bei jedem Zeitschritt, ist der Prozess quasi kontinuierlich. Durch Wahl mit Hilfe eines virtuellen Schalters wird der Zustand ohne Anlaufphase, also im eingefahrenen Zustand simuliert. Andernfalls wird die Anlaufphase mitberücksichtigt.

Unter der Vorgabe „manuell“ mit Hilfe eines virtuellen Schalters können die Zugabezeitpunkte der Chargen beliebig eingestellt werden.

Weiterhin gibt es Angaben zum Austrag des nicht abbaubaren Materials inklusive des mineralischen Anteils im Programm. Der Beginn eines regelmäßigen Austrags kann durch das Programm automatisch gefunden oder durch Eingabe („manuell“) vorgegeben werden. Der von dem Simulationsprogramm berechnete Austrag ist abhängig von der Eintragshäufigkeit und der Abbauverzögerung. Der Austrag wiederholt sich entsprechend der Chargenzufuhr.

Haben die Verzögerungsphasen den Wert „1“, wird das abbaubare Material ganz abgebaut (Maximum). Andernfalls wird davon ausgegangen, dass der Rest des abbaubaren Materials verbleibt.

6.2.4 Eingabe der betrachteten Abbauezeit

Die Länge der Abbauezeit kann als fester Wert vorgegeben oder durch das Programm automatisch gesucht werden. Bei der automatischen Suche wird die Abbauezeit ermittelt, bei der über 80 Gew.-% (durch Umprogrammierung änderbar) des abbaubaren Materials ohne

Überschreitung der Grenzwerte abgebaut worden ist. Der Anfangstag für die automatische Suche sollte zur Verkürzung der Simulation etwa der geschätzten Dauer entsprechen.

Eine Gesamtverlängerung der Abbaupzeit wird bei der Einstellung „auto.“ im Programm unter aeroben Milieubedingungen durch zu geringes Porenvolumen (≤ 10 Vol.-%), einem Wassergehalt unter 12 Gew.-% bzw. über 70 Gew.-% und durch Temperaturen < 10 °C bzw. > 80 °C und eine Kohlendioxidkonzentration von mindestens 25 Vol.-% in der Abluft ausgelöst. Unter simulierten anaeroben Milieubedingungen wird der Prozess nur durch Temperaturen < 10 °C bzw. > 80 °C und einem Wassergehalt < 25 Gew.-% verlängert, da anaerobe Prozesse auch bei hohem Wassergehalt ablaufen können.

Die Gesamtverlängerung der Abbaupzeit erfolgt bei der Einstellung „auto.“ im Programm bis zum Zeitpunkt „100“ (100 Zeitschritte) bei Nichteinhaltung der Grenzwerte durch Addition mit „1“ und ab dem Zeitpunkt „100“ mit „10“.

6.2.5 Automatische Materialmengenveränderungen durch das Programm

Wahlweise kann im Programm eine virtuelle Nährstoff- und Materialzugabe bzw. –abnahme simuliert werden, wenn die Abbaupzeit automatisch von dem Simulationsprogramm ermittelt werden soll. Diese dient der Optimierung des Prozesses und ist als Vorschlag anzusehen. Geändert werden die Inhaltsstoffe Kohlenhydrate (allg.), Stärke, Hemicellulose, Cellulose, Proteine und Aminosäuren unter „Input Materials“ und Strukturmaterial wie folgt:

Die Kohlenhydratmenge (allg.) wird mit 1,1 multipliziert, wenn unter aeroben Milieubedingungen eine Hygienisierung erreicht werden soll. Die Strukturmaterialmenge wird mit 1,1 multipliziert, wenn aerob das freie Porenvolumen zu gering (≤ 10 Vol.-%) ist. Die Protein- und Aminosäuremengen werden durch 1,1 geteilt, wenn anaerob die Grenzwerte von Ammonium- oder Schwefelwasserstoff nicht überschritten werden sollen (Ammoniumkonzentrationen > 3000 mg/l bei einem pH-Wert über 7,4 und Schwefelwasserstoff ≥ 23 mg/l). Die Mengen an Kohlenhydrate (allg.), Stärke, Hemicellulose und Cellulose (Kohlenhydrate (allg.) nur, wenn unter aeroben Milieubedingungen eine Hygienisierung erreicht ist) werden unter anaeroben Milieubedingungen durch 1,1 geteilt, wenn die Wasserstoffkonzentration zu hoch ist (> 20 Vol.-%). Berücksichtigt wird im Simulationsmodell dadurch eine hemmende Wirkung von Wasserstoff bei einem Wasserstoff-Partialdruck von über 0,15 bar und höheren oder niedrigeren Drücken aufgrund einer ungleichmäßigen Druckverteilung.

6.2.6 Eingabe der Verzögerungsphasen

Die Einstellung der Verzögerungsphasen bestimmt die zeitliche Verzögerung des mikrobiellen Abbaus. Simuliert werden mit dieser Vorgabe alle den Abbau verzögernde Vorgänge. Die Verzögerungen können also durch physikalische, chemische oder biochemische Prozesse begründet sein.

Ist vorgegeben worden, dass die Verzögerungsphasen automatisch durch das Programm gefunden werden sollen, wirken unter anaeroben Milieubedingungen zu hohe Ammonium- (> 3000 mg/l bei einem pH-Wert über 7,4), Schwefelwasserstoff- (≥ 23 mg/l) und Wasserstoffkonzentrationen (> 20 Vol.-%) Abbauphase verlängern.

Unter aeroben Milieubedingungen führt eine Kohlendioxidkonzentration von mindestens 25 Vol.-% in der Abluft zu einem geringeren mikrobiologischen Abbau durch Verlängerung der Verzögerungsphase.

Unter aeroben und anaeroben Bedingungen wirken in der Simulation Temperaturen außerhalb eines Bereiches von < 10 °C bzw. > 80 °C, pH-Werte außerhalb eines Bereiches von < 4 bzw. > 11 , Wassergehalte außerhalb eines Bereiches von < 12 Gew.-% bzw. > 70 Gew.-% unter aeroben Milieubedingungen und < 25 Gew.-% unter anaeroben Milieubedingungen und ein zu hoher Schwermetallgehalt verzögernd.

Eingabe der Schwermetallhemmung

Überschreitet die gemessene oder vermutete Schwermetallkonzentration den Grenzwert mindestens eines Schwermetalls, so kann dies durch Betätigung eines virtuellen Schalters simuliert werden (siehe Kapitel 6.1.13).

6.2.7 Eingabe der Material- und Reaktorform

Über ein Auswahlménü kann die Reaktor- oder die Mietenform vorgegeben werden. Es kann zwischen Dreiecksmiete, Tafelmiete, Trapezmiete, Zylinderreaktor, Trommel, kugelförmiger Reaktor (Faulbehälter zur Berechnung idealisiert, meistens eiförmig) und Boxenform gewählt werden.

Über die Form des Reaktors bzw. der Mietenart werden Oberfläche, Höhe und Länge des Materials berechnet. Die Breite bzw. Durchmesser, Länge und Höhe ermöglicht die Volumenberechnung für die Materialeingabe. Umgekehrt kann aufgrund eines vorgegebenen Volumens und der Form, die Breite bzw. Durchmesser, Höhe und ggf. Länge durch das Programm berechnet werden.

Für Vergleiche mit Berechnungen der Raumbelastung unter realen Bedingungen kann im Simulationsprogramm ergänzend ein Freivolumen voreingestellt werden, das die Reaktorgröße verändert, aber nicht die Materialmenge („V+“ in Kubikmeter).

Die Zuordnungen der Abmaße der Reaktoren bzw. der Mieten im Simulationsprogramm sind in der Abbildung 6-9 dargestellt: Der Winkel der Dreiecks- und Trapezmiete α , die Breite b und der Mittelpunkt durch die halbe Breite ($b/2$), die Höhe h und die Länge l . Aus diesen Maßen lassen sich alle erforderlichen Größen berechnen.

Die Längenmaße und Höhe sind begrenzt und liegen zwischen 0,06 m und 90 m. Der Winkel α kann zwischen 35° und 89° gewählt werden.

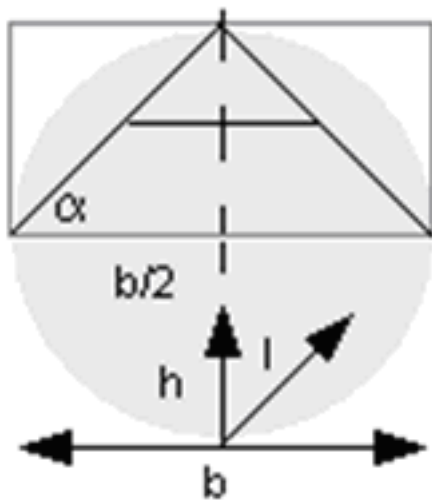
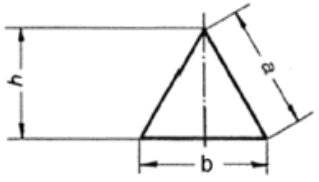
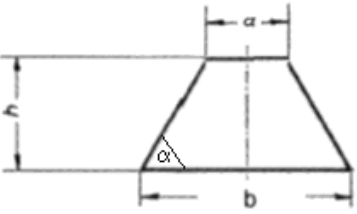
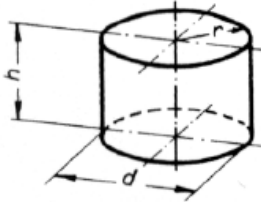
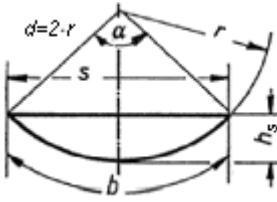
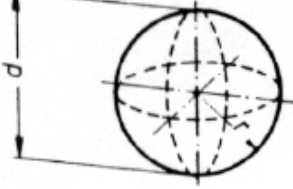
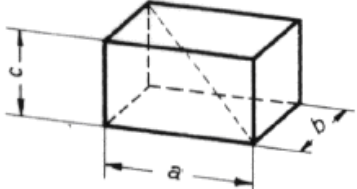


Abb. 6-9: Zuordnung der Abmaße der Reaktoren und der Mieten im Simulationsprogramm

Die Berechnungen der Größen der Reaktoren und der Mieten im Simulationsmodell (Dreiecks-, Tafel- oder Trapezmiete, Zylinder-, Trommel-, kugelförmiger Reaktor und Boxenform) im Einzelnen sind in der Abbildung 6-10 aufgeführt (aus Gieck und Gieck, 1995).

<p>Dreiecksmiete</p>	 <p style="text-align: right;">l = Länge</p>	$A_o = 2 \cdot \frac{b \cdot h_r}{2} + 2 \cdot a \cdot l \quad a = \sqrt{h_r^2 + \left(\frac{b}{2}\right)^2}$ $A_u = b \cdot l$ $V = \frac{b \cdot h}{2} \cdot l \quad h_r = \frac{2 \cdot V_r}{(b \cdot l)}$
<p>Trapezmiete (Tafelmiete)</p>	 <p style="text-align: right;">l = Länge</p>	$A_o = 2 \cdot h_r \cdot \frac{(a+b)}{2} + 2 \cdot l \cdot \sqrt{h_r^2 + \left(\frac{h_r}{\tan(\alpha)}\right)^2} + a \cdot l$ $a = b - 2 \cdot \frac{h_r}{\tan(\alpha)} \quad (\alpha = 89^\circ : \text{Tafelmiete})$ $A_u = b \cdot l$ $V = h \cdot \frac{(a+b)}{2} \cdot l \quad h_r = \frac{V_r}{\left(\frac{a+b}{2} \cdot l\right)}$
<p>Zylinderreaktor</p>		$A_o = h_r \cdot d \cdot \pi + \frac{\pi}{4} \cdot d^2$ $A_u = \frac{\pi}{4} \cdot d^2$ $V = h \cdot \frac{\pi}{4} \cdot d^2 \quad h_r = \frac{4 \cdot V_r}{(d^2 \cdot \pi)}$
<p>Trommelreaktor</p>	<p style="text-align: center;">siehe Zylinderreaktor</p>  <p style="text-align: right;">l = Länge</p>	<p>mit $h = l$ und $d = h$</p> $A_o = l \cdot (d \cdot \pi - b) + 2 \cdot \left(\frac{\pi}{4} \cdot d^2 - A_r\right) + l \cdot s$ $A_u = d \cdot l$ $V = l \cdot \frac{\pi}{4} \cdot d^2$ $d_r = \sqrt{\frac{4 \cdot V_r}{(\pi \cdot l)}} \quad h_s = d - d_r$ $s = \sqrt{\left(\frac{d}{2} - \frac{h_s}{2}\right) \cdot 8 \cdot h_s} \quad b = \frac{\pi}{180^\circ} \cdot \frac{d}{2} \cdot \alpha$ $A_r = \frac{h_s}{(6 \cdot s)} \cdot (3 \cdot h_s^2 + 4 \cdot s^2)$
<p>Kugelförmiger Reaktor</p>		$A_o = \pi \cdot d_r^2$ $A_u = \frac{\pi}{4} \cdot d^2$ $V = \frac{\pi}{6} \cdot d^3 \quad d_r = \sqrt[3]{\frac{6 \cdot V_r}{\pi}}$ <p>(Zur Vereinfachung wird bei Volumenreduktion die Kugel verkleinert, als Beispiel für die geringste Oberfläche bei maximalem Volumen.)</p>
<p>Boxenform</p>		$c = h \quad a = l$ $A_o = 2 \cdot b \cdot h_r + 2 \cdot h_r \cdot l + b \cdot l$ $A_u = b \cdot l$ $V = b \cdot h \cdot l \quad h_r = \frac{V_r}{(b \cdot l)}$

A_o : Oberfläche (ohne A_u); A_u : Auflagefläche (maximal Fläche bei Draufsicht); V : Volumen; V_r : reduziertes Volumen (siehe Gl. 6-34); h_r bzw. d_r : reduzierte Materialhöhe durch Volumenreduktion; b, d, l, h : 0,06 - 90 m; $\alpha = 35^\circ - 89^\circ$

Abb. 6-10: Berechnungen der Größen der Reaktoren und Mieten im Simulationsmodell

6.2.8 Eingabe der Materialien

Es sind die Inhaltsstoffe als Feucht- oder Trockengewichte direkt eingebbar. Die Inhaltsstoffe sind in Gruppen zusammengefasst: Kohlenhydrate (allg.), Stärke, Aminosäuren, Hemicellulose, Fette, Wachse, Proteine, Cellulose und Lignin. Die Werte für Nahrungsmittel können z. B. aus Nährwerttabellen wie Souci et al., 2011 oder Souci et al., 2008 entnommen werden. Berücksichtigt werden im Simulationsmodell nur die unterschiedlichen Abbaubarkeiten der jeweiligen Stoffgruppen, nicht die unterschiedlichen Abbauewege einzelner Moleküle und die daran beteiligten Mikroorganismen. Auch die Vielzahl von Molekülzusammensetzungen und -variationen innerhalb der Gruppen bleibt unberücksichtigt. Die Inhaltsstoffe Kohlenhydrate (allg.), Stärke, Aminosäuren, Hemicellulose, Fette, Wachse, Proteine, Cellulose und Lignin können auch ergänzend direkt eingegeben und addiert werden.

Über Wahl aus diversen Materialgruppen aus dem Bereich des organischen Abfalls (Klärschlamm, Grünabfälle, Hausmüll, organischer Anteil Hausmüll, Bioabfall, Zeitungspapier, Papierfasern) sind Abfallmengen direkt als Gewicht (Feucht- oder Trockengewicht in Kilogramm) im Programm eingebbar. Es erfolgt dann eine Umrechnung in Inhaltsstoffe und bei entsprechender Vorgabe in Feuchtgewicht über den eingegebenen Wert des Trockensubstanzgehalts.

Über repräsentative Stoffhauptgruppen können im Programm bestimmte Fraktionen gewählt und durch Addition zusammengestellt werden. Die Hauptgruppen sind Stroh, Holz, Rinde, Blätter, Gras, Früchte (z. B. Äpfel), Kartoffeln, Gemüse (z. B. Rüben), Getreide (z. B. Weizen), Hülsenfrüchte (z. B. Erbsen), Fleisch und Fisch. Die Eingabe erfolgt als Gewicht in Kilogramm oder in Prozent jeweils als Trocken- oder Feuchtmaterial.

Die Gesamtmaterialmenge kann auch direkt oder über die Form des Reaktors bzw. der Mietenart und das Volumen im Programm eingegeben werden. Die Materialart oder -zusammensetzung wird dann anschließend gewählt. Es kann durch Vorgabe über einen virtuellen Schalter das Feuchtgewicht berechnet werden, wenn nur Trockensubstanzdaten vorliegen. Die Berechnung erfolgt dann über den eingegebenen Wert des Trockensubstanzgehalts.

Die zudotierbaren Stoffe bzw. Anfangsgehalte sind Kalk, Ammonium, Nitrat, Sulfat, Methanol und Eisen(II bzw. III)chlorid. Anorganisches Material wie Sand und organisches Strukturmaterial (nicht abbaubares organisches Material) können ebenfalls im Programm ergänzend zugegeben werden. Für beide Zugabemengen besteht die Möglichkeit, von dem Programm die Trockensubstanz in die Feuchtschubstanz, mit dem angegebenen Trockensubstanzgehalt, umrechnen zu lassen. Für Testzwecke kann vor der Addition der vorhergehende Wert gespeichert und nach dem Test zurückgelesen werden.

Über ein Auswahlmenü sind zudem Materialien aus einer Datenbank (etwa 100 Substrate sind mit den bekannten Eigenschaften voreingetragen) wählbar (Tabelle 6-3). Wahlweise kann ein neues Substrat mit Parametern entsprechend der Datenbankvorgaben eingegeben werden.

Aus der Datenbank werden folgende Werte eingelesen (Tabelle 6-3):

Tab. 6-3: Eingabeparameter für die Datenbankvorlage des Simulationsprogramms

dry solid content	carbohydrates	starch	amino acids	hemicellulose	fats	waxes	proteins	cellulose	lignin
weight-%	kg (DM)	kg (DM)	kg (DM)	kg (DM)	kg (DM)	kg (DM)	kg (DM)	kg (DM)	kg (DM)

pore vol.	bulk density	settlement	ammonium cont.	nitrate cont.	sulfate cont.	phosphorus	potassium	calcium carb.
vol.-% (DM)	Mg/m ³ (wet)	high-%	mg/kg (oDM)	mg/kg (oDM)	mg/kg (oDM)	kg	kg	kg

methanol	ferric chloride	structure	str. dry solid cont.	str. density	e. g. sand	sand dry s. c.	material	organic dry s. c.
kg	kg	kg (wet)	weight-%	Mg/m ³ (wet)	kg (wet)	weight-%	kg (DM)	weight-%

Anmerkung: Die Eingaben „carbohydrates“ bis „lignin“ sind alternativ weight-%oDM, wenn die Summe dem prozentualen Gehalt an Organik entspricht („organic (weight-%oDM)“).

Die Werte können in der Frontansicht des Simulationsprogramms eingegeben werden. Die Datenbank ist als Vorlage im Programm integriert, aber die enthaltenen Daten sind unvollständig und müssen durch Analysen und Recherchen ergänzt werden.

Die im Simulationsprogramm verwendeten Werte für die Inhaltsstoffe der unterschiedlichen Substrate und Materialien sind aus den folgenden beiden Tabellen 6-4 und 6-5 abgeleitet worden. Das Simulationsmodell verwendet daraus die Werte der Tabellen 6-6 und 6-7.

Tab. 6-4: Substrate und deren Hauptbestandteile (Körner et al., 1999)

Substrat	N ¹ % TS	GR ¹ %	HR org. ³ % TS	wesentliche organische Hauptbestandteile (Klammerangaben: % TS der Substrate)
Stroh	0,6...0,7...0,8	6,1	20,9	Cellulose ² (43), Hemicellulosen ² (24), Lignin, Suberin
Holz	0,1...0,2...0,4	0,1	28,5	Cellulose ² (49), Lignin ³ (28), Hemicellulosen ² (20)
Rinde	0,6	7,8	48,5	Lignin, Suberin, Cellulose ² (23), Hemicellulosen ² (12)
Blätter	1,3	12,3	40,0	Cutin, Lignin, Cellulose ² (13), Hemicellulosen ² (11)
Gras	2,6...2,7...2,9	7,1	16,4	Cellulose ² (21), Hemicellulosen ² (13), Cutin, Lignin
Äpfel	0,4...0,5...0,7	5,4		Fructose ⁴ (31), Sacc. ⁴ (15), Gluc. ⁴ (11), s. Kohl ⁴ (13)
Kartoffeln	2,1	6,7		Stärke ⁴ (64), sonstige Kohlenhydrate ⁴ (12)
Rüben	1,8...2,4...3,4	12,3		Saccharose ⁵ (64), sonstige Kohlenhydrate ⁵ (5)
Weizen	2,2...2,3...2,4	1,7	2,9	Stärke ² (72), Cellulose und Pentosane ² (16)
Erbsen	3,4...4,0...4,4	2,8		Stärke ⁴ (61), Protein ⁴ (26), Hexosane ⁴ (13)
Fleisch	10...10,6...11	16,5		Fett ⁴ (50), Protein ⁴ (45)
Sand	+	99,5		keine
Kalk	+	98,9		keine

1 Mittelwerte für verschiedene Substrate gleicher Typen
 2 chromatografische Bestimmung der monomeren Zucker im Säurehydrolysat; BFH Hamburg
 3 Rückstand nach Säurehydrolyse (ohne anorganische Bestandteile); BFH Hamburg, Holzchemie
 4 Souci et al. (2008)
 5 Dehnicke und Kreipe (1952)

Tab. 6-5: Abfälle und deren Hauptbestandteile (aus Krogmann, 1994)

	Wasser- gehalt (Gew.-%)	Asche (%TS)	C/N	N (%TS)	C (%TS)	Zucker (%TS)	Stärke (%TS)	Amino- säuren (%TS)	Proteine (%TS)	Fette (%TS)	Wachse (%TS)	Hemi- cellulose (%TS)	Cellulose (%TS)	Lignin (%TS)
Klärschlamm														
Bidlingmaier (1983)	80	63	8	3,4	26	2,5			1	2,5	2,2	3,2	4,5	21,0
Hausmüll														
Spörri (1977)	40	40,8	36	1,0	36	2,3			2,3	0,8	0,9	13,0	31,4	9,7
Bidlingmaier (1983)		41,0											29,0	
Org. Anteil Hausmüll														
Jäger (1989)	-	5	-	-	-	4		4		3		19	48	16
Bioabfall														
Berlin, Okt. 1985	-	11,9	-	-	-			48,5				16,7	13,7	9,2
Berlin, Nov. 1985	-	6,5	-	-	-			42,2				17,4	20,1	13,9
Jäger (1989)														
Grünabfälle (Pflanzen)														
Poincelot (1975)	-	-	-	-	-	5 – 30			5 – 40	5 – 15		15 – 60		5 – 30
Zeitungspapier														
Bidlingmaier (1983)	0	12,3	163	0,3	49	1,9			-	1,5	1,4	13,0	46,4	23,5
Papierfasern														
Poincelot (1975)	-	-	90	0,51	46	-	-	-	-	-	-	-	60,5	-

Die Materialeigenschaften und Inhaltsstoffe der im Simulationsmodell verwendeten Substrate sind in Tabelle 6-6 aufgeführt. Die Werte können durch Umprogrammierung nachträglich verändert werden.

Tab. 6-6: Materialeigenschaften und Inhaltsstoffe der im Simulationsmodell verwendeten Substrate

	Wasser- gehalt ¹⁾	Anorganik/ Struktur.	Kohlenhyd. (allg.)	Stärke	Amino-Säuren	Proteine	Fette	Wachse	Hemi- cellulose	Cellulose	Lignin
	(Gew.-%)	(%TS)	(%TS)	(%TS)	(%TS)	(%TS)	(%TS)	(%TS)	(%TS)	(%TS)	(%TS)
Klärschlamm	80	63,11	0,83	0,83	0,83	1	2,5	2,2	3,2	4,5	21
Hausmüll	40	41,99	0,77	0,77	0,77	2,3	0,8	0,9	13	29	9,7
Org. Anteil Hausmüll	40	6	2	2	2	2	1,5	1,5	19	48	16
Bioabfall	40	6,42	7,03	7,03	7,03	7,03	7,03	7,03	17,4	20,1	13,9
Grünabfälle (Pflanzen)	40	64,99	1,67	1,67	1,67	5	2,5	2,5	7,5	7,5	5
Zeitungspapier	0	12,31	0,63	0,63	0,63	0	1,5	1,4	13	46,4	23,5
Papierfasern	0	39,5	0	0	0	0	0	0	0	60,5	0
Stroh	13	0	0	0	0	0	0	0	24	43	33
Hart- u. Weich- holz	0	0	0	0	0	0	0	0	20	49	31
Rinde	0	0	0	0	0	0	0	0	12	23	65
Blätter	20	0	0	0	0	0	0	38	11	13	38
Gras	78	0	0	0	0	0	0	33	13	21	33
Früchte	83	0	70	0	0	0	0	0	0	0	30
Kartoffeln	20	0	12	64	0	0	0	0	0	0	24
Gemüse	10	0	69	0	0	0	0	0	0	0	31
Getreide	9	0	0	72	0	0	0	0	0	16	12
Hülsenfrüchte	85	0	0	61	0	26	0	0	0	13	0
Fleisch	35	0	0	0	5	45	50	0	0	0	0
Fisch²⁾	80	0	0	0	0	80	20	0	0	0	0

¹⁾ auch aus Biogas2000, 2000 ²⁾ aus Souci et al., 2011

6.2.9 Aufruf der Laborversuche

Im Simulationsprogramm vorgegeben sind sechs Laborversuche zum Vergleichen der Simulationswerte mit Versuchsergebnissen. Für die Laborversuche werden die Versuchsdaten wie Materialzusammensetzung, Wassergehalt, Schüttdichte und Belüftungsmenge nach der Wahl von dem Simulationsprogramm automatisch eingelesen. Auch kann man sich die Versuchsparameter als Text anzeigen lassen. Die im Labor gemessenen Werte der Versuche werden für den Vergleich im Programm parallel dazu graphisch dargestellt (Sauer-

stoff (Vol.-%), Kohlendioxid (Vol.-%), pH-Wert, Temperatur (°C) und Wassergehalt (Gew.-%), siehe Anhang 14.4).

Werte der Laborversuche

Die sechs unterschiedlichen Laborversuche wurden dem BMBF-Projekt „Neue Techniken der Kompostierung“ entliehen (Körner et al., 1999). Die Zusammensetzungen und Eigenschaften der Modellabfälle E1, E2, E3, E4, E5 und E6 sind in Tabelle 6-7 und die Belüftungs-raten in Tabelle 6-8 aufgeführt. Die Versuchsdurchführung wird in Kapitel 8 beschrieben.

Tab. 6-7: Materialeigenschaften und Inhaltsstoffe der im Simulationsmodell dargestellten Laborversuche E1, E2, E3, E4, E5 und E6 (Modellabfälle aus Körner et al., 1999)

	E1 / E6	E2	E3	E4	E5
Modellabfall TS (kg)	31	61	18	35	25
Stroh (% TS)	0	0	27	10	27
Hart- u. Weichholz (% TS)	15	22	0	18	19
Rinde (% TS)	0	0	14	0	14
Blätter (% TS)	0	0	18	10	0
Gras (% TS)	0	0	0	0	0
Früchte (% TS)	7	4	1	0	1
Kartoffeln (% TS)	5	4	2	10	1
Gemüse (% TS)	3	3	0	0	0
Getreide (% TS)	43	28	7	0	7
Hülsenfrüchte (% TS)	16	10	7	0	7
Fleisch (% TS)	2	1	1	2	1
Kalk (% TS)	9	10	9	0	9
Sand (% TS)	0	18	14	50	14
Schüttdichte (m³/Mg)	0,8	0,7	0,2	0,5	0,2
Wassergehalt (Gew.-%)	50	54	53	60	43

Tab. 6-8: Belüftungsraten der im Simulationsmodell dargestellten Laborversuche E1, E2, E3, E4, E5 und E6 (Modellabfälle aus Körner et al., 1999)

Zeit	E1	E2	E3	E4	E5	E6
(d)	(l/h)	(l/h)	(l/h)	(l/h)	(l/h)	(l/h)
0	94	96	174	89	147	295
7	203	145	133	147	146	283
14	149	151	146	141	149	274
21	158	138	153	141	162	287
28	164	163	157	143	142	262
35	150	155	151	135	142	274
42	142	131	147	31	k. A.	279
49	151	k. A.	k. A.	18	k. A.	281
56	154	k. A.	k. A.	19	k. A.	266
63	148	k. A.	k. A.	k. A.	k. A.	286
70	150	78	84	k. A.	k. A.	287
77	165	65	k. A.	k. A.	k. A.	291
84	154	k. A.	k. A.	280	k. A.	281
91	148	k. A.	k. A.	287	k. A.	279
98	158	k. A.	k. A.	197	k. A.	283
105	155	k. A.	k. A.	149	k. A.	283
112	160	k. A.	k. A.	145	k. A.	278
119	155	k. A.	k. A.	k. A.	k. A.	283
126	285	k. A.	k. A.	k. A.	k. A.	282
133	152	k. A.	k. A.	k. A.	k. A.	289
140	k. A.	k. A.	k. A.	k. A.	k. A.	275
161	108	k. A.	k. A.	k. A.	k. A.	257

k. A.: keine Angaben

6.2.10 Eingabe der Wasserzufuhr und Wasserabfuhr

Es kann die Wasserzufuhr durch Niederschlag (z. B. Regenwasser) oder Bewässerung und die Verdunstung im Simulationsmodell vorgegeben werden. Es besteht die Möglichkeit zwischen kontinuierlicher, also gleiche Werte für jeden Zeitschritt, Wasserzugabe und zeitdiskreter (zeiteinheitsspezifischer) Zugabe von Wasser für die Simulation zu wählen. Die Temperatur des zugegebenen Wassers sollte hierzu durch Abschätzung oder Messung der realen Temperatur mit eingegeben werden.

Im Simulationsmodell kann auch die fehlende Wassermenge für einen Wassergehalt von 50 Gew.-% am Anfang berechnet werden und der Wassergehalt automatisch von dem Simulationsprogramm auf mindestens 50 Gew.-% über die Abbauphase hin eingestellt werden. Die

50 Gew.-% sind durch Umprogrammierung bei Bedarf änderbar. Die fehlenden Wassermengen, die in der Wirklichkeit zugegeben werden müssten, werden angezeigt.

Wahlweise kann die Rückführung des Kondenswassers in den Prozess simuliert werden. Die Menge an gebildetem Kondensat am Ende des betrachteten Zeitraums wird mit oder ohne Rückführung angezeigt.

Es wird bei allen Materialien eine Wasserhaltekapazität von etwa 80 Gew.-% angenommen (Kapitel 6.1.7 und Abbildung 6-6), wobei das Verhalten durch Umprogrammierung bei Bedarf änderbar ist.

6.3 Ausgabewerte (Output)

Die Darstellung der wichtigsten Entwicklungen von physikalischen Parametern, der Gasproduktionen und Konzentrationen von Stoffen in der Feststoff- und Wasserphase (wie Schwefel- und Stickstoffwerte, pH-Wert, Essigsäureäquivalent, C/N-Verhältnis, Wasserverteilung, Stickstoff-, Schwefel- und Kohlenstoffbilanzen) erfolgt wegen der großen Anzahl von Daten neben der Ausgabe von Einzelwerten graphisch (zum Beispiel Abbildung 7-1). Durch die graphische Darstellung werden Entwicklungen und Zusammenhänge verdeutlicht und die Werte sind übersichtlich und zügig ablesbar.

Als Einzelwerte ablesbar sind spezielle Ergebnisse zur Gas-, Wasser- und Feststoffphase. Zum Beispiel sind die Abbaurate und die mögliche Methanbildung bezogen auf die Edukte Essigsäure, Wasserstoff und Kohlendioxid, der Sickerwasseranfall, die Oberflächenwassermenge und die Kondensatbildung ablesbar. Auch ob eine Hygienisierung des Materials stattgefunden hat, wird im Simulationsprogramm angezeigt.

Die Ausgabewerte (auch Abbildung 3-3) im Einzelnen:

6.3.1 Ausgabe von Werten im zeitlichen Verlauf

Es können die graphischen Darstellungen „physikalische Parameter“, „N/S/C-Bilanzen“, „Stickstoff“, „Schwefel / Stickstoff“, „Gas / Wasser“ und „Gas (Vol.-%)“ im Simulationsprogramm gewählt werden. In den graphischen Darstellungen sind Vergrößerungen und Skalierungen der Achsen und Ausführungen der Linien und Punkte frei wählbar.

Der zeitliche Verlauf ist in Tagesschritten (durch Umrechnung auch Stunden, Wochen bzw. Monate) angegeben. Zur Abschätzung der Gas- und Wassermengen, Frachten und der Abbauprodukte bzw. Emissionsdauer bei sehr viel kleineren und größeren Materialmengen kann folgende Tabelle 6-9 verwendet werden:

Tab. 6-9: Umrechnungstabelle für geschätzte Substratmengen und Abbauzeiten

Mengen multipliziert mit:	
10⁻³	aus Tagen werden Stunden
10³	aus Tagen werden Wochen
10⁶	aus Tagen werden Monate

Der Umrechnungsfaktor gilt für alle Mengenangaben, also Ein- und Ausgabewerte, im Simulationsprogramm. Er basiert auf veröffentlichte Werte und ermöglicht auch die Abschätzung der Größenordnung von Werten für die Praxis (Beispiel siehe Kapitel 9.5).

Die jeweiligen Parameter der graphischen Darstellungen werden im Folgenden einzeln aufgeführt. Zum Teil werden gleiche Parameter in verschiedenen Diagrammen angezeigt, wodurch Zusammenhänge besser erkannt und verdeutlicht werden können. Die angegebene Wasserphase umfasst das Wasser im Material und das Sickerwasser, also der Wasseranteil, der das Material verlassen hat (Kapitel 6.3.3).

Physikalische Parameter

Das Diagramm für die physikalischen Parameter beinhaltet die Abbaurate (Gew.-%), die Belüftungsmenge (m³/d), den Wassergehalt (Gew.-%) im Material, die Temperatur (°C) im Material, das freie Porenvolumen (Vol.-%), die Volumenabnahme (Vol.-%) des Materials, die Höhe (m) des Materials, die Reduktion der organischen Trockensubstanz (Gew.-%) und die Wasserdurchlässigkeit (berechneter Durchlässigkeitskoeffizient) (m/d) des Materials.

N/S/C-Bilanzen

Das Diagramm für die Stickstoff-, Schwefel- und Kohlenstoffbilanz umfasst den Anteil Stickstoff-, Schwefel- und Kohlenstoffatome in der Feststoff-, Wasser- und Gasphase jeweils in kumulativen Massen-%. Berücksichtigt werden hier der abbaubare Feststoff und die Verteilung des darin enthaltenen Stickstoffs, Schwefels und Kohlenstoffs in den unterschiedlichen Phasen (Feststoff, Wasser und Gas). Die Werte werden addiert (Summenwerte).

Stickstoff

Dargestellt im Stickstoff-Diagramm sind Ammonium-N (NH_4^+ -N) (mg/l), Nitrat-N (NO_3^- -N) (mg/l), Nitrit-N (NO_2^- -N) (mg/l) jeweils in der Wasserphase und Ammoniak-N (NH_3 -N) (g/d) in der Gasphase.

Schwefel / Stickstoff

In dem Diagramm für Schwefel- und Stickstoffverbindungen werden zur optischen Korrelation der pH-Wertverlauf in der Wasserphase, Distickstoffoxid (N_2O) (m^3/d), produziertes Distickstoff (N_2) (m^3/d) und Ammoniak (NH_3) (m^3/d) in der Gasphase, Gesamtstickstoff (N) (g/l), Ammonium (NH_4^+) (g/l), Nitrat (NO_3^-) (mg/l) und Nitrit (NO_2^-) (mg/l) in der Wasserphase, Schwefelwasserstoff (H_2S) (m^3/d) in der Gasphase und Schwefel (S) (mg/l) und Sulfat-S (SO_4^{2-} -S) (mg/l) in der Wasserphase zusammen angezeigt.

Gas / Wasser

In dem Diagramm zur Darstellung der Gasproduktionen und Wassersituation werden die Gasmengen von Methan (CH_4) (m^3/d), Wasserstoff (H_2) (m^3/d), Kohlendioxid (CO_2) (m^3/d) und Sauerstoff (O_2) (m^3/d) abgebildet. Dazu angezeigt werden der pH-Wertverlauf und das Essigsäureäquivalent (AC_{eq}) (g/l) in der Wasserphase, das C/N-Verhältnis (berücksichtigt werden die Verluste durch Gasbildung von CH_4 , CO_2 , NH_3 , N_2O und N_2) in der Feststoffphase und die anfallende Sickerwassermenge (kg/d), die Oberflächenwassermenge (kg/d), also das nicht eingesickerte Wasser, und die Wassermenge im Material (kg/d).

Gas (Vol.-%)

Dargestellt wird in diesem Diagramm die prozentuale Gaszusammensetzung. Es werden Sauerstoff (O_2), Kohlendioxid (CO_2), Distickstoff (N_2), Methan (CH_4), Wasserstoff (H_2), Distickstoffoxid (N_2O), Ammoniak (NH_3) und Schwefelwasserstoff (H_2S) in Volumenprozent angezeigt.

6.3.2 Ausgabe von Werten des Wasserhaushalts

Ergänzend zu den graphischen Darstellungen (Kapitel 6.3.1) werden Sickerwasser- bzw. Oberflächenwassermenge, Kondensat und die Menge des durch mikrobiologischen Abbau gebildeten Wassers (metabolisches H_2O) in Kilogramm am Ende des betrachteten Zeitraums angezeigt. Hierzu kann zwischen der Angabe der am Ende vorhandenen Sickerwassermengen-

ge und des an der Oberfläche verbliebenen Wassers gewählt werden. Das entstehende Kondensat kann als dem Prozess zurückgeführte Flüssigkeit oder als Entnahme simuliert werden. Angezeigt wird das am Ende vorhandene Kondensat in Kilogramm.

Ausgegeben werden auch die Wasserzugabemengen und –zeitpunkte zur Einstellung des Wassergehalts auf 50 Gew.-% am Anfang oder mindestens auf 50 Gew.-% während des gesamten Prozesses.

6.3.3 Ausgabe von Werten der Wasserphase

Neben den pH-Werten werden die Maximumwerte von Stickstoff und Schwefel während des simulierten Abbaus (max. Stickstoff (N) (g), max. Schwefel (S) (g)), deren Verbindungen (max. Ammonium-N (NH_4^+ -N) (g), max. Nitrat-N (NO_3^- -N) (g), max. Nitrit-N (NO_2^- -N) (g), max. Schwefelwasserstoff-S (H_2S -S) (mg) und max. Sulfat-S (SO_4^{2-} -S) (mg)) und der Summenwert des Sauerstoffkonsums für die Wasserphase (mg/l) in einem gewählten Zeitraum (die letzten x Tage ab Bezugstag y) ausgegeben.

Die Konzentrationsangaben beziehen sich auf das Wasser im Material. Wenn kein Sickerwasser entsteht, findet kein Austrag über die Wasserphase statt. Es wird angenommen, dass die Konzentrationen im Wasser des Materials der im Sickerwasser entsprechen, da von einer gleichmäßigen Verteilung der Stoffe im Wasser ausgegangen werden kann (Körner, 2009). Dies ist wichtig, um das Emissionspotential über die Wasserphase abschätzen zu können.

6.3.4 Ausgabe von Werten der Gasphase

Es werden die kumulativen Werte für die Sauerstoffrespiration in Kilogramm, die Kohlendioxidbildung in Kilogramm und die Stickstoffproduktion in Kubikmeter für die Gasphase ausgegeben. Weiterhin angezeigt wird die Biogasbildung mit unterschiedlichen Bezügen (m^3/Mg oTS und wahlweise TS, $\text{l}/(\text{m}^3 \cdot \text{d})$ und m^3/Mg FS). Die Methan- und Wasserstoffproduktionen insgesamt werden in l/kg oTS und wahlweise TS angegeben. Die gesamte Kohlenstoffemission über die Gasphase wird in g/kg oTS und wahlweise TS ausgegeben. Ebenso die Kohlenstoffemissionen über die Kohlendioxid- und Methanbildung (C, CH_4 -C, CO_2 -C in g/kg oTS bzw. TS). Der Verlauf der Schwefelwasserstoffkonzentrationen wird zur Vergleichbarkeit mit Werten, die empirisch gewonnen wurden, nicht nur graphisch in Volumen pro Zeiteinheit (m^3/d), sondern auch als ppm angezeigt.

Weiterhin werden die Gasemissionssummenwerte in Volumen (m^3) am Ende des Prozesses von Kohlendioxid (CO_2), Wasserstoff (H_2), Methan (CH_4), Ammoniak (NH_3), Schwefelwasser-

stoff (H_2S) und Distickstoffoxid (N_2O) ausgegeben. Der kumulative Gesamtgasemissionswert (umfasst emittiertes Kohlendioxid und emittierten molekularen Stickstoff und Sauerstoff, molekularen Wasserstoff, Methan, Ammoniak, Schwefelwasserstoff und Distickstoffoxid) und alternativ nur die produzierte Gasmenge (umfasst produziertes Kohlendioxid und produzierten molekularen Stickstoff, molekularen Wasserstoff, Methan, Ammoniak, Schwefelwasserstoff und Distickstoffoxid) wird ebenfalls in Kubikmeter am Ende des Prozesses angezeigt.

Da das Volumen von Gasen von der Temperatur, dem Luftdruck und dem Wasserdampfdruck abhängt, sind die Gasvolumina auf Normbedingungen einstellbar. Die Werte werden dann auf $0\text{ }^\circ\text{C}$ mit einem Luftdruck von 1013,25 mbar umgerechnet. Der Wasserdampfdruck bleibt unberücksichtigt. Aufgrund fehlender Angaben diesbezüglich in vielen Veröffentlichungen ist die Temperatur zur besseren Vergleichbarkeit neben $0\text{ }^\circ\text{C}$ alternativ auf $20\text{ }^\circ\text{C}$ (angenommene Durchschnittstemperatur) einstellbar. Bei $0\text{ }^\circ\text{C}$ und 1013,25 mbar liegen die Gasproduktionswerte 15 % unterhalb der Werte bei $20\text{ }^\circ\text{C}$ und 1013,25 mbar.

6.3.5 Ausgabe des Gasbildungspotentials und der Atmungsaktivität

Es wird das Gasbildungspotential unter anaeroben Bedingungen und der Sauerstoffverbrauch unter aeroben Verhältnissen angezeigt. Der Zeitpunkt und die Messdauer können in beiden Fällen (GPx bzw. GBx und RAx bzw. ATx) gewählt werden (letzten x Tage ab Bezugstag y). Für den anaeroben Prozess wird die Menge der produzierten Gase in diesem Zeitraum insgesamt in l/kg oTS und wahlweise TS und für den aeroben Prozess die Menge des veratmeten Sauerstoffs in mg O_2 /g oTS und wahlweise TS angezeigt. Bei einer Abbaurate von nahezu 100 Gew.-% der abbaubaren Trockensubstanz erhält man jeweils das Potential. Andernfalls die simulierte reale Gasbildung bzw. den Sauerstoffverbrauch.

Nach der VDI-Richtlinie 4630 zur Vergärung organischer Stoffe (VDI, 2006) sollten Biogasvolumina in Normvolumen angegeben werden. Im Simulationsprogramm besteht daher die Möglichkeit, die Gasemissionswerte zu normieren (s.o.).

6.3.6 Ausgabe von Werten des Materials

Für den Vergleich mit Werten, die analytisch gewonnen wurden, sind jeweils der Prozessanfangswert des organischen prozentualen Massenanteils der Trockensubstanz, des organischen Kohlenstoffgehalts (TOC: Total Organic Carbon) und des C/N-Verhältnisses des eingegeben Materials angegeben. Der TOC umfasst den gesamten organisch gebundenen Kohlenstoff in Kilogramm oTS. Ergänzend wird zeitdiskret jeweils der abzubauen Anteil in Massenprozent bezogen auf die zu diesem Zeitpunkt vorhandene organische Trockensub-

stanz bzw. wahlweise auf die zu diesem Zeitpunkt vorhandene gesamte Trockensubstanz angezeigt.

Um die Ergebnisse der Methan- und Kohlendioxidproduktion vergleichen zu können, werden die Potentiale (maximale Summenwerte) über das Input-Material bestimmt und in Kubikmeter im Normzustand angezeigt. Die mögliche Methanproduktion wird zusätzlich in l/kg oTS angegeben, ebenfalls im Normzustand. Die Berechnungsgrundlage basiert auf Annahmen nach Hartmann (1983). So betragen die Verhältnisse von Methan zu Kohlendioxid in der Gasphase und die Gasproduktionen für die drei Substratgruppen Kohlenhydrate, Fette und Proteine diese Werte (Hartmann, 1983):

- Kohlenhydrate: 50 % CH₄ / 50 % CO₂ und Gasproduktion: 790 l/kg,
- Fette: 68 % CH₄ / 32 % CO₂ und Gasproduktion: 1250 l/kg und
- Proteine: 71 % CH₄ / 29 % CO₂ und Gasproduktion: 704 l/kg.

Ebenso bestimmt wird der Phosphor- und Kaliumgehalt (in kg) im Feststoff. Im Simulationsprogramm beträgt der Phosphorgehalt ein Viertel und der Kaliumgehalt ein Drittel des Stickstoffgehalts (verallgemeinerte Annahme, stoffspezifische Werte z. B. Kerschberger et al., 2001, BGK, 2012).

Angezeigt wird weiter die Materialmenge (auch Chargenmenge) als Feuchtgewicht (in kg) mit dem Trockensubstanzanteil (Gew.-%) und dem Anteil an abbaubarem Substrat (% TS) (Kapitel 6.1.2) und die zugegebenen Strukturmengen als Feuchtgewicht (in kg) zusammen mit den anorganischen Zugabemengen von z. B. Sand und deren Gesamttrockensubstanzanteil (Gew.-%), berechnet von dem Simulationsprogramm aus den Trockensubstanzanteilen und Mengenanteilen.

6.3.7 Ausgabe der erreichten Abbaurate und Methanbildung

Ausgegeben wird im Simulationsprogramm die Abbaurate (gleichbedeutend mit Abbaugrad) des Materials insgesamt (Gleichung 6-40) und der jeweils aerob oder anaerob erreichte prozessspezifische Anteil an der möglichen Methanbildung (Gleichung 6-41) jeweils in Prozent. Wurde eine Materialtrennung vorgegeben (siehe Kapitel 6.1), sind Werte unter 100 Gew.-% (Materialteilbetrachtung) möglich. Eine virtuelle Leuchtdiode zeigt im Programm an, ob unter den jeweiligen Bedingungen alles Abbaubare abgebaut wurde.

Prozentual erreichte Abbaurate

Es kann die Abbaurate bezogen auf die abbaubare Trockensubstanz (m_{TSa}) oder auf die gesamte Trockensubstanz ($m_{\text{TSa}} + m_{\text{TSn}} + m_{\text{TSstr}} + m_{\text{TSu}}$, siehe Gleichung 6-32) wie folgt im Simulationsprogramm gewählt und angezeigt werden:

$$\text{Abbaurate (Gew. - \%)} = 100 \cdot \frac{\text{abgebaute TS}}{(\text{abbaubare}) \text{ TS insgesamt}}$$

TS: Trockensubstanz (kg) (m_{TSa} bzw. $m_{\text{TSa}} + m_{\text{TSn}} + m_{\text{TSstr}} + m_{\text{TSu}}$)

Gl. 6-40: Abbaurate in Gewichtsprozent im Simulationsmodell

Die Angaben der Abbauraten beziehen sich in den Simulationsdarstellungen im Folgenden immer auf die abbaubare Trockensubstanz (m_{TSa}). Andernfalls wird auf den Bezug auf die gesamte Trockensubstanz ($m_{\text{TSa}} + m_{\text{TSn}} + m_{\text{TSstr}} + m_{\text{TSu}}$) hingewiesen.

Welcher prozentuale Anteil der jeweiligen Substratgruppe abbaubar ist, kann im Simulationsprogramm vorgegeben werden. Zusammengefasst sind drei Gruppen; eine Gruppe besteht aus den Kohlenhydraten (allg.), Stärke, Aminosäuren und Hemicellulose, eine weitere aus den Fetten und Wachsen und die Dritte aus den Proteinen und Cellulose. Lignin kann im Simulationsprogramm nicht abgebaut werden und steht somit für die nicht abbaubaren organischen Stoffe (siehe auch Kapitel 6 und 6.2).

Prozentual erreichte Methanbildung

Die prozentual erreichte Methanbildung bezogen auf die Edukte Essigsäure, Wasserstoff und Kohlendioxid wird im Simulationsprogramm wie folgt berechnet (Gleichung 6-41):

$$\text{Methanbildung (Massen - \%)} = 100 \cdot \frac{\text{prozessspezifische Methanbildung (Mol)}}{\text{mögliche Methanbildung (Mol)}}$$

Mögliche Methanbildung:

aerob: aufgrund des Materials (Kohlenhydrate, Proteine und Fette) berechnet aus den Modellreaktionen 6 - 8

anaerob: aus den nach der sauren Phase vorhandenen Edukten Essigsäure, Wasserstoff und Kohlendioxid

Gl. 6-41: Prozentual erreichte Methanbildung im Simulationsmodell

Die stöchiometrisch mögliche Methanbildung wird unter aeroben Milieubedingungen aufgrund der im Material vorkommenden Kohlenhydrate, Proteine und Fette aus den Modellreaktionen 6 - 8 (Kapitel 6.1.3) berechnet und unter anaeroben Bedingungen aus den nach der sauren Phase vorhandenen Edukten Essigsäure, Wasserstoff und Kohlendioxid.

6.3.8 Ausgabe von Stickstoff- und Schwefelwerten

Für den Vergleich mit Werten, die z. B. aus der Literatur bezogen werden, sind weitere Angaben bezüglich der Stickstoff- und Schwefelemissionen im Simulationsprogramm aufgeführt.

So werden die Stickstoff- und Schwefelgesamtgehalte wahlweise in Prozent organischer Trockensubstanz oder der gesamten Trockensubstanz (oTS bzw. TS) am Anfang und Ende des Prozesses ausgegeben. Die Werte am Ende des Prozesses sind auch auf die organische Trockensubstanz bzw. die gesamte Trockensubstanz zu diesem Zeitpunkt bezogen, so dass prozentual höhere Konzentrationen als am Anfang möglich sind.

Weiterhin ausgegeben werden die N/S/C-Bilanzendwerte des abbaubaren Substrats in der Feststoff-, Wasser- und Gasphase in kumulativen Massen-%. Die Prozentangaben beziehen sich auf den in der Phase jeweiligen Gehalt am Ende, also abzüglich der Emissionen über die Gasphase.

Die Stickstoff- und Schwefelemissionen über die Gas- und Wasserphase, auch in den unterschiedlichen Verbindungen, sind in maximalen Konzentrationen während des simulierten Abbaus und in kumulativen Gesamtemissionen im Einzelnen wie folgt angegeben:

Emissionen über die Gasphase

Bei den Emissionen über die Gasphase sind Ammoniak-N ($\text{NH}_3\text{-N}$) (g), produzierter Distickstoff-N ($\text{N}_2\text{-N}$) (g), Distickstoffoxid-N ($\text{N}_2\text{O-N}$) (g) und Stickstoff (N) (g) und auch Schwefel (S) (g) und Schwefelwasserstoff (H_2S) (ppm) als Gesamtemissionen und eine maximale Schwefelemission (max. S) (g/d) aufgeführt.

Emissionen über die Wasserphase

Über die Wasserphase werden im Simulationsprogramm eine maximale Ammonium-N-Emission (max. $\text{NH}_4^+\text{-N}$) (g/l), maximale Nitrat-N- (max. $\text{NO}_3^-\text{-N}$) (mg/l), maximale Nitrit-N- (max. $\text{NO}_2^-\text{-N}$) (mg/l) und eine kumulative Sulfat-S-Emission ($\text{SO}_4^{2-}\text{-S}$) (mg) und eine maximale Sulfat-S-Emission (max. $\text{SO}_4^{2-}\text{-S}$) (mg/l) ausgegeben.

6.3.9 Ausgabe der Essigsäurekonzentration, Raumbelastung und Verweilzeit

Weitere Ausgabewerte sind die maximale Essigsäurekonzentration (AC_{eq} g/kg oTS wahlweise TS) während des simulierten Abbaus (Kapitel 6.1.10) wahlweise in Prozent organischer Trockensubstanz oder der gesamten Trockensubstanz (oTS bzw. TS) und die Raumbelastung (kg oTS wahlweise TS/(m³·d), siehe Gleichung 6-39). Die Verweilzeit entspricht der gewählten oder angegebenen Abbaupzeit insgesamt (siehe Kapitel 6.1.12).

6.3.10 Ausgabe von weiteren Endwerten

Das freie Porenvolumen (f_{as}) (Vol.-%), die Volumenreduktion (Vol.-%), die Materialhöhe (m) und der berechnete Durchlässigkeitskoeffizient (m/d) am Ende des Prozesses werden ergänzend zu den graphischen Darstellungen angezeigt.

Weiterhin angegeben ist die bei Isolierung oder nicht vorhandenem Wassermantel und fehlender Isolation durch mikrobiologischen Abbau entstehende maximale Wärme, der maximale Wärmeverlust des Wassermantels durch freie Konvektion bei Nichtisolierung (beides in GJ/d) und ob die Kriterien für eine Hygienisierung (Kapitel 4) eingehalten wurden (also mindestens 7 Tage 65 °C oder mindestens 14 Tage 55 °C) mit einer Anzeige „no/yes“. Die Verlustwärme wird nur bei vorhandenem Wassermantel und fehlender Isolation angezeigt, um die Wirksamkeit einer Isolation abschätzen und ggf. eine geeignete Isolation wählen zu können.

6.3.11 Ausgabe der Materialentnahme bei Chargenbetrieb

Bei Chargenbetrieb erfolgt eine Anzeige wann und wie viel nicht abbaubares Material ausgetragen worden ist. Durch Wahl „manuell“ mit Hilfe eines virtuellen Schalters (Kapitel 6.2.3) kann der Beginn des Austrags vorgegeben werden. Durch Wahl „automatisch“ erfolgt der Zeitpunkt des ersten Austrags durch Berechnung. Der von dem Simulationsprogramm berechnete Austrag ist abhängig von der Eintragshäufigkeit und der Abbauverzögerung. Die darauf folgenden Austräge sind abhängig von den Zugabezeitpunkten. Das Simulationsprogramm berechnet den Anteil des nicht abbaubaren Materials inklusive dem mineralischen Anteil und zeigt diesen Wert zu den Entnahmezeitpunkten an. Die Angaben sind zeitdiskret und kumulativ als Feuchtsubstanz in Kilogramm angegeben.

6.3.12 Speicherung von Simulationen

Aufgrund der vielen Variationsmöglichkeiten von Simulationen mit unterschiedlichen Werten, können einzelne Läufe abgespeichert und zu einem späteren Zeitpunkt erneut aufgerufen werden. Abgespeichert werden hierbei sowohl die Eingabe- als auch die Ausgabewerte.

Durch ergänzende Programmierung könnten Werte auch in andere Dateiformate umgerechnet und exportiert werden.

6.4 Zusammenfassende Charakterisierung des Simulationsprogramms

Das in englischer Sprache gehaltene Simulationsprogramm basiert auf einem Simulationsmodell und kann zusammengefasst wie folgt charakterisiert werden:

- Das Simulationsprogramm simuliert aerobe und anaerobe mikrobiologische, physikalische und chemische bzw. biochemische Prozesse in Feststoffen mit einem Wassergehalt < 80 Gew.-% (Trockenfermentation) (durch Umprogrammierung bei Bedarf änderbar).
- Das Simulationsmodell berücksichtigt die Gasströmung durch einschichtiges Material unterschiedlicher Menge und Form, die Thermodynamik (Wärmeleitung, Wärmestrahlung und Konvektion) und den Wasserhaushalt.
- Die räumliche Verteilung der Zustandsgrößen ist unberücksichtigt. Das System ist also als ein einräumiger raumkontinuierlicher Reaktor mit vollkommen durchmischem Feststoff zu betrachten.
- Das Simulationsmodell ist deterministisch und zeitvariant. Es enthält empirische Erfahrungswerte und ermöglicht die Eingabe von zeitgenauen Zufallsereignissen.
- Das Simulationsmodell ist zeitkontinuierlich bei einer Auflösung von einem Tag (durch Umrechnung auch Stunden, Wochen bzw. Monate). Über einen längeren Zeitraum, der mehrere Zeitschritte umfasst, ist es zeitdiskret und liefert somit auch unstetige Kurvenverläufe.
- Die zeitliche Darstellung ermöglicht Rückschlüsse auf die physikalischen Feststoffeigenschaften bei ungleichmäßiger Feststoffverteilung. Das bedeutet, dass sich die Gesamtentwicklung aus kleineren Räumen unterschiedlicher zeitlicher Entwicklung zusammensetzt, die den Verlauf des Gesamtprozesses beeinflussen.
- Es werden fünf Substanzgruppen berücksichtigt. Die drei Substratgruppen Kohlenhydrate, Proteine und Fette und das nicht abbaubare organische Material und anorganische Stoffe. Nach Abbaubarkeit werden Kohlenhydrate (allg.), Stärke, Aminosäuren, Hemicellulose, Fette, Wachse, Proteine, Cellulose und Lignin unterschieden und den drei Substratgruppen zugeordnet.

- Für die Kohlenhydrate, Proteine und Fette werden in Anlehnung an die Monod-Kinetik unterschiedliche mikrobiologische Abbaukurven vorgegeben. Diesen entsprechend können Abbauverzögerungen (Lag-Phasen) eingegeben werden. Auch die Materialmenge wird als Verzögerungsfaktor berücksichtigt, um Lösungs-, Transport- und Diffusionsvorgänge einzubeziehen.
- Das Programm sucht unter Beachtung vorgegebener Grenzwerte automatisch nach der maximalen Abbaurrate bei vorgegebener oder von dem Programm gesuchter Gesamtabbauzeit.
- Die Optimierung durch das Programm erfolgt durch Verlängerung der Gesamtabbauzeit und/oder durch Verkürzung oder Verlängerung der Abbauverzögerungen. Ergänzend kann wahlweise eine virtuelle Materialzugabe bzw. –abnahme zur Prozessoptimierung durch das Programm simuliert werden. Geändert werden dann die Massen der Kohlenhydrate (allg.), Stärke, Hemicellulose, Cellulose, Proteine und Aminosäuren und die Masse des Strukturmaterials. Das Programm sucht nach einem stabilen Prozessverlauf bei dem mindestens 80 % des abbaubaren Anteils abgebaut wurden.
- Für ausgewählte Organikfraktionen (Stroh, Holz, Rinde, Blätter, Gras, Früchte (z. B. Äpfel), Kartoffeln, Gemüse (z. B. Rüben), Getreide (z. B. Weizen), Hülsenfrüchte (z. B. Erbsen), Fleisch und Fisch) sind die Zusammensetzungen schon vorgegeben und die Mengen dadurch direkt als Trocken- oder Feuchtgewicht oder in Prozent im Programm einbringbar.
- Auch für die Materialien Klärschlamm, Grünabfälle, Hausmüll, organischer Anteil Hausmüll, Bioabfall, Zeitungspapier und Papierfasern sind die Zusammensetzungen schon vorgegeben und die Mengen dadurch direkt als Trocken- oder Feuchtgewicht oder in Prozent einbringbar.
- Es besteht ergänzend die Möglichkeit, aus einer Datenbank (Bestandteil des Programms, aber unvollständig) bzw. durch Direkteingabe Materialien bzw. deren Zusammensetzung einzugeben.
- Durch Vorgabe von etwa 30 Initialisierungsparametern können viele Variationen und Einflüsse simuliert werden (siehe Kapitel 6.2):

Vorgegeben werden Schüttdichte (Mg/m^3 FS), Dichte des Strukturmaterials (Mg/m^3 FS), Materialtemperatur am Anfang ($10\text{ °C} - 80\text{ °C}$), Porenvolumen (Vol.-% TS), Setzung (Materialhöhen-% insgesamt), Mieten- oder Reaktorform (Dreiecks-, Tafel- oder Trapezmiete, Zylinder-, Trommel-, kugelförmiger Reaktor und Boxenform jeweils beschrieben durch die charakteristischen Abmaße Höhe, Breite, Länge oder Durchmesser in Meter und ggf. Winkel), Isolation bzw. Temperierung oder Temperaturnachführung mit Reaktor-Wassermantel, eine Prozessverlustwärme und die Lufttemperatur der Umwelt ($-40\text{ °C} - 80\text{ °C}$).

Es wird zwischen aeroben, anaeroben und wechselndem Milieu unterschieden. Eine Feststofftrennung zu einem beliebigen Zeitpunkt ermöglicht eine Betrachtung des anderen als den Gesamtprozess bestimmenden Milieus (aerob oder anaerob) zur Simulation eines

Milieuwechsels während eines Prozesses. Durch Belüftungsvariationen sind Zwischenstufen des Milieus simulierbar.

Für die Belüftung kann die konstante Belüftung, die von dem Programm optimierte Belüftung oder durch Eingabe eine zeitgenaue Belüftung gewählt werden jeweils mit der Belüftungstemperatur (-40 °C - 80 °C) und -feuchte (0 - 100 RH-%).

Die Zugabe des Materials kann in einer Charge (Batch), in mehreren Chargen mit vorzugebenden Intervallen (zeitgenau und in zeitgenauen Intervallen) oder quasi-kontinuierlich, wahlweise mit Materialentnahme des nicht weiter abbaubaren Anteils und mit oder ohne Lufteintrag, simuliert werden.

Simuliert werden kann die Wasserzugabe (z. B. Regen) zeitgenau oder kontinuierlich mit der zugehörigen Wassertemperatur (1 °C - 80 °C) und der Wasserverlust (Evaporation), auch zeitgenau oder kontinuierlich. Das Simulationsprogramm kann wahlweise die erforderliche Wasserzugabemenge zur Einstellung des Wassergehalts auf 50 Gew.-% (durch Umprogrammierung bei Bedarf änderbar) berechnen. Bei Vorgabe wird diese Wassermenge als Zugabe am Anfang oder durchgängig während des Prozesses angezeigt und simuliert.

- Bei der Parametrierung können Gehalte bzw. Zugaben von Ammonium, Nitrat und Sulfat zeitgenau vorgegeben werden. Ebenso die Zuschlagsstoffe Sand, Strukturmaterial, Kalk, Methanol und Eisen(II bzw. III)chlorid.
- Alle Werteeingaben sind durch Begrenzung auf realitätsnahe Wertebereiche vereinfacht.
- Die Ausgaben der Simulationsergebnisse erfolgen graphisch in Diagrammen, als Einzelwerte und Arrays (siehe Kapitel 6.3 und Abbildung 3-3):

Bilanziert werden Kohlenstoff, Stickstoff und Schwefel (Gas-, Feststoff- und Wasserphase) des abbaubaren Substrats.

Die wichtigsten Transformationsprodukte werden in den verschiedenen Phasen (Gasphase, Feststoff- und Wasserphase) in Mengen und Konzentrationen ausgegeben.

Des Weiteren werden viele andere wichtige Parameter ausgegeben wie Temperaturverlauf, pH-Wertverlauf, Materialvolumenveränderung, Wassergehaltsänderung, Sickerwasser- und Kondensatbildung und Gasbildungsraten.

- Das Simulationsmodell ist einfach in der Handhabung (eine Frontansicht) und benötigt nur geringen Speicherplatz (ca. 20 MB).
- Durch die Verwendung des graphischen Programmiersystems LabVIEW™ von National Instruments können durch Programmierung Prozessregelungs- und Prozesskontrollelemente einfach ergänzt werden.

In der folgenden Abbildung 6-11 ist das Programm zur „Prozesssimulation biologischer Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft“ zusammenfassend dargestellt:



Abb. 6-11: Übersichtsdarstellung des Simulationsmodells zur „Prozesssimulation biologischer Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft“

7 Anwendung des Simulationsprogramms

Bevor ein Modell für Simulationen als Alternative für Untersuchungen am Realsystem eingesetzt werden kann, muss seine Validität (Gültigkeit) überprüft werden. Ob ein Modell übertragbar ist, lässt sich jedoch nicht allgemein beurteilen. Die Gültigkeit ist vielmehr abhängig von bestimmten Fragestellungen, Zielsetzungen und Bewertungen. Daher gibt es auch keinen allgemein gültigen Validitätstest, der alles beinhaltet. Es müssen daher auf verschiedenen Ebenen vielfältige Prüfungen vorgenommen werden, um das Modell transparent zu machen und seine Eignung für die jeweilige Problemstellung zu zeigen („model credibility“).

Für die operationalen Modellvalidierungen (siehe Kapitel 3.4) (Plausibilitätstests, Sensitivitätsanalysen, Kalibrierungen, Outputvergleiche und prognostische Gültigkeitsprüfungen) der Ergebnisse des Simulationsprogramms werden Simulationsergebnisse mit Literaturdaten und realen Messwerten verglichen. Hierzu müssen die vorgegebenen Bedingungen und bekannte Eingabewerte möglichst weitgehend übereinstimmen.

Für den Vergleich und für die Wiederholbarkeit einer Simulation müssen die im Programm eingestellten Parameter, also die Parametrierung, angegeben werden. Nur bei Vorgabe gleicher Eingabeparameter, einschließlich der Lag-Verzögerung, sind die Werte der Simulation reproduzierbar.

Die Frontansicht des Programms enthält alle Ein- und Ausgabeparameter. Einen Ausschnitt, der auch die Startansicht darstellt, zeigt die Abbildung 7-1. Das Programm enthält keine weiteren Seiten als Unterprogramme, jedoch Informationsfelder, die aufgerufen werden können. Durch die einseitige Bedienungsfläche entsteht auf einem entsprechend großen Bildschirm eine anwendungsfreundliche Übersicht. Bei einer anwendungsspezifischen Reduktion der Ein- und Ausgabewerte durch Umprogrammierung können Teilprogramme entwickelt werden.

Da die Frontansicht des Programms zu komplex ist, um die Eingabeparameter vollständig abzubilden, wird für die im Folgenden durchgeführten Simulationsbeispiele eine Textliste für die Nennung der Parametrierung verwendet. Die vollständige Parametrierungsliste ist im Anhang 14.1 dargestellt.

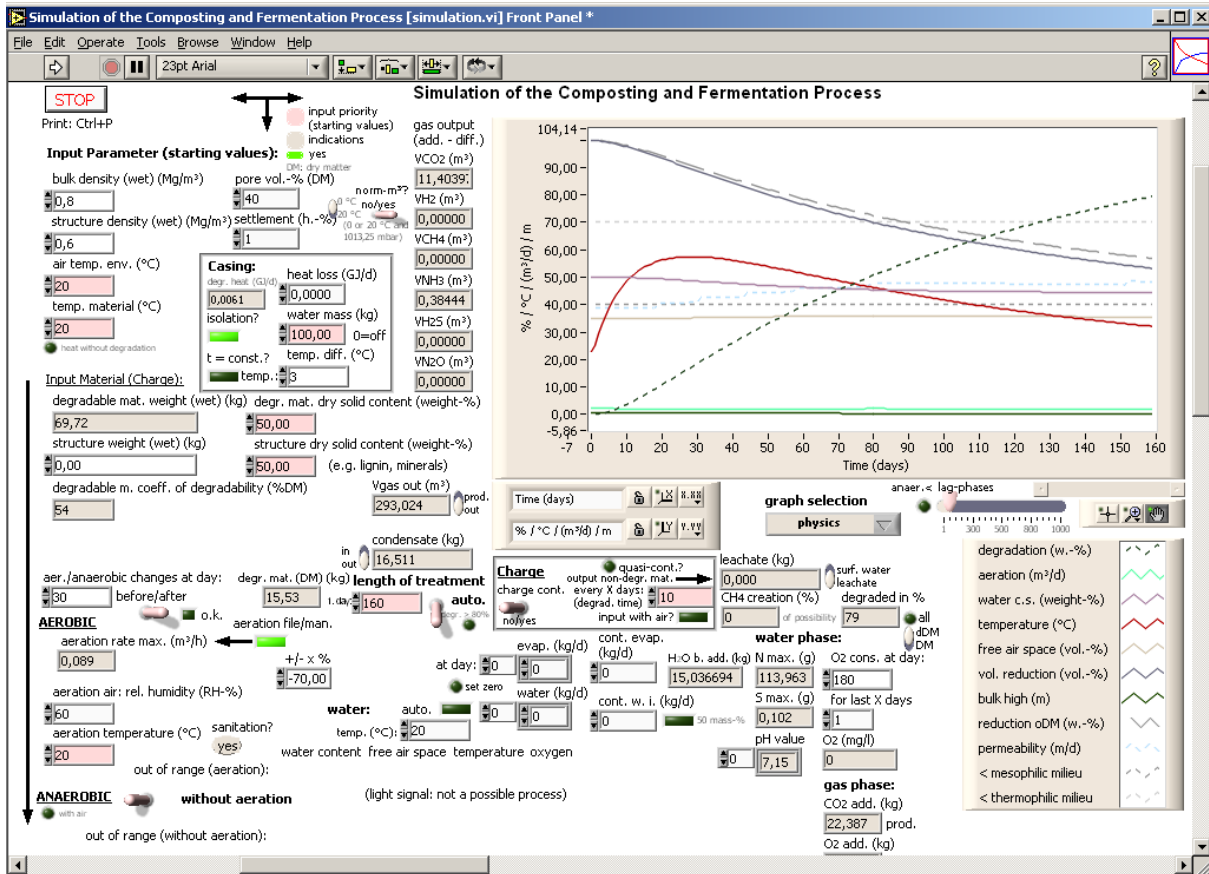


Abb. 7-1: Frontansicht des Programms zur „Prozesssimulation biologischer Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft“

7.1 Gaszusammensetzung bei unterschiedlichen Betriebsarten

Um die Unterschiede der biologischen Abbauprozesse im aeroben und anaeroben Milieu im Simulationsmodell darzustellen, wurden diese Simulationsparameter (Eingabewerte bzw. Input, siehe auch Anhang 14.1) für die im Folgenden beschriebenen Simulationen als Fallbeispiel vorgegeben und unterschiedliche Betriebsarten eingestellt:

Simulationsparameter (Input)

Material:	Bioabfall
Materialgesamtmenge:	100 kg FS
Organische Trockensubstanz (oTS):	89 Massen-%
TOC:	12 kg oTS
C/N:	14
Belüftung:	ja (aerobe Betriebsweise) und zeitbegrenzte Belüftung nein (anaerobe Betriebsweise)
Art der Belüftung:	optimale Belüftung (siehe Kapitel 6.1.8)
Dauer der Behandlung:	180 Tage
Temperatur der Belüftungsluft:	20 °C

Feuchtigkeit der Belüftungsluft:	60 RH-%
Schüttdichte des Substrats:	0,8 Mg/m ³ FS
Dichte des Strukturmaterials:	0,6 Mg/m ³ FS
Temperatur des Materials am Anfang:	20 °C
Temperatur der Umgebung:	20 °C
Isolation:	ohne Belüftung ja, mit Belüftung nein
Wassermantel:	nein
Temperatur des zufließenden Wassers:	20 °C
Wasserzugabe:	nein, z. T. ja (wird angegeben)
Kondensat:	Entnahme
Porenvolumen:	40 Vol.-% TS
Setzung:	1 Materialhöhen-% insgesamt
Form der Miete oder des Reaktors:	Zylinder
Breite oder Durchmesser der Materialschüttung:	0,4 m
Trockensubstanzgehalt des Substrats:	60 Gew.-%
Trockensubstanzgehalt des Strukturmaterials:	60 Gew.-%
Chargenbetrieb:	nein
Zuschlagsstoffe:	z. T. 3 kg Kalk (wird angegeben)
Schwermetallbelastung:	nein
Raubelastung:	2,6 kg TS/(m ³ ·d) und 2,3 kg oTS/(m ³ ·d)

Die vorgegebenen Bedingungen und Werte sind in Anlehnung an vielfach durchgeführten Versuchen im Labormaßstab ausgewählt worden (z. B. Deipser, 1989, Deipser und Poller, 1990, Deipser und Stegmann, 1993, Körner et al., 1999).

Darstellung einzelner Simulationsbeispiele

Für die Darstellung interessanter Simulationsbeispiele wurden einzelne Werte variiert. Die Änderungen werden jeweils genannt. Für die direkte Vergleichbarkeit wurden zudem für Simulationen ähnlicher Fragestellungen die gleichen Emissionen bzw. Stoffkonzentrationen graphisch dargestellt, auch wenn einzelne Stoffe davon nicht auftraten. Das entspricht auch den Darstellungen im Programm, aus dem die Graphiken entnommen wurden.

Simulierte Gasvolumina wurden auf 20 °C und 1013,25 mbar normiert, da diese Werte besser mit Literaturdaten vergleichbar sind, wenn bei diesen keine Umrechnung in den Normzustand (0 °C bzw. 273,15 K und 1013,25 mbar nach DIN 1343) erfolgt ist oder keine Angaben gemacht wurden. Bei abweichenden Bedingungen werden diese angegeben.

Im Folgenden werden die Simulationsergebnisse im Einzelnen dargestellt, interpretiert und verglichen.

7.1.1 Simulationsergebnis Kompostierung und Vergärung

Die wesentlichen beiden Betriebsarten in der biologischen Abfallverwertung unterscheiden sich in der Anwesenheit von Sauerstoff: Unter aeroben Milieuverhältnissen ist es die Kompostierung und unter anaeroben Milieuverhältnissen die Vergärung (Kapitel 4). Die Simulationsergebnisse dieser beiden Betriebsarten werden daher als Erstes dargestellt.

Vergleichbar werden Simulationen bei gleicher Abbaurrate, vor allem wenn die Emissionen betrachtet werden sollen. Die Abbaurrate bei der Kompostierung (75 Gew.-%) ist in der Simulation im gleichen Zeitraum vergleichbar mit der Vergärung (74 Gew.-%), wenn 3 kg Kalk zugegeben werden und der Einfluss meso- und thermophiler Mikroorganismen unberücksichtigt bleibt (Abbildung 7-2).

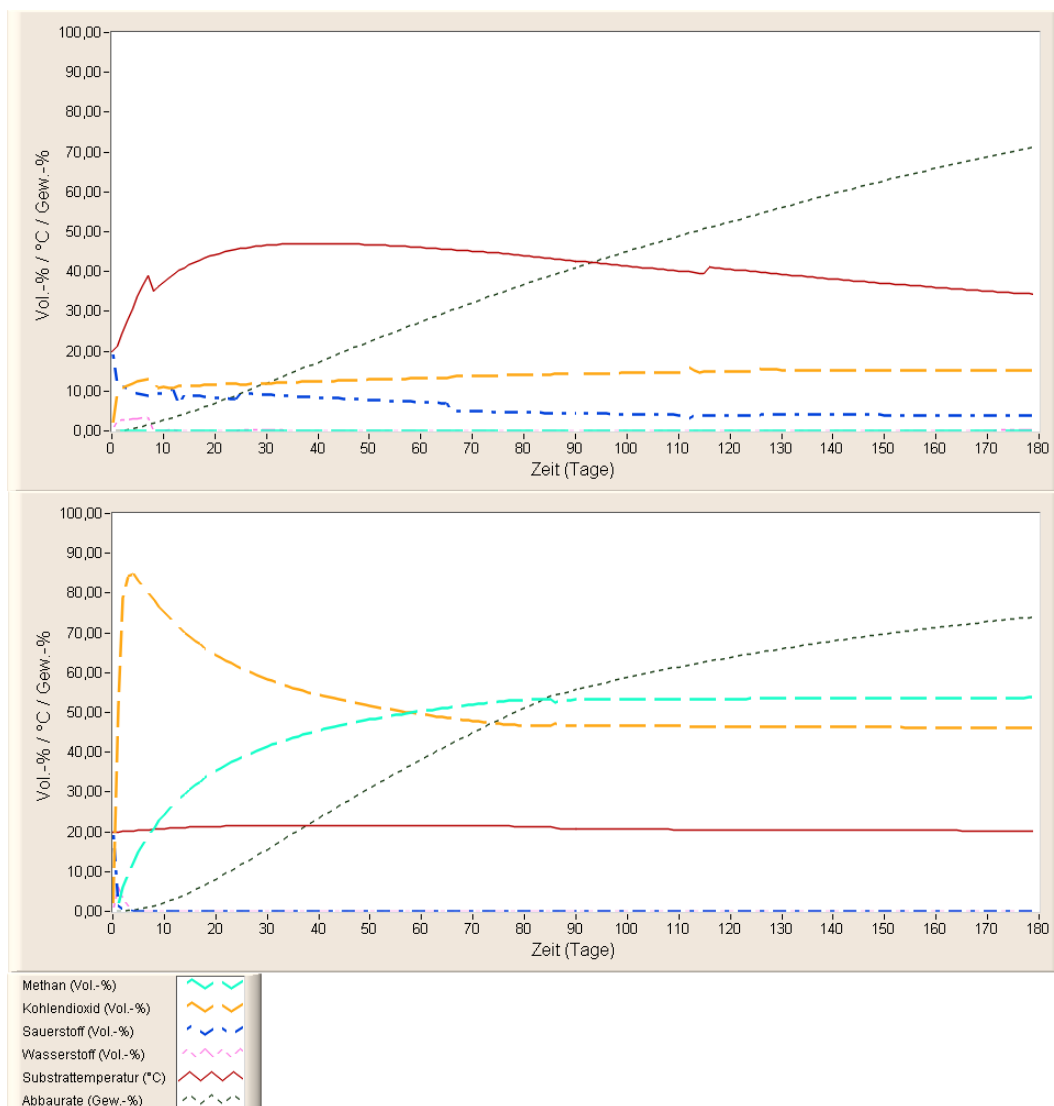


Abb. 7-2: Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung, Substrattemperatur und Abbaurrate mit optimaler Belüftung (oben) und ohne Belüftung (unten)

Die Temperaturen sind unter aeroben Milieubedingungen erwartungsgemäß höher (Kapitel 5.2) und der Abbau steigt zu Beginn zügiger an. Der Konzentrationsverlauf von Kohlendioxid zeigt wegen der optimalen Belüftung (siehe Kapitel 6.1.8) aerob einen fast konstanten Verlauf bei etwa 10 Vol.-%. Die Sauerstoffkonzentration verbleibt bei mindestens etwa 5 Vol.-%, wodurch anaerobe Prozesse minimiert werden (z. B. Strom et al., 1980, de Bertoldi et al., 1983). Anaerob steigt zu Beginn die Kohlendioxidkonzentration stark an (bis ca. 85 Vol.-%), was an der anfänglichen Versäuerung liegt. Das Kohlendioxid-Methanverhältnis stellt sich nach etwa 80 Tagen bei 48/52 Vol.-% stabil ein. Wasserstoff tritt in beiden Fällen vor allem am Anfang auf. Unter anaeroben Bedingungen wird der Wasserstoff zügig zu Methan umgesetzt.

Die Kurvenverläufe in den Simulationen sind mit Angaben aus der Wirklichkeit vergleichbar (siehe Kapitel 5).

7.1.2 Quasi-kontinuierlicher Chargenbetrieb mit und ohne Belüftung

Ein weiterer Vergleich mit den gleichen Simulationsparametern (Kapitel 7.1) aber im quasi-kontinuierlichen Chargenbetrieb ohne Anlaufphase ergibt mit den hier genannten geänderten Simulationsparametern folgende Werte:

Geänderte Simulationsparameter (weitere Parameter siehe Kapitel 7.1)

Chargenbetrieb:	ja (ohne Anlaufphase)
Materialzufuhr oder/und –entnahme:	automatisch durch das Programm
Materialzufuhr:	täglich mit Lufteintrag bei Belüftung und ohne Lufteintrag ohne Belüftung
Materialentnahme:	ab dem 2. Tag täglich 0,2 kg FS mit Belüftung und ohne Belüftung
Zuschlagsstoffe:	3 kg Kalk

Unter aeroben Milieubedingungen wird quasi-kontinuierlich ohne Anlaufphase und mit Zugabe von 3 kg Kalk in der Simulation im gleichen Zeitraum wie im Batchbetrieb insgesamt etwas mehr abgebaut (etwa 86 Gew.-%). Kohlendioxid hat einen relativ konstanten Anteil von 14 Vol.-% und Sauerstoff etwa 7 Vol.-%. Die Temperatur sinkt von 65 °C auf 48 °C. Methan und Wasserstoff werden nicht gebildet.

Werden 3 kg Kalk unter anaeroben Milieubedingungen im quasi-kontinuierlichen Betrieb zugegeben, wird eine Abbaurate von insgesamt 16 Gew.-% unter Methanbildung erreicht. Die Temperaturen liegen zwischen 22 - 25 °C. Der Anteil Methan liegt bei 52 Vol.-% in der Gasphase und der Anteil von Kohlendioxid bei 48 Vol.-%. Sauerstoff und Wasserstoff treten nur

am Anfang auf (Abbildung 7-3). Deutlich höhere Abbauraten sind in der Simulation mit steigenden Temperaturen erreichbar (Kapitel 6.1.3, 9.3 und 9.4).

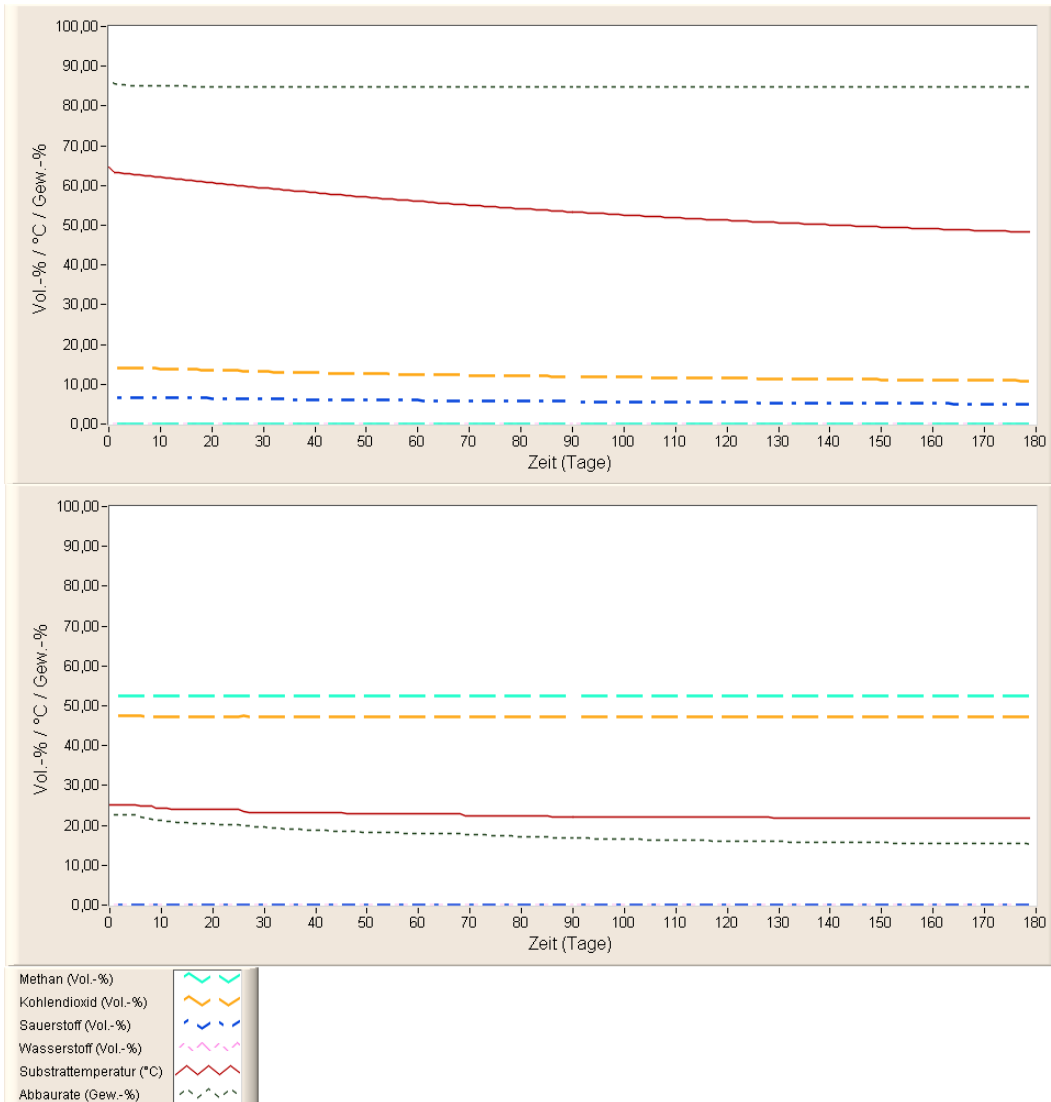


Abb. 7-3: Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung, Substrattemperatur und Abbaurate im quasi-kontinuierlichen Chargenbetrieb mit optimaler Belüftung (oben) und ohne Belüftung und Luft eintrag (unten) mit Kalkzugabe

Der quasi-kontinuierliche Betrieb unter anaeroben Milieubedingen zeigt ohne Kalkzugabe und ohne Anlaufphase in der Simulation eine Versäuerung (nicht abgebildet). Die Gaszusammensetzung besteht im Wesentlichen aus Kohlendioxid (80 Vol.-%) und Wasserstoff (20 Vol.-%), wobei die Gasproduktion gering ist (nicht abgebildet). Methan und Sauerstoff treten nicht auf und die Abbaurate von 12 Gew.-% insgesamt basiert auf dem Abbau in der sauren Phase. Die Temperatur bleibt bei etwas über 20 °C konstant.

Da im quasi-kontinuierlichen Betrieb in der Simulation nur der nicht abbaubare Anteil ausgetragen wird, können sich schwer abbaubare Substanzen über die Zeit anreichern. Das hat vor allem Einfluss auf die Abbaurate, wenn der Wert auf die gesamte Trockensubstanz bezogen wird, und auf die Temperatur.

Es konnte auch im simulierten quasi-kontinuierlichen Betrieb gezeigt werden, dass die Ergebnisse im Wesentlichen den aus der Wirklichkeit beschriebenen Zusammenhängen entsprechen (z. B. Emberger, 1993, siehe Kapitel 5). Bedeutend ist unter anaeroben Milieubedingungen vor allem der Temperatureinfluss. Die Kalkzugabe ist in der Simulation im quasi-kontinuierlichen Betrieb unter aeroben und anaeroben Bedingungen bei Bioabfall zur Erhöhung des pH-Wertes sinnvoll.

7.1.3 Mehrtägiger Chargenbetrieb in der Anlaufphase mit und ohne Belüftung

Ein weiterer Vergleich mit den gleichen Simulationsparametern des Kapitels 7.1.2 und den hier genannten geänderten Simulationsparametern, also im zehntägigen Chargenbetrieb in der Anlaufphase, zeigt eine Entwicklung mit fallenden und steigenden Kurven bei Zugabe und Entnahme von Material.

Geänderte Simulationsparameter (weitere Parameter siehe Kapitel 7.1.2)

Chargenbetrieb:	ja (in der Anlaufphase)
Dauer der Behandlung:	120 Tage
Materialzufuhr oder/und –entnahme:	automatisch durch das Programm
Materialzufuhr:	zehntägig mit Lufteintrag bei Belüftung und ohne und mit Lufteintrag ohne Belüftung
Materialentnahme:	ab dem 106. Tag zehntägig 2,5 kg FS mit Belüftung
Materialentnahme:	ab dem 10. Tag zehntägig 2,5 kg FS ohne Belüftung

Auch im mehrtägigen Chargenbetrieb in der Anlaufphase werden aerob höhere Abbauraten erzielt als anaerob. Aufgrund der früheren Materialentnahme unter anaeroben Bedingungen bleibt die Abbaurate relativ konstant bei 1 Gew.-%. Da auch bei Lufteintrag Material abgebaut wird (aerob statt anaerob, auch Kapitel 7.1.4), unterscheiden sich die anaeroben Abbauraten mit und ohne Lufteintrag durch das Material kaum. Die optimale Belüftung (siehe Kapitel 6.1.8) berücksichtigt in der Simulation den unterschiedlichen Sauerstoffbedarf, so dass die Sauerstoff- und Kohlendioxidkonzentrationen in der Abluft konstant bleiben. Die Temperatur erreicht nach einer Anfangsphase bis zu 60 °C, trotz Temperaturabfall bei Materialzugabe (Abbildung 7-4). Schwankungen entstehen durch die Berücksichtigung des be-

vorzugten Temperaturbereichs mesophiler Mikroorganismen. Bei optimaler Belüftung sind der Energieverbrauch und der Wasseraustrag durch die Belüftungsluft minimiert.

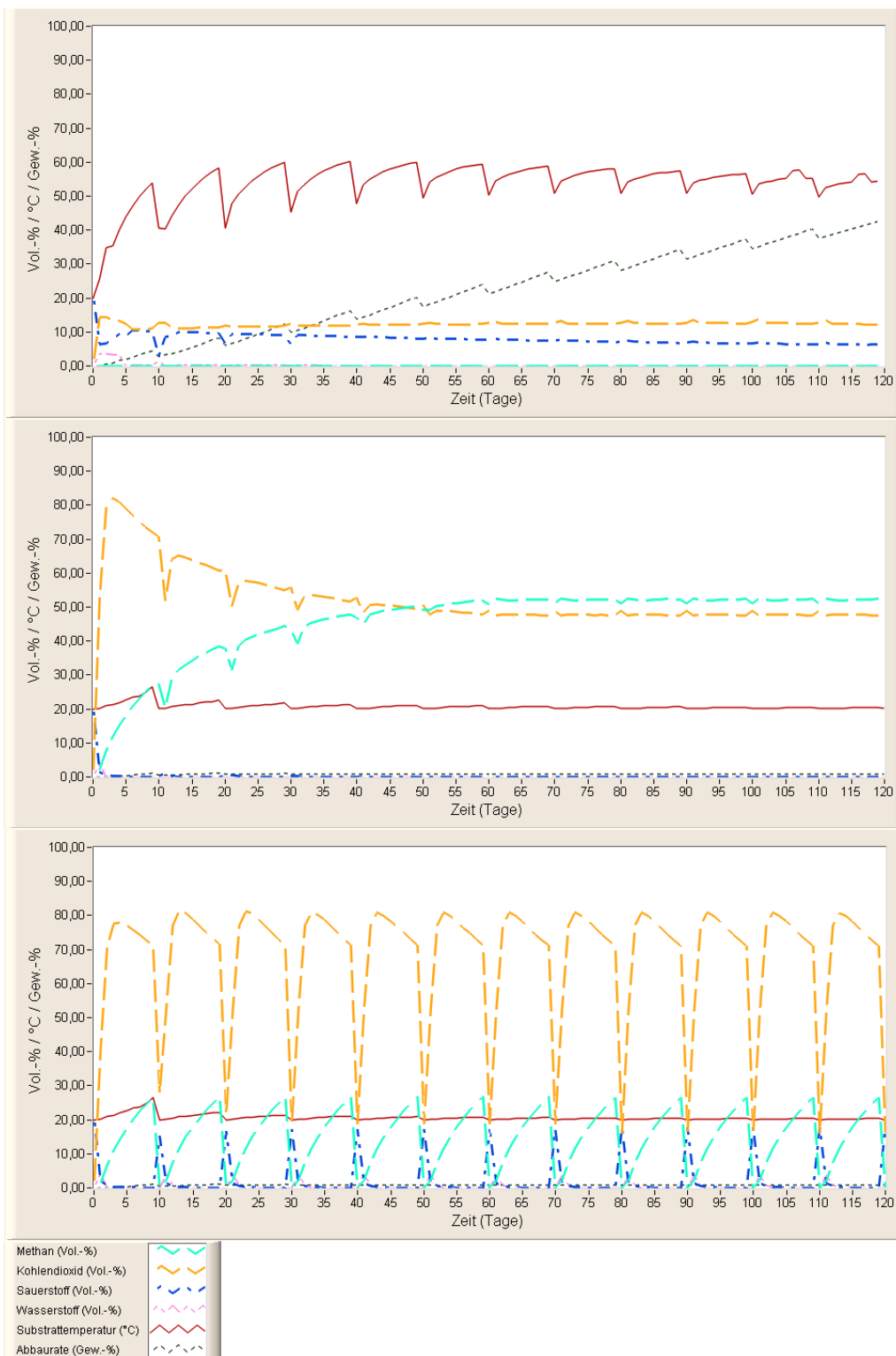


Abb. 7-4: Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung, Substrattemperatur und Abbaurrate im zehntägigen Chargenbetrieb (Anlaufphase) mit optimaler Belüftung (oben) und ohne Belüftung ohne Lufteintrag durch das Material (Mitte) und ohne Belüftung mit Lufteintrag durch das Material (unten)

Bei anaeroben mehrtägigen Chargenbetrieb wird in der Anlaufphase ohne Lufteintrag bei der Materialzugabe in der Simulation die Methanphase dauerhaft erreicht. Mit Luftzufuhr fällt der Abbau immer wieder in die aerobe und acetogene Abbauphase zurück, wodurch weniger Methan aufgrund geringerer Eduktmengen produziert wird. Wasserstoff entweicht durch die Kalkzugabe und den damit verbundenen anderen Reaktionen in beiden Fällen nicht (ohne Kalk entsteht in beiden Fällen kein Methan, aber Wasserstoff, hier nicht abgebildet). Der Temperaturverlauf zeigt kaum einen Anstieg und liegt bei etwa Außen- bzw. Materialtemperatur.

Die Abbauraten sind auf das ständig zunehmende abbaubare Substrat bezogen, wodurch die Kurve der Abbaurate in der Simulation auch sinken kann.

7.1.4 Simulationsergebnis Vergärung mit Lufteintrag

Die Vergärung setzt wegen der Sauerstoffempfindlichkeit vieler fakultativ und strikt anaerober Mikroorganismenarten theoretisch voraus, dass kein Sauerstoff über eine bestimmte Konzentration hinaus anwesend ist. In der Wirklichkeit sind die Milieubedingungen jedoch oft uneinheitlich. Verzögerungen durch Mikroorganismenhemmungen, geringen Lufteintrag oder Zwischenbelüftungen sind häufig nicht zu vermeiden und werden daher beispielhaft simuliert.

Die Verzögerung wird hierzu im Simulationsprogramm durch die Verstellung eines virtuellen Schalters eingestellt (siehe Kapitel 6.2.6).

Um die Ergebnisse besser vergleichen zu können, werden die ersten 20 Tage der Simulationen des nicht verzögerten, des verzögerten Abbaus und des durch geringen Lufteintritt verzögerten Abbaus unter anaeroben Milieubedingungen dargestellt (Abbildung 7-5, 7-6 und 7-7). Am Tag 0 wird davon ausgegangen, dass Luft mit dem Material eingetragen wird. Die weiteren Einstellungen entsprechen denen in Kapitel 7.1.1, also Batchbetrieb über 180 Tage.

Nicht verzögerter anaerober Abbau

Die Simulation des unverzögerten anaeroben Abbaus zeigt in der Anfangsphase die in der Abbildung 7-5 dargestellten Kurvenverläufe.

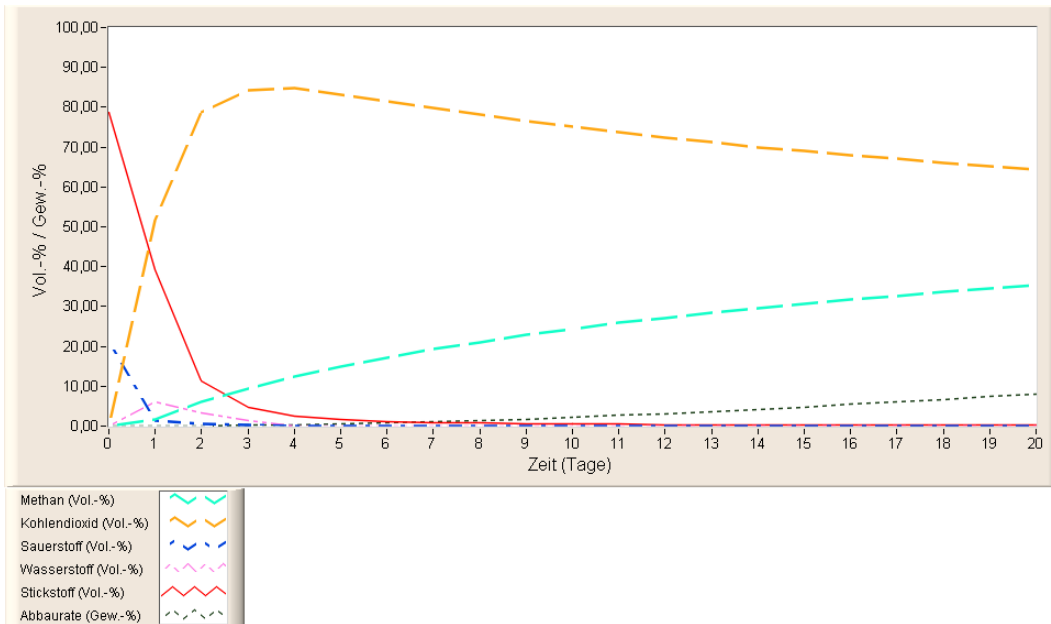


Abb. 7-5: Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung und Abbaurrate bei anaerober Betriebsweise über 180 Tage in der Anfangsphase bis zum 20. Tag, nicht verzögert

Die Simulation zeigt in der Anfangsphase die Abnahme der molekularen Luftkomponenten Sauerstoff und Stickstoff (Distickstoff). Der Sauerstoff wird schnell verbraucht und der Stickstoff entweicht langsamer, da er erst mit der Gasentwicklung von Kohlendioxid, molekularem Wasserstoff und Methan ausgetrieben wird. Der Wasserstoff wird nach einer Anfangsphase, in der sich die Methanbildner entwickeln (ca. 3 Tage, entspricht einem Durchschnitt realer Generationszeiten (z. B. Seyfried und Saake, 1986)), für die Bildung von Methan verbraucht. Die Abbaurrate ist mit 8 Gew.-% nach 20 Tagen relativ hoch.

Verzögerter anaerober Abbau

Der simulierte stark verzögerte anaerobe Abbau, in der Wirklichkeit verursacht durch ungünstige Milieubedingungen oder Substratzusammensetzungen, zeigt eine vergleichsweise geringere Abbaurrate (1 Gew.-%) nach 20 Tagen und damit eine geringere Gasproduktion (nicht abgebildet). Dadurch bleibt molekularer Stickstoff (Distickstoff) längere Zeit im Gas in höheren Konzentrationen nachweisbar und molekularer Wasserstoff und Kohlendioxid werden langsamer produziert und entweichen über einen längeren Zeitraum, da sie geringfügiger zu Methan umgesetzt werden. Sauerstoff hingegen wird gleichfalls schnell verbraucht (Abbildungen 7-6).

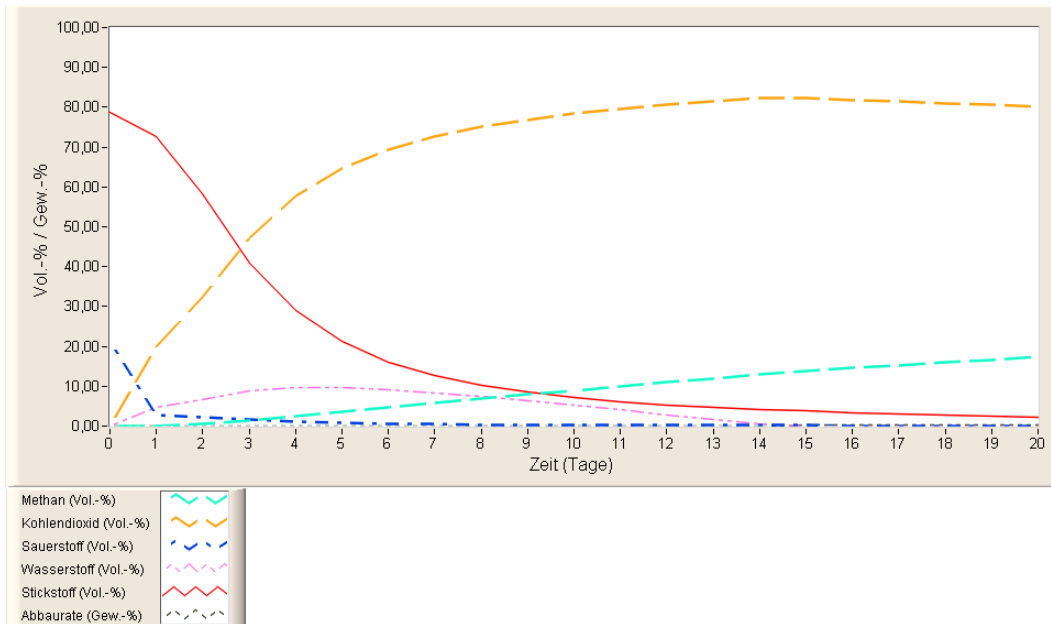


Abb. 7-6: Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung und Abbaurrate bei anaerober Betriebsweise über 180 Tage in der Anfangsphase bis zum 20. Tag, stark verzögert

Geringer Lufteintritt bei anaerober Betriebsweise

Tritt etwas Luft und somit Sauerstoff in den anaeroben Prozess ein (z. B. durch Undichtigkeiten im Reaktor, in der Simulation konstant 0,5 l/h), wird Kohlendioxid durch aerobe Abbauvorgänge vermehrt produziert (Abbildung 7-7). Methan entsteht kaum, da die entsprechenden Mikroorganismen gehemmt werden. Dadurch wird Wasserstoff nicht mehr verwertet, wodurch es in höheren Konzentrationen molekular entweicht. Die Abbaurrate ist nach 20 Tagen gering (0,3 Gew.-%) und steigt mit zunehmenden anaeroben Abbauvorgängen, erkennbar an der sinkenden molekularen Sauerstoffkonzentration, an der steigenden Kohlendioxidkonzentration und an dem vermehrten Austrag des molekularen Stickstoffs (Distickstoff).

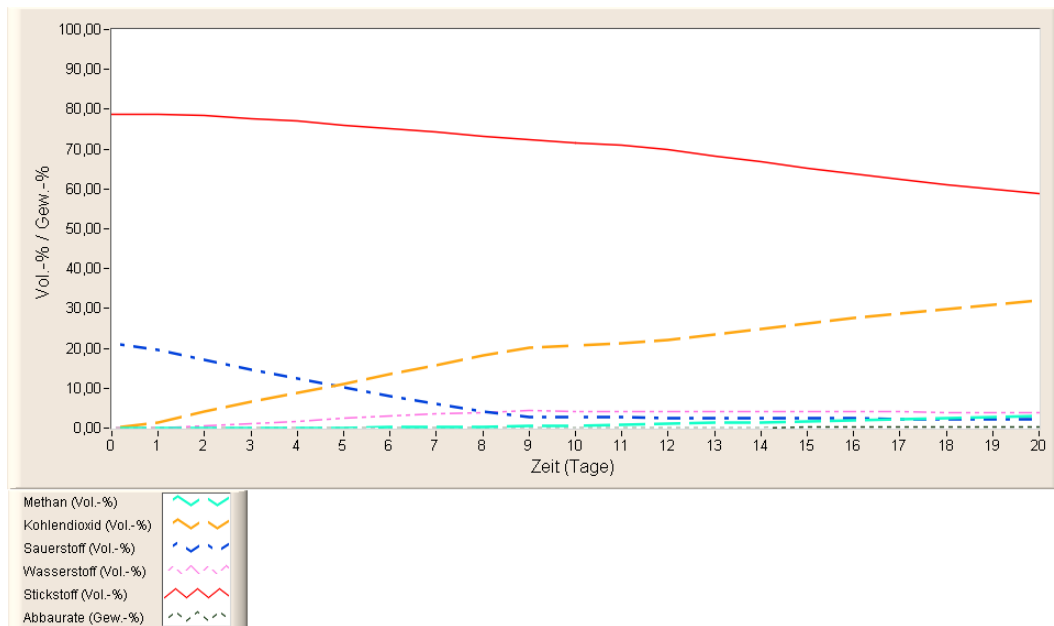


Abb. 7-7: Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung und Abbaurrate bei anaerober Betriebsweise über 180 Tage in der Anfangsphase bis zum 20. Tag mit geringem Lufteintrag (konstant 0,5 l/h), stark verzögert

Zeitweilige Belüftung bei anaerober Betriebsweise

Eine weitere Einstellung ermöglicht die Simulation einer zeitweiligen Belüftung während der anaeroben Betriebsweise. Diese Einstellung ist z. B. wichtig für die Simulation und Analyse kombinierter anaerober und aerober Verfahren zur Optimierung oder Beschleunigung von Abbauprozessen. Die Simulation erfolgte mit den Simulationsparametern des Kapitels 7.1 ohne Kalkzugabe zur Säurepufferung, aber mit Wechsel des Milieus durch optimale Belüftung (siehe Kapitel 6.1.8) vom 20. bis zum 80. Tag. Der Temperatureinfluss auf die mesophilen und thermophilen Mikroorganismen blieb unberücksichtigt (virtueller Schalter ist aktiviert).

Die Kurvenverläufe der Gaszusammensetzung, Substrattemperatur und Abbaurrate sind in der Abbildung 7-8 dargestellt.

Der begonnene anaerobe Prozess wird in dieser Simulation am 20. Tag durch optimale Belüftung, also einer Belüftung entsprechend des aeroben Mikroorganismenwachstums (siehe Kapitel 6.1.8), unterbrochen und am 80. Tag fortgesetzt. Durch die dann einsetzende (optimale) Belüftung wird in diesem Simulationsbeispiel die Kohlendioxid- und Wasserstoffproduktion reduziert und der aerobe Abbau bewirkt einen deutlichen Anstieg der Abbaurrate auf 55 Gew.-% nach 80 Tagen. Die Methanproduktion beginnt erst ab dem 95. Tag (siehe auch Abbildung 7-10). Der pH-Wert steigt ohne Kalkzugabe in der Phase der Belüftung an und fällt anschließend wieder ab (siehe Abbildung 7-17).

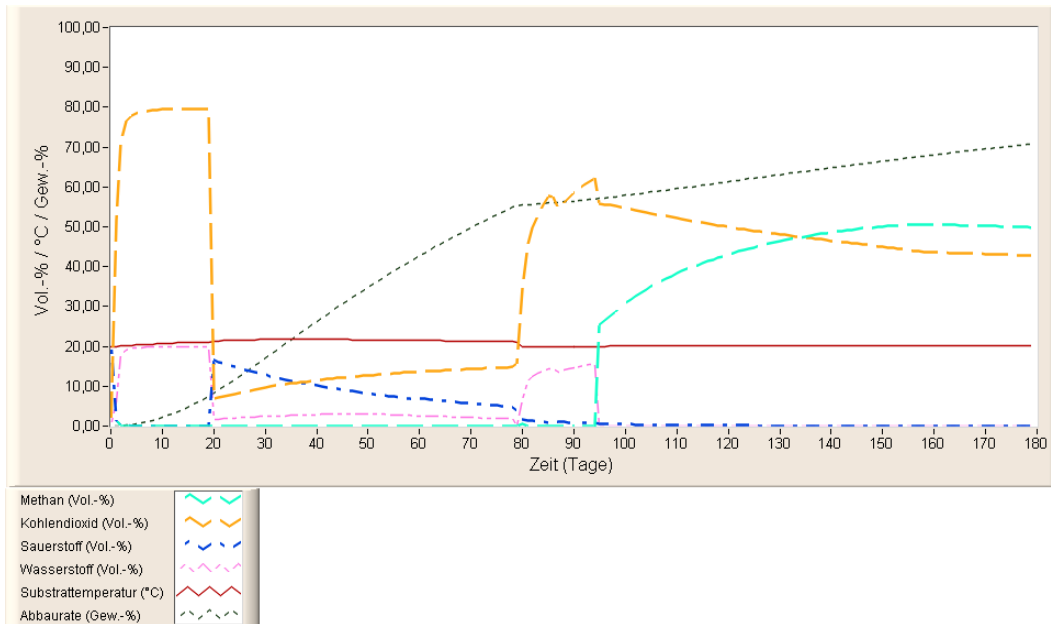


Abb. 7-8: Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung, Substrattemperatur und Abbaurrate bei anaerober Betriebsweise mit optimaler Zwischenbelüftung zwischen dem 20. und 80. Tag

Die Temperatur ist in der Phase des aeroben Abbaus mit optimaler Belüftung in diesem Beispiel nur leicht erhöht, denn durch die anaerobe Vorbehandlung wurde schon Substrat umgesetzt. Während des aeroben Abbaus steigt die Kohlendioxidkonzentration aufgrund der optimalen Belüftung entsprechend des aeroben Mikroorganismenwachstums allmählich an und die Sauerstoffkonzentration sinkt entsprechend. Nach Abbruch der Belüftung am 80. Tag beginnt der anaerobe Abbau erneut. Molekularer Wasserstoff entweicht jeweils in den ersten anaeroben Tagen, da er durch fehlende Mikroorganismen nicht verwertet wird. Sauerstoff wird nach der Zwischenbelüftung langsamer verbraucht als am Anfang, da schnell und leicht abbaubare Substanzen bereits abgebaut sind.

Weitere Simulationen zeigen, dass im gleichen Zeitraum bei ausschließlich anaerobem Abbau mit 3 kg Kalkzugabe deutlich mehr Methan produziert wird (siehe Abbildung 7-10). Auch ohne Kalkzugabe wird ohne Zwischenbelüftung mehr Methan produziert, wenn der Temperatureinfluss auf mesophile und thermophile Mikroorganismen in der Simulation unberücksichtigt bleibt. Wird der Temperatureinfluss auf mesophile und thermophile Mikroorganismen berücksichtigt, wird mit und ohne Zwischenbelüftung ohne Kalkzugabe aufgrund der Versäuerung kein Methan gebildet (nicht abgebildet).

7.1.5 Gasemissionen bei der Kompostierung und Vergärung in der Realität

Um die Simulationsergebnisse vergleichen zu können, werden im Folgenden die Verläufe der Gaszusammensetzung bei der Kompostierung und Vergärung in der Wirklichkeit, also in Laborversuchen oder entsprechenden Anlagen, beschrieben.

Gasemissionen bei der Kompostierung

Die Zusammensetzungen der Gasemissionen sind unter aeroben und anaeroben Milieubedingungen unterschiedlich (siehe auch Kapitel 5.8). Die meisten aeroben Mikroorganismen oxidieren die organische Substanz bis zu anorganischen Endprodukten wie Kohlendioxid und Wasser. Die Sauerstoffkonzentration nimmt dadurch entsprechend der Kohlendioxidproduktion in der Gasphase ab. Es gibt jedoch auch einige aerobe Mikroorganismen, die unvollständige Oxidationen durchführen. Dazu gehören die Essigsäurebildung durch Essigsäurebakterien und die Milch-, die Fumar-, Glucon-, Oxal und Citronensäurebildung durch Pilze (Schlegel, 1992). Dadurch entsteht eine Vielzahl flüchtiger organischer Stoffe, die in Abhängigkeit von den physikalischen Bedingungen wie Temperatur, Wassergehalt und Luftdurchströmung zu unterschiedlichen Zeiten und in unterschiedlichen Mengen aus dem Kompostmaterial freigesetzt werden. Neben Kohlendioxid wird, vor allem in der Intensivrotte, Ammoniak und Distickstoff aus dem Abbau stickstoffhaltiger Verbindungen in höheren Konzentrationen emittiert (z. B. Gudladt, 2001, Körner, 2009, Kehres et al., 2010). In der Nachrotte kann Stickstoff auch als Distickstoffoxid entweichen (Körner, 2009, Kehres et al., 2010).

Die Emissionen von Kohlenstoffverbindungen werden in der Literatur unterschiedlich angegeben. Die organischen Stoffe in der Abluft, ausgenommen der staubförmigen organischen Stoffe, werden als Gesamtkohlenwasserstoff (C-ges.) berechnet. Er umfasst die flüchtigen organischen Verbindungen (volatile organic compounds, VOC) ohne Methan (non methane volatile organic compounds, NMVOC) sowie den Anteil des Kohlenstoffs im Methan ($\text{CH}_4\text{-C}$). Methan ist in dem Summenparameter Gesamtkohlenwasserstoff (C-ges.) die größte organische Einzelkomponente. Die flüchtigen organischen Verbindungen ohne Methan (NMVOC) bilden den Summenparameter für organische Stoffe, die leicht verdampfen oder bereits bei geringer Temperatur als Gas vorliegen, wobei das Gas Methan (CH_4) ausgenommen wird. Der Parameter NMVOC wird aus der Differenz von Gesamtkohlenwasserstoff (C-ges.) und dem Anteil des Kohlenstoffs im Methan ($\text{CH}_4\text{-C}$) ermittelt. NMVOC-Emissionen aus der biologischen Abfallbehandlung setzen sich hauptsächlich aus folgenden Komponenten zusammen: Schwefelverbindungen (Schwefelkohlenstoff, Dimethylsulfid, Dimethyldisulfid), Stickstoffverbindungen (basische Amine), Aldehyde (Acetaldehyd, 3-Methylbutanal), Ketone (Aceton, 2-Butanon, 2-Pentanon), Alkohole (Ethanol, 2-Propanol, 2-Butanol, 2-Methylpro-

panol), Karbonsäuren (Methansäure, Ethansäure, Propansäure, Valeriansäure), Ester (Methylacetat, Ethylacetat) und Terpene (Myrcen, α -Pinen, β -Pinen, Limonen, α -Thujon). Die genannten Stoffe machen einen Anteil von mehr als 90 % der NMVOC aus (Kehres et al., 2010).

Zusammengefasst können die bei der Kompostierung von Bioabfall und Hausmüll identifizierten Stoffe in der Gasphase den folgenden Stoffklassen zugeordnet werden (Heining, 1998, Gudladt, 2001):

- niedere Fettsäuren
- niedermolekulare Alkohole, Aldehyde, Ketone, Ester
- Terpene
- schwefelhaltige Verbindungen
- stickstoffhaltige aliphatische und heterozyklische Verbindungen
- Kohlenwasserstoffe, chlorierte Kohlenwasserstoffe
- sonstige organische Fremdstoffe

Die genannten organischen Spurenstoffe (NMVOC) sind in der Gasphase in dem Simulationsmodell nicht berücksichtigt. Die in den Abbildungen 7-2 bis 7-8 dargestellten Permanentgase Stickstoff, Methan, Kohlendioxid, Sauerstoff und Wasserstoff ergeben unter Berücksichtigung der dargestellten Zusammenhänge eine gute Übereinstimmung der Gas Konzentrationsverläufe. Am deutlichsten wird dies in den Abbildungen 7-2 (oben), 7-3 (oben) und 7-8 (weitere Simulationsergebnisse hierzu siehe Kapitel 8.2 und 9.5).

Gasemissionen bei der Vergärung

Die Zusammensetzung der Gasemissionen besteht unter anaeroben Milieubedingungen vor allem aus den in Abbildung 7-2 bis 7-8 dargestellten Permanentgasen Methan und Kohlendioxid. In geringeren Mengen können auch die Permanentgase Stickstoff, Sauerstoff und Wasserstoff molekular auftreten (siehe ergänzend auch Kapitel 5.8). In der Anfangsphase nehmen in der Wirklichkeit und so auch in den Simulationen die molekularen Luftkomponenten Sauerstoff und Stickstoff ab. Der Sauerstoff wird schnell verbraucht und der Stickstoff entweicht langsam, da er mit der Gasentwicklung von Kohlendioxid, molekularem Wasserstoff und Methan ausgetrieben wird. Der Wasserstoff wird nach einer Anfangsphase, in der sich die Methanbildner entwickeln und das Milieu sich ändert, für die Bildung von Methan verbraucht. Wenn die Gasproduktion durch mikrobiologischen Abbau geringer wird bzw. zum Erliegen kommt und der Luftzutritt möglich ist, ähnelt die Gaszusammensetzung in den freien Porenvolumina der Luftzusammensetzung. Dann ist nur noch mit geringen Emissionen zu rechnen.

Die unterschiedlichen Zeitabschnitte und damit die Kurvenverläufe variieren. Sie sind abhängig von der Materialmenge, der Zusammensetzung des Substrats und von den Milieubedingungen (Kapitel 5.1). Der anaerobe mikrobiologische Abbau kann sich von Stunden bei leicht verwertbarem Substrat und optimalen Milieubedingungen bis hin zu Wochen, Monaten und Jahren bei schwer verwertbarem Substrat bzw. ungünstigen Milieubedingungen erstrecken (z. B. Spendlin, 1991).

Gaszusammensetzung unter anaeroben Milieubedingungen im Batchbetrieb

In einem frisch befüllten Reaktor adaptieren die Mikroorganismen in einer mehr oder weniger langen Anlaufphase an die vorliegenden anaeroben Milieubedingungen (die Vergärungsanlage in gleicher Weise wie eine Mülldeponie, siehe Abbildung 7-9). Diese Phase geht in eine exponentielle Wachstumsphase über, die durch eine gleichbleibende maximale Wachstumsgeschwindigkeit der Organismen gekennzeichnet ist. Falls keine Hemmungen auftreten und kein neues Substrat zugegeben wird, geht die Kultur nach Verbrauch der Nährstoffe in die Verzögerungsphase über, an die sich die Absterbephase anschließt (Braun, 1982).

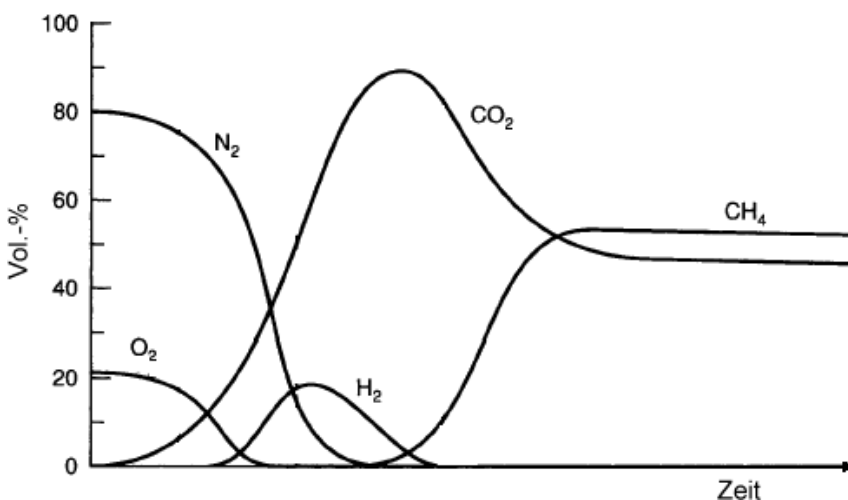


Abb. 7-9: Entwicklung der Gaszusammensetzung bis zur Absterbephase in einer Mülldeponie nach Farquhar und Rovers (1973) als Beispiel für den Vergärungsverlauf

Der dargestellte Verlauf der Gaszusammensetzung in der Abbildung 7-9 ist bis zur stabilen Methanphase übertragbar auf Vergärungsanlagen im Batchbetrieb und in der Literatur vielfach zu finden (z. B. Braun, 1982, Spendlin, 1991, Thomé-Kozmiensky, 1995). Die Zeitdauer der einzelnen Phasen ist vor allem von der Materialmenge abhängig. Der Verlauf der Gaszusammensetzung in den unterschiedlichen Phasen ist daher in einer Mülldeponie besonders deutlich.

Der Vergleich mit den Simulationsergebnissen ergibt unter Berücksichtigung der dargestellten Zusammenhänge eine gute Übereinstimmung der Gaskonzentrationsverläufe. Am deutlichsten wird dies in den Abbildungen 7-2 (unten) und 7-6.

7.2 Simulationsergebnisse einzelner Parameter

Im Folgenden werden die Simulationsergebnisse einzelner Parameter dargestellt und mit Werten aus der Wirklichkeit verglichen. Die in Kapitel 7.1 aufgeführten Eingabewerte (Fallbeispiel) wurden grundsätzlich beibehalten. Änderungen z. B. für Sensitivitätsanalysen werden jeweils angegeben.

7.2.1 Simulationsergebnisse zur Gasentstehung

Das Simulationsprogramm bietet die Möglichkeit zu testen, welche Gase und Gasmengen unter welchen Bedingungen entstehen. Die Gasentstehung wird im Simulationsprogramm im prozentualen Vergleich in Volumenprozent und als Volumen in Kubikmetern pro Zeiteinheit dargestellt. Diese können alternativ auf 0 °C bzw. 20 °C und 1013,25 mbar normiert angezeigt werden.

In der Abbildung 7-10 sind die Kohlendioxid- und Methanproduktionen in Kubikmetern pro Zeiteinheit unter unterschiedlichen Milieubedingungen vergleichend dargestellt. Die Werte sind auf 20 °C und 1013,25 mbar normiert.

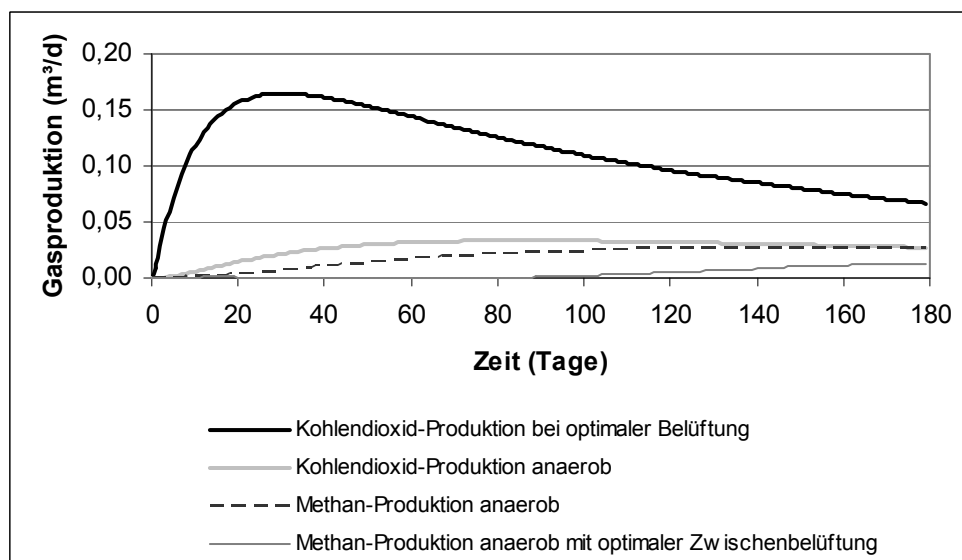


Abb. 7-10: Simulationsergebnis: Vergleich der Kohlendioxidproduktion bei aerober Betriebsweise mit optimaler Belüftung und anaerober Betriebsweise und der Methanproduktion bei anaerober Betriebsweise und mit optimaler Zwischenbelüftung

Bei optimaler Belüftung (siehe Kapitel 6.1.8) werden aus 100 kg FS Bioabfall mit 3 kg Kalk 20 m^3 Kohlendioxid, $0,007 \text{ m}^3$ Wasserstoff und $4,3 \text{ m}^3$ Ammoniak insgesamt produziert. Anaerob entsteht unter den aufgeführten Bedingungen $3,4 \text{ m}^3$ Methan, $0,014 \text{ m}^3$ Schwefelwasserstoff und $0,0004 \text{ m}^3$ Ammoniak. Mit Zwischenbelüftung (Wechsel des Milieus durch optimale Belüftung vom 20. Tag bis zum 80. Tag, siehe Kapitel 7.1.4) sind es nur $0,7 \text{ m}^3$ Methan. Dafür werden $5,4 \text{ m}^3$ Kohlendioxid, $0,32 \text{ m}^3$ Wasserstoff, $0,004 \text{ m}^3$ Ammoniak und $0,007 \text{ m}^3$ Schwefelwasserstoff produziert.

Die Simulationsergebnisse sind gemessenen Werten aus der Wirklichkeit in der Größenordnung und im Mengenverhältnis ähnlich, wie die noch kommenden Ausführungen zeigen werden.

Simulationsvergleich mit gemessenen Kohlendioxidproduktionen

Kaiser und Soyez (1990) führten Laborversuche zum aeroben mikrobiologischen Abbau von hemicellulose- und cellulosehaltigen Abfällen durch. Während eines 17-tägigen Rotteprozesses wurden Messungen an 90 kg FS Modellsubstrat (Weizenstroh mit 65 Gew.-% Wassergehalt) durchgeführt. Durch den fast vollständigen aeroben Abbau des Hemicellulose- und Celluloseanteils wurden insgesamt etwa $17,3 \text{ kg}$ Kohlendioxid produziert.

Im Simulationsmodell werden vergleichsweise bei gleicher Substratmenge und gleichem Wassergehalt aus Stroh nach etwa 160 Tagen bei einer Abbaurate von 77 Gew.-% etwa 13 kg Kohlendioxid produziert. Bei höheren Abbauraten könnten also 17 kg Kohlendioxid erreicht werden. Kürzere Abbauezeiten sind in der Simulation mit geringeren Abbauraten verbunden. Innerhalb von 17 Tagen wird aber im Vergleich in diesem Fall kein fast vollständiger aerober Abbau erreicht.

7.2.2 Simulationsergebnisse zur Wasserstoffproduktion

Das Simulationsprogramm bietet unter anderem die Möglichkeit zu testen, welche Gase unter welchen Bedingungen und in welchen Mengen entstehen. Hier wird beispielhaft Wasserstoff dargestellt (Abbildung 7-11), da es neben Methan energiewirtschaftlich interessant ist. Die Simulation erfolgte mit den in Kapitel 7.1 und den hier genannten geänderten Simulationsparametern. Die Abbaurate betrug jeweils etwa 35 Gew.-%.

Geänderte Simulationsparameter (weitere Parameter siehe Kapitel 7.1)

Belüftung: aerobe Betriebsweise (0,005 m³/h),
anaerobe Betriebsweise mit Zwischenbelüftung zwischen dem 20. und 80. Tag (0,05 m³/h)
und anaerobe Betriebsweise ohne Belüftung

Isolation: ja

Zuschlagsstoffe: 3 kg Kalk

Die Kurvenverläufe zeigen, dass bei konstanter geringer Belüftung mit simulierter aerober Mikroorganismenvergesellschaftung gleichmäßig molekularer Wasserstoff emittiert wird (Abbildung 7-11). Unter anaeroben simulierten Bedingungen wird nur anfänglich bei gleicher Abbaurrate etwas Wasserstoff freigesetzt (hier nicht dargestellt), denn der Wasserstoff wird unter anaeroben Bedingungen für die Methanbildung verbraucht. Eine Zwischenbelüftung zwischen dem 20. und 80. Tag unter anaeroben Milieubedingungen zeigt in der Simulation eine vergleichsweise höhere molekulare Wasserstoffemission in der Zeit der Belüftung. Diese ist mit der Störung der Methanbildung in diesem Zeitabschnitt zu erklären. Nach der Belüftung endet die Emission von Wasserstoff erwartungsgemäß durch den Verbrauch von Wasserstoff für die Methanbildung durch die Methanbildner.

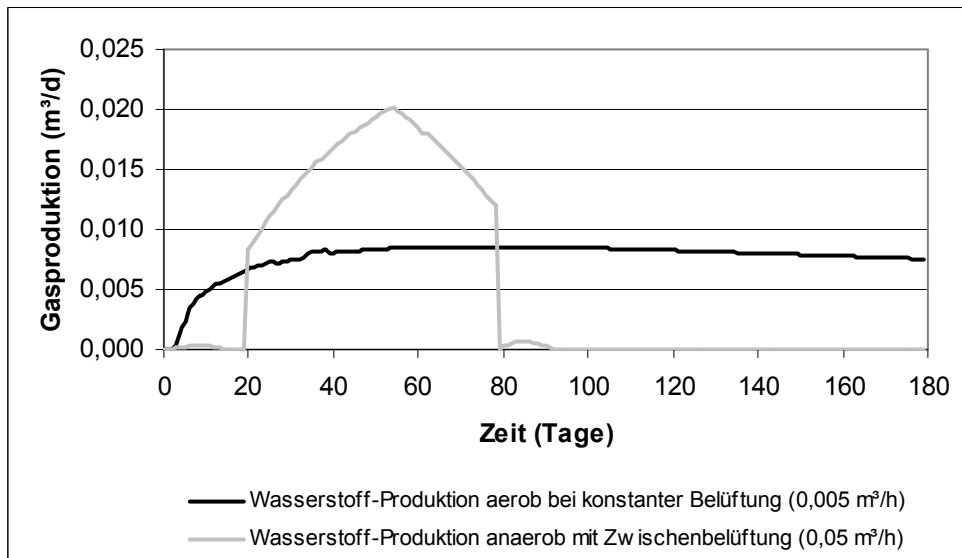


Abb. 7-11: Simulationsergebnis: Vergleich der molekularen Wasserstoffproduktion bei aerober Betriebsweise mit konstanter Belüftung von 0,005 m³/h und anaerober Betriebsweise mit konstanter Zwischenbelüftung von 0,05 m³/h

Die insgesamt entweichende (kumulative) Wasserstoffmenge beträgt so aerob 1,38 m³ und mit Zwischenbelüftung 0,94 m³. Die Werte sind auf 20 °C und 1013,25 mbar normiert.

Eine Optimierung der Wasserstoffproduktion könnte demnach durch geringe Belüftung und damit Behinderung der Entstehung von Methanbildnern erreicht werden. Genauere Prozessoptimierungen sind durch Änderungen der Eingabewerte ermittelbar. Es muss je-

doch beachtet werden, dass auch in der Simulation ein stabiler Prozessverlauf gefunden werden sollte, damit eine Übertragbarkeit in die Wirklichkeit denkbar ist.

7.2.3 Simulationsergebnisse zu Sauerstoffverbrauch und Gasbildung

In einem aktiv belüfteten Rotteraktor ermittelte Müsken (1989) im Sickerwasser einen biologischen Sauerstoffbedarf in fünf Tagen (BSB_5) von 3300 bis 7050 mg/l und einen chemischen Sauerstoffbedarf (CSB) von 6200 bis 15100 mg/l mit einem pH-Wert von 7,1 bis 8,1.

Das entwickelte Simulationsprogramm kann den CSB nicht ermitteln, jedoch in Annäherung den BSB_5 . Angegeben wird der Gesamtsauerstoffverbrauch für die vorgegebenen Reaktionen (Kapitel 6.1.3). Die durch die Simulation erhaltenen Werte sind mit veröffentlichten Werten aus der Wirklichkeit vergleichbar, wie die tabellarischen Darstellungen in Kapitel 7.2.3.1 zeigen.

Charakteristik verschiedener Abfälle

Es werden fünf Abfälle (100 kg FS) mit den in Kapitel 7.1 genannten Parametern ohne simulierter Kalkzugabe verglichen, die wie folgt (Tabelle 7-1) hinsichtlich des Organikgehalts (Gew.-% TS), des organischen Kohlenstoffgehalts (TOC) (kg oTS), des C/N-Verhältnisses und des pH-Wertes vor Abbaubeginn charakterisiert sind (siehe ergänzend Tabelle 6-6):

Tab. 7-1: Simulationsergebnis: Fünf Abfallarten (100 kg FS) und deren Organikgehalt, TOC, C/N-Verhältnis und pH-Wert vor Abbaubeginn

	Organikgehalt (Gew.-% TS)	TOC (kg oTS)	C/N	pH-Wert
Klärschlamm	100	0,8	20	6,0
Grünabfälle	100	4,6	12	4,7
Hausmüll	30	6,7	37	4,7
Org. Hausmüll	90	10,8	42	4,6
Bioabfall	89	12,2	14	4,4

Der Organikgehalt und der organische Kohlenstoffgehalt ermöglichen eine Beurteilung der zu erreichenden Biogasproduktion und des Emissionspotentials des Materials. Erwartungsgemäß haben der organische Anteil im Hausmüll und Bioabfall einen höheren organischen Kohlenstoffgehalt als Klärschlamm, Grünabfälle und Hausmüll. Der Organikge-

halt gibt Aufschluss über den Gehalt an Fremdstoffen und Mineralien, der in Klärschlamm und Grünabfall nicht und im Hausmüll viel vorhanden ist und im organischen Anteil des Hausmülls und im Bioabfall deutlich zu finden ist.

Für die Kompostierung wird für viele Bioabfälle ein C/N-Verhältnis zwischen 20 und 30 als optimal angegeben (Golueke, 1977). Bei der Vergärung liegt das C/N-Optimum zwischen 10 und 30 (Faulstich et al., 1995) bzw. 16 und 45 (Glauser et al., 1987) (siehe Kapitel 5.6).

Auf Grundlage der Simulationsergebnisse der Tabelle 7-1 müsste demnach bezüglich des C/N-Verhältnisses Klärschlamm gut zu kompostieren sein. Grünabfälle, Hausmüll, organischer Hausmüll und Bioabfall könnten ohne Substratzugaben zur Einstellung des C/N-Verhältnisses vergärt werden. Der pH-Wert müsste hierzu jedoch z. B. durch Zugabe von Kalk angehoben werden. Dies entspricht den allgemeinen Erfahrungen, wobei die individuelle Schwankungsbreite von Faktoren wie der örtlichen Zusammensetzung und Alter des Abfalls sowie von der Jahreszeit abhängig ist (z. B. Krogmann, 1994, Körner et al., 1999).

7.2.3.1 Simulationsergebnisse zu Gasbildungspotential und Atmungsaktivität

Im Folgenden werden Simulationsergebnisse bezüglich des Gasbildungspotentials (GP_{21}) unter anaeroben Milieubedingungen und der Atmungsaktivität (AT_4) unter aeroben Milieubedingungen (siehe Kapitel 5.8) für fünf Abfallarten (Klärschlamm, Grünabfälle, Hausmüll, organischer Anteil im Hausmüll und Bioabfall) mit den in Kapitel 7.1 genannten Parametern ohne Kalkzugabe in jeweils 100 kg FS verglichen.

Eine Gegenüberstellung in Tabelle 7-2 zeigt für die fünf Abfallarten (Tabelle 7-1) in jeweils 100 kg FS und einer Gesamtabbauzeit von 180 Tagen den Sauerstoffverbrauch bezogen auf den Wassergehalt am dritten Tag und den Sauerstoffverbrauch in den ersten vier Tagen unter aeroben Bedingungen bei optimaler Belüftung (siehe Kapitel 6.1.8) und das Gasbildungspotential der ersten einundzwanzig Tage unter anaeroben Bedingungen (Tabelle 7-2, Spalte 1). Die Wassermenge und die Menge organischer Trockensubstanz sind jeweils auf den genannten Zeitpunkt bezogen, bis auf den Anfang. Die Atmungsaktivität bezieht sich am Anfang auf den Wert des 4. Tages und das Gasbildungspotential auf den Wert des 21. Tages.

Eine weitere vergleichende Gegenüberstellung zeigt für diese fünf Abfallarten bei optimaler Belüftung den Sauerstoffverbrauch bezogen auf den Wassergehalt am 90. Tag (Mitte des Prozesses), den Sauerstoffverbrauch an den vier Tagen vor dem 90. Tag und das Gasbildungspotential der einundzwanzig Tage vor dem 90. Tag unter anaeroben Bedingungen (Tabelle 7-2, Spalte 2) und die gleichen Parameter bezogen auf den letzten (180.) Tag (Ta-

belle 7-2, Spalte 3). Ergänzend sind jeweils die zugehörigen maximierten Abbauraten und die pH-Werte angegeben.

Tab. 7-2: Simulationsergebnis: Sauerstoffverbrauch und Gasbildung von fünf Abfallarten in 100 kg FS am Anfang, nach 90 Tagen und nach 180 Tagen mit den pH-Werten und den zugehörigen maximierten Abbauraten

	O₂ (BSB₅) (mg/l H ₂ O) 0./90./180. Tag	RA₄ (mg O ₂ /g oTS) 0./90./180. Tag	maximierte aerobe Abbauraten (Gew.-% ab- baubarer TS)	GP₂₁ (l/kg oTS) 0./90./180. Tag	pH-Wert 3. / 90. / 180. Tag anaer. (aer.)	maximierte anaerobe Abbauraten (Gew.-% ab- baubarer TS)
Klärschlamm	0 / 209 / 104	0,9 / 1,7 / 0,8	97	21,8 / 6,5 / 2,6	5,5 / 6,7 / 6,7 (7,0)	97
Grünabfälle	110 / 1726 / 443	0,7 / 5,2 / 1,4	100	6,2 / 18,9 / 5,1	4,7 / 6,6 / 6,6 (7,1)	74
Hausmüll	47 / 1293 / 783	1,2 / 21 / 25,0	81	44,4 / 146,3 / 46,9	4,8 / 6,7 / 6,7 (6,8)	71
Org. Hausm.	38 / 1570 / 1109	0,3 / 5,5 / 4,5	61	23,0 / 53,6 / 13,8	4,8 / 6,7 / 6,7 (6,8)	71
Bioabfall	171 / 4714 / 2687	1,4 / 16,1 / 11,3	80	19,4 / 71,8 / 21,6	4,7 / 6,6 / 6,6 (7,2)	74

Die Werte sind auf 20 °C und 1013,25 mbar normiert.

Gut zu erkennen ist die Abbauverzögerung am Anfang des Abbauprozesses. Unter anaeroben Milieubedingungen wird mit steigendem pH-Wert anfangs mehr Gas produziert. Der Hausmüll emittiert anaerob deutlich das meiste Gas bezogen auf die organische Trockensubstanz. Das Gasbildungspotential (GP₂₁) liegt zwischen 2,6 und 146,3 l/kg oTS. Der Sauerstoffverbrauch, vergleichbar mit dem BSB₅, variiert zwischen 0 und 4714 mg/l H₂O. Die Atmungsaktivität (RA₄) ergibt Werte zwischen 0,3 und 25,0 mg O₂/g oTS. Hausmüll behält bis zum 180. Tag eine hohe Atmungsaktivität, was auf einen späten aeroben Abbau der schwer abbaubaren Substrate hinweist (siehe auch Kapitel 9.5). Die Simulation zeigt auch, dass mit zunehmendem Abbau der pH-Wert steigt. Charakteristisch ist, dass Klärschlamm kaum biologische Aktivität aufweist, Hausmüll anaerob am meisten Gas erzeugt und Sauerstoff verbraucht (deutlich höhere Atmungsaktivität bei Bezug auf die organische Trockensubstanz) und organischer Hausmüll und Bioabfall bis zum Schluss hohe BSB₅-Werte behalten, ohne dass die Atmungsaktivität entsprechend hoch ist. Zu begründen ist dies mit den unterschiedlichen und sich in der Menge verändernden Bezügen auf den Wassergehalt bzw. auf die organische Trockensubstanz und der verschiedenen Zusammensetzung des abbaubaren Materials. Die Relation der Werte zwischen den Abfallarten ist zudem von den Abbauraten abhängig. Auch gibt es Unterschiede in der Abbaubarkeit des Organikanteils in den Abfallarten. Das Simulationsprogramm berücksichtigt diese Einflüsse, so dass bei der Interpretation der Werte Fehler vermieden werden können.

Zum Vergleich der Endwerte des Gasbildungspotentials und der Atmungsaktivität können die Grenzwerte der Abfallablagerungsverordnung (AbfAbIV, 2006) (siehe auch Kapitel 5.8) genannt werden. So sind die Zuordnungswerte für die Gasbildungsrate im Gärtest (GP₂₁ bzw. GB₂₁) für mechanisch biologisch behandelte Abfälle gemäß Anhang 2 der Abfallablagerungsverordnung (AbfAbIV, 2006) ≤ 20 l/kg TS (als Atmungsaktivität (RA₄ bzw. AT₄): ≤ 5 mg O₂/g TS) und die Zielwerte zum Deponienachsorgeende ≤ 10 l/kg TS (als Atmungsaktivität (RA₄ bzw. AT₄): $\leq 2,5$ mg O₂/g TS). Auf Grundlage der Simulationswerte könnten demnach nach 180 Tagen Behandlungszeit Klärschlamm und Grünabfälle als abgebaut angesehen werden. Der organische Hausmüll kommt zusammen mit dem Klärschlamm und den Grünabfällen unter die Grenzwerte für mechanisch biologisch behandelte Abfälle.

Zu beachten ist bei der Beurteilung im Wesentlichen die Abbaurate, die durch das Gasbildungspotential und durch die Atmungsaktivität nicht ausreichend dargestellt werden kann. Auch der Sauerstoffverbrauch, bezogen auf die Wassermenge, charakterisiert die Abbaurate nicht.

7.2.3.2 Simulationsergebnisse zur Methanproduktion

Zur Feststellung des Methanbildungspotentials von den fünf Abfallarten (Tabelle 7-1) mit jeweils 100 kg FS und den in Kapitel 7.1 genannten Parametern und 3 kg Kalkzugabe wurden die Werte der Potentialbestimmung nach Hartmann (1983) (siehe Kapitel 6.3.6) mit den in der Simulation erzielten maximalen Methanbildungen verglichen (Tabelle 7-3). Hierbei werden Verzögerungen durch Hemmungen der Mikroorganismen nicht berücksichtigt, im Gegensatz zu den in Kapitel 9.3 durchgeführten Simulationen. Die maximierten Abbauraten der Simulationen werden auf die abbaubare Trockensubstanz bezogen angegeben. Zu beachten ist, dass die simulierten Werte aufgrund der Zeitdiskretion nicht linear sind und daher Umrechnungen auf 100 Gew.-% nicht möglich sind. Auch sind diese Werte theoretisch und in dieser Weise nicht auf die Realität übertragbar.

Tab. 7-3: Simulationsergebnis: Methanbildung nach Hartmann (1983) und höchste Methanbildung von fünf Abfallarten aus 100 kg FS bei maximierter Abbaurrate

	Σ Methan ^{*)} (m ³) (aus 100 kg FS)	Σ Methan (m ³) (aus 100 kg FS)	Methan (l/kg oTS)	maximierte anaerobe Abbaurrate (Gew.-% ab- baubarer TS)
Klärschlamm	0,9	0,7	35,3	97
Grünabfälle	4,9	4,1	67,9	97
Hausmüll	6,8	5,8	320,1	96
Org. Hausmüll	10,9	9,3	172,2	96
Bioabfall	13,4	10,2	189,8	97

Die Werte sind auf 20 °C und 1013,25 mbar normiert. *): Bestimmung nach Hartmann (1983) siehe Kapitel 6.3.6

Das meiste Methan wird in der Simulation von Bioabfall gefolgt von organischem Hausmüll produziert (10,2 m³ bzw. 9,3 m³ insgesamt). Die Werte liegen jeweils etwas unterhalb der nach Hartmann (1983) bestimmten Methanbildungspotentiale, aber die Relation der Werte zwischen den Abfallarten ist gleich. Der einzige Grund für die etwas geringeren Methanbildungspotentiale in der Simulation kann die Abbaurrate sein, die unter 100 Gew.-% der abbaubaren Trockensubstanz liegt. Bei ähnlicher Abbaurrate sind die Verhältnisse der Gasbildung zueinander aber identisch. Bezogen auf die gesamte organische Trockensubstanz produziert Hausmüll in dieser Simulation mit maximierter Abbaurrate am meisten Methan (320,1 l/kg oTS), gefolgt von Bioabfall und organischem Hausmüll (189,8 bzw. 172,2 l/kg oTS). Erkennbar ist hier deutlich der Einfluss der Bezugsgröße. Klärschlamm eignet sich auf Grundlage der Simulationsergebnisse zur Methangewinnung am wenigsten, gefolgt von den Grünabfällen. Der Bezug auf die gesamte organische Trockensubstanz ergibt eine hohe Methanproduktion für Hausmüll, jedoch nur wegen des geringen Gehalts an Organik verbunden mit einem hohen Anteil abbaubaren Substrats. In der Praxis ist Hausmüll zur Methangewinnung wegen der enthaltenen Schadstoffe und aussortierter organischer Inhaltsstoffe in der Regel ungeeignet (Kapitel 4).

7.2.4 Simulationsergebnisse zum Wassergehalt

Werden in dem simulierten Fallbeispiel (siehe Kapitel 7.1) ohne Kalkzugabe im Programm 80 kg Wasser zu Beginn auf das Material (100 kg FS) gegeben, entstehen etwa 41 kg Sickerwasser und 1,6 kg Kondensat bei optimaler Belüftung (siehe Kapitel 6.1.8) und einer Abbaurrate von 77 Gew.-%. Ohne Wasserzugabe und bei gleicher Abbaurrate entstehen etwa

6 kg Kondensat. Der Grund hierfür liegt in der insgesamt um etwa 20 °C niedrigeren Temperatur bei höherem Wassergehalt. Bei gleicher Wasserzugabe ohne Belüftung und einer Abbaurrate von 66 Gew.-% entstehen etwa 37 kg Sickerwasser und 0,01 kg Kondensat. Ohne Wasserzugabe und ohne Belüftung entsteht kein Kondensat und kein Sickerwasser, da das Material dafür mit einem anfänglichen Wassergehalt von 40 Gew.-% zu trocken ist. Zudem ist die Materialtemperatur kaum erhöht.

Zum Vergleich seien hier Werte aus der Wirklichkeit genannt. Für eine unbelüftete Mietenrotte von Bioabfall werden für 100 kg Feuchtsubstanz Sickerwassermengen zwischen 0 und 2,5 l (0 - 25 l/Mg FS) genannt (Fricke et al., 1989). Substrate mit einem hohen Anteil an leicht abbaubaren Komponenten, die zudem besonders feucht sind, neigen verstärkt zur Sickerwasserbildung, und zwar in Laborversuchen bis zu 425 l/Mg Abfallfrischsubstanz (Körner, 2009).

Demnach ist die Größenordnung der in der Simulation erzielten Werte mit der Wirklichkeit vergleichbar. Für einen genauen Vergleich müssten aber z. B. der Wassergehalt und die Material- und Umgebungstemperatur in der Realität bekannt sein.

In der Abbildung 7-12 sind weitere Simulationen mit Wasserzugabe dargestellt. Werden 100 l Wasser am Anfang des Prozesses bei optimaler Belüftung (siehe Kapitel 6.1.8) zugegeben, wird der maximale Wassergehalt nicht erreicht, denn das Wasser entweicht als Sickerwasser. Aufgrund des relativ geringen Wassergehalts am Anfang (40 Gew.-%) kann das mit zum Teil trockenem Material und dem Druck aufgrund der einmaligen Wasserzugabe erklärt und mit der Wirklichkeit verglichen werden. Wird nur 1 l Wasserzugabe täglich simuliert, steigt der Wassergehalt bis zum 63. Tag auf 65 Gew.-% und ab dann sehr viel langsamer aber stetig. Bei einer Wasserzugabe von 100 l täglich wird der Prozess anaerob und der Wassergehalt geht in zwei Tagen auf 80 Gew.-% hoch. Anschließend steigt der Wassergehalt auch hier langsam weiter. Mit der Einstellung „automatische Wasserzugabe“ (automatische Wassergehaltseinstellung auf 50 Gew.-%, Kapitel 6.2.10) erhöht sich der Wassergehalt bei optimaler Belüftung bis auf 56 Gew.-% nach 180 Tagen.

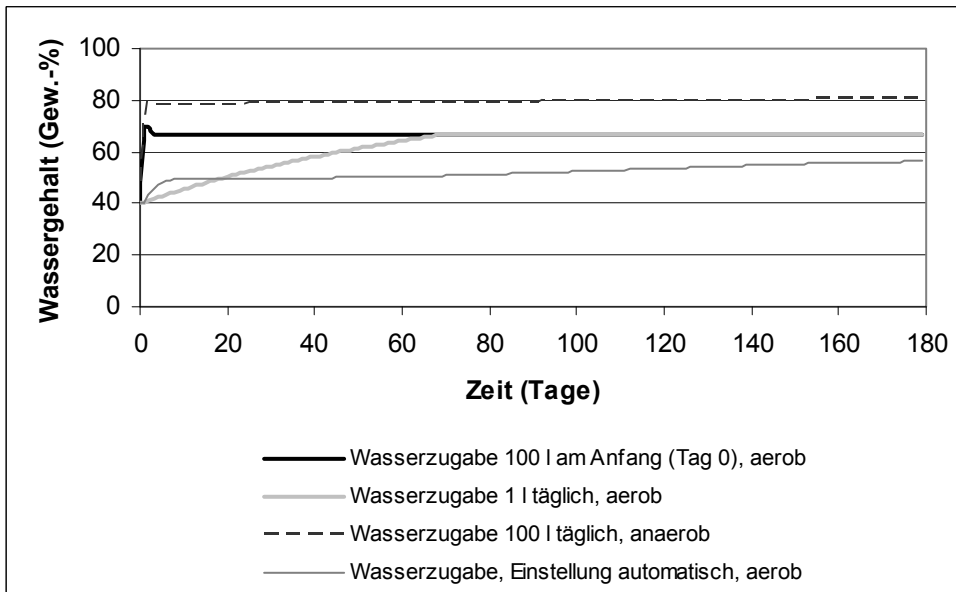


Abb. 7-12: Simulationsergebnis: Vergleich der Wassergehaltsänderungen bei 100 l Zugabe am Anfang und 1 l täglich bei aerober Betriebsweise, 100 l täglich bei anaerober Betriebsweise und mit programmierter automatischer Wassergehaltseinstellung auf 50 Gew.-% bei aerober Betriebsweise

Es ist zusammenfassend festzustellen, dass ab einem Wassergehalt von 80 Gew.-% die Wasserhaltekapazität erreicht wird. Aerobe Abbauprozesse werden dann anaerob. Ein höherer Wassergehalt ist auch bei erheblicher Wasserzugabe in der Simulation nur kurzfristig erreichbar. Auch dargestellt ist die automatische Wasserzugabe von dem Programm zur Wassergehaltseinstellung auf 50 Gew.-%. Ist nicht genug Wasser im Material oder ist zu befürchten, dass das Material über die Abbauzeit hin zu trocken wird, kann über die Einstellung „auto.“ eine Wasserzugabe simuliert werden, die zu einem Wassergehalt von etwa 50 Gew.-% führt (Kapitel 6.2.10). Wird nur wenig Wasser täglich zugegeben oder am Anfang einmalig sehr viel, wird die Wasserhaltekapazität nicht erreicht, da das Wasser vorher als Sickerwasser das Material verlässt.

Die Simulationsergebnisse zeigen, dass die Erfahrungen aus der Praxis der biologischen Abfallbehandlung (Kapitel 5.5) in der Simulation wiedergegeben werden können.

Metabolisches Wasser

Finstein et al. (1986) geben einen Literaturüberblick über abgeschätzte Daten zum metabolischen Wasser. Die Werte liegen im Bereich zwischen 0,55 kg (Cellulose) und 0,8 kg durch mikrobiologischen Abbau produziertes Wasser je Kilogramm abgebauter organischer Trockensubstanz.

In der Simulation werden zum Vergleich Werte bis 0,4 kg je Kilogramm abgebauter organischer Trockensubstanz erreicht, jedoch bei Abbauraten unter 100 Gew.-%, so dass die theoretisch berechneten metabolischen Wassermengen des Simulationsmodells mit den Schätzungen sehr gut vergleichbar sind.

7.2.5 Simulationsergebnisse zum Temperaturverlauf

Der simulierte Temperaturverlauf wird beispielhaft für die aerobe und anaerobe Betriebsweise (Kompostierung und Vergärung) des in Kapitel 7.1 genannten Fallbeispiels ohne Kalkzugabe in Abbildung 7-13 dargestellt. Die simulierte Kompostierung erfolgte bei optimaler Belüftung mit einer Abbaurate von 77 Gew.-% und die Vergärung mit einer Abbaurate von 66 Gew.-%.

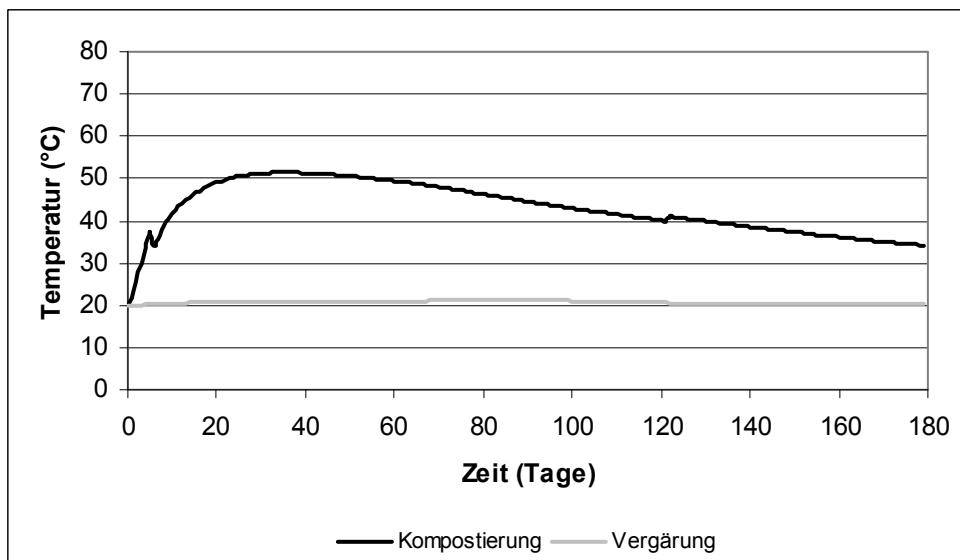


Abb. 7-13: Simulationsergebnis: Vergleich der Temperaturverläufe bei aerober und anaerober Betriebsweise Kompostierung und Vergärung

Während bei der Kompostierung in der Simulation innerhalb von etwa drei Wochen Temperaturen von bis zu 50 °C entstehen, werden bei der Vergärung trotz Isolation nur etwa 21 °C erreicht. Das liegt an der anfänglichen Versäuerung und der damit verbundenen späteren Methanbildung. Bei aerober Betriebsweise (Kompostierung) wird in diesem Fall keine Hygienisierung erreicht. Der kurze Temperaturabfall am Anfang liegt an der Berücksichtigung des Temperaturoptimums mesophiler Mikroorganismen (siehe Kapitel 6.1.3). Wird in der Simulation unter anaeroben Bedingungen (Vergärung) der Einfluss der Temperatur auf die Acetogenese ausgeschaltet (siehe Abbildung 6-3), bleibt der Temperaturverlauf unverändert, jedoch sinkt durch die Versäuerung der pH-Wert und damit die Abbaurate auf etwa 8 Gew.-%.

Zum Vergleich eine Zusammenfassung aus der Literatur und empirischer Ergebnisse zum Thema Erwärmung des Materials in der biologischen Abfallbehandlung (Kompostierung und Vergärung) (siehe auch Kapitel 4 und Kapitel 5.1 und 5.2):

Temperaturen der Kompostierung

Aufgrund des hohen Gehalts an leicht metabolisierbaren Stoffen im frischen Bioabfall steigt zu Beginn der Kompostierung die mikrobielle Stoffwechselaktivität und damit die Temperatur schnell an. Nach dem Abbau der leicht metabolisierbaren Fraktion sinkt die Temperatur und es erfolgt ein Wechsel der Mikroorganismenvergesellschaftung, verbunden mit einem verstärkten Abbau höhermolekularer Bestandteile aus dem pflanzlichen Stützgewebe wie Hemicellulose und Cellulose (z. B. de Bertoldi et al., 1988, Krogmann, 1994). In der anschließenden Nachrotte, die mehrere Wochen bis Monate dauern kann, erfolgt eine allmähliche Reifung des Komposts, bei der ein Ab- und Umbau auch schwer verwertbarer Gerüstsubstanzen wie z. B. der Lignocellulosen stattfindet. Am Ende des in der Regel Monate bis Jahre dauernden Reifungsprozesses steht eine vollständige Humifizierung der organischen Substanz (z. B. Grabbe und Schuchardt, 1993, Krogmann, 1994, Amlinger et al., 2005) mit Umgebungstemperatur. Der prinzipielle Verlauf des beschriebenen Kompostierungsprozesses ist in Abbildung 7-14 zusammenfassend dargestellt.

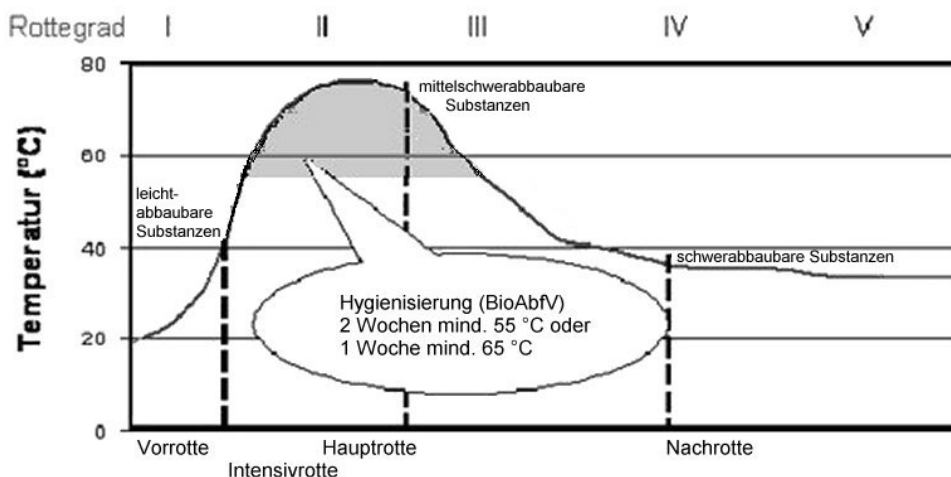


Abb. 7-14: Prinzipieller Verlauf des Kompostierungsprozesses nach Körner (2009)

In vielen Kompostierungsexperimenten werden optimale Abbautemperaturen von über 55 °C während der Intensivrotte angegeben (Krogmann, 1994). Dabei werden aber substratspezifische Unterschiede nur ungenügend erfasst. Bei Temperaturen um 60 °C nimmt die Mikro-

organismenvielfalt signifikant ab und bei Temperaturen zwischen 75 °C und 80 °C wird kaum noch mikrobielle Aktivität detektiert (Strom, 1985, Krogmann, 1994).

Nach z. B. Körner (2009) (Abbildung 7-14) und Kranert (2000) findet bei der Kompostierung am Ende der Hauptrotte eine leichte Temperaturerhöhung bzw. eine Abkühlungsunterbrechung (konstante Temperatur) durch späten Abbau schwer abbaubarer Substanzen statt. In der Simulation wird dies durch die Berücksichtigung des Temperaturoptimums mesophiler Mikroorganismen bis 40 °C erreicht.

Das Simulationsprogramm kann auch schwankende Temperaturverläufe wiedergeben, da zwischen leicht, mittel und schwer abbaubaren Substanzen unterschieden wird. Temperaturschwankungen aufgrund sich verändernder Milieubedingungen (z. B. Wassergehalt, pH-Wert, Belüftungsschwankungen, Änderung des freien Porenvolumens) oder Hemmungen aufgrund zu hoher Konzentrationen bzw. Materialzugaben werden in der Simulation ebenfalls berücksichtigt und dargestellt.

Temperaturen der Vergärung

Die bei der Vergärung aktiven Organismengruppen haben unterschiedliche und dabei jeweils recht enge Temperaturoptima (Tabelle 5-1). Bei höheren Temperaturen steigt häufig die Geschwindigkeit der Gasbildung an, was durch die bessere Verfügbarkeit von Nährstoffen im Substrat und den vermehrten Abbau bestimmter Stoffe begründet sein wird, jedoch der Methanengehalt nimmt mit steigender Temperatur im Verhältnis ab. Die jeweils gewählten Gärungstemperaturen sind also ein Kompromiss zwischen den Optima der beteiligten Mikroorganismen und der Energiebilanz der Vergärung (Faulstich et al., 1995, Spendlin, 1991). Die Temperatur wird bei der Vergärung in der Regel durch Isolierungen und aktives Beheizen eingestellt, so dass hierdurch zu berücksichtigende Kosten entstehen und ein typischer Temperaturverlauf wie bei der Kompostierung nicht gegeben ist.

In dem Simulationsmodell können diese Zusammenhänge verdeutlicht werden. Durch die mögliche Wahl der Berücksichtigung von Temperatureinflüssen auf die Acetogenese sind die Unterschiede darstellbar. Die Abbauraten und damit auch die Gasbildung können dadurch erheblich variieren.

Simulationsergebnisse von Temperaturentwicklungen im Material ohne Abbauenergie

Zur Überprüfung des Temperatureinflusses durch unterschiedliche Außen- und Materialtemperaturen wurde die Materialtemperatur auf 10 °C und die Außentemperatur auf -40 °C bzw. 40 °C gesetzt. Die Belüftungstemperatur (20 °C) und -feuchte (60 RH-%) und andere Para-

meter blieben unverändert (siehe Kapitel 7.1). Der Behälter (Zylinder) wurde als gut wärmeleitend ohne Isolierung angenommen. Der mikrobiologische Abbau wurde ausgeschaltet, um ausschließlich die physikalischen Zusammenhänge zu überprüfen.

In der Abbildung 7-15 werden die Temperaturverläufe bei unterschiedlichen Materialmengen (100 kg und 1000 kg) ohne Belüftung und ohne mikrobiologische Abbauenergie dargestellt.

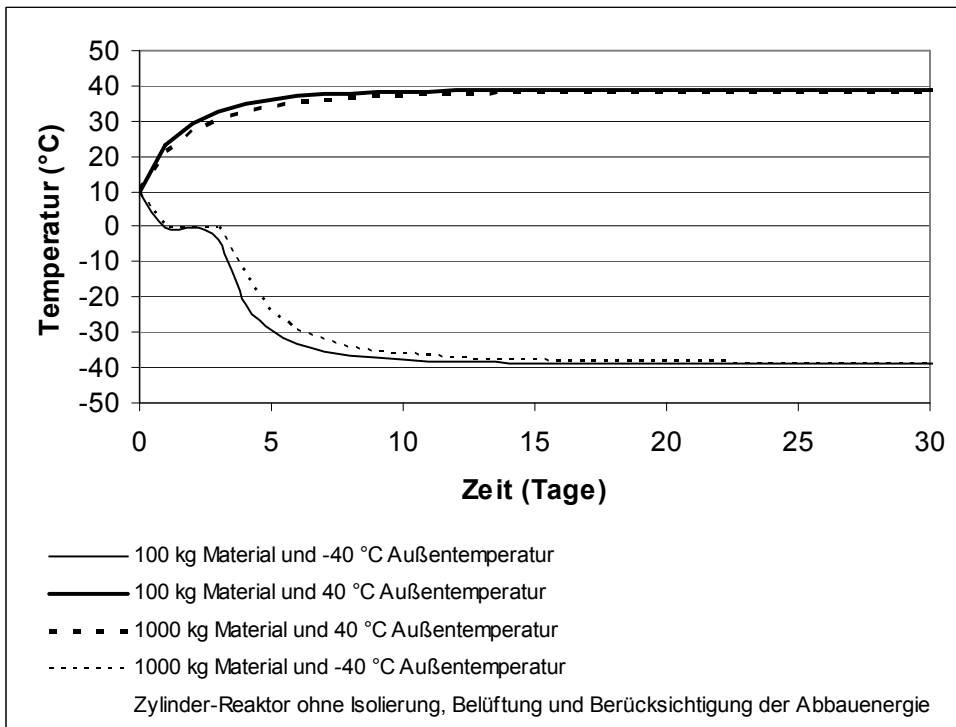


Abb. 7-15: Simulationsergebnis: Vergleich der Temperaturverläufe bei 100 kg und 1000 kg Material ohne Belüftung und ohne mikrobiologische Abbaupenergie bei -40 °C und 40 °C Außentemperatur ohne Isolierung in 30 Tagen

Der Temperaturanstieg und -abfall ist abhängig von der Materialmenge. Wegen des sich wenig verändernden Volumen/Oberflächenverhältnisses bei der Gewichtszunahme wird nach etwa 15 Tagen sowohl bei 100 kg mit 38,7 °C als auch bei 1000 kg mit 38,0 °C annähernd die Außentemperatur erreicht. Jedoch ist bei geringerer Masse der Temperaturanstieg bzw. -abfall schneller, d. h. hohe bzw. niedrige Temperaturen werden in kürzerer Zeit erreicht. Die Berücksichtigung der Schmelz- bzw. Erstarrungsenergiezu- bzw. abfuhr bei Über- bzw. Unterschreitung von 0 °C (Gleichung 6-20) im Simulationsmodell führt zu einer kurzen Abkühlungsunterbrechung nach 2 Tagen (Abbildung 7-15).

Der Belüftungseinfluss ist bei einer Materialmenge von 100 kg innerhalb von 180 Tagen deutlich zu erkennen (Abbildung 7-16).

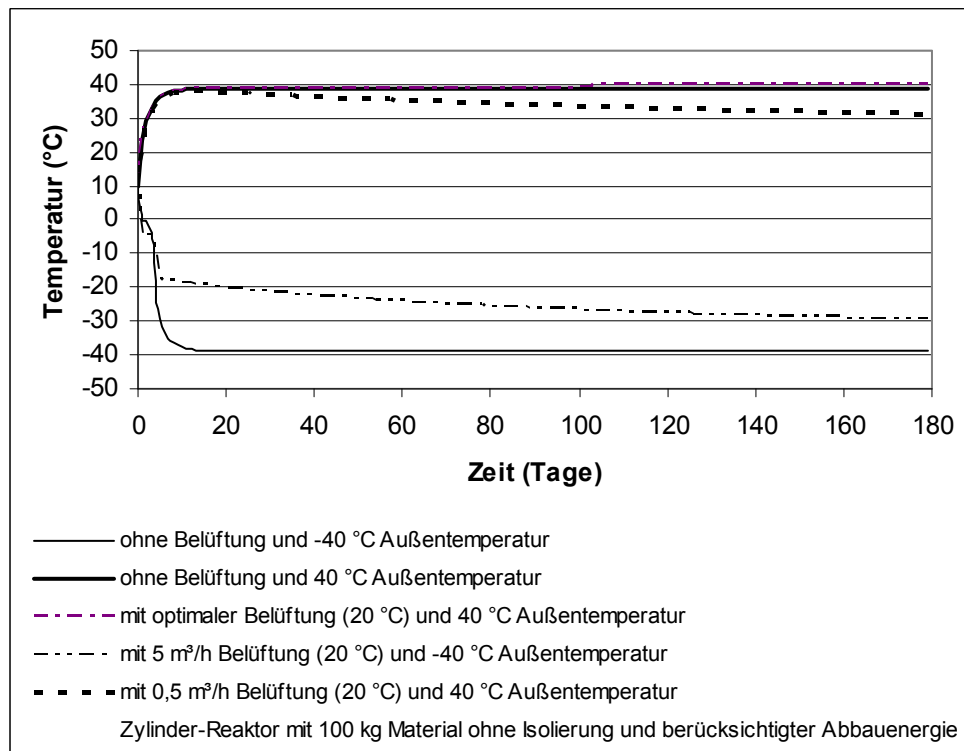


Abb. 7-16: Simulationsergebnis: Vergleich der Temperaturverläufe bei 100 kg Material ohne Belüftung und bei unterschiedlicher Belüftung mit 20 °C Belüftungstemperatur und ohne mikrobiologische Abbauenergie bei -40 °C und 40 °C Außentemperatur ohne Isolierung in 180 Tagen

Zum Vergleich werden in der Abbildung 7-16 die Kurven ohne Belüftung nochmals mit dargestellt. Bei optimaler Belüftung (Kapitel 6.1.8) wird die Außentemperatur von 40 °C durch den geringen kühlenden Gasstrom ähnlich des Temperaturanstiegs ohne Belüftung erreicht. Bei konstantem Gasfluss ist dem Gasvolumen entsprechend ein verzögerter Temperaturanstieg bzw. -abfall ablesbar. So werden bei einem Belüftungsstrom von 5 m³/h und 20 °C die Außentemperatur von -40 °C in 180 Tagen nicht erreicht. Ohne Belüftung hingegen wird nach etwa 15 Tagen annähernd die Außentemperatur erreicht. Bei einem Belüftungsstrom von 0,5 m³/h und 20 °C wird das Material bei einer Außentemperatur von 40 °C in 180 Tagen kontinuierlich gekühlt. Durch die Verdunstung des Wassers bei höheren Temperaturen wird das Material zunehmend in Richtung Belüftungstemperatur eingestellt. Bei niedriger Umgebungstemperatur unterhalb der Belüftungstemperatur wird das Wasser der Belüftungsluft im Material kondensiert, so dass der Wassergehalt zunimmt und das Material mit der Zeit tendenziell eher die Außentemperatur erreicht.

Ähnliche Ergebnisse erhält man bei den anderen Materialschüttformen (Abbildung 6-10), wenn das Volumen/Oberflächenverhältnis wenig abweicht.

7.2.6 Simulationsergebnisse zum pH-Wertverlauf

Der pH-Wertverlauf wurde beispielhaft mit unterschiedlichen Einstellungen im Programm simuliert. Dargestellt ist der Verlauf bei der Vergärung und der Kompostierung (optimale Belüftung, siehe Kapitel 6.1.8) mit den in Kapitel 7.1 aufgeführten Simulationsparametern ohne Kalkzugabe und jeweils mit 3 kg Kalkzugabe am Anfang, die anaerobe Betriebsweise mit einer Zwischenbelüftung (optimale Belüftung) zwischen dem 20. und 80. Tag und die anaerobe Betriebsweise mit Wenden und Lufteintrag am 0., 50., 100. und 150. Tag (Abbildung 7-17) ohne Kalkzugabe.

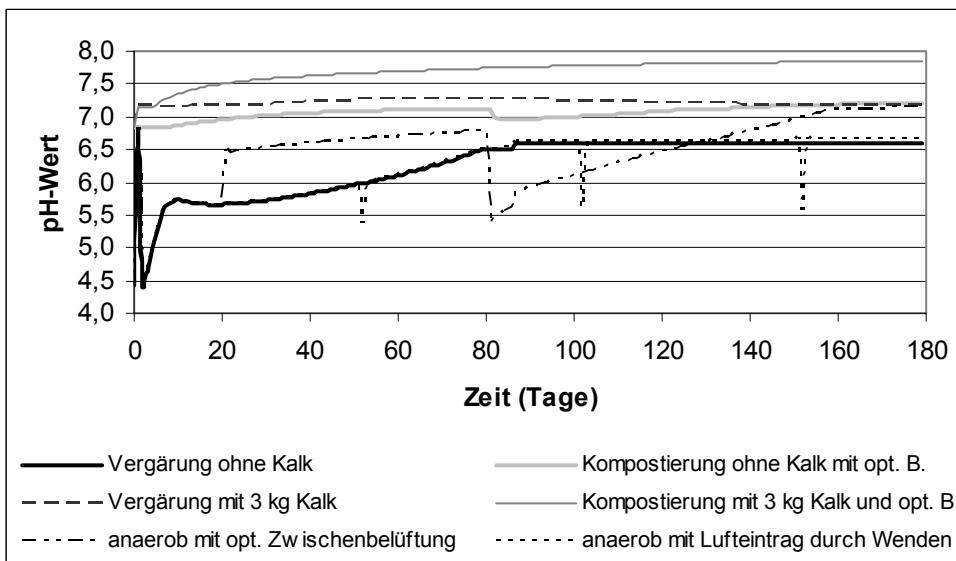


Abb. 7-17: Simulationsergebnis: Vergleich der pH-Wert-Verläufe bei aerober und anaerober Betriebsweise Kompostierung und Vergärung mit und ohne Kalk und anaerob mit optimaler Zwischenbelüftung und mit Lufteintrag durch Wenden

Die Simulation zeigt für die Kompostierung pH-Werte zwischen anfänglich 6,8 bis 7,2 am Ende ohne Kalkzugabe. Ist Kalk (3 kg) als Puffer enthalten, beginnt der Prozess mit pH-Werten um 7,2 und steigt dann zügig nach 20 Tagen auf pH 7,5. Nach 180 Tagen erreicht der pH-Wert etwa 7,8, wenn Kalk vorhanden ist.

Die Simulation der Vergärung ohne Kalkzugabe ergibt pH-Werte zwischen 4,4 und 6,6. Durch virtuelle Zugabe von Kalk (3 kg) als Säurepuffer am Anfang kann der pH-Wert bei etwa 7,2 konstant gehalten werden. Wird bei der Vergärung Sauerstoff eingetragen (z. B. durch Wenden), werden die Methanbildner gehemmt, wodurch es auch in der Simulation jeweils kurzfristig zu einer Anreicherung der Säuren kommt und der pH-Wert sinkt. Der aerobe Abbau der Säuren findet aufgrund der fehlenden entsprechenden Mikroorganismen in der kurzen Zeit nicht statt. In der Simulation wird durch Wenden am 0., 50., 100. und 150. Tag Luft eingetragen und der pH-Wert sinkt jeweils auf etwa 5,4 bis 5,6 (nach jedem

Wenden etwas ansteigend) und steigt insgesamt langsam von 4,4 auf etwa 6,7, also etwas höher als ohne Lufteintrag.

Wird unter anaeroben Bedingungen ohne Kalkzugabe zwischenbelüftet, zeigt die Simulation bei beginnender Belüftung am 20. Tag einen zügigen pH-Wertanstieg von 5,7 auf 6,5 und bis zum 80. Tag auf 6,8. Nach Beendigung der Belüftung am 80. Tag sinkt er sofort auf einen pH-Wert von etwa 5,4 zurück. Anschließend steigt der pH-Wert erst auf 6,0 am 95. Tag und dann bis zum 154. Tag auf 7,0 und etwas später auf 7,1, vergleichbar mit der Kompostierung in der Simulation.

Gut zu erkennen ist, dass auch in der Simulation durch Zugabe von Kalk höhere pH-Werte erreicht werden (siehe Kapitel 5.7). Die anfängliche Versäuerung bei der simulierten Vergärung in den etwa ersten fünf Tagen, mit langsamen Anstieg bis etwa zum 90. Tag auf 6,6, ist durch Kalk kompensierbar, so dass pH-Werte über 7 (max. 7,3) erreichbar sind. Bei der simulierten Kompostierung mit optimaler Belüftung und Kalk kann der pH-Wert ebenfalls deutlich angehoben werden (etwa 7,8).

Die Simulation zeigt weiter, dass durch eine Zwischenbelüftung der pH-Wert steigt. Nach Belüftungsende tritt erneut eine Versäuerung ein. Anschließend steigt der pH-Wert jedoch deutlich über das Niveau der Simulation ohne Zwischenbelüftung.

Die simulierten pH-Werte entsprechen somit grundsätzlich den in der Wirklichkeit gemessenen Werten wie in Kapitel 5.7 beschrieben.

7.2.7 Simulationsergebnisse der Nährstoffbilanzen

Damit die Nährstoffsituation unter unterschiedlichen Milieubedingungen verglichen werden kann, sind in dem Simulationsprogramm in einem Diagramm die Summenwerte von Kohlenstoff-, Stickstoff- und Schwefelatomen in Massenprozent darstellbar (Kapitel 6.3.1). Der Verbleib der Kohlenstoff-, Stickstoff- und Schwefelatome in den unterschiedlichen Phasen, also Substrat (abbaubarer Feststoff), Wasser (im Feststoff und ggf. Sickerwasser) und Gas (in den Feststoffporen und in der Abluft), kann auf diese Weise übersichtlich nachvollzogen werden. Verglichen wurde für die Simulation beispielhaft wiederum die aerobe und anaerobe Betriebsweise (Kompostierung und Vergärung) für das in Kapitel 7.1 genannte Fallbeispiel mit 3 kg Kalkzugabe (Abbildung 7-18).

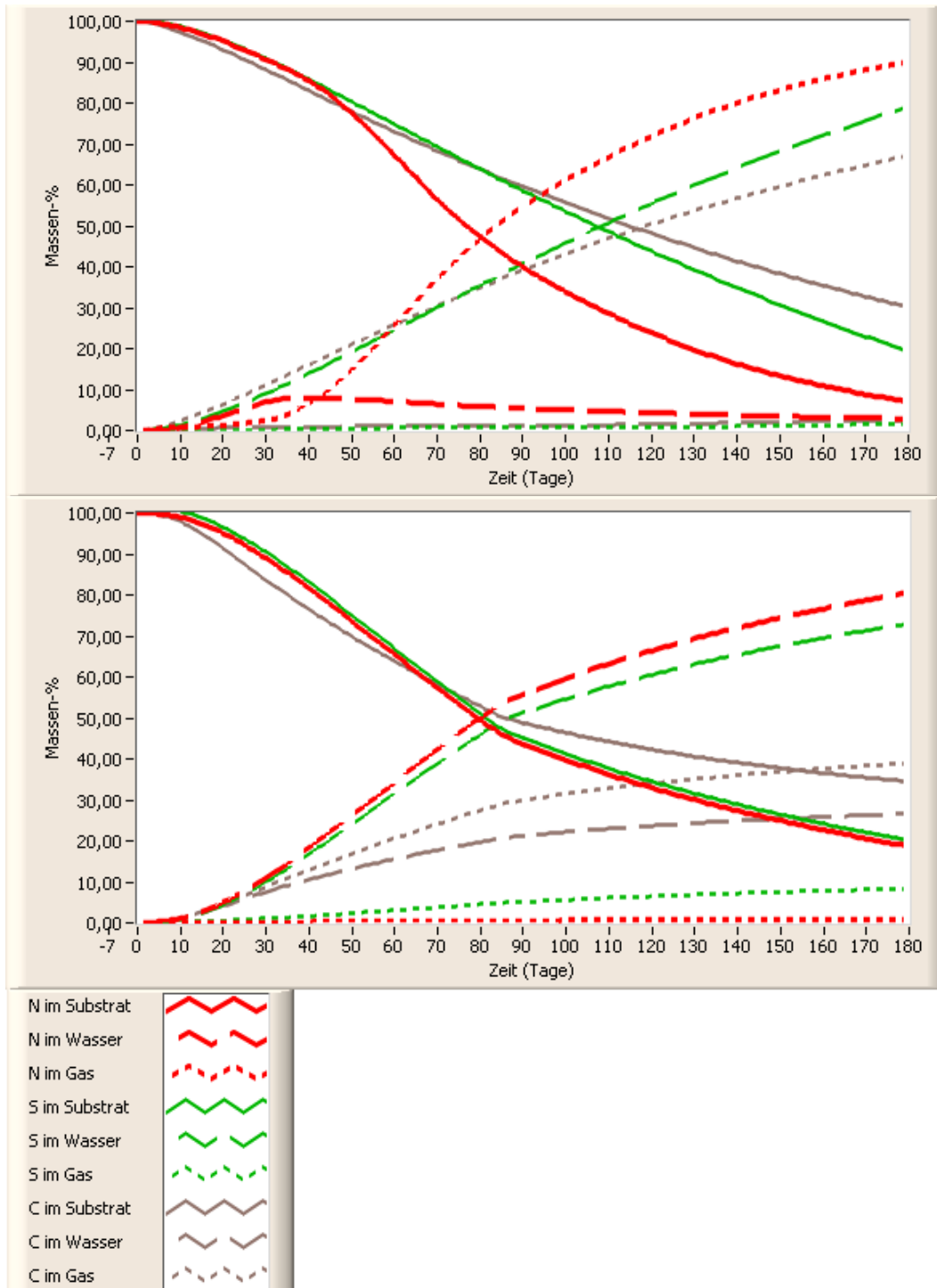


Abb. 7-18: Simulationsergebnis: Gesamt-Stickstoff (N)-, Schwefel (S)- und Kohlenstoff (C)-Bilanz des abbaubaren Substrats mit optimaler Belüftung (oben) und ohne Belüftung (unten)

Gut zu erkennen ist, dass bei gleicher Abbaurate (75 Gew.-%) aerob mehr Kohlenstoff (C) und Stickstoff (N) über die Gasphase als anaerob emittiert wird im Gegensatz zu Schwefel (S), der in beiden Fällen überwiegend in der Wasserphase verbleibt. Bei anaerober Betriebsweise gehen mehr Kohlenstoff- und Stickstoffatome von der Feststoff- in die

Wasserphase über als aerob. Anaerob entweichen Stickstoff und Schwefel aus dem Feststoff in gleicher Weise, wobei Schwefel deutlich stärker über die Gasphase entweicht als aerob. Stickstoff hingegen geht anaerob im Gegensatz zu aerob kaum in die Gasphase über, sondern verbleibt in der Wasserphase. Kohlenstoff entweicht bei aerobem Abbau überwiegend in die Gasphase, vor allem durch Kohlendioxid. Beim anaeroben Abbau geht ein erheblicher Teil des Kohlenstoffs neben der Gasphase (Methan und Kohlendioxid) auch in die Wasserphase über (organische Säuren, Carbonat bzw. Hydrogencarbonat).

Die Simulationsergebnisse entsprechen den im Programm vorgegebenen Gleichungen und Zusammenhängen. In der Realität sind die Bedingungen komplexer, jedoch sind die Tendenzen und Entwicklungen gut wiedergegeben. Bei der Mehrzahl der in der Literatur beschriebenen Untersuchungen sind die Angaben für eine Bilanzierung zu unvollständig und daher wenig aussagekräftig (Körner et al., 1999). Für die Beurteilung der Realitätsentsprechung der Simulationsergebnisse müssten weitergehende Vergleiche durchgeführt werden.

7.2.8 Simulationsergebnisse zu Ammonium, Nitrat, Nitrit und Sulfat

In diesem Kapitel wurden für den Vergleich mit realen Konzentrationsverläufen relevante Stoffe in der Wasserphase und entsprechend im Sickerwasser (siehe Kapitel 6.1.7) simuliert. Hierzu gehören Ammonium, Nitrat, Nitrit und Sulfat. Zur besseren Einschätzung der in der Simulation erreichten Gehalte wurden die höchstzulässigen Trinkwasserkonzentrationen für den Vergleich mit „reinem“ Wasser nach der Trinkwasserverordnung (TrinkwV, 2011) und die Einleitungsgrenzwerte in Gewässer der Abwasserverordnung (AbwV, 2012) verwendet. Die Gehaltsgrenze im Trinkwasser von Ammonium liegt bei 0,5 mg/l (0,4 mg/l Ammonium-N), von Nitrat bei 50 mg/l (11 mg/l Nitrat-N) und von Nitrit bei 0,1 mg/l (0,03 mg/l Nitrit-N). Für Sulfat liegt die Trinkwassergehaltsgrenze bei 250 mg/l (83 mg/l Sulfat-S). Der Einleitungsgrenzwert von Ammonium-N liegt bei 10 mg/l und für Nitrit-N und Nitrat-N bei 13 mg/l (Nges). Für Sulfat liegt der Einleitungsgrenzwert bei 2 g/l (667 mg/l Sulfat-S). Sulfatkonzentrationen über 100 mg/l gelten als korrosionsfördernd und greifen sowohl Stahl- als auch Betonkonstruktionen an.

Der Zuordnungswert für Ammoniumstickstoff für mechanisch biologisch behandelte Abfälle gemäß Anhang 2 der Abfallablagerversordnung (AbfAbIV, 2006) ist ≤ 200 mg/l und Zielwert zum Deponienachsorgeende ist ≤ 50 mg/l.

Unter aeroben Milieubedingungen mit optimaler Belüftung (siehe Kapitel 6.1.8) und ohne Kalkzugabe und Temperaturen deutlich über 20 °C (bis etwa 53 °C) entstehen in der Simulation des in Kapitel 7.1 genannten Fallbeispiels Sulfat-S (bis ca. 18 mg/l), Nitrat-N (bis ca. 58 mg/l) und Ammonium-N (ansteigend bis ca. 18 g/l). Nitrit-N tritt zusammen mit Nitrat-N

und einer Konzentration von bis zu etwa 20 mg/l auf, da wegen des Sauerstoffmangels keine vollständige Oxidation mehr erfolgen kann. Der pH-Wert steigt langsam von 6,6 auf 7,2 an. Insgesamt werden 79 Gew.-% des abbaubaren Materials umgesetzt.

Bei gleichen Vorgaben entstehen wegen des Sauerstoffmangels und der Versäuerung unter anaeroben Milieubedingungen (pH-Werte liegen um 4,5 und die Temperaturen nur knapp über 20 °C) deutlich geringere Konzentrationen Ammonium-N (ansteigend bis ca. 12 mg/l). Nitrat-N, Nitrit-N und Sulfat-S treten jeweils gar nicht in der Wasserphase auf. Insgesamt werden aber auch nur 6 Gew.-% des abbaubaren Materials abgebaut.

Die Konzentrationsschwankungen und –spitzen und das plötzliche An- und Absteigen der Kurven (nicht abgebildet) resultiert aus den im Simulationsmodell vorgegebenen Abläufen und Grenzwerten. Vor allem das Auftreten von Nitrat, Nitrit und Sulfat ist abhängig von dem Sauerstoffrestgehalt und den Milieubedingungen pro Zeitschritt, wodurch sporadische Konzentrationsspitzen und plötzliche Konzentrationsanstiege und -abfälle begünstigt werden. Ähnliche Verläufe sind aber auch in der Wirklichkeit zu beobachten (Körner, 2009), vermutlich aus den gleichen und weiteren Gründen.

Die Sulfatkonzentrationen sind in dem Fallbeispiel unter aeroben und anaeroben Milieubedingungen unbedenklich. Die Ammonium-N-, Nitrat-N- und Nitrit-N-Konzentrationen liegen zeitweise unter aeroben Milieubedingungen erheblich über den Trinkwassergrenzwerten und über den Einleitungsgrenzwerten der Abwasserverordnung und Ammonium-N auch weit über dem Zuordnungswert für Ammoniumstickstoff für mechanisch biologisch behandelte Abfälle. Unter anaeroben Bedingungen treten in der Simulation diese Stoffe vergleichsweise - bis auf Ammonium, das deutlich über dem Trinkwassergrenzwert liegt und auch über dem Einleitungsgrenzwert der Abwasserverordnung - nicht auf.

Ein weiterer Vergleich erfolgt mit Daten eines realen Kompostierungsprozesses (Fricke et al., 1989); so wurden im Sickerwasser einer unbelüfteten Mietenrotte von Bioabfallkompost Ammonium-N-Konzentrationen zwischen 400 und 1100 mg/l und Nitrat-N-Konzentrationen zwischen 1,7 und 25 mg/l gemessen. Durch die fehlende Belüftung dürften anaerobe Abbauprozesse in der Miete stattgefunden haben. In der Simulation wird Nitrat-N bei einer konstanten geringen Belüftungsrate von 0,005 m³/h vergleichsweise kaum produziert (bis max. 0,005 mg/l). Ammonium-N tritt mit maximal 4,27 g/l auf. Bei einer konstanten hohen Belüftungsrate von 0,5 m³/h entstehen hingegen bis zu 80 mg/l Nitrat-N und geringere Konzentrationen Ammonium-N (max. 0,5 g/l).

Die Werte sind also deutlich von der Belüftungsrate abhängig. Die hier dargestellten Simulationenwerte sind in der Größenordnung mit den realen Messwerten vergleichbar, wenn man von einer Belüftung zwischen 0,005 und 0,5 m³/h ausgeht. Für einen präziseren Vergleich

müsste die Belüftung im realen Prozess erfasst werden, damit eine Übertragung in das Simulationsprogramm erfolgen kann.

7.2.9 Simulationsergebnisse zu Stickstoff- und Schwefelemissionen

Die im Folgenden dargestellten Simulationsergebnisse beziehen sich auf die in Kapitel 6.1.9 genannten Zusammenhänge und auf die in Kapitel 7.2 durchgeführten Simulationen. Aufgrund der erheblichen Konzentrationsunterschiede und des häufig spontanen Auftretens der einzelnen Verbindungen werden zur besseren Vergleichbarkeit der Emissionen nur die Summen- und Maximumwerte genannt.

Simulationsergebnisse Stickstoffemissionen

In der Simulation entstehen aufgrund der Reaktionsgleichungen (Kapitel 6.1.9) bei optimaler Belüftung (siehe Kapitel 6.1.8), einem leicht ansteigendem pH-Wert (bis auf ca. 6,8) und einer Abbaurrate von 82 Gew.-% in dem in Kapitel 7.1 beschriebenen Fallbeispiel ohne Kalkzugabe Distickstoff-N (8,65 g insgesamt) und es wird, verglichen mit den anderen Milieuverhältnissen, am meisten Distickstoffoxid-N (0,3 g insgesamt) emittiert. Verringert man den Belüftungsstrom um z. B. 40 %, sinkt der pH-Wert und die Stickstoffemissionen über die Gasphase nehmen ab (845 statt 2379 g N insgesamt, überwiegend Ammoniak). Ammoniak-N entweicht im Verhältnis zu Ammonium-N solange stärker, bis Nitrat-N bzw. Nitrit-N entsteht. Dann verbleibt der Stickstoff vermehrt in der Wasserphase, statt in die Gasphase überzugehen.

Unter anaeroben Bedingungen entsteht wenig Distickstoffoxid-N (0,004 g insgesamt) und wenig Distickstoff-N (0,09 g insgesamt). Die Abbaurrate beträgt 43 Gew.-% des abbaubaren Materials und der pH-Wert liegt unter 7 (von 4,4 ab ansteigend bis auf 6,2 nach 180 Tagen). Insgesamt werden 0,32 g Stickstoff (N) ohne Belüftung bei einem anfänglichen C/N-Verhältnis von 14 über die Gasphase emittiert. Nitrat-N und Nitrit-N wird ohne Belüftung nicht gebildet. Ammonium-N tritt mit maximal 0,07 g/l gering auf. Ammoniak-N wird mit $\Sigma 0,23$ g über die Gasphase abgegeben.

Bei einem C/N-Verhältnis von 5 am Anfang und unter anaeroben Bedingungen entsteht kein Distickstoffoxid-N und wenig Distickstoff-N (0,12 g insgesamt). Die Abbaurrate beträgt 61 Gew.-% des abbaubaren Materials. Nitrat-N wird ohne Belüftung nicht gebildet. Nitrit-N tritt mit maximal 0,006 mg/l gering auf und Ammonium-N mit maximal 0,3 g/l ebenfalls. Ammoniak-N entweicht mit $\Sigma 2,73$ g über die Gasphase. Insgesamt werden 2,85 g Stickstoff (N) ohne Belüftung über die Gasphase emittiert, also deutlich mehr als bei einem anfänglichen C/N-Verhältnis von 14.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass Stickstoffverluste über die Gasphase auch in der Simulation von der Belüftungsstärke und dem pH-Wert abhängig sind. Je stärker die Belüftung ist, desto größer ist der Stickstoffverlust, überwiegend als Ammoniak, über die Gasphase. Da in der Simulation kein Sickerwasser anfällt, entweicht kein Stickstoff über die Wasserphase.

Simulationsergebnisse Schwefelemissionen

Die Schwefelreaktionen (Kapitel 6.1.9) sind in der Simulation ebenfalls sehr von dem Belüftungszustand und dem pH-Wert abhängig. Bei optimaler Belüftung und leicht ansteigendem pH-Wert (bis auf ca. 6,8) treten in der Simulation kaum Schwefelwasserstoff-S in der Gasphase und organische Säuren (AC_{eq}) (siehe Kapitel 6.1.10) auf, dafür entsteht Sulfat-S in der Wasserphase mit einer Konzentration von bis zu 16 mg/l bei einer Abbaurrate von 82 Gew.-% des abbaubaren Materials.

Bei anaerober Betriebsweise sinkt der pH-Wert bis auf 4,4 ab und steigt nur bis 6,2 nach 180 Tagen an. Organische Säuren (AC_{eq} bis 0,34 g/l) und Schwefelwasserstoff-S (bis etwa 0,13 g/d) werden deutlich mehr produziert. Sulfat-S entsteht nicht. Die Abbaurrate beträgt hierzu 43 Gew.-% des abbaubaren Materials. Wird die Zugabe von 3 kg Kalk simuliert, entstehen deutlich weniger organische Säuren (AC_{eq} bis 0,25 g/l) und Schwefelwasserstoff-S (bis zu 0,05 g/d). Der pH-Wert wird dadurch auf konstante 7,2 eingestellt. Die Abbaurrate beträgt 59 Gew.-% des abbaubaren Materials.

Bei 50 mg/oTS simulierter Sulfatanfangskonzentration ohne Belüftung und ohne Kalk ist Sulfat-S (max. 22,3 mg/l) und Schwefelwasserstoff-S (max. 0,45 g/d) messbar. Bei 3 kg simulierter Kalkzugabe und 50 mg/oTS Sulfatanfangskonzentration ohne Belüftung entsteht etwas weniger Sulfat-S (max. 21,1 mg/l) und Schwefelwasserstoff-S (max. 0,18 g/d).

Die Simulation von Eisenchlorid-Zugaben zur Reduktion der Schwefelwasserstoffemissionen ohne vorgegebener Sulfatanfangskonzentration, ohne Belüftung und ohne Kalk ergibt bei Zugabe von 1 g Eisen(III)chlorid eine insgesamt geringe Schwefelwasserstoff-S Reduktion in der Gasphase. Unter der Annahme, dass nur 50 % der Eisenionen gelöst und wirksam sind, bewirkt die Zugabe von 140 g Eisen(III)chlorid eine vollständige Schwefelwasserstoffreduktion.

Die Alternative der Eisen(II)chlorid-Zugabe ergibt nur wenig Unterschied. Der Dichteunterschied zu Eisen(III)chlorid (3160 kg/m^3 statt 2900 kg/m^3) ist jedoch erheblich und in der Praxis bei der Einwaage und dem Vergleich mit Simulationsergebnissen zu beachten.

Bei geringer konstanter Dauerbelüftung mit einer Belüftungsrate von $0,005 \text{ m}^3/\text{h}$ treten in der Simulation Sulfat-S in der Wasserphase (max. 0,38 mg/l und 0,88 mg insgesamt) und

Schwefelwasserstoff-S in der Gasphase (max. 0,03 g/d = 23 ml/d und 3,7 g insgesamt = 2,8 l bei 20 °C und 1013,25 mbar) auf. Die Abbaurate beträgt hierzu 30 Gew.-% des abbaubaren Materials.

In hier nicht weiter dargestellten Vergleichen mit anderen Substraten ist bei der Beurteilung der Werte zu berücksichtigen, dass der Bioabfall im Simulationsprogramm sehr viel Proteine und damit Schwefel enthält. Schwefelwasserstoffemissionen können daher in der Realität bei anderen Materialien auch sehr viel geringer sein.

In Kapitel 9.5 ist ein Vergleich der Schwefelwasserstoff- und Sulfatkonzentrationen in der Simulation mit in der Realität gemessenen Werten anhand von Daten einer belüfteten Deponie ausführlicher dargestellt.

7.2.10 Simulationsergebnisse zur Schwermetallhemmung

Wird eine Schwermetallhemmung im Programm simuliert, resultiert daraus eine Abbauverzögerung, denn auch in der Wirklichkeit wird nur selten der Abbau ganz zum Erliegen kommen. Eine Aufhebung der Hemmung erfolgt in der Simulation, wenn bei niedrigem pH-Wert über einen längeren Zeitraum, der von der Materialmenge abhängig ist, Sickerwasser entsteht (Kapitel 6.1.13). Konkret werden erst dann Schwermetalle ausgewaschen, wenn der pH-Wert kleiner als 5 ist und Sickerwasser (> 0,1 kg) über mindestens drei Tage (materialmengenabhängig, siehe Kapitel 6.1.13) gleichzeitig entsteht.

Diese Bedingungen konnten mit dem vorgegebenen Material (Kapitel 7.1) unter anaeroben Milieubedingungen ohne simulierte Kalkzugabe mit einer Belüftung (optimale Belüftung, siehe Kapitel 6.1.8) zwischen dem 20. und 80. Tag und einer kontinuierlichen Wasserzugabe von fünf Litern täglich bis zum 20. Tag erreicht werden. Wenn 5 l Wasser in der Simulation in dem Fallbeispiel des Kapitels 7.1 täglich bis zum 20. Tag zugegeben werden, entstehen insgesamt 35,4 kg Sickerwasser. Der Wasseraustritt aus dem Material beginnt nach 17 Tagen mit etwa 10 l. Bis zum 20. Tag ist der pH-Wert niedriger als 5, so dass in der Simulation in diesen drei Tagen die Schwermetallkonzentration unter die hemmende Konzentration sinkt und der mikrobiologische Abbau fortgesetzt werden kann. Wegen des niedrigen pH-Wertes findet aber nur unter aeroben Milieubedingungen mit höherem pH-Wert ein deutlicher mikrobiologischer Abbau statt.

Die Abbildung 7-19 zeigt den verzögerten Abbau durch die simulierte Schwermetallbelastung und wegen des niedrigen pH-Wertes, der nur während der Belüftung deutlich höher ist (bis max. 6,9).

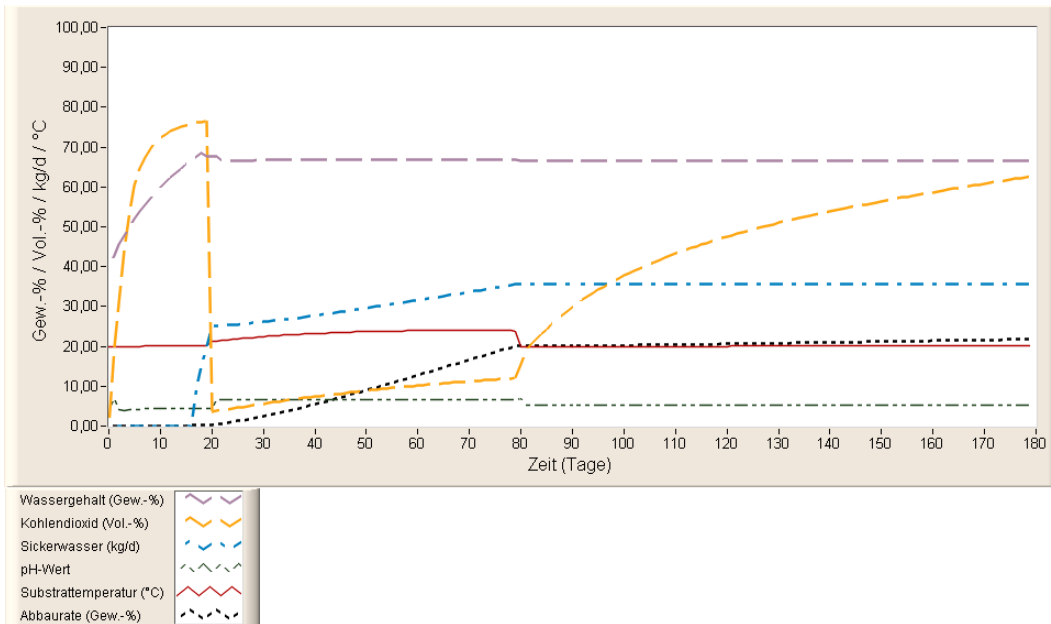


Abb. 7-19: Simulationsergebnis: Schwermetallauswaschung in drei Tagen unter anaeroben Bedingungen mit optimaler Zwischenbelüftung zwischen dem 20. und 80. Tag, dargestellt durch den Wassergehalt, Kohlendioxidanteil, Sickerwassermenge, pH-Wert, Substrattemperatur und Abbaurrate

Kohlendioxid wird wegen der Versäuerung in den ersten zwanzig Tagen anteilig vermehrt gebildet. Dann erfolgt durch die Belüftung ein aerober mikrobiologischer Abbau, der gut am Anstieg der Abbaurrate zu erkennen ist. Auch die Temperatur erhöht sich dadurch bis auf 24 °C. Aufgrund der Wasserzugabe steigt der Wassergehalt im Material am Anfang bis zum 20. Tag kontinuierlich bis auf etwa 67 Gew.-% an und bleibt dann nahezu konstant. Durch das Nachsickern des zugegebenen Wassers aus dem Material und durch den Abbau (metabolisches Wasser) steigt die Menge an Sickerwasser bis zum 80. Tag weiter an. Nach der Belüftung sinkt der pH-Wert wieder, jedoch nicht mehr unter 5, und steigt auch nach 180 Tagen nur bis 5,3 an. Dadurch kann kein Methan gebildet werden (nicht abgebildet), aber es entsteht anteilig mehr Kohlendioxid bei geringem Abbau. Der resultierende Abbau liegt bei 22 Gew.-%. Ohne simulierte Auswaschung der Schwermetalle liegt die Abbaurrate in diesem Beispiel bei 3 Gew.-% (nicht abgebildet).

Die Simulation der Schwermetallhemmung zeigt nur die Tendenzen an und ist auf die Wirklichkeit nicht übertragbar, da es zu viele Einflussfaktoren gibt, die in der Simulation nicht berücksichtigt werden (z. B. spezifische Reaktionen einzelner Schwermetalle).

7.3 Simulationsergebnisse physikalischer Parameter

Die physikalischen Bedingungen werden durch Parameter wie Temperatur, Durchlässigkeit (Stofffluss), Verdichtungen (Strömungsbedingungen) und Wassergehalt beschrieben. Sie

liefern die Voraussetzungen für mikrobiologische Abbauprozesse und sind daher für die Simulation relevant (Kapitel 5).

Das Simulationsmodell ist für biologische Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft optimiert. Die Simulation physikalischer Parameter ist in inhomogenen Feststoffgemischen wie sie in der Abfallwirtschaft vorkommen je nach angestrebter Genauigkeit und Auflösung umfangreich und von vielen auch unbekanntem Größen abhängig. Zur Vereinfachung der komplexen Zusammenhänge wird in der Simulation von einer ständigen Vergleichmäßigung des Materials ausgegangen (Raumkontinuität, siehe Kapitel 6.1).

Für die Darstellung der Simulationsergebnisse der physikalischen Parameter wird das freie Porenvolumen (fas) (Vol.-% FS), die Volumenreduktion (Vol.-%), die Materialhöhe (m), die Wasserdurchlässigkeit (berechneter Durchlässigkeitskoeffizient) (kf-Wert) (m/d), die Substrattemperatur (°C) und die Abbaurate (Gew.-%) betrachtet. Beeinflusst werden diese Werte vor allem durch die Belüftungsweise bzw. durch die vorgegebene Betriebsart. Für einen Vergleich mit Literaturwerten ist es erforderlich, die Berechnungsmethoden und vor allem die Einheiten und Wertebezüge zu berücksichtigen.

Im Folgenden werden die physikalischen Parameter für die in Kapitel 7.1 und 7.2 durchgeführten Simulationen (Simulationsparameter siehe Kapitel 7.1) und für interessante Einzelfälle mit einem vorgegebenen Anfangswert der Schüttdichte von $0,8 \text{ Mg/m}^3$ und einer Dichte der nicht abbaubaren organischen Trockensubstanz (Strukturmaterial) von $0,6 \text{ Mg/m}^3$ beschrieben. Die Simulationsergebnisse sind auch nochmal graphisch im Anhang 14.2 zu finden.

Simulationsergebnisse physikalischer Parameter bei optimaler Belüftung

Das freie Porenvolumen sinkt bei optimaler Belüftung (siehe Kapitel 6.1.8) und einem vorgegebenen Anfangswert von 40 Vol.-% TS und 1 Materialhöhen-% Setzung von 35 auf 32 Vol.-% FS mit dem Wasseranteil, das Volumen sinkt auf 57,6 Vol.-%, die Materialhöhe von 1,01 m auf 0,34 m und der kf-Wert von 52,2 auf 44,2 m/d. Die Abbaurate hierzu beträgt 82 Gew.-% des abbaubaren Materials und es entsteht kein Sickerwasser, aber 10,1 kg Kondenswasser. Ohne Isolation werden Temperaturen bis 56 °C erreicht.

Bewertung und Begründung

Auffallend ist die große Volumenreduktion (siehe Anhang 14.2, Abbildung 14-1), die aus der hohen Abbaurate und dem geringen Anteil nicht abbaubaren Materials (6,4 kg FS) resultiert.

Simulationsergebnisse physikalischer Parameter ohne Belüftung

Das freie Porenvolumen sinkt unter anaeroben Bedingungen bei einem vorgegebenen Anfangswert von 40 Vol.-% TS und 1 Materialhöhen-% Setzung von 35 auf 31 Vol.-% FS mit dem Wasseranteil, das Volumen sinkt auf 74,3 Vol.-%, die Materialhöhe von 1,01 m auf 0,56 m und der kf-Wert von 52,2 auf 41,9 m/d. Die Abbaurate beträgt 43 Gew.-% des abbaubaren Materials. Trotz Isolation steigt die Temperatur kaum (siehe Anhang 14.2, Abbildung 14-2).

Bewertung und Begründung

Unter anaeroben Verhältnissen sinkt der kf-Wert im Verhältnis zur Abbaurate und dem aeroben Abbau stärker, da die Feuchtigkeit im Material zunimmt, denn der Wasserverlust über die Gasphase ist geringer. Das freie Porenvolumen nimmt daher auch stärker ab.

Die große Höhensetzung beinhaltet auch den mikrobiologischen Abbau (Kapitel 6.1.8). Zudem beeinflusst die gewählte Schüttungsform (Zylinderreaktor) die Höhensetzung erheblich. Der Zylinderreaktor bewirkt in diesem Beispiel eine verhältnismäßig große Höhensetzung von 45 % (0,45 m/1,01 m).

Simulationsergebnisse physikalischer Parameter bei geringer Belüftung

Bei einer geringen konstanten Belüftungsrate von 0,005 m³/h sinkt das freie Porenvolumen bei einem vorgegebenen Anfangswert von 40 Vol.-% TS und 1 Materialhöhen-% Setzung von 35 auf 32,5 Vol.-% FS mit dem Wasseranteil, das Volumen sinkt auf 84,7 Vol.-%, die Materialhöhe von 1,01 m auf 0,73 m und der kf-Wert von 52,2 auf 46,9 m/d. Die Abbaurate beträgt 30 Gew.-% des abbaubaren Materials. Ohne Isolation werden Temperaturen bis 30 °C erreicht.

Bewertung und Begründung

Die geringe Belüftung bewirkt eine Hemmung vor allem der strikt anaeroben Mikroorganismen, weshalb weniger abgebaut wird und die betrachteten Werte entsprechend weniger sinken (siehe Anhang 14.2, Abbildung 14-3).

Simulationsergebnisse physikalischer Parameter bei hoher Belüftung

Bei einer hohen konstanten Belüftungsrate von 0,5 m³/h steigt das freie Porenvolumen bei einem vorgegebenen Anfangswert von 40 Vol.-% TS und 1 Materialhöhen-% Setzung von 35 auf 37 Vol.-% FS mit dem Wasseranteil, das Volumen sinkt auf 74,7 Vol.-%, die Materialhöhe von 1,01 m auf 0,57 m und der kf-Wert steigt von 52,2 auf 63,0 m/d. Die Abbaurate be-

trägt hierbei 41 Gew.-% des abbaubaren Materials. Ohne Isolation werden Temperaturen bis 32 °C erreicht.

Bewertung und Begründung

Wegen der hohen Belüftung trocknet das Material über die Zeit zunehmend aus, was zu einem Anstieg des freien Porenvolumens und des kf-Wertes führt (siehe Anhang 14.2, Abbildung 14-4). Die anderen Werte entsprechen den Werten bei ähnlicher Abbaurrate.

Simulationsergebnisse physikalischer Parameter anaerob mit Zwischenbelüftung

Bei konstanter Zwischenbelüftung mit 0,05 m³/h vom 20. bis 80. Tag unter anaeroben Bedingungen sinkt das freie Porenvolumen bei einem vorgegebenen Anfangswert von 40 Vol.-% TS und 1 Materialhöhen-% Setzung von 35 auf 32 Vol.-% FS mit dem Wasseranteil, das Volumen sinkt auf 79,1 Vol.-%, die Materialhöhe von 1,01 m auf 0,64 m und der kf-Wert von 52,2 auf 46,8 m/d. Die Abbaurrate beträgt etwa 35 Gew.-% des abbaubaren Materials. Mit Isolation werden während der Belüftungsphase Temperaturen bis 39 °C erreicht (siehe Anhang 14.2, Abbildung 14-5).

Bewertung und Begründung

Die Zwischenbelüftung bewirkt eine geringere Abbaurrate als ohne Belüftung oder mit optimaler Belüftung, da vor allem die anaeroben Mikroorganismen durch den Milieuwechsel gestört werden. Durch die geringere Abbaurrate sinken die betrachteten Werte entsprechend weniger, ähnlich der Werte mit geringer Belüftung.

Simulationsergebnisse physikalischer Parameter unter aeroben Bedingungen im Chargenbetrieb

Unter aeroben Bedingungen bei optimaler Belüftung und 20-tägigem Chargenbetrieb (ohne Materialaustrag) sinkt das freie Porenvolumen bei einem vorgegebenen Anfangswert von 40 Vol.-% TS und 1 Materialhöhen-% Setzung von 35 auf 32 Vol.-% FS mit dem Wasseranteil, das Volumen sinkt bis auf 94,8 Vol.-%, die Materialhöhe steigt auf 0,62 m an und der kf-Wert sinkt von 52,2 auf 46,0 m/d. Die Abbaurrate beträgt 54 Gew.-% des abbaubaren Materials. Ohne Isolation werden Temperaturen bis 61 °C erreicht.

Bewertung und Begründung

Gut zu erkennen ist der An- und Abstieg des Volumens und der Materialhöhe (siehe Anhang 14.2, Abbildung 14-6). Der berechnete Durchlässigkeitskoeffizient und das freie Porenvolumen sinken, da ohne Materialaustrag das Materialvolumen insgesamt stetig ansteigt und dadurch mehr Gewichtskraft auf die Porenräume wirkt, die dadurch verkleinert werden. Die

Temperatur sinkt insgesamt ebenfalls, da ein Teil der Wärme in das stetig zunehmende Material abfließt.

Simulationsergebnisse physikalischer Parameter unter aeroben Bedingungen mit Wasserzugabe

Unter aeroben Bedingungen mit einer konstanten Belüftungsrate von $0,07 \text{ m}^3/\text{h}$ sinkt das freie Porenvolumen bei einem vorgegebenen Anfangswert von 15 Vol.-% TS und 1 Materialhöhen-% Setzung und einer kontinuierlichen Wasserzugabe von 0,5 kg mit einer Temperatur von $20 \text{ }^\circ\text{C}$ täglich und einer einmaligen Zugabe von 10 kg am 50. Tag von 13 auf 7,5 Vol.-% FS mit dem Wasseranteil. Das Volumen sinkt auf 76,8 Vol.-%, die Materialhöhe von 1,01 m auf 0,60 m und der kf-Wert von 19,6 vor Wasserzugabe auf 1,58 m/d. Das Wasser führt zur Luftporenverringerng, wodurch der aerobe Abbau am 58. Tag zum Erliegen kommt (siehe Anhang 14.2, Abbildung 14-7). Die Abbaurate beträgt 45 Gew.-% des abbaubaren Materials und es entsteht 35,8 kg Sickerwasser und 7,8 kg Kondenswasser. Ohne Isolation werden Temperaturen bis $56 \text{ }^\circ\text{C}$ erreicht.

Bewertung und Begründung

Der berechnete Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) des Materials sinkt stark, da das freie Porenvolumen durch Wassersättigung gering ist. Das Volumen und die Höhe des Materials sinken deutlich, bis der Abbau zum Erliegen kommt. Dann steigen beide aufgrund der kontinuierlichen Wasserzugabe wieder leicht an, denn das Wasser retardiert im Material. Die Temperatur sinkt nach der Wassersättigung auf die Außentemperatur, da keine Abbauenergie mehr entsteht.

Simulationsergebnisse physikalischer Parameter unter anaeroben Bedingungen mit Wasserzugabe

Unter anaeroben Bedingungen sinkt das freie Porenvolumen bei einem vorgegebenen Anfangswert von 15 Vol.-% TS und 1 Materialhöhen-% Setzung und einer kontinuierlichen Wasserzugabe von 0,5 kg mit einer Temperatur von $20 \text{ }^\circ\text{C}$ täglich und einer einmaligen Zugabe von 10 kg am 50. Tag von 13 auf 8,5 Vol.-% FS mit dem Wasseranteil, das Volumen sinkt auf 82,6 Vol.-%, die Materialhöhe von 1,01 m auf 0,70 m und der kf-Wert von 19,6 vor Wasserzugabe auf 1,57 m/d. Die Abbaurate beträgt 31 Gew.-% des abbaubaren Materials und es entsteht 37,5 kg Sickerwasser und kaum Kondenswasser. Trotz Isolation steigt die Temperatur kaum (siehe Anhang 14.2, Abbildung 14-8).

Bewertung und Begründung

Das Wasser führt anaerob zur Vernässung, wodurch der pH-Wert so niedrig wird (nicht abgebildet), dass der Abbau stark verzögert ist. Durch den geringeren Abbau verliert das Mate-

rial unter anaeroben Bedingungen weniger an Volumen und Höhe als unter aeroben und sonst gleichen Bedingungen. Die Abbaurate ist unter anaeroben Bedingungen geringer, steigt aber kontinuierlich, da das fehlende Porenvolumen wegen der Wassersättigung die säurebildenden Mikroorganismen kaum stört.

Simulationsergebnisse physikalischer Parameter bei optimaler Belüftung und hoher Setzung

Das freie Porenvolumen sinkt bei optimaler Belüftung (siehe Kapitel 6.1.8) und einem vorgegebenen Anfangswert von 40 Vol.-% TS und 50 Materialhöhen-% Setzung von 35 auf 31 Vol.-% FS mit dem Wasseranteil, das Volumen sinkt auf 58,1 Vol.-%, die Materialhöhe von 1,01 m auf 0,34 m und der kf-Wert von 52,2 auf 40,7 m/d. Die Abbaurate beträgt 81 Gew.-% des abbaubaren Materials und es entsteht kein Sickerwasser, aber 7,1 kg Kondenswasser. Ohne Isolation werden Temperaturen bis 54 °C erreicht.

Bewertung und Begründung

Die simulierte 50 Materialhöhen-% Setzung, berücksichtigt wird bei diesem Wert nur die Setzung ohne mikrobiologischen Abbau (siehe Gleichung 6-34), ist vergleichsweise hoch (siehe Kapitel 6.1.8). Trotz der hohen Setzung bleibt das freie Porenvolumen, der kf-Wert und Wassergehalt (nicht abgebildet) im Rahmen der günstigen Milieubedingungen für aerobe Mikroorganismen. Der Abbau ist entsprechend groß, wodurch Volumen und Höhe aufgrund des geringen Anteils nicht abbaubaren Materials (6,4 kg FS) stark sinken (siehe Anhang 14.2, Abbildung 14-9).

8 Vergleich der Kompostierungssimulation mit einem Laborversuch

Die im Simulationsprogramm vorgegebenen sechs Laborversuche zur Kompostierung E1 bis E6 (Kapitel 6.2.9) sollen in diesem Kapitel beispielhaft anhand des Versuchs E6 dargestellt werden.

Für die Kompostierung müssen vor allem die Parameter Sauerstoffgehalt, Wassergehalt, Temperatur und pH-Wert eingehalten und ggf. eingestellt werden (Kapitel 5). Diese Werte sollen daher zusammen mit den ebenfalls in der Kompostierung wichtigen physikalischen Parametern aufgezeigt werden.

8.1 Parameter des Laborversuchs und Simulation der Kompostierung

Der Laborversuch E6 (siehe Tabelle 6-7 und 6-8) wurde dem BMBF-Projekt „Neue Techniken der Kompostierung“ als Beispiel mit den Messergebnissen entnommen (aus Körner et al., 1999) und mit den Werten der Simulation verglichen.

Die Laborversuche E1 bis E6 (Kapitel 6.2.9) wurden in der Praxis wie folgt durchgeführt (Körner et al., 1999):

Das zu behandelnde frische Substrat wurde in die luftdicht verschließbaren Reaktoren mit einem Nutzvolumen von etwa 100 l gefüllt. Die Reaktoren waren korrosionsbeständig und mit einem beheizbaren wassergefüllten Doppelmantel mit Isolierung ausgestattet. Die Zuluft gelangte von unten in den Reaktor und eine Füllkörperschicht unterstützte eine gleichmäßige Verteilung über die gesamte Bodenfläche in das Material. Ringe an den Reaktorwänden verbesserten die Luftverteilung in das Substrat und beschränkte Kurzschlussströmungen. Die Abluft wurde an der Reaktoroberfläche abgeleitet und gemessen. Ein Ablasshahn an der Reaktorunterseite ermöglichte die Entnahme von Sicker- bzw. Prozesswasser.

Temperierung: Es erfolgte eine Simulation der Selbsterhitzung, indem die Wärmeverluste an die Umgebung durch Beheizung des Wassermantels ausgeglichen wurden. Wenn die entsprechende Temperatur um 2 - 3 °C niedriger war als die Temperatur im Substratinneren, wurde das Wasser automatisch beheizt.

Belüftung: Die Belüftung diente hauptsächlich der Sauerstoffzufuhr und der Einstellung unterschiedlicher Sauerstoffgehalte in der Gasphase. Ein Durchflussmesser in Kombination mit einem Regulierventil ermöglichte die Einstellung eines Zuluftvolumenstromes zwischen 0 und 350 l/h. Während des Prozesses wurde die Belüftungsmenge in Abhängigkeit von dem Prozessverlauf manuell geregelt. Die Belüftung erfolgte mit Frischluft bei Raumtemperatur.

Befeuchtung: Die Befeuchtung diente der Einstellung des Wassergehalts des Substrats während der Kompostierung. Die erforderlichen Wasserzugaben wurden auf Basis des Wasser-

gehalts der Substrate ermittelt. Das Kondenswasser wurde nicht wieder in den Behälter zurückgeleitet.

Werte des Laborversuchs E6

Das Substrat bestand aus Modellabfall (E6, Tabelle 6-6 und 6-7), der dem Bioabfall ähnlich und reich an schnellabbaubaren Küchenabfällen war.

Die Werte im Einzelnen waren beim Befüllen des Reaktors:

Material:	Äpfel: 7 Gew.-% TS, Kartoffeln: 5 Gew.-% TS, Rüben: 3 Gew.-% TS, Weizen: 43 Gew.-% TS, Erbsen: 16 Gew.-% TS, Fleischmehl: 2 Gew.-% TS, Holz: 15 Gew.-% TS, Kalk: 9 Gew.-% TS
Trockensubstanz:	31,3 kg
Wassergehalt:	50 Gew.-%
pH-Wert:	6,1 - 6,5
Schüttdichte:	0,8 Mg/m ³ FS
Organische Trockensubstanz (oTS):	82 - 85 %
C/N:	20 – 25

Simulationsparameter des Laborversuchs Kompostierung

Für die Simulation wurden die folgenden geänderten Werte der in Kapitel 7.1 aufgeführten Parameter vorgegeben bzw. aus dem Laborversuch übernommen:

Material:	Äpfel: 7 Gew.-% TS, Kartoffeln: 5 Gew.-% TS, Rüben: 3 Gew.-% TS, Weizen: 43 Gew.-% TS, Erbsen: 16 Gew.-% TS, Fleischmehl: 2 Gew.-% TS, Holz: 15 Gew.-% TS, Kalk: 9 Gew.-% TS (wie Laborversuch)
Materialgesamtmenge:	31,3 kg TS (wie Laborversuch)
Organische Trockensubstanz (oTS):	100 Massen-% (ohne Kalk) (Laborversuch: 82 – 85 %)
C/N:	44 (Laborversuch: 20 – 25)
Belüftung:	ja (aerobe Betriebsweise) (wie Laborversuch)
Art der Belüftung:	Belüftungsdatei (siehe Laborversuch, Tabelle 6-8), prozentuale Erniedrigung des Luftstroms um 80 %
Dauer der Behandlung:	160 Tage (wie Laborversuch)
Temperatur der Belüftungsluft:	20 °C (wie Laborversuch)
Feuchtigkeit der Belüftungsluft:	60 RH-% (wie Laborversuch)
Schüttdichte des Substrats:	0,8 Mg/m ³ FS (wie Laborversuch)
Isolation:	ja (wie Laborversuch)
Wassermantel:	ja (wie Laborversuch)
Temperaturnachführung:	3 °C (wie Laborversuch)
Kondensat:	Entnahme (wie Laborversuch)
Trockensubstanzgehalt des Substrats:	50 Gew.-% (wie Laborversuch)
Zuschlagsstoffe:	2,82 kg Kalk (wie Laborversuch)

8.2 Laborwerte und Simulationsergebnisse im Vergleich

In der Simulation beträgt die Abbaurrate 81 Gew.-% des abbaubaren Materials (Abbildung 8-2) und es entsteht kein Sickerwasser, aber 12,8 kg Kondenswasser. Der reale Laborversuch zeigte eine ähnliche Abbaurrate von 77 Gew.-%.

Für den Vergleich mit den empirisch ermittelten Messdaten wurde der Wassergehalt, Kohlendioxid- und Sauerstoffgehalt, pH-Wert und Substrattemperatur (siehe Anhang 14.4, Tabelle 14-6) im zeitlichen Verlauf der Simulation gegenübergestellt (Abbildung 8-1):

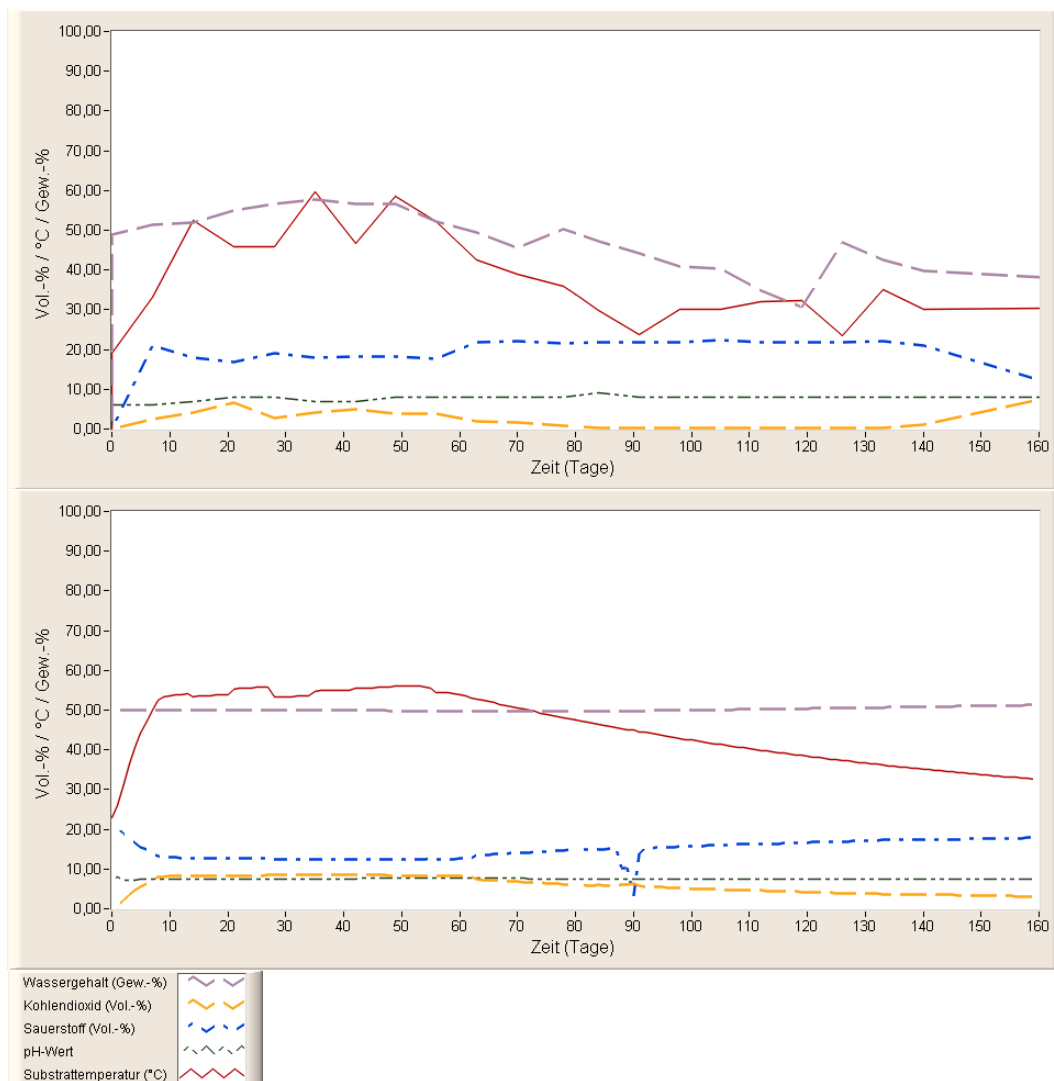


Abb. 8-1: Simulationsergebnis: Im Laborversuch E6 analysierte Werte des Wassergehalts, des Kohlendioxid- und Sauerstoffanteils mit pH-Wert und Substrattemperatur (oben) im Vergleich zu Werten der Simulation des Laborversuchs (unten)

Der Vergleich zeigt Ähnlichkeiten der Kurvenverläufe. Der Wassergehalt sinkt in der Simulation nicht. Die Ursache liegt in der simulierten gleichmäßigen Belüftungsreduzierung um 80 % und geringfügig an der relativ hohen Belüftungstemperatur und -feuchtigkeit. Dadurch wird deutlich weniger Wasser ausgetragen. Auch fiel in der Simulation kein Sickerwasser an,

da die Wasserhaltekapazität nicht überschritten wurde. In realen Laborversuchen entsteht in der Regel Sickerwasser aufgrund der Inhomogenität des Materials oder Belüftungsschwankungen. Dies wird in diesem Vergleich nicht sichtbar. Kohlendioxid- und Sauerstoffanteile in der Abluft sind vergleichbar, wenn Schwankungen des Luftstroms durch Materialveränderung oder Pumpenunregelmäßigkeiten (Belüftungsschwankungen) unberücksichtigt bleiben. Diese können in der Simulation nicht erfasst werden, es sei denn, eine taggenaue Aufzeichnung des Luftstroms ist vorhanden. Diese Werte könnten dann in das Programm eingegeben werden, wodurch sich die Kurvenverläufe, vor allem Kohlendioxidkonzentrationen, Sauerstoffkonzentrationen und die Substrattemperatur, weiter angleichen würden. Die in der Simulation verwendeten Werte wurden aber aufgrund fehlender Messdaten für die Belüftungsdatei zum Teil interpoliert, wodurch Schwankungen überbrückt worden sind. Auch können Schwankungen des prozentualen Sauerstoffanteils in der Abluft in der Simulation u. a. durch Verbrauch des Sauerstoffs für Stickstoff- oder Schwefeloxidationen bzw. durch Produktion von Distickstoff, Distickstoffoxid, Ammoniak oder Schwefelwasserstoff verursacht werden, die im realen Laborversuch weniger deutlich sichtbar sind.

Der pH-Wert im Laborversuch stieg im Sickerwasser von 6 am Anfang, 7 nach 14 Tagen und 8 nach 28 Tagen. In der Simulation lag der pH-Wert zwischen 7 und 8 aufgrund der simulierten Kalkzugabe (2,82 kg). Im realen Laborversuch könnten durch Inhomogenität und Belüftungsschwankungen am Anfang anaerobe Zonen entstanden sein, die zu niedrigeren pH-Werten geführt haben. Auch eine nicht optimale Vermischung des Kalks mit dem Material könnte Ursache sein. In der Simulation wird von einer weitgehend homogenen Verteilung des Kalks ausgegangen. Inhomogenitäten werden berücksichtigt, indem nur 90 % des Kalks in die Berechnungen einfließen (Kapitel 6.1.10). Der pH-Wert kann z. B. durch weniger Kalkzugabe eingestellt werden.

Die simulierte Substrattemperatur ist mit dem Laborversuch vergleichbar. Sie steigt am Anfang bis auf fast 60 °C, um am Ende auf etwa 30 °C abzufallen. Der Temperaturabfall ist in der Simulation weniger stark ausgeprägt, was im Wesentlichen an den interpolierten Belüftungswerten und der angenommenen gleichmäßigen Durchströmung des Materials liegt.

8.3 Simulationsergebnisse physikalischer Parameter des Laborversuchs

Das freie Porenvolumen sinkt bei einem vorgegebenen Anfangswert von 40 Vol.-% und 1 Materialhöhen-% Setzung von 35 auf 33 Vol.-% FS mit dem Wasseranteil, das Volumen sinkt auf 52,3 Vol.-%, die Materialhöhe von 0,69 m auf 0,19 m und der kf-Wert nimmt von 38,8 auf 34,7 m/d ab bei einer Abbaurate von 81 Gew.-% des abbaubaren Materials (Abbil-

dung 8-2). Die simulierte Substrattemperatur steigt am Anfang bis auf fast 60 °C, um am Ende auf etwa 30 °C abzufallen (Kapitel 8.2).

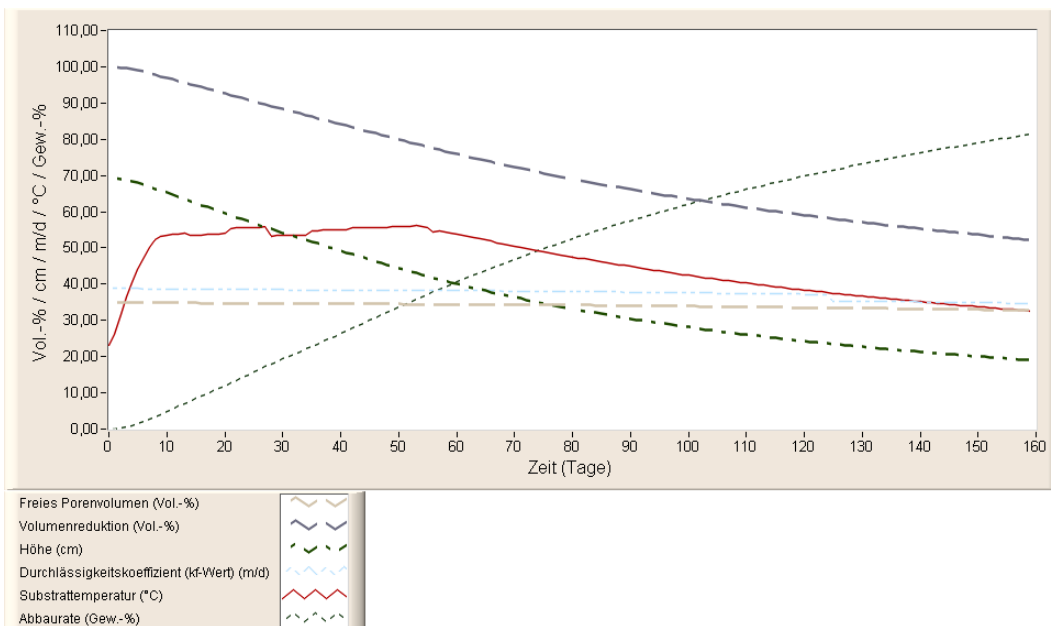


Abb. 8-2: Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurrate in der Simulation des Laborversuchs E6

Die Abnahme des freien Porenvolumens und des kf-Wertes entspricht den Erwartungen, denn in der Wirklichkeit wird das Material durch Abbauprozesse zerkleinert, wodurch diese beiden Werte sinken. Wegen des nicht abbaubaren Strukturmaterials bleibt die Durchlässigkeit aber in dem Zeitraum von 160 Tagen grundsätzlich erhalten. Die Volumenabnahme dagegen ist auf den hohen Anteil abbaubarer Substanz zurückzuführen. Der reale Laborversuch E6 zeigte vergleichsweise auch eine erhebliche Höhenabnahme von 0,82 m auf 0,20 m.

9 Empirische Ergebnisse aus der Literatur im Vergleich zur Simulation

Um die durchgeführten beispielhaften Simulationen mit dem Programm besser beurteilen zu können und die Werte auf Plausibilität hin zu überprüfen, werden im Folgenden simulierte Ergebnisse mit denen durchgeführter Versuche und empirischen Werten in Veröffentlichungen verglichen und Informationen hierzu aus der Literatur zusammengestellt (Simulationsmodellvalidierung).

Grundsätzlich ist der Vergleich mit empirisch gewonnenen Daten jedoch schwierig. Selbst untereinander lassen sich die empirischen Werte realer Bedingungen häufig nicht vergleichen. Emissionsuntersuchungen mit unterschiedlichen Materialien (wie Restmüll, Hausmüll, Bioabfall, synthetischem Bioabfall, Grünschnitt, Klärschlamm und Gewerbeabfall) und unterschiedliche Behandlungsverfahren und Behandlungsweisen lassen sich nur eingeschränkt gegenüberstellen. Sogar Untersuchungen z. B. mit gleichartigem Bioabfall sind nicht ohne weiteres vergleichbar, da die Zusammensetzung des Bioabfalls regional und saisonal starken Schwankungen unterliegt (u. a. Krogmann, 1994, Weppen et al., 1998a,b, Körner et al., 1999).

Eine Validierung des Simulationsmodells ist dennoch notwendig und kann über die aufgeführten Beispiele hinaus durch eine Vielzahl von Simulationen und Vergleichen auch in Zukunft weiter zur Verbesserung des Simulationsmodells führen.

9.1 Vergleich: Stickstoff in der Kompostierung

Für den Vergleich von Simulationsergebnissen bezüglich des Stickstoffs während der Kompostierung werden die Ergebnisse von Körner (2009) herangezogen, da zahlreiche Laborversuche (Anzahl: 53) und eine umfangreiche Literaturzusammenfassung zu diesem Thema durchgeführt wurden. Körner (2009) stellte fest, dass ein Großteil der aus dem globalen Stickstoff-Kreislauf bekannten Prozesse auch für die Kompostierung bedeutsam sind. Die wesentlichen Transformationsprozesse sind die Ammonifikation organischer Stickstoffverbindungen, die Nitrifikation, die Denitrifikation und die Ammonium/Ammoniak-Immobilisierung. Im Substrat hat organischer Stickstoff zu jedem Zeitpunkt der Kompostierung den größten Stickstoffanteil. Ammonium/Ammoniak-Stickstoff ist kontinuierlich präsent, wobei die Anteile jedoch während des Prozesses stark variieren. Nitrat-N und vor allem Nitrit-N sind seltener und nur in bestimmten Phasen und meistens nur in geringen Konzentrationen enthalten. Die wesentlichen Stickstoffemissionen erfolgen über die Abluft in Form von Ammoniak und produziertem Distickstoff mit phasenweise unterschiedlicher Intensität. Distickstoffoxid ist selten und quantitativ für Bilanzierungen nicht relevant, kann jedoch als Spurenstoff klimawirksam sein. Stickstoff-N-Auswaschungen mit dem Sickerwasser können für

eine Bilanzierung relevant sein, treten jedoch nicht immer auf, da nicht zwangsläufig in der entsprechenden Phase Sickerwasser gebildet wird. Im Substrat enthaltenes Ammonium/Ammoniak kann als Ammoniak über die Abluft entweichen. Der Stoffaustrag erfolgt vermehrt durch aktive Belüftung oder durch natürliche Konvektion. Dadurch kommt es zu einer Neueinstellung des Ammonium/Ammoniak-Gleichgewichtes im Substrat (Körner, 2009).

Die Ammonifikation und der damit verbundene mögliche Ammoniakverlust über die Abluft und die Denitrifikation mit eintretender Distickstoffemission sind daher die zu beachtenden Hauptvorgänge des Stickstoffverlustes bei der Kompostierung.

Simulationsergebnis zum Verbleib des Stickstoffs in der Kompostierung

Auch in den Simulationen (Kapitel 7.2.8 und 7.2.9) tritt Nitrat-N und vor allem Nitrit-N selten und nur in bestimmten Phasen und nur in geringen Konzentrationen auf. Die wesentlichen Stickstoffemissionen erfolgen über die Abluft in Form von Ammoniak und produziertem Distickstoff mit phasenweise unterschiedlicher Intensität (Abbildung 9-1). Der Stickstoffanteil ist im Substrat immer am höchsten, da nicht alles abgebaut wird.

Zur differenzierteren Darstellung wurde ergänzend der in Kapitel 8 beschriebene Laborversuch E6 gewählt. Das Substrat bestand aus Modellabfall (E6, Tabelle 6-6 und 6-7), der dem Bioabfall ähnlich und reich an schnellabbaubaren Küchenabfällen war. Es erfolgte eine Simulation der Selbsterhitzung, indem die Wärmeverluste an die Umgebung durch Beheizung des Wassermantels ausgeglichen wurden. Während des Prozesses ist die Belüftungsmenge in Abhängigkeit von dem Prozessverlauf mit Frischluft und Raumtemperatur manuell geregelt worden. Die erforderlichen Wasserzugaben wurden auf Basis des Wassergehalts der Substrate ermittelt. Das Kondenswasser wurde nicht wieder in den Behälter zurückgeleitet.

Die Simulation des Laborversuchs zeigte Ammoniak-N-Emissionen von insgesamt 8,4 g (das entspricht 14,5 l Ammoniak bei 20 °C und 1013,25 mbar) und Ammonium-N-Konzentrationen von bis zu 37,8 mg/l bei einem C/N-Verhältnis am Anfang von 44. Es wurden insgesamt 7,8 g Distickstoff-N (das entspricht 6,7 l Distickstoff bei 20 °C und 1013,25 mbar) am Anfang und ab dem 88. Tag gebildet. Ebenfalls ab dem 88. Tag ist Nitrat-N mit bis zu 39,3 mg/l in der Wasserphase von dem Simulationsprogramm berechnet worden. Nitrit-N und Distickstoffoxid-N traten nicht auf. Damit entwichen insgesamt 16,2 g Stickstoff über die Gasphase.

In der Abbildung 9-1 sind die Konzentrationsverläufe der entstandenen Stickstoffverbindungen mit der Substrattemperatur und dem pH-Wert in der Simulation des Laborversuchs E6 dargestellt.

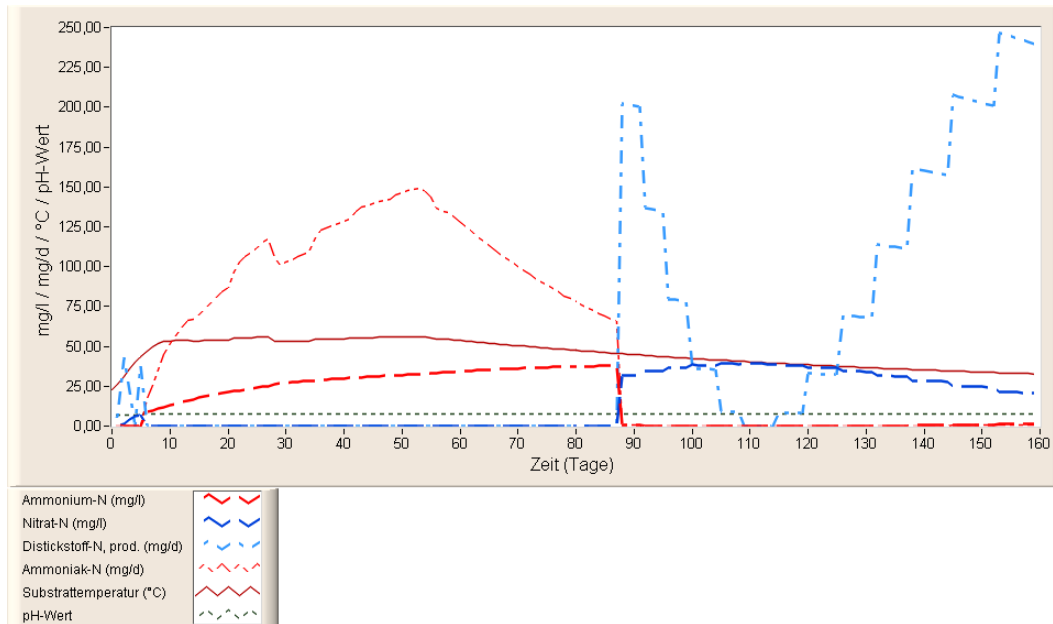


Abb. 9-1: Simulationsergebnis: Ammonium-N, Nitrat-N, produzierter Distickstoff-N und Ammoniak-N mit Substrattemperatur und pH-Wert in der Simulation des Laborversuchs E6

Der reale Laborversuch E6 zeigte bei ähnlicher Abbaurrate (77 Gew.-% Materialverlust, in der Simulation 81 Gew.-% des abbaubaren Materials) ein vergleichbares Ergebnis. Produzierter Distickstoff und Distickstoffoxid konnten messtechnisch nicht erfasst werden. Abgeschätzt nach Körner (2009) betrug die Distickstoff-N-Gesamtbildung 35,7 g (11,9 - 59,5 g, Maximum: 118,9 g) in dem Laborversuch E6. Ab dem 126. Tag wurden geringe Nitratkonzentrationen bis maximal 0,15 mg/l Nitrat-N gemessen, Nitrit wurde nicht nachgewiesen und Ammoniak-N kann nach Berechnung auf Basis von Messwerten (Körner, 2009) mit 29,7 g Emission insgesamt über die Gasphase angenommen werden (Bereich: 29,7 - 267,6 g, Maximum: 416 g). Des Weiteren sind Ammonium-N-Konzentrationen in der Wasserphase in vergleichbaren Versuchen zwischen 0,01 bis 17 g/l (Mittelwert: 2,1 g/l) und Nitrat-N-Konzentrationen in weiteren Versuchen in ein Fünftel der Proben zwischen 0,1 und 2700 mg/l (Mittelwert: 351 mg/l, Median: 15 mg/l) gemessen worden. Nitrit-N trat selten auf und wenn, dann bis höchstens 0,2 % der Substrattrockenmasse. Die Bildung von Distickstoffoxid war selten feststellbar und quantitativ nicht relevant (Körner, 2009).

Zusammengefasst zeigt der Vergleich des Laborversuchs E6 mit der Simulation des Laborversuchs Ammoniak-N-Emissionen von insgesamt 8,4 g (Laborwerte: 29,7 - 267,6 g, Maximum: 416 g) und Ammonium-N-Konzentrationen von bis zu 0,038 g/l (Laborwerte: 0,01 - 17 g/l, Mittelwert: 2,1 g/l) bei einem C/N-Verhältnis am Anfang von 44 (Laborwerte: 20 - 25). Ammonium-N wurde aber auch bis zu Konzentrationen von 18 g/l simuliert (Kapitel 7.2.8). Es ist in der Simulation insgesamt 7,8 g Distickstoff-N (Distickstoff-N-

Gesamtbildung abgeschätzt nach Körner (2009) im Laborversuch E6: 35,7 g in einem Bereich von 11,9 - 59,5 g, Maximum: 118,9 g) gebildet worden. In weiteren Simulationen trat produzierter Distickstoff-N in niedrigeren und höheren Konzentrationen auf. Nitrat-N trat in der Simulation des Laborversuchs E6 mit bis zu 39,3 mg/l auf (Laborwerte: 0,1 - 2700 mg/l (Mittelwert: 351 mg/l, Median: 15 mg/l)). Nitrit-N und Distickstoffoxid-N konnten in der Simulation des Laborversuchs E6 nicht festgestellt werden (Laborwerte: Nitrit-N und Distickstoffoxid-N waren selten feststellbar).

Mit zu bedenken ist, dass die Gesamtemissionen von der Abbaurate abhängig sind. Bei einer Abbaurate von 81 Gew.-% wie in der Simulation ist daher mit höheren Frachten zu rechnen, als bei einer Abbaurate von 77 Gew.-% z. B. des Laborversuchs. Die Stickstoffemissionen sind auch von dem C/N-Verhältnis abhängig (Kapitel 5.6). Ein hohes C/N-Verhältnis bedeutet einen geringeren Stickstoffanteil und eine im Verhältnis niedrigere mögliche Emission von Stickstoffverbindungen.

Weitere Simulationsergebnisse zeigten, dass bei optimaler Belüftung geringe Mengen Distickstoff-N und Distickstoffoxid-N produziert werden. Ammoniak entweicht im Verhältnis zu Ammonium solange stärker, bis Nitrat-N bzw. Nitrit-N entsteht. Verringert man den Belüftungsstrom, sinkt der pH-Wert und die Stickstoffemissionen über die Gasphase nehmen ab. Bei hoher Belüftung wird weniger Stickstoff über die Gasphase emittiert und das fast ausschließlich als produziertes Distickstoff-N. Des Weiteren entstehen höhere Konzentrationen Nitrat-N und Nitrit-N. Diese Zusammenhänge entsprechen denen von Körner (2009) in verschiedenen Laborversuchen nachgewiesenen Verläufen.

Die Untersuchungen von Körner (2009) zeigten weiterhin, dass in fast allen Versuchsreihen eine Distickstoffbildung nachgewiesen werden konnte. Auch Versuchsreihen ohne nachweisbares Nitrat-Budget im Substrat zeigten eine deutliche Distickstoff-Generierung, was auf den simultanen Verbrauch von Nitrat zur Distickstoffbildung zurückgeführt wird. Die Distickstoffbildung ist jedoch höher, wenn parallel Nitrat detektiert wird. Eine Abschätzung der durchschnittlichen Distickstoff-N-Generierung ergab Werte von 2 bis 10 % des initialen Stickstoffgehalts, aber auch Werte bis zu 20 % des initialen Stickstoffs.

Auch in den Simulationen ist die Distickstoffbildung höher, wenn parallel dazu Nitrat auftritt. Der Laborversuch E6 zeigte in der Simulation eine Distickstoff-N-Produktion von 1,3 % des initialen Stickstoffgehalts in Höhe von 1,9 % TS und die Simulation bei optimaler Belüftung 14,3 %, also Werte, die der Abschätzung von Körner (2009) ähnlich sind.

Die Simulationsergebnisse sind trotz der vielen Einflüsse sehr nahe an den Laborwerten. Die vereinfachenden Annahmen im Simulationsmodell reichen demnach aus, um die Zusammenhänge nachvollziehbar darzustellen.

Gesamt-Stickstoffbilanz des abbaubaren Substrats zwischen Fest-, Flüssig- und Gasphase

In der Bilanz wird deutlich, dass der Stickstoff (N) aus dem Substrat in der geschilderten Simulation des Laborversuchs E6 mit einer Abbaurrate von 81 Gew.-% beim Abbau im Wesentlichen über die Wasserphase emittiert wurde (Abbildung 9-2), nämlich 69 Massen-%. In der Gasphase des Feststoffs befand sich in dieser Simulation kaum Stickstoff (am Ende nur 9 Massen-%), was an den von dem realen Laborversuch übernommenen Belüftungsdaten und der zur Simulation stark reduzierten Belüftungsmenge liegt. Der Stickstoff entwich konzentrationsabhängig aus der Wasserphase in die Gasphase. Da in diesem Beispiel kein Sickerwasser auftrat, fand kein Stickstoffverlust über die Wasserphase statt.

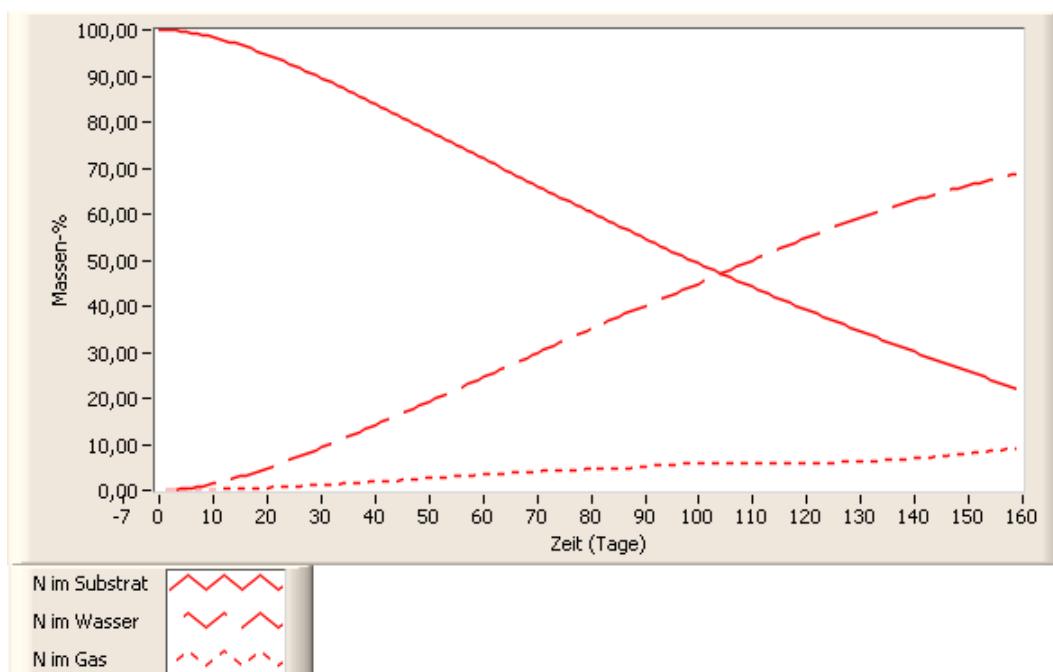


Abb. 9-2: Simulationsergebnis: Gesamt-Stickstoff (N)-Bilanz des abbaubaren Substrats im simulierten Laborversuch E6

Es gibt viele weitere veröffentlichte Untersuchungen zum Verbleib des Stickstoffs während des Kompostierungsprozesses. So stellten z. B. Delschen et al. (1996) fest, dass Stickstoff während der Kompostierung in komplexen organischen Verbindungen eingebaut wird. Gronauer und Helm (1996) bestätigten, dass Stickstoffverluste mit dem Gesamtabbau der organischen Substanz korrelieren und nehmen an, dass Stickstoff hauptsächlich über die Gasphase in Form von Ammoniak entweicht (auch Körner, 2009).

Die Simulationsergebnisse sind demnach den empirischen Beobachtungen sehr ähnlich. Die wesentlichen Stickstoffemissionen erfolgen in der Simulation beim aeroben Abbau im Wesentlichen über die Gasphase (Abbildung 7-18). Bei geringer Belüftung und mit zunehmendem Wassergehalt wird Stickstoff stärker über die Wasserphase emittiert, wie mit dem

Laborversuch E6 gezeigt werden konnte (Abbildung 9-2). Die mengenmäßig bedeutsamsten Emissionen über die Gasphase sind in der Simulation die Verbindungen Ammoniak und produzierter Distickstoff mit phasenweise unterschiedlicher Intensität (Abbildung 9-1). Dies entspricht den Ergebnissen von Körner (2009). Da produzierter Distickstoff wegen des hohen Stickstoffanteils in der Luft schwer nachzuweisen ist, könnten die Simulationswerte ergänzende Ergebnisse sein und weitere Erkenntnisse ermöglichen.

9.2 Vergleich: Parameter großtechnischer Biogasanlagen

Für den Vergleich von Simulationsergebnissen mit Parametern großtechnischer Biogasanlagen werden Daten dreier Biogasanlagen beispielhaft dargestellt.

Beim Vergleich ist zu beachten, dass die Prozesssimulation nur die Trockenvergärung vorsieht. Im Folgenden kann aber gezeigt werden, dass das Simulationsprogramm auch für die Nassvergärung eingesetzt werden kann, wenn man Durchströmungsprobleme bei der Belüftung außer Acht lässt. Der hohe Wassergehalt bei der Nassvergärung hat verfahrenstechnische Vorteile wie die Pumpfähigkeit für die Befüllung und Entleerung der Reaktoren und eine leichtere Durchmischbarkeit und damit Homogenität des Materials und des Substrats. Für die Simulation ist nur die Homogenität relevant, die durch die Raumkontinuität vorgegeben ist. Eine Vergleichbarkeit der realen Prozesse - auch der Nassvergärung - mit Simulationsergebnissen ist also bei ausreichendem Wassergehalt gewährleistet. Wichtig für den Vergleich mit Nassvergärungsverfahren ist der Nährstoffgehalt des Substrats und die Temperatur. Beim Vergleich ist daher weiter zu beachten, dass die Prozesssimulation nicht die abweichenden Abbauege mesophiler und thermophiler Mikroorganismen berücksichtigt, jedoch die unterschiedlichen temperaturabhängigen Abbauprodukten. Über die Temperatur können mesophile oder thermophile Bedingungen gewählt werden, wobei die temperaturabhängige Hemmung säurebildender Mikroorganismen (Optimum liegt bei 30 °C (Mudrack und Kunst, 1991)) unberücksichtigt bleibt (siehe Kapitel 6.1.3 und Abbildung 6-3). Temperaturunterschiede bewirken, wie in realen Prozessen, auch in der Simulation eine andere Verteilung von Stickstoff und Schwefel. Zudem ändert sich der Wasserhaushalt, da bei höheren Temperaturen der Wasserdampfaustritt bei gleichzeitiger Gasproduktion steigt. Wenn keine Kondensatrückführung erfolgt, ist der Einfluss deutlich zu erkennen. Temperaturabhängige Viskositäten, Diffusionskoeffizienten und unterschiedliche temperaturabhängige Wasserlöslichkeiten z. B. von Fetten werden in der Simulation indirekt durch Erhöhung bzw. Erniedrigung des Abbaus mit der Temperatur berücksichtigt (Kapitel 6.1.3).

Für den Vergleich der Biogasmengen mit Simulationsergebnissen wurden großtechnisch produzierte Biogasmengen von Bioabfallvergärungsanlagen, die nach dem Nassverfahren

arbeiten, herangezogen. Grundsätzlich schwierig und zu berücksichtigen ist die eingeschränkte Vergleichbarkeit durch abweichende Abbauraten, unterschiedliche Materialzusammensetzungen - vor allem im Abfallbereich kaum erfassbare und reproduzierbare Materialinhalte -, verschiedene Messmethoden, Bezugnahmen (z. B. TS, oTS, FS usw.) und Betriebsführungen bzw. Anlagengestaltungen.

In der Abbildung 9-3 sind beispielhaft Biogaskennzahlen von den drei Bioabfallvergärungsanlagen Nottensdorf (Poetsch, 2005), Kehlheim (Hoppenheidt et al., 1998) und Karlsruhe (Gallert et al., 2002) dargestellt.

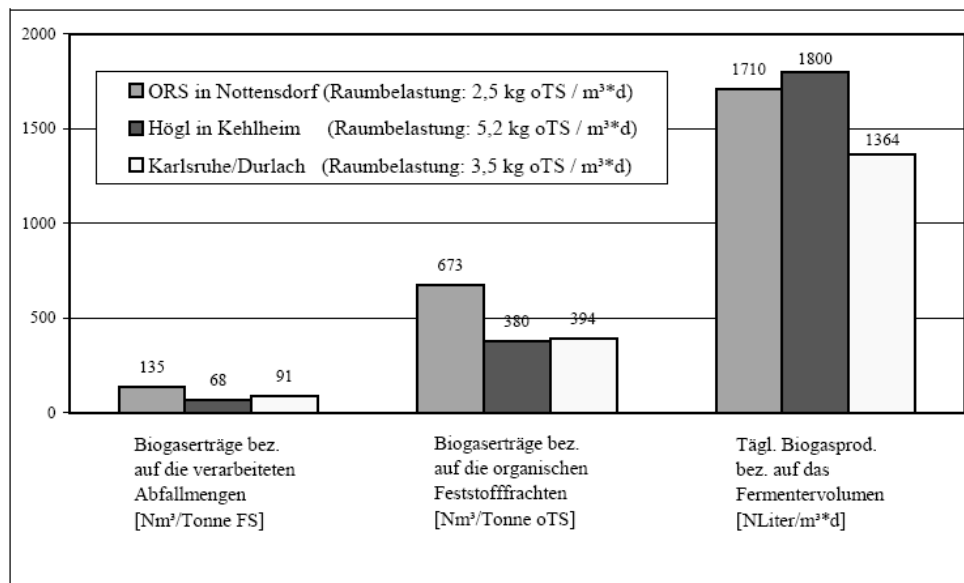


Abb. 9-3: Biogaskennzahlen der Bioabfallvergärungsanlagen Nottensdorf, Kehlheim und Karlsruhe im Vergleich (aus Poetsch, 2005)

Die Biogasanlage ORS in Nottensdorf (Raumbelastungen: 2,5 kg oTS/(m³·d), thermophil) wurde mit 135 m³/Mg FS, 673 m³/Mg oTS und 1710 l/(m³·d) Biogasproduktion, die Biogasanlage Högl in Kehlheim (Raumbelastungen: 5,2 kg oTS/(m³·d), mesophil) mit 68 m³/Mg FS, 380 m³/Mg oTS und 1800 l/(m³·d) Biogasproduktion und die Biogasanlage Karlsruhe/Durlach (Raumbelastungen: 3,5 kg oTS/(m³·d), mesophil) wurde mit 91 m³/Mg FS, 394 m³/Mg oTS und 1364 l/(m³·d) Biogasproduktion angegeben (Abbildung 9-3).

Die Simulationsergebnisse wurden mit Karlsruhe (Baden-Württemberg) ausführlicher verglichen, da kommunaler Bioabfall ohne Co-Substrate eingesetzt wurde. Bioabfall ist im Programm integriert und kann als Vorgabe gewählt werden. Co-Substrate können ergänzend eingegeben werden, müssen hierzu aber als Fraktion oder in der Zusammensetzung bekannt sein. Die Raumbelastung der Karlsruher Biogasanlage betrug laut Angaben 3,5 kg oTS/(m³·d) (Gallert et al., 2002). Die Abbaurate der organischen Substanz lag bei

mesophiler Betriebsweise etwa bei 86 %. Da das Reaktorvolumen 1350 m^3 und die verarbeitete Abfallmenge 20 Mg/d betrug, war die Verweilzeit etwa 68 Tage (Gallert et al., 2002).

Für den Vergleich wurde das Fallbeispiel aus Kapitel 7.1 mit $20 \text{ kg FS Bioabfall}$, einer Verweilzeit von 120 Tagen und mit einer Zugabe von 1 kg Kalk zu Beginn genommen. Das entsprach genau einer Charge des noch folgenden simulierten quasi-kontinuierlichen Prozesses. Die Simulation erfolgte also mit einer 1000fach geringeren Substratmenge als in der Biogasanlage Karlsruhe. Durch Umrechnung bzw. Bezugnahmen wurden die Werte aber mit den größeren Mengen vergleichbar (Tabelle 6-9). Die Temperatur wurde mit $45 \text{ }^\circ\text{C}$ auf mesophile Bedingungen im oberen Bereich (Tabelle 5-1) eingestellt. Die Gasemissionen wurden auf $20 \text{ }^\circ\text{C}$ und $1013,25 \text{ mbar}$ normiert, um die Werte mit nicht normierten oder mit Werten ohne Angaben besser vergleichen zu können. Mit diesen Vorgaben wurde zunächst eine Biogasanlage im Batchbetrieb simuliert.

Simulation einer Biogasanlage im Batchbetrieb

Die Raumbelastung betrug mit den geschilderten Vorgaben in der Simulation im Batchbetrieb $3,5 \text{ kg oTS}/(\text{m}^3 \cdot \text{d})$ mit einer dazugehörigen Verweilzeit von 120 Tagen. Die Abbaurate stieg nach anfänglicher Verzögerungsphase stetig auf etwa 50 Gew.-% der abbaubaren organischen Substanz (Abbildung 9-4). Der Kurvenverlauf in der Abbildung 9-4 zeigt, dass erst am Ende der Verweilzeit die stabile Methanphase erreicht wurde und sich ein stabiles Verhältnis von Methan (CH_4) mit etwa 53 Vol.-% und Kohlendioxid (CO_2) mit etwa 47 Vol.-% einstellte.

In der Abbildung 9-4 ist auch ersichtlich, dass der mit der Befüllung eingetragene Sauerstoff (O_2) am ersten Tag veratmet wurde und der Stickstoff (N_2) aus der Luft am Anfang mit dem produzierten Gas entwich. Wasserstoff (H_2) wurde nur gering am Anfang ($0,3 \text{ l}$ insgesamt) emittiert.

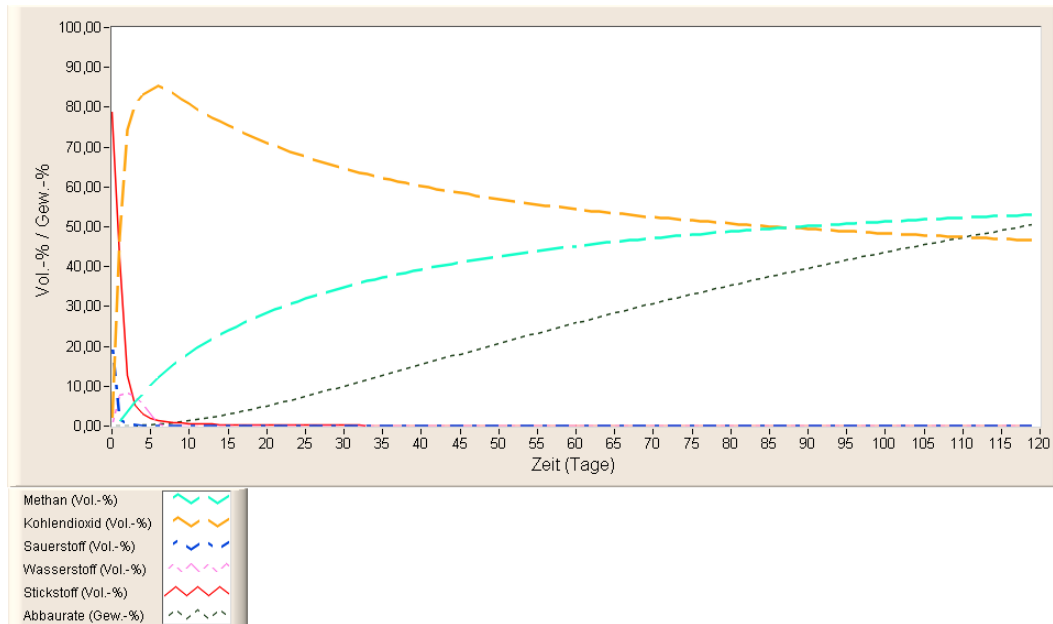


Abb. 9-4: Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung des produzierten Biogases und Abbaurrate von Bioabfall in der Simulation einer Biogasanlage im Batchbetrieb

Simulation einer Biogasanlage im quasi-kontinuierlichen und eingefahrenen Betrieb

Für einen weiteren Vergleich erfolgte die Simulation einer Biogasanlage im quasi-kontinuierlichen und eingefahrenen Betrieb.

Hierzu wurde wieder das Fallbeispiel aus Kapitel 7.1 aber mit 1400 kg FS (entspricht 70 · 20 kg FS) Bioabfall und mit Zugabe von 1 kg Kalk täglich genommen. Die ergänzten bzw. geänderten Werte (weitere Parameter siehe Kapitel 7.1) im Einzelnen waren:

Geänderte Simulationsparameter (weitere Parameter siehe Kapitel 7.1)

Material:	Bioabfall
Materialgesamtmenge:	1400 kg FS
Organische Trockensubstanz (oTS):	89 Massen-%
Belüftung:	nein (anaerobe Betriebsweise)
Dauer der Behandlung:	70 Tage
Isolation:	ja
Wassermantel:	ja (200 l) , Temperatur auf ca. 45 °C (mesophil) geregelt
Breite oder Durchmesser der Materialschüttung:	1,5 m
Chargenbetrieb:	ja (eingefahrener Zustand)
Materialzufuhr oder/und –entnahme:	auto. ab Tag 0
Materialzufuhr:	täglich ohne Lufteintrag
Materialentnahme:	6,3 kg FS täglich
Zuschlagsstoffe:	1 kg Kalk täglich
Raubelastung:	3,7 kg TS/(m ³ ·d) und 3,7 kg oTS/(m ³ ·d)
Betriebsart:	mesophil (45 °C)

Die Raumbelastung betrug mit diesen Werten in der quasi-kontinuierlichen Simulation also 3,7 kg oTS/(m³·d) und die dazugehörige Verweilzeit 70 Tage. Die Abbaurrate der abbaubaren organischen Substanz lag etwa bei 85 Gew.-%. Die Biogasproduktion betrug in dieser Simulation 202 m³/Mg FS, 377 m³/Mg oTS und 2292 l/(m³·d) (bezogen auf das Reaktorvolumen). Werden die Werte auf 0 °C und 1013,25 mbar normiert statt auf 20 °C und 1013,25 mbar, beträgt die Biogasproduktion 188 m³/Mg FS, 351 m³/Mg oTS und 2136 l/(m³·d) (bezogen auf das Reaktorvolumen).

In der Abbildung 9-5 sind die Methan-, Kohlendioxid- und Schwefelwasserstoffproduktionen und der pH-Wertverlauf im quasi-kontinuierlichen Chargenbetrieb einer simulierten Biogasanlage nach der Anlaufphase dargestellt.

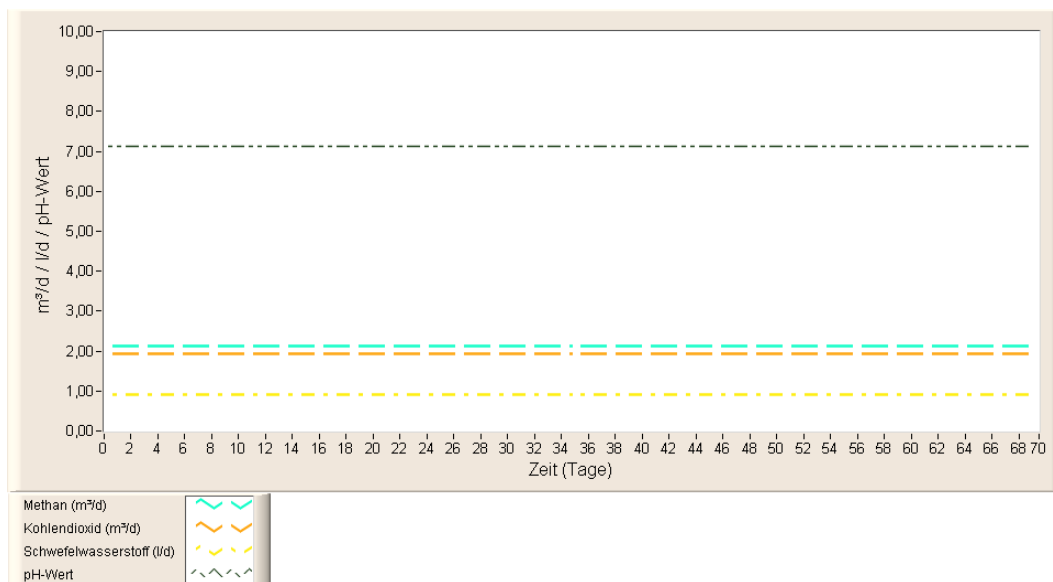


Abb. 9-5: Simulationsergebnis: Methan-, Kohlendioxid-, Schwefelwasserstoffemissionen und pH-Wert im quasi-kontinuierlichen Chargenbetrieb einer simulierten Biogasanlage nach der Anlaufphase

Der quasi-kontinuierliche Chargenbetrieb einer simulierten Biogasanlage nach der Anlaufphase zeigte eine konstante Produktion von Methan (CH₄: 2,1 m³/d entspricht 52 Vol.-%) und Kohlendioxid (CO₂: 1,9 m³/d entspricht 48 Vol.-%). Der pH-Wert musste mit Kalk auf Werte zwischen 7 und 8 eingestellt werden, da der Bioabfall in der Simulation sonst nicht in die Methanphase gelangt wäre. Auch in der Praxis werden die pH-Werte in Biogasanlagen eingestellt (FNR, 2009), so dass von einer Vergleichbarkeit ausgegangen werden kann. Angaben hierzu gibt es i. d. R. nicht. Die Schwefelwasserstoffemissionen (H₂S) lagen in der Simulation konstant bei 0,9 l/d (entsprach 0,02 Vol.-% bzw. 223 ppm). Die Gasemissionen wurden auf 20 °C und 1013,25 mbar normiert.

Vergleich der Simulationsergebnisse mit realen Biogasanlagen

Die Simulationsergebnisse der Biogasanlage Karlsruhe werden im Folgenden für weitere Vergleiche verwendet, um die Biogaskennzahlen und Abweichungen zu überprüfen. Hierzu erfolgte eine Umrechnung nach der Tabelle 6-9.

Die verarbeiteten Abfallmengen (20 Mg/d also nach Umrechnung 20 kg/d), die Raumbelastungen (3,5 und 3,7 kg oTS/(m³·d), Verweilzeiten (68 und 70 Tage) und die Abbauraten (86 und 85 Gew.-%) waren zwischen der Biogasanlage Karlsruhe und der Simulation im quasi-kontinuierlichen Chargenbetrieb vergleichbar. Voreingestellt wurden im Programm die verarbeitete Abfallmenge und die Verweilzeit. Das Reaktorvolumen, abhängig von der Dichte und dem freien Porenvolumen, lag auch wegen des geringeren Wassergehalts (40 Gew.-%) nach Umrechnung (Gleichung 6-34) in der Simulation mit 2000 m³ deutlich höher als das Reaktorvolumen der Biogasanlage Karlsruhe mit 1350 m³. Aufgrund hierzu fehlender Angaben von den Biogasanlagen wären zur Validierung des Simulationsprogramms aber weitere Praxisvergleiche sinnvoll.

Die Biogasproduktion bezogen auf die organische Trockensubstanz der Biogasanlage Karlsruhe und des simulierten quasi-kontinuierlichen Chargenbetriebs war nahezu übereinstimmend. Die Abweichung beträgt etwa 4 %. Zu Högl in Kehlheim beträgt sie sogar nur 0,8 %. Der simulierte Wert ist mit 377 m³/Mg oTS am niedrigsten. Die Abweichung der Biogasproduktion, bezogen auf die organische Trockensubstanz, zur Biogasanlage ORS in Nottensdorf ist mit 79 % hoch, jedoch wurden dort auch fetthaltige Co-Substrate mitvergärt, deren Menge und Zusammensetzung nicht bekannt und daher nicht simuliert werden konnten. In Kapitel 5.8 wurde auf die höheren Werte in Bioabfallvergärungsanlagen mit fetthaltigen Co-Substraten (Schmelz, 2000) hingewiesen.

Die Abweichungen sind groß, wenn die Werte auf das Reaktorvolumen bezogen werden (27 - 68 % geringere Werte als in der Simulation). Das kann an unterschiedlichen Befüllungshöhen und damit Reaktorfreiräumen liegen. In der Simulation ist das Reaktorvolumen gefüllt mit Material. Freivolumen kann aber bei Bedarf vorgegeben werden, wenn dies verfahrenstechnisch für die Praxis erforderlich ist. Auch bei Bezug auf die verarbeitete Abfallmenge sind die Abweichungen hoch (50 - 300 % geringere Werte als in der Simulation). Unterschiede der Biogasproduktionen sind allgemein vorrangig durch verschieden zusammengesetzte Bioabfälle, Co-Substrate und Abbaubarkeiten der Inhaltsstoffe zu erklären (Merkblatt ATV-DVWK-M 363, 2002, FNR, 2009). Ein höherer Wassergehalt des Materials und zusätzliches freies Reaktorvolumen können ebenfalls zu geringeren Werten führen, wenn diese auf das Feuchtgewicht oder Reaktorvolumen bezogen sind. Die Werte der Simulation sind diesbezüglich optimiert und die simulierten Biogaserträge bei diesen Bezügen entsprechend auch. Die auf die organische Trockensubstanz bezogenen Biogasproduktio-

nen sind wegen der Unabhängigkeit von dem Wassergehalt und Reaktorvolumen mit den Simulationsergebnissen am besten vergleichbar. Bei Bezugnahme auf die Feuchtsubstanz und auf das Reaktorvolumen werden die Abweichungen der gemessenen Werte von den Simulationsergebnissen geringer, wenn die Werte auf 0 °C statt auf 20 °C bezogen werden. Die Gasvolumina sind dann etwa 15 % niedriger.

Vergleich: Methangasproduktion

Die nach Hartmann (1983) bestimmte Methangasproduktion im Programm (Kapitel 6.3.6) betrug für die beschriebene simulierte Biogasanlage 187 m³ (249 m³/Mg oTS). Sie wird als Maximalwert bei vollständigem Abbau für das Substrat berechnet. In der Simulation wurden 149 m³ (197 m³/Mg oTS) produziert. Die geringeren Werte in der Simulation im Vergleich zur Bestimmung nach Hartmann (1983) sind auf den unvollständigen Abbau (nur 85 Gew.-% des abbaubaren Substrats wurden abgebaut) zurückzuführen. Die simulierten Werte entsprechen bei 50 Vol.-% Methan und fast gleicher Abbaurate dem Wert der Biogasanlage Karlsruhe (394 · 0,50 = 197 m³/Mg oTS). Verglichen mit Högl in Kehlheim müsste der Methangehalt 52 Vol.-% betragen haben und in der Biogasanlage ORS in Nottensdorf 29 Vol.-%.

Vergleich: Schwefelwasserstoffgehalt im Biogas

Der Schwefelwasserstoffgehalt im Biogas der Simulation ist mit 0,02 Vol.-% (223 ppm) relativ niedrig, liegt aber im möglichen Bereich. Durchschnittlich wird von 20 bis 20.000 ppm Schwefelwasserstoff im Biogas ausgegangen (Kaltschmitt und Hartmann, 2001). Je nach Substrat können die Werte aber auch bis zu 3 Vol.-% betragen (Thomé-Kozmiensky, 1995).

Zusammenfassend ist festzustellen, dass die erzielten Simulationsergebnisse einer Biogasanlage sehr nahe an den realen Werten liegen. Für einen noch besseren Vergleich zwischen Simulation und unterschiedlichen Biogasanlagen wären präzisere Angaben der tatsächlich eingetragenen Mengen an Kohlenhydraten, Proteinen und Fetten (Analysenwerte) und genauere Angaben zu den Betriebsparametern für die Eingabe im Programm notwendig. Der Vergleich von Simulationswerten mit der Biogasanlage Karlsruhe zeigt, dass bei Übereinstimmung der wichtigsten Parameter sehr gute Ergebnisse erzielt werden können.

9.3 Vergleich: Methanbildung der im Programm vorgegebenen Substrate

Um die Methanbildungswerte in der Simulation von den im Programm vorgegebenen Substraten ergänzend zu den in Kapitel 7.2.3.2 erzielten maximalen Werten zu überprüfen, wur-

den die im Programm nach Hartmann (1983) bestimmten Konzentrationen (Kapitel 6.3.6) mit den Simulationsergebnissen im Batchbetrieb und im quasi-kontinuierlichen Betrieb verglichen und gegenübergestellt. Ein weiterer Vergleich erfolgte mit Werten aus der Tabelle im Anhang 14.3, also Literaturangaben.

Methanbildung der im Programm vorgegebenen Substrate im Batchbetrieb

Für die Simulation wurde das in Kapitel 7.1 beschriebene Fallbeispiel mit den folgenden geänderten Simulationsparametern verwendet:

Geänderte Simulationsparameter (weitere Parameter siehe Kapitel 7.1)

Materialgesamtmenge:	100 kg FS
Belüftung:	nein (anaerobe Betriebsweise)
Dauer der Behandlung:	180 Tage
Isolation:	ja
Wassermantel:	ja (100 l) , Temperatur auf ca. 55 °C (thermophil) geregelt
Chargenbetrieb:	nein / quasi-kontinuierlich
Zuschlagsstoffe:	0,5 kg Kalk
Betriebsart:	thermophil (55 °C)

Im Vergleich zu Literaturangaben zeigen die Werte der Simulation im Batchbetrieb mit den jeweiligen Abbauraten und den aufgeführten Betriebsparametern deutlich geringere Werte. So werden Methanproduktionen bis zu etwa 442 Methan l/kg oTS und Biogasproduktionen bis zu 680 Biogas m³/Mg oTS (siehe Anhang 14.3, kommunale Abfallstoffe) genannt. In der Simulation waren es nur 18 - 145 Methan l/kg oTS und 40 - 351 Biogas m³/Mg oTS (Tabelle 9-1). Der Grund ist vor allem die abweichende Substratzusammensetzung (Kohlenhydrat-, Protein- und Fettgehalt) (Merkblatt ATV-DVWK-M 363, 2002, FNR, 2009) und die geringe anaerobe Abbaurate aufgrund der Batchbetriebsart.

Tab. 9-1: Simulationsergebnis: Methanbildung nach Hartmann (1983) und erzielte Methanbildung und Biogasproduktion von fünf Abfallarten aus 100 kg FS im Batchbetrieb mit den zugehörigen Abbauraten

	Σ Methan ^{*)} (m ³) (aus 100 kg FS)	Methan ^{*)} (l/kg oTS)	Σ Methan (m ³) (aus 100 kg FS)	Methan (l/kg oTS)	Biogas (m ³ /Mg oTS)	zugehörige anaerobe Abbaurate (Gew.-% abbaubarer TS)
Klärschlamm	0,9	45,7	0,4	18,0	40,1	60
Grünabfälle	4,9	82,2	2,0	34,0	77,8	60
Hausmüll	6,8	374,6	2,6	145,3	351,1	57
Org. Hausmüll	10,9	202,1	4,2	78,1	188,7	57
Bioabfall	13,4	249,3	5,4	101,5	233,2	60

Die Werte sind auf 20 °C und 1013,25 mbar normiert. *): Bestimmung nach Hartmann (1983)

Methanbildung der im Programm vorgegebenen Substrate im quasi-kontinuierlichen Betrieb

Um die Methan- und Biogasproduktion in der Simulation zu erhöhen, wurden folgende Simulationsparameter für den quasi-kontinuierlichen Betrieb geändert:

Geänderte Simulationsparameter

Materialgesamtmenge:	100 kg FS
Belüftung:	nein (anaerobe Betriebsweise)
Dauer der Behandlung:	80 Tage
Chargenbetrieb:	ja (eingefahrener Zustand)
Materialzufuhr oder/und -entnahme:	auto. ab Tag 0
Materialzufuhr:	täglich ohne Luftertrag
Materialentnahme:	täglich, Menge ist abhängig von dem Material
Zuschlagsstoffe:	0,5 kg Kalk täglich

Im Vergleich zu den genannten Literaturangaben zeigen die Werte der Simulation im eingefahrenen quasi-kontinuierlichen Betrieb mit den jeweiligen Abbauraten und den aufgeführten Betriebsparametern ähnliche Werte als im Batchbetrieb. So liegt die Methanproduktion in der Simulation des eingefahrenen quasi-kontinuierlichen Betriebs bei 36 - 329 Methan l/kg oTS und die Biogasproduktion bei 68 - 652 Biogas m³/Mg oTS bei Abbauraten von 91 - 95 Gew.-% der abbaubaren Trockensubstanz.

Die Simulationsergebnisse für den quasi-kontinuierlichen Betrieb sind in der Tabelle 9-2 zusammengestellt.

Tab. 9-2: Simulationsergebnis: Methanbildung nach Hartmann (1983) und erzielte Methanbildung und Biogasproduktion von fünf Abfallarten aus 100 kg FS im quasi-kontinuierlichen Betrieb mit den zugehörigen Abbauraten

	Σ Methan ^{*)} (m ³) (aus 100 kg FS)	Methan ^{*)} (l/kg oTS)	Σ Methan (m ³) (aus 100 kg FS)	Methan (l/kg oTS)	Biogas (m ³ /Mg oTS)	zugehörige anaerobe Abbaurate (Gew.-% abbaubarer TS)
Klärschlamm	0,9	45,7	0,7	35,5	68,1	91
Grünabfälle	4,9	82,2	4,2	68,8	134,2	91
Hausmüll	6,8	374,6	6,1	328,8	652,3	93
Org. Hausmüll	10,9	202,1	10,1	186,0	368,9	95
Bioabfall	13,4	249,3	11,8	217,8	425,2	95

Die Werte sind auf 20 °C und 1013,25 mbar normiert. *): Bestimmung nach Hartmann (1983)

Der Bereich des Biogasertrags von organischen Siedlungsabfällen wird mit 150 - 600 m³/Mg oTS bei einem Methangehalt von 58 - 65 Vol.-% (also etwa 92 - 369 Methan l/kg oTS) angegeben (FNR, 2005, KTBL, 1998, Anhang 14.3). Der simulierte Biogas- bzw. Methanertrag liegt für organischen Hausmüll mit 369 Biogas m³/Mg oTS und 186 Methan l/kg oTS also in der Mitte der aus der Praxis angegebenen gemessenen Werte.

Die Ergebnisse liegen knapp unter den nach Hartmann (1983) bestimmten Werten, die den Maximalwerten entsprechen. Die quasi-kontinuierliche Betriebsweise im eingefahrenen Anlagenbetrieb ergibt also die höchste Methanausbeute. Die Werte liegen auch über den in Tabelle 7-3 maximalen Methanbildungsraten, trotz geringerer Abbauraten. Ursache hierfür ist die Optimierung des Abbaus durch kleine Chargenmengen und durch den regelmäßigen Austrag des nicht abbaubaren Anteils. Die Verhältnismäßigkeit der Biogaserträge zwischen den Substraten ist durch die unterschiedlichen Betriebsarten nicht beeinflusst.

Der Grund für abweichende Methan- bzw. Biogaserträge in der Simulation der Realität ist wieder im Wesentlichen in der unterschiedlichen Substratzusammensetzung (Kohlenhydrat-, Protein- und Fettgehalt) (Merkblatt ATV-DVWK-M 363, 2002, FNR, 2009) zu suchen. Aber auch die Betriebsart hat einen großen Einfluss auf die Methangasbildung. Bei einem Vergleich ist jedoch auch zu beachten, dass Literaturwerte häufig Potentiale oder Maximalwerte darstellen und von denen in der täglichen Praxis abweichen. Je nach Verfahren (z. B. Anlagenaufbau, Betriebsart, Substrate) können die Werte nach oben oder unten variieren. Für eine genauere Überprüfung der Simulationsergebnisse müssten daher weitere Simulationen mit angepassten und vergleichbaren Substratzusammensetzungen und Betriebsparametern durchgeführt werden.

Es ist jedoch festzustellen, dass die Simulationsergebnisse im Bereich realer gemessener Werte liegen und eine Optimierung ausgesuchter Parameter mit dem Simulationsprogramm möglich ist.

9.4 Vergleich: Ermittlung von Methanbildungspotentialen im Labortest

Um Simulationsergebnisse mit Werten des Gärtests (Kapitel 5.8) nach der VDI-Richtlinie 4630 „Vergärung organischer Stoffe - Substratcharakterisierung, Probenahme, Stoffdatenerhebung, Gärversuche“ (2006) zu vergleichen, werden aus den zahlreich veröffentlichten und von vielen Laboren durchgeführten Versuchen die Ergebnisse von Labortests anhand eines Beispiels ausgewählter organischer Substrate kurz dargestellt. Anschließend werden die Simulationsergebnisse der drei organischen Substratgruppen Fette, Proteine und Kohlenhydrate mit maximalen Biogas- und Methanerträgen unter realen Bedingungen aus einer weiteren Veröffentlichung verglichen.

Bestimmung des potentiellen Biogasertrags aus Substraten im Gärtest

Zur Bestimmung des potentiellen Biogasertrags aus Substraten wurden von Poetsch (2005) Gärtests im Batch-Verfahren unter Berücksichtigung der DIN 38414-S8 (1985) (Versuchsaufbau und Versuchsdurchführung) durchgeführt. In diesem Labortestverfahren wird ermittelt, mit welcher substratspezifischen Methangasproduktion unter optimalen Milieubedingungen gerechnet werden kann. Hierzu erforderlich sind 300 g Impfschlamm (Inoculum) und bis zu 5 g Substrat. Die im Folgenden dargestellten Gärversuche von Poetsch (2005) wurden bei 35 °C (mesophiler Temperaturbereich) durchgeführt. Die normierten Gasvolumina pro Zeiteinheit wurden addiert. Das Gasbildungspotential des Inokulums wurde parallel unter den gleichen Bedingungen bestimmt und von den Probenwerten subtrahiert, so dass nur das Biogaspotential der jeweiligen Probe kumuliert wurde.

Für Bioabfall, Fett und Leimwasser (als Beispiel für eine Proteinzusammensetzung) wurden auf diese Weise die in der folgenden Abbildung 9-6 dargestellten Biogaserträge gemessen (Poetsch, 2005):

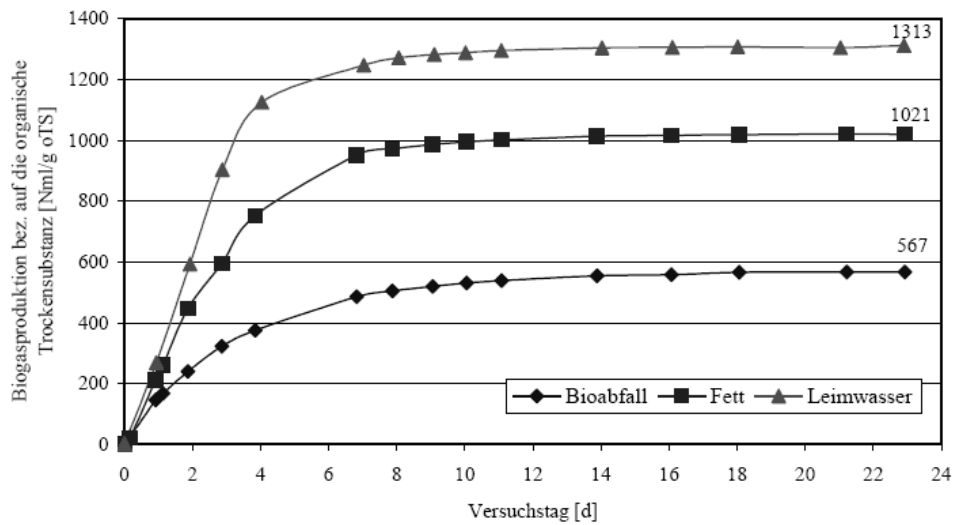


Abb. 9-6: Biogasbildungspotential der Substrate Bioabfall, Fett und Leimwasser bezogen auf die organische Trockensubstanz in Abhängigkeit von der Versuchszeit (Poetsch, 2005)

Der Methangehalt des Biogases kann für die unterschiedlichen Substrate durch Umrechnung mit Hilfe geschätzter Volumenanteile bestimmt werden. Bei einem Methananteil von 72 Vol.-% für Fette und 58 Vol.-% für Proteine (Leimwasser) ergeben sich Methanproduktionen für Fette von 735 l/kg oTS und für Proteine (Leimwasser) von 762 l/kg oTS (Poetsch, 2005).

Bestimmung des potentiellen Biogasertrags aus Substraten in der Simulation des Gärtests

Für die Simulation wurde das in Kapitel 7.1 beschriebene Fallbeispiel mit 5 g Substrat und folgenden Parametern für die Substrate Bioabfall, Fette, Proteine und Kohlenhydrate gewählt:

Geänderte Simulationsparameter (weitere Parameter siehe Kapitel 7.1)

Materialgesamtmenge:	5 g FS
Belüftung:	nein (anaerobe Betriebsweise)
Dauer der Behandlung:	23 Tage
Isolation:	ja
Wassermantel:	ja, Temperatur auf 35 °C (mesophil) geregelt
Kondensat:	Entnahme
Form der Miete oder des Reaktors:	Zylinder
Breite oder Durchmesser der Materialschüttung:	0,2 m
Zuschlagsstoffe:	0,05 g Kalk

Durch Umrechnung nach Tabelle 6-9 entsprechen die Größen und Mengen etwa den Laborversuchsbedingungen. Um möglichst hohe Gasproduktionswerte zu simulieren, ist darauf geachtet worden, dass mindestens 95 Gew.-% des abbaubaren Materials abgebaut wurden. Die Werte sind auf 20 °C und 1013,25 mbar normiert. Für Vergleiche und Beurteilungen muss beachtet werden, dass bei 0 °C und 1013,25 mbar die Gasproduktionswerte 15 % unterhalb der genannten Werte liegen.

Der Bioabfall produziert auf diese Weise in der Simulation weniger Biogas (450 m³/Mg oTS) als im Labortest (567 m³/Mg oTS). Der Kurvenanstieg ist in der Simulation weniger ausgeprägt, da die Zugabe des Inokulums fehlt. Zur Ermittlung vergleichbarer Werte ist die simulierte Zugabe eines Animpfmateri als wegen der ermöglichten Voreinstellung der Abbaurates aber nicht erforderlich.

In der Abbildung 9-7 ist das in der Simulation erreichte Biogasbildungspotential der Substrate Bioabfall (450 m³/Mg oTS), Fette (495 m³/Mg oTS), Proteine (602 m³/Mg oTS) und Kohlenhydrate (605 m³/Mg oTS) bezogen auf die organische Trockensubstanz in Abhängigkeit von der Zeit dargestellt. Die Zusammensetzung des im Laborversuch verwendeten Leimwassers ist leider nicht bekannt, so dass in der Simulation von einer reinen Proteinzusammensetzung ausgegangen wurde. Die Gasvolumina pro Zeiteinheit sind wie im Laborversuch rechnerisch aufaddiert worden.

Die Kohlenhydrate werden auch in der Simulation erwartungsgemäß am ehesten abgebaut (Spendlin, 1991, FNR, 2009), wodurch die Biogasproduktion bzw. Methanproduktion am Anfang zügig ansteigt. Dies ist bei allen durchgeführten Simulationen deutlich zu sehen.

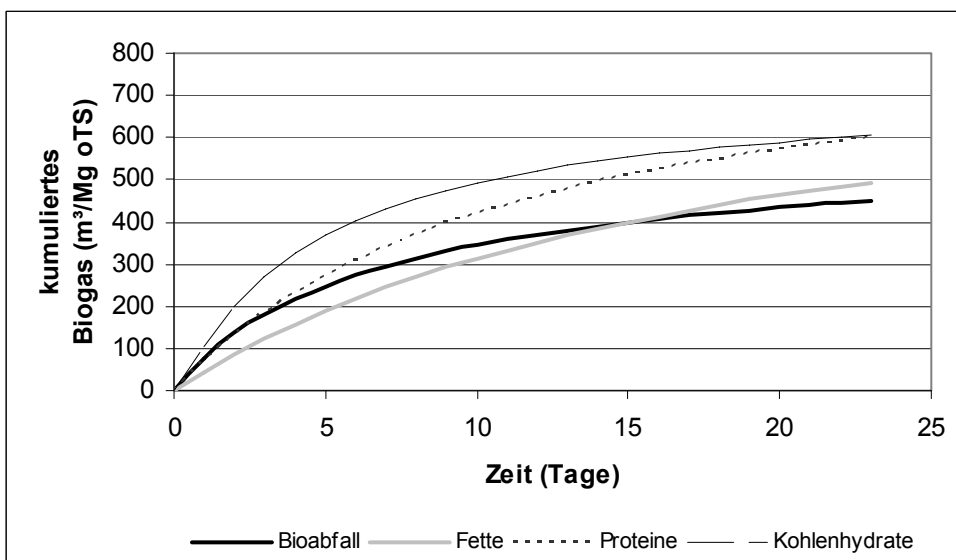


Abb. 9-7: Simulationsergebnis: Biogasbildungspotential der Substrate Bioabfall, Fette, Proteine und Kohlenhydrate bezogen auf die organische Trockensubstanz in Abhängigkeit von der Zeit

Die Biogasproduktion aus Fetten und Proteinen ist im Labortest (Fette 1021 m³/Mg oTS und Proteine 1313 m³/Mg oTS) deutlich höher als in der Simulation (Fette 495 m³/Mg oTS und Proteine 602 m³/Mg oTS). In beiden Ergebnissen werden aber aus Proteinen höhere Werte als aus Fetten erzielt (Differenz Proteine-Fette im Labortest 292 m³/Mg oTS und in der Simulation 107 m³/Mg oTS).

Bestimmung des potentiellen Methanertrags aus Substraten in der Simulation des Gärtests

Auch die Methanproduktion aus Fetten und Proteinen ist im Labortest (Fette 735 m³/Mg oTS und Proteine 762 m³/Mg oTS) deutlich höher als in der Simulation (Fette 294 m³/Mg oTS und Proteine 313 m³/Mg oTS). In beiden Ergebnissen wurden aber auch aus Proteinen höhere Werte als aus Fetten erzielt (Differenz Proteine-Fette im Labortest 27 m³/Mg oTS und in der Simulation 19 m³/Mg oTS).

In der Abbildung 9-8 wird das Methanbildungspotential der Substrate Bioabfall (236 m³/Mg oTS), Fette (294 m³/Mg oTS), Proteine (313 m³/Mg oTS) und Kohlenhydrate (298 m³/Mg oTS) bezogen auf die organische Trockensubstanz in Abhängigkeit von der Zeit in der Simulation gezeigt.

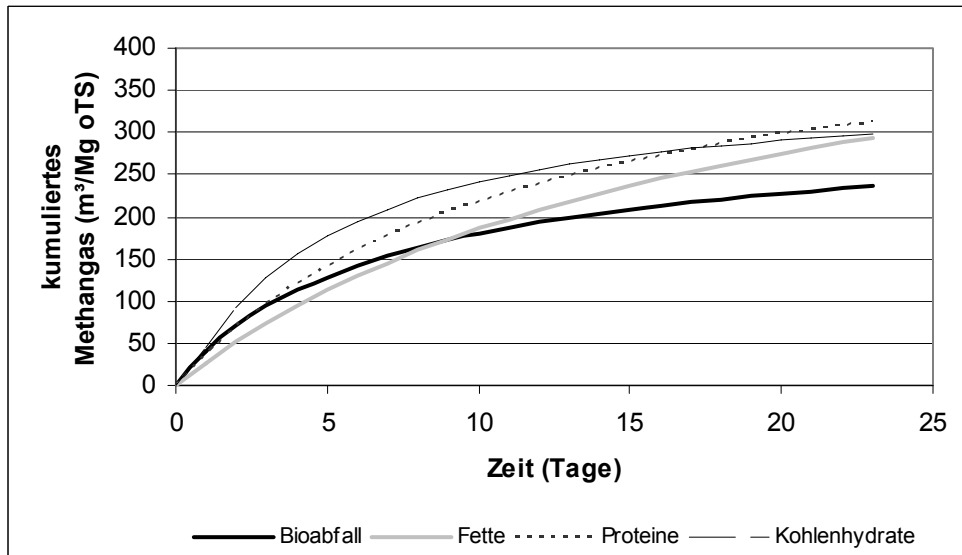


Abb. 9-8: Simulationsergebnis: Methanbildungspotential der Substrate Bioabfall, Fette, Proteine und Kohlenhydrate bezogen auf die organische Trockensubstanz in Abhängigkeit von der Zeit

Auf Grundlage des Simulationsergebnisses hätte das Biogas des Bioabfalls einen durchschnittlichen Methananteil von 53 Vol.-%. Überträgt man den Methananteil auf das Ergebnis des Labortests, wären 301 m³/Mg oTS Methan produziert worden. Das ist deutlich mehr als in der Simulation (236 m³/Mg oTS).

Simulationsergebnisse des potentiellen Biogasertrags bei 100-prozentiger Abbaubarkeit

Die Unterschiede zwischen Labortest und Simulation können durch abweichende und im Programm vorgegebene Abbaubarkeiten der Fette, Proteine und Kohlenhydrate entstehen. In der Simulation wurde davon ausgegangen, dass die Kohlenhydrate (allg.), Stärke, Aminosäuren und Hemicellulose zu 70 %, Fette und Wachse zu 45 %, Proteine und Cellulose zu 50 % abgebaut werden können und Lignin (siehe auch Kapitel 6.1.2) gar nicht abgebaut werden kann (nach z. B. Haug, 1980, Bidlingmaier, 1983). Die Abbaubarkeiten können im Programm aber verändert und so den entsprechenden speziellen Substraten angepasst werden. Die Gas- und Methanproduktionen sind bei einer Abbaubarkeit von jeweils 100 % (Fette, Proteine und Kohlenhydrate) entsprechend höher. Die geringere Abbaubarkeit ist eine Annahme, die für Bioabfälle aber recht gut gewählt ist, denn die Biogasproduktionen z. B. der Biogasanlagen im Vergleich zur Simulation (Kapitel 9.2) stimmen vergleichsweise gut überein.

In der Abbildung 9-9 ist das Biogasbildungspotential der Substrate Bioabfall (772 m³/Mg oTS), Fette (1100 m³/Mg oTS), Proteine (1210 m³/Mg oTS) und Kohlenhydrate (906 m³/Mg oTS) bei 100 %iger Abbaubarkeit bezogen auf die organische Trockensubstanz in Abhängigkeit von der Zeit in der Simulation dargestellt.

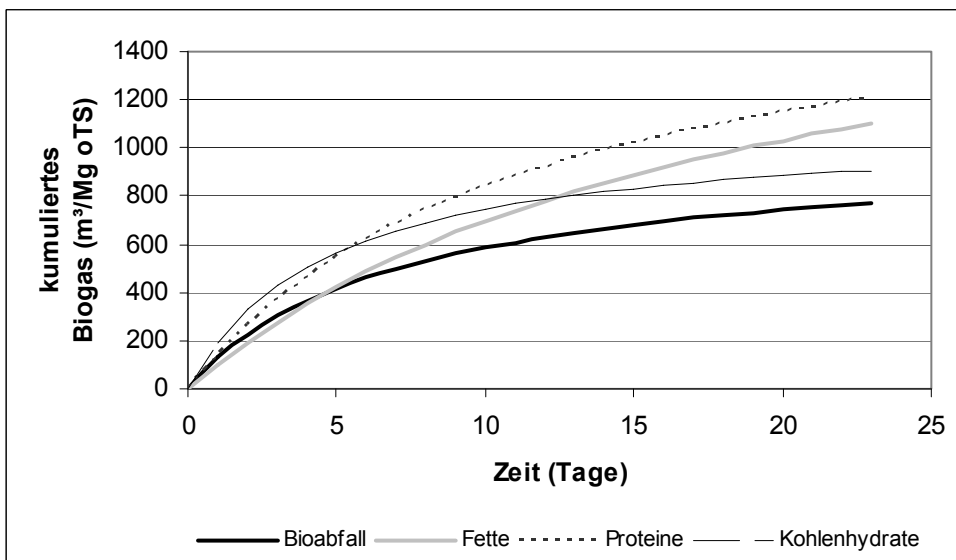


Abb. 9-9: Simulationsergebnis: Biogasbildungspotential der Substrate Bioabfall, Fette, Proteine und Kohlenhydrate bei 100 %iger Abbaubarkeit bezogen auf die organische Trockensubstanz in Abhängigkeit von der Zeit

Der Vergleich der Simulationsergebnisse bei vorgegebener 100-prozentiger Abbaubarkeit von Fetten, Proteinen und Kohlenhydraten mit den Ergebnissen des Labortests zeigen für

Fette und Proteine bezüglich der Biogasproduktion eine gute Übereinstimmung. Der Biogasproduktionswert von den Proteinen liegt in der Simulation um etwa 8 % unter dem Laborwert (Labortest: 1313 m³/Mg oTS und Simulation: 1210 m³/Mg oTS) und von den Fetten etwa 8 % über dem Laborergebnis (Labortest: 1021 m³/Mg oTS und Simulation: 1100 m³/Mg oTS). Die höheren Biogasproduktionswerte gegenüber den Fetten zeigten wiederum die Proteine.

Das Biogasbildungspotential von Bioabfall zeigt in der Simulation mit 772 m³/Mg oTS einen deutlich höheren Wert als im Labortest (567 m³/Mg oTS). Die Abweichung ist mit 36 % sehr viel größer als bei Voreinstellung geringerer Abbaubarkeiten von Fetten, Proteinen und Kohlenhydraten (450 m³/Mg oTS entspricht 21 % Abweichung).

Simulationsergebnisse des potentiellen Methanertrags bei 100-prozentiger Abbaubarkeit

Der Vergleich der Simulationsergebnisse bei 100-prozentiger Abbaubarkeit von Fetten, Proteinen und Kohlenhydraten mit den Ergebnissen des Labortests zeigen für Fette und Proteine bezüglich der Methangasproduktion größere Abweichungen.

In der Abbildung 9-10 ist das Methanbildungspotential der Substrate Bioabfall (387 m³/Mg oTS), Fette (593 m³/Mg oTS), Proteine (577 m³/Mg oTS) und Kohlenhydrate (414 m³/Mg oTS) bei 100 %iger Abbaubarkeit bezogen auf die organische Trockensubstanz in Abhängigkeit von der Zeit in der Simulation dargestellt.

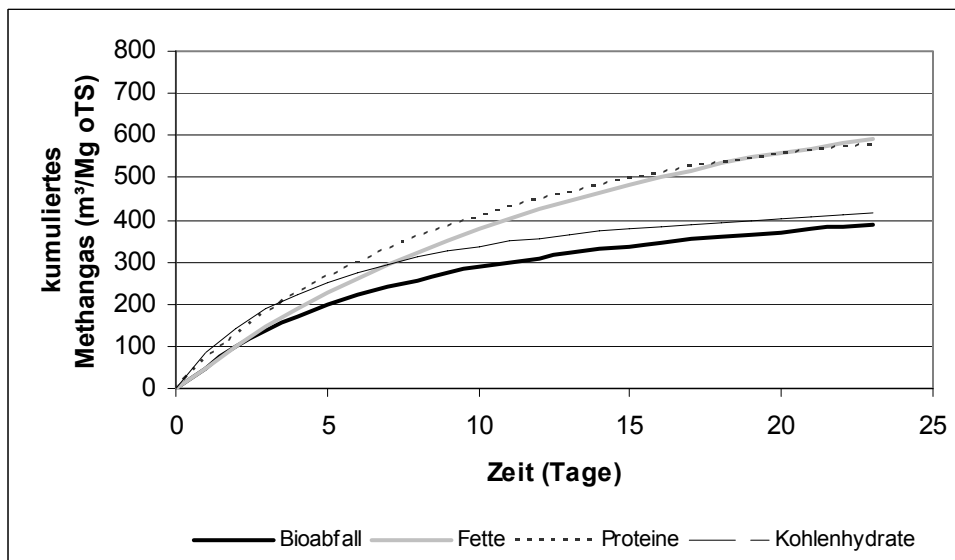


Abb. 9-10: Simulationsergebnis: Methanbildungspotential der Substrate Bioabfall, Fette, Proteine und Kohlenhydrate bei 100 %iger Abbaubarkeit bezogen auf die organische Trockensubstanz in Abhängigkeit von der Zeit

Auf Grundlage des Simulationsergebnisses hätte das Biogas des Bioabfalls bei 100 %iger Abbaubarkeit von Fetten, Proteinen und Kohlenhydraten einen durchschnittlichen Methananteil von 50 Vol.-%. Überträgt man den Methananteil auf das Ergebnis des Labortests, wären 284 m³/Mg oTS Methan produziert worden. Das ist deutlich weniger als in der Simulation (387 m³/Mg oTS). Der Methananteil wäre im Labortest 68 Vol.-% bei gleicher Methangasemission wie in der Simulation.

Das Simulationsergebnis der Methangasproduktion aus Leimwasser (Proteinen) liegt um etwa 24 % (Labortest: 762 m³/Mg oTS und Simulation: 577 m³/Mg oTS) und aus Fetten um etwa 19 % (Labortest: 735 m³/Mg oTS und Simulation: 593 m³/Mg oTS) unterhalb des Laborergebnisses. Die höheren Methangasproduktionswerte werden in der Simulation aus den Fetten erzielt. Im Labortest wurde aus Leimwasser (Proteinen) ein höherer Methangasproduktionswert gemessen als aus den Fetten. Ursache könnte ein abweichender Methananteil im Biogas des Labortests sein und eine differenziertere Zusammensetzung des Leimwassers. Angenommen wurde, dass das Leimwasser ausschließlich aus Proteinen bestand. Da der Methangaswert für die Energieberechnung besonders wichtig ist, müssten weitere und erweiterte Messungen und Vergleiche durchgeführt werden.

Allgemein wurden in Biogasanlagen mit vielen fetthaltigen Substraten höhere Methangasproduktionswerte festgestellt (FNR, 2009). Das Simulationsergebnis, das eine höhere Methanausbeute aus Fetten gegenüber Proteinen zeigte, könnte in dieser Hinsicht richtiger sein als die Aussage des Labortests. Da die Abbaubarkeiten von den Molekülen in den Substraten unterschiedlich sind und im Zusammenhang mit den Milieuverhältnissen und den anderen zeitgleich verfügbaren Stoffen stehen, müssten jedoch sehr viel mehr Vergleiche zwischen Simulationen und realen Messungen durchgeführt werden, um das Simulationsmodell zu optimieren.

Im Folgenden werden die Biogas- und Methanerträge aus den organischen Substratgruppen im Labortest und in der Simulation des Labortests ergänzend mit erzielten Werten unter realen Bedingungen aus einer Veröffentlichung verglichen, um die Unterschiede der verschiedenen ermittelten Werte der Gasbildungspotentiale mit den in der Realität erreichten Erträgen zu zeigen.

Biogas- und Methanerträge der organischen Substratgruppen unter realen Bedingungen

Die maximalen Biogas- und Methanerträge aus den organischen Substratgruppen unter realen Bedingungen liegen nach Weiland (2001a) für Fette bei 1250 m³/Mg oTS Biogas und 913 m³/Mg oTS Methan, für Proteine 700 m³/Mg oTS Biogas und 525 m³/Mg oTS Methan

und für Kohlenhydrate bei 800 m³/Mg oTS Biogas und 440 m³/Mg oTS Methan im Normzustand.

Die Biogaserträge in der Simulation betragen aus Fetten 461 - 1025 m³/Mg oTS, aus Proteinen 561 - 1127 m³/Mg oTS und aus Kohlenhydraten 563 - 844 m³/Mg oTS.

Die Methanerträge in der Simulation betragen aus Fetten 273 - 552 m³/Mg oTS, aus Proteinen 292 - 538 m³/Mg oTS und aus Kohlenhydraten 278 - 386 m³/Mg oTS.

Der Vergleich zeigt, dass das Simulationsmodell aus Fetten geringere Biogas- und Methanproduktionen als unter realen Bedingungen ausgibt, die Biogaswerte aus Proteinen deutlich über den maximalen Werten aus der Praxis liegen können, die Methanproduktion aber vergleichbar ist, und aus Kohlenhydraten in der Simulation etwas mehr Biogas als unter realen Bedingungen produziert wird, aber weniger Methan.

Die maximalen Biogas- und Methanerträge unter realen Bedingungen sind im Vergleich zu den Werten des Labortests aus Fetten mit 1250 m³/Mg oTS (1021 l/kg oTS) Biogas und 913 m³/Mg oTS (735 l/kg oTS) Methan höher (18 % bzw. 19 %) und aus Proteinen mit 700 m³/Mg oTS (1313 l/kg oTS) Biogas und 525 m³/Mg oTS (762 l/kg oTS) Methan deutlich niedriger (88 % bzw. 45 %). Erkennbar ist, dass die gemessenen Werte unter realen Bedingungen auch von Werten, die in Labortests ermittelt wurden, erheblich abweichen können.

Der beispielhafte Vergleich zeigt vor allem, dass die Parametrierung des Simulationsmodells großen Einfluss auf die erzielten Ergebnisse hat. Um für die Praxis verlässliche Simulationsergebnisse zu erhalten, sind vor allem entsprechende Analysen der Nährstoffzusammensetzung und Eigenschaften wie Wassergehalt und abbaubarer Anteil des Substrats erforderlich. Wegen der Schwankungen von Messwerten des Methanbildungspotentials im Labortest heterogener Substratgemische, auch aufgrund der Schwierigkeit einer repräsentativen Probenahme, und unter realen Bedingungen in Anlagen könnten die Simulationsergebnisse aber die zuverlässigeren Werte sein.

9.5 Simulation eines weiteren Anwendungsgebiets (belüftete Deponie)

Ein weiterer Vergleich von Simulationsergebnissen mit Messungen in der Realität wurde mit Daten einer belüfteten Altdeponie (z. B. Hinchee et al., 1995, Heyer et al., 2000, Heyer et al., 2001) durchgeführt. Anhand dieses Beispiels wird der Wechsel der Milieubedingungen von anaeroben auf aerobe Bedingungen und die damit verbundenen Auswirkungen auf die Emissionen vergleichend zwischen Prozesssimulation und empirischen Werten dargestellt. Aufgrund der vielen Einflüsse an einer Altdeponie können jedoch nur Tendenzen und Grö-

Reihenordnungen einzelner Werte und Entwicklungen mit dem Simulationsmodell verglichen werden. Altdeponien enthalten häufig unbekannte Inhaltsstoffe und sind nicht homogen in ihrer Materialstruktur. Messungen und Analysen an unterschiedlichen Orten und Tiefen der Deponie ergeben daher oft sehr unterschiedliche Ergebnisse. Auch Materialproben verschiedener Deponieregionen können in Deponiesimulationsreaktoren (DSR) im Labor stark abweichende Ergebnisse liefern. Die Simulation am Computer könnte daher eine wichtige Ergänzung sein, um Deponien mit organischen Abfällen richtig zu charakterisieren. Um die prinzipielle Anwendbarkeit des Simulationsprogramms für Deponien mit organischen Abfällen zu zeigen, wird exemplarisch eine Simulation mit folgenden geänderten Werten der in Kapitel 7.1 aufgeführten Parameter vorgegeben:

Geänderte Simulationsparameter (weitere Parameter siehe Kapitel 7.1)

Material:	Hausmüll
Materialgesamtmenge:	10 kg FS (entspricht 10.000 Mg FS)
Organische Trockensubstanz (oTS):	30 Massen-%
TOC:	0,67 kg oTS (37 Gew.-%) (Zum Vergleich: Wirtz et al. (1996) bestimmten einen durchschnittlichen TOC-Gehalt von 30 Gew.-% (Trockenrückstand) in Altdeponien. Der von dem Simulationsprogramm berechnete Wert ist also realen Messwerten sehr ähnlich.)
C/N:	37
Belüftung:	ab dem 90. Monat (vorher anaerobe Betriebsweise)
Art der Belüftung:	geringe konstante Belüftung (0,0005 m ³ /h bzw. 0,005 m ³ /h)
Dauer der Behandlung:	180 Monate
Isolation:	ja (umgebendes Material bzw. Abdichtung)
Wassermantel:	Nein
Form der Miete oder des Reaktors:	Box
Breite, Länge und Höhe der Materialschüttung:	0,3 · 0,3 · 0,16 m
Trockensubstanzgehalt des Substrats:	60 Gew.-%
Trockensubstanzgehalt des Strukturmaterials:	60 Gew.-%
Chargenbetrieb:	Nein
Zuschlagsstoffe:	0,1 kg Kalk

Für den Vergleich wurden Untersuchungsergebnisse von Rustemeier (2001) an der Altdeponie Kuhstedt im Landkreis Rotenburg (Wümme) gewählt, da es eine große Anzahl von Altdeponien und Altablagerungen in der Art dieser Deponie gibt.

Die Deponiefläche der Altdeponie Kuhstedt betrug zum Zeitpunkt der Messungen 3,2 ha und sie hatte eine Höhe über Gelände von etwa 8 - 10 m und eine Tiefe unter Gelände von 2 - 3 m. Die Ablagerung von Abfällen endete 1987, nachdem bis 1973 Abfälle unkontrolliert

und unverdichtet abgelagert worden sind. Die Altdeponie kann aufgrund ihrer Geometrie als Haldendeponie bezeichnet werden. Sie enthält Hausmüll, Sperrmüll, hausmüllähnliche Gewerbeabfälle und Bauschutt (Ritzkowski et al., 2001).

Für die Übertragung der Werte auf die Prozesssimulation wurde davon ausgegangen, dass Messungen und Belüftungen in der Praxis in der Regel an Gasbrunnen erfolgen. Dadurch ist nur eine Deponieteilbetrachtung möglich, die mit 10 kg Material simuliert wurde. Unter Anwendung der Umrechnungstabelle (Tabelle 6-9) könnten diese 10 kg etwa 10.000 Mg Deponiemüll entsprechen (Faktor 10^6). Die Altdeponie ist mit einem Volumenstrom von 250 bis 450 m³/h belüftet worden. In der Simulation wurde ein Gasstrom von 0,0005 m³/h gewählt, also vergleichbar etwa mit dem Gasstrom, mit dem die Altdeponie belüftet worden ist ($0,0005 \cdot 10^6$ m³/h).

Vergleich der Gaszusammensetzung

Die Prozesssimulation zeigte, dass nach Deponieabschluss ohne Belüftung laut Umrechnungstabelle (Tabelle 6-9) etwa nach 180 Monaten (15 Jahren) die stabile Methanphase von 10.000 Mg Deponiemüll erreicht wird (nicht abgebildet). Die Abbaurrate beträgt dann 6 Gew.-% der Trockensubstanz des abbaubaren Materials und es entsteht kein Sickerwasser und kaum Kondenswasser, wenn kein Niederschlag simuliert wird. Mit Belüftung ab dem 90. Monat beträgt die Abbaurrate 12 Gew.-% der Trockensubstanz des abbaubaren Materials unter den beschriebenen Bedingungen. Ohne Belüftung entstehen 0,027 Mio. m³ Methan und 0,037 Mio. m³ Kohlendioxid und kein Distickstoffoxid (nicht abgebildet). Mit Belüftung sind es 0,012 Mio. m³ Methan und 0,14 Mio. m³ Kohlendioxid und 80 m³ Distickstoffoxid bei 20 °C und 1013,25 mbar.

Die Kurvenverläufe der Gaszusammensetzung und der Abbaurrate einer belüfteten Altdeponie in der Prozesssimulation zeigt die Abbildung 9-11.

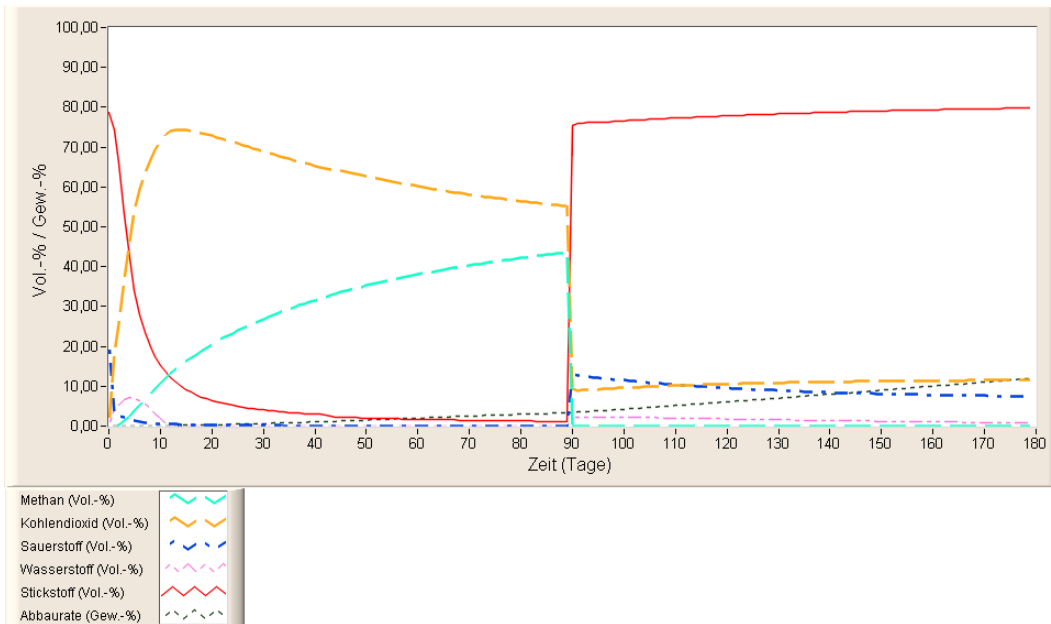


Abb. 9-11: Simulationsergebnis: Gaszusammensetzung und Abbaurrate einer mit dem Simulationsprogramm simulierten belüfteten Deponie

Vor Belüftungsbeginn nehmen in der Simulation die Luftkomponenten Sauerstoff (O_2) und Stickstoff (N_2) ab. Der Sauerstoff wird auch in der Simulation schnell verbraucht und der Stickstoff entweicht langsam, da er mit der Gasentwicklung von Kohlendioxid (CO_2), Wasserstoff (H_2) und Methan (CH_4) ausgetrieben, aber nicht umgesetzt wird. Der Wasserstoff hingegen wird nach einer Anfangsphase, in der sich wie in der Realität die Methanbildner entwickeln und das Milieu sich ändert, für die Bildung von Methan verbraucht.

Mit dem Einsetzen der Belüftung ist die Gaszusammensetzung mit den gemessenen Werten eines Deponiesimulationsreaktors im Laborversuch zur Simulation einer belüfteten Altdeponie vergleichbar. Die Umstellung auf den aeroben Abbau erfolgt schnell. Der Sauerstoff wird veratmet und es entsteht entsprechend viel Kohlendioxid (etwa 10 Vol.-%). Bis zur vollständigen Milieuänderung kann Wasserstoff emittiert werden.

Die gemessenen Werte eines Deponiesimulationsreaktors im Laborversuch zur Simulation einer belüfteten Altdeponie sind in der Abbildung 9-12 dargestellt:

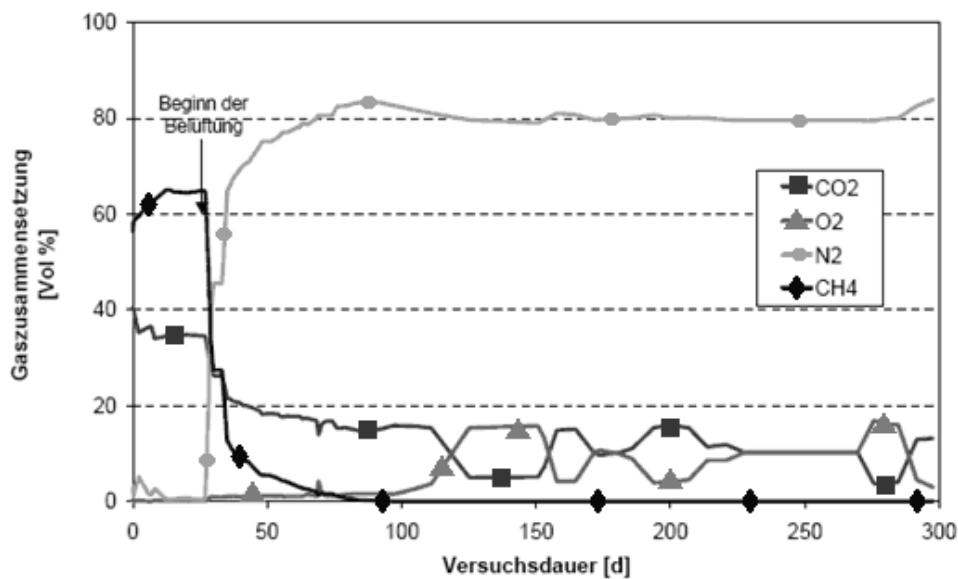


Abb. 9-12: Gaszusammensetzung in einem Deponiesimulationsreaktor im Laborversuch zur Simulation einer belüfteten Altdeponie (Rustemeier, 2001)

Allgemein zeigt eine Altablagerung bei Belüftung in der Anfangsphase eine Verdünnung des Deponiegases, welche eine Veränderung der Gaszusammensetzung bewirkt (Rustemeier, 2001, Heyer, 2003, Ritzkowski et al., 2005). Die Methan- und Kohlendioxidkonzentrationen nehmen ab bei einer gleichzeitigen Zunahme der Sauerstoff- und Stickstoffkonzentrationen. Aufgrund gleichzeitiger Veratmung des Sauerstoffs entsteht durch aerobe Stoffwechselprozesse Kohlendioxid und die Differenz von Sauerstoff zu Stickstoff im Gas sinkt, wenn Sauerstoff unverbraucht entweicht. Im Fall einer zusätzlichen Methanoxidation sinkt der Sauerstoffgehalt und es kommt zu einer Verringerung des Methan- zu Sauerstoffverhältnisses bei steigender Kohlendioxidkonzentration. Abhängig von den Abbaubarkeiten der Ablagerungen verändert sich der Kohlenstoffaustrag über die Gasphase im Verlaufe der Zeit solange, bis keine aeroben und anaeroben Abbauprozesse aufgrund fehlenden Substrats mehr möglich sind.

Diese Zusammenhänge werden in der Prozesssimulation und im Labor in den Deponiesimulationsreaktoren wiedergegeben bzw. sichtbar. Bei dem Vergleich zu berücksichtigen ist, dass auch die Ergebnisse von Laborversuchen z. B. in Deponiesimulationsreaktoren keine Planungssicherheit bieten. Die Prozesse, die in der Praxis in vielen Jahren ablaufen, müssen im Labor auf einen kurzen Zeitraum reduziert werden und aufgrund der geringen und nicht repräsentativen Probenmenge können auch den Abbau beschleunigende Maßnahmen wie der Sickerwasserzirkulation nur eingeschränkt für Prognosen aussagekräftige Ergebnisse liefern. Eine Computersimulation könnte daher auch für diese Anwendung schneller und vielseitiger für Vorhersagen einsetzbar sein. Auch können in kurzer Zeit viele mögliche Variatio-

nen am Computer simuliert werden. In Laborversuchen hingegen sind im Vergleich Aufwand und Kosten ungleich höher.

Vergleich der Kohlenstofffracht über die Gasphase

In der Prozesssimulation wurde mit Belüftung eine Gesamt-C-Fracht von 41 g/kg TS über die Gasphase emittiert. Ohne Belüftung entstand eine Gesamt-C-Fracht von 18 g/kg TS, wobei die Abbaurate auch nur halb so hoch war.

In Proben der Altdeponie fielen in Deponiesimulationsreaktoren etwas geringere C-Frachten an, wobei zu beobachten ist, dass Abfallproben, die noch wenig abgebaut wurden, unter dem Einfluss der Belüftung signifikant höhere C-Austräge über die Gasphase aufweisen als weitgehend stabilisiertes Material. So kann nach Rustemeier (2001) ein bis zu 1,5facher höherer Kohlenstoffaustrag unter aeroben Bedingungen erreicht werden. Es wurden in Laboruntersuchungen von Müllproben aus der Deponie mit Belüftung Werte von bis zu 14 g C/kg TS in der Gasphase gemessen. Da das Material der Altdeponie zum Zeitpunkt der Untersuchungen, also nach etwa 12 Jahren, aber schon zum Teil abgebaut worden sein dürfte, liegen die Werte sogar unterhalb der möglichen Austräge. In der Prozesssimulation hingegen wird der gesamte Zeitraum von Ablagerungsbeginn bis nach 180 Monaten betrachtet, so dass Simulationswerte - abhängig von der Abbaurate - realen Emissionen insgesamt über den Abbauzeitraum entsprechen.

Vergleich der Atmungsaktivität und TOC-Konzentrationen

Ein weiterer Vergleich erfolgt anhand der Atmungsaktivität (Kapitel 5.8). Der maximale Wert der Atmungsaktivität über 4 Tage beträgt in der Prozesssimulation 3 bis 11 mg O₂/gTS zwischen dem 94. und 180. Monat. Reale Messwerte von verschiedenen Abfallproben der Altdeponie wiesen Werte zwischen etwa 2 und knapp 10 mg O₂/gTS über 4 Tage auf (Rustemeier, 2001). Die Simulationswerte sind den realen Werten also sehr ähnlich. In beiden Fällen ist der Abbau zum Zeitpunkt der Messwerterfassung schon fortgeschritten. Dafür sprechen auch die geringen durchschnittlichen TOC-Konzentrationen von Abfallproben aus der Altdeponie, die gemessen nach DIN EN 1484 „Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung“ unter 8 % liegen (Rustemeier, 2001). Die Prozesssimulation zeigt TOC-Werte von etwa 11 % bezogen auf die Trockensubstanz, was demnach mit realen Werten gut vergleichbar ist, wenn man das höhere Alter der realen Abfallproben berücksichtigt.

Vergleich der Kohlenstoffemissionen über die Gasphase

Bei einer computersimulierten belüfteten Deponie entweichen 11 g CO₂-C/kg TS Kohlendioxid-C und 1 g CH₄-C/kg TS Methan-C (also 12 g C/kg TS) über die Gasphase und bei einer unbelüfteten Deponie entweichen 3 g CO₂-C/kg TS Kohlendioxid-C und 2 g CH₄-C/kg TS Methan-C (also 5 g C/kg TS) über die Gasphase. In der computersimulierten belüfteten Deponie entweicht also vergleichsweise mehr Kohlenstoff, was auf die höhere Abbaurate (12 statt 6 Gew.-%) zurückzuführen ist. Ohne Belüftung entsteht dafür im Verhältnis deutlich mehr Methan, jedoch verbleibt mehr abbaubares Substrat im Feststoff. In Deponiesimulationsreaktoren im Labor wurden in Deponiemüllproben maximal etwa 8 g CO₂-C/kg TS Kohlendioxid-C und 4 g CH₄-C/kg TS Methan-C (also 12 g C/kg TS) in der Gasphase gemessen (Rustemeier, 2001). Die computersimulierten Werte sind also gut vergleichbar mit Labormessungen, wenn man den fortgeschrittenen Abbauzustand der realen Abfallproben berücksichtigt.

Vergleich Sulfatkonzentrationen und Schwefelwasserstoffemissionen

Sulfationen entstehen bei der biochemischen Oxidation von Sulfiden und beim aeroben Abbau organischer Schwefelverbindungen (siehe auch Kapitel 5.6). In vielen Gewässern ist Sulfat in relativ hohen Konzentrationen messbar. So können in Oberflächengewässern bis 100 mg/l Sulfat und auch darüber auftreten (Worch, 1997).

Nur bei zehnfach höherer Belüftung sind die Simulationsergebnisse am Computer mit realen Messwerten von Sulfatkonzentrationen und Schwefelwasserstoffemissionen vergleichbar.

In der Computersimulation tritt bis zur Belüftung kein Sulfat auf (Abbildung 9-13). Erst nach Belüftungsbeginn steigt die Konzentration auf maximal 8,0 mg/l Sulfat (entspricht 2,7 mg/l Sulfat-S) an. Die Zunahme des Sulfats ist auf die Oxidation des Sulfids durch die Belüftung zurückzuführen. Daher nimmt die Schwefelwasserstoffkonzentration nach Belüftungsbeginn auch in der Computersimulation ab und die Sulfatkonzentration steigt zeitverzögert an.

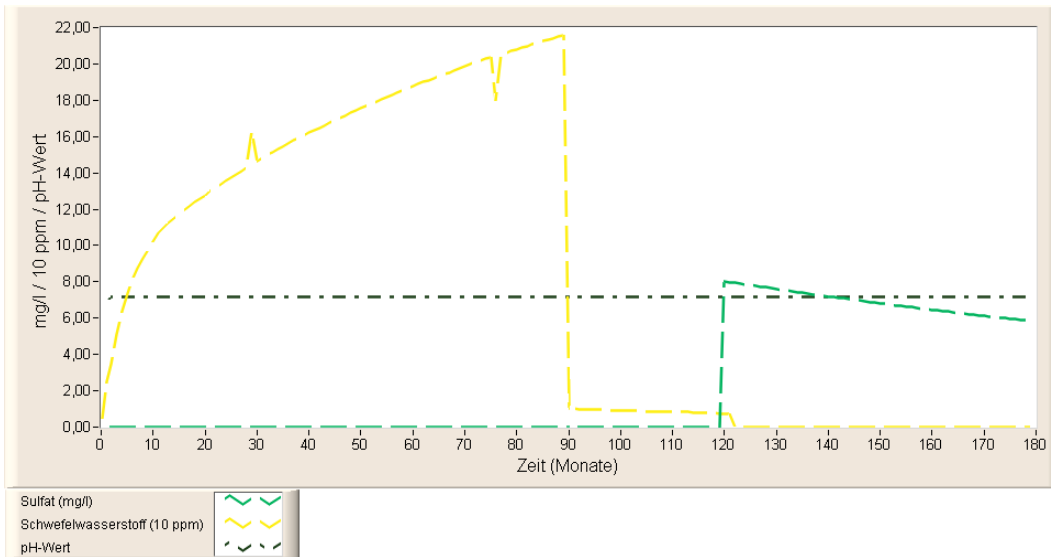


Abb. 9-13: Simulationsergebnis: Sulfatkonzentrationen, Schwefelwasserstoffemissionen und pH-Werte einer mit dem Simulationsprogramm simulierten belüfteten Deponie

Die Sulfatkonzentrationen in der hier als Beispiel gewählten realen Altdeponie sind nach Belüftungsbeginn deutlich höher als in der Simulation (bis etwa 350 mg/l). Jedoch wurden auch sehr viel niedrigere Sulfatgehalte ≤ 6 mg/l im Sickerwasser von Laborversuchen mit Proben aus verschiedenen anderen Deponien und mit unterschiedlichen Ablagerungsaltern gemessen (Rustemeier, 2001). Vor einer Deponiegasabsaugung wurden in der gewählten realen Altdeponie maximale Sulfatgehalte von 22,5 mg/l festgestellt (Rustemeier, 2001). Sowohl in der realen Altdeponie als auch in der Computersimulation treten die höheren Sulfatkonzentrationen also zeitlich verzögert nach Belüftungsbeginn auf.

Als Ursache für die geringeren Werte in der Computersimulation können schwefelhaltige Ablagerungen in der realen Deponie in Frage kommen, die in der Simulation nicht berücksichtigt wurden. So treten in der Simulation ähnlich hohe Werte wie in der Altdeponie auf, wenn eine Anfangskonzentration von 500 mg/kg oTS Sulfat angenommen wird (nicht abgebildet).

Die Schwefelwasserstoffkonzentration sinkt in der Computersimulation von maximal 215 ppm auf 0 ppm nach etwa 32 Monaten nach Belüftungsbeginn ab (Abbildung 9-13). Auch in der Altdeponie wurden hohe Schwefelwasserstoffkonzentrationen kurz vor Belüftungsbeginn gemessen (maximale Konzentration 274 ppm), die nach Belüftungsbeginn zeitlich verzögert bis auf 0 ppm absanken (Rustemeier, 2001).

Durch diffusen Lufteintrag in Altdeponien sind höhere Sulfatkonzentrationen und niedrigere Schwefelwasserstoffkonzentrationen als in der Prozesssimulation denkbar. Das wiederum könnte als minimaler Lufteintrag simuliert werden.

Vergleich der pH-Wertverläufe

Der pH-Wert in der Computersimulation einer belüfteten Altdeponie beträgt durch die simulierte Kalkzugabe relativ konstant 7,1 (Abbildung 9-13). In der Altdeponie wurden pH-Werte von etwa 7 und nach Belüftungsbeginn bis 7,5 gemessen (Rustemeier, 2001). In der Simulation steigt der pH-Wert auch an, aber je nach Belüftungsmenge nur zwischen 0,01 und 0,1. Ohne simulierte Kalkzugabe liegt der pH-Wert in der Simulation bei etwa 5 und steigt nach Belüftungsbeginn auf pH-Wert 6,9 an (nicht abgebildet). Die computersimulierten Werte und deren Konzentrationsverlauf sind also mit gemessenen Werten an einer Altdeponie vergleichbar, wenn man Kenntnisse über die Inhaltsstoffe oder Analysenwerte der Deponie für Voreinstellungen im Programm hat. Zur Berücksichtigung von Einflüssen wie pH-Wert wirksame Bauschuttagerungen kann der pH-Wert im Simulationsprogramm durch geeignete Vorgaben so eingestellt werden, dass die davon abhängigen Simulationsergebnisse mit realen Verhältnissen gut übereinstimmen.

Vergleich der Ammonium-, Nitrat- und Nitritkonzentrationen

In der Computersimulation steigt die Ammoniumkonzentration mit einsetzender Belüftung aufgrund des ansteigenden aeroben mikrobiologischen Abbaus an. Erst bei zehnfach höherer Belüftung, also $0,005 \text{ m}^3/\text{h}$ statt $0,0005 \text{ m}^3/\text{h}$ wie in der Deponiesimulation vorgegeben, treten die Nitrifikationsprodukte Nitrit und Nitrat auf (Abbildung 9-14).

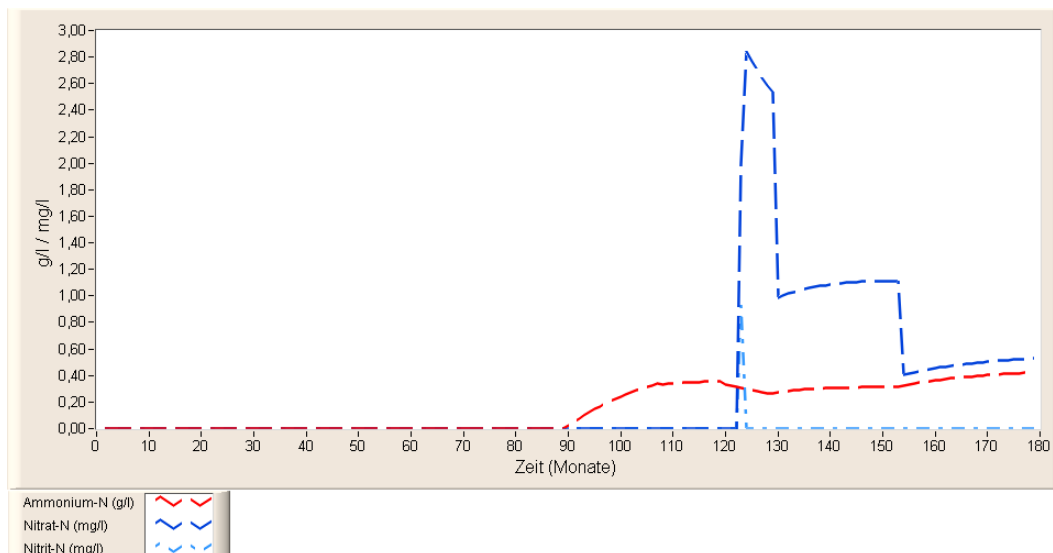


Abb. 9-14: Simulationsergebnis: Ammonium-N-, Nitrat-N- und Nitrit-N-Konzentrationen einer mit dem Simulationsprogramm simulierten belüfteten Deponie

In der Computersimulation einer belüfteten Deponie steigt nach etwa 32 Monaten nach Belüftungsbeginn die Nitrat-N-Konzentration auf ein Maximum von 2,8 mg/l an (Abbil-

dung 9-14). Vor Belüftungsbeginn ist Nitrat nicht enthalten. Nitrit-N ist während der ganzen Simulationszeit nur im 123. Monat einmal mit 0,9 mg/l vorhanden. Deutlich zu erkennen ist der nach dem Belüftungsbeginn einsetzende Anstieg der Ammoniumkonzentration. Vor Belüftungsbeginn betragen die Konzentrationen bis zu 3 mg/l Ammonium-N und nach Belüftungsbeginn maximal 422 mg/l. Die Konzentrationsunterschiede von Ammonium-N sind vor und nach Belüftungsbeginn in der Simulation deutlich höher als in der Altdeponie (Rustemeier, 2001). In der Altdeponie schwankten die Ammonium-N-Konzentrationen stark. Es wurden Werte bis zu 260 mg/l Ammonium-N im Sickerwasser gemessen. Für Sickerwasser aus unbelüfteten Hausmülldeponien werden Ammonium-N-Konzentrationen von 725 mg/l im Mittel genannt (Ehrig, 1980). Diese hohen Ammoniumkonzentrationen sind unter aeroben und anaeroben Milieubedingungen in der Prozesssimulation bei größeren Abbauraten feststellbar. Wegen des geringen anaeroben Abbaus sind die Ammoniumkonzentrationen vor der Belüftung daher sehr gering.

Der Vergleich der Ammonium-, Nitrit- und Nitratkonzentrationen mit einer realen belüfteten Altdeponie zeigt Übereinstimmung mit dem Auftreten der Nitrifikationsprodukte Nitrit und Nitrat nach Belüftungsbeginn (Rustemeier, 2001). Nitrat-N wurde in Konzentrationen bis zu etwa 10 mg/l gemessen, wobei die meisten Messwerte niedriger waren (Rustemeier, 2001).

Simulationsergebnis einer belüfteten Deponie (geringe Belüftung bei anaerobem Milieu)

Die Simulationsergebnisse einer belüfteten Deponie zeigen, dass mit dem Simulationsprogramm reale Ergebnisse und Trends, wie sie von zahlreichen Autoren auch anhand von Laborversuchen beschrieben werden, nachgestellt werden können. Die Computersimulation ergibt, dass durch eine geringe Belüftung der anaerobe Abbau stark reduziert werden kann. Wegen der knappen Belüftung tritt der aerobe Abbau aber nicht wie in der Kompostierung ein. Der Kohlendioxidaustrag bleibt kleiner und oxidierte Stickstoff- und Schwefelverbindungen treten im Sickerwasser in Abhängigkeit von der Belüftungsmenge auf. Der pH-Wert steigt nach Belüftungsbeginn entsprechend der Belüftungsstärke und der Inhaltsstoffe - vor allem Kalk - an, denn organische Säuren werden aerob abgebaut und es werden anaerob weniger nachgebildet. Ohne Belüftung verbleibt mehr Kohlenstoff, Stickstoff und Schwefel im unabgebauten Material als mit geringer Belüftung. Vor allem Stickstoff und Schwefel werden durch die Belüftung verstärkt emittiert, wobei Schwefel über potentiell Sickerwasser als Sulfat entweicht und nicht über die Gasphase als Schwefelwasserstoff. Das klimawirksame Gas Distickstoffoxid entsteht in der Simulation nur bei Belüftung. In der Prozesssimulation am Computer wird der mikrobiologische Abbau durch die Belüftung also beschleunigt und es wird vergleichsweise mehr Kohlendioxid und weniger Methan emittiert.

10 Beurteilung des Simulationsmodells und Diskussion

Der Vergleich von Tendenzen und Größenordnungen der simulierten Werte mit empirisch gewonnenen Ergebnissen zeigte, dass das Simulationsmodell für die Praxis zum Beispiel zur Emissionsoptimierung oder Anlagenplanung und für die Ausbildung hinreichend genaue und mit der Realität übereinstimmende Werte in Form von Kurven, Konzentrationen und Bilanzen ausgibt. Aufgrund vieler Einstellungsalternativen können fast alle gängigen Prozessbetriebsarten für die biologische Behandlung von Feststoffen simuliert werden. Das beinhaltet die Reaktor- bzw. Schüttungsform, aerobe und anaerobe Milieubedingungen, auch im Wechsel, viele unterschiedliche Belüftungsarten und wahlweise Batch- oder Chargenbetrieb und den quasi-kontinuierlichen Betrieb jeweils im eingefahrenen Zustand und in den Anfangsphasen.

Die Entstehungen, Konzentrationen und Entwicklungen der energie- und explosionsrelevanten Gase Wasserstoff und Methan, aber auch die anderen bei mikrobiologischen aeroben und anaeroben Abbauprozessen auftretenden Stoffe, können unter den unterschiedlichen und - analog zur Wirklichkeit - in der Regel nicht optimalen Milieubedingungen anhand der graphischen Darstellungen und der Array- und Einzelwertangaben betrachtet und beurteilt werden. Änderungen von hemmenden Einflüssen können simuliert und so Prozesse optimiert werden. Besonders wichtig ist hierfür auch der Wärme- und Wasserhaushalt, die beide im Simulationsmodell berücksichtigt sind.

Die Frage nach dem Verbleib der Nährstoffe Kohlenstoff, Stickstoff und Schwefel in den verschiedenen Phasen kann mit den unterschiedlichsten Einstellungen und Betriebsarten in Mengen, Verhältnissen und Tendenzen mit dem Prozesssimulationsprogramm beantwortet werden.

Wegen der Komplexität biologischer, biochemischer, chemischer und physikalischer Prozesse in inhomogenen Feststoffgemischen können auf Simulationsbasis nur näherungsweise Ergebnisse erzielt werden, die jedoch für die Praxis sehr hilfreich sein können. Denn auch empirische Untersuchungen sind fehlerbehaftet: Durch Probenahmen und Probenaufbereitungen - vor allem aus inhomogenen Feststoffgemischen wie im Bereich der Abfallwirtschaft - und Analysen, Analysenmethoden und Berechnungen können Fehler und Ungenauigkeiten entstehen. Trotzdem zeigten die Werte eine gute Übereinstimmung in den Entwicklungen und in den Mengenverhältnissen, obgleich die Ergebnisse aus dem Labor und in dem Simulationsprogramm vollständig anders ermittelt werden. Kosten- und zeitaufwendige Laboruntersuchungen und Analysen könnten daher zumindest teilweise durch die Prozesssimulation ersetzt oder deutlich reduziert werden.

Die Problematiken der Programmierung sind in dieser Arbeit nicht dargestellt. Es wurde darauf geachtet, dass im Programm nur Werte aus sinnvollen Wertebereichen gewählt werden

können. Die große Zahl von Parametern ermöglicht auch Eingaben, die in der Wirklichkeit kaum vorkommen. Trotzdem entsprechen die Simulationsergebnisse, die man so erhält, den vorgegebenen Eingabeparametern. Wenn mikrobiologische Abbauvorgänge aufgrund der Vorgaben nicht wie gewünscht stattfinden können, zeigt das Simulationsmodell die resultierenden Ereignisse wie Milieuwechsel oder Abbaustillstand. Die unterschiedlichsten Kombinationsmöglichkeiten des Substrats, die Teilungsmöglichkeiten des Materials, die Vorgabemöglichkeit von Zuschlagsstoffen und Anfangskonzentrationen mit unterschiedlichen Einheiten und Bezügen machen das Programm komplex und rechenaufwendig. Die verborgene Logik, die sich durch die Wahl verschiedener Zustände und Prozesse ergibt, ist umfangreich. Die Kombination der Überprüfbarkeit der simulierten Ergebnisse mit empirischen Erfahrungswerten und die dann möglichen Änderungen im Programm oder sogar die Ergänzungsmöglichkeiten durch Übertragung in die Programmiersprache, jedoch unter Beachtung aller schon existierenden Vorgaben, macht das Programm zu einer Basissoftware für biologische Abbauvorgänge im Bereich der Abfallwirtschaft. Darauf aufbauend sind weitere Einsatzgebiete z. B. in der Abwasser- oder Abluftreinigung denkbar.

Durch die Verwendung unterschiedlicher Einheiten und Bezugnahmen bei Konzentrationsangaben in den Veröffentlichungen sind Vergleiche zwischen Messungen und Simulationsergebnissen dennoch oftmals schwer oder nicht möglich. Eine wesentliche Erleichterung würde eine weitergehende Normierung der für die Praxis wichtigsten Werte bringen. So könnten Konzentrationen umweltrelevanter Stoffe wie anorganische Stickstoffverbindungen einheitlich auf den Stickstoff bezogen werden. Damit keine nachträglichen Umrechnungen von Gasvolumina auf den Normzustand erfolgen müssen, wären Gewichtsangaben für Gaskonzentrationen wie Schwefelwasserstoff und Methan in Veröffentlichungen sinnvoller. Bei Kohlendioxid ist dies häufig schon üblich. Eine computergestützte Simulation könnte so zum Standard für die Aus- und Weiterbildung und für Planungen und Optimierungen von Prozessen der biologischen Feststoffbehandlung bzw. Feststoffverwertung werden. Als Beispiel hierfür ist die Kompostierung und Vergärung (Biogasgewinnung), die mechanische biologische Abfallaufbereitung (MBA) und sind Anlagen zur Verwertung von nachwachsenden Rohstoffen (NawaRo) zu nennen. Der Vorteil des Simulationsprogramms ist, dass die einmal ermittelten Daten anschließend dauerhaft Simulationen zur Verfügung stehen und mit ihnen andere Parameter auf ihre Wirksamkeit hin überprüft werden können.

Die durchgeführten Simulationen zeigten, dass die Parametrierung des Simulationsmodells großen Einfluss auf die erzielten Ergebnisse hat. Um für die Praxis verlässliche Simulationsergebnisse zu erhalten, sind vor allem entsprechende Analysen der Nährstoffzusammensetzung und Eigenschaften wie Wassergehalt und abbaubarer Anteil des Substrats erforderlich. Messfehler der Analysenwerte z. B. der Nährstoffgehalte einzelner Substrate sind im Ver-

hältnis zu prozessbedingten möglichen Ungenauigkeiten als gering wirksam einzustufen. Bei heterogenen Substratgemischen wie in der Abfallwirtschaft dürfte der Fehler durch eine nicht repräsentative Probenahme überwiegen. Das Simulationsprogramm ermöglicht anhand der Einzelsubstrate das Austesten von theoretischen Gemischen, was alternativ in der Praxis ungleich kostenintensiver ist.

Wegen der Komplexität der Software-Front ist das Programm erst nach Anpassungen der Ansicht, unter Berücksichtigung des Bedarfs (z. B. Anlagenplanung, -optimierung oder Ausbildung), für Ungeschulte einfach bedienbar. Für den Gebrauch des Programms in der Praxis könnte es daher sinnvoller und kostengünstiger sein, Simulationen anzubieten. Denkbar wäre aber auch eine Anpassung des Designs und der Bedienung an die unterschiedlichen Einsatzgebiete. Vor allem die Verwendung in der Aus- und Weiterbildung in den verschiedenen Fachgebieten könnte zur Vereinfachung der Software und zum lizenzierten Verkauf führen.

11 Zusammenfassung

Das Programm **SimuCF** zur „Prozesssimulation biologischer Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft“ unter Verwendung des graphischen Programmiersystems LabVIEW™ 7.0 von National Instruments, erhältlich auf Anfrage bei deipser@t-online.de, beinhaltet ein Simulationsmodell, das für die Praxis wie der Anlagenplanung, Anlagenoptimierung und des Anlagenbetriebs und für die Aus- und Weiterbildung sehr gute und hilfreiche Ausgabewerte liefert. Die Materialeingabe mit ihren Eigenschaften und die Anfangsbedingungen - insgesamt je nach Prozess etwa 30 Parameter - sind dabei maßgeblich für die Ergebnisse verantwortlich.

Das Simulationsmodell ist im Wesentlichen geprägt durch die Umrechnung des Materials in Modellmoleküle und anschließender Verarbeitung anhand stöchiometrischer Reaktionsgleichungen. Die Dynamik und Zeitdiskretion wird durch das Erzeugen von Arrays in einer Vielzahl von Iterationsschleifen (ca. 50) erreicht.

Das Simulationsmodell enthält die wichtigsten mikrobiellen Abbauschritte für drei Substratgruppen unter Berücksichtigung von Verzögerungsphasen: Kohlenhydrate, Proteine und Fette. Die Abbaukinetik ist in Anlehnung an Monod (1949) modelliert. Durch getrennte Betrachtungen des aeroben Milieus, der im anaeroben Milieu ablaufenden Acetogenese und der Methanogenese können die in diesen Milieus stattfindenden spezifischen Reaktionen berücksichtigt werden. Die differenzierte Beachtung des Wasserhaushalts, der Thermodynamik und der Belüftungszustände in dem Modell ermöglicht eine Beurteilung der physikalischen Parameter wie Temperatur, Feuchtigkeit und Porösität, die die Milieubedingungen und damit die biologischen Abbauprozesse entscheidend mitprägen.

Die zur Simulation erforderlichen Berechnungen können anhand sehr vieler praxisnaher Betriebsweisen erfolgen, die von dem Anwender ausgewählt und parametrisiert werden können. Zeit- und Materialoptimierungen, Wassergehaltseinstellungen, Temperatur- und Belüftungsoptimierungen sind zu diesem Zweck sowohl automatisch durch das Programm als auch durch Vorgaben des Anwenders ausführbar.

Die Eingabewerte umfassen das Material zerlegt in Stoffgruppen und die Materialeigenschaften, die Mieten oder Reaktorform und die Umgebungsbedingungen. Vorgegebene Materialien mit ihren Eigenschaften sind Stroh, Holz, Rinde, Blätter, Gras, Früchte (z. B. Äpfel), Kartoffeln, Gemüse (z. B. Rüben), Getreide (z. B. Weizen), Hülsenfrüchte (z. B. Erbsen), Fleisch und Fisch und die Abfallgruppen Klärschlamm, Grünabfälle, Hausmüll, der organische Anteil des Hausmülls, Bioabfall, Zeitungspapier und Papierfasern. Ergänzende und zum Teil vorgegebene aber änderbare Angaben bezüglich des Materials bzw. der Umgebung sind die Schüttdichte und Dichte des Strukturmaterials, die Lufttemperatur der Umwelt,

die Materialtemperatur am Anfang, das Porenvolumen und die Setzung. Die Gehalte von Ammonium, Nitrat und Sulfat und die Zuschlagsstoffe Sand, Strukturmaterial, Kalk, Methanol und Eisen-(II oder III)chlorid können ebenfalls zur Berücksichtigung eingetragen werden. Die zu wählenden Mietenformen sind die Dreiecks-, Tafel- oder Trapezmiete und die Reaktorformen Zylinder-, Trommel- und kugelförmiger Reaktor und die Boxenform. Ergänzend zu wählen sind Isolation bzw. Temperierung oder Temperaturnachführung mit einem Reaktor-Wassermantel und eine mögliche Prozessverlustwärme.

Die Verfahrenswahl des Simulationsprogramms umfasst den aeroben oder anaeroben Batch oder Chargenbetrieb, auch quasi-kontinuierlich im Anfangszustand oder im eingefahrenen Betrieb, mit durch das Programm automatischer oder vorgegebener Materialentnahme. Die Belüftungsarten sind die konstante Belüftung, die für den mikrobiologischen Abbau optimale Belüftung und eine direkte Vorgabe pro Zeitschritt, die mit der Belüftungstemperatur und -feuchte wählbar sind. Vorzugeben ist weiterhin eine zeitgenaue oder kontinuierliche Wasserzugabe mit Wassertemperatur und Evaporation. Der Wassergehalt kann nach Wahl auf einen Mindestwert von 50 Gew.-% (durch Umprogrammierung bei Bedarf änderbar) geregelt werden. Die erforderliche Wassermenge wird zeitgenau angegeben.

Die Ausgabewerte sind umfassend und bei Bedarf auch durch Weiterentwicklung ergänzend programmierbar. Zur Übersichtlichkeit erfolgt die Ausgabe der wesentlichen Werte graphisch. Auf diese Weise dargestellt werden die physikalischen Parameter, die Stickstoff-, Schwefel- und Kohlenstoffbilanzen, die Stickstoff- und Schwefelverbindungen, die Gasemissionen und der Wasserhaushalt. Daneben sind aber auch viele Einzelwertausgaben unter Verwendung von geeigneten oder häufig verwendeten Einheiten und Bezugnahmen wie auf die Wasserphase, das Trocken- oder Feuchtgewichte und Volumina für Vergleichszwecke integriert.

Für die operationalen Modellvalidierungen der Ergebnisse des Simulationsprogramms wurden Simulationsergebnisse mit Literaturdaten und realen Messwerten, dargestellt in den Kapiteln 7 bis 9, verglichen.

Zusammengefasst ergaben die Simulationsergebnisse zur Kompostierung und Vergärung bei unterschiedlichen Betriebsarten in Kapitel 7.1, dass die Kurvenverläufe der Methan-, Kohlendioxid-, Sauerstoff- und Wasserstoffvolumenanteile und die Verläufe der Substrattemperatur und der Abbauraten mit Messungen in der Realität vergleichbar sind.

Die Simulationen des quasi-kontinuierlichen Chargenbetriebs mit und ohne Belüftung zeigten, dass die Ergebnisse im Wesentlichen den aus der Wirklichkeit beschriebenen Zusammenhängen entsprachen. Bedeutend war unter anaeroben Milieubedingungen vor allem der Temperatureinfluss. Die simulierte Kalkzugabe ergab in der Simulation wie in der Realität im

quasi-kontinuierlichen Betrieb unter aeroben und anaeroben Bedingungen bei Bioabfall eine Erhöhung des pH-Wertes und einen verbesserten mikrobiologischen Abbau.

Bei der Simulation des mehrtägigen Chargenbetriebs in der Anlaufphase mit und ohne Belüftung wurden aerob höhere Abbauraten erzielt als anaerob. Die Temperatur erreichte bei simulierter Kompostierung mit optimaler Belüftung nach einer Anfangsphase bis zu 62 °C, trotz Temperaturabfall bei Materialzugabe. Schwankungen entstanden durch die Berücksichtigung des bevorzugten Temperaturbereichs mesophiler Mikroorganismen.

Bei anaeroben mehrtägigen Chargenbetrieb wurde in der Anlaufphase ohne Lufteintrag bei der Materialzugabe in der Simulation die Methanphase dauerhaft erreicht. Mit Luftzufuhr fiel der Abbau immer wieder in die aerobe und acetogene Abbauphase zurück. Wasserstoff entwich durch die simulierte Kalkzugabe und den damit verbundenen anderen Reaktionen in beiden Fällen nicht. Ohne Kalk entstand in beiden Fällen kein Methan, aber Wasserstoff. Der Temperaturverlauf zeigte kaum einen Anstieg und lag bei etwa Außen- bzw. Materialtemperatur.

Das Simulationsergebnis zur Vergärung mit Lufteintrag zeigte in der Anfangsphase die Abnahme der molekularen Luftkomponenten Sauerstoff und Stickstoff. Der Sauerstoff wurde schnell verbraucht und der Stickstoff entwich langsamer. Das entspricht der Realität, da der Stickstoff erst mit der Gasentwicklung von Kohlendioxid, molekularem Wasserstoff und Methan ausgetrieben wird. Der Wasserstoff wurde nach einer Anfangsphase, in der sich wie in der Realität die Methanbildner entwickeln, für die Bildung von Methan verbraucht.

Der simulierte verzögerte mikrobiologische Abbau mit geringem Lufteintritt bei anaerober Betriebsweise ergab, dass Kohlendioxid durch aerobe Abbauvorgänge vermehrt produziert wurde. Methan entstand kaum, da die entsprechenden Mikroorganismen wie in der Realität gehemmt wurden. Dadurch wurde Wasserstoff nicht mehr verwertet, wodurch es in höheren Konzentrationen molekular entweichen konnte. Die Abbaurate war gering. Die zeitweilige optimale Belüftung bei anaerober Betriebsweise zeigte, dass der aerobe Abbau einen deutlichen Anstieg der Abbaurate bewirkte. Die Methanproduktion begann entsprechend später und der pH-Wert stieg ohne Kalkzugabe in der Phase der Belüftung an und fiel anschließend wieder ab. Die Temperatur war in der Phase des aeroben Abbaus mit optimaler Belüftung in diesem Beispiel nur leicht erhöht, denn durch die anaerobe Vorbehandlung wurde wie in der Realität schon Substrat umgesetzt. Während des aeroben Abbaus stieg die Kohlendioxidkonzentration aufgrund der optimalen Belüftung wie in der Realität parallel zum aeroben Mikroorganismenwachstum allmählich an und die Sauerstoffkonzentration sank entsprechend. Nach Abbruch der Belüftung begann der anaerobe Abbau erneut. Molekularer Wasserstoff entwich jeweils in den ersten anaeroben Tagen, da er wie in der Realität durch fehlende Mikroorganismen nicht verwertet wurde. Sauerstoff wurde nach der Zwischenbelüftung lang-

samer verbraucht als am Anfang, da schnell und leicht abbaubare Substanzen wie in der Realität bereits abgebaut waren. Weitere Simulationen zeigten, dass im gleichen Zeitraum bei ausschließlich anaerobem Abbau mit Kalkzugabe deutlich mehr Methan produziert wurde. Die Ergebnisse entsprechen also realen Beobachtungen.

Der Vergleich der Gasemissionen bei der Kompostierung und Vergärung im Batchbetrieb in der Realität mit den Simulationsergebnissen ergab für die Permanentgase Stickstoff, Methan, Kohlendioxid, Sauerstoff und Wasserstoff unter Berücksichtigung der Zusammenhänge eine gute Übereinstimmung der Gaskonzentrationsverläufe. Die flüchtigen organischen Verbindungen ohne Methan (NMVOC) in der Gasphase sind in dem Simulationsmodell nicht berücksichtigt.

Die Simulationsergebnisse einzelner Parameter in Kapitel 7.2 entsprachen weitgehend realen Feststellungen.

Hier sind die Simulationsergebnisse zur Gasentstehung zu nennen, die in der Größenordnung und im Mengenverhältnis ähnlich waren. Eine Optimierung der Wasserstoffproduktion konnte der Realität entsprechend durch geringe Belüftung und damit Behinderung der Entstehung von Methanbildnern erreicht werden. Genauere Prozessoptimierungen sind durch Änderungen der Eingabewerte im Simulationsprogramm ermittelbar. Es muss jedoch beachtet werden, dass auch in der Simulation ein stabiler Prozessverlauf gefunden werden sollte, damit eine Übertragbarkeit in die Wirklichkeit denkbar ist. Die Simulationsergebnisse zu Sauerstoffverbrauch und Gasbildung waren mit veröffentlichten Werten aus der Wirklichkeit vergleichbar.

Die Charakteristik verschiedener im Simulationsprogramm integrierter Abfälle entsprach den allgemeinen Erfahrungen, wobei die individuelle Schwankungsbreite von Faktoren wie der örtlichen Zusammensetzung und Alter des Abfalls sowie von der Jahreszeit abhängig ist.

Die Simulationsergebnisse zu Gasbildungspotential und Atmungsaktivität zeigten, dass die zur Beurteilung von Abfällen wesentliche Größe, die Abbaurate, durch das Gasbildungspotential und die Atmungsaktivität nicht ausreichend dargestellt werden kann. Auch der Sauerstoffverbrauch, bezogen auf die Wassermenge, charakterisiert die Abbaurate nicht.

Das Gasbildungspotential (GP_{21}) der fünf im Programm integrierten Abfallarten Klärschlamm, Grünabfälle, Hausmüll, organischer Hausmüll und Bioabfall lag zwischen 2,6 und 146,3 l/kg oTS. Der Sauerstoffverbrauch, vergleichbar mit dem BSB_5 , variierte zwischen 0 und 4714 mg/l H_2O . Die Atmungsaktivität (RA_4) ergab Werte zwischen 0,3 und 25,0 mg O_2 /g oTS.

Die Simulationsergebnisse zur Methanproduktion ergaben, bezogen auf die gesamte organische Trockensubstanz, dass Hausmüll unter gleichen Bedingungen mit maximierter Abbau-

rate am meisten Methan (320,1 l/kg oTS) emittiert, gefolgt von Bioabfall und organischem Hausmüll (189,8 bzw. 172,2 l/kg oTS).

Die Simulationsergebnisse zum Wassergehalt ergaben mit der Wirklichkeit vergleichbare Werte. Es wurde entsprechend den Vorgaben im Programm ab einem Wassergehalt von 80 Gew.-% die Wasserhaltekapazität erreicht. Aerobe Abbauprozesse wurden dann anaerob. Ein höherer Wassergehalt ist auch bei erheblicher Wasserzugabe in der Simulation wie in der Realität nur kurzfristig erreichbar. Bei geringer täglicher Wasserzugabe oder hoher einmaliger Wasserzugabe am Anfang, wurde die Wasserhaltekapazität nicht erreicht, da das Wasser vorher als Sickerwasser das Material wie in der Realität verließ

Ein Vergleich der im Simulationsprogramm berechneten metabolischen Wassermengen mit Schätzungen aus der Literatur ergab eine gute Übereinstimmung.

Die Simulationsergebnisse zum Temperaturverlauf zeigten, dass auch schwankende Temperaturverläufe gut und folgerichtig wiedergegeben werden. Im Programm berücksichtigte und die Schwankungen beeinflussende Faktoren sind die Unterscheidung zwischen leicht, mittel und schwer abbaubaren Substanzen, sich verändernder Milieubedingungen (z. B. Wassergehalt, pH-Wert, Belüftungsschwankungen, Änderung des freien Porenvolumens) oder Hemmungen aufgrund zu hoher Konzentrationen bzw. Materialzugaben.

Die Temperaturen bei der Simulation der Vergärung sind wie in der Realität durch die aktiven Organismengruppen und deren unterschiedliche und jeweils recht enge Temperaturoptima beeinflusst. In der Simulation wird dies sichtbar durch die mögliche Wahl der Berücksichtigung von Temperatureinflüssen auf die Acetogenese. Die Abbauraten und damit auch die Gasbildung können dadurch erheblich variieren.

Die Simulationsergebnisse von Temperaturentwicklungen im Material ohne Abbauprodukte zeigten durch die Berücksichtigung der Schmelz- bzw. Erstarrungsenergiezu- bzw. -abfuhr bei Über- bzw. Unterschreitung von 0 °C realitätsentsprechend eine kurze Abkühlungsunterbrechung nach zwei Tagen. Bei Belüftung wurde durch die Verdunstung des Wassers bei höheren Außentemperaturen als die Belüftungstemperatur, die Materialtemperatur zunehmend in Richtung Belüftungstemperatur eingestellt. Bei niedriger Umgebungstemperatur unterhalb der Belüftungstemperatur kondensierte das Wasser der Belüftungsluft im Material, so dass der Wassergehalt zunahm und das Material mit der Zeit tendenziell eher die Außentemperatur erreichte. Ähnliche Ergebnisse erhält man bei den anderen Materialschüttformen, wenn das Volumen/Oberflächenverhältnis wenig abweicht. Die Simulationsergebnisse sind also physikalisch folgerichtig.

Die simulierten pH-Werte entsprachen grundsätzlich den in der Wirklichkeit gemessenen Werten. Wie bei der Simulation der Nährstoffbilanzen muss berücksichtigt werden, dass die

Zusammenhänge der Milieubedingungen in der Realität komplexer sind, jedoch scheinen die Tendenzen und Entwicklungen in der Simulation gut wiedergegeben zu sein. Für die präzisere Beurteilung der Realitätsentsprechung der Simulationsergebnisse müssten weitergehende Vergleiche durchgeführt werden.

Die Simulationsergebnisse zu den in der Abfallwirtschaft relevanten Stoffen Ammonium, Nitrat, Nitrit und Sulfat in der Wasserphase und entsprechend im Sickerwasser zeigten Konzentrationsschwankungen und -spitzen, was aus den im Simulationsmodell vorgegebenen Abläufen und Grenzwerten resultiert. Vor allem das Auftreten von Nitrat, Nitrit und Sulfat ist abhängig von dem Sauerstoffrestgehalt und den Milieubedingungen pro Zeitschritt, wodurch sporadische Konzentrationsspitzen und plötzliche Konzentrationsanstiege und -abfälle begünstigt werden. Diese Verläufe sind in der Wirklichkeit zu beobachten, vermutlich aus den gleichen und weiteren Gründen, weshalb davon ausgegangen werden kann, dass die Simulationen aussagekräftige Ergebnisse liefern. Für einen präziseren Vergleich müssten die Belüftungsraten in realen Prozessen erfasst und in das Simulationsprogramm übertragen werden.

Die Simulationsergebnisse zu Stickstoff- und Schwefelemissionen ergaben eine Wiedergabe der Beobachtungen in der Wirklichkeit. Die Ergebnisse zu den Stickstoffemissionen ergaben z. B. wie in der Realität, dass Stickstoffverluste über die Gasphase auch in der Simulation von der Belüftungsstärke und dem pH-Wert abhängig sind. Je stärker die Belüftung ist, desto größer ist der Stickstoffverlust, überwiegend als Ammoniak, über die Gasphase. Die Schwefelreaktionen waren in der Simulation ebenfalls sehr von dem Belüftungszustand und dem pH-Wert abhängig. Bei optimaler Belüftung und leicht ansteigendem pH-Wert (ca. 6,8) traten in der Simulation kaum Schwefelwasserstoff in der Gasphase und organische Säuren auf, dafür entstand Sulfat in der Wasserphase. Bei anaerober Betriebsweise sank der pH-Wert ab und die organischen Säuren und Schwefelwasserstoff wurden deutlich mehr produziert und Sulfat entstand nicht. Mit Kalkzugabe wurden in der Simulation deutlich weniger organische Säuren und Schwefelwasserstoff bei einem pH-Wert von konstant 7,2 gebildet. Die Simulation von Eisenchlorid-Zugaben zur Reduktion der Schwefelwasserstoffemissionen ohne vorgegebener Sulfatanfangskonzentration, ohne Belüftung und ohne Kalk ergab bei Zugabe von 1 g Eisen(III)chlorid zu 100 kg FS Bioabfall eine insgesamt geringe Schwefelwasserstoffreduktion in der Gasphase. Unter der Annahme im Simulationsmodell, dass nur 50 % der Eisenionen gelöst und wirksam sind, bewirkte die Zugabe von 140 g Eisen(III)chlorid eine vollständige Schwefelwasserstoffreduktion. Die Simulationsergebnisse entsprachen somit den in der Realität zu beobachtenden Zusammenhängen.

Die Simulation der Schwermetallhemmung zeigt im Simulationsprogramm nur die Tendenzen an und ist auf die Wirklichkeit nicht übertragbar, da es zu viele Einflussfaktoren gibt, die

in der Simulation nicht berücksichtigt werden (z. B. spezifische Reaktionen einzelner Schwermetalle). Es kann aber eine Schwermetallhemmung im Programm simuliert werden, die wie in der Realität zu einer Abbauverzögerung führt, denn auch in der Wirklichkeit kommt im Bereich der biologischen Abfallbehandlung der Abbau selten ganz zum Erliegen. Eine Aufhebung der Hemmung erfolgt in der Simulation, wenn bei niedrigem pH-Wert über einen längeren Zeitraum, der von der Materialmenge abhängig ist, Sickerwasser entsteht. Diese Zusammenhänge konnten an einem Beispiel dargestellt werden.

Die Simulationsergebnisse der physikalischen Parameter in Kapitel 7.3 bestätigten, dass das Simulationsmodell für biologische Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft optimiert ist. Die Simulation physikalischer Parameter ist in inhomogenen Feststoffgemischen wie sie in der Abfallwirtschaft vorkommen je nach angestrebter Genauigkeit und Auflösung umfangreich und von vielen auch unbekanntem Größen abhängig. Zur Vereinfachung der komplexen Zusammenhänge wird in der Simulation von einer ständigen Vergleichmäßigung des Materials ausgegangen (Raumkontinuität). Für die Darstellung der Simulationsergebnisse der physikalischen Parameter wurde das freie Porenvolumen (fas) (Vol.-% FS), die Volumenreduktion (Vol.-%), die Materialhöhe (m), die Wasserdurchlässigkeit (berechneter Durchlässigkeitskoeffizient) (kf-Wert) (m/d), die Substrattemperatur (°C) und die Abbaurate (Gew.-%) betrachtet. Beeinflusst werden diese Werte vor allem durch die Belüftungsweise bzw. durch die vorgegebene Betriebsart. Es zeigte sich, dass es für einen Vergleich mit Literaturwerten erforderlich ist, die Berechnungsmethoden und vor allem die Einheiten und Wertebezüge zu berücksichtigen. Die durchgeführten Simulationsbeispiele zeigten gute Übereinstimmung mit Beobachtungen in der Realität und waren somit plausibel.

Für den Vergleich der Kompostierungssimulation mit einem Laborversuch in Kapitel 8 wurden die Parameter Wassergehalt, Kohlendioxid- und Sauerstoffgehalt, pH-Wert und Substrattemperatur im zeitlichen Verlauf betrachtet. Der Laborversuch zur Kompostierung und die Simulation des Laborversuchs zeigten in Kapitel 8.2 vergleichbare Werte, wenn Schwankungen des Luftstroms durch Materialveränderung oder Pumpenunregelmäßigkeiten (Belüftungsschwankungen) unberücksichtigt blieben. Ein präziserer Vergleich wäre durch eine weitergehende Übereinstimmung der Bedingungen, also der einzelnen Parameter, möglich. Auch die Simulationsergebnisse der physikalischen Parameter des Laborversuchs in Kapitel 8.3 waren plausibel, wobei nur die erhebliche Materialhöhenabnahme im Behälter, also die Volumenreduktion, im Laborversuch gemessen wurde und damit direkt vergleichbar war. Die Ergebnisse zeigten eine sehr gute Übereinstimmung.

Die empirischen Ergebnisse aus der Literatur im Vergleich zur Simulation in Kapitel 9 machten deutlich, dass die Simulationsergebnisse trotz der vielen Einflüsse sehr nahe an den rea-

len Messwerten lagen. Die vereinfachenden Annahmen im Simulationsmodell reichen demnach aus, um die Zusammenhänge nachvollziehbar darzustellen.

Der Vergleich der Stickstoffemissionen in der Kompostierungssimulation mit realen Messungen in Kapitel 9.1 ergab, dass die Simulationsergebnisse den empirischen Beobachtungen sehr ähnlich sind. Die wesentlichen Stickstoffemissionen erfolgten in der Simulation beim aeroben Abbau im Wesentlichen über die Gasphase. Bei geringer Belüftung und mit zunehmendem Wassergehalt wurde Stickstoff stärker über die Wasserphase emittiert. Die mengenmäßig bedeutsamsten Emissionen über die Gasphase waren in der Simulation die Verbindungen Ammoniak und produzierter Distickstoff mit phasenweise unterschiedlicher Intensität. Da produzierter Distickstoff wegen des hohen Stickstoffanteils in der Luft schwer nachzuweisen ist, könnten die Simulationsergebnisse ergänzende Ergebnisse sein.

Der Vergleich der Simulationsergebnisse mit Parametern großtechnischer Biogasanlagen in Kapitel 9.2 zeigte ebenfalls, dass die erzielten Simulationsergebnisse sehr nahe an den realen Werten lagen. Für einen noch besseren Vergleich zwischen Simulationen und unterschiedlichen Biogasanlagen wären präzisere Angaben der tatsächlich eingetragenen Mengen an Kohlenhydraten, Proteinen und Fetten (Analysenwerte) und genauere Angaben zu den Betriebsparametern notwendig. Die Gegenüberstellung der simulierten Biogasanlage mit realen Angaben der Biogasanlage Karlsruhe zeigte, dass bei Übereinstimmung der wichtigsten Parameter sehr gute Ergebnisse erzielt werden können.

Der Vergleich der Methanbildung der im Programm vorgegebenen Substrate in Kapitel 9.3 ergab, dass im Wesentlichen die unterschiedliche Substratzusammensetzung zu abweichenden Ergebnissen führte. Aber auch die Betriebsart hatte einen großen Einfluss auf die Methangasbildung. Für eine genauere Überprüfung der Simulationsergebnisse müssten daher weitere Simulationen mit angepassten und vergleichbaren Substratzusammensetzungen und Betriebsparametern durchgeführt werden. Es ist jedoch festzustellen, dass die Simulationsergebnisse im Größenbereich realer gemessener Werte lagen und eine Optimierung gesuchter Parameter mit dem Simulationsprogramm möglich ist.

Der Vergleich der Ermittlung von Methanbildungspotentialen im Labortest in Kapitel 9.4 unter Laborbedingungen mit der entsprechenden Simulation zeigte, dass das Simulationsmodell für Fette geringere Biogas- und Methanproduktionen ausgibt als unter realen Bedingungen, die Biogasemissionswerte für Proteine deutlich über den maximalen Werten aus der Praxis liegen können, die Methanproduktion aber vergleichbar ist, und Kohlenhydrate in der Simulation etwas mehr Biogas als unter realen Bedingungen produzieren können, aber weniger Methan. Erkennbar wurde, dass die gemessenen Werte unter realen Bedingungen auch von Werten, die in Labortests ermittelt wurden, erheblich abweichen können. Der beispielhafte Vergleich zeigte vor allem wieder, dass die Parametrierung des Simulationsmodells großen

Einfluss auf die erzielten Ergebnisse hat. Um für die Praxis verlässliche Simulationsergebnisse zu erhalten, sind vor allem entsprechende Analysen des Substrats erforderlich. Wegen der Schwankungen von Messwerten in Labortests und unter realen Bedingungen könnten die Simulationsergebnisse aber die zuverlässigeren Werte sein.

Die Simulation eines weiteren Anwendungsgebiets (belüftete Deponie) mit dem Programm in Kapitel 9.5 ergab, dass mit dem Simulationsprogramm reale Ergebnisse und Trends zur Belüftung einer Altdeponie nachgestellt werden können. Verglichen wurden die Gaszusammensetzung, die Kohlenstofffracht und Kohlenstoffemissionen über die Gasphase, die Atmungsaktivität und TOC-Konzentrationen, die Sulfatkonzentrationen und Schwefelwasserstoffemissionen, pH-Wertverläufe und Ammonium-, Nitrat- und Nitritkonzentrationen in der Wasserphase. Die Prozesssimulation einer belüfteten Deponie am Computer zeigte, dass durch eine geringfügige Belüftung der anaerobe Abbau stark reduziert werden kann. Ohne Belüftung verblieb mehr Kohlenstoff, Stickstoff und Schwefel im unabgebauten Material als mit geringer Belüftung. Vor allem Stickstoff und Schwefel wurden durch die Belüftung verstärkt emittiert, wobei Schwefel über potentiell Sickerwasser als Sulfat entwich und nicht über die Gasphase als Schwefelwasserstoff. Das klimawirksame Gas Distickstoffoxid entstand in der Computersimulation nur bei Belüftung. In der Prozesssimulation wurde der mikrobiologische Abbau durch die Belüftung also beschleunigt und vergleichsweise mehr Kohlendioxid und weniger Methan emittiert. Die Werte des Simulationprogramms waren insgesamt mit Messwerten an einer realen belüfteten Altdeponie und mit Messwerten von Deponiesimulationsreaktoren (DSR) im Labor vergleichbar, vor allem wenn man die weitgehend unbekanntes Inhaltsstoffe (Zusammensetzung Hausmüll, Sperrmüll, hausmüllähnliche Gewerbeabfälle und Bauschutt) in einer Altdeponie berücksichtigt.

Die Simulationsergebnisse anhand ausgesuchter Fallbeispiele, dargestellt in den Kapiteln 7-9, zeigten, dass die Erfahrungen aus der Praxis der biologischen Abfallbehandlung mit dem Simulationsprogramm wiedergeben werden können. Die in den Kapiteln 7-9 ausgeführten Vergleiche zwischen Werten der Simulation und realen Messwerten sind jedoch nur einzelne Testergebnisse und keine vollständige Modellvalidierung. Schon die Änderung eines Parameters ergibt in der Regel abweichende Ergebnisse. Die Komplexität ist entsprechend der Anzahl der Eingabeparameter so hoch, dass eine vollständige Darstellung sämtlicher möglicher Simulationsergebnisse nicht möglich ist.

Zusammenfassend ist festzustellen, dass die Rückführung der komplexen aeroben und anaeroben biologischen Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft auf wesentliche Abbauvorgänge in einem Prozesssimulationsprogramm eine Prognose zu Dauer, Emissionen und Materialveränderungen ermöglicht. Der mikrobielle bzw. biochemische und chemisch-

physikalische Abbau wirkt dabei mitbestimmend auf das Milieu ein und ist umgekehrt auch selbst davon abhängig. Durch ständigen Abgleich bei einer Zeitauflösung von einem Tag (durch Umrechnung auch Stunden, Wochen bzw. Monate) kann durch Vorgabe der Anfangswerte, aber auch durch Vorgabe und Einstellung zu erwartender Ereignisse wie Stoff- und Wasserzugaben, Niederschläge, Verdunstung, Wenden und Wechsel von Belüftungszuständen, die Entwicklung des Abbaus im Hinblick auf Gasproduktion, Sickerwasserentstehung und Transformationen von Kohlenstoff-, Stickstoff- und Schwefelatomen in unterschiedliche Verbindungen simuliert werden. Die maßgeblich beeinflussenden physikalischen Parameter wie Wassergehalt, Temperatur und Porenvolumen, also auch Diffusion, Gasfluss und freies Luftporenvolumen, werden dabei für jeden Zeitschritt neu berechnet.

Ein Vergleich der Simulationsergebnisse mit empirisch gewonnenen Werten zeigte, dass die Resultate im Verhältnis, in der Entwicklung und in der Größenordnung sehr ähnlich sind.

12 Ausblick auf weitere Anwendungen des Simulationsprogramms

Die Prozesssimulation kann in der Praxis bei der Behandlung oder Verwertung biogen-organischer Abfallströme helfen, die Zusammenhänge besser zu verstehen und dadurch Optimierungen und Planungen zu unterstützen. So könnte z. B. eine Reduktion von Stickstoff- und Schwefelemissionen durch Aussortierung von proteinreichen Substraten, auch durch großtechnische Sortieranlagen, sinnvoll sein. Eine anschließende biotechnologische Proteinverwertung zur Rückgewinnung des Stickstoffs und Schwefels, aber auch anderer Stoffe wie z. B. Kalium und Phosphor, könnte der Gewinnung von biologischen und mineralischen Düngemitteln dienen.

Eine weitere Verwendung des Programms kann die Ermittlung des möglichen Emissionsminderungspotentials z. B. einer Altdeponie sein, wenn unterschiedliche Behandlungsszenarien mit den verschiedenen Emissionen wie der klimawirksamen Gase Methan, Distickstoffoxid und Kohlendioxid oder toxischer Gase wie Schwefelwasserstoff simuliert werden.

Im Bereich der Biogasgewinnung wäre der Einsatz der Prozesssimulation sinnvoll, um die Energiegewinnung zu optimieren. Genormte Messungen, Schnelltests und Online-Analysen von Stoffströmen z. B. auch mit Hilfe von Biosensoren, vor allem zur Analyse des Kohlenhydrat-, Protein- und Fettgehalts und damit des Gehalts an organischer Trocken- und Feuchsubstanz und somit auch des Wassergehalts, wären im Hinblick auf eine die Praxis unterstützende Prozesssimulation erstrebenswert. Die gewonnenen Analysendaten würden zukünftigen Simulationen zur Verfügung stehen und die Untersuchung anderer Parameter auf ihre Wirksamkeit hin ermöglichen.

Darauf basierend könnten Stoffströme aus den unterschiedlichsten Bereichen, in denen organische Abfälle anfallen, online analysiert und ggf. nach einer Trennung verschieden behandelt, verwendet oder verwertet werden. Eine Beurteilung und Einteilung der Stoffe in weitergehende Abbaubarkeitsklassen bei verschiedener Behandlung wäre denkbar.

13 Literaturverzeichnis

AbfAbIV (2006): Verordnung über die umweltverträgliche Ablagerung von Siedlungsabfällen - Abfallablagerungsverordnung vom 20. Februar 2001 (BGBl. I S. 305), die zuletzt durch Artikel 1 der Verordnung vom 13. Dezember 2006 (BGBl. I S. 2860) geändert worden ist und aufgehoben wurde durch Art. 4 Nr. 2 V v. 27.4.2009 I 900 mWv 16.7.2009

AbwV (2012): Verordnung über Anforderungen an das Einleiten von Abwasser in Gewässer - Abwasserverordnung in der Fassung der Bekanntmachung vom 17. Juni 2004 (BGBl. I S. 1108, 2625), die zuletzt durch Artikel 5 Absatz 8 des Gesetzes vom 24. Februar 2012 (BGBl. I S. 212) geändert worden ist

Amlinger, F., Peyr, S., Hildebrandt, U., Müsken, J., Cuhls, C., Clemens, J. (2005): Stand der Technik der Kompostierung - Grundlagenstudie, Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft, Umwelt und Wasserwirtschaft (Hrsg.), Eigenverlag

Amon, Th., Kryvoruchko, V., Amon, B., Moitzi, G., Lyson, D., Hackl, E., Jeremic, D. (2003): Optimierung der Biogaserzeugung aus den Energiepflanzen Mais und Klee gras, Endbericht Juli 2002, Forschungsprojekt Nr. 1249 GZ 24.002/59-IIA1/01, Wien

ATV-Fachausschuss 7.5 (1990): Anaerobe Verfahren zur Behandlung von Industrieabwässern, Korrespondenz Abwasser, Nr. 37, S. 1247-1251

Bach, P. D., Shoda, M., Kubota, H. (1984): Rate of composting of dewatered sewage sludge in continuously mixed isothermal reactor, Journal of Fermentation Technology, Bd. 62, Nr. 3, S. 285-292

Bach, P. D., Nakasaki, K., Shoda, M., Kubota, H. (1987): Thermal balance in composting operations, Journal of Fermentation Technology, Bd. 65, Nr. 2, S. 199-209

Baserga, U. (2000): Vergärung organischer Reststoffe in landwirtschaftlichen Biogasanlagen, in: FAT - Berichte Nr. 546/2000, Eidgenössische Forschungsanstalt für Agrarwirtschaft und Landtechnik (Hrsg.), Tänikon

Batstone, D. J., Keller, J., Angelidaki, I., Kalyuzhnyi, S. V., Pavlostathis, S. G. Rozzi, A., Sanders, W. T. M., Siegrist, H., Vavilin, V. A. (2002): The IWA Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1), Water Science and Technology, Bd. 45, Nr. 10, S. 65-73

Batstone, D. J., Keller, J. (2003): Industrial applications of the IWA anaerobic digestion model No. 1 (ADM1), Water Science and Technology, Bd. 47, Nr. 12, S. 199-206

Beba, A., Atalay, F. S. (1986): Mathematical models for methane production in batch fermenters, Biomass, Bd. 11, Nr. 3, S. 173-184

Bekker, M. (2007): Charakterisierung der anaeroben Abbaubarkeit von spezifischen organischen Stoffen, Dissertation, Universität Karlsruhe, Verlag Siedlungswasserwirtschaft Karlsruhe, Schriftenreihe SWW, Nr. 125, ISBN 978-3-9809383-8-9

Beyer, Ch., Pretz, Th., Wintgens, Th. (2001): Simulation des Rotteprozesses in mechanisch-biologischen Abfallbehandlungsanlagen, Müll und Abfall, Nr. 8, S. 452-455

Bfg (2008): Wasserbewirtschaftung und Niedrigwasser, Kolloquium am 26./27. Mai 2008 in Koblenz, bfg - Bundesanstalt für Gewässerkunde (Hrsg.), ISSN 1866-220X, <http://www.bafg.de>, recherchiert im Dezember 2008

BGK (2003): Hygiene Baumusterprüfsystem Kompostierungsanlagen Vergärungsanlagen, Informationsmaterialien, Bestell-Nr.: 240, 3. ergänzte und überarbeitete Auflage, Bundesgütegemeinschaft Kompost e. V (Hrsg.), Oktober 2003, Köln

BGK (2012): Bundesgütegemeinschaft Kompost e. V., <http://www.kompost.de>, recherchiert im Mai 2012

Bidlingmaier, W. (1983): Das Wesen der Kompostierung von Siedlungsabfällen, in: Handbuch Müll und Abfallbeseitigung, Kumpf, W., Maas, K., Straub, H. (Hrsg.), Erich Schmidt Verlag, Berlin

Bidlingmaier, W. (1995): Anlageninput und erzeugte Kompostqualität, in: Biologische Abfallbehandlung II, Wiemer, K., Kern, M. (Hrsg.), M. I. C. Baeza-Verlag, Witzenhausen, S. 109-119

Bidlingmaier, W., Grauenhorst, V. (1996): Geruchsemissionen von Kompostierungsanlagen, in: Neue Techniken der Kompostierung, Stegmann, R. (Hrsg.), Economica-Verlag, Bonn, S. 441-458

bifa-Umweltinstitut (2010): Ökoeffiziente Verwertung von Bioabfällen und Grüngut in Bayern, Studie im Auftrag des Bayerischen Staatsministeriums für Umwelt und Gesundheit (StMUG), Augsburg

BlmschG (2013): Bundes-Immissionsschutzgesetz in der Fassung der Bekanntmachung vom 26. September 2002 (BGBl. I S. 3830), das durch Artikel 1 des Gesetzes vom 8. April 2013 (BGBl. I S. 734) geändert worden ist

4. BlmschV (2013): Verordnung über genehmigungsbedürftige Anlagen vom 2. Mai 2013 (BGBl. I S. 973)

30. BlmschV (2009): Verordnung über Anlagen zur biologischen Behandlung von Abfällen vom 20. Februar 2001 (BGBl. I S. 317), die durch Artikel 3 der Verordnung vom 27. April 2009 (BGBl. I S. 900) geändert worden ist

BioAbfV (2012): Verordnung über die Verwertung von Bioabfällen auf landwirtschaftlich, forstwirtschaftlich und gärtnerisch genutzten Böden - Bioabfallverordnung vom 21. September 1998 (BGBl. I S. 2955), die zuletzt durch Artikel 1 u. Artikel 4 der Verordnung vom 23. April 2012 (BGBl. I S. 611) geändert worden ist

Biogas2000, 2000: Windows-Software von Spezialisten zur Verwertung von biogenen Reststoffen, Schweizer Bundesamt für Energiewirtschaft, Arbeitsgemeinschaft Bioenergie, arbi GmbH, Maschwanden

Blumensaat, F., Keller, J. (2005): Modelling of two-Stage anaerobic digestion using the IWA Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1), Water Research, Bd. 39, Nr. 1, S. 171-183

Bornhöft, D. (1993): Untersuchungen zur Beschreibung und Modellierung des Bodenwasserhaushalts entlang einer Agrar- und einer Wald-Catena im Bereich der Bornhöveder Seenkette, EcoSys, Bd. 6

Braun, R. (1982): Biogas - Methangärung organischer Abfallstoffe, Springer Verlag, Wien, New York

Breuer, H. (1985): dtv-Atlas zur Chemie, Bd. 2, 3. Auflage, Deutscher Taschenbuch Verlag GmbH & Co. KG, München, S. 304-305

Brock, T. D., Madigan, M. T. (1991): Biology of microorganisms, 6. Edition, Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, New Jersey

Buggeln, R., Rynk, R. (2002): Self-heating in yard trimmings: conditions leading to spontaneous combustion, Compost Science & Utilization, Bd. 10, Nr. 2, S. 162-182

Carmen (2005): Centrales Agrar-Rohstoff-Marketing- und Entwicklungs-Netzwerk e.V. (C.A.R.M.E.N.): Umrechnungstabelle - Viehbestand bzw. Fläche oder Substratanfall

Casella, S., Rutili, A. (1990): Denitrifying population dynamic and evolution of nitrogen gas during a composting process, in: FEMS Microbiology Letters, Bd. 68, S. 53-60

Chen, Y. R. (1983): Kinetic analysis of anaerobic digestion of pig manure and its design implications, Agricultural Wastes, Nr. 8, S. 65-81

Christ, O., Wilderer, P. A., Faulstich, M. (1998): Leistungsfähigkeit von verschiedenen Biozönosen bei der Abfallvergärung, in: Märkl, H., Stegmann, R. (Hrsg), Technik anaerober Prozesse, Dechema Verlag, Frankfurt am Main

Christen, H. R. (1974): Struktur Stoff Reaktion - allgemeine und anorganische Chemie, Verlag Moritz Diesterweg GmbH & Co., Frankfurt am Main und Sauerländer AG, Eigenverlag, Aarau

CRC Handbook (2006): Handbook of Chemistry and Physics, Version 2006, CRC Press LLC Headquarters, 6000 Broken Sound Parkway, NW, Boca Raton, FL 33487, USA

Dach, J. (1998): Zur Deponiegas- und Temperaturentwicklung nach der Biologisch-Mechanischen Abfallbehandlung, Schriftenreihe WAR, Nr. 107, Darmstadt

Dammann, B. (2005): Abluftreinigung von schwefelorganischen Gerüchen, Dissertation an der TU Hamburg-Harburg, Hamburger Berichte 27, Stegmann, R. (Hrsg.), Economica Verlag, Bonn, ISBN 3-98100-642-9

Das, K. (1995): Effect of aeration pathways on spatial homogeneity during in-vessel composting, Dissertation, Columbus, Ohio State University

Das, K., Keener, H. M. (1997): Moisture effect on compaction and permeability in composts, Journal of Environmental Engineering, Bd. 123, Nr. 3, S. 275-281

de Bertoldi, M., Vallini, G., Pera, A., Zucconi, F. (1983): Comparison of three windrow systems, BioCycle, Bd. 24, Nr. 3/4, S. 45-50

de Bertoldi, M., Rutili, A., Citterio, B. Civilini, M. (1988): Composting management: A new process control through O₂-Feedback, Waste Management & Research, Nr. 6, S. 239-259

de Gracia, M., Sancho, L., Garcí'a-Heras, J. L., Vanrolleghem, P., Ayesa, E. (2006): Mass and charge conservation check in dynamic models: application to the new ADM1 model, Water Science and Technology, Bd. 53, Nr. 1, S. 225-240

Dehnicke, J., Kreipe, H. (1952): Laboratoriumsbuch für die Brennerei- und Hefeindustrie, Verlag Wilhelm Knopp, Halle (Saale)

Deipser, A. (1989): Quellen leichtflüchtiger halogenierter Kohlenwasserstoffe im Hausmüll und hausmüllähnlichem Gewerbemüll, Diplomarbeit an der Fachhochschule Hamburg-Bergedorf im Studiengang Bio-Ingenieurwesen (Umwelttechnik), Eigenverlag, Hamburg

Deipser, A., Poller, T. (1990): Laborbestimmung von FCKW und LCKW im Hausmüll, Entsorgungs-Praxis, Nr. 6, S. 373-375

Deipser, A., Stegmann, R. (1993): Untersuchungen von Hausmüll auf leichtflüchtige Spurenstoffe, Müll und Abfall, Nr. 2, S. 69-81

Deipser, A., Stegmann, R. (1994): The origin and fate of volatile trace components in municipal solid waste landfills, Waste Management & Research, Bd. 12, Nr. 2, S. 129-139

Deipser, A., Poller, T., Stegmann, R. (1996): Emissions of volatile halogenated hydrocarbons from landfills, in: Landfilling of Waste: Biogas, Christensen, T. H., Cossu, R., Stegmann, R. (Hrsg.), E&FN SPON, Chapman & Hall, ISBN 0-419-19400-2, S. 59-72

- Deipser, A., Stegmann, R. (1997a):** Biological degradation of VCCs and CFCs under simulated anaerobic landfill conditions in laboratory test digesters, *Environmental Science and Pollution Research*, Bd. 4, Nr. 4, S. 209-216
- Deipser, A., Stegmann, R. (1997b):** Deponiegas: Biologischer Abbau von teilhalogenierten H-FCKW und Vinylchlorid unter aeroben Bedingungen bei Anwesenheit von Methan, *Umweltwissenschaften und Schadstoff-Forschung*, Bd. 9, Nr. 6, S. 309-316
- Deipser, A. (1998):** Biodegradation of volatile CFCs, H-CFCs and VC in compost and marl, *Waste Management & Research*, Bd. 16, Nr. 4, S. 330-341
- Delschen, T., König, W., Leuchs, W., Bannick, C. (1996):** Begrenzung von Nährstoffeinträgen bei der Verwendung von Bioabfällen in Landschaftsbau und Rekultivierung, *EntsorgungsPraxis*, Nr. 12, S. 19-24
- Demirel, B., Yenigun, O. (2002):** Two-phase anaerobic digestion processes: a review, *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, Bd. 77, Nr. 7, S. 743-755
- DepV (2012):** Verordnung über Deponien und Langzeitlager (DepV) - Deponieverordnung vom 27. April 2009 (BGBl. I S. 900), die zuletzt durch Artikel 5 Absatz 28 des Gesetzes vom 24. Februar 2012 (BGBl. I S. 212) geändert worden ist
- Di Chio, D., Potenz, D., Rigetti, E. (1999):** Degradation of organic substances in the soil: proposal for a mathematical model, *Bioresource Technology*, Bd. 67, Nr. 3, S. 267-278
- Dichtl, N., Geschwind, S. (2001):** Technische Voraussetzungen zur Einspeisung von Biogas in das Gasnetz, Beitrag zur 10. Jahrestagung des Fachverbandes Biogas e. V. vom 09.–12.01.2001 in Borken (Hessen)
- DIN 38414 S8 (1985):** Deutsche Einheitsverfahren Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung - Schlamm und Sedimente (Gruppe S), Bestimmung des Faulverhaltens (S8)
- Dominguez, B., Lobo, A., Moreno-Ventas, X., Tejero, I. (2005):** Heterotrophic and anammox nitrogen removal in leachate treatment plants: Modelling the coexistence of processes, in: *Proceedings 10. International Waste Management Landfill Symposium - Sardinia 2005*, Cossu, R., Stegmann, R. (Hrsg.), Padova
- EEG (2012):** Erneuerbare-Energien-Gesetz vom 25. Oktober 2008 (BGBl. I S. 2074), das zuletzt durch Artikel 5 des Gesetzes vom 20. Dezember 2012 (BGBl. I S. 2730) geändert worden ist
- Ehrig, H.-J. (1980):** Beitrag zum quantitativen und qualitativen Wasserhaushalt, Veröffentlichungen des Instituts für Stadtbauwesen, Nr. 26, 2. Auflage, Braunschweig

El Fadel, M., Findikakis, A. N., Leckie, J. O. (1996): Numerical modelling of generation and transport of gas and heat in landfills - 1. model formulation, Waste Management & Research, Nr. 14, S. 483-504

Emberger, J. (1993): Kompostierung und Vergärung, Vogel Buchverlag, Würzburg, ISBN 3-8023-1444-1

EN ISO 11734 (1998): Bestimmung der „vollständigen“ anaeroben biologischen Abbaubarkeit organischer Verbindungen im Faulschlamm, Verfahren durch Messung der Biogasproduktion, Deutsches Institut für Normung e.V. (Hrsg.), Beuth Verlag, Berlin

Farkasdi, G. (1961a): Untersuchungen über die bei der Kompostierung auftretenden Temperaturen sowie den Gehalt der Stapelluft an Kohlendioxid und Sauerstoff, in: Gemeinsamer Bericht über die Ergebnisse zum Forschungsauftrag Nr. A 203 und A 204, Arbeitsgemeinschaft von Instituten der Justus-Liebig-Universität Giessen, S. 43-72

Farkasdi, G. (1961b): Die Nirifikation bei der Kompostierung von Müll-Faulschlamm-Gemischen, in: Gemeinsamer Bericht über die Ergebnisse zum Forschungsauftrag Nr. A 203 und A 204, Arbeitsgemeinschaft von Instituten der Justus-Liebig-Universität Giessen, S. 103-116

Farquhar, G. J., Rovers, F. A. (1973): Gas production during refuse decomposition, Water, Air and Soil Pollution, Nr. 2

Faulstich, M., Kolb, R., Netter, E. (1995): Praxis der biologischen Abfallbehandlung, Hieronymus Buchreproduktions-GmbH, München

Fertig, J. (1981): Untersuchungen von Wechselwirkungen zwischen Belüftung, Wärmebildung, Sauerstoffverbrauch, Kohlendioxidbildung und Abbau der organischen Substanz bei der Kompostierung von Siedlungsabfällen, Dissertation im Fachbereich Angewandte Biologie und Umweltsicherung, Justus-Liebig-Universität Gießen, Eigenverlag, Gießen

Findikakis, A. N., Leckie, J. O. (1979): Numerical simulation of gas flow in sanitary landfills, Journal of the environmental engineering division, ASCE, Nr. 105, S. 927-945

Findikakis, A. N., Papelis, C., Halvadakis, C. P., Leckie, J. O. (1988): Modelling gas production in managed sanitary landfills, Waste Management and Research, Nr. 6, S. 115-123

Finger, S. M., Hatch, R. T., Regan, T. M. (1976): Aerobic microbial growth in semisolid matrices: Heat and mass transfer limitation, Biotechnology and Bioengineering, Nr. 18, S. 1193-1218

Finstein, M. S., Morris, M. L. (1975): Microbiology of municipal solid waste composting, Advances in Applied Microbiology, Bd. 19, S. 113-151

Finstein, M. S., Miller, F. C., Strom, P. F. (1986): Waste treatment composting as a controlled system, in: *Biotechnology*, Nr. 8 (Biodegradations), Rehm, H.-J., Reed, G. (Hrsg.), VCH-Verlagsgesellschaft, Weinheim, S. 363-398

Fischer, J. L., Albrecht, A., Kämpfer, P. (2001): Mikrobiologie der Kompostierung von Abfällen, in: *Biologische Behandlung organischer Abfälle*, Kämpfer, P., Weißenfels, W. D. (Hrsg.), Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, ISBN 3-540-41915-2, S. 3-44

Fletcher, S. I., Durrant A. P., Tucker P. (2000): Compost modelling - a literature review of existing models and their applicability to domestic composting, *Progress in Environmental Science*, Bd. 2, Nr. 2, S. 109-128

FNR (2005): Fachagentur für Nachwachsende Rohstoffe e. V. (FNR) (Hrsg.): *Handreichung - Biogasgewinnung und -nutzung*, 2. Auflage, Institut für Energetik und Umwelt gGmbH, Leipzig, Bundesforschungsanstalt für Landwirtschaft (FAL), Braunschweig, Kuratorium für Technik und Bauwesen in der Landwirtschaft e. V. (KTBL), Darmstadt

FNR (2009): Fachagentur für Nachwachsende Rohstoffe e. V. (FNR) (Hrsg.): *Handreichung - Biogasgewinnung und -nutzung*, 4. Auflage, Institut für Energetik und Umwelt gGmbH, Leipzig, Bundesforschungsanstalt für Landwirtschaft (FAL), Braunschweig, Kuratorium für Technik und Bauwesen in der Landwirtschaft e. V. (KTBL), Darmstadt

Forster, P., Ramaswamy, V., Artaxo, P., Berntsen, T., Betts, R., Fahey, D. W., Haywood, J., Lean, J., Lowe, D. C., Myhre, G., Nganga, J., Prinn, R., Raga, G., Schulz, M., Van Dorland, R. (2007): Changes in atmospheric constituents and in radiative forcing, in: *Climate Change 2007: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*, Solomon, S., Qin, D., Manning, M., Chen, Z., Marquis, M., Averyt, K. B., Tignor, M., Miller, H. L. (Hrsg.), Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, S. 212

Fortes, M., Okos, M. R. (1980): Drying theories: Their bases and limitations as applied to foods and grains, in: *Advances in Drying*, Mujumdar, I. (Hrsg.), Nr. 1, S. 119-154

Fricke, K., Vogtmann, H., Kehres, B., Turk, T. (1989): *Bioabfall-Kompostierung: Kompostierung biogener Abfallstoffe aus der getrennten Sammlung organischer Haushalts- und Gartenabfälle im Modell Witzenhausen. Der Hessische Minister für Umwelt und Reaktorsicherheit, Referat Öffentlichkeitsarbeit* (Hrsg.), Vogt GmbH, Hessisch-Lichtenau

Furnas, C. C. (1929): Flow of gases through beds of broken solids, Bulletin 307, Bureau of Mines, Washington

Furukawa, K., Lieu, P. K., Hatozaki, R., Homan, H., Fuji, T. (2005): Single-Stage nitrogen removal using anammox and partial nitrification (SNAP) process and its application to treat-

ment of synthetic landfill leachate, in: Proceedings 10. International Waste Management Landfill Symposium - Sardinia 2005, Cossu, R., Stegmann, R. (Hrsg.), Padova

Fux, C., Egli, K., van der Meer, J. R., Siegrist, H. (2003): Das Anammox-Verfahren zur Stickstoffentfernung in Kläranlagen, EAWAG News 56d, S. 20-21

Gall, B. (1999): Review of activated sludge modelling, in: Proceedings International Environmental Conference and Exhibit, Nashville, TN, USA

Gallert, C., Hennig, A., Stentzel, U., Winter, J. (2002): Verarbeitung von getrennt gesammelten Bioabfällen in der Bioabfallvergärungsanlage Karlsruhe/Durlach, Korrespondenz Abwasser, Wasserwirtschaft, Abfall, Bd. 49, Nr. 5, S. 695-704

Gebel, J. (1991): Möglichkeiten einer umweltgerechten und wirtschaftlichen Aufbereitung von Gülle, Müll und Abfall, Nr. 8, S. 518-528

Gessler, G. (1995): Vergleich und Bewertung verschiedener Verfahren zur Vergärung von Bioabfall, Vortragsmanuskript, GUT Gesellschaft für Umwelttechnik mbH, Berlin

Gieck, K., Gieck, R. (1995): Technische Formelsammlung, 30. deutsche Auflage, 75. Gesamtauflage, Gieck Verlag, Germering

Gieß, S. (1994): Mikrobiologisch-hygienische Untersuchungen zur Bioabfallkompostierung in Mieten und in Kleinkompostern, Dissertation im Fachbereich Agrarwissenschaft, Universität Hohenheim, Eigenverlag, Hohenheim

Glathe, H., Farkasdi, G. (1966): Bedeutung verschiedener Faktoren für die Kompostierung, in: Handbuch Müll- und Abfallbeseitigung, Kumpf, W., Maas, K., Straub, H. (Hrsg.), Kennzahl 5040, Erich Schmidt Verlag, Berlin

Glathe, H., Küster, E., Niese, G., Klopotek, A. (1985): Biologie der Rotteprozesse bei der Kompostierung von Siedlungsabfällen, in: Handbuch Müll- und Abfallbeseitigung, Hösel, G., Bilitewski, B., Schenkel, H., Schnurer, H. (Hrsg.), Kennzahl 5200-5290, Erich Schmidt Verlag, Berlin

Glauser, M., Argano, M., Gandolla, M. (1987): Anaerobic digestion of urban wastes: Sewage sludge and organic fraction of garbage, in: Bioenvironmental Systems, Nr. 3, Wise, D. L. (Hrsg.), Florida

Golueke, C. G. (1977): Biological reclamation of solid waste, Rodale Press, Emmaus, Pennsylvania, ISBN 978-08-7857-158-1

Golueke, C. G. (1989): Putting principles into successful practice, in: The biocycle guide to yard waste composting, JG Press Inc., Emmaus, Pennsylvania, ISBN 978-09-3242-410-5, S. 106-110

Gottschall, R. (1990): Kompostierung - Optimale Aufbereitung und Verwendung organischer Materialien im ökologischen Landbau, in: Alternative Konzepte, Bd. 45, Stiftung ökologischer Landbau (Hrsg.), 4. Auflage, Verlag C. F. Müller, Karlsruhe

Gottschall, R., Kranert, M., Hafner, G., Bruns, C., Schiere, O., Seibel, C. (2008): Ökologischer und ökonomischer Vergleich der stofflichen und energetischen Nutzung von Grünabfällen, in: Bio- und Sekundärrohstoffverwertung III, Wiemer, K., Kern, M. (Hrsg.), S. 459-470

Grabbe, (1988): Der Kompostierungsprozess in Abhängigkeit von biochemischen und mikrobiellen Einflussgrößen, in: Herstellung und Vermarktung von Komposten nach Gütekriterien, Haus der Technik (Hrsg.), Eigenverlag, Essen

Grabbe, K., Schuchardt, F. (1993): Grundlagen der Kompostierung, in: Kuratorium für Technik und Bauwesen in der Landwirtschaft (KTBL) (Hrsg.), Kompostierung und landwirtschaftliche Kompostverwertung, Arbeitspapier 191, Landwirtschaftsverlag Münster-Hiltrup, S. 49-64

Gronauer, A., Helm, M. (1996): Bioabfallkompostierung - ein Verfahrens- und Konzeptvergleich unter ökologischen und ökonomischen Gesichtspunkten, Abfallwirtschaftsjournal, Nr. 11, S. 35-40

Gronauer, A., Claassen, N., Ebertseder, Th., Fischer, P., Gutser, R., Helm, M., Popp, L., Schön, H. (1997): Bioabfallkompostierung - Verfahren und Verwertung, Bayrisches Landesamt für Umweltschutz, Schriftenreihe, Nr. 139, München

Gudladt, U. (2001): Emissionsminderungspotentiale prozessintegrierter Maßnahmen bei der Kompostierung von Bioabfall, Dissertation, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Eigenverlag, Kiel

Gunaseelan, V. N. (1997): Anaerobic digestion of biomass for methane production: A Review, Biomass & Bioenergy, Bd. 13, Nr. 1-2, S. 83-114

Gunaseelan, V. N. (2004): Biochemical methane potential of fruits and vegetable solid waste feedstocks, Biomass & Bioenergy, Bd. 26, Nr. 4, S. 389-399

Haarstrick, A., Hempel, D., Ostermann, L., Ahrens, H., Dinkler, D. (2001): Modelling of the biodegradation of organic matter in municipal landfills, Waste Management & Research, Bd. 19, Nr. 4, S. 320-331

Haarstrick A., Mora-Naranjo, N., Meima, J., Hempel, D. C. (2004): Modeling anaerobic degradation in municipal landfills, Environmental Engineering Science, Bd. 21, Nr. 4, S. 201-214

Hamelers, H. V. M. (1993): A theoretical model of composting kinetics, in: Science and engineering of composting: design, environmental, microbiological aspects, Hoitink, H. A. J.,

Keener, H. M. (Hrsg.), Ohio Agricultural Research and Development Center, Worthington, Ohio, Renaissance Publications, ISBN 978-09-3664-515-5

Hamelers, H. V. M. (2004): Modeling composting kinetics: A review of approaches, Environmental Science & Bio-Technology, Nr. 3, S. 331-342

Hartmann, L. (1983): Biologische Abwasserreinigung, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York

Hashimoto, A. G. (1982): Methane from cattle waste - effects of temperature, hydraulic retention time, and influent substrate concentration on kinetic parameter (k), Biotechnology and Bioengineering, Nr. 24, S. 2039-2052

Hashimoto, A. G. (1984): Methane from swine manure - effect of temperature and influent substrate concentration on kinetic parameter (k), Agricultural Wastes, Bd. 9, Nr. 4, S. 299-308

Haug, R. T. (1980): Compost engineering - principles and practice, Ann Arbor Science Publishers, Michigan

Haug, R. T. (1993): The practical handbook of compost engineering, Lewis Publishers Boca Raton

Heerenklage, J., Stegmann, R. (2005): Analytical methods for the determination of the biological stability of waste samples, in: Proceedings Sardinia 2005, 10. International Waste Management and Landfill Symposium, S. Margherita di Pula, Cagliari, Italy

Heerenklage, J., Morabito, A., Stegmann, R. (2007): Comparison of test methods to measure the respiration activity of waste samples, in: Proceedings Sardinia 2007, 11. International Waste Management and Landfill Symposium, S. Margherita di Pula, Cagliari, Italy

Heining, K. (1998): Biofilter und Biowäscher: Die Geruchseliminierung bei Kompostwerken, Dissertation an der TU Hamburg-Harburg, Hamburger Berichte 14, Stegmann, R. (Hrsg.), Economica Verlag, Bonn, ISBN 3-87081-158-7

Heldt, H.-W. (1996): Pflanzenbiochemie, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, ISBN 3-8274-0103-8, S. 321-333

Helfer, A., Merrettig-Bruns, U. (2001): Testverfahren zur aeroben biologischen Abbaubarkeit von Feststoffen, in: Biologische Behandlung organischer Abfälle, Kämpfer, P., Weißenfels, W. D. (Hrsg.), Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, ISBN 3-540-41915-2, S. 123-148

Helffrich, D., Öchsner, H. (2003): Hohenheimer Biogasertragstest, Vergleich verschiedener Laborverfahren zur Vergärung von Biomasse, in: Agrartechnische Forschung, Bd. 9, Nr. 3, S. 27-30

Heyer, K.-U., Hupe, K., Stegmann, R. (2000): Die Technik der Niederdruck-Belüftung zur in-Situ Stabilisierung von Deponien und Altablagerungen, Müll und Abfall, Nr. 7, S. 438-443

Heyer, K.-U., Hupe, K., Stegmann, R. (2001): Aerobe in-Situ Stabilisierung der Altdeponie Kuhstedt - Verfahrenstechnik, Planung, Bau und Inbetriebnahme, in: Belüftung von Altdeponien zur in-Situ Stabilisierung, Heyer, K.-U., Hupe, K., Stegmann, R. (Hrsg.), Verlag Abfall aktuell, Stuttgart, S. 87-112

Heyer, K.-U. (2003): Emissionsreduzierung in der Deponienachsorge, Einflüsse auf das Emissionsverhalten organischer und stickstoffhaltiger Verbindungen in Siedlungsabfalldéponien, Dissertation an der TU Hamburg-Harburg, Hamburger Berichte 21, Stegmann, R. (Hrsg.), Verlag Abfall aktuell, Stuttgart, ISBN 3-9808180-4-7

Hickey, R. F., Vanderwielen, J., Switzenbaum, M. S. (1989): The effect of heavy metals on methane production and hydrogen and carbon monoxide levels during batch anaerobic sludge digestion, Water Research, Bd. 23, Nr. 2, S. 207-218

Higgins, C. W., Walker L. P. (2001): Validation of a new model for aerobic organic solids decomposition: simulations with substrate specific kinetics, Process Biochemistry, Nr. 36, S. 875-884

Hinchee, R. E., Miller, R. N., Johnson, P. C. (1995): In-Situ aeration: Air sparing, bioventing and related remediation process, Batelle Press, Columbus, Richland

Hofenk, G., Lips, S. J. J., Rijkens, B. A., Voetberg, J. W. (1984): Two-phase anaerobic digestion of solid organic wastes yielding biogas and compost, Final EC-Report No. ESE-E-R-040-NL, IBVL, Wageningen

Holt, A. D. (1984): Thermal design for solids processing, in: Perry, R. H., Green, D. W., Maloney, J. O.: Perry's Chemical Engineers Handbook - International Edition 1984, Caledonia, USA 1984, S. 10-43 - 10-53

Hoppenheidt, K., Wallnöfer, P. (1995): Der Naturhaushalt als Vorbild für eine rückstandsarme Kreislaufwirtschaft, Wasser und Boden, Bd. 47, Nr. 4

Hoppenheidt, K., Hirsch, P., Kottmair, A., Nordsieck, H., Mücke, W., Kübler, H., Nimmrichter, R. (1998): Co-Vergärung von Bioabfällen und organischen Gewerbeabfällen - Ergebnisse eines großtechnischen Pilotvorhabens, VDI-Seminar „Biogene Abfälle/Holz/Klärschlamm - Verwertung/Behandlung/Beseitigung“, 13.4.-15.4.2000, Bamberg

Hörmann, G. (1997): SIMPEL - ein einfaches, benutzerfreundliches Bodenwassermodell zum Einsatz in der Ausbildung, Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen, Bd. 41, Nr. 2, S. 67-72

Hsieh, C. M., Ho, P.-C., Chang, Y.-I. (1997): Theoretical model for a nonisothermal static compost, Journal of The Chinese Institute of Chemical Engineers, Bd. 28, Nr. 1, S. 37-48

Hudgins, M. (2000): Aerobic landfill bioreactor technology demonstration - Baker Place Road Landfill, Columbia County, Georgia, South Technology Center

Huitric, R. (1981): Setzungsverhalten von Deponien, in: Verlängerung der Nutzungsdauer von Deponien, Abfallwirtschaft an der TU Berlin, Bd. 8, S. 46 ff.

Hunze, M. (2005): Simulation in der kommunalen Abwasserreinigung, Grundlagen, Hintergründe und Anwendungsfälle, Oldenbourg Verlag, München, Wien, ISBN 3-486-63073-3

Husain, A. (1998): Mathematical models of the kinetics of anaerobic digestion - A selected review, Biomass & Bioenergy, Bd. 14, Nr. 5-6, S. 561-571

Institut für Energetik und Umwelt gGmbH (IE) (2007): Biogaserzeugung durch Trockenvergärung von organischen Rückständen, Nebenprodukten und Abfällen aus der Landwirtschaft, Förderkennzeichen: 22011701, Schlussbericht

Jäger, J. (1989): Biomüllsammlung und -kompostierung: Erfassung- und Verwertungskonzepte für Biomüll und Altstoffe am Beispiel eines Landkreises, Veröffentlichungen der Ingenieurgesellschaft Technischer Umweltschutz, Berlin, ISBN 3-923235-07-0, S.336

Jensen, U. (1996): Untersuchungen zum Einfluss von Belüftung und pH-Wert auf die Stickstoffdynamik bei der Kompostierung mit Hilfe von Bioreaktoren, vergleichende Untersuchung der Kompostierung im Kompostwerk Bützberg, Diplomarbeit an der Technischen Universität Hamburg-Harburg, Arbeitsbereich Abfallwirtschaft und Stadttechnik, Eigenverlag, Hamburg

Jeong, H. S., Suh, C. W., Lim, J. L., Lee, S. H., Shin, H. S. (2005): Analysis and application of ADM1 for anaerobic methane production, Bioprocess and Biosystems Engineering, Bd. 27, Nr. 2, S. 81-89

Jetten, M. S. M., Wagner, M., Fuerst, J. A., van Loosdrecht, M. C. M., Kuenen, J. G., Strous, M. (2001): Microbiology and application of the anaerobic ammonium oxidation (anammox) process, in: Current Opinion Biotechnology, Bd. 12, S. 283-288

Jörg, R. (2001): Testverfahren zur anaeroben biologischen Abbaubarkeit, in: Biologische Behandlung organischer Abfälle, Kämpfer, P., Weißenfels, W. D. (Hrsg.), Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, ISBN 3-540-41915-2, S. 151-174

Kaiser, J., Soye, K. (1990): Simulation der aeroben Rotte mit biotechnischen Modellen, in: Biologische Verfahren der Abfallbehandlung, Dott, W., Fricke, K., Oetjen, R. (Hrsg.), EF Verlag für Energie- und Umwelttechnik, Berlin, S. 147-156

- Kaiser, J. (1999):** Ein Simulationsmodell des Kompostierungsprozesses und seine Anwendung auf Grundfragen der Verfahrensgestaltung und Verfahrensführung, Dissertation, Technische Universität Dresden, Eigenverlag, Dresden
- Kaltschmitt, M., Hartmann, H. (2001):** Energie aus Biomasse - Grundlagen, Techniken und Verfahren, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
- Kaltwasser, B. J. (1980):** Biogas - Regenerative Energieerzeugung durch anaerobe Fermentation organischer Abfälle in Biogasanlagen, Wiesbaden, Berlin
- Kalyuzhnyi, S., Fedorovich, V., Lens, P., Pol, L. H., Lettinga, G. (1998):** Mathematical modelling as a tool to study population dynamics between sulfate reducing and methanogenic bacteria, Biodegradation, Nr. 9, S. 187-199
- Kämpfer, P., Weißenfels, W. D. (2001):** Biologische Behandlung organischer Abfälle, Kämpfer, P., Weißenfels, W. D. (Hrsg.), Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, ISBN 3-540-41915-2
- Keener, H. M., Ekinici, K., Elwell, D. L., Michel Jr., F. C. (2002):** Principles of composting process optimization, in: Proceedings of the international Conference „Composting 2002“, Columbus, Ohio 7.-8. Mai 2002
- Kehres, B., Mähl, B., Clemens, J., Cuhls, C., Reinhold, J., Müsken, J. (2010):** Betrieb von Kompostierungsanlagen mit geringen Emissionen klimarelevanter Gase, Bundesgütegemeinschaft Kompost e.V., Köln, 1. Auflage November 2010
- Kern, M. (1999):** Bio- und Reststoffbehandlung III, Witzenhausen-Institut für Abfall, Umwelt und Energie GmbH, Eigenverlag
- Kern, M., Raussen, T. (2005):** Energetische Nutzung von Bio- und Grünabfällen, Gallenkemper, B., Bidlingmaier, W., Doedens, H., Stegmann R. (Hrsg.), 9. Münsteraner Abfallwirtschaftstage, Bd. 8, S. 372–382
- Kern, M., Raussen, Th., Funda, K., Lootsma, A., Hofmann, H. (2010):** Aufwand und Nutzen einer optimierten Bioabfallverwertung hinsichtlich Energieeffizienz, Klima- und Ressourcenschutz, Umweltforschungsplan Förderkennzeichen 3707 33 304, UBA-FB 001295, Witzenhausen-Institut für Abfall, Umwelt und Energie GmbH im Auftrag des Umweltbundesamtes, <http://www.uba.de/uba-info-medien/4010.html>, recherchiert im Dezember 2012, ISSN 1862-4804, Dessau-Roßlau
- Kerschberger, M., Franke, G., Heß, H. (2001):** Anleitung und Richtwerte für Nährstoffvergleiche nach Düngeverordnung, Thüringer Landesanstalt für Landwirtschaft (Hrsg.), 3. Auflage, Jena

Khoshnavaz, Abdol-Reza (1992): N-Fractionen in Zuckerrübenblättern als Indikator der N-Versorgung der Rübenpflanze, Dissertation, Institut für Zuckerrübenforschung und Institut für Agrikulturchemie der Universität Göttingen, Cuvillier Verlag, Göttingen

Kiener, A., Leisinger, T. (1983): Oxygen sensitivity of methanogenic bacteria, System Applied Microbiology, Nr. 4

Klass, D. L. (1984): Methane from anaerobic fermentation, Science, Bd. 223

Kleber, H.-P., Schlee, D. (1991): Biochemie, Gustav Fischer Verlag, Jena

Kloss, R. (1986): Planung von Biogasanlagen, Oldenbourg Verlag, München, Wien

Kobelt, G. (1996): Geruchsbekämpfung in der Kompostwirtschaft, EntsorgungsPraxis, Nr. 3

Koepp-Bank, H. J. (1989): Mikrobiologische Grundlagen des anaeroben Abbaus organischer Substanzen, in: Thomé-Kozmiensky, K. J. (Hrsg.), Biogas - Anaerobtechnik in der Abfallwirtschaft, EF Verlag für Energie- und Umwelttechnik, Berlin

Köhler, R. (1966): Schadenswirkung auf den Schlammfäulungsprozess durch stagnierend und toxisch wirkende Stoffe, Wasser - Luft und Betrieb, Nr. 6, S. 388-395

Konzeli-Katsiri, A., Kartsonas, N. (1986): Inhibition of anaerobic digestion by heavy metals, in: Anaerobic digestion of sewage sludge and organic agriculture wastes, Bruce, A. M., Konzeli-Katsiri, A., Newman, P. J. (Hrsg.), Elivier Applied Science Publishers, London, New York, S. 104-119

Körner, I., Ritzkowski, M., Stegmann, R. (1999): Nährstofffreisetzung bei der Kompostierung und bei der Vergärung (Abschlussbericht) im Verbundvorhaben „Neue Techniken der Kompostierung“, Teil 1 des Teilvorhabens 10: „Stickstoffdynamik in Komposten und bei der Kompostanwendung“, Förderkennzeichen: 1450 638 C8, Umweltbundesamt (Hrsg.), Eigenverlag, Berlin

Körner, I., Braukmaier, J., Heerenklage, J., Leikam, K., Ritzkowski, M., Schlegelmilch, M., Stegmann, R. (2003): Investigation and optimization of composting processes - test systems and practical examples, Waste Management, Nr. 23, S. 17-26

Körner, I. (2009): Stickstoffhaushalt bei der Kompostierung - Bilanzen, Gehalte, Umsetzungs- und Austragsprozesse, Habilitationsschrift, Technische Universität Hamburg-Harburg, Hamburger Berichte 33, Stegmann, R. (Hrsg.), Verlag Abfall aktuell, Stuttgart, ISBN 978-3-9812867-0-0

Kraft, E. (2001): Charakterisierung von Bioabfällen - Voraussetzung für die Optimierung des Kompostierungsprozesses, Manuskripte zur Abfallwirtschaft, Nr. 5, Rhombos Verlag, Berlin

Krämer, Johannes (2007): Lebensmittelmikrobiologie, 5. Auflage, Eugen Ulmer Verlag Stuttgart, ISBN 978-3-8252142-10, S. 143

Kranert, M. (1981): Bestimmung der spezifischen Wärmekapazität von Müll, Diplomarbeit am Institut für Siedlungswasserbau, Wassergüte- und Abfallwirtschaft der Universität Stuttgart, Abteilung Abfalltechnik, Eigenverlag, Stuttgart

Kranert, M. (1988): Freisetzung und Nutzung von thermischer Energie bei der Schlammkompostierung, Stuttgarter Berichte zur Abfallwirtschaft, Bd. 33, Erich Schmidt Verlag, Bielefeld

Kranert, M. (2000): Grundlagen der Kompostierung, in: Bidlingmaier, W. (Hrsg.): Biologische Abfallverwertung, Eugen Ulmer Verlag, Stuttgart, S. 37-56

Krischer, O., Kast, W. (1992): Trocknungstechnik Band 1: Die wissenschaftlichen Grundlagen der Trocknungstechnik, 3. Auflage, Springer Verlag, Berlin

Krogmann, U. (1994): Kompostierung - Grundlagen zur Einsammlung und Behandlung von Bioabfällen unterschiedlicher Zusammensetzung, Dissertation an der TU Hamburg-Harburg, Hamburger Berichte 7, Stegmann, R. (Hrsg.), Economica Verlag GmbH, Bonn, ISBN 3-87081-004-1

Krogmann, U., Körner, I. (2000): Technology and strategies of composting, in: Biotechnology, Environmental Processes - Wastewater and Waste Treatment, Rehm, H.-J., Reed, G., Pühler, A., Stadler, P. (Hrsg.), Bd. 11b, VCH-Verlagsgesellschaft, Weinheim

Kroiss, H. (1986): Anaerobe Abwasserreinigung, in: Wiener Mitteilungen Wasser, Abwasser, Gewässer, 62, Institut für Wassergüte und Landschaftswasserbau, Technische Universität Wien (Hrsg.), Eigenverlag, Wien

Kröll, K., Kast, W. (1989): Trocknen und Trockner in der Produktion, Springer Verlag, Berlin

Krull, R., Diekmann, R., Lindert, M. (1995): Behandlung von Bioabfall in Vergärungsanlagen - eine Marktübersicht, EntsorgungsPraxis, Nr. 5, S. 22-25

KrWG (2012): Gesetz zur Förderung der Kreislaufwirtschaft und Sicherung der umweltverträglichen Beseitigung von Abfällen - Kreislaufwirtschaftsgesetz vom 24. Februar 2012 (BGBl. I S. 212)

KTBL (1998): Kofermentation, Kuratorium für Technik und Bauwesen in der Landwirtschaft e. V. (KTBL) (Hrsg.), Eigenverlag, Darmstadt

KTBL (2005): Gasausbeute in landwirtschaftlichen Biogasanlagen, Kuratorium für Technik und Bauwesen in der Landwirtschaft e. V. (KTBL) (Hrsg.), Eigenverlag, Darmstadt

KTBL (2012): Biogasrechner, <http://www.ktbl.de>, recherchiert im Dezember 2012, Kuratorium für Technik und Bauwesen in der Landwirtschaft e. V. (KTBL), Darmstadt

KTBL und UBA (2002): Fütterungsstrategien zur Verminderung von Spurenelementen/Schwermetallen in Wirtschaftsdüngern, KTBL-Workshop 23./24.04.2002, Göttingen, KTBL-Schrift 410

Kuchta, K., Jäger, J., Reinhard, T., Eckrich, C., Kirsch, S. (1995): Geruchs-Emissionen bei der Kompostierung, in: Müllhandbuch, Hösel, G., Schenkel, H., Schnurer, H. (Hrsg.), Kennzahl 5330, Erich Schmidt Verlag, Berlin, S. 1-18

Kuntze, H., Röschmann, G., Schwerdtfeger, G. (1994): Bodenkunde, Verlag Eugen Ulmer, Stuttgart

Kutzner, H. J., Jäger, T. (1994): Kompostierung aus mikrobiologischer Sicht - Ein Essay, in: Nachweis und Bewertung von Keimemissionen bei der Entsorgung von kommunalen Abfällen sowie spezielle Hygieneprobleme der Bioabfallkompostierung, Proceedings, 5. Hohenheimer Seminar, DVG - Deutsche veterinärmedizinische Gesellschaft e. V., 5.-6. Oktober, Gießen, S. 281-303

KWS, (2007): Biogas, Grundlagen der Gärbiologie, Informationsbroschüre, KWS MAIS GmbH

LAGA-Methodensammlung (2008): LAGA-Methodensammlung Abfalluntersuchung Version 1.0, erarbeitet vom LAGA Forum Abfalluntersuchung, Dresden

Langhans, G. (1997a): Reale Werte, Müllmagazin, Nr. 1, S. 30-33

Langhans, G. (1997b): Bemessung und Bilanzierung der Biogasausbeuten in der Abfallvergärung, Abfallwirtschaftsjournal, Nr. 1-2, S. 35-38

Langhans, G. (1998): Biochemische Schwermetallauskreisung aus organischen Abfällen während des Anaerobprozesses, Abfallwirtschaftsjournal, Nr. 5, S. 11-16

Larsen-Vefring, W. (1993): Simulation der Nitrifikation und anderer Stoffumwandlungen im Biofilm, Fortschritt-Bericht VDI, Reihe 15, Nr. 104, VDI-Verlag, Düsseldorf

Leustek, Th., Saito, K. (1999): Sulfate transport and assimilation in plants, in: Plant Physiology, Bd. 120, Nr. 3, S. 637-644

Leutnant, D. (2008): Erstellung einer Handlungsanleitung für die automatische Kalibrierung des Niederschlag-Abfluss-Modells NASIM, Diplomarbeit an der Fachhochschule Münster, Labor für Wasserbau und Wasserwirtschaft, Eigenverlag, Münster

Lexikon der Chemie (2000): Lexikon der Chemie, Spektrum Akademischer Verlag GmbH, Heidelberg

- LFL (2003):** Bayerische Landesanstalt für Landwirtschaft: Der Hopfen, Institut für Pflanzenbau und Pflanzenzüchtung, Bayerisches Staatsministerium für Ernährung, Landwirtschaft und Forsten, Eigenverlag
- Lin, Yupeng (2006):** Simulation modeling and process control of composting systems under complexity and uncertainty, Dissertation, University of Regina, Saskatchewan, Eigenverlag, Regina
- Linke, B., Kalisch, H. (1983):** Zur Ermittlung kinetischer Parameter bei der anaeroben Gülleaufbereitung, Institut für Düngungsforschung Leipzig-Potsdam an der Akademie der Landwirtschaftswissenschaften der DDR (Hrsg.), Nr. 211, S. 177-184
- Lomax, K. M., Collins, N. E., Denny, C. m (1984):** Simulating mushroom compost heat production, Biocycle, Bd. 34, Nr. 3, S. 38-40
- Lyczkowski, R. W. (1982):** Modeling of flow nonuniformities in fissured porous media, The Canadian Journal of Chemical Engineering, Bd. 60, S. 61-75
- Mähnert, P. (2007):** Kinetik der Biogasproduktion aus nachwachsenden Rohstoffen und Gülle, Dissertation, Landwirtschaftlich-Gärtnerische Fakultät der Humboldt-Universität zu Berlin, Eigenverlag, Berlin
- Märkl, H., Mather, M., Witty, W. (1980):** Mikrobielle Methangewinnung - Fortschritte der Verfahrenstechnik, Bd. 18, VDI-Verlag, Düsseldorf
- Märkl, H., Mather, M., Witty, W. (1983):** Anaerobe Abwasser- und Schlammbehandlung - Biogastechnologie, Bayerisches Landesamt für Wasserforschung (Hrsg.), Oldenbourg Verlag, München, Wien, S. 49-64
- Mason, I. G. (2006):** Mathematical modelling of the composting process: A review, Waste Management, Bd. 26, S. 3-21
- Mata-Alvarez, J., Mace, S., Llabres, P. (2000):** Anaerobic digestion of organic solid wastes: An overview of research achievements and perspectives, Bioresource Technology, Bd. 74, Nr. 1, S. 3-16
- Mather, M. (1986):** Mathematische Modellierung der Methangärung, Fortschritt-Bericht VDI, Reihe 14, Nr. 28, VDI-Verlag, Düsseldorf
- Maurer, M., Winkler, J.-P. (1980):** Biogas: theoretische Grundlagen, Bau und Betrieb von Anlagen, C. F. Müller-Verlag, Karlsruhe
- McCarty, P. L., McKinney, R. E. (1961):** Salt toxicity in anaerobic digestion, Journal of Water Pollution Control Federation, Bd. 33, S. 399-415

- Menkel, F. (1992):** Einführung in die Technik von Bioreaktoren, Oldenbourg Verlag, München, Wien
- Mennerich, A. (1988):** Beitrag zur anaeroben-aeroben Behandlung von Sickerwässern aus Hausmülldeponien, Veröffentlichungen des Instituts für Siedlungswasserwirtschaft der TU Braunschweig, Nr. 44
- Merkblatt ATV-DVWK-M 363 (2002):** Merkblatt ATV-DVWK-M 363, Herkunft, Aufbereitung und Verwertung von Biogas, ATV-DVWK 2002
- Mertens, Ch., Förster, M., Krumm, W. (1997):** Simulation biologischer Abfallbehandlungsanlagen, Müll und Abfall, Nr. 4, S. 201-210
- Mertens, Ch. (2001):** Ermittlung von Synergieeffekten bei der Kombination von Kompostierung und Vergärung von Bioabfällen mit Hilfe von Simulationsmodellen, Dissertation, Fachbereich Maschinentechnik der Universität-Gesamthochschule Siegen, Eigenverlag, Siegen
- Mohee, R., White, R. K., Das, K. C. (1998):** Simulation model for composting cellulosic (bagasse) substrates, Compost Science & Utilization, Bd. 6, Nr. 2, S. 82-92
- Moletta, R., Verrier, D., Albagnac, G. (1986):** Dynamic modeling of anaerobic digestion, Water Research, Bd. 20, Nr. 4, S. 427-434
- Moller, H. B., Sommer, S. G., Ahring, B. K. (2004):** Methane productivity of manure, straw and solid fractions of manure, Biomass & Bioenergy, Bd. 26, Nr. 5, S. 485-495
- Monod, J. (1949):** The growth of bacterial cultures, Annual Reviews Microbiology, Bd. 3, S. 371-379
- Mosche, M., Jordening, H. J. (1999):** Comparison of different models of substrate and product inhibition in anaerobic digestion, Water Research, Bd. 33, Nr. 11, S. 2545-2554
- Mudrack, K., Kunst, S. (1991):** Biologie der Abwasserreinigung, 3. Auflage, Gustav Fischer Verlag, Stuttgart, Jena, New York
- Mukengele, M., Brule, M., Oechsner, H. (2006):** Einfluss der Substratmischung aus Energiepflanzen auf Abbaukinetik und Methanertrag, Landtechnik, Bd. 61, Nr. 1, S. 26-27
- Müsken, J. (1989):** Emissionsbetrachtung für die Biomüllkompostierung, in: Stuttgarter Berichte zur Abfallwirtschaft, Bd. 34, Erich Schmidt Verlag, Bielefeld, S. 205-215
- Nakasaki, K., Kato, J., Akiyama, T., Kubota, H. (1987a):** A new composting model and assessment of optimum operation for effective drying of composting material, Journal of Fermentation Technology, Bd. 65, Nr. 4, S. 441-447

- Nakasaki, K., Kato, J., Akiyama, T., Kubota, H. (1987b):** Transformations of water soluble organic materials during thermophilic composting of sewage sludge, *Journal of Fermentation Technology*, Bd. 65, Nr. 6, S. 675-681
- Nakasaki, K., Akiyama, T. (1988):** Effects of seeding on thermophilic composting of household organic waste, *Journal of Fermentation Technology*, Bd. 66, Nr. 2, S. 37-42
- Nakasaki, K., Yaguchi, H., Sasaki, Y., Kubota, H. (1990):** Effects of oxygen concentration on composting of garbage, *Journal of Fermentation and Bioengineering*, Bd. 70, Nr. 6, S. 431-433
- Nakasaki, K., Yaguchi, H., Sasaki, Y., Kubota, H. (1992):** Effects of C/N ratio on thermophilic composting of garbage, *Journal of Fermentation and Bioengineering*, Bd. 73, Nr. 1, S. 43-45
- Nopens, I., Batstone, D. J., Copp J. B., Jeppsson, U., Volcke, E., Alex, J., Vanrolleghem, P. A. (2009):** An ASM/ADM model interface for dynamic plant-wide simulation, *Water Research*, Bd. 43, Nr. 7, S. 1913-1923
- Ottow, J. (1997):** *Umweltbiotechnologie*, Springer Verlag, Stuttgart, Jena, Lübeck, Ulm
- Pavlostathis, S. G., Giraldogomez, E. (1991):** Kinetics of anaerobic treatment - A critical review, *Critical Reviews in Environmental Control*, Bd. 21, Nr. 5-6, S. 411-490
- Penger, J. S. (2012):** Einflüsse auf die Kohlenstoffisotopenfraktionierung in methanogenen Systemen, Dissertation im Fachbereich Biologie, Philipps-Universität Marburg, Eigenverlag, Marburg/Lahn
- Pirsing, A. (1996):** Reaktionstechnische Untersuchung und mathematische Modellierung der Nitrifikation in hochbelasteten Abwässern, Dissertation, Technische Universität Berlin, Eigenverlag, Berlin
- Poetsch, M. (2005):** Bilanzierung und Betriebsoptimierung einer großtechnischen Biogasanlage, Diplomarbeit an der Technischen Universität Hamburg-Harburg, Arbeitsbereich Abfallwirtschaft und Stadttechnik, Eigenverlag, Hamburg
- Pöhle, H. (1994):** Geruchsstoffemissionen bei der Kompostierung von Bioabfall, Dissertation, Universität Leipzig, Eigenverlag, Leipzig
- Poincelot, R. P. (1975):** The biochemistry and methology of composting, Bulletin 754, The Connecticut Agricultural Experiment Station, New Haven
- Poincelot, R. P. (1977):** The biochemistry of composting, in: Proceedings of the National Conference on Composting and Municipal Residues and Sludges, Information Transfer, Rockville, MD

Pommier, S., Chenu, D., Quintard, M., Lefebvre, X. (2008): Modelling of moisture-dependent aerobic degradation of solid waste, *Waste Management*, Bd. 28, S. 1188-1200

Präve, P., Faust, U., Sittig, W., Sukatsch, D. A. (1994): Handbuch der Biotechnologie, 4. Auflage, Oldenbourg Verlag, München, Wien, ISBN 978-3486262230

Radke, D. (2000): Untersuchungen zur Verbesserung der biochemischen Umsatzrate lignocellulosehaltiger organischer Abfälle, in: *Abfall, Recycling, Altlasten*, Gesellschaft zur Förderung der Siedlungswasserwirtschaft an der RWTH Aachen e. V., Dohmann, H. (Hrsg.), Bd. 20, Aachen, S. 224

Rahman, M. S. (1984): Microcalorimetric measurement of heat production and the thermophysical properties of compost, Dissertation, Graduate School New Brunswick, Rutgers - the State University of New Jersey, Eigenverlag, New Jersey

Reimann, I., Märkl, H. (2001): Thermophile Mikroorganismen für die Reinigung fetthaltiger Abwässer, in: *Biokatalyse*, Sonderausgabe der Deutschen Bundesstiftung Umwelt (DBU)

Rinzema, A., van Lier, J. B., Lettinga, G. (1988): Sodium inhibition of acetoclastic methanogens in granular sludge from a UASB reactor, *Enzyme and Microbial Technology*, Bd. 10, S. 24-32

Ritzkowski, M., Heyer, K.-U., Stegmann, R. (2001): Aerobe in situ Stabilisierung der Altdeponie Kuhstedt - Hintergründe, Potenziale, Möglichkeiten, in: *Belüftung von Altdeponien zur in situ Stabilisierung*, Heyer, K.-U., Hupe, K., Stegmann, R. (Hrsg.), Verlag Abfall aktuell, Stuttgart, S. 49-86

Ritzkowski, M., Heyer, K.-U., Stegmann, R. (2005): Neuere Erkenntnisse zur aeroben in situ Stabilisierung von Altdeponien, Tagungsband zur Fachtagung „Stilllegung und Nachsorge von Deponien - Schwerpunkt Deponiegas“, Rettenberger, G., Stegmann, R., Bilitewski, B. (Hrsg.), 11.-12.01.2005 in Trier

Robertson, L. A., Kuenen, J. G. (1992): Nitrogen removal from water and waste, in: *Microbial control of pollution*, Symposium 48, Society of General Microbiology, Fry, J. C., Gadd, G. M., Herbert, R. A., Jones, C. W., Watson-Craik, I. A. (Hrsg.), Cambridge University Press, Cambridge

Rüprich, A. (1990): Rotteführung und Mikroorganismen, Studienreihe „Abfall Now“, Bd. 5, Verlag Abfall Now, Stuttgart

Rustemeier, K. (2001): Großtechnische Umsetzung der aeroben in-Situ-Stabilisierung am Beispiel der Altdeponie Kuhstedt, Diplomarbeit an der Technischen Universität Hamburg-Harburg, Arbeitsbereich Abfallwirtschaft und Stadttechnik, Eigenverlag, Hamburg

- Sahm, H. (1981):** Biologie der Methanbildung, Chemie-Ingenieur-Technik, Bd. 53, Nr. 11, S. 854-863
- Sahm, H. (1990):** Grundlagen des anaeroben mikrobiellen Abbaus organischer Abfälle, in: Biologische Verfahren zur Abfallbehandlung, Dott, W. (Hrsg.), EF Verlag, Berlin, S. 257-268
- Sander, R. (1999):** Compilation of Henry's law constants for inorganic and organic species of potential importance, in: Environmental Chemistry, Version 3, Air Chemistry Department Max-Planck Institute of Chemistry, PO Box 3060, 55020 Mainz
- Scheffer, F., Schachtschabel, P. (1998):** Lehrbuch der Bodenkunde, Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart
- Scherber, K., Steiner, A. (1982):** Zur Toxizität von Schwermetallen bei der biologischen Abwasserreinigung, Münchner Beiträge zur Abwasser-, Fischerei- und Flussbiologie, Bd. 34, S. 191-207
- Scherer, P. A. (1995):** Aktuelle Marktübersicht zu Vergärungsanlagen für feste Abfälle - Vorteile gegenüber Kompostierungsanlagen, Müll und Abfall, Nr. 12
- Scherer, P. A. (2001):** Mikrobiologie der Vergärung von festen Abfallstoffen, in: Biologische Behandlung organischer Abfälle, Kämpfer, P., Weißenfels, W. D. (Hrsg.), Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, ISBN 3-540-41915-2, S. 45-73
- Schink, B. (1997):** Energetics of syntrophic cooperation in methanogenic degradation, Microbiology and Molecular Biology Reviews, Bd. 61, Nr. 2, S. 262-280
- Schlegel, H. G. (1992):** Allgemeine Mikrobiologie, 7. überarbeitete Auflage, Georg Thieme Verlag, Stuttgart
- Schmelz, K. (2000):** Co-Vergärung von Klärschlamm und Bioabfällen, Rhombos-Verlag, Berlin
- Schmidt, I., Sliker, O., Schmid, M., Cirpus, I., Strous, M., Bock, E., Kuenen, J. G., Jetten, M. S. M. (2002):** Aerobic and anaerobic ammonia oxidizing bacteria-competitor or natural partner, FEMS Microbiology Ecology, Nr. 39, S. 175-181
- Schmitz, G. (2011):** Technische Thermodynamik, 3. überarbeitete Auflage, ISSN 1868-3398, ISBN 978-3-941492-31-8, TuTech Verlag, Hamburg
- Schneider, K. J. (2012):** Bautabellen für Ingenieure, mit Berechnungshinweisen und Beispielen, Goris, A. (Hrsg.), Bücher Werner Verlag, Neuwied, ISBN 978-3-8041-5251-9
- Scholwin, F. (2005):** Durch Prozessregelung zum Rotteerfolg, ein modellbasiertes Regelungskonzept für biologische aerobe Abfallbehandlungsanlagen auf der Grundlage von

Fuzzy Logic, aus der Reihe „Manuskripte zur Abfallwirtschaft“, Bd. 8, Bidlingmaier, W., Kranert, M. (Hrsg.), Rhombos-Verlag, Berlin, ISBN 3-937231-78-1

Schön, M. (1994): Verfahren zur Vergärung organischer Rückstände in der Abfallwirtschaft, Abfallwirtschaft in Forschung und Praxis, Bd. 66, Erich Schmidt Verlag, Berlin

Schuchardt, F. (1988): Verlauf von Kompostierungsprozessen in Abhängigkeit von technisch-physikalischen und chemischen Rahmenbedingungen, in: Herstellung und Vermarktung von Komposten nach Gütekriterien, Proceedings, Haus der Technik, Essen

Seki, H., Komori, T. (1987): Application of heat generated in compost to soil warming, Journal of Agricultural Meteorology, Bd. 43, Nr. 3, S. 189-202

Senesi, N., Brunetti, G. (1996): Chemical and physico-chemical parameters for quality of humic substances produced during composting, in: The Science of Composting, de Bertoldi, M., Sequi, P., Lemmes B., Papi, T. (Hrsg.), London, Glasgow, Blackie Academic & Professional, S. 195-212

Seyfried, C. F., Saake, M. (1986): Verfahren der anaeroben Reinigung von Industrieabwässern, Korrespondenz Abwasser, Nr. 10, S. 877-893

Souci, W. S., Fachmann, W., Kraut, H. (2008): Die Zusammensetzung der Lebensmittel, Nährwert-Tabellen, 7. Auflage, Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft, Stuttgart, ISBN 978-3804750388

Souci, W. S., Fachmann, W., Kraut, H. (2011): Der kleine Souci-Fachmann-Kraut, Lebensmitteltabelle für die Praxis, Nährwert-Tabellen, 5. Auflage, Deutsche Forschungsanstalt für Lebensmittelchemie (Hrsg.), Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft, Stuttgart, ISBN 978-3804726796

Soyez, K., Prause, M., Costa, A. (1995): Modelle und Simulationen des Kompostierungsprozesses auf der Basis kinetischer Ansätze (Modelling and simulation of composting processes using kinetic models), in: Proceedings of the 1st International Symposium, Biological waste management - a wasted chance?, Bochum

Spendlin, H.-H. (1991): Untersuchungen zur frühzeitigen Initiierung der Methanbildung bei festen Abfallstoffen, Dissertation an der TU Hamburg-Harburg, Hamburger Berichte 4, Stegmann, R. (Hrsg.), Economica Verlag, Bonn, ISBN 3-87081-271

Stark, W., Binner, E., Lechner, P. (1992): Investigations into the control of forced-aerated in-vessel composting systems, in: Proceedings from ISWA Specialized Conference on Incineration and Biological Waste Treatment ENVIRO 92, 1.-3. 9. 1992, Amsterdam

Stark, W. (1995): Grundlagen zur Beschreibung und Regelung örtlich verteilter Zustandsgrößen in zwangsbelüfteten Rottesystemen, Dissertation, Technische Universität Wien, Fakultät für Bauingenieure, Eigenverlag, Wien

Statistisches Bundesamt (2011): Abfallwirtschaft in Deutschland 2011, Fakten, Daten, Grafiken, Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU), Referat: WA II 1, 53175 Bonn, <http://www.bmu.de>, Stand: Januar 2011

Steiner, A., Müller, R. (1988): Influence of nickel and copper on anaerobic sludge digestion, Fifth international Symposium on Anaerobic Digestion Bologna, S. 141-144

Stombaugh, D. P., Nokes, S. E. (1996): Development of a biologically based aerobic composting simulation model, Transactions - American Society of Agricultural Engineers, Bd. 39, Nr. 1, S. 239-250

Strom, P. F., Morris, M. L., Finstein, M. S. (1980): Leaf composting through appropriate, low-level Technology, Compost Science/Land Utilization, Nr. 11/12, S. 44-48

Strom, P. F. (1985): Effect of temperature on bacteria species diversity in thermophilic solid-waste composting, Applied and Environmental Microbiology, Bd. 50, Nr. 4, S. 899-905

Swedish Gas Center (2001): Report SGC 118 - Adding gas from biomass to the gas grid, Studie des „Swedish Gas Center“ (SGC), Malmö

Thistlethwayte, D. K. B. (1979): Sulfide in Abwasseranlagen: Ursachen, Auswirkungen, Gegenmaßnahmen, Thistlethwayte, D. K. B. (Hrsg.), deutsche Bearbeitung von Norbert Klose, Beton-Verlag, Düsseldorf, 3-7640-0131-3

Thomé-Kozmiensky, K. J. (1989): Biogas: Anaerobtechnik in der Abfallwirtschaft, EF Verlag für Energie- und Umwelttechnik, Berlin, ISBN 3-924511-33-0

Thomé-Kozmiensky, K. J. (1995): Biologische Abfallbehandlung, Enzyklopädie der Kreislaufwirtschaft, EF Verlag für Energie- und Umwelttechnik, Berlin, ISBN 3-924511-72-1

TrinkwV (2011): Verordnung über die Qualität von Wasser für den menschlichen Gebrauch - Trinkwasserverordnung in der Fassung der Bekanntmachung vom 28. November 2011 (BGBl. I S. 2370), die durch Artikel 2 Absatz 19 des Gesetzes vom 22. Dezember 2011 (BGBl. I S. 3044) geändert worden ist

TU Hamburg Harburg - Institut für Wasserbau (2003): Modelltheorie des Niederschlag-Abfluss-Modells KALYPSO, <http://kalypso.bjoernsen.de>, recherchiert im Dezember 2012

TU Hamburg Harburg - Institut für Wasserbau (2008): Kalypso Hydrology - Anwenderhandbuch, <http://kalypso.bjoernsen.de>, recherchiert im Dezember 2012

van Loosdrecht, M. C. M., Jetten, M. S. M. (1998): Microbiological conversions in nitrogen removal, Water Science Technology, Bd. 38, S. 1-8

VanderGheynst, J. S., Walker, L. P., Parlange, J.-Y. (1997): Energy transport in a high-solids aerobic degradation process: mathematical modeling and analysis, Biotechnology Progress, Bd. 13, S. 238-248

Vavilin, V. A., Lokshina, L. Y. (1996): Modeling of volatile fatty acids degradation kinetics and evaluation of microorganism activity, Bioresource Technology, Bd. 57, Nr. 1, S. 69-80

VDI-Richtlinie 4630 (2006): Vergärung organischer Stoffe - Substratcharakterisierung, Probenahme, Stoffdatenerhebung, Gärversuche, VDI-Gesellschaft Energietechnik (Hrsg.), Beuth Verlag, Berlin

VDI-Wärmeatlas (2006): Verein Deutscher Ingenieure, VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen (GVC) (Hrsg.), 10. bearbeitete und erweiterte Auflage, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg

Vollmer, G.-R. (2004): Trockenfermentation von landwirtschaftlichen Roh- und Abfallstoffen, in: Gülzower Fachgespräche Trockenfermentation - Evaluierung des Forschungs- und Entwicklungsbedarfs, Band 23, Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe e.V. (FNR), 4./5. Februar 2004, S. 73-80

Wallmann, R., Cuhls, C., Clemens, J., Scheelhaase, T., Hake, J. (2003): Offene Nachrotte bei MBA gemäß §16 der 30. BImSchV, Müll und Abfall, Nr. 6, S. 276-281

Weiland, P. (1989): Industrieabfälle und Möglichkeiten für deren Vergärung, in: Vergärung fester organischer Abfälle, Möglichkeiten und Grenzen der Biogasgewinnung, Schriftenreihe des Arbeitskreises für die Nutzbarmachung von Siedlungsabfällen, Nr. 16, S. 54-83

Weiland P. (2001a): Biogas als regenerative Energie, Stand und Perspektiven, Tagung 19. und 20. Juni 2001 in Hannover, Bericht 1620, VDI-Verlag, Düsseldorf

Weiland, P. (2001b): Verfahrenstechnik der anaeroben Behandlung organischer Abfälle, in: Biologische Behandlung organischer Abfälle, Kämpfer, P., Weißenfels, W. D. (Hrsg.), Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, ISBN 3-540-41915-2, S. 99-120

Weiland, P. (2004): Stand der Technik bei der Trockenfermentation - Zukunftsperspektiven, in: Gülzower Fachgespräche Trockenfermentation - Evaluierung des Forschungs- und Entwicklungsbedarfs, Band 23, Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe e.V. (FNR), 4./5. Februar 2004, S. 23-35

Weißenfels, W. D. (2001): Verfahrenstechnik der aeroben Behandlung organischer Abfälle, in: Biologische Behandlung organischer Abfälle, Kämpfer, P., Weißenfels, W. D. (Hrsg.), Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, ISBN 3-540-41915-2, S. 81-98

- Wellinger, A., Baserga, U., Edelmann, W., Egger, K., Seiler, B. (1991):** Biogashandbuch, Grundlagen - Planung - Betrieb landwirtschaftlicher Anlagen, Verlag Wirz AG, Aarau
- Weppen, P., Gudladt, U., Korten, R., Willert, A. (1998a):** Minimierung von gasförmigen und flüssigen Emissionen bei der Kompostierung organischer Abfallstoffe durch prozesstechnische Maßnahmen, in: Deutsche Bundesstiftung Umwelt, Bioabfallverwertung, Ergebnisse des Förderschwerpunktes, Zeller Verlag, Osnabrück, S. 123-133
- Weppen, P., Gudladt, U., Willert, A. (1998b):** Minimierung gasförmiger und flüssiger Emissionen bei der Kompostierung organischer Abfallstoffe durch prozesstechnische Maßnahmen, Abschlussbericht Deutsche Bundesstiftung Umwelt (DBU)-Vorhaben AZ 08781, Universität Kiel, Forschungsstelle für Ökotechnologie
- Widmann, R. (1999):** Anaerobic procedures (fermentation), in: Organic Recovery & Biological Treatment, Part I, Research and Implementation of Process Technology, International Conference Orbit 99, Bidlingmaier, W. (Hrsg.), Rhombos Verlag, Berlin, S. 169-177
- Wiesmann, U. (1988):** Kinetik und Reaktionstechnik der anaeroben Abwasserreinigung, Chemie-Ingenieur-Technik, Bd. 60, Nr. 6, S. 464-474
- Wilfert, R., Schattauer, A. (2003):** Biogasgewinnung aus Gülle, organischen Abfällen und aus angebaute Biomasse - Eine technische, ökologische und ökonomische Analyse, Institut für Energetik und Umwelt gGmbH, Leipzig, Bundesforschungsanstalt für Landwirtschaft (FAL), Braunschweig
- Winter, J. (1985):** Mikrobiologische Grundlagen der anaeroben Schlammfäulung, gwf Wasser Abwasser, Bd. 126, Nr. 2
- Wirtz, A., Kabbe, G., Roos, H.-J., Forge, F., Schröder, H. Fr., Dohmann, M. (1996):** Emissionsverhalten und Emissionspotential von Altablagerungen und Altdeponien, Müll und Abfall, Nr. 6, S. 399-407
- Witty, W. (1984):** Reaktionstechnische Aspekte der Methangärung am Beispiel der Vergärung von Penicillinmycel, Dissertation, Technische Universität München, Eigenverlag, München
- Woodford, P. B. (2009):** In-vessel composting model with multiple substrate and microorganism types, Dissertation, Kansas State University Manhattan, Eigenverlag, Kansas
- Worch, E. (1997):** Wasser und Wasserinhaltsstoffe - eine Einführung in die Hydrochemie, B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart
- Young, A. (1990):** The landfill ecosystem, Journal of Mathematics Applied in Medicine and Biology, Bd. 7, Nr. 3, S. 199-217

Zachäus, D., Laude, I. (1997): Sorptionsverhalten von Prozesswässern aus der biologischen Abfallbehandlung, Abfallwirtschaftsjournal, Nr. 1-2

Zehnder, A. J. B. (1978): Ecology of methane formation, Water Pollution Microbiology, Nr. 2, S. 349-376

Zehnder, A. J. B. (1989): Biologische Grundlagen der Biogasgewinnung, in: Vergärung fester Organischer Abfälle: Möglichkeiten und Grenzen der Biogasgewinnung, Arbeitskreis für die Nutzbarmachung von Siedlungsabfällen ANS, Bd. 16, Pfirter, A. (Hrsg.), Wiesbaden

Zelic, B., Vasic-Racki, D., Wandrey, C., Takors, R. (2004): Modeling of the pyruvate production with *Escherichia coli* in a fed-batch bioreactor, Bioprocess and Biosystems Engineering, Bd. 26, Nr. 4, S. 249-258

Zheng, D.-Q., Guo, T.-M., Knapp, H. (1997): Experimental and modelling studies on the solubility of CO_2 , CHClF_2 , CHF_3 , $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_4$ and $\text{C}_2\text{H}_4\text{F}_2$ in water and aqueous NaCl solutions under low pressures, Fluid Phase Equilibria, Bd. 129, Nr. 1-2, S. 197-209

14 Anhang

14.1 Liste der Simulationsparameter (Input)

Die zur Parametrierung verwendete Liste beinhaltet Werte, die vorgegeben werden müssen („?“) und Werte, die aus anderen Eingaben berechnet werden („X“):

Material:	Klärschlamm, Grünabfälle, Hausmüll, organischer Anteil Hausmüll, Bioabfall, Zeitungspapier, Papierfasern, Stroh, Holz, Rinde, Blätter, Gras, Früchte (z. B. Äpfel), Kartoffeln, Gemüse (z. B. Rüben), Getreide (z. B. Weizen), Hülsenfrüchte (z. B. Erbsen), Fleisch und Fisch als Masse (kg) oder in Prozent (jeweils als Trocken- oder Feuchtgewicht)
Materialgesamtmenge:	? (0 – 10000) kg feucht oder trocken
Organische Trockensubstanz (oTS):	? Massen-% (ggf. berechnet)
TOC:	x kg oTS (wird im Programm berechnet)
C/N:	x (wird im Programm berechnet)
Phosphor:	x kg (wird im Programm berechnet)
Kalium:	x kg (wird im Programm berechnet)
Belüftung:	ja (aerobe Betriebsweise), nein (anaerobe Betriebsweise) und zeitbegrenzte Belüftung
Art der Belüftung:	konstanter Luftstrom (0 – 10000 m ³ /h), optimale Belüftung (l/h), prozentuale Erhöhung oder Erniedrigung des Luftstroms (-100 – 10000 %), Belüftungsdatei oder direkte Eingabe und Erhöhung oder Erniedrigung des Luftstroms um ? l/h
Dauer der Behandlung:	? (1 – 1000) Tage Vorgabe oder automatisch durch das Programm
Temperatur der Belüftungsluft:	? (-40 – 80) °C
Feuchtigkeit der Belüftungsluft:	? (0 – 100) RH-%
Schüttdichte des Substrats:	? (0,1 – 5) Mg/m ³ FS
Dichte des Strukturmaterials:	? (0,1 – 5) Mg/m ³ FS
Temperatur des Materials am Anfang:	? (10 – 80) °C
Temperatur der Umgebung:	? (-40 – 80) °C
Isolation:	ja / nein
Wassermantel:	ja / nein (? (0 - ∞) kg)
Temperaturnachführung:	? (0 – 80) °C
Temperatur des zufließenden Wassers:	? (1 – 80) °C
Wasserzugabe:	nein / ja alle ? (1 – 1000) Tage ? (1 – 1000) kg
Kondensat:	Entnahme / Rückführung
Porenvolumen:	? (1 – 100) Vol.-% TS
Setzung:	? (0 – 100) Materialhöhen-% insgesamt

Form der Miete oder des Reaktors:	Dreiecks-, Tafel- oder Trapezmiete, Zylinder-, Trommel-, kugelförmiger Reaktor und Boxenform
Breite oder Durchmesser der Materialschüttung:	? (0,01 - ∞) m (Abbildung 6-10)
Trockensubstanzgehalt des Substrats:	? (0 – 100) Gew.-%
Trockensubstanzgehalt des Strukturmaterials:	? (0 – 100) Gew.-%
Chargenbetrieb:	ja / nein (Anlaufphase oder eingefahrener Zustand)
Materialzufuhr oder / und –entnahme:	automatisch durch das Programm oder durch Vorgabe
Materialzufuhr:	alle ? (1 – 1000) Tage, mit oder ohne Lufteintrag
Materialentnahme:	ab dem ?. (0 – 1000) Tag alle x Tage y kg FS
Materialwende:	ja, an den Tagen ?, nein
Milieuwechsel anaerob-aerob-anaerob:	Wechsel des Milieus durch Belüftung vom ?. (0 – 1000) Tag bis zum ?. (1 – 1000) Tag
Zwei-Phasen-Betrachtung:	Trennung am Tag ? (0 - 1000) zur Behandlungskontrolle des Materials vor oder nach diesem Zeitpunkt
Zuschlagsstoffe bzw. Gehalte:	sandähnliche anorganische Materialien, nicht abbaubares Strukturmaterial, Kalk, Ammonium, Nitrat, Sulfat, Methanol, Eisenchlorid
Schwermetallbelastung:	ja / nein
Raumbelastung:	x kg TS/(m ³ ·d) wahlweise oTS/(m ³ ·d) (wird im Programm berechnet)
Betriebsart:	mesophil / thermophil

Einige dieser Werte werden teilweise bei der Materialwahl automatisch durch das Programm vorgegeben. Dies gilt auch für die Feststoffanteile, Strukturmenge, C/N-Verhältnis und Zuschlagsstoffe bzw. Anfangsbelastungen.

14.2 Die graphischen Simulationsergebnisse physikalischer Parameter

Im Folgenden sind die graphischen Ergebnisse der Simulation physikalischer Parameter dargestellt (siehe Kapitel 7.3):

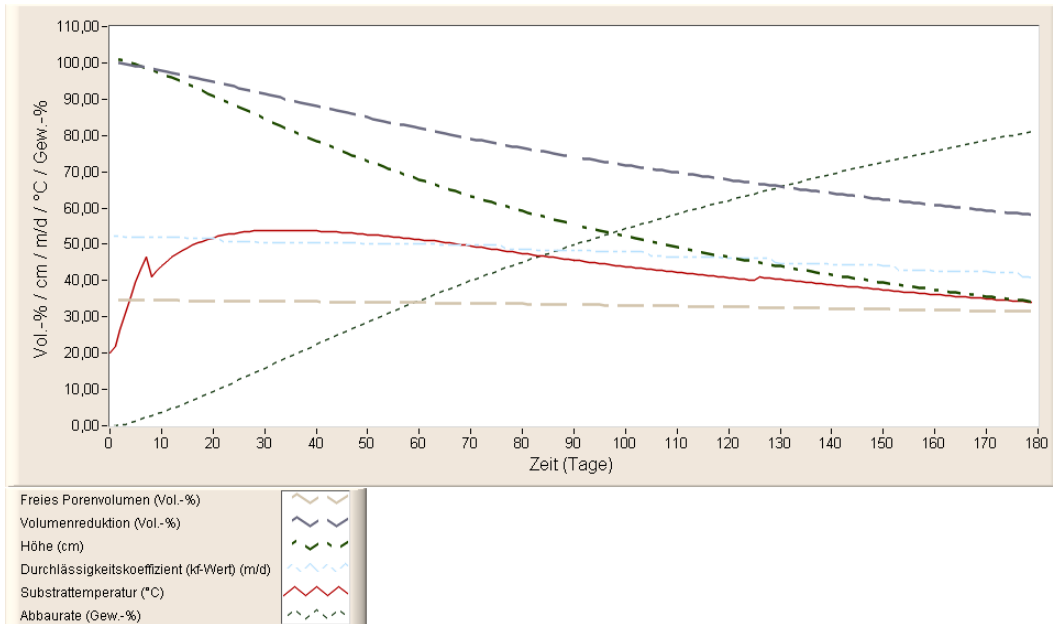


Abb. 14-1: Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurrate bei optimaler Belüftung

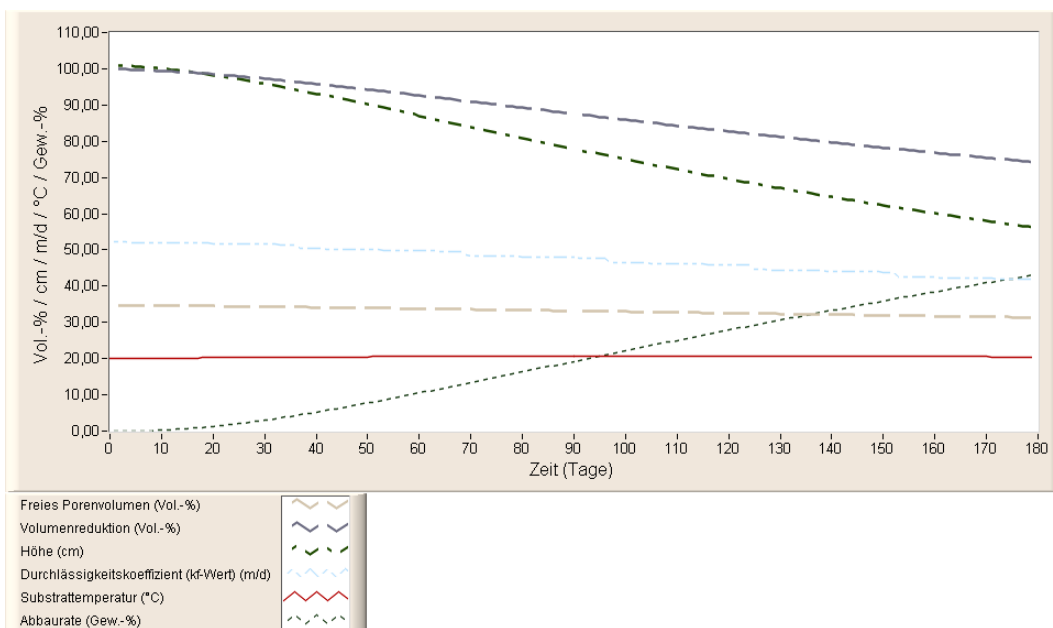


Abb. 14-2: Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurrate unter anaeroben Bedingungen

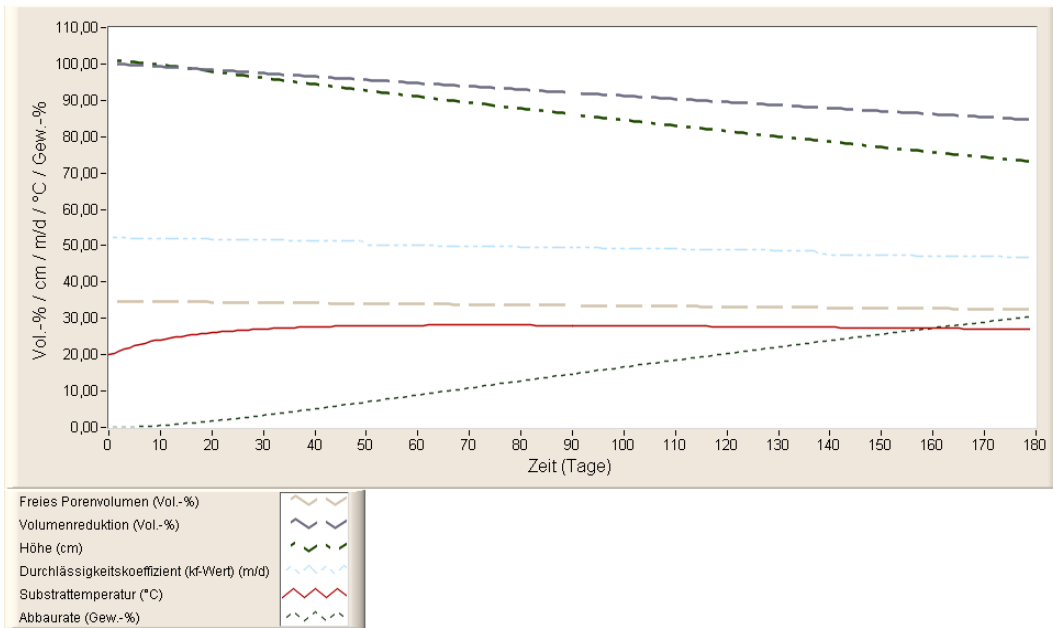


Abb. 14-3: Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurrate bei einer geringen konstanten Belüftungsrate von 0,005 m³/h

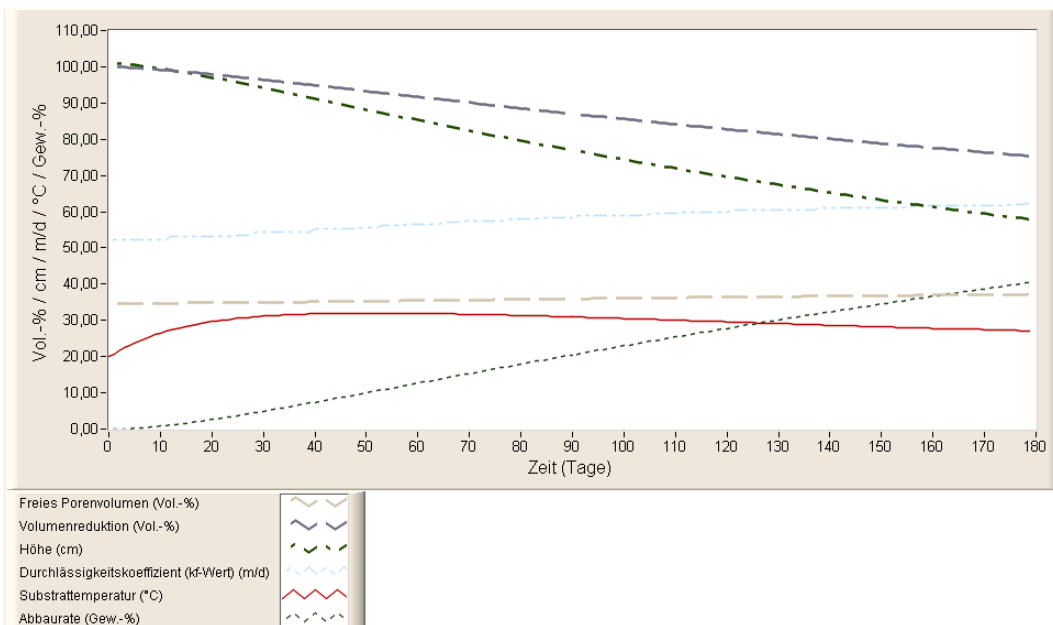


Abb. 14-4: Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurrate bei einer hohen konstanten Belüftung von 0,5 m³/h

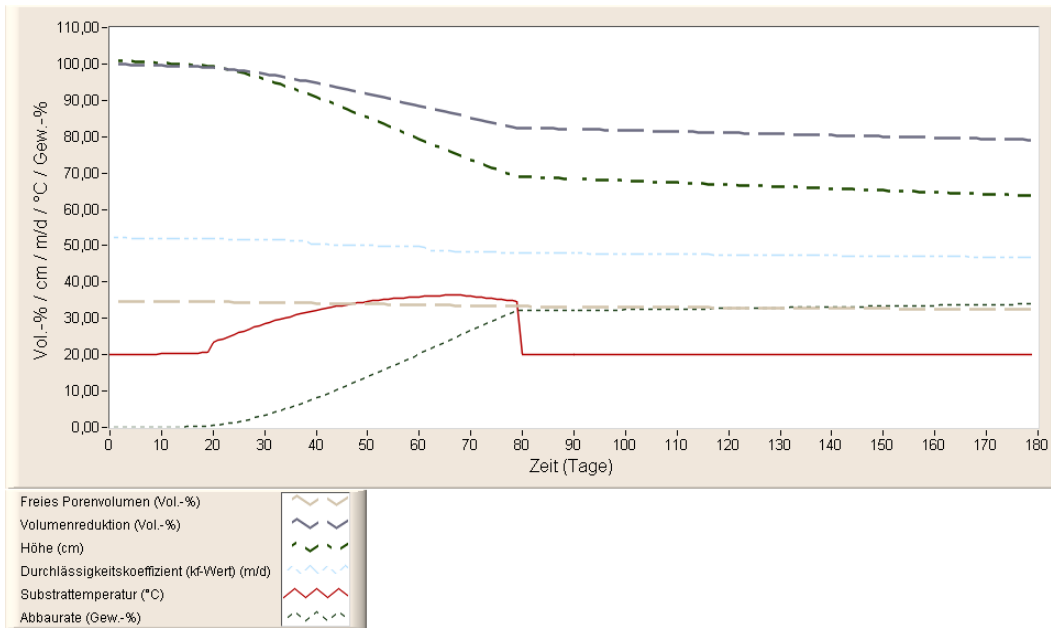


Abb. 14-5: Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurrate unter anaeroben Bedingungen mit konstanter Zwischenbelüftung von 0,05 m³/h zwischen dem 20. und 80. Tag

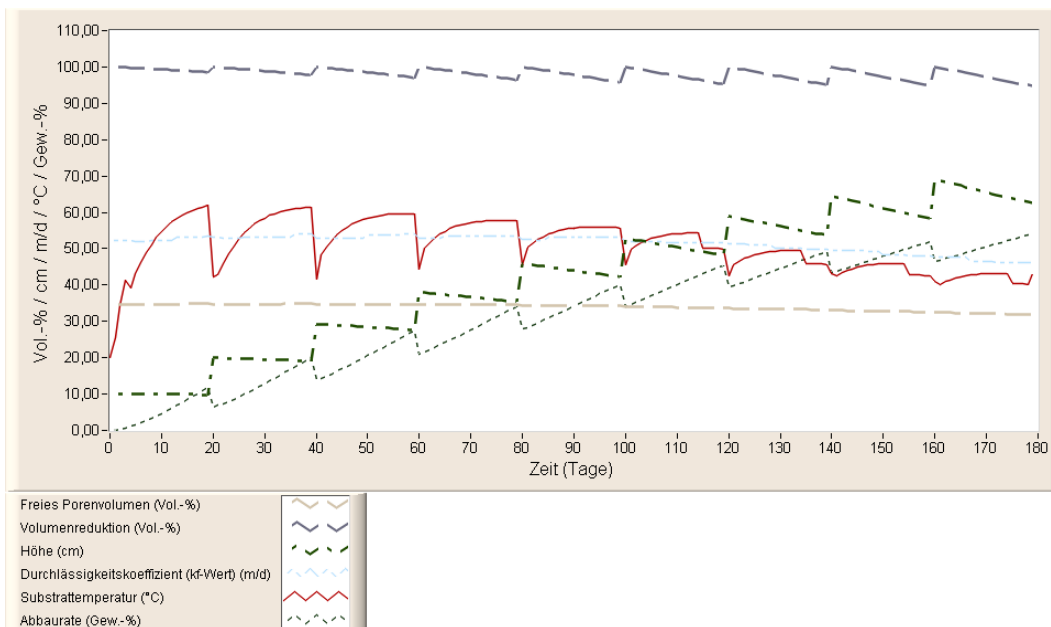


Abb. 14-6: Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurrate bei optimaler Belüftung und 20-tätigem Chargenbetrieb

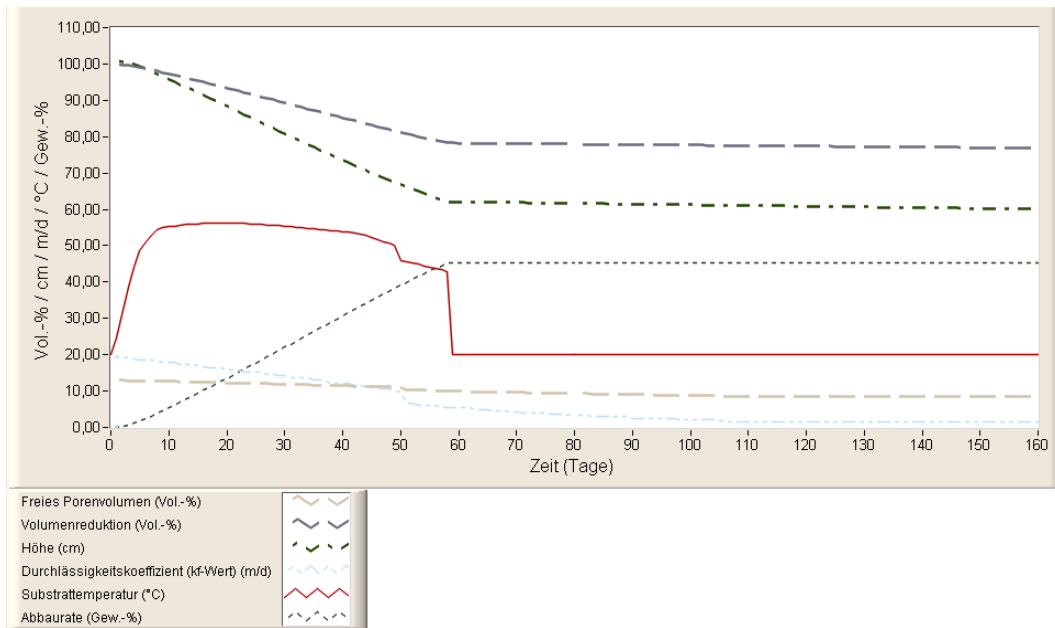


Abb. 14-7: Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurrate unter aeroben Bedingungen mit einer Belüftungsrate von 0,07 m³/h und mit Wasserzugabe

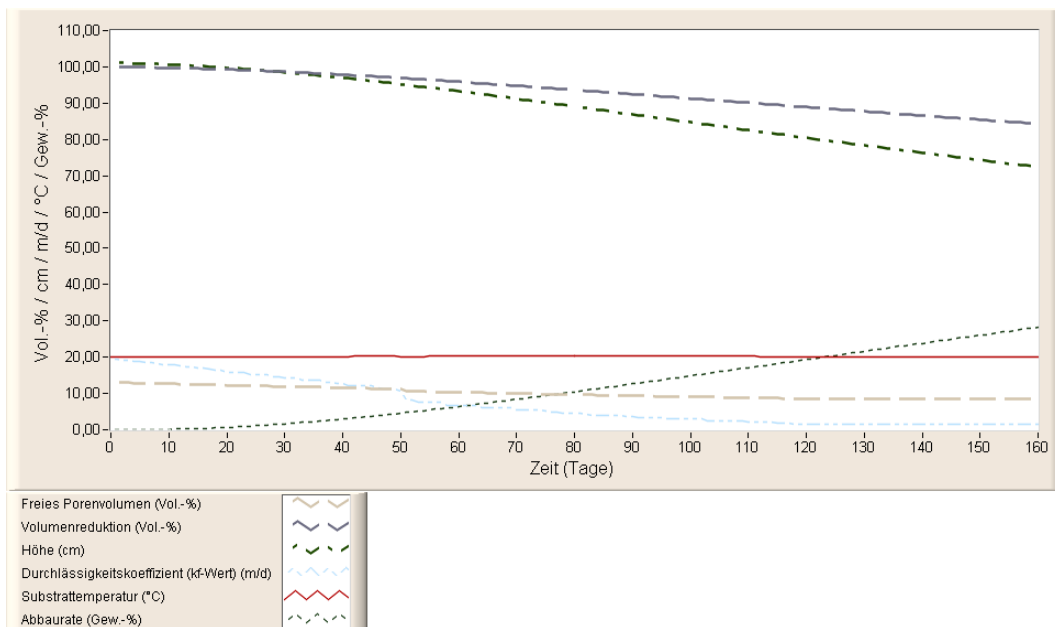


Abb. 14-8: Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurrate unter anaeroben Bedingungen mit Wasserzugabe

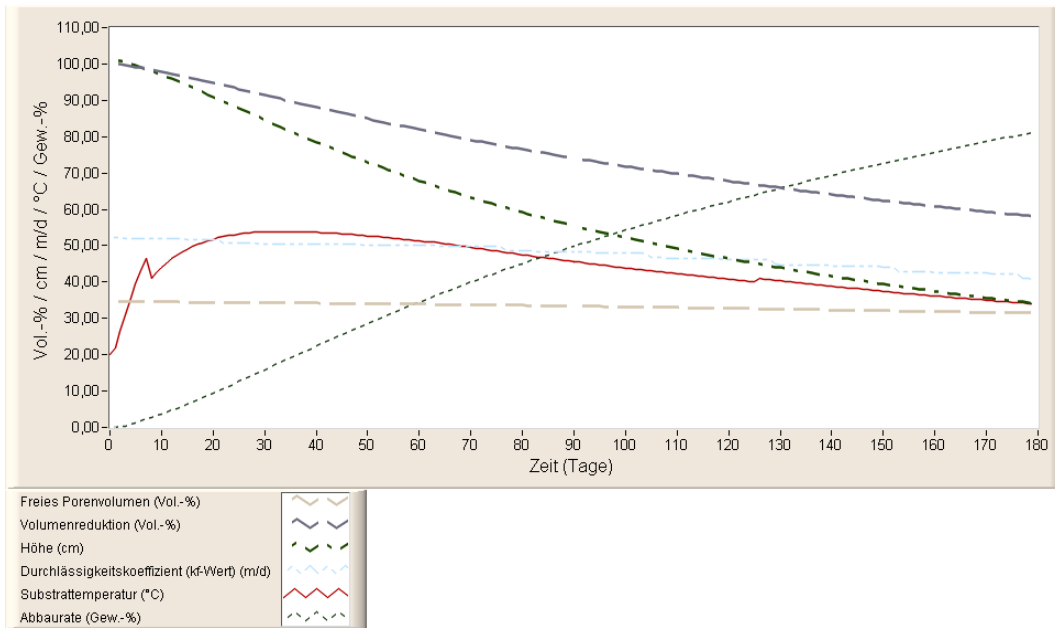


Abb. 14-9: Simulationsergebnis: Freies Porenvolumen (fas), Volumenreduktion, Materialhöhe und Durchlässigkeitskoeffizient (kf-Wert) mit Substrattemperatur und Abbaurrate bei optimaler Belüftung und hoher Setzung

14.3 Biogasausbeute verschiedener Substrate

Substrate	TS	oTS	Biogasertrag		CH ₄ -Gehalt	Quelle
	[%]	[% TS]	[m ³ / Mg FM]	[m ³ / Mg oTS]	[%]	
Landwirtschaftliche Halmgüter						
Weizenstroh	86	92	-	380	52	1), 3)
Roggenstroh	85 - 90	85 - 89	-	250 - 350	52	5), 1)
Gerstenstroh	86	94	-	427	52	1)
Hafer, Triticale	85 - 90	85 - 89	-	250 - 350	52	5), 1)
Winterraps	85 - 90	85 - 89	-	250 - 350	52	5), 1)
Maisstroh	86	72	-	500	52	5)
Sommerraps und Rübsen	86	92	-	350	52	1)
Sonnenblumenstroh	86	92	-	350	52	1)
Tierische Exkremente						
Rindermist	ca. 25	68 - 76	40 - 50	210 - 300	60	2)
Schweinemist	20 - 25	75 - 80	55 - 65	270 - 450	60	2)
Geflügelmist	ca. 32	63 - 80	70 - 90	250 - 450	60	2)
Pferdmist	ca. 28	75	-	300 - 400	55	3)
Nachwachsende Rohstoffe						
Zucker- Futterrübenblätter	16	75 - 80	ca. 70	550 - 600	54 - 55	2)
Kartoffelkraut	25	79	-	500 - 600	50	5), 6)
Hopfenanbau	17	77	-	570	54	8)
Dauergrünland - Mähgut (Gras)	22 - 37	93 - 96	-	500	51 - 54	3), 4)
Maissilage	20 - 35	85 - 95	170 - 200	450 - 700	50 - 55	2)
Industrielle Reststoffe						
Biertreber	20 - 25	70 - 80	105 - 130	580 - 750	59 - 60	2)
Bierhefe	10	92	-	723	62	1)
Rapskuchen	91	93	612	722	63	1)
Rapsextraktionsschrot	89	92	517	633	61	1)
Rübenschnitzel (Zuckerherstellung)	22 - 26	ca. 95	60 - 75	250 - 350	70 - 75	2)
Rebentrester	40 - 50	80 - 90	250 - 270	640 - 690	65 - 70	2)
Gemüse- und Zierpflanzen	14	83	-	620	56	7)
Schlachtabfälle Rind (abgepresst)	33	80 - 90	20 - 60	200 - 400	58 - 62	2), 4)
Schlachtabfälle Schwein	30	78 - 86	20 - 60	250 - 450	60 - 70	2), 4)
Fruchtsaft-/ Nektartrester	25 - 45	85 - 95	150 - 280	590 - 680	65 - 70	2)
Kommunale Abfallstoffe						
org. Siedlungsabfälle	40 - 57	50 - 60	80 - 120	150 - 600	58 - 65	2), 4)
Markabfälle	5 - 20	80 - 90	45 - 110	400 - 600	60 - 65	2), 5)
überlagerte Lebensmittel (inkl. Altbrot)	40 - 48	90 - 96	-	500 - 600	50 - 53	2), 3)
Rasen- /Grünschnitt	ca. 12	83 - 92	150 - 200	550 - 680	55 - 65	2)
Landschaftspflegeflächen	ca. 21	94	-	450 - 550	55	3)

1) Carmen 2005 2) FNR 2005 3) KTBL 2005 4) KTBL 1998 5) Baserga 2000 6) IE Berechnung
 7) Wilfert & Schattauer 2003 8) LfL 2003

(aus: Institut für Energetik und Umwelt gGmbH (IE), 2007)

14.4 Laborversuchsergebnisse der Modellabfälle

Tab. 14-1: Laborversuchsergebnisse von Kohlendioxid- und Sauerstoffanteil, pH-Wert, Temperatur und Wassergehalt des im Simulationsmodell dargestellten Laborversuchs E1 (Körner et al., 1999)

Zeit	CO₂	O₂	pH	T	Wassergehalt
(d)	(Vol.-%)	(Vol.-%)	(pH)	(°C)	(Gew.-%)
0	0,03	21	6	18,7	50
7	17,86	5,82	6	42,83	52,94
14	2,28	20,44	7	62,33	54,16
21	4,84	17,67	7	53,38	57,63
28	14,14	8,38	8	55,37	62,05
35	10,97	12,11	8	60,11	64,97
42	9,17	13,9	8	48,27	66,83
49	16,18	6,05	8	54,95	69,01
56	18,57	3,01	8	53,67	67,92
63	13,82	3,72	8	49,1	67,12
70	14,5	3,18	8	49,99	65,95
78	21,09	0,96	8	29,15	64,95
84	21,24	0,42	8	28,96	64,93
91	21,37	0,58	8	26,27	64,04
98	21,45	0,55	8	29,75	64,24
105	21,62	0,68	8	30,74	63,57
112	21,72	0,59	8	33,03	62,55
119	21,96	0,63	8	31,02	62,22
126	21,34	0,35	8	24,17	61,09
133	22,25	0,39	8	36,58	59,26
140	21,85	0,45	8	30,53	57,94
161	12,69	6,01	8	31,75	57,36

Tab. 14-2: Laborversuchsergebnisse von Kohlendioxid- und Sauerstoffanteil, pH-Wert, Temperatur und Wassergehalt des im Simulationsmodell dargestellten Laborversuchs E2 (Körner et al., 1999)

Zeit	CO₂	O₂	pH	T	Wassergehalt
(d)	(Vol.-%)	(Vol.-%)	(pH)	(°C)	(Gew.-%)
0	k. A.	21	6	32,17	53,6
7	3,76	18,49	7	68,98	53,2
14	16,95	4,93	8	65,75	57
21	14,1	8,86	8	55,54	56,9
28	9,66	13,29	8	46,67	58,2
35	2,2	20,08	8	31,63	57,8
42	1,38	20,61	8	33,92	57,5
49	1,07	20,72	7	31,28	56,9
56	5,1	13,14	8	32,07	55,3
63	17	1,19	7	32	54,8
70	16,28	1,23	8	31,67	55,2
77	9,74	10,85	8	30,7	54,6
84	0,31	21,38	8	28,43	55,7
91	1,05	18,22	7	29,09	53,5
98	8,41	5,44	8	27,7	54,3
105	11,52	6,61	8	29,68	53,6
112	7,53	13,86	8	k. A.	53,6
119	18,71	1,4	8	k. A.	53,8
126	20,28	1,3	k. A.	k. A.	k. A.

k. A.: keine Angaben

Tab. 14-3: Laborversuchsergebnisse von Kohlendioxid- und Sauerstoffanteil, pH-Wert, Temperatur und Wassergehalt des im Simulationsmodell dargestellten Laborversuchs E3 (Körner et al., 1999)

Zeit	CO₂	O₂	pH	T	Wassergehalt
(d)	(Vol.-%)	(Vol.-%)	(pH)	(°C)	(Gew.-%)
0	k. A.	k. A.	6	30,97	53,3
7	1,47	20,91	7	36,43	58,9
14	2,27	19,78	7	33,97	55,6
21	1,09	21,45	6	25,94	55,8
28	0,69	21,61	6	27,97	55,1
35	1,23	21,05	7	27,13	53,5
42	0,29	21,73	7	28,18	49,9
49	0,17	21,73	6	29,82	42,1
56	2,32	19,63	6	32,33	37,2
63	15,61	6,32	7	31,13	37,9
70	13,57	6,93	7	28,21	38,2
77	8,71	11,47	7	26,23	35,6
84	0,13	21,79	7	28,1	34,2
91	0,8	20,8	7	28,34	28,4
98	3,93	17,02	7	28,6	27,6
105	2,69	18,62	7	28,02	26,6
112	9,42	11,02	7	28,78	24,9
119	3,53	18,01	7	27,92	25,4

k. A.: keine Angaben

Tab. 14-4: Laborversuchsergebnisse von Kohlendioxid- und Sauerstoffanteil, pH-Wert, Temperatur und Wassergehalt des im Simulationsmodell dargestellten Laborversuchs E4 (Körner et al., 1999)

Zeit	CO₂	O₂	pH	T	Wassergehalt
(d)	(Vol.-%)	(Vol.-%)	(pH)	(°C)	(Gew.-%)
0	k. A.	21	6	12,1	54,8
7	1,33	20,08	7	23,5	56,7
14	1,39	19,94	8	22,9	58,2
21	1,35	20,93	7	25,8	57,6
28	1,22	20,78	7	28,3	57,5
35	1,08	21,09	7	22,6	56,4
42	2,18	19,85	6	27,6	55,4
49	3	19	6	25,3	55,7
56	1,38	20,47	6	18,2	54,1
63	16,6	5,08	7	25,5	53,1
70	10,14	1,74	7	27,5	53,4
77	16,64	1,32	7	20,8	54,2
84	9,49	10,57	7	49,5	53,9
91	5,91	15,2	6	65,9	53,9
98	1,37	20,68	7	40,1	54,5
105	0,89	21,1	7	46,5	53,8
112	0,65	21,31	7	36,3	53,8
119	0,53	21,42	7	22,24	55,1

k. A.: keine Angaben

Tab. 14-5: Laborversuchsergebnisse von Kohlendioxid- und Sauerstoffanteil, pH-Wert, Temperatur und Wassergehalt des im Simulationsmodell dargestellten Laborversuchs E5 (Körner et al., 1999)

Zeit	CO₂	O₂	pH	T	Wassergehalt
(d)	(Vol.-%)	(Vol.-%)	(pH)	(°C)	(Gew.-%)
0	k. A.	21	11	20,31	43,39
7	1,01	20,86	6	33,98	45,66
14	2,34	19,07	7	28,39	46,89
21	0,87	21,23	7	25,31	48,13
28	0,63	21,39	7	25,67	46,49
35	0,32	21,63	7	22,72	44,85
56	0,85	21,02	7	19,57	44,03
63	19,5	1,88	7	25,3	44
70	8,81	8,46	7	28	45
77	18,17	1,88	7	24,52	45,86
84	3,02	17,01	7	20,78	46,65
91	0,76	21,36	7	23,07	47
98	5,73	12	7	21,48	48
107	15,18	1,77	7	20,9	48,55

k. A.: keine Angaben

Tab. 14-6: Laborversuchsergebnisse von Kohlendioxid- und Sauerstoffanteil, pH-Wert, Temperatur und Wassergehalt des im Simulationsmodell dargestellten Laborversuchs E6 (Körner et al., 1999)

Zeit	CO₂	O₂	pH	T	Wassergehalt
(d)	(Vol.-%)	(Vol.-%)	(pH)	(°C)	(Gew.-%)
0	k. A.	k. A.	6	19,1	49,01
7	2,62	20,9	6	33,1	51,37
14	4,22	18,06	7	52,42	51,83
21	6,68	16,79	8	45,82	55,03
28	2,81	19,17	8	45,97	56,66
35	4,22	17,93	7	59,66	57,62
42	5	18,32	7	46,78	56,58
49	3,8	18,23	8	58,52	56,6
56	3,78	17,75	8	52,16	52,24
63	1,84	21,9	8	42,53	49,43
70	1,61	22,02	8	38,83	45,57
78	0,83	21,45	8	36	50,28
84	0,23	21,9	9	29,87	47,19
91	0,17	21,73	8	23,67	44,13
98	0,26	21,87	8	30,05	40,93
105	0,21	22,44	8	30,02	40,2
112	0,2	21,95	8	31,98	34,79
119	0,18	21,92	8	32,28	30,67
126	0,25	21,83	8	23,35	46,98
133	0,28	22,11	8	35,18	42,55
140	1,17	20,89	8	30,12	39,72
161	7,64	11,79	8	30,28	38,25

k. A.: keine Angaben

(Das Simulationsprogramm **SimuCF** ist auf Anfrage bei deipser@t-online.de kostenpflichtig erhältlich.)