Bedienungsanleitung für das Simulationsprogramm SimuCF

Programm zur Prozesssimulation biologischer Abbauprozesse im Bereich der Abfallwirtschaft





INHALTSVERZEICHNIS

1	Cł	haral	terisierung des Simulationsmodells	.4
2	In	stalla	ation	.4
3	Fi	ınkti	onsweise	.5
	3.1	Bei	spiele für die Anwendung des Programms	.5
				•
4		ertee	eingabe (Input)	.8
	4.1	Ma	terial	.11
	4.2	Erg	jänzende Angaben	.19
	4.3	An	angsgehalte bzw. Zuschlagsstoffe	. 20
	4.4	Mie	eten oder Reaktorform	.21
	4.5	lso	lation und Reaktor-Wassermantel	.22
	4.6	Vei	fahrenswahl und –länge	.23
	47	Fin	stellung der Belüftung	25
	- .,			. 25
	4.8	Ein	stellung der Wassersituation	.27
5	W	ertea	nusgabe (Output)	.28
5	5.1	ertea Gra	nusgabe (Output) aphische Ausgabe	.28 .28
5	5.1 5.1	Gra Gra	aphische Ausgabe Physikalische Parameter	. 28 . 28 . 29
5	5 W 5.1 5.1 5.1	ertea Gra 1.1 1.2	nusgabe (Output) aphische Ausgabe Physikalische Parameter N/S/C-Bilanzen	. 28 . 28 . 29 . 29
5	5 W 5.1 5.1 5.1 5.1	Gra Gra 1.1 1.2 1.3	aphische Ausgabe Physikalische Parameter N/S/C-Bilanzen Stickstoff	.28 .28 .29 .29 .29
5	5 W 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1	ertea Gra 1.1 1.2 1.3 1.4	aphische Ausgabe Physikalische Parameter N/S/C-Bilanzen Stickstoff Schwefel/Stickstoff	.28 .29 .29 .29 .29 .29
5	5 W 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1	Gra Gra 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5	aphische Ausgabe Physikalische Parameter N/S/C-Bilanzen Stickstoff Schwefel/Stickstoff Gas/Wasser	.28 .29 .29 .29 .29 .29 .29
5	5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1	Gra 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5 1.6	aphische Ausgabe Physikalische Parameter N/S/C-Bilanzen Stickstoff Schwefel/Stickstoff Gas/Wasser Gas (Vol. %)	.28 .29 .29 .29 .29 .29 .29 .29 .30
5	5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1	Gra 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5 1.6 Au	Ausgabe (Output) Aphische Ausgabe Physikalische Parameter N/S/C-Bilanzen Stickstoff Schwefel/Stickstoff Gas/Wasser Gas (Vol. %) sgabe von Einzelwerten	.28 .29 .29 .29 .29 .29 .29 .30 .30
5	5 W 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.2	Gra 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5 1.6 Au 2.1	nusgabe (Output) nphische Ausgabe Physikalische Parameter N/S/C-Bilanzen Stickstoff Schwefel/Stickstoff Gas/Wasser	.28 .29 .29 .29 .29 .29 .29 .30 .30 .31
5	5 W 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.2 5.2	Gra 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5 1.6 Au 2.1 2.2	nusgabe (Output) nphische Ausgabe Physikalische Parameter N/S/C-Bilanzen Stickstoff Schwefel/Stickstoff Gas/Wasser Gas (Vol. %) sgabe von Einzelwerten Wasserhaushalt Wasserphase	.28 .29 .29 .29 .29 .29 .30 .30 .31 .31
5	5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.2 5.2 5.2	Gra 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5 1.6 Au 2.1 2.2 2.3	husgabe (Output) aphische Ausgabe Physikalische Parameter N/S/C-Bilanzen Stickstoff Schwefel/Stickstoff Gas/Wasser Gas (Vol. %) sgabe von Einzelwerten Wasserhaushalt Wasserphase Gasphase	.28 .29 .29 .29 .29 .30 .30 .31 .31 .31
5	5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.2 5.2 5.2 5.2	Gra 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5 1.6 Au 2.1 2.2 2.3 2.4	aphische Ausgabe. Physikalische Parameter. N/S/C-Bilanzen. Stickstoff. Schwefel/Stickstoff. Gas/Wasser. Gas (Vol. %) sgabe von Einzelwerten Wasserhaushalt. Wasserphase Gasphase Gasbildungspotential und Atmungsaktivität	.28 .29 .29 .29 .29 .29 .30 .30 .31 .31 .31 .31
5	5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.2 5.2 5.2 5.2	Gra Gra 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5 1.6 Au 2.1 2.2 2.3 2.4 2.5	husgabe (Output) hphische Ausgabe Physikalische Parameter N/S/C-Bilanzen Stickstoff Schwefel/Stickstoff Gas/Wasser Gas (Vol. %) sgabe von Einzelwerten Wasserhaushalt Wasserphase Gasphase Gasbildungspotential und Atmungsaktivität Ausgabe der Materialwerte	.28 .29 .29 .29 .29 .29 .30 .31 .31 .31 .31 .32 .33
5	5 W 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1	Gra Gra 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5 1.6 Au 2.1 2.2 2.3 2.4 2.5 2.6	Physikalische Ausgabe Physikalische Parameter N/S/C-Bilanzen Stickstoff Schwefel/Stickstoff Gas/Wasser Gas (Vol. %) sgabe von Einzelwerten Wasserhaushalt Wasserphase Gasphase Gasbildungspotential und Atmungsaktivität Ausgabe der Materialwerte Abbaurate und Methanbildung	.28 .29 .29 .29 .29 .29 .30 .31 .31 .31 .31 .32 .33 .34
5	5 W/ 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.1 5.2 5.2 5.2 5.2 5.2 5.2 5.2 5.2	Gra Gra 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5 1.6 Au 2.1 2.2 2.3 2.4 2.5 2.6 2.7	ausgabe (Output)	.28 .29 .29 .29 .29 .29 .30 .31 .31 .31 .31 .32 .33 .34 .34



	5.2.9	9 Weitere Endwerte	5
6	Dat	enbearbeitung	36
6	.1	Logdatei erstellen 3	6
6	.2	Datenextraktion	6

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

Abbildung 2-1: Dateien zur Installation	4
Abbildung 3-1: Schritt-für-Schritt-Anleitung zur Einrichtung der Simulationsschnittstelle anhand von	
Beispielen	6
Abbildung 3-2: Gut definierte Zonen (insgesamt 21 Zonen)	6
Abbildung 3-3: Benennung für einzelne Zonen	6
Abbildung 3-4: Nummerierung für jedes Feld in SimuCF	7
Abbildung 3-5: Diagramme zum Vergleich zwischen Laborexperiment und SimuCF-Simulation	7
Abbildung 4-1: Einstellung des Trockengehalts (Zone C)	11
Abbildung 4-2: Prozentuale Abbaubarkeiten der Inhaltsstoffe (Zone J)	12
Abbildung 4-3: Versteckte Funktionen der "Datenbank" (Zone K)	13
Abbildung 4-4: Übersicht der Materialeingabe	18
Abbildung 4-5: Eingabe von Zusatzinformationen (wichtig für den aeroben Abbau) (Zone A)	20
Abbildung 4-6: Eingabe von Zuschlagsstoffe (Zone L)	20
Abbildung 4-7: Eingabe von anorganischen Materialien (Zone N)	21
Abbildung 4-8: Eingabe für den anorganischen Anteil (Zone C)	21
Abbildung 4-9: Eingabe für die Form des Haufens oder Reaktorform (Zone I)	22
Abbildung 4-10: Eingabe der Materialmenge (Zone L)	22
Abbildung 4-11: Eingaben zur Isolierung, Temperierung und Energie (Zone B)	23
Abbildung 4-12: Eingaben zur Prozessdauer, Kondensatverbleib und Chargenwahl (Zone D und E)	24
Abbildung 4-13: Eingaben zu Chargen Ein- und Ausfuhr und Ausgabezeiten/-mengen (Zone S)	24
Abbildung 4-14: Eingaben zu Verfahrenswahl, Belüftung und Umsetzung (Zone C, G und H)	26
Abbildung 4-15: Einstellung der Wassersituation (Zone G)	27
Abbildung 5-1: Werteausgabe graphisch und Einzelwerte (Zone G, O, P, Q und R)	30
Abbildung 5-2: Ausgabe von Einzelwerten (Zone S)	33
Abbildung 5-3: Ausgabe materialabhängiger Berechnungen (Zone K)	34



1 Charakterisierung des Simulationsmodells

Das Simulationsprogramm SimuCF simuliert 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. Hierbei werden überwiegend mathematische Grundgleichungen bzw. physikalische Gesetzmäßigkeiten und stöchiometrische Stoffberechnungen angewendet. Damit ist es im Wesentlichen den deterministischen Modellen zuzuordnen.

Nach Vorgabe der Anfangsbedingungen werden zeitdiskret iterativ Werte in ständiger Neuberechnung mit den vorgegebenen und während des Laufs änderbaren Parametern unter Berücksichtigung gegebener Abhängigkeiten erzeugt.

Das Programm ist durch folgende Eigenschaften kurz charakterisierbar:

- Keine strikte Prozesstrennung zwischen anaeroben und aeroben Verfahren
- Viele Betriebsvarianten möglich
- Thermodynamische Einflüsse einbezogen
- Thermophile Bedingungen und passive Belüftung berücksichtigt
- Korrekturfaktoren als änderbare Annahmen integriert
- Auch spontan auftretende kurzzeitige Temperaturanstiege prognostizierbar
- Zeitdiskreter Prozessverlauf, nicht nur Summenergebnisse
- Abbaukinetik beinhaltet viele Einflüsse
- Wassersituation umfangreich einstellbar

2 Installation

Zunächst muss der Ordner "SimuCF.zip" entpackt und geöffnet werden. In diesem befinden sich die in Abbildung 2-1 aufgeführten Dateien. Zur Installation muss die Datei "setup.exe" ausgeführt werden. Die Öffnung des Programms erfolgt wie unter Windows üblich über "Programme". Es empfiehlt sich eine Verknüpfung auf dem Desktop anzulegen.

ata	Dateiordner
🚞 bin	Dateiordner
🚞 license	Dateiordner
🚞 supportfiles	Dateiordner
🚾 SimulationCF.alia	ALIASES-Datei
SimulationCF.exe	Anwendung
SimulationCF.ini	Konfiguration
🚾 nidist.id	ID-Datei
🛅 setup.exe	Anwendung
🎒 setup.ini	Konfiguration

Abbildung 2-1: Dateien zur Installation



3 Funktionsweise

Nach der Installation kann das Simulationstool genutzt werden. Bei der Öffnung des Programms läuft zunächst eine Simulation anhand eines Beispiels.

Eigene Simulationen können im Anschluss unter Variation einer Vielzahl von Parametern durchgeführt werden, welche kurz erläutert werden. Die Eingabe erfolgt direkt auf der Oberfläche des Programms.

Zunächst grundlegende Informationen:

- Rosa hinterlegte Eingabeflächen enthalten die Startwerte der Simulation.
- Weiße Flächen und grüne Schalter enthalten weitere Auswahlmöglichkeiten.
- In braun-grauen Flächen sind Ergebnisse aus Simulation oder aus Startwerten dargestellt.

- Simulationen können mit stop beendet werden (STRG+P).
- Zurücksetzen der Simulation zum Startzustand ist durch "Reinitialize All to Default" möglich; dies ist unter der Schaltfläche Operate am oberen Bildrand zu finden.
- Die Eingabe der Materialien wird nur übernommen, wenn die Simulation läuft (s.o.).
- Die Speicherung von ganzen Simulationen kann in der Kopfzeile unter Operate > Data Logging > Log durchgeführt werden; hierzu muss eine Datei angelegt werden.
- Gespeicherte Simualtionen können über Operate > Data Logging > Retrieve geladen werden.
- Bei Simulation der chargenweisen Zugabe ist die Simulationsdauer verlängert, weshalb bis zum automatischen Ende der Simulation gewartet werden muss.
- Der Prozess ist nur dann machbar, wenn die Diagramme und Zahlen konstant sind und keine Warnleuchten im mittleren Bereich aufleuchten.
- Vorraussetzung ist also stets das Erreichen eines stabilen Zustands ohne Warnhinweise.
- Ein- und Austräge finden bei Simulation eines Prozesses in Chargen gleichzeitig statt.

3.1 Beispiele für die Anwendung des Programms

Einzelne Beispiele für anaerobe Vergärung und Kompostierung sind enthalten, nämlich die anaerobe Vergärung von Laub bzw. die Kompostierung von Lebensmittelabfällen. Die für die Beispiele vorgesehenen Einstellungen sind in Abbildung 3-1 dargestellt. Um die Identifizierung in der folgenden Anleitung zu erleichtern, ist die Oberfläche von SimuCF in 21 Zonen unterteilt, die in alphabetischer Reihenfolge beschriftet sind (siehe Abbildung 3-2). Alle Bereiche sind einzeln benannt, wie in Abbildung 3-3 dargestellt. Für die in der SimuCF-Oberfläche enthaltenen Felder wurde eine



eindeutige Nummerierung erstellt, die in Abbildung 3-4 dargestellt ist. Die in Abbildung 3-5 dargestellte Grafik ist das Ergebnis, das mit SimuCF erstellt werden soll.



Abbildung 3-1: Schritt-für-Schritt-Anleitung zur Einrichtung der Simulationsschnittstelle anhand von Beispielen



Abbildung 3-2: Gut definierte Zonen (insgesamt 21 Zonen)

А	Basic starting values	К	Material by components
В	Reactor casing	L	Biowaste-mixture by preset shares
С	Material characteristic	М	Additional components
D	Duration of treatment	Ν	Additional structure fraction
Е	Charge (batch/continuous)	0	Additional fluid output characteristics
F	Inoculum and lag-phase	Ρ	Graph selection and legend
G	Aerobic parameters	Q	Graph illustration
н	Anaerobic parameters	R	Gas output
I	Reactor form	S	Laboratory reactors results
J	Components degradability	т	Input overall sum
SC	ShortCut		

Abbildung 3-3: Benennung für einzelne Zonen





Abbildung 3-4: Nummerierung für jedes Feld in SimuCF



Graph: Summer Leaves

Abbildung 3-5: Diagramme zum Vergleich zwischen Laborexperiment und SimuCF-Simulation



4 Werteeingabe (Input)

Um die Simulation durchzuführen, müssen zunächst die folgenden Informationen über das Eingangssubstrat ermittelt und analysiert werden.

- 1. <u>Physikalisch-chemische Analyse</u>
 - Struktur Trockensubstanzgehalt (auch bekannt als Gesamtfeststoffgehalt (TS))
 - Gehalt an abbaubaren Stoffen (auch als flüchtiger Feststoffgehalt (VS) und organische Trockenmasse (oDM) bezeichnet)
 - Strukturgewicht (auch als anorganischer Gehalt und Aschegehalt bezeichnet)
- 2. Bio-chemische Analyse
 - Kohlenhydrate
 - Stärke
 - Aminosäuren
 - Hemicellulose
 - Fette
 - Wachse
 - Proteine
 - Zellulose
 - Lignin
- 3. Art der Materialien
 - Stroh
 - Holz
 - Rinden
 - Laub
 - Gras
 - Obst (z. B. Äpfel)
 - Kartoffeln
 - Gemüse (z. B. Rüben)
 - Getreide (z. B. Weizen)
 - Hülsenfrüchte (z. B. Erbsen)
 - Fleisch
 - Fisch
- 4. Konzentration von Schwermetallen
 - Eisen
 - Zink
 - Chrom
 - Kupfer



- Nickel
- Blei
- Kadmium

Diese Ausgangswerte werden dann auf die in der SimuCF-Schnittstelle genannten Einheiten umgerechnet, bevor sie in die entsprechenden Felder eingegeben werden. Damit eine Simulation genauer abläuft, werden die Eingabedaten für Kategorie 2 (biochemische Analyse) der Kategorie 3 (Art der Materialien) vorgezogen.





 Die Informationen über das Eingangssubstrat, die aus der Laboranalyse gewonnen wurden, sind wie folgt:

Physikalisch-chemische Analyse				
Wassergehalt	%FM	50.12		
Trockenrückstand (TS)	%FM	49.88		
Glühverlust (VS)	%TS	92.36		
Anorganischer Gehalt	%TS	7.64		
Bio-chemische Analyse				
Kohlenhydrate (Nass)	kg	1.7054455		
Stärke (Nass)	kg	0.00		
Aminosäuren (Nass)	kg	0.00		
Hemicellulose (Nass)	kg	0.8789604		
Fette (Nass)	kg	0.0393564		
Wachse (Nass)	kg	0.00		
Proteine (Nass)	kg	0.4722772		
Zellulose (Nass)	kg	0.8264851		
Lignin (Nass)	kg	1.3774752		
Konzentration von Schwermetallen				
Fe	mg/L	0.3206		
Zn	mg/L	0.1299		
Pb	mg/L	0.0030		
Cd	mg/L	0.0006		
Cr	mg/L	0.0091		
Cu	mg/L	0.0234		
Ni	mg/L	0.0032		

- Öffnen die SimuCF-Software.
- Simulationen können durch Drücken der stop Taste (Strg+P) oder der Taste in der linken oberen Ecke der Benutzeroberfläche gestoppt werden.



Kompostierung von Lebensmittelabfälle
Zonen, die für die Eingabe von Informationen zur Simulation des Kompostierungsprozesses
wichtig sind, sind die Zonen A, C, D, E, F, G, H, I, J, und K.

4.1 Material

Die Eingabefläche für den Trockengehalt des Materials befindet sich im linken oberen Bereich der Programmoberfläche und ist in Abbildung 4-1 dargestellt. Falls nicht vorgegeben liegt dieser bei 50 Gew.-% bzw. kann eingestellt werden. Beim "degr. mat. dry solid content [C4]" handelt es sich um den abbaubaren Anteil, der "structure dry solid content [C5]" beschreibt nicht abbaubares Strukturmaterial.

degr. mat. dry solid content (weight-%)	C4
50,00	
structure dry solid content (weight-%)	C5
50,00 (e.g. lignin, minerals)	

Abbildung 4-1: Einstellung des Trockengehalts (Zone C)

Anaerobe Vergärung von Blättern						
Die aus der physikalisch-chemischen Analyse gewonnenen Daten sind zum Ausfüllen der						
Felder (Felder C4 und C5 erforderlich.					
	Physikalisch-chemische Analys	Se				
	Wassergehalt	%FM	50.12			
	Trockenrückstand (TS)	%FM	49.88			
	Glühverlust (VS)	%TS	92.36			
	Anorganischer Gehalt	%TS	7.64			
• C4 ist definiert als der VS-Gehalt in Frischmasse (FM). $Gl $ $Gl $ $ihverlust \times Trockenr $ $ickstand \times 100\%$ $= 0.9236 \times 0.4988 \times 100\% = 46.07\%$						
 C5 ist de werden. 	 C5 ist definiert als TS in Frischmasse (FM). Daher sollten 49,88 % in das Feld C5 eingetragen werden. 					

Die Abbaubarkeiten der einzelnen Inhaltsstoffe [J1-J3] beruhen auf Annahmen und können im Programm am linken Rand der Programmoberfläche bei Bedarf angepasst werden, siehe Abbildung 4-2.





Abbildung 4-2: Prozentuale Abbaubarkeiten der Inhaltsstoffe (Zone J)



In Error! Reference source not found. sind 8 verschiedenen Eingabemöglichkeiten aufgezeigt und werden nun erläutert:

1. <u>Die Eingabe der Materialien kann über die Substrate (Stroh, Holz, Rinde, Blätter, Früchte,</u> <u>Fleisch usw.) erfolgen.</u>

Dazu können Werte direkt in den rot markierten Kasten [L5-L16] eingegeben werden, welche mit "use values [L1]" im blau markierten Kasten bestätigt und in Inhaltsstoffe umgerechnet werden. Die Bestandteile werden erst angezeigt, nachdem die Simulation durch Drücken von 😥 "to run" gestartet wurde. "Null setzen" [M11] kann angeklickt werden, bis ein grünes Licht leuchtet, um frühere Eingaben zu löschen und neue Abfallkategorien, Abfallmodelle zu definieren oder eine Direkteingabe vorzunehmen.

2. Geben den Materialinput mit verschiedenen Abfallkategorien in das Programm ein.

Ebenso ist eine Eingabe anhand verschiedener Abfallkategorien (Klärschlamm, Hausmüll, Bioabfall, usw.), welche im Programm hinterlegt sind, möglich. Dazu die graue Dropdown-Schaltfläche im gelben Kasten [K2] (**Error! Reference source not found.**) nutzen und mit "o.k." bestätigen. Die Bestandteile werden erst angezeigt, nachdem die Simulation durch Drücken von 😥 "to run" gestartet wurde. Die Abfallkategorien enthalten vordefinierte biochemische Zusammensetzungen und Werte gemäß der Literatur. Beispiele für verfügbare Abfallkategorien sind:

- Klärschlamm
- Grünenschnitt
- Hausmüll



- Org. Hausmüll
- Bioabfall
- Zeitung
- Papierfasern
- Database (Hinweis: [K1, K2*a and K2*b] werden sichtbar, nachdem "Datenbase" ausgewählt wurde, wie in Error! Reference source not found. gezeigt)
- All zero (Hinweis: Diese Option wird gewählt, wenn frühere Eingaben unter [K5-K13] lieber gestrichen werden sollen, um neue Abfallkategorien oder Abfallmodelle zu definieren oder um eine direkte Eingabe vorzunehmen).



Abbildung 4-3: Versteckte Funktionen der "Datenbank" (Zone K)

3. Geben den Materialinput mit sechs in das Programm integrierten Modellabfälle ein.

Außerdem stehen sechs weitere Modellabfälle zur Verfügung (E1 bis E6), welche genutzt werden können. Details zu den einzelnen Abfallmodellen sind in



Tabelle 1 dargestellt, die über den "show"-Hebel [L4] in der SimuCF-Oberfläche wieder abgerufen werden können. Diese können durch die graue Dropdown-Schaltfläche [L3] im orangenen Kasten (**Error! Reference source not found.**) ausgewählt und mit "o.k." bestätigt werden. Die Materialien werden automatisch in ihre Bestandteile (Kohlenhydrate, Stärke, Fette usw.) umgewandelt ([K5-K13], grüner Kasten in **Error! Reference source not found.**), nachdem die Simulation durch Drücken von 🔄 "to run" gestartet wurde.



[L3]	bioabfall e1	bioabfall e2
Status	Modellabfall	Modellabfall
Beschreibung	Leicht abbaubare Küchenabfallmischungen	Leicht abbaubare Küchenabfallver- bindungen, hohe Konzentration anor- ganischer Stoffe (z. B. Sand und Erde)
Jahreszeit (in der der Abfall gewonnen wird)	Winter	Winter
Aufbau der Abfälle	■ Äpfel	Äpfel
	Kartoffeln	- Kartoffeln
	Rüben 15%	Rüben
	- Weizen	- Weizen
	2% ■ Erbsen	Erbsen 28%
	Eloischpulvor 16%	= Fleischpulver
	= Heischpulver	• Holz 22%
	Holz	■ Kalk
	Kalk	■ Sand
Belüftungsrate	moderate	-
Wassergehalt (%)	49	9-50 54
pH-Wert	6.1	-6.5 6.3
Schüttdichte (Mg/m ³)		0.8 0.7
N-Gehalt (%)	1.8	-1.9 1.4
Organischer Gehalt (%)	82	2-85 76
C/N-Verhältnis	20	0-25 24
Trockenmasse (kg)	3	1.30 60.55

Tabelle 1: Details zu den einzelnen Abfallmodellen e1-e6

[L3]	bioabfall e3	bioabfall e4
Status	Modellabfall	Echter Abfall
Beschreibung	Reich an Grünabfallbestandteilen, enthält einige Fraktionen von Kü- chenabfällen	Der Abfall wird vor dem Kompostie- rungsprozess zunächst anaerob ab- gebaut.
Jahreszeit (in der der Abfall gewonnen wird)	Herbst	
Aufbau der Abfälle	Apfel	
	Kartoffeln 1% 2%	
	• Weizen 14% 7%	Gärrest
	Erbsen	
	Fleischpulve	
	r ■ Stroh	
	Rinden 18% 27%	82%
	 Blätter 	Holz
	• Kalk 14%	
	■ Sand	
Belüftungsrate	-	-
Wassergehalt (%)	53	60
pH-Wert	6.0	8.0
Schüttdichte (Mg/m ³)	0.2	0.5
N-Gehalt (%)	1.5	1.2
Organischer Gehalt (%)	66	39



C/N-Verhältnis	21	8
Trockenmasse (kg)	17.95	35.00

[L3]	bioabfall e5	bioabfall e6
Status	Modellabfall	Modellabfall
Beschreibung	Reich an Grünabfallbestandteilen,	Leicht abbaubare
	enthält einige Fraktionen von Kü-	Küchenabfallmischungen
	chenabfällen	
Jahreszeit (in der der	Frühling, Sommer	Winter
Abfall gewonnen wird)		
Aufbau der Abfälle	Äpfel	- Äpfol
	1% ₇ [−] 1%	Aprei
	Kartoffeln	Kartoffeln
	Weizen	5%
	Frbsen	Rüben 15%
	9% 1% -	Woizop
	■ Fleischpulve	2%
	Stroh	Erbsen
	Rinden 19%	16%
		Fleischpulver 43%
	■ Hoiz 14%	Holz
	■ Kalk	
	■ Sand	■ Kalk
Belüftungsrate	-	Intense
Wassergehalt (%)	43	49-50
pH-Wert	10.8	6.1-6.5
Schüttdichte (Mg/m ³)	0.2	0.8
N-Gehalt (%)	0.6	1.8-1.9
Organischer Gehalt (%)	64	82-85
C/N-Verhältnis	12	20-25
Trockenmasse (kg)	25.00	31.30

4. Materialeingabe direkt mit Werten eingeben.

Grundsätzlich werden die Materialien in ihre Inhaltsstoffe zerlegt ([K5-K13], grüner Kasten in Abbildung 4-4), wo diese auch direkt eingegeben werden können:

- Kohlenhydrate
- Stärke
- Aminosäuren
- Hemicellulose
- Fette
- Wachse
- Proteine
- Zellulose
- Lignin

Diese Werte werden für die Simulation eingelesen, nachdem die Simulation mit 😥 "to run" gestartet wurde.

SimuCF funktioniert am besten zwischen 1-1000 kg. Die Ein- und Ausgabewerte können jedoch in jedem Fall skaliert werden (x0,1, x10, x1000 usw.).



5. Geben den Materialeinsatz durch Umrechnung von trockener in feuchte Feststoffe (kg) ein.

Eine Umrechnung von Trocken- in Feuchtgewicht (kg) ist ebenfalls möglich. Diese muss durchgeführt werden, wenn das Material als Trockengewicht angegeben ist. Dazu im lila Kasten [K4] (Abbildung 4-4) die Schaltfläche betätigen (leuchtet kurz grün auf). Die Änderungen werden erst sichtbar, wenn die Simulation mit der Taste 😥 "to run" gestartet wird. Die Umrechnung basiert auf Literaturwerten für einige der definierten Modellabfälle sowie der Abfallkategorien und einzelnen Materialien. Die Trockengehalte sind zudem veränderbar bzw. können für die nicht vorgegebenen gewählt werden.

6. Geben das Material ein, indem Sie es aus einer "Database" auswählen.

Zukünftig ist es ebenso möglich, Materialien aus einer Datenbank auszuwählen. Dazu muss aus der Dropdown-Schaltfläche [K2] im gelben Kasten "database" (Abbildung 4-4) (leuchtet kurz grün auf) und im Anschluss ein Substrat im erscheinenden Menü ausgewählt werden [K2*a] (Abbildung 4-3). Nachdem die Auswahl vollständig getroffen ist, wird die Auswahl mit der Schaltfläche "o.k." neben [K2] bestätigt. Die Werte aus der Datenbank werden eingelesen, nachdem die Simulation mit 🔂 "to run" gestartet wurde.

7. Geben das Material ein, indem Sie das eigene Material eingeben.

Wie bereits erwähnt, würde [K1] erst erscheinen, wenn unter [K2] die "Database" ausgewählt und die Simulation mit 🔄 "to run" gestartet wurde. Durch Anklicken der Fläche "input own material" [K1] ist es zudem möglich (leuchtet kurz grün auf), eigenes Material im unteren Bereich der Benutzeroberfläche zu definieren [T1-T28, Zone T].

8. Geben zusätzliche Materialeingaben zu den vorhandenen Mengen ein.

Ebenso ist es möglich, Inhaltsstoffe in prozentualer Angabe zu bereits vorhandenen Mengen hinzuzufügen. Dazu die Werte in die weißen Felder [M1-M10] eingeben und mit "o.k." bestätigen, erkennbar im schwarzen Kasten in Abbildung 4-4. "Set Zero" [M11] kann angeklickt werden, bis ein grünes Licht leuchtet, um frühere Eingaben zu löschen und neue Abfallkategorien, Abfallmodelle zu definieren oder eine Direkteingabe vorzunehmen.

Addiert werden können auch die im roten und orange markierten Kästen mit "add(+)" [K3] und "use values" [L1].

Die Aktionen werden eingelesen, nachdem die Simulation durch Drücken von 🔂 "to run" gestartet wurde.

Das Feld unter "Input Material (Charge)" unter Zone C, wie in Abbildung 4-8 dargestellt, zeigt den Nassgehalt in kg an.





Abbildung 4-4: Übersicht der Materialeingabe



Anaerobe Vergärung von Blättern					
 Die Informationen über das Eingangssubstrat, die aus der Laboranalyse gewonnen wurden, 					
sind wie folgt:					
Bio-chemische Analyse					
Kohlenhydrate (Nass)	kg	1.7054455			
Stärke (Nass)	kg	0.00			
Aminosäuren (Nass)	kg	0.00			
Hemicellulose (Nass)	kg	0.8789604			
Fette (Nass)	kg	0.0393564			
Wachse (Nass)	kg	0.00			
Proteine (Nass)	kg	0.4722772			
Zellulose (Nass)	kg	0.8264851			
Lignin (Nass)	kg	1.3774752			
Konzentration von Schwermetallen					
Fe	Fe mg/L 0.3206				
Zn	mg/L	0.1299			
Pb	mg/L	0.0030			
Cd	mg/L	0.0006			
Cr	mg/L	0.0091			
Cu	mg/L	0.0234			
Ni	mg/L	0.0032			
Mit diesen Informationen kann Methode 4 angewendet werden, indem die Werte in die Fel-					

- der K5-K13 (grüner Kasten in Abbildung 4-4) eingetragen werden.
- Da die in der Tabelle angegebenen Schwermetallkonzentrationen die vom SimuCF geforderten "max. values heavy metals" nicht überschreiten, muss K17 nicht eingeschaltet werden.

4.2 Ergänzende Angaben

ł

Die Schüttdichte [A1] und die Dichte des Strukturmaterials [A2] sind teilweise durch die gewählten Materialien vorgegeben. Die Materialtemperatur [A4] zu Beginn muss dem Prozess entsprechend gewählt oder angenommen werden. Das Porenvolumen [A6] und die Setzung des Materials [A7] sind besonders für den aeroben Abbau wichtig und können ggf. geschätzt werden. Ferner ist es möglich die Lufttemperatur der Umgebung [A3] anzupassen. Diese kann zwischen -40 und 80 °C liegen. Die Angaben werden links oben auf der Zone A in Simulationsoberfläche getätigt, wie in Abbildung 4-5 gezeigt.





Abbildung 4-5: Eingabe von Zusatzinformationen (wichtig für den aeroben Abbau) (Zone A)

4.3 Anfangsgehalte bzw. Zuschlagsstoffe

Kalk [L18], Ammonium [L22], Nitrat [L24], Sulfat [L26], Methanol [L28] und Eisen (II bzw. III) chlorid [L29,L31] können im Bereich "surcharge materials" zudotiert werden. Dabei kann die Zugabe auf einen bestimmten Tag festgelegt werden [L18, L21, L23, L25, L27, L30]. Wenn keine Zuschlagsstoffe vorhanden sind, kann "Null setzen" [L17] eingeschaltet werden, um die bereits im Feld vorhandenen Werte zu löschen. Die erwähnten Felder für die Eingabe von Zuschlagsstoffen befinden sich in Zone L, diese sind in Abbildung 4-6 dargestellt



Abbildung 4-6: Eingabe von Zuschlagsstoffe (Zone L)

Anorganisches Material wie Sand [N1-N3] und nicht abbaubares organisches Material [N4-N6] können ebenso in Zone N über C2 aus Zone C ergänzend zugegeben werden. Diese sind in Abbildung 4-7 und in Abbildung 4-8 dargestellt. Die bei [N1 und N4] eingefügten Werte sollten dann mit der daneben befindlichen Schaltfläche "o.k." bestätigt werden. Dabei werden die Werte zur Simulation eingelesen, nachdem die Simulation mit 🔂 "to run" gestartet wurde.



strue	cture f <mark>raction:</mark>			
	inorganics	e.g. sand weight (wet) (kg)	sand dry solid cont. (weight-	%) sand DM to wet
structure fraction	: save values	♦ 0,00 N1 .k.	\$50, N2	(dry density: 1,5 Mg/m ³)
ıt (weight-%)	o.k. load saved values	add struct. weight (wet) (kg)	struct. dry solid cont. (weigh	t ^{-%)} structure DM to wet
	o.k.	♥ 0,00 N4 .k.	20 N5	N6 (dry density: 0,3 Mg/m ³)

Abbildung 4-7: Eingabe von anorganischen Materialien (Zone N)



Abbildung 4-8: Eingabe für den anorganischen Anteil (Zone C)



4.4 Mieten oder Reaktorform

Über ein Auswahlmenü am linken Rand der Programmoberfläche in Zone I (wie in Abbildung 4-9 dargestellt) kann die Reaktor- oder Mietenform vorgegeben werden. Es kann zwischen Dreiecksmiete, Trapezmiete (Tafelmiete), Zylinderreaktor, Trommel, kugelförmigem Reaktor und Boxenform gewählt werden [11]. Über Angabe von Höhe [15], Breite [14] bzw. Durchmesser und Länge [13] erfolgt



die Volumenberechnung des Materials. Zudem kann ergänzend ein Freivolumen im Feld "V+ (m³)" [I7] voreingestellt werden. Dieses verändert die Reaktorgröße, aber nicht die Materialmenge. Der Winkel "α" [I6] muss für die Trapezmiete angegeben werden. Im Dropdown-Menü sind die zur Berechnung genutzten Angaben in Klammern hinter der Formangabe aufgeführt (z. B "box (b,l)"). Das berechnete Volumen wird in der Graphik angezeigt.

Die Materialmenge in Kilogramm kann mittig im unteren Teil der Programmoberfläche direkt eingegeben werden oder über das Volumen berechnet werden, [L34] dargestellt im roten Kasten in Abbildung 4-10.



Abbildung 4-9: Eingabe für die Form des Haufens oder Reaktorform (Zone I)



Abbildung 4-10: Eingabe der Materialmenge (Zone L)

4.5 Isolation und Reaktor-Wassermantel

Im Programm kann angegeben werden, ob Reaktor bzw. Schüttung isoliert ist, Wärmeverluste zu erwarten sind oder ob über einen Wassermantel zusätzlich Wärme zugeführt wird. Die



Wassertemperatur im Mantel wird als konstante Temperatur oder dem Material nachgeführte Temperatur simuliert.

Die Einstellung der Parameter kann im in Abbildung 4-11 aufgezeigten Kasten vorgenommen werden. Durch betätigen des Schalters unter "isolation?" [B3] wird definiert, ob das System isoliert ist, wenn das grüne Licht aufleuchtet. Dementsprechend ist der oberhalb stehende Wert definiert. Entweder als "degr. heat" (Abbauenergie) oder "heat loss" (Wärmeverlust) [B1]. Zudem kann ein zusätzlicher Wärmeverlust in der weißen Fläche angegeben werden, wenn man von einem Wärmeverlust [B2] bei der Isolation ausgeht. Falls man ein vollständig isoliertes System betrachtet, muss keine Wassermenge angegeben werden.

Im rosa hinterlegten Feld [B4] kann die genutzte Wassermenge definiert werden, wobei ein Wert von 0 bedeutet, dass kein Wassermantel vorhanden ist. Falls die angegebene Wassermasse zu gering ist für die gegebene Temperatur, wird diese automatisch auf die nötige Menge erhöht.

Die benötigte Energiemenge entspricht der Warmwassermenge in der Simulation.

Casing: heat loss (GJ/d			(GJ/d)
0.005	B1	0,0000	B2
isolat	ion?	water m	ass (kg)
	B3	100,00	^{B4} ff
t = const.? temp. diff. (°C)			
	B5	3	B6

Abbildung 4-11: Eingaben zur Isolierung, Temperierung und Energie (Zone B)



4.6 Verfahrenswahl und –länge

Die Eingabe eines Chargenbetriebs kann mittels des Schalters im mittleren Bereich der Programmoberfläche in Zone E durchgeführt werden. Dazu den Schalter im grünen Kasten in Abbildung 4-12 in Richtung "yes" stellen. Die vorgegebene Materialmenge wird dabei durch die Anzahl der Chargen geteilt, wodurch dieselbe Menge wie im Batchbetrieb betrachtet wird. Im rosa hinterlegten Feld [E3]



im blauen Kasten von Abbildung 4-12 wird die Häufigkeit der Chargenzugabe festgelegt. Die Zahl entspricht der Differenz zwischen den einzelnen Zugaben.

Die Zeitpunkte der Zugaben können ebenso für jeden Zeitschritt einzeln definiert werden, dazu können die Einstellungen aus Abbildung 4-13 im roten Kasten genutzt werden. Durch umstellen des dortigen Schalters auf "man." [S6] werden die im weißen Feld [S7] angezeigten Tage als Zugabezeitpunkte für Chargen definiert. Dazu muss der grüne Knopf [S8] für die einzelnen Tage aktiviert werden (also leuchten). Ebenso ist es möglich eine automatische Zugabe zu definieren und diese im Anschluss manuell zu bearbeiten (hinzufügen, löschen von Tagen). Durch betätigen von "all no" [S9] werden alle Eingaben deaktiviert.



Abbildung 4-12: Eingaben zur Prozessdauer, Kondensatverbleib und Chargenwahl (Zone D und E)

Charge			
non-degr. mat. output (wet) (kg)	at day: non-degr. mat. output (wet) (kg)	S6	charge input at day:
10 0 s2	200 add. (wet) (kg	aut	s7 20 58
S1	S3 S4 S5		S9 all no

Abbildung 4-13: Eingaben zu Chargen Ein- und Ausfuhr und Ausgabezeiten/-mengen (Zone S)

Auf die Möglichkeit, die Prozesszeit zu definieren, wird ebenfalls in Zone D hingewiesen, wie in Abbildung 4-12 gezeigt (rot markiert). Im Feld von [D1] ist es möglich, die Prozesszeit durch einen festen Wert zu definieren. Dazu muss der Schalter im roten Kästchen umgeklappt werden. In das rosa Feld kann dann ein Wert (in Tagen) eingetragen werden. Bei langen Prozessen kann die Simulation einige Zeit in Anspruch nehmen.

Außerdem kann das Programm automatisch einen Wert finden, indem es die Zeit ermittelt, in der 80 Gewichtsprozent des Materials abgebaut sind. Dabei ist der Schalter [D2] unter Zone D nach oben zu schieben ("auto."). Der Starttag sollte nicht zu weit vom benötigten Tag entfernt sein, um die Simulationszeit kurz zu halten.





4.7 Einstellung der Belüftung

Die wichtigste Vorgabe besteht bei der Wahl des Grundprozesses: Ohne Belüftung erfolgt schwerpunktmäßig ein anaerober Abbau (z.B. Vergärung) und mit Belüftung ein aerober Abbau (z.B. Kompostierung). Zur Einstellung des Grundprozesses muss der virtuelle Schalter [H2] in Abbildung 4-14 im roten Kasten verändert werden. Ist dieser nach rechts gelegt findet ein aerober Prozess statt, zur linken Seite findet ein anaerober Prozess statt.

Wird der Schalter im roten Kasten [H2] nach links umgelegt, wird ein aerober Prozess simuliert. Zwischenstufen sind abhängig von der Luftmenge und können im Programm ebenso simuliert werden. Zunächst befindet sich rechts oben im rechten braunen Kasten in Abbildung 4-14 die grüne rechteckige Taste [G4], die ein- oder ausgeschaltet werden kann. Wenn er eingeschaltet ist, leuchtet er grün. Im Bereich des linken braunen Kästchens [G1*, G1-G3] (Abbildung 4-14) kann eine Änderung der Daten vorgenommen werden. Es besteht die Möglichkeit, den rosafarbenen Schieberegler auf "Datei" [G1] zu schalten, wodurch eine kontinuierliche Erhöhung der voreingestellten Werte für die Lüftung möglich ist. Ist der Schieberegler auf "man." geschaltet, kann die Lüftung für jeden einzelnen Tag ("Zeit" entspricht den Tagen) festgelegt werden. Ist der [G4] ausgeschaltet (kein Licht), kann eine Dauerlüftung in m³/h festgelegt werden. Das Eingabefeld unter "Belüftungsrate max." [G6] im rechten braunen Kasten ändert sich in ein rosa Eingabefeld. In diesem Fall ist es möglich, den Schalter [G4*] neben dem Feld zu kippen, um eine ideale Lüftung zu simulieren. Dies ist im grünen Feld [G4**a-b] zu sehen. Die Werte werden nach der Stöchiometrie der biochemischen Reaktionen berechnet. Zusätzlich kann die Genauigkeit der Ventilation übernommen werden. Dazu kann das Eingabefeld unter "+/- x %" [G5] im rechten Bereich der braunen Box verwendet werden.

Wenn der Schalter [H2] auf einen anaeroben Prozess (rechts) umgelegt wird, besteht immer noch die Möglichkeit, eine Luftzufuhr in das System zu simulieren. Dies ist möglich, indem Sie den kleinen Knopf [H1] drücken, der grün leuchtet. Dies simuliert einen anaeroben Prozess mit Lufteintrag. Die Luftzufuhr wird auf die gleiche Weise definiert wie beim aeroben Prozess. Eine solche Simulation kann in der Regel als "Fehlschlag" bezeichnet werden, z. B. aufgrund von Leckagen.

Alternativ kann die oben erwähnte Belüftung für eine bestimmte Zeitspanne unter dem gelben Kasten in Abbildung 4-14 eingestellt werden. Für diesen Fall muss [D2] nach oben verschoben werden, so dass die Dauer vom Beginn bis zum Ende in Tagen definiert werden kann. In den Feldern [H3-4] besteht auch die Möglichkeit, einen Umsatz für einzelne Tage ("turn over at day:") des Materials zu simulieren. Dann wird das Porenvolumen der Materialoberfläche mit 10 cm Tiefe als Gasvolumen simuliert.



Zwischenprozesse, die von der Luftmenge abhängen, können ebenfalls simuliert werden. Darüber hinaus ist es möglich, einen Wechsel zwischen aeroben und anaeroben (Milieubedingungen) durchzuführen, wie im blauen Kasten in Abbildung 4-14 dargestellt. Mit Hilfe der Vorher/Nachher-Anzeige [C7] wird das bereits abgebaute oder das Restsubstrat des angegebenen Tages angezeigt [C9]. Wenn ein aerober Prozess simuliert wird und die Schaltfläche "o.k." [C8] gedrückt wurde, wechselt die Simulation zu einem anaeroben Prozess und umgekehrt. Mit dieser Funktion können Optimierungen und Änderungen im Prozess simuliert werden.

Darüber hinaus ist es auch möglich, die relative Luftfeuchtigkeit [G7] und die Lufttemperatur [G8] zu definieren, wie in Abbildung 4-14 dargestellt.



Abbildung 4-14: Eingaben zu Verfahrenswahl, Belüftung und Umsetzung (Zone C, G und H)





4.8 Einstellung der Wassersituation

Es kann die Wasserzufuhr durch Niederschlag oder Bewässerung und die Verdunstung Im Simulationsmodell vorgegeben werden. Zudem besteht die Möglichkeit, die fehlende Wassermenge für einen Wassergehalt von 50 Gew.-% zu berechnen und diesen über die Abbauzeit hinweg konstant zu halten.

Die Einstellungen der Wasserzufuhr und Evaporation sind in Abbildung 4-15 zu erkennen und befinden sich im mittleren Bereich der Programmoberfläche. Im roten Kasten sind die Angaben zur Verdunstung dargestellt, diese können sowohl zeitspezifisch (Angabe des Tages und Masse) [G10-12] als auch kontinuierlich (Masse pro Tag) [G13] angegeben werden. Auch eine Kombination ist möglich. Im grünen Kasten sind die gleichen Einstellungsmöglichkeiten für die Wasserzufuhr anzugeben. Weiterhin besteht die Möglichkeit, das verdampfte Wasser in den Prozess zurückzuführen. Hierzu wird der virtuelle Schalter [R9] in Abbildung 4-12 im schwarzen Kasten auf "in" gestellt. Bei Stellung auf "out" findet keine Rückführung statt.

Die automatische Regelung des Wassergehaltes auf 50 Gew.-% während des Prozesses ist mittels des Schalters [G15] auf der rechten Seite neben "auto." möglich. Zudem kann die Temperatur des zugeführten Wassers auf der Schaltfläche rechts neben "temp. (°C)" [G16] definiert werden. Die Regelung des Wassergehaltes auf 50 Gew.-% zu Beginn des Prozesses ist mittels des Schalters auf der rechten Seite neben "cont. w. i." [G20] möglich.



Abbildung 4-15: Einstellung der Wassersituation (Zone G)



5 Werteausgabe (Output)

Nach Verarbeitung der Daten erfolgt die Darstellung der wichtigsten Entwicklungen neben der Ausgabe von Einzelwerten in graphischer Form. Durch die graphische Darstellung werden Zusammenhänge verdeutlicht und ein zügiges Ablesen wird ermöglicht.

In der graphischen Darstellung sind Vergrößerungen und Skalierungen der Achsen frei durchführbar (grüner Kasten in Abbildung 5-1), zudem lassen sich alle Graphen optisch anpassen (Rechtsklick im gelben Kasten [P2] von Abbildung 5-1 und Rechtsklick auf Darstellungsfläche [Q]).

Die zeitdiskrete Ausgabe der Daten erfolgt tageweise, kann allerdings auch auf Stunden, Monate oder Tage umgerechnet werden. Zur Abschätzung der Gas- und Wassermengen, Frachten, Abbauzeiten bzw. Emissionszeiten bei sehr viel kleineren bzw. größeren Materialmengen, kann folgende Tabelle 2 genutzt werden:

Tabelle	2: Umrechnun	astabelle für	geschätzte	Substratmengen	und Abbauzeiten
		0	0	5	

Mengen multipliziert mit:	
10 ⁻³	aus Tagen werden Stunden
10 ³	aus Tagen werden Wochen
10 ⁶	aus Tagen werden Monate

Die berechneten Mengen müssen mit dem angegebenen Umrechnungsfaktor vom Tabelle 2 verrechnet werden, um eine Abschätzung der veränderten Mengen zu erhalten. Die Faktoren gelten für Ein- und Ausgabewerte und basieren auf veröffentlichten Werten. Die Tabelle befindet sich ebenso im unteren Bereich der Programmoberfläche (in Zone K).

Ergänzend zur graphischen Ausgabe sind Ergebnisse zu Gas, Wasser und Feststoff als Einzelwerte ablesbar. Alle Werte können exportiert werden.

5.1 Graphische Ausgabe

Es stehen sechs verschiedene Graphen (physics, N/S/C balances, Nitrogen, S/N, gas/water, and gas (vol.%) zur Darstellung von Werten zur Verfügung. Diese können im mittleren Bereich der Programmoberfläche im roten Kasten [P1] in Abbildung 5-1 über die Drop-Down Liste ausgewählt werden und sind im gelben Kasten inklusive Einheiten aufgeführt. Die Legenden werden dann in dem gelben Kasten [P2] angezeigt.



5.1.1 Physikalische Parameter

Unter "physics" sind die physikalischen Parameter zu finden. Diese beinhalten die Abbaurate, die Belüftungsmenge, den Wassergehalt im Material, die Temperatur im Material, das freie Porenvolumen, die Volumenabnahme des Materials, die Höhe des Materials, die Reduktion der organischen Trockensubstanz und die Wasserdurchlässigkeit des Materials.

5.1.2 N/S/C-Bilanzen

Das Diagramm für die Stickstoff-, Schwefel- und Kohlenstoffbilanzen umfasst die jeweiligen Atome in Feststoff-, Wasser- und Gasphase jeweils in Massen-%. Hierbei wird der abbaubare Feststoff berücksichtigt.

5.1.3 Stickstoff

Das Stickstoff-Diagramm enthält Ammonium-N, Nitrat-N, Nitrit-N jeweils in der Wasserphase und Ammoniak-N in der Gasphase.

5.1.4 Schwefel/Stickstoff

Im Diagramm für Schwefel- und Stickstoffverbindungen werden zur optischen Korrelation der pH-Wertverlauf in der Wasserphase, Distickstoffoxid (N₂O), produziertes Distickstoff (N₂) und Ammoniak (NH₃) in der Gasphase, Gesamtstickstoff (N), Ammonium (NH₄⁺), Nitrat (NO₃⁻) und Nitrit (NO₂⁻) in der Wasserphase, Schwefelwasserstoff (H₂S) in der Gasphase, Schwefel (S) und Sulfat-S (SO₄²⁻-S) in der Wasserphase zusammen angezeigt.

5.1.5 Gas/Wasser

Das Diagramm der Gasproduktion und Wassersituation zeigt die Gasmengen von Methan (CH₄), Wasserstoff (H₂), Kohlendioxid (CO₂) und Sauerstoff (O₂) auf. Ebenso werden der pH-Wert, das Essigsäureäquivalent (AC_{eq}) in der Wasserphase, das C/N-Verhältnis in der Feststoffphase und die anfallende Sickerwassermenge (im Programm "leachate"), die Oberflächenwassermenge (nicht eingesickertes Wasser) und die Wassermenge im Material.



5.1.6 Gas (Vol. %)

Hier wird die prozentuale Gaszusammensetzung dargestellt. Dabei ist Sauerstoff (O₂), Kohlendioxid (CO₂), Distickstoff (N₂), Methan (CH₄), Wasserstoff (H₂), Distickstoffoxid (N₂O), Ammoniak (NH₃) und Schwefelwasserstoff (H₂S) in Volumenprozent angezeigt.



Simulation of the Composting and Fermentation Process

Abbildung 5-1: Werteausgabe graphisch und Einzelwerte (Zone G, O, P, Q und R)

5.2 Ausgabe von Einzelwerten

Folgend werden nun die abgebildeten Einzelwerte aufgeführt und beschrieben, welche zusätzlich zu den graphischen Darstellungen ablesbar sind.



5.2.1 Wasserhaushalt

Die Sickerwasser- bzw. Oberflächenwassermenge [O1] kann unterhalb des roten Kastens in Abbildung 5-1 abgelesen werden. Dazu kann der virtuelle Schalter [O2] zwischen "surf. water" und "leachate" umgelegt werden. Das am Ende vorhandene Kondensat [R10, wie in Abbildung 4-12 angezeigt] kann auf der linken Seite neben dem grünen Kasten abgelesen werden, wobei hier ein virtueller Schalter die Auswahl zwischen "in" und "out" [R9] zulässt. Dabei wird definiert, ob das Kondensat dem Prozess zurückgeführt wird oder eine Entnahme stattfindet. Zudem ist die Menge des durch mikrobiologischen Abbau gebildeten Wassers ablesbar. Diese ist links neben den Werten der Wasserphase (blauer Kasten) in Abbildung 5-1 ablesbar und als "H₂O b. add." [G14] definiert.

5.2.2 Wasserphase

Die Werte der Wasserphase sind in den blauen Kästen der Abbildung 5-1 und Abbildung 5-2 abzulesen. Die pH-Werte [O10] (für jeden Tag über die nebenstehenden Pfeiltasten einstell- und ablesbar [O9]) und die Maximalwerte von Stickstoff [O7] und Schwefel [O8] sowie der Summenwert des Sauerstoffkonsums [O11] für einen gewählten Zeitraum (von einem bestimmten Tag für die letzten x Tage) sind im blauen Bereich von Abbildung 5-1 erkennbar. Die Maximalwerte einzelner Stickstoffund Schwefelverbindungen [S10-14] sind in Abbildung 5-2 aufgeführt. Die Werte beziehen sich auf die Gasphase und auf das Wasser im Material. Falls kein Sickerwasser entsteht, findet kein Austrag über die Wasserphase statt.

5.2.3 Gasphase

Zum einen werden die kumulativen Werte für die Sauerstoffrespiration, die Kohlendioxidbildung und die Stickstoffproduktion auf der Oberfläche des Programms angegeben, diese [O14-16] sind in Abbildung 5-1 im unteren schwarzen Kasten aufgeführt.

Auch wird die Biogasbildung mit unterschiedlichen Bezügen sowie die Methan- und Wasserstoffproduktion [S32-38] angegeben, ablesbar im schwarzen größeren Kasten auf der linken Seite von Abbildung 5-2.

Die gesamte Kohlenstoffemission sowie die Kohlenstoffemission über die Kohlendioxid- und Methanbildung (C, CO₂-C, CH4-C) [S63, S64 und S67] sind im schwarzen Kasten von Abbildung 5-2 im rechten unteren Bereich dargestellt. Im schwarzen Kasten darüber ist der Verlauf der Schwefelwasserstoffkonzentration, zusätzlich zur graphischen Darstellung, als ppm [S52] angezeigt. Dabei kann mit den links nebenstehenden Pfeiltasten der Tag [S51] ausgewählt werden.

Ebenso werden in Abbildung 5-1 im schwarzen Kasten im linken oberen Bereich die Gasemissionssummenwerte für Kohlendioxid [R1], Wasserstoff [R2], Methan [R3], Ammoniak [R4], Seite 31 von 36



Schwefelwasserstoff [R5] und Distickstoffoxid [R6] am Ende des Prozesses, wie in Abbildung 5-1 angezeigt ausgegeben. Im selben Kasten unter "Vgas out (m³)" [R7] ist der kumulative Gesamtgasemissionswert oder alternativ nur die produzierte Gasmenge aufgezeigt. Dies kann über den rechts liegenden Schalter [R8] ausgewählt werden, welcher zwischen "prod" und "out" unterscheidet. Der kumulative Gesamtgasemissionswert umfasst emittiertes Kohlendioxid und emittierten molekularen Stickstoff und Sauerstoff, molekularen Wasserstoff, Methan, Ammoniak, Schwefelwasserstoff und Distickstoffoxid. Die produzierte Gasmenge umfasst produziertes Kohlendioxid und produzierten molekularen Stickstoff, molekularen Wasserstoff, Methan, Ammoniak, Schwefelwasserstoff und Distickstoffoxid.

Da das Gasvolumen von Temperatur, Luftdruck und Wasserdampfdruck abhängt, sind die Gasvolumina auf Normbedingungen einstellbar [A8-9], wie in Abbildung 4-5 angezeigt. Die Werte werden dann auf 0 °C mit einem Luftdruck von 1013,25 mbar umgerechnet. Der Wasserdampfdruck bleibt dabei unberücksichtigt. Zur besseren Vergleichbarkeit kann die Temperatur ebenso auf 20 °C [A8] umgestellt werden. Dazu den Schalter unterhalb von "norm-I?" [A9] im kleinen Schwarzen Kasten von Abbildung 5-2 umstellen. Ist dieser nach rechts umgelegt ("yes"), liegt die Temperatur bei 0 °C. Zur linken Seite umgelegt ("no"), liegt die Temperatur bei 20 °C.

5.2.4 Gasbildungspotential und Atmungsaktivität

Im roten Kasten von Abbildung 5-2 wird unter aeroben Bedingungen der Sauerstoffverbrauch (RAx) angezeigt und unter anaeroben Bedingungen das Gasbildungspotential (GPx). Findet ein anaerober Prozess mit Belüftung für einen definierten Zeitabschnitt statt, werden sowohl GPx als auch RAx [S26 und S30] ausgegeben. Zeitpunkt und Messdauer können in beiden Fällen gewählt werden [S24-25, S28-29].

Bei einem Abbau von annähernd 100 Gew.-% der abbaubaren Trockensubstanz erhält man jeweils das Potential, andernfalls die simulierte prozessspezifische Gasbildung bzw. den Sauerstoffverbrauch.





Abbildung 5-2: Ausgabe von Einzelwerten (Zone S)

5.2.5 Ausgabe der Materialwerte

Für den Vergleich mit analytisch gewonnenen Werten sind jeweils der Prozessanfangswert des organischen prozentualen Massenanteils der Trockensubstanz [K14], des organischen Kohlenstoffs (TOC) [K15] und des C/N-Verhältnisses [K16] angegeben. Die beiden erstgenannten befinden sich in Abbildung 5-3.

Um die Ergebnisse der Methan- [K18] und Kohlendioxidproduktion [K20] vergleichen zu können, sind ebenso die Potentiale [K19] (maximale Summenwerte) über das Input-Material bestimmt und in Kubikmeter im Normzustand dargestellt. Diese befinden sich im oberen Bereich des rechten Kastens von Abbildung 5-3. Darunter ist der Phosphor- (P) [K21-22] und Kaliumgehalt (K) [K23-24] aufgezeigt, welcher sich über eine Korrelation aus dem Stickstoffgehalt ergibt. Für den Fall, dass das



Eingangsmaterial keinen Stickstoff enthält ergeben sich somit auch für die Menge an P und K keine Werte. Gleiches gilt für das C/N-Verhältnis.



Abbildung 5-3: Ausgabe materialabhängiger Berechnungen (Zone K)

5.2.6 Abbaurate und Methanbildung

Im Simulationsprogramm ausgegeben wird die Abbaurate (auch Abbaugrad) des gesamten Materials [O4] und der aerob oder anaerob erreichte prozessspezifische Anteil der möglichen Methanbildung [O3]. Beides ist in Prozent angegeben und befindet sich mittig unterhalb der graphischen Darstellung der Ergebnisse in Abbildung 5-1. Die grüne Leuchtdiode rechts [O5] neben der Abbaurate leuchtet auf, falls alles Abbaubare abgebaut wurde. Die Abbaurate kann wahlweise auf das abbaubare oder ganze Material bezogen werden (Schalter darunter). Zudem besteht die Möglichkeit, im Simulationsprogramm die Abbauraten anzupassen.

5.2.7 Stickstoff- und Schwefelwerte

Die Stickstoff- und Schwefelgesamtgehalte sind für Anfang und Ende des Prozesses [S39-42] ausgegeben, dargestellt in Abbildung 5-2 im kleinen grünen Kasten in der linken unteren Ecke. Die Werte beziehen sich immer auf die Trockensubstanz zu diesem Zeitpunkt.



Ebenso sind die Endwerte der N/S/C-Bilanzen des abbaubaren Substrats in der Feststoff-, Wasserund Gasphase [S15-23] in kumulativen Massenprozent angezeigt, dargestellt im oberen Bereich von Abbildung 5-2 im grünen Kasten.

Weiterhin sind rechts unterhalb der N/S/C-Bilanzen in den grünen Kästen die Stickstoff- und Schwefelemissionen [S46-50] über die Gas- und Wasserphase angegeben. Die Gasphase enthält als Gesamtemission Ammoniak-N (NH₃-N), Distickstoff-N (N₂-N), Distickstoffoxid-N (N₂O-N), Stickstoff (N) und Schwefel (S) sowie im schwarzen Kasten darunter Schwefelwasserstoff (H₂S) [51-53] als Tagesemission und eine maximale Schwefelemission (max. S). Die Wasserphase ist im rechts daneben liegenden grünen Kasten dargestellt und enthält eine maximale Ammonium-N-(max. NH₄⁺-N), maximale Nitrat-N- (max. NO₃⁻-N), maximale Nitrit-N- (max. NO₂⁻-S) [S57] und maximale Sulfat-S-Emission (max. SO₄²⁻-S) [S58].

5.2.8 Essigsäure, Raumbelastung und Verweilzeit

Ebenso werden die maximale Essigsäurekonzentration [S43] während des simulierten Abbaus und die Raumbelastung [S44]. Diese sind im gelben Kasten von Abbildung 5-2 aufgeführt. Die Verweilzeit bezieht sich auf die gewählte bzw. angegebene Abbauzeit [S45].

5.2.9 Weitere Endwerte

Ergänzend angegeben sind zudem das freie Porenvolumen (Vol.-%) [S59], die Volumenreduktion (Vol.-%) [S60], die Materialhöhe (m) [S61] und der berechnete Durchlässigkeitskoeffizient (m/d) [S62] für das Ende des Prozesses. Die genannten Werte sind im Bereich von Abbildung 5-2 im lila Kasten rechts unten aufgeführt.

Ob eine Hygienisierung [G9] stattgefunden hat, lässt sich im Bereich der Prozesswahl ablesen (siehe Abbildung 4-14 im braunen Kasten rechts). Hier befindet sich im mittleren Bereich unterhalb von "sanitation?" eine braun-graue Ausgabefläche, welche "yes" oder "no" darstellen kann. Um die Kriterien für eine Hygienisierung zu erfüllen, muss der Prozess mindestens 7 Tage bei 65 °C oder 14 Tage bei 55 °C abgelaufen sein.



6 Datenbearbeitung

6.1 Logdatei erstellen

Diese Funktion wird verwendet, wenn das erstellte Simulationsmodell gespeichert werden soll und um das gespeicherte Modell in Zukunft leichter öffnen zu können.

1. Um eine Logdatei zu erstellen:

Operate > log at completion > run SimuCF > Speichern Sie die Datei am gewünschten Ort

2. Um eine Logdatei zu öffnen:

Operate > Data logging > Log... > select a desired file > select "o.k." > zurück zur SimuCF-Schnittstelle > Operate > Data logging > Retrieve... > Drücken Sie ein "Häkchen" oben links auf der SimuCF-Oberfläche > würden alle Werte aus der zuvor erstellten Protokolldatei in der Schnittstelle erscheinen

6.2 Datenextraktion

Um die Daten zu extrahieren:

Right-click on Zone Q > Export > eine Option aus der Liste auswählen

Es gibt Optionen wie:

- Export data to Clipboard
- Export data to Excel
- Export data to DIAdem
- Export Simplified Image

Die exportierten Daten hängen von der Auswahl des Diagramms [P1] ab, wie in Abbildung 5-1 dargestellt.