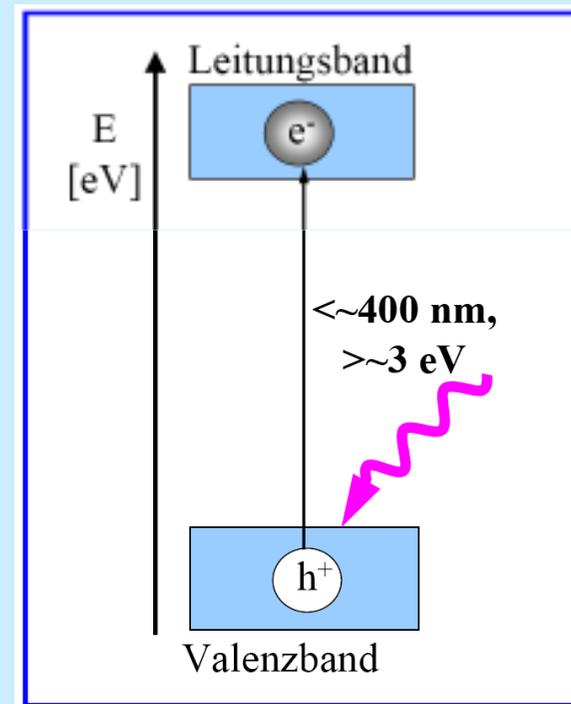


Numerische Modellierung des photokatalytischen Stickoxidabbaus durch TiO₂- dotierte Gebäudefassaden

Thomas Flassak

- Titandioxid (TiO_2) schon seit 1967 als effektiver Photokatalysator bekannt: „*Honda-Fujishima Effekt*“
- Mechanismus:
 - UV-Licht $< 400 \text{ nm}$:
 - Freies Elektron e^- im Leitungsband
 - Elektronenlücke h^+ im Valenzband
 - Reduktion (e^-) bzw. Oxidation (h^+) adsorbierter Stoffe z.B. NO_x



Bildquelle: Kleffmann, Uni Wuppertal

- Labor- und Feldversuche von der
 - LUBW (LUBW 2006, 2007, 2008) und der
 - Bergischen Universität Wuppertal (Laufs et al., 2010)
- Ziel: Untersuchung der photokatalytischen Wirksamkeit von TiO_2 -dotierten Gebäudefarben der Fa. Sto AG, Stühlingen.

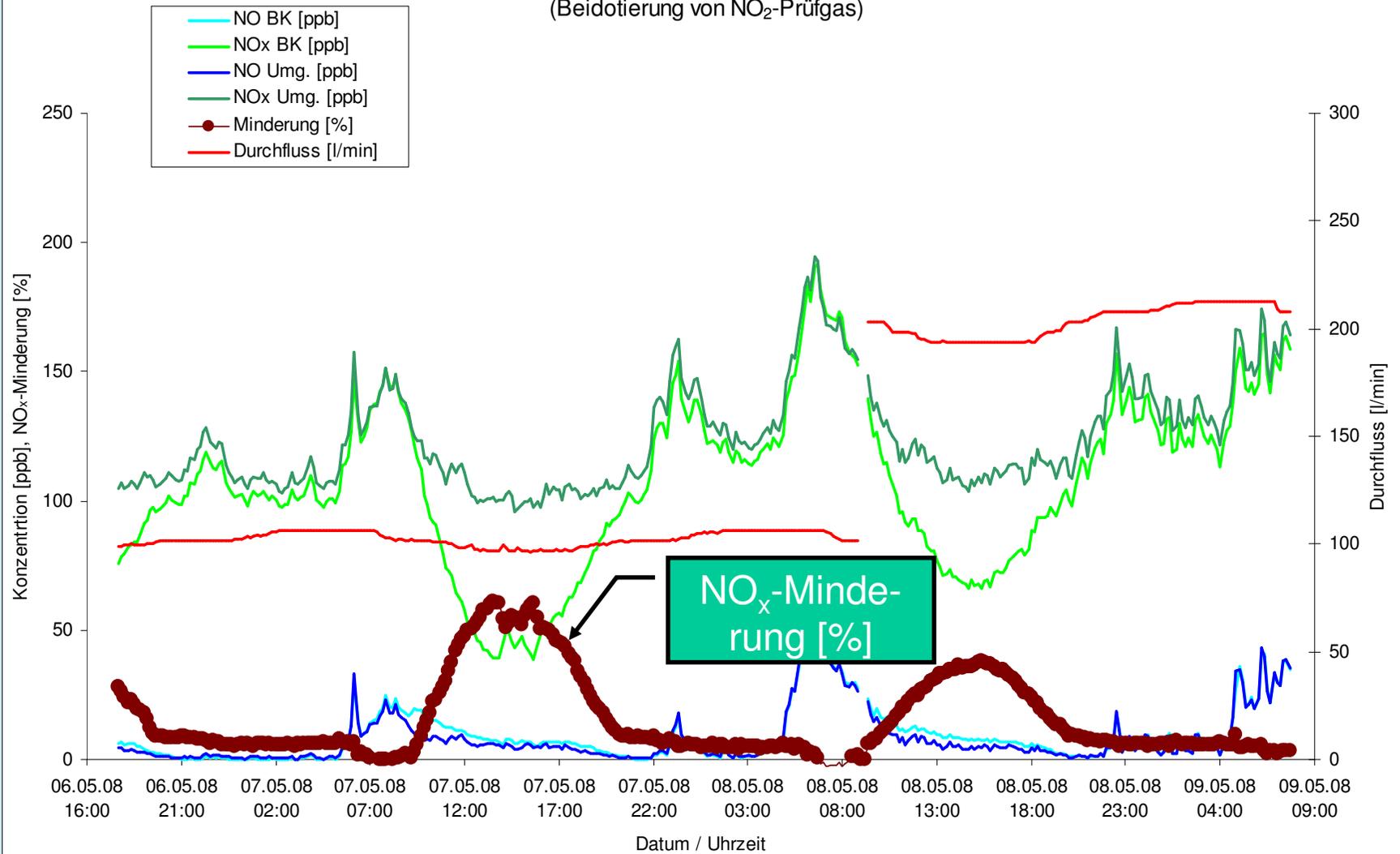
- LUBW-Feldversuche, Beprobungskammer

- Abmessungen B x H x T =
85x115x19 cm³ = 185 l
- 4 beschichtete senkrecht
stehende Prüfplatten,
Größe: 62 cm x 25 cm
- Zuluft: Umgebungsluft +
zudosiertes Prüfgas
- Durchflussrate bis 200 l/min



**"Feldversuch"- Sto AG weiße Dispersionsfarbe am BK 1; 10-Minutenwerte
NO/NO_x-Konzentrationen vom 06.05.08 - 09.05.08**

(Beidotierung von NO₂-Prüfgas)



- Übertragung der Ergebnisse aus Feldversuchen auf ein reales Stadtquartier.
- durch Modellsimulation mit dem
- prognostischen, dreidimensionalen, mikroskaligen Strömungs- und Ausbreitungsmodell MISKAM.

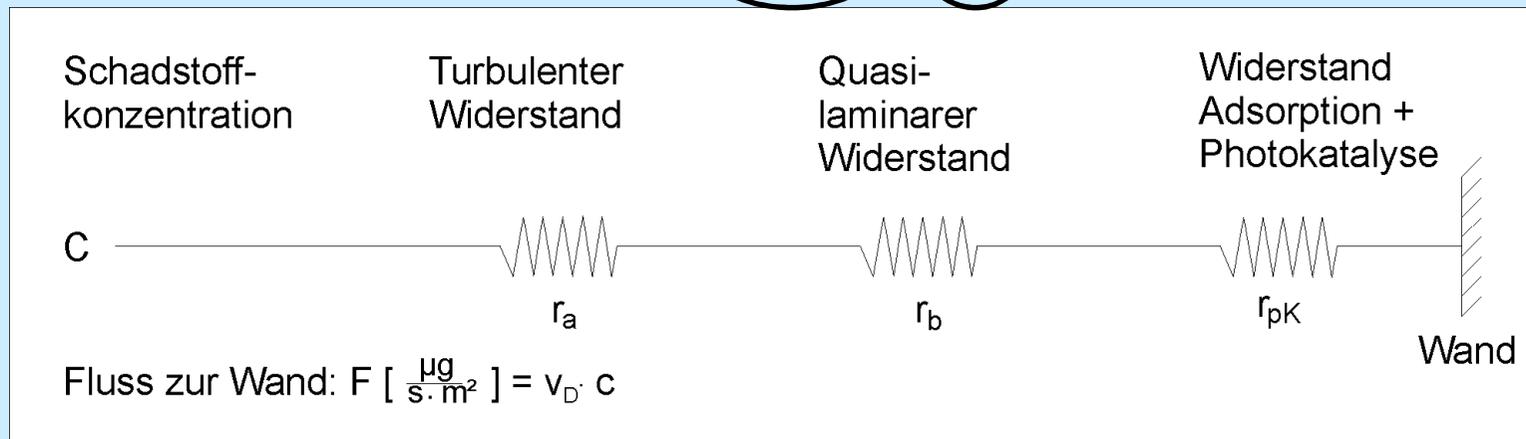
- Schritt 1: Modellierung der wandnahen Flüsse

- Widerstandsmodell nach VDI 3782 Blatt 5:
(Gesamt-)depositionsgeschwindigkeit =
Kehrwert der relevanten Widerstände.

Formeln siehe
VDI 3782, Bl.5

$$v_d = \frac{1}{r_a + r_b + r_{pk}}$$

aus
Messungen
berechnen



- Beispiel: Depositionsgeschwindigkeiten v_d für $v_{pk} = 0.6$ und 0.3 cm/s in Abhängigkeit von
 - Windgeschwindigkeit und
 - Wandrauigkeit

Windgeschwindigkeit	Rauigkeit $v_{pk} = 0,6 \text{ cm/s}$	Einzel- und Gesamtwiderstände				Depositionsgeschwindigkeit	Verhältnis v_d / v_{pk}
		r_a	r_b	r_{pk}	r_{ges}		
U	z_0	[s/m]				v_d	
[m/s]	[cm]					[cm/s]	
1	1	241	57	167	465	0.22	37%
3	1	80	19	167	266	0.38	63%
1	10	96	36	167	298	0.34	57%
3	10	32	12	167	210	0.48	80%
1	1	241	57	333	631	0.16	53%
3	1	80	19	333	433	0.23	77%
1	10	96	36	333	465	0.22	73%
3	10	32	12	333	377	0.27	90%

$v_{pk} = 0,3 \text{ cm/s}$

- Schritt 2: Berechnung von v_{pk} aus Messungen
 - Der photokatalytische Abbau von Schadstoffen entspricht in der Regel einer Kinetik 1. Ordnung

$$C = C_0 \cdot e^{-kt}$$

- Schritt 2: Berechnung von v_{pk} aus Messungen

– Mit:

$$v_{d,BK} = \frac{k}{S/V}$$

/ /

Geschwindigkeitskonstante

Photokat. aktive Oberfläche

Volumen Beprobungskammer

– Depositionsgeschwindigkeit $v_{d,BK}$ in der Beprobungskammer BK:

$$v_{d,BK} = \frac{\dot{V}_{str}}{S} \cdot \ln \left[\frac{C_{ein}}{C_{aus}} \right]$$

Volumenstrom

Eintrittskonzentration

Austrittskonzentration

- Schritt 2: Problem: $v_{d,BK} \neq v_{pk}$
da $v_{d,BK}$ auch Widerstände r_a und r_b enthält:

$$r_{pk} = \frac{1}{v_{pk}} = \frac{1}{v_{d,BK}} - (r_a + r_b)_{BK}$$

Wird bestimmt durch eine Simulation der Strömung in der Beprobungskammer mit einem CFD-Modell

Strömungswiderstände in der Beprobungskammer

Abbaugeschwindigkeit in der Beprobungskammer, Berechnung: siehe letzte Folie

Gesuchte Größe: Abbaugeschwindigkeit durch Adsorption und Photokatalyse

- Schritt 2: Ergebnis der $v_{pk,NOx}$ – Berechnung:
 - Mittelwert: 0,3 cm/s
 - Maximalwert: 0,6 cm/s

- Anwendungsfall „reales Stadtquartier“



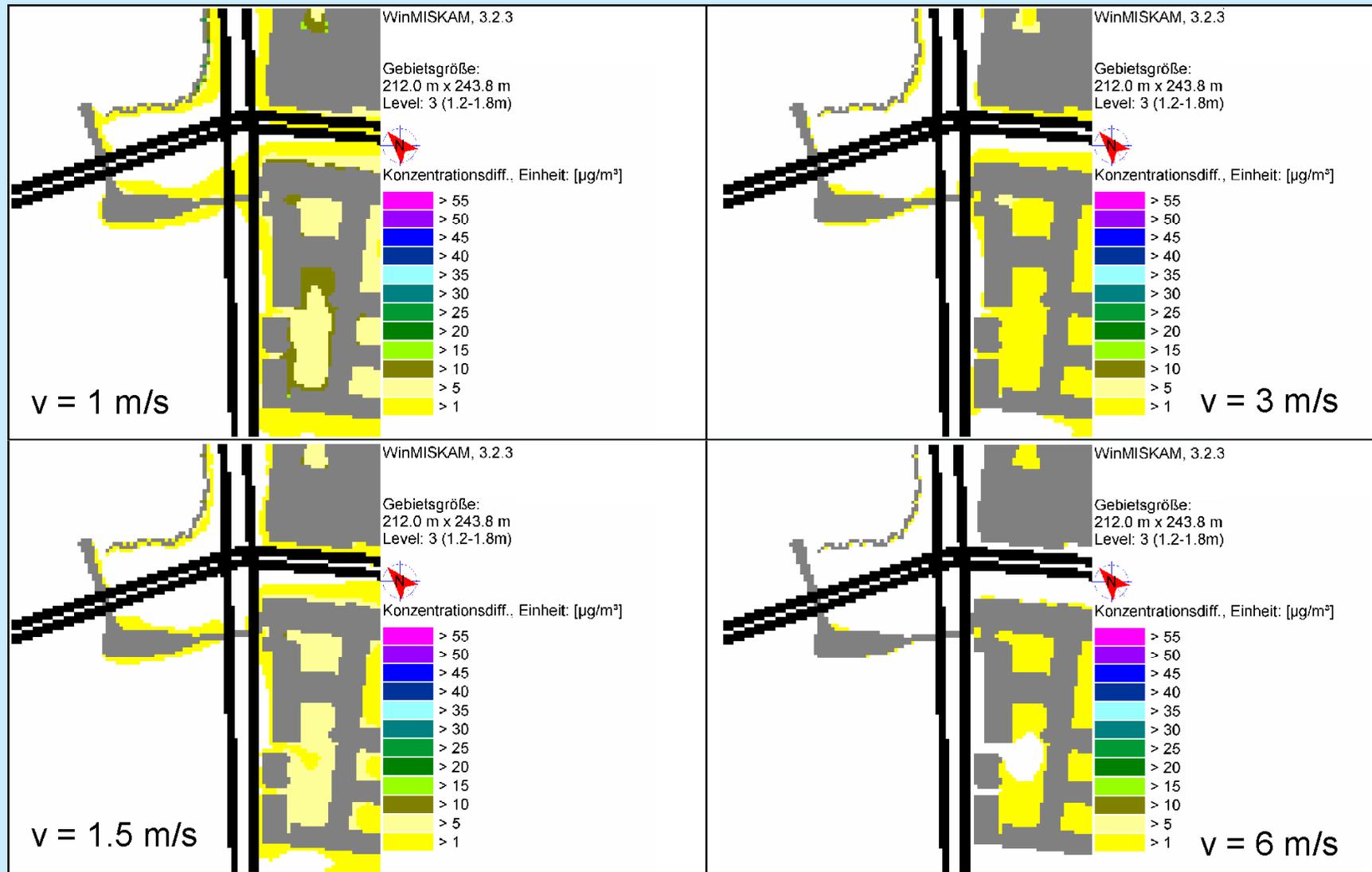
Rot: reale
Bebauung

Grün: zusätzliche
fiktiver Gebäude-
bestand

Gebietsgröße:
900 x 900 m²

- Anwendungsfall „reales Stadtquartier“
 - 2 Berechnungsfälle:
 - Reale Bebauung
 - Szenario „bebauter Park“
 - Annahme: Alle vertikalen Wände der Gebäude sind photokatalytisch aktiv
 - Photokatalytisch aktive Fläche: 492 300 m²
 - Grundfläche Modellgebiet: 810 000 m²
 - Wandflächen- zu Grundflächenverhältnis bei realer Bebauung im Modellgebiet: 0,61.
 - Wandflächen- zu Grundflächenverhältnis im Szenario „bebauter Park“: 0,76.
 - Photokatalyse ab 0,9 W/m² (entspricht 50% des Jahres)
 - NO_x-Vorbelastung: 63,2 µg/m³ (ca. 34 µg/m³ NO₂)
 - Änderungen im MISKAM-Quelltext erforderlich.

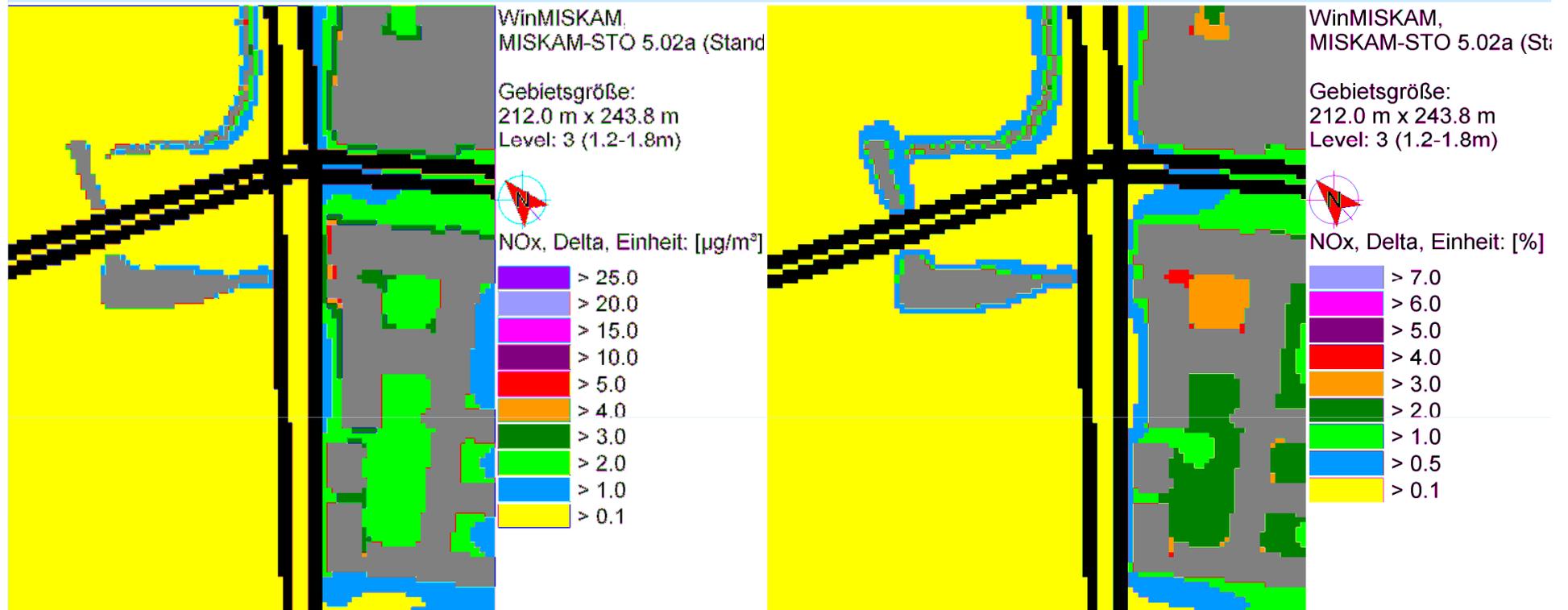
NO_x-Konzentrationsdifferenzen in Abhängigkeit von der Anströmgeschwindigkeit bei Anströmung aus 320°. (Ausschnitt aus dem realen Modellgebiet bei realer Bebauung)



NO_x-Abbaumassenstrom in Abhängigkeit von der Anströmgeschwindigkeit bei Anströmung aus 320°.

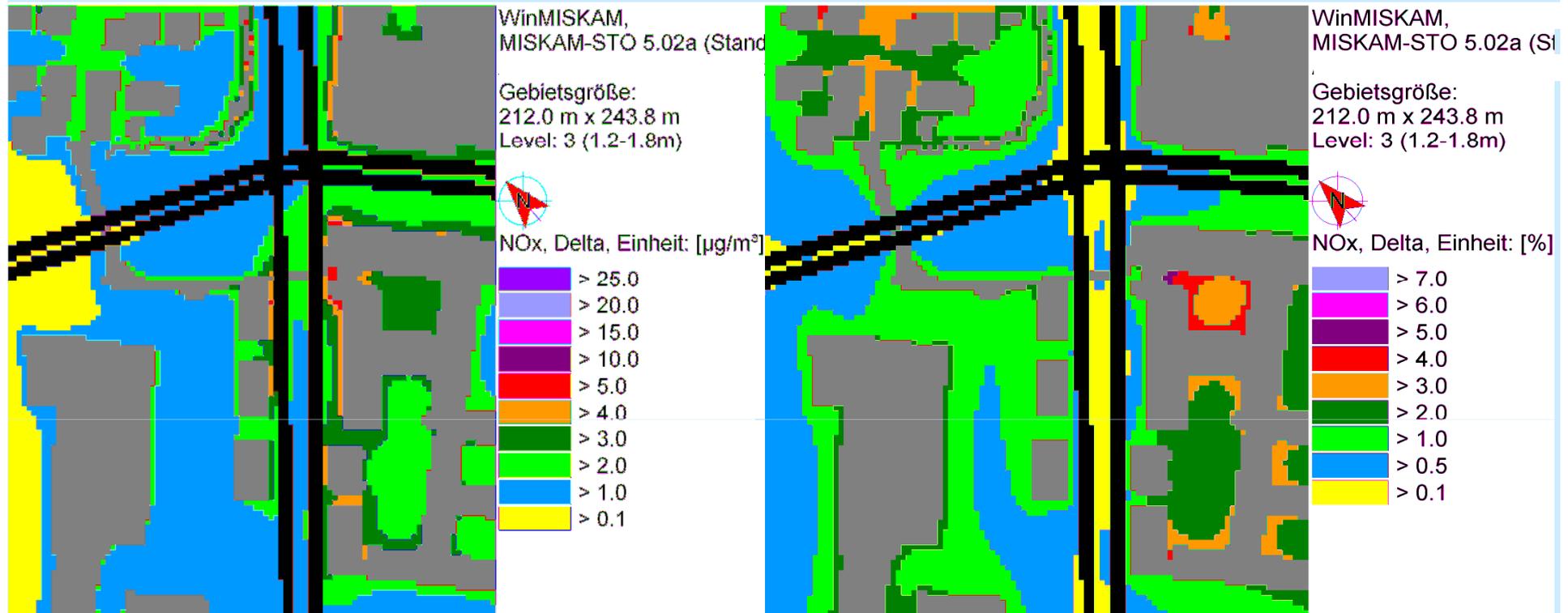
Anströmgeschwindigkeit [m/s]	NO _x -Abbaumassenstrom [mg/s]	NO _x -Abbaumassenstrom bezogen auf die mittleren Emissionen im Modellgebiet [%]
1	77	7
1.5	85	8
3	109	10
6	141	13

Absolute (links) und prozentuale (rechts) Reduktionen des NO_x -Jahresmittelwertes.
 (Ausschnitt aus dem realen Modellgebiet bei **realer Bebauung**)



Die maximalen absoluten bzw. relativen örtlichen Reduktionen des NO_x -
 Jahresmittelwertes betragen $6.4 \mu\text{g}/\text{m}^3$ bzw. 6.9%.

Absolute (links) und prozentuale (rechts) Reduktionen des NO_x -Jahresmittelwertes.
 (Ausschnitt aus dem realen Modellgebiet für Szenario „bebauter Park“)

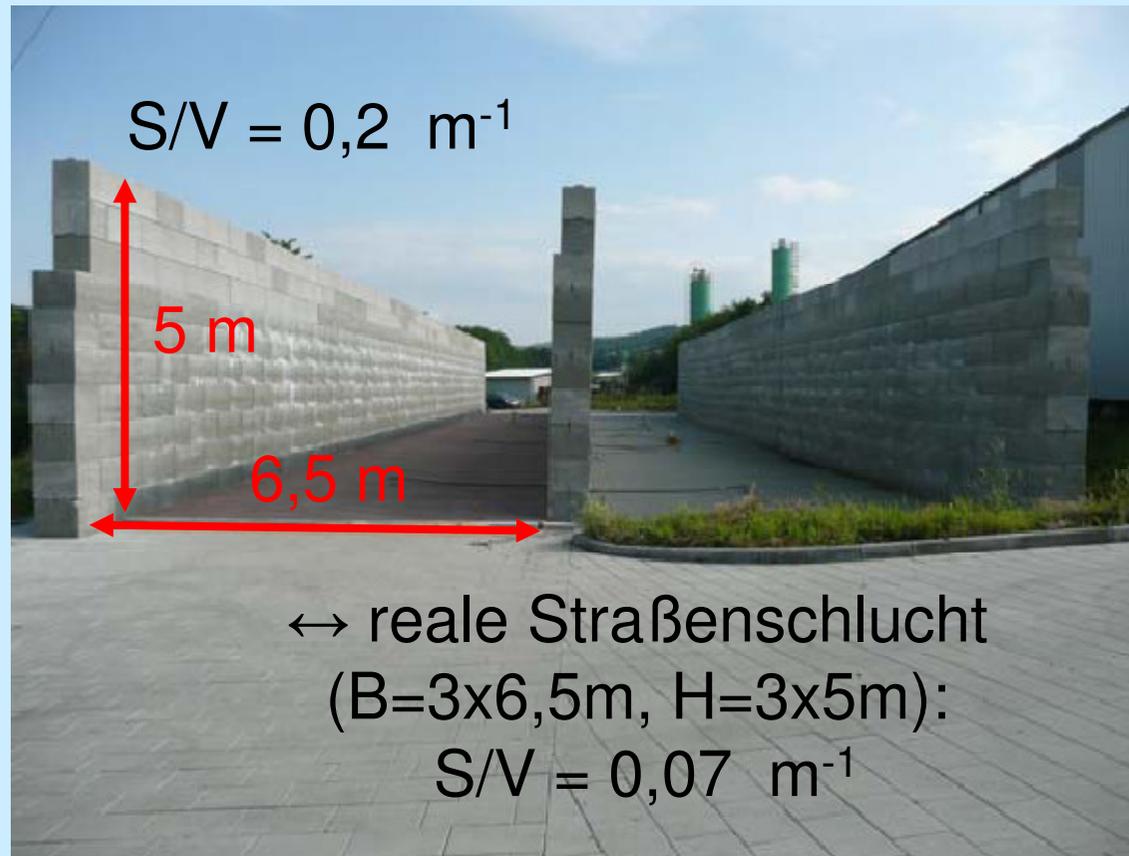


Die maximalen absoluten örtlichen Reduktionen des NO_x -Jahresmittelwertes erhöhen sich von $6.4 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (für den Fall „reale Bebauung“) auf $6.6 \mu\text{g}/\text{m}^3$ für das Szenario „bebauter Park“. Die größte prozentuale Wirkung der photokatalytisch aktiven Farben erhöht sich von 6.9% auf 7.9%.

- Vergleich mit anderen Experimenten, z.B.
 - PICADA-Experiment: NO_x-Reduktionen = 40-80%
 - DBU/ Fraunhofer-Projekt (Fa. Nüdling): Canyon-Testfläche: mittlere NO₂-Reduktionen = 18%, NO-Reduktionen = 28%
- Bewertungsgröße
 - Hier: NO_x-Jahresmittelwert
 - Experimente oben: Mittelwert während Tagesstunden mit photokatalytischer Aktivität.
 - Unterschied: Faktor 2 bis 4.

- Vergleich verschiedener Experimente
 - Relevant ist Verhältnis Bezugsvolumen V zu photokatalytisch aktiver Flächengröße S
 - Minderungswirkung $\propto S/V$

- DBU/Fraunhofer-Projekt



- Beobachtete NO_2 Reduktion: 18%
- Erwartete reale NO_2 Reduktion: 6%

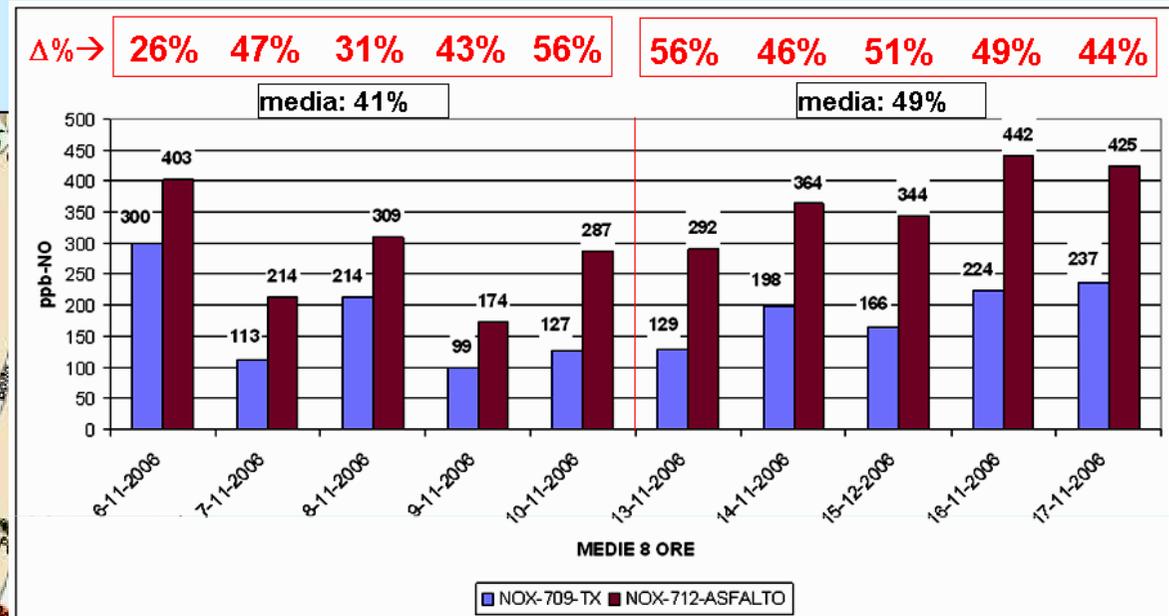
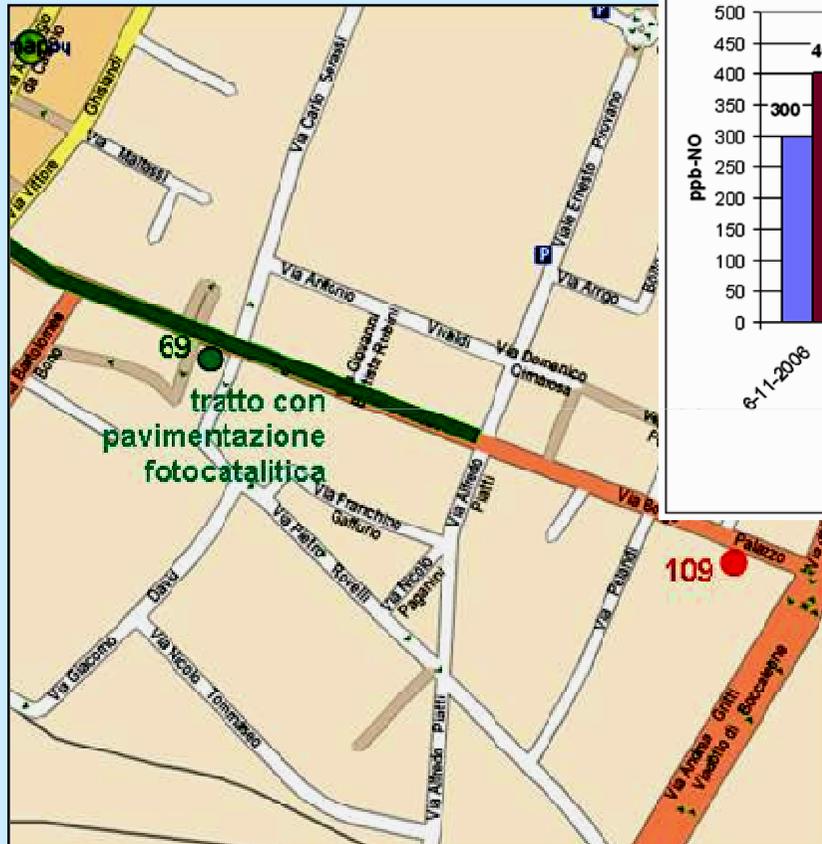
- PICADA-Experiment

$$S/V = 0,8 \text{ m}^{-1}$$



- Beobachtete NO_2 Reduktion: 40-80%
- Erwartete reale NO_2 Reduktion: 7,5% (5-10%)

- Derzeit in Arbeit: Via Borgo Palazzo, Bergamo

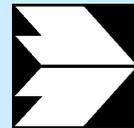


- Schlussfolgerungen
 - Vergleich verschiedener Experimente
 - Relevant ist Verhältnis Bezugsvolumen V zu photokatalytisch aktiver Flächengröße S
 - Minderungswirkung $\propto S/V$

Vielen Dank für Ihre
Aufmerksamkeit



Kolloquium "Luftqualität an Straßen"
am 30./31. März 2011 in Bergisch Gladbach



Ingenieurbüro Lohmeyer
GmbH & Co. KG, Karlsruhe

