

**Referencelaboratoriet for måling af emissioner til luften**

Titel	Beregningsformler til emission
Undertitel	-
Forfatter(e)	Arne Oxbøl
Arbejdet udført, år	2019
Udgivelsesdato	September 2019
Revideret, dato	-

Indholdsfortegnelse

1	Indledning	3
1.1	Formål.....	3
2	Metode.....	3
3	Formler til beregning af røggasmængder	3
4	Formler til koncentrationsberegninger.....	7
5	Formler til tilstandsberegninger	8
6	Formler til omregning mellem enheder	10
7	Andre formler.....	12
8	Håndtering af sum af stoffer	15
9	Diverse enheder	15
9.1	Enheder for emissionsgrænseværdier og B-værdier.....	16
10	Referencer	17
	Bilag A Notat om realgas- og idealgasvolumen.....	18



Oversigt over formler

Formel 1: Røggasmængde ved forbrænding af 1 kg naturgas /3/	3
Formel 2: Røggasmængde ved forbrænding af 1 m ³ (n) naturgas /3/	4
Formel 3: Røggasmængde ved forbrænding af 1 kg gasolie /3/:	4
Formel 4: Røggasmængde ved forbrænding af 1 kg fuelolie /3/:	4
Formel 5: Røggasmængde ved forbrænding af 1 kg stenkul med 13% vand /3/:	5
Formel 6: Røggasmængde ved forbrænding af 1 kg træ med 25% vand /3/:	5
Formel 7: Røggasmængde ved forbrænding af 1 kg halm med 10% vand /3/:	5
Formel 8: Beregning af støkiometrisk røggasmængde for faste, flydende og gasformige brændsler /3/	6
Formel 9: Beregning af støkiometrisk røggasmængde for gasformige brændsler (m ³ /m ³ brændsel) /3/	6
Formel 10: Beregning af støkiometrisk røggasmængde for gasformige brændsler (m ³ /kg brændsel) /3/	6
Formel 11: Beregning af mængden af SO ₂ der potentielt kan udledes til luften per kg brændsel	7
Formel 12: Beregning af SO ₂ -koncentrationen ved ref. O ₂ på 3, 6, 11 og 15%	7
Formel 13: Omregning fra tør til våd volumenstrøm	8
Formel 14: Omregning fra tør til våd koncentration	8
Formel 15: Omregning af volumen fra driftstilstand til normaltilstand /1/	8
Formel 16: Omregning af volumen fra normaltilstand til driftstilstand	8
Formel 17: Omregning af volumen fra normaltilstand til reference O ₂ % /1/	9
Formel 18: Omregning af koncentration fra driftstilstand til normaltilstand /1/	9
Formel 19: Omregning af koncentration fra normaltilstand til driftstilstand	9
Formel 20: Omregning af koncentration ved normaltilstand til reference O ₂ % /1/	9
Formel 21: Omregning af koncentration ved normaltilstanden til reference CO ₂ % /1/	10
Formel 22: Beregning af O ₂ % ud fra målt CO ₂ % /1/	10
Formel 23: Beregning af CO ₂ % ud fra målt O ₂ % /1/	10
Formel 24: Omregning fra ppm til mg/m ³ (n,t):	11
Formel 25: Omregning fra mg/m ³ (n,t) til ppm:	11
Formel 26: Resulterende B-værdi /1/:	12
Formel 27: B-værdi ved intermitterende drift jævnt fordelt over døgnet og hele året /1/:	13
Formel 28: B-værdi ved intermitterende drift IKKE jævnt fordelt over døgnet og hele året /1/:	13
Formel 29: Spredningsfaktoren ved vurdering af skorstenshøjder /1/:	13
Formel 30: Normeret kildestyrke til brug for B ₁ -metoden /1/	13
Formel 31: Kontrolgrænseværdien til brug ved stikprøvekontrol, grænseværdireglen /1/	13
Formel 32: Stikprøveantal til brug ved stikprøvekontrol, stikprøve-reglen /1/	14
Formel 33: Beregning af benz[a]pyren-ækvivalenter	14

Oversigt over tabeller

Tabel 1 Nedre og øvre brændværdi for udvalgte brændsler /3/	6
Tabel 2 CO _{2,max} -værdier for forskellige brændsler	10
Tabel 3 Oversigt over molvægte, -voluminer og omregningsfaktorer	12
Tabel 4 Ækvivalensfaktorer for PAH'er /4/	14
Tabel 5 Energi og effekt-enheder /1/	15
Tabel 6 Beregning af omregningsfaktor for mol-ppm	19

1 Indledning

I forbindelse med revision af Luftvejledningen, har Referencelaboratoriets følgegruppe besluttet, at alle konstanter, beregninger definitioner etc. som er relevante for emissionsområdet, skal samles i ét dokument. Et sådant dokument kan f.eks. være et metodeblad eller et bilag til MEL-22. Dokumentet skal beskrive hvordan de mange beregninger, enheder og definitioner der er for området håndteres.

En sådan samling af beregninger kan evt. senere suppleres med en emissionsregnemaskine på nettet, som virksomheder og myndigheder let kan anvende. Regnemaskinen skal anvendes, når beregningsresultater ikke foreligger i de ønskede enheder, eller man f.eks. ønsker at regne på energiudnyttelse af forskellige typer brændsler.

1.1 Formål

Nærværende dokument skal samle de oftest benyttede formler og omregninger fra emissionsstandarder og eksisterende vejledninger – primært Luftvejledningen. Formlerne skal opstilles på en overskuelig måde med forklaring på indgående størrelser. Hvor det er relevant, skal det anføres, hvor formlen kommer fra.

2 Metode

De mest anvendte standarder og alle Miljøstyrelsens metodeblade gennemgås, og formler heri opdeles i formler til energiberegninger, formler til tilstandsberegninger, formler til omregning mellem forskellige enheder og et afsnit med andre formler.

Energiberegninger omfatter beregning af teoretisk opnåelig energi fra forskellige brændselstyper og beregning af røggasmængde for forskellige brændselstyper. Formler til tilstandsberegninger er f.eks. omregning fra koncentration i luft ved normaltilstanden til koncentration ved en referenceiltkoncentration. Formler til omregning mellem forskellige enheder er primært omregning mellem ppm og mg/m³ (n,t) for de oftest målte parametre. Afsnittet med andre formler indeholder f.eks. beregning af spredningsfaktoren til vurdering af nødvendig skorstenshøjde og beregning af resulterende B-værdier.

3 Formler til beregning af røggasmængder

Røggasmængden ved forbrænding af forskellige typer brændsler kan estimeres ved hjælp af Formel 1 til Formel 7. Røggasmængder kan beregnes mere præcist på baggrund af en brændselsanalyse i Formel 8 til Formel 10.

Formel 1: Røggasmængde ved forbrænding af 1 kg naturgas /3/

$$V_{røggas,normal} = \frac{240}{21 - \%O_2}$$

eller

$$V_{røggas,våd} = 2,57 + \frac{241}{21 - \%O_2}$$



Rapport nr.: 87

Hvor $V_{røggas,normal}$ er røggasmængden m^3 (n,t)
 $V_{røggas,våd}$ er røggasmængden m^3 (våd)
 $\%O_2$ er indholdet af ilt i røggassen, udtrykt i volumenprocent, tør

Formel 2: Røggasmængde ved forbrænding af 1 m^3 (n) naturgas /3/

$$V_{røggas,normal} = \frac{198}{21 - \%O_2}$$

eller

$$V_{røggas,våd} = 2,12 + \frac{199}{21 - \%O_2}$$

Hvor $V_{røggas,normal}$ er røggasmængden m^3 (n,t)
 $V_{røggas,våd}$ er røggasmængden m^3 (våd)
 $\%O_2$ er indholdet af ilt i røggassen, udtrykt i volumenprocent, tør

Formel 2 er baseret på den gennemsnitlige densitet for naturgas i 2016 som målt af Energinets kvalitetsmålestation i Egtved (= 0,8265 kg/ m^3 (n)), jf. Energinet.dk og Formel 1.

Formel 3: Røggasmængde ved forbrænding af 1 kg gasolie /3/:

$$V_{røggas,normal} = \frac{217}{21 - \%O_2}$$

eller

$$V_{røggas,våd} = 1,41 + \frac{221}{21 - \%O_2}$$

Hvor $V_{røggas,normal}$ er røggasmængden m^3 (n,t)
 $V_{røggas,våd}$ er røggasmængden m^3 (våd)
 $\%O_2$ er indholdet af ilt i røggassen, udtrykt i volumenprocent, tør

Formel 4: Røggasmængde ved forbrænding af 1 kg fuelolie /3/:

$$V_{røggas,normal} = \frac{213}{21 - \%O_2}$$

eller

$$V_{røggas,våd} = 1,29 + \frac{211}{21 - \%O_2}$$

Hvor $V_{røggas,normal}$ er røggasmængden m^3 (n,t)
 $V_{røggas,våd}$ er røggasmængden m^3 (våd)
 $\%O_2$ er indholdet af ilt i røggassen, udtrykt i volumenprocent, tør



Rapport nr.: 87

Formel 5: Røggasmængde ved forbrænding af 1 kg stenkul med 13% vand /3/:

$$V_{røggas,normal} = \frac{131}{21 - \%O_2}$$

eller

$$V_{røggas,våd} = 0,54 + \frac{132}{21 - \%O_2}$$

Hvor $V_{røggas,normal}$ er røggasmængden m^3 (n,t)
 $V_{røggas,våd}$ er røggasmængden m^3 (våd)
 $\%O_2$ er indholdet af ilt i røggassen, udtrykt i volumenprocent, tør

Formel 6: Røggasmængde ved forbrænding af 1 kg træ med 25% vand /3/:

$$V_{røggas,normal} = \frac{72}{21 - \%O_2}$$

eller

$$V_{røggas,våd} = 0,82 + \frac{73}{21 - \%O_2}$$

Hvor $V_{røggas,normal}$ er røggasmængden m^3 (n,t)
 $V_{røggas,våd}$ er røggasmængden m^3 (våd)
 $\%O_2$ er indholdet af ilt i røggassen, udtrykt i volumenprocent, tør

Formel 7: Røggasmængde ved forbrænding af 1 kg halm med 10% vand /3/:

$$V_{røggas,normal} = \frac{83}{21 - \%O_2}$$

eller

$$V_{røggas,våd} = 0,72 + \frac{85}{21 - \%O_2}$$

Hvor $V_{røggas,normal}$ er røggasmængden m^3 (n,t)
 $V_{røggas,våd}$ er røggasmængden m^3 (våd)
 $\%O_2$ er indholdet af ilt i røggassen, udtrykt i volumenprocent, tør

Beregning af den støkiometriske røggasmængde for faste, flydende og gasformige brændsler med kendt sammensætning på grundstofniveau kan udføres efter Formel 8. Ved den støkiometriske røggasmængde forstås, at al forbrændingsluftens ilt netop medgår i forbrændingen, og der er 0% ilt i røggassen.



Rapport nr.: 87

Formel 8: Beregning af støkiometrisk røggasmængde for faste, flydende og gasformige brændsler /3/

$$V_{\text{røggas, støkiometrisk, normal}} = 8,8930 \cdot \gamma_C + 20,9724 \cdot \gamma_H + 3,3190 \cdot \gamma_S - 2,6424 \cdot \gamma_O + 0,7997 \cdot \gamma_N$$

Hvor $V_{\text{røggas, støkiometrisk, normal}}$ er støkiometrisk, normal røggasmængde m^3 (n,t) pr. kg brændsel
 γ_C , γ_H , γ_S , γ_O og γ_N er brændselsanalysen for henholdsvis C, H, S, O og N i kg/kg brændsel

Brændselsanalyse af gasformige brændsler omfatter normalt indhold af kulbrinter og andre stoffer, og ikke indholdet af grundstofferne. I det tilfælde kan røggasmængden beregnes efter Formel 9 (røggasmængde pr. m^3 gas) eller Formel 10 (røggasmængde pr. kg gas). Hvis et gasformigt brændsel indeholder væsentlige mængder af andre komponenter end dem, der indgår i formlerne, kan det være nødvendigt at beregne koefficienter for disse komponenter og medtage dem i formlen.

Formel 9: Beregning af støkiometrisk røggasmængde for gasformige brændsler (m^3/m^3 brændsel) /3/

$$V_{\text{røggas, støkiometrisk, normal}} = 1,885 \cdot \gamma_{\text{H}_2} + 2,8811 \cdot \gamma_{\text{CO}} + 8,5584 \cdot \gamma_{\text{CH}_4} + 15,342 \cdot \gamma_{\text{C}_2\text{H}_6} + 22,3251 \cdot \gamma_{\text{C}_3\text{H}_8} + 29,7579 \cdot \gamma_{\text{C}_4\text{H}_{10}} + 37,6901 \cdot \gamma_{\text{C}_5\text{H}_{12}} + 46,6076 \cdot \gamma_{\text{C}_6\text{H}_{14}} + \gamma_{\text{CO}_2} + \gamma_{\text{N}_2}$$

Hvor $V_{\text{røggas, støkiometrisk, normal}}$ er støkiometrisk, normal røggasmængde m^3 (n,t) pr. m^3 brændsel
 γ_x er gassens indhold af komponenten x i m^3/m^3 brændsel fundet ved brændselsanalyse
x er H_2 , CO , CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 , C_4H_{10} , C_5H_{12} , C_6H_{14} , CO_2 og N_2

Formel 10: Beregning af støkiometrisk røggasmængde for gasformige brændsler (m^3/kg brændsel) /3/

$$V_{\text{røggas, støkiometrisk, normal}} = 20,9724 \cdot \gamma_{\text{H}_2} + 2,3040 \cdot \gamma_{\text{CO}} + 11,9286 \cdot \gamma_{\text{CH}_4} + 11,3223 \cdot \gamma_{\text{C}_2\text{H}_6} + 11,1017 \cdot \gamma_{\text{C}_3\text{H}_8} + 10,9876 \cdot \gamma_{\text{C}_4\text{H}_{10}} + 10,9179 \cdot \gamma_{\text{C}_5\text{H}_{12}} + 10,8709 \cdot \gamma_{\text{C}_6\text{H}_{14}} + 0,5058 \cdot \gamma_{\text{CO}_2} + 0,7997 \cdot \gamma_{\text{N}_2}$$

Hvor $V_{\text{røggas, støkiometrisk, normal}}$ er støkiometrisk, normal røggasmængde m^3 (n,t) pr. kg brændsel
 γ_x er gassens indhold af komponenten x i kg/kg brændsel fundet ved brændselsanalyse
x er H_2 , CO , CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 , C_4H_{10} , C_5H_{12} , C_6H_{14} , CO_2 og N_2

Tabel 1 Nedre og øvre brændværdi for udvalgte brændsler /3/

Brændsel	Nedre brændværdi	Øvre brændværdi
Naturgas	ca. 48,6 MJ/kg	ca. 56 MJ/kg
Gasolie	ca. 43 MJ/kg	ca. 45 MJ/kg
Fuelolie	ca. 41 MJ/kg	ca. 43 MJ/kg
Stenkul	ca. 25 MJ/kg	ca. 26 MJ/kg
Træ (vandindhold på 25 %)	ca. 13,7 MJ/kg	-
Halm	ca. 14,5 MJ/kg	-



4 Formler til koncentrationsberegninger

Koncentrationen af svovl i form af SO₂ i røggassen kan beregnes ud fra svovlindholdet i brændslet fundet ved brændselsanalysen. Dette gøres ved hjælp af Formel 11.

Formel 11: Beregning af mængden af SO₂ der potentielt kan udledes til luften per kg brændsel

$$C_{SO_2-fuel} = y_S * \frac{M_{SO_2}}{M_S} * 1.000.000 \left(\frac{mg}{kg} \right)$$

Hvor C_{SO_2-Fuel} er den teoretiske mængde SO₂ dannet per kg brændsel i mg/kg
 y_S er brændslets indhold af svovl i kg/kg brændsel fundet ved brændselsanalyse
 M_{SO_2} er molvægt for svovldioxid = 64
 M_S er molvægt for svovl = 32

Ved en brændselsanalyse af faste og flydende brændsler angives svovlindholdet i masse/masse, hvorfor Formel 11 kan anvendes direkte. For gasformige brændsler angives svovlindholdet normalt ikke i masse/masse, men i ppm, % eller mg/m³ (n,t), som skal omregnes til masse/masse for at kunne anvendes i Formel 11.

Den potentielle SO₂-emissionskoncentration beregnes herefter ved at dividere den beregnede SO₂-mængde med den beregnede, støkiometriske røggasmængde omregnet til relevant ilt referenceprocent, Formel 12.

Formel 12: Beregning af SO₂-koncentrationen ved ref. O₂ på 3, 6, 11 og 15%

$$C_{SO_2-r\ddot{o}g,ref.O_2} = y_S * \frac{M_{SO_2}}{M_S} * 1.000.000 \left(\frac{mg}{kg} \right) * \frac{1}{V_{r\ddot{o}ggas,st\ddot{o}kiometrisk,normal} * F_{refO_2}}$$

Hvor $C_{SO_2-r\ddot{o}g, ref.O_2}$ er teoretisk koncentration af SO₂ i røggassen ved en given ref. O₂ mg/m³,ref
 y_S er brændslets indhold af svovl i kg/kg brændsel fundet ved brændselsanalyse
 M_{SO_2} er molvægt for svovldioxid = 64
 M_S er molvægt for svovl = 32
 $V_{r\ddot{o}ggas,st\ddot{o}kiometrisk,normal}$ er den støkiometriske, normale røggasmængde
 F_{refO_2} er en korrektionsfaktor, der afhænger af referenceiltprocenten:
Ref O₂ = 3%: $F_{refO_2} = 1,17$
Ref O₂ = 6%: $F_{refO_2} = 1,4$
Ref O₂ = 11%: $F_{refO_2} = 2,1$
Ref O₂ = 15%: $F_{refO_2} = 3,5$

F_{refO_2} er beregnet efter princippet i Formel 20 og i praksis som $21/(21 - ref. O_2)$.

Formel 11 og Formel 12 forudsætter, at al brændslets svovlindhold brænder til SO₂ og udledes med røggassen, dvs. der beregnes en teoretisk maksimal emission. Hvis der er rensningsforanstaltninger eller, hvis der sker indbinding af svovl i aske eller slagge, vil beregningsresultatet være større end den aktuelle røggaskoncentration.



5 Formler til tilstandsberegninger

Emissionsmålinger foretages i sagens natur ved aktuelle omstændigheder (temperatur, tryk, vand, iltprocent, kuldioxidprocent, el-effekt på turbine eller andet. Emissionsgrænseværdier er imidlertid næsten aldrig ved aktuelle omstændigheder, men ved f.eks. 0°C, 1013 hPa, tør (normaltilstanden) eller ved x% ilt, idet x er den reference iltprocent der er gældende for den aktuelle type anlæg. Måleresultater skal derfor næsten altid omregnes.

Formel 13: Omregning fra tør til våd volumenstrøm

$$V_{våd} = V_{tør} * \frac{100}{100 - \%H_2O}$$

Hvor $V_{våd}$ er volumen af våd gas (m³, våd)
 $V_{tør}$ er volumen af tør gas (m³, tør)
 $\%H_2O$ er volumenprocent vanddamp

Formel 14: Omregning fra tør til våd koncentration

$$C_{våd} = C_{tør} * \frac{100 - \%H_2O}{100}$$

Hvor $C_{våd}$ er koncentration i våd gas (m³, våd)
 $C_{tør}$ er koncentration i tør gas (m³, tør)
 $\%H_2O$ er volumenprocent vanddamp

Formel 15: Omregning af volumen fra driftstilstand til normaltilstand /1/

$$V_{n,t} = V_{drift} * \frac{273,15}{T_{drift}} * \frac{P_{drift}}{1013,25} * \frac{100 - \%H_2O}{100}$$

Formel 16: Omregning af volumen fra normaltilstand til driftstilstand

$$V_{drift} = V_{n,t} * \frac{T_{drift}}{273,15} * \frac{1013,25}{P_{drift}} * \frac{100}{100 - \%H_2O}$$

Hvor $V_{n,t}$ er tørt volumen ved normaltilstanden 273,15°C og 1013,25 hPa
 V_{drift} er målt volumen ved drifttilstanden
 T_{drift} er driftstemperaturen
 P_{drift} er driftstrykket
 $\%H_2O$ er volumenprocent vanddamp



Rapport nr.: 87

Formel 17: Omregning af volumen fra normaltstand til reference O₂ % /1/

$$V_{ref} = \frac{21 - \%O_{2,m\ddot{a}lt}}{21 - \%O_{2,ref}} * V_{n,t}$$

Hvor V_{ref} er volumen ved referenceprocent for O₂ (m³ (n,t,ref))
 $\%O_{2,ref}$ er referenceprocenten for O₂
 $\%O_{2,m\ddot{a}lt}$ er den m\ddot{a}lte O₂-procent i afkastluften i vol%, t\ddot{o}r
 $V_{n,t}$ er volumen ved normaltstand (m³ (n,t))
21 er er atmosf\dd{a}rens indhold af O₂ i vol%, t\ddot{o}r¹

Formel 18: Omregning af koncentration fra driftstilstand til normaltstand /1/

$$C_{n,t} = C_{drift} * \frac{T_{drift}}{273,15} * \frac{1013,25}{P_{drift}} * \frac{100}{100 - \%H_2O}$$

Formel 19: Omregning af koncentration fra normaltstand til driftstilstand

$$C_{drift} = C_{n,t} * \frac{273,15}{T_{drift}} * \frac{P_{drift}}{1013,25} * \frac{100 - \%H_2O}{100}$$

Hvor $C_{n,t}$ er koncentrationen ved t\ddot{o}r normaltstanden 273,15°C og 1013,25 hPa
 C_{drift} er m\ddot{a}lt koncentration ved driftstilstanden
 T_{drift} er driftstemperaturen
 P_{drift} er driftstrykket
 $\%H_2O$ er volumenprocent vanddamp

Formel 20: Omregning af koncentration ved normaltstand til reference O₂ % /1/

$$C_{ref} = \frac{21 - \%O_{2,ref}}{21 - \%O_{2,m\ddot{a}lt}} * C_{m\ddot{a}lt}$$

Hvor C_{ref} er koncentrationen ved referenceprocent for O₂ (mg/m³ (n,t,ref))
 $\%O_{2,ref}$ er referenceprocenten for O₂
 $\%O_{2,m\ddot{a}lt}$ er den m\ddot{a}lte O₂-procent i afkastluften i vol%, t\ddot{o}r
 $C_{m\ddot{a}lt}$ er den m\ddot{a}lte koncentration (mg/m³ (n,t))
21 er er atmosf\dd{a}rens indhold af O₂ i vol%, t\ddot{o}r¹

¹ Tallet 21 i formlen er atmosf\dd{a}rens indhold af O₂ i vol%, t\ddot{o}r og afrundet, som man g\dd{o}r det i Luftvejledningen og EU direktiver. Anvendes det uafrundede O₂-indhold i atmosf\dd{a}ren (20,95 vol%, t\ddot{o}r) bliver beregningen en smule mere n\dd{o}jagtig.

Formel 21: Omregning af koncentration ved normaltstanden til reference CO₂ % /1/

$$C_{ref} = \frac{\%CO_{2,ref}}{\%CO_{2,m\grave{a}lt}} * C_{m\grave{a}lt}$$

Hvor C_{ref} er koncentrationen ved referenceprocent for CO₂ (mg/m³ (n,t,ref))
 %CO_{2,ref} er referenceprocenten for CO₂
 %CO_{2,m\grave{a}lt} er den m\grave{a}lte CO₂-procent i afkastluften
 C_{m\grave{a}lt} er den m\grave{a}lte koncentration (mg/m³ (n,t))

Formel 22: Beregning af O₂ % ud fra m\grave{a}lt CO₂ % /1/

$$\%O_2 = 21 - \frac{21 * \%CO_{2,m\grave{a}lt}}{\%CO_{2,max}}$$

Hvor %O₂ er teoretisk forventet O₂-procent i r\oggasen
 %CO_{2,m\grave{a}lt} er m\grave{a}lt CO₂-procent i r\oggasen
 %CO_{2,max} er den teoretisk maksimale CO₂-procent i r\oggasen for det aktuelle br\endtsel

Formel 23: Beregning af CO₂ % ud fra m\grave{a}lt O₂ % /1/

$$\%CO_2 = \frac{(21 - \%O_{2,m\grave{a}lt}) * \%CO_{2,max}}{21}$$

Hvor %CO₂ er teoretisk forventet CO₂-procent i r\oggasen
 %O_{2,m\grave{a}lt} er m\grave{a}lt O₂-procent i r\oggasen
 %CO_{2,max} er den teoretisk maksimale CO₂-procent i r\oggasen for det aktuelle br\endtsel

Tabel 2 viser udvalgte v\ardier for CO_{2,max}, som kan anvendes ved overslagsberegninger.

Tabel 2 CO_{2,max}-v\ardier for forskellige br\endtsler

Br\endtsel	CO _{2,max}
Tr\ae og halm	20,2%
Husholdningsaffald	19,0%
Kul	18,8%
Fuelolie	15,9%
Gasolie	15,4%
Naturgas	12,0%

6 Formler til omregning mellem enheder

Mange monitorer til emissionsm\alinger giver resultatet i mol-ppm og enkelte i volumen-ppm, men gr\ænsev\ardier er n\æsten altid i v\ægt/m³ (n,t) – oftest mg/m³ (n,t). Det er derfor relevant at have en omregningsformel mellem de to enheder.

Molvolumen ved 0°C og 1013 hPa varierer for forskellige komponenter. Idealgasmolvolumen er 22,41383 m³/kmol /2/. I

**Rapport nr.: 87**

Tabel 3 ses en oversigt over molvægte og -voluminer for udvalgte komponenter. De fleste komponenters molvolumen ligger tæt på idealgasvoluminet, men f.eks. SO₂ og HCN afviger en del. Det kan derfor i princip diskuteres, om en given komponents realgasvolumen skal anvendes i beregningen. Fysiske love siger, at reale gasser har større intermolekylær tiltrækningskraft end ideale gasser (Van der Waalske kræfter), men kun hvis molekylerne er tæt på hinanden og reelt kan udøve tiltrækning. I en røggas er den overvejende bestanddel den ideale gas nitrogen, og røggaskomponenternes molekyler er langt fra hinanden. Konklusionen er derfor, at for alle praktisk forekommende koncentrationer skal omregningen ske ved hjælp af idealgasvoluminet, uanset om der er tale om mol-ppm eller volumen-ppm. Se endvidere notat i Bilag A.

Formel 24: Omregning fra ppm til mg/m³ (n,t):

$$C_{mg/m^3(n,t)} = \frac{C_{ppm} * M_{komponent}}{V_{luft(n,t)}} = C_{ppm} * F_{ppm \text{ til } \frac{mg}{m^3}}$$

Formel 25: Omregning fra mg/m³ (n,t) til ppm:

$$C_{ppm} = \frac{C_{mg/m^3(n,t)} * V_{luft(n,t)}}{M_{komponent}} = F_{\frac{mg}{m^3} \text{ til ppm}}$$

hvor $C_{mg/m^3(n,t)}$ er koncentrationen af komponenten per normalkubikmeter (tør).

C_{ppm} er koncentrationen i mol-ppm

$M_{komponent}$ er molvægten i kg/kmol for komponenten

$V_{luft(n,t)}$ er molvolumen for den aktuelle luftblanding ved 0°C, 1013 hPa

$F_{ppm \text{ til } mg/m^3}$ er omregningsfaktor fra ppm til mg/m³, se Tabel 3

$F_{mg/m^3 \text{ til ppm}}$ er omregningsfaktor fra mg/m³ til ppm, se Tabel 3



Tabel 3 Oversigt over molvægte, -voluminer og omregningsfaktorer

Komponent	Molvægt	Realmolvolumen	Omregningsfaktor med idealgasvolumen 22,41383 l/mol	
	kg/kmol		m ³ /kmol	ppm til mg/m ³
CO	28,010	22,400	1,250	0,800
NO	30,006	22,390	1,339	0,747
NO ₂	46,005	22,414	2,053	0,487
SO ₂	64,062	21,856	2,858	0,350
HCl	36,461	22,203	1,627	0,615
C	12,011	22,414	0,536	1,866
NH ₃	17,031	22,065	0,760	1,316
HF	20,006	22,414	0,893	1,120
N ₂ O	44,013	22,252	1,964	0,509
SO ₃	80,061	21,856	3,572	0,280
CH ₄	16,043	22,360	0,716	1,397
HCN	27,026	21,200	1,206	0,829
Formaldehyd	30,026	22,414	1,340	0,746
H ₂ S	34,080	22,192	1,520	0,658
O ₃	47,997	22,414	2,141	0,467
Propan	44,097	21,928	1,967	0,508
Argon	39,948	22,392	1,782	0,561

7 Andre formler

Dette afsnit indeholder alle formler, som ikke naturligt hører hjemme i afsnittene 3, 5 og 6.

Formel 26: Resulterende B-værdi /1/:

$$B_r = \frac{G}{\frac{G_1}{B_1} + \frac{G_2}{B_2} + \dots + \frac{G_n}{B_n}}$$

hvor B_r er den resulterende B-værdi i mg/m³,
 G er summen af $G_1, G_2 \dots G_n$
 G_1 er kildestyrken for stof 1 i mg/s,
 B_1 er den B-værdi, som angives/fastsættes for stof 1.

**Rapport nr.: 87****Formel 27: B-værdi ved intermitterende drift jævnt fordelt over døgnet og hele året /1/:**

$$B_i = \frac{B * 8760}{T_i}$$

hvor B er stoffets B-værdi
T_i er den samlede tid pr. år for den intermitterende drift målt i timer.

Formel 28: B-værdi ved intermitterende drift IKKE jævnt fordelt over døgnet og hele året /1/:

$$B_{ik} = \frac{B * 8760}{T_i * 2}$$

Hvor B_{ik} er den intermitterende korrigerede værdi, der er korrigeret ved at dividere med 2.

Formel 29: Spredningsfaktoren ved vurdering af skorstenshøjder /1/:

$$S = \frac{G}{B}$$

hvor G er kildestyrken for det aktuelle stof
B er B-værdien for det aktuelle stof

Formel 30: Normeret kildestyrke til brug for B₁-metoden /1/

$$G_{n,i} = \frac{G_i}{B_i}$$

Hvor G_{n,i} er den normerede kildestyrke for stof i
G_i er kildestyrken for stof i
B_i er B-værdien for stof i

Formel 31: Kontrolgrænseværdien til brug ved stikprøvekontrol, grænseværdireglen /1/

$$M_1 = K * 37^q$$

hvor M₁ er kontrolgrænseværdien
K er grænseværdien
q er den geometriske spredning på stikprøveresultaterne

Formel 32: Stikprøveantal til brug ved stikprøvekontrol, stikprøvereglen /1/

$$M_2 = 2 * K * 19^{-q}$$

Hvor K er grænseværdien

For nogle stofgrupper gælder en grænseværdi for summen af stofferne i stofgrupperne, hver vægtet med deres toxicitet. Et eksempel er for polyaromatiske hydrocarboner (PAH'er). Disse vægtes i forhold til toxiciteten af benz[a]pyren. Ækvivalensfaktorerne ses i Tabel 4.

Formel 33: Beregning af benz[a]pyren-ækvivalenter

$$\text{Benz[a]pyren ækvivalent} = \sum C_{PAH,n} * \text{ækvivalensfaktor}_{PAH,n}$$

Hvor $C_{PAH,n}$ er koncentrationen af den n'te PAH-forbindelse
 ækvivalensfaktor_{PAH,n} er den relative toxicitet af den n'te PAH-forbindelse

Tabel 4 Ækvivalensfaktorer for PAH'er /4/

PAH-forbindelse	Ækvivalensfaktor
Acenaphthen	0,001
Acenaphthylen	0,001
Anthracen	0,0005
Benz[a]anthracen	0,005
Benzo[b]fluoranthen	0,1
Benzo[k]fluoranthen	0,05
Benzo[ghi]perylene	0,02
Benzo[a]pyren	1
Chrysen	0,03
Dibenz[a,h]anthracen	1,1
Fluoranthen	0,05
Fluoren	0,0005
Indeno[1,2,3-cd]pyren	0,1
Phenanthren	0,0005
Pyren	0,001

Det skal bemærkes, at i en tilsvarende tabel i Luftvejledningen og i metodebladet for PAH-målinger /5/ er ækvivalensfaktoren for Benzo[ghi]perylene angivet til 0,01. Referencelaboratoriet har uden held undersøgt hvilken faktor, der er den rigtige. Anvendelse af faktoren 0,02 er konservativ, og da faktoren er så lav, har det ingen praktisk betydning, om den ene eller den anden faktor anvendes.

Der findes en tilsvarende formel for dioxiner for beregning af I-TEQ. Den gengives ikke her, da alle analyselaboratorier foruden enkeltstoffer rapporterer den ækvivalente værdi for I-TEQ. Se herom i metodebladet for dioxinmålinger /6/.

8 Håndtering af sum af stoffer

Luftvejledningen /1/ angiver i kap. 5.2.4.8 følgende:

"Hvis emissionsgrænseværdien gælder for summen af flere stoffer, skal man ikke medregne måleresultater, der er under detektionsgrænsen".

Uddrag fra MEL-22, Kvalitet i emissionsmålinger:

For metaller på affaldsforbrændingsanlæg skal der summeres f.eks. ni metaller for at overholde en emissionsgrænse. Værdier mindre end detektionsgrænsen skal ikke medregnes i summen. Hvis alle værdier i en sum er under detektionsgrænsen, anbefales det at angive summen som mindre end (<) den højeste detektionsgrænse som indgår i summen.

Ovenstående regel gælder for alle miljømålinger, hvor der er tale om grænseværdier som sum af stoffer.

Hvis "gasfase" og "partikelfase" analyseres hver for sig, må hver fase betegnes som et enkelt stof, og ovenstående regel gælder stadig.

9 Diverse enheder

I dette afsnit vises relevante størrelser og omregning mellem disse. I Tabel 5 er "størrelse 2" ækvivalent til "størrelse 1".

Tabel 5 Energi og effekt-enheder /1/

Størrelse 1	Størrelse 2
1 J/s	1 W
1 MJ/s	0,8598 Gcal/h
1 kJ	$2,778 \cdot 10^{-4}$ kWh
1 kWh	3600 kJ
1 kWh	859,8 kcal
1 kcal	$1,163 \cdot 10^{-3}$ kWh
1 kcal	4,1868 kJ

9.1 Enheder for emissionsgrænseværdier og B-værdier

Enheden for koncentration i emission defineres i Luftvejledningen afsnit 3.2.1.

Klippet fra Luftvejledningen:

Emissionsgrænsen (der gælder for **hvert enkelt afkast**) angives i mg/normal m³, dvs. mg af det forurenende stof pr. kubikmeter emitteret (udsendt) gas omregnet til referencetilstanden (0°C, 101,3 kPa, tør gas).

Ved emission fra forbrændingsprocesser benyttes referencetilstanden (0°C, 101,3 kPa, tør røggas ved 10% O₂), hvor intet andet er angivet.

I visse brancher kan der benyttes andre referencetilstande ved forbrændingsprocesser. Der tages da udgangspunkt i det realistiske O₂-indhold i røggassen for branchens procesudstyr og driftsforhold.

Eksempler på referencetilstande

1. Referencetilstanden for teglværker bør være det aktuelle O₂-indhold ved referencetilstanden (0 °C, 101,3 kPa, tør røggas) dog ikke højere end et O₂-indhold på 18%.
2. Referencetilstanden for anlæg, der forbrænder gasformige, organiske stoffer bør være det aktuelle O₂-indhold ved referencetilstanden (0 °C, 101,3 kPa, tør røggas).
3. Referencetilstanden for asfaltfabrikker bør være det aktuelle O₂-indhold ved referencetilstanden (0 °C, 101,3 kPa, tør røggas), dog ikke højere end et O₂-indhold på 17%.
4. Referencetilstanden for virksomheder, der fremstiller ekspanderede leraggregater, samt for molerværker bør være det aktuelle O₂-indhold ved referencetilstanden (0 °C, 101,3 kPa, tør røggas), dog ikke højere end et O₂-indhold på 16%.
5. I vejledningen for krematorier² er det ikke anført, om der skal anvendes tør eller fugtig røggas som referencetilstand. Som ved andre forbrændingsprocesser bør der refereres til tør røggas.

Referencetilstanden bør altid anføres i godkendelsen i forbindelse med emissionskravene.

Ovenstående definition kan godt bibeholdes, men mg/Nm³ bør undgås, da det i SI-enheder betyder mg/Newton m³.

Emissionslaboratorier anvender typisk følgende enheder i deres rapporter: mg/m³(n,t) eller mg/m³(ref) med følgende fodnoter:

(n,t) angiver tør gas ved normaltilstanden (0°C, 101,3 kPa)

(ref) angiver tør røggas ved normaltilstanden (0°C, 101,3 kPa) og x% O₂. (x er den reference iltprocent der er gældende for den aktuelle type anlæg).

Hvis ppm eller volumen% anvendes bør det understreges at det er tør: (t) eller fugtig/våd: (f)/(v). Eksempelvis ppm (t) og vol % (f).

² Vejledning fra Miljøstyrelsen nr. 2/1993. Begrænsning af forurening fra forbrændingsanlæg, del 3, Krav i forbindelse med fastsættelse af vilkår for godkendelse af krematorieanlæg efter miljøbeskyttelsesloven. Er erstattet af standardvilkår.



10 Referencer

- /1/ Miljøstyrelsens vejledning nr. 2, 2001: Luftvejledningen, Begrænsning af luftforurening fra virksomheder
- /2/ DIN 1871: Gasförmige Brennstoffe und sonstige Gase, 1980
- /3/ Revideret kapitel 6 om energianlæg, 6. supplement til Luftvejledningen, 19. december 2017
- /4/ Miljøstyrelsens vejledning nr. 20, 2016: Vejledning om B-værdier
- /5/ Miljøstyrelsens metodeblad MEL-10: Bestemmelse af koncentrationer af Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAH) i strømmende gas, 2003
- /6/ Miljøstyrelsens metodeblad MEL-15: Bestemmelse af koncentrationen af dioxin og PCB i strømmende gas, 2015

Bilag A Notat om realgas- og idealgasvolumen

Indledning

I forbindelse med miljømålinger af koncentrationer af røggaskomponenter og komponenter i ventilationsluft opnås resultater ofte i ppm. Om det er mol-ppm eller volumen-ppm styres af hvilken enhed kalibreringsgassen er leveret i. Kalibreringsgasser vil dog normalt altid være i mol-ppm.

Mol-ppm er betegnelsen for antal μmol gaskomponent/mol gasblanding

Volumen-ppm er betegnelsen for ml gaskomponent/ m^3 gasblanding

For at kunne omregne til mg/m^3 kræves kendskab til en omregningsfaktor:

$$\text{mg}/\text{Nm}^3 = \frac{\text{ppm}_{\text{komponent}} * \text{molvægt}_{\text{komponent}}}{\text{molvolumen}_{\text{komponent}}}$$

Her kan der rejses spørgsmål om, hvilket molvolumen, der skal anvendes – idealgasvoluminet eller realgasvoluminet for den aktuelle gas.

Teori

En ideal gas er kendetegnet ved, at de intermolekylære kræfter er nul. Denne forudsætning gælder for mange gasser, hvilket indikerer, at intermolekylære kræfter er negligible, undtagen når molekylerne er tæt pakkede eller temperaturen er meget lav³. Antagelsen om idealgas er "surprisingly good".

Boyles lov siger, at produktet af en gas's tryk og volumen er konstant. Den er tilnærmelsesvis sand for alle gasser, når trykket er lavt og temperaturen relativt høj. Gasser, der følger denne lov, er ideale gasser. Gasser, der ikke følger denne lov, kaldes reale gasser, og der ses relativt store afvigelser, hvis en real gas er under højt tryk eller har lav temperatur. Reale gasser tilnærmer sig ideale gasser, når de er under meget lavt tryk og relativt høj temperatur^{4(p. 35)}.

Den kinetiske molekylærteori, som gælder generelt for ideale gasser og for reale gasser undtagen under lavt tryk og høj temperatur siger^{4(p. 383)}:

1. Gasser består af molekyler i konstant, tilfældig bevægelse
2. Molekylerne udviser ingen tiltræknings- eller frastødningskræfter på hinanden
3. Molekylære sammenstød er elastiske, og der tabes derfor ingen energi i sammenstødene
4. Molekylerne er i sig selv negligibelt små i forhold til gassens volumen

Når reale gasser kommer under højt tryk, gælder forudsætning 2 og 4 ikke mere. Molekylernes eget volumen kommer tættere på gassens volumen, og van der Waals tiltrækningskræfter får betydning. Betydningen er særligt stor, når temperaturen er lav, fordi molekylernes bevægelser er langsommere, og de er tættere på hinanden i længere tid^{4(p. 390)}.

³ Alonso-Finn: Fundamental University Physics, Volume 1, Mechanics, 7. udgave, 1976, p. 268

⁴ Clyde R. Dillard, David E. Goldberg: Chemistry, Reactions, structure and properties, The Macmillan Company, 1971

Rapport nr.: 87

Det står ikke eksplicit i de to nævnte referencer og dermed heller ikke i ovenstående sammendrag, at reglerne gælder for rene gasser. Det er i princippet ligegyldigt, hvilke ideale gasser der tales om^{4(p. 36)}, og det må tilsvarende være ligegyldigt, om der er tale om blandinger af ideale gasser (antagelse).

Anderledes ser det ud, når der er tale om reale gasser blandet med ideale gasser. Her vil koncentrationen af de reale gasser være afgørende for, om tiltrækningskræfterne får betydning. Det er særligt interessant i den sammenhæng, som nærværende redegørelse skal sættes ind i – koncentrationer af røggaskomponenter eller komponenter i ventilationsafkast. I disse situationer møder vi oftest koncentrationer i størrelsesorden op til 1.000 ppm, hvilket også er niveauet for Miljøstyrelsens grænseværdier.

Regneeksempel – SO₂

SO₂ er valgt da der er relativ stor forskel mellem realgasvoluminet (21,856) og idelagasvoluminet (22,414) for SO₂. Hvis man bruger idealgasvoluminet bliver omregningsfaktoren $64/22,414 = 2,855$. Hvis man bruger realgasvoluminet bliver omregningsfaktoren $64/21,856 = 2,928$.

I følgende regneeksempel for SO₂, hvor det antages at et enkelt molekyle SO₂ fylder det som realgasvoluminet antyder, selvom teorien siger at det ikke er korrekt (idet molekylerne skal være tæt på hinanden for at kunne kollidere og dermed påvirke voluminet). Regneeksemplet er udført for at vise at uanset om teorien er korrekt eller ej, så vil den mest korrekte beregning ved normale emissionskoncentrationer opnås ved anvendelse af idealgasvoluminet.

I eksemplet i Tabel 6, er der regnet på 1.000 mol-ppm SO₂ under anvendelse af reale mol-voluminer for SO₂ og nitrogen.

Tabel 6 Beregning af omregningsfaktor for mol-ppm

Komponent	molvægt	indhold	molvolumen	I ét kmol gas			I røggas
	kg/kmol	mol ppm	m ³ /kmol	kmol	m ³	mg	mg/m ³
SO ₂	64	1.000	21,856	0,001	0,021856	64000	2856,83
Nitrogen	28	999.000	22,403	0,999	22,3806	-	-
I alt	-	1.000.000	-	1	22,40245	-	-

Omregningsfaktor bliver således 2,857 og dermed tæt på faktoren beregnet med idealgasvoluminet.

For en koncentration på 100.000 mol-ppm (10 mol%) SO₂ bliver omregningsfaktoren 2,864. Ved 1.000.000 mol-ppm (100 mol%) SO₂ bliver omregningsfaktoren 2,928 (hvilket svarer til omregningsfaktoren baseret på realgasvoluminet). Konsekvensen af dette er, at man for målte koncentrationer op til i hvert fald 100.000 mol-ppm (10%) bør omregningen til mg/m³ foretages med en omregningsfaktor baseret på idealgasvoluminet. Selvom dette ikke skulle være helt korrekt, indfører man en større fejl ved at anvende en omregningsfaktor baseret på realgasvoluminet.

I den tekniske specifikation for kontinuert måling af SO₂, dvs. med monitører kalibreret med kendte gasser med koncentrationer angivet i ppm⁵, giver afsnit 11 anvisning på omregning af resultaterne til massekoncentrationer. Det er samme formel som vist i nærværende notats indledning, og der anvendes værdien 22,4 liter/mol for molvoluminet for SO₂ – altså idealgasvoluminet.

⁵ CEN:TS 17021_2017_SO₂ med monitører



Rapport nr.: 87

Konklusion

For praktiske forhold i emissionsmåling skal omregningsfaktoren baseret på idealgasvoluminet altid anvendes uanset om der er tale om mol-ppm eller vol-ppm.

06-09-2019

Arne Oxbøl