

Computerunterstützte Prognose optischer Eigenschaften holzfreier Papiere aus Eigenschaften der Faserstoffkomponenten

G. Meinl

Zusammenfassung

Optische Eigenschaften sind neben mechanischen und strukturellen Eigenschaften wesentliche, den Gebrauchswert von Papieren bestimmende, physikalische Merkmale. Über das optische Erscheinungsbild von Papier als Informationsträger oder Verpackungsmaterial wird wesentlich das Kaufverhalten der Kunden gesteuert. Unternehmen der Zellstoff- und Papierindustrie investieren deshalb erhebliche Mittel in die Sicherung konstanter optischer Papiereigenschaften. Dies erfolgt entlang der gesamten technologischen Kette der Papierherstellung.

Es liegt in der Natur der meisten, die optischen Endeigenschaften steuernden Prozesse, dass auch andere wichtige Qualitätsmerkmale des resultierenden Papiers in ungewollter Weise beeinflusst werden. Darüber hinaus ist der Rahmen, innerhalb dessen optische Endeigenschaften technisch und betriebswirtschaftlich sinnvoll beeinflusst werden können, bereits durch den zum Einsatz kommenden Faserstoff vorgegeben. Insgesamt ergibt sich ein sehr komplexes Regelsystem, welches selbst durch den erfahrenen Papiermacher angesichts der Vielfalt an Rohstoffen und Prozessparametern kaum noch beherrscht werden kann.

Im Rahmen des Projektes erfolgte die Entwicklung von Algorithmen, die sowohl unter Berücksichtigung von Prozessparametern der Mahlung als auch unter Verwendung der morphologischen Fasermerkmale eine Prognose der optischen Papiereigenschaften erlauben. Alle Lösungsansätze konzentrieren sich auf die Vorhersage der spektralen Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten der resultierenden Papiere, da über das Modell von KUBELKA und MUNK daraus alle wesentlichen optischen Papiereigenschaften ableitbar sind.

Abstract

Optical properties are beside from mechanical and structural characteristics determining the usage properties of papers. Via the optical appearance of paper as storage medium or packaging material the purchase behaviour of the customers is substantially steered. Enterprises of the cellulose and paper industry invest therefore large means into the quality assurance of constant optical paper properties. This takes place along the entire technological chain of the paper manufacture.

It is in the nature of most processes used to control the final optical characteristics that other important quality criteria of the resulting paper are affected in an inadvertent way too. Beyond that the framework, in which optical final characteristics can be affected technically and economically meaningfully, is already given by the used type of fibrous material. Altogether the situation results in a very complex monitoring system, which even by the experienced papermaker can hardly be controlled in view of the variety of raw materials and process parameters.

In the context of the project mathematical algorithms have been developed, which permit a prediction of the optical paper properties with consideration both of process parameters of refining and using the morphologic fibre characteristics. All solutions concentrate on the forecast of the spectral light scattering and light absorption coefficients of the resulting papers, since via the model from KUBELKA and MUNK all substantial optical paper properties are derivable.

1 Wissenschaftliche und wirtschaftliche Ausgangssituation

Optische Eigenschaften sind ebenso wie mechanische und strukturelle Eigenschaften wesentliche, den Gebrauchswert bestimmende Merkmale von Papieren und Verpackungen. In den vergangenen Jahrzehnten hat sich bei der industriellen Papiererzeugung eine Vielzahl von Verfahren bewährt, um durch moderne Methoden der Zellstoffbleiche oder durch Verwendung geeigneter funktionaler Additive die optischen Papiereigenschaften in gewünschter Weise zu beeinflussen. Diese Maßnahmen stoßen dann an ihre Grenzen, wenn neben optischen Eigenschaften noch weitere Anforderungen an das resultierende Papier oder an das Laufverhalten der Papiermaschine einzuhalten sind. Letztendlich definieren betriebswirtschaftliche Aspekte Schranken, innerhalb derer die Anwendung der erwähnten Maßnahmen ökonomisch erfolgen muss.

Durch eine zweckmäßige Faserstoffauswahl und durch abgestimmte Maßnahmen der Stoffaufbereitung, z.B. der Mahlung, kann der verfügbare Spielraum wesentlich beeinflusst werden.

Auch hat sich das Zellstoffsortiment mit der Einführung elementarchlorfrei (ECF-) und totalchlorfrei (TCF-) gebleichter Zellstoffe wesentlich erweitert. Der globalisierte Markt macht mittlerweile jeden weltweit hergestellten Zellstoff verfügbar. Aus der beeindruckenden Vielfalt an Zellstoffen mit ihrer ebenso vielfältigen Eigenschaftspalette werden sich zukünftig nur noch mittels rechnergestützter Methoden die für den jeweiligen Anwendungszweck optimalen Kombinationen bestimmen lassen. Eine vollständige und zuverlässige Beschreibung des Eigenschaftspotenzials aller Faserstoffe ermöglicht ein rasches Reagieren auf neue Kundenwünsche und veränderte Marktbedingungen. Besonders kleine und mittlere Unternehmen mit einem stark spezialisierten Produktionsspektrum für hochwertige, grafische Papiere benötigen ein leistungsfähiges Instrument, mit dem eine zuverlässige Bewertung von Zellstoffen hinsichtlich erzielbarer optischer Eigenschaften durchführbar ist. Einsparungen bei den Aufwendungen für Labor- und Pilotversuche verschaffen ihnen Vorteile bei der raschen Markteinführung neuer Papierprodukte.

Unter der Bezeichnung Computer Assisted Paper Design (CAPD) hat die Papiertechnische Stiftung (PTS) mit der systematischen Entwicklung von rechnergestützten Methoden zum Entwurf von Papierprodukten begonnen. Ein System verschiedener Bausteine soll helfen, mittels Simulation zu entscheiden, welche Kombination von Faserstoffen und Prozessparametern welche physikalischen Endeigenschaften erwarten lässt.

Zur Zeit werden die algorithmischen Grundlagen für drei Module entwickelt (**Abb. 1**), die als Bausteine helfen sollen, typische Probleme im Umfeld der Mahlung und der faserstoffbasierten Prognose von Papiereigenschaften simulativ zu lösen:

- Modul „Mahlung“ (Änderung von Zellstoffeigenschaften im Ergebnis von Mahlprozessen)
- Modul „Festigkeit“ (Ableitung von Festigkeitseigenschaften von Papieren aus den Eigenschaften gemahlener Zellstoffe)
- Modul „Optik“ (Ableitung von optischen Eigenschaften von Papieren aus den Eigenschaften gemahlener Zellstoffe)

Bis jetzt ist weltweit noch kein einziges softwarebasiertes Werkzeug kommerziell verfügbar, welches in etwa die Funktionalität der drei genannten Module bietet. Es besteht ein grundsätzlicher Mangel an algorithmisierbarem Wissen zum Zusammenwirken von (Zell-)Stoff, Prozess und Produktqualität.

Erst seit wenigen Jahren sind Messgeräte verfügbar, die eine genaue Erfassung der Faser-morphologie ermöglichen. Sie liefern die Grundlage dafür, Zusammenhänge zwischen morphologischen Eigenschaften der Faserstoffe in der Suspension und den daraus resultierenden Papiereigenschaften zu erfassen und in Abhängigkeit vom Mahlungszustand zu interpretieren.

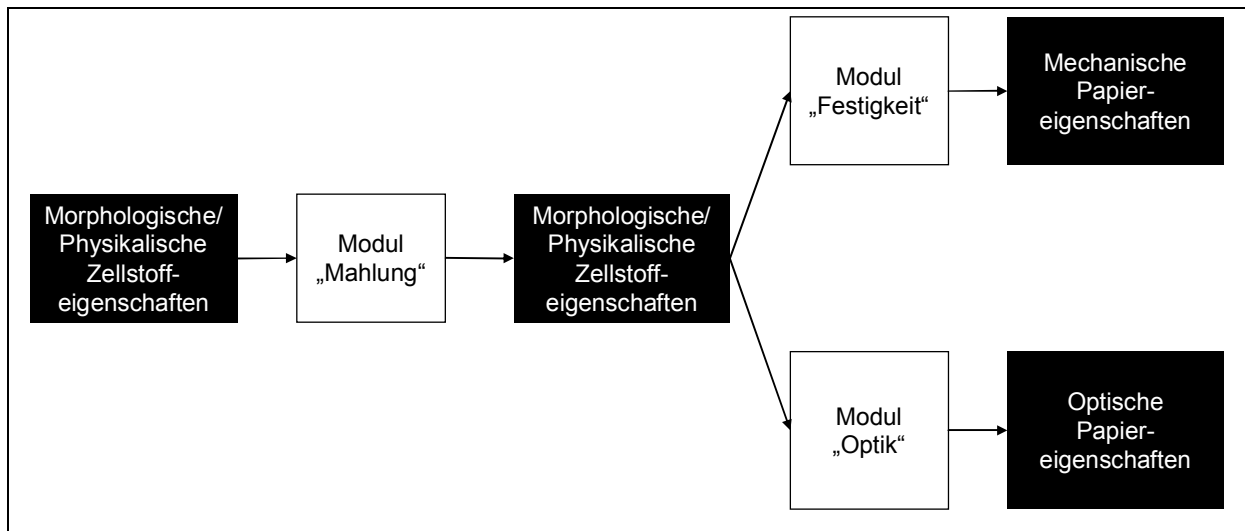


Abb. 1: Einordnung des Moduls „Optik“ in ein Gesamtsystem zur Simulation grundlegender Prozesse der Papiererzeugung

Die Theorie der optischen Eigenschaften von Papieren orientiert sich heute wesentlich an dem Modell von KUBELKA und MUNK. Aus Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten der eingesetzten Stoffe (Faserstoffe, Füllstoffe, Additive) können alle optischen Eigenschaften eines Papiers bei Kenntnis seiner Zusammensetzung abgeleitet werden. Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten von Faserstoffen sind jedoch durch die morphologischen, physikalischen und chemischen Fasereigenschaften determiniert. Änderungen dieser Fasereigenschaften im Zuge mechanischer Einwirkungen während der Stoffaufbereitung bedeuten gleichzeitig Änderungen der KUBELKA-MUNK-Parameter und somit des optischen Verhaltens des Papiers am Ende der Prozesskette.

2 Forschungsziel

Das Ziel der Forschungstätigkeit bestand in der Entwicklung der algorithmischen Grundlagen eines Moduls „Optik“ für zukünftige softwaregestützte Werkzeuge zum Entwurf neuer oder zur Optimierung vorhandener Papiersorten.

Gegenstand des Moduls „Optik“ ist es, anhand der

- Fasermorphologie und der Herkunft des Zellstoffes (Holzart, Aufbereitung, Bleiche) und
- charakteristischer Größen der Mahlung (Mahlgarnitur, spezifische Mahlenergie, spezifische Kantenbelastung, Schnittwinkel)

die Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten resultierender ungefüllter Papiere zu prognostizieren und mit Hilfe des Ansatzes von KUBELKA-MUNK die optischen Eigenschaften der Papiere abzuleiten.

3 Lösungsweg und Ergebnisse

3.1 Grundlegende Vorgehensweise

Die mathematische Modellbildung erfolgte auf der Grundlage einer Datenbasis, welche im Ergebnis des in **Abb. 2** dargestellten Versuchsschemas gewonnen wurde.

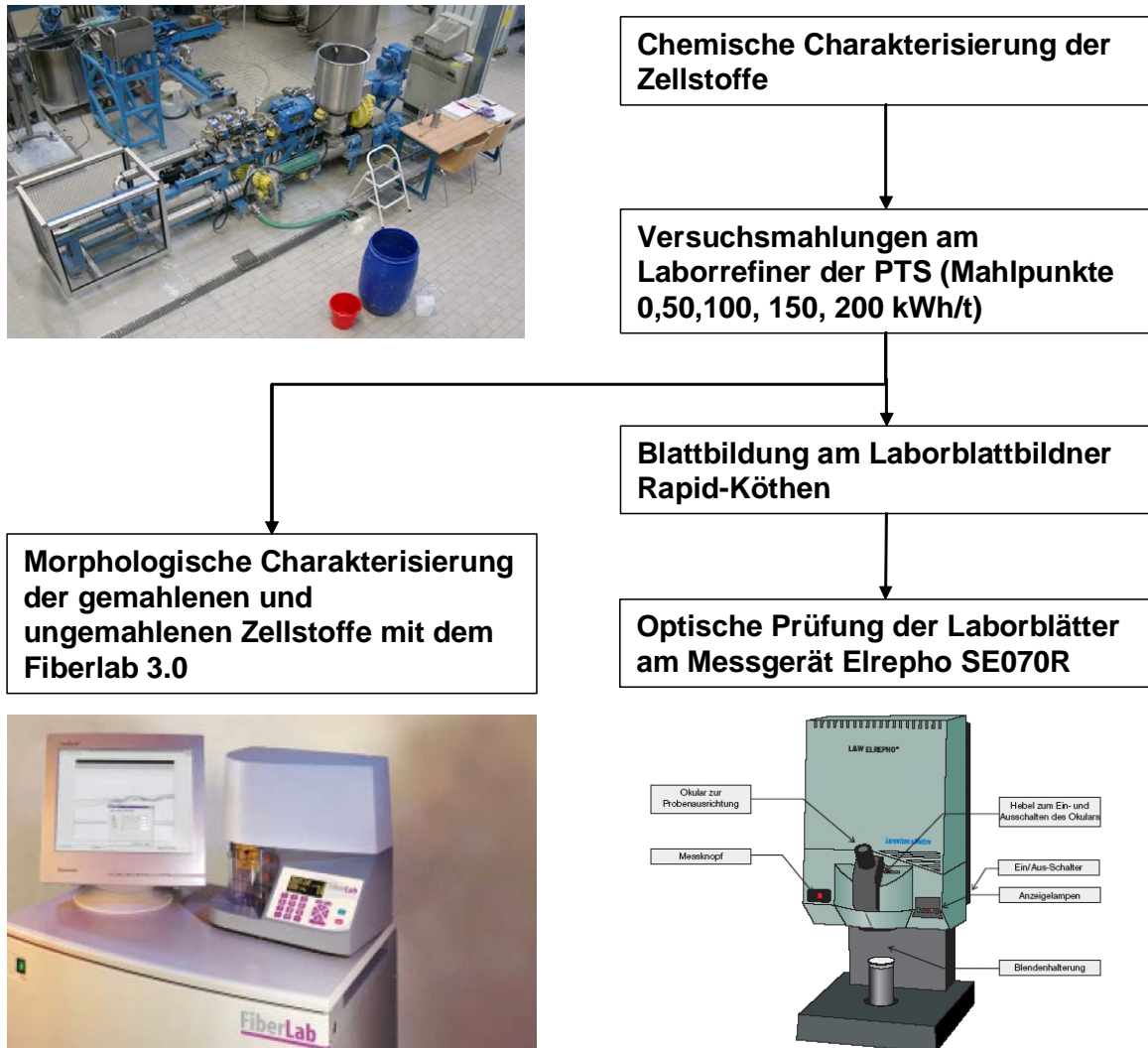


Abb. 2: Versuchsschema und eingesetzte Messtechnik für den Aufbau der Datenbasis

Die Versuchsplanung erfolgte in enger Abstimmung mit den gleichzeitig durchgeführten Forschungsarbeiten zum Projekt „Prognose des Mahlungsverhaltens“ (AiF 13478). Somit war es möglich, eine wesentlich breitere Vielfalt von Faserstoffen in die Untersuchungen einzubeziehen, deren Fasermorphologie sich sowohl durch die verwendete Holzart als auch durch die Methoden der Stoffaufbereitung, insbesondere der Mahlung, unterschied.

In der nachfolgenden Erläuterung der Versuchsmethodik wird auf eine nähere Darstellung der Durchführung der Mahlversuche sowie der morphologischen Prüfung mit dem FiberLab 3.0 verzichtet. Eine detailliertere Beschreibung findet der Leser in [1].

3.2 Methodik

3.2.1 Klassifikation der Zellstoffe

Basierend auf Erfahrungen der PTS erfolgte eine Klassifizierung aller eingesetzten Zellstoffe gemäß dem Schlüssel in **Tab. 1**.

Tab. 1: Klassifikation der Zellstoffe (Auszug)

Fasertyp	regionale Herkunft	Aufschlussverfahren	Bleichtyp
<ul style="list-style-type: none"> • Nh: Nadelholz • Lh: Laubholz (ohne Eukalyptus) • Eu: Eukalyptus • Ei: Einjahrespflanzen • Li: Linters 	<ul style="list-style-type: none"> • NA: Nordamerika • SA: Südamerika • NE: Nord- und Mitteleuropa • SE: Südeuropa/ Mittelmeergebiet • AA: Nordafrika /Vorderasien/ Mittelasien 	<ul style="list-style-type: none"> • Sa: Sulfat • Si: Sulfit 	<ul style="list-style-type: none"> • Unbl: Ungebleicht • ECF: Elementarchlorfrei • TCF: Totalchlorfrei

3.2.2 Optische Prüfung der Blätter

3.2.2.1 Spektrale optische Prüfung

Die Vermessung der optischen Blatteigenschaften erfolgt an einem Spektralphotometer des Typs L&W ELREPHO, welches eine kontinuierliche Erfassung der Reflexionsfaktoren $R(\lambda)$ für Licht im Bereich von $\lambda = 360 \dots 700$ nm ermöglicht. Unter Verwendung genormter Wichtungsfunktionen $R(\lambda)$ werden spektrale Reflexionsfaktoren berechnet. Die Wichtungsfunktionen simulieren Lichtarten bzw. subjektive Farbeindrücke (**Tab. 2**).

Tab. 2: Wichtungsfunktionen und zugehörige Lichtarten

Bezeichnung der Wichtungsfunktion	Simulierte Lichtart
X	Rotes Licht
Y	Grünes Licht
Z	Blaues Licht
457	Licht mit Schwerpunktwellenlänge 457 nm zur Helligkeitsprüfung

3.2.2.2 Ableitung optischer Eigenschaften

Gemäß dem Projektziel stand die messtechnische Erfassung der (spektralen) Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten im Mittelpunkt, da daraus gemäß der Theorie von KUBELKA-MUNK alle wesentlichen optischen Blatteigenschaften abgeleitet werden können. Weiterhin ermöglicht die Verfügbarkeit der Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten einzelner Faserstoffe eine einfache Vorhersage des Mischungsverhaltens.

Es erwies sich als zweckmäßig, in einem Messschritt zunächst die (spektralen) Reflexionsfaktoren und zwar nacheinander über einem Schwarzkörper ($R_{0,Y}$ bzw. $R_{0,X}$ bzw. $R_{0,Z}$ bzw. $R_{0,457}$) und über einem Papierstapel ($R_{\infty,Y}$ bzw. $R_{\infty,X}$ bzw. $R_{\infty,Z}$ bzw. $R_{\infty,457}$) zu bestimmen.

Gemäß

$$S_Y = \frac{1}{w \left(\frac{1}{R_{\infty,Y}} - R_{\infty,Y} \right)} \ln \left(\frac{(1 - R_{0,Y} R_{\infty,Y}) R_{\infty,Y}}{R_{0,Y} - R_{\infty,Y}} \right) \quad (3-1)$$

$$K_Y = \frac{1 - R_{\infty,Y}}{2w(1 + R_{\infty,Y})} \ln \left(\frac{(1 - R_{0,Y} R_{\infty,Y}) R_{\infty,Y}}{R_{0,Y} - R_{\infty,Y}} \right) \quad (3-2)$$

bzw. sinngemäß für S_X und K_X bzw. S_Z und K_Z bzw. S_{457} und K_{457} können unter Verwendung des spezifischen Flächengewichtes w alle (spektralen) Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten aus den Reflexionsfaktoren abgeleitet).

Umgekehrt können aus den Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten die Reflexionsfaktoren berechnet werden. Für die Reflexionsfaktoren im Y-Spektrum (und analog auch für die übrigen Spektren) lauten die Gleichungen

$$R_{\infty,Y} = 1 + \frac{K_Y}{S_Y} - \sqrt{\left(\frac{K_Y}{S_Y} \right)^2 + 2 \cdot \frac{K_Y}{S_Y}} \quad (3-3)$$

$$R_{0,Y} = \frac{R_{\infty,0} \cdot \exp \left[S_Y \cdot w \cdot \left(\frac{1}{R_{\infty,Y}} - R_{\infty,0} \right) \right] - R_{\infty,0}}{\exp \left[S_Y \cdot w \cdot \left(\frac{1}{R_{\infty,Y}} - R_{\infty,0} \right) \right] - R_{\infty,0}^2} \quad (3-4)$$

Über die Reflexionsfaktoren sind alle wesentlichen optischen Zustandsgrößen des Papiers definiert, wie

- Opazität

$$O = \frac{R_{0,Y}}{R_{\infty,Y}} \quad (3-5)$$

- Helligkeit

$$R_{\infty,457} \quad (3-6)$$

- Weißgrad¹

$$R_{\infty,Y} \quad (3-7)$$

¹ Wegen der Subjektivität des Farbeindruckes „Weiße“ existiert in der Literatur eine Vielzahl von unverbindlichen Formeln. Die Mehrzahl der Autoren leitet den Weißgrad aus dem Reflexionsfaktor $R_{\infty,Y}$ ab, wobei gegebenenfalls noch weitere Korrekturterme verwendet werden, in die Koordinaten des Farbortes (Normfarbwerte oder CIE-Lab) eingehen.

- Normfarbwerte (für C/2°)

$$X = 0,73185 \cdot R_{\infty,X} + 0,19752 \cdot R_{\infty,Y}$$

$$Y = R_{\infty,Y} \quad (3-8)$$

$$Z = 1,1822246 \cdot R_{\infty,Z}$$

- CIELab-Werte (für C/2°)

$$L = 116 \cdot \sqrt[3]{\frac{Y}{100}} - 16$$

$$a = 500 \cdot \left(\sqrt[3]{\frac{X}{98,074}} - \sqrt[3]{\frac{Y}{100}} \right) \quad (3-9)$$

$$b = 200 \cdot \left(\sqrt[3]{\frac{Y}{100}} - \sqrt[3]{\frac{Z}{118,232}} \right)$$

3.3 Modelle

3.3.1 Relationen zwischen spektralen Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten

Über nahezu alle Zellstoffgruppen ergibt sich eine klare Korrelationen zwischen den in unterschiedlichen Spektralbereichen aufgenommenen Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten. Repräsentativ ist in **Abb. 3** der Zusammenhang zwischen S_Y und S_Z dargestellt, wobei deutlich eine Differenzierung in 3 Zellstoffgruppen auszumachen ist.

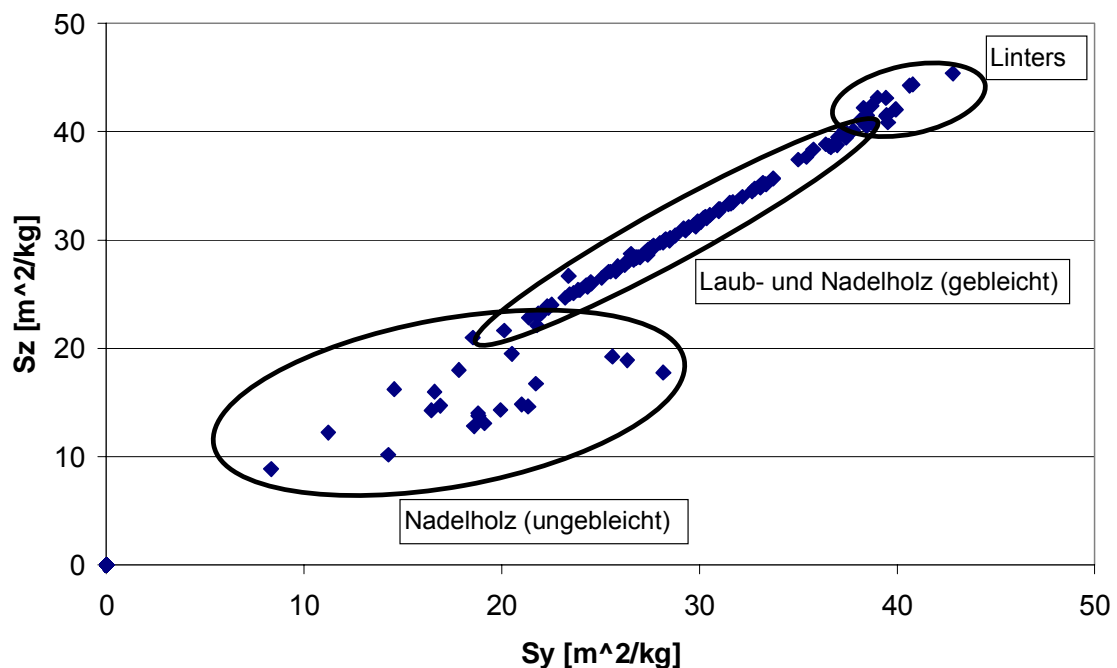


Abb. 3: Lichtstreuoeffizienten S_Y und S_Z aller geprüften Zellstoffe

Es wurde deshalb in den drei Zellstoffgruppen

- Gebleichte Nadel- und Laubholzzellstoffe
- Linters
- Ungebleichte Nadelholzzellstoffe

eine lineare Regression zwischen den Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten im Y-Spektrum und den übrigen spektralen Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten gemäß den Ansätzen

$$S_{\bullet} = a_{\bullet} \cdot S_Y \quad (3-10)$$

$$K_{\bullet} = c_{\bullet} \cdot K_Y \quad (3-11)$$

durchgeführt. Dabei steht jeweils \bullet als Platzhalter für die Indizes X, Z und 457.

Tab. 3: Regressionskoeffizienten a , sowie Bestimmtheitsmaß der linearen Regression zwischen S_Y und den übrigen Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten

Zellstoffgruppe	S_x		S_z		S_{457}	
	a_x	R^2	a_z	R^2	a_{457}	R^2
Nh (bl.), Lh, Eu	0,9829	1	1,0579	0,9999	1,0572	0,9999
Li	0,9969	0,9267	1,0795	0,9615	1,0774	0,9523
Nh (unbl.)	1,0847	0,9267	0,8265	0,3106	0,8148	0,1448

Tab. 4: Regressionskoeffizienten c , sowie Bestimmtheitsmaß der linearen Regression zwischen K_Y und den übrigen Lichtabsorptionskoeffizienten

Zellstoffklasse	K_x		K_z		K_{457}	
	c_x	R^2	c_z	R^2	c_{457}	R^2
Nh (bl.), Lh, Eu	0,8336	0,9953	3,0837	0,976	2,9342	0,976
Li	0,9161	0,9955	2,4347	0,9062	2,354	0,8988
Nh (unbl.)	0,8249	0,9654	1,6789	0,3607	1,6774	0,3114

Für die Gruppe der ungebleichten Zellstoffe ist die Korrelation deutlich schlechter. Eine mögliche Ursache ist in der geräteinternen Numerik zu suchen. Gemäß Gleichungen (3-1) und (3-2) geht in die Berechnung der Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten die Differenz $R_0 - R_{\infty}$ als Nenner des Quotienten innerhalb des Logarithmus ein. Für ungebleichte Zellstoffe ist diese Differenz nahezu Null. In Konsequenz ziehen kleinste Ungenauigkeiten in der Vermessung der Reflexionsfaktoren erhebliche Abweichungen in den rechnerisch abgeleiteten Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten nach sich.

3.3.2 Morphologische und optische Eigenschaften ungemahlener Zellstoffe

Wichtigste morphologische Faserkenngröße für alle optischen Eigenschaften ist die durchschnittliche äußere Faseroberfläche

$$A_o = \pi \cdot D \cdot L \quad (3-12)$$

je Faser eines Faserstoffes, wobei man zylindrische Fasern unterstellt und nur die Mantelfläche berücksichtigt. **Abb. 4** bestätigt für ungemahlene Faserstoffe den zu erwartenden Zusammenhang, dass Fasern mit kleinerer Oberfläche (z.B. Laubholzfasern) kompaktere Netzwerkstrukturen aufbauen, welche je Masseinheit mehr streufähige Oberfläche bieten, als Fasern mit größerer Oberfläche (z.B. Nadelholzfasern). Das Streuverhalten um die Regressionskurve

$$S_y [m^2 / kg] = \frac{20,68}{A_o^{0,1785} [mm^2]} \quad (3-13)$$

macht jedoch deutlich, dass weitere Faktoren das Streuvermögen des resultierenden FaserNetzwerkes zum Teil wesentlich stärker beeinflussen.

Aufgrund der fraktalen Natur der Faseroberfläche ist jegliches Maß für eine Fasergesamt-oberfläche an einen definierten Grad der Auflösung gekoppelt. Die in Gleichung (3-12) bestimmte Gesamtfläche setzt eine absolut glatte Faseroberfläche voraus. Für Reflexionseffekte im sichtbaren Lichtbereich müssen aber auch noch Faserfeinstrukturen ab einer Ausdehnung von etwa 0,5 µm berücksichtigt werden. Ein gewisses Maß für die bei dieser Auflösung verfügbare Faseroberfläche ist der Entwässerungswiderstand. Eine „rauere“ Faseroberfläche, d.h. ein Faserstoff mit höherem Entwässerungswiderstand, bietet pro Masseinheit mehr reflexionsfähige Oberfläche als eine glatte Oberfläche. Diese direkte Proportionalität wird durch **Abb. 5** bestätigt. Die zugehörige Regressionskurve lautet

$$S_y [m^2 / kg] = 7,2091 \cdot SR [^\circ]^{0,5551} \quad (3-14)$$

Basierend auf den Gleichungen (3-13) und (3-14) wird der so genannte Oberflächenindex

$$OI := \frac{\sqrt{SR [^\circ]}}{\sqrt[5]{A_o [mm^2]}} \quad (3-15)$$

definiert. In **Abb. 6** ist für ungemahlene Zellstoffe der Lichtstreuoeffizient in Abhängigkeit vom Oberflächenindex dargestellt.

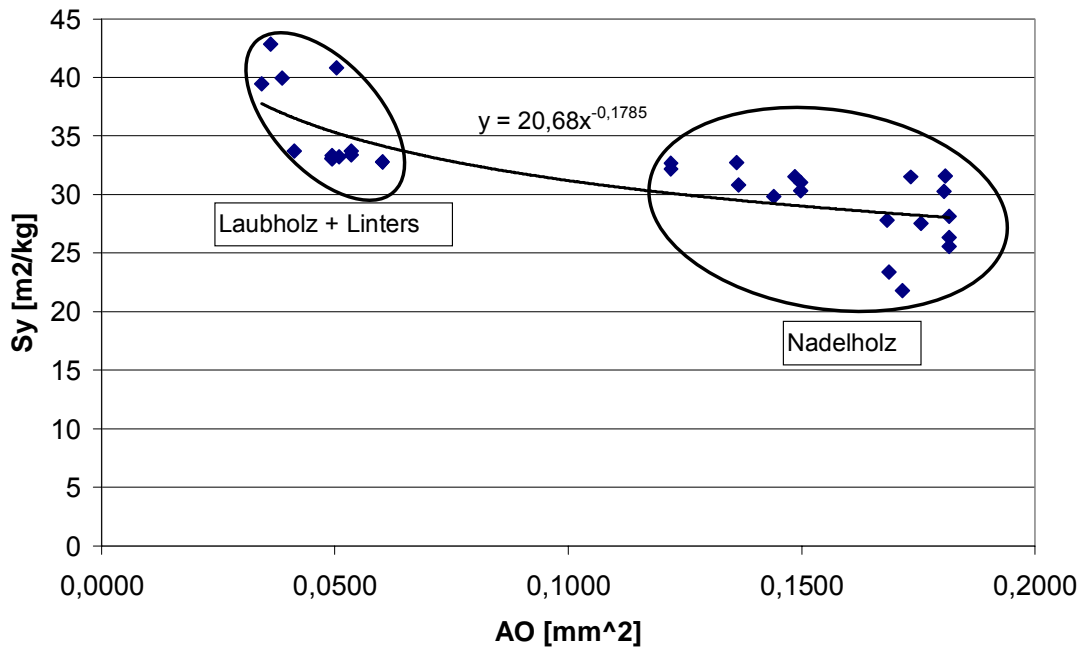


Abb. 4: Durchschnittliche Oberfläche je Faser verschiedener ungemahlener Zellstoffe und zugehörige Lichtstreckoeffizienten SY von Laborblättern

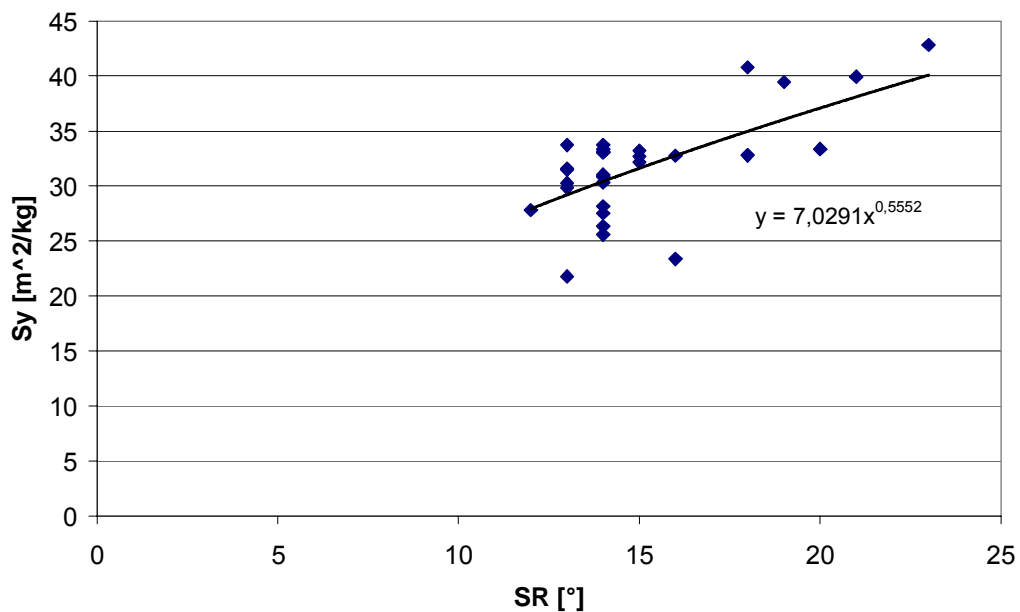


Abb. 5: Entwässerungswiderstand verschiedener ungemahlener Zellstoffe und zugehöriger Lichtstreckoeffizienten SY von Laborblättern

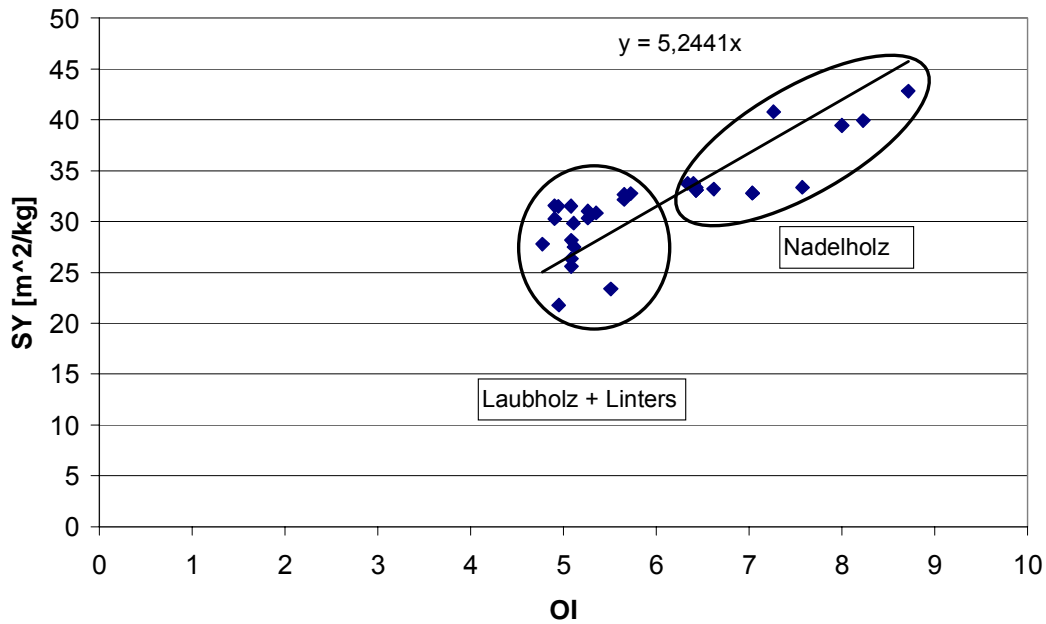


Abb. 6: Oberflächenindex ungemahlener Zellstoffe und zugehöriger Lichtstreuoeffizient SY von Standardblättern

Abb. 6 verdeutlicht, dass über die Regressionsgleichung

$$S_Y [m^2 / kg] = 5.2441 \cdot \frac{\sqrt{SR[^\circ]}}{\sqrt[6]{A_o [mm^2]}} \quad (3-16)$$

aus Entwässerungswiderstand und (scheinbarer) Gesamtfaseroberfläche durchaus repräsentative Trendaussagen zum Lichtstreuvermögen ungemahlener Faserstoffes getroffen werden können.

Eine ähnliche Formel für den Lichtabsorptionskoeffizienten ist für die Gesamtheit aller Zellstoffe nicht zu erwarten. Vielmehr als geometrische Merkmale eines Faserstoffes steuern die Art und Weise seiner Aufbereitung (z.B. Aufschluss und Bleiche) und daraus resultierende Unterschiede in der chemischen Zusammensetzung (Ligningehalt, absorbierte Schwermetallkationen) sein optisches Absorptionsverhalten. Fasst man ähnlich aufgeschlossene Zellstoffe zusammen, so lassen sich in den Gruppen durchaus Abhängigkeiten zwischen der mittleren Querschnittsfläche der Faserwand und dem Lichtabsorptionskoeffizienten feststellen (**Abb. 7**). Dabei wurde bei der Berechnung der mittleren Querschnittsfläche wieder von einer kreiszylindrischen Form der Faser ausgegangen, so dass sich die mittlere Querschnittsfläche gemäß

$$CWA = \frac{\pi}{4} (2D + FWT) \cdot FWT \quad (3-17)$$

aus den Ergebnissen der Vermessungen mit dem FIBERLAB berechnen lässt.

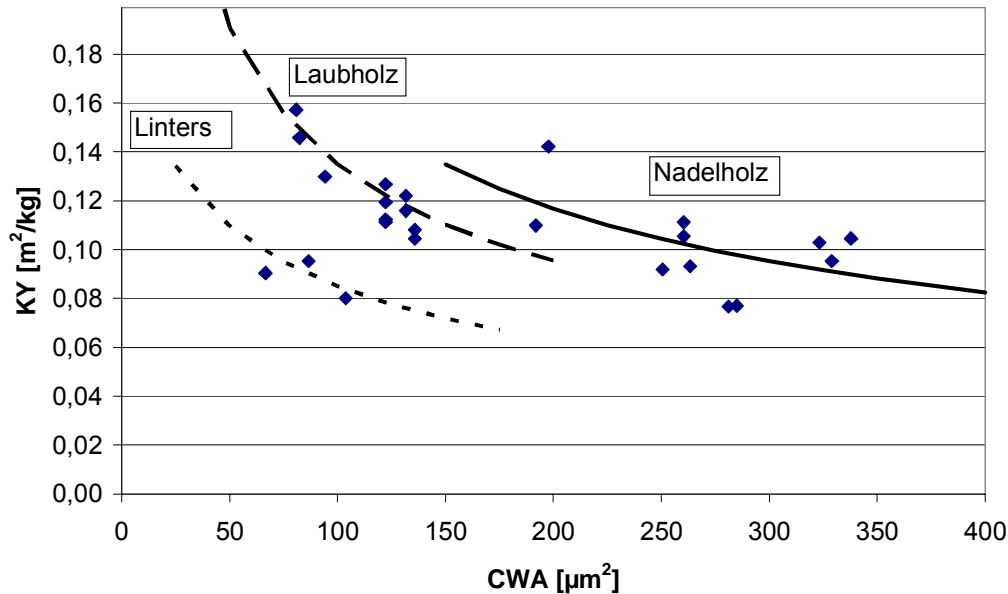


Abb. 7: Mittlere Querschnittsfläche der Faserwand ungebleichter sowie ungemahlener Zellstoffe und zugehörige Lichtabsorptionskoeffizienten von Laborblättern

Die in **Abb. 7** eingetragenen Kurven entsprechen dabei folgenden Regressionsfunktionen und zwar

- für Nadelhölzer:

$$K_Y [m^2 / kg] = \frac{1,65}{\sqrt{CWA [\mu m^2]}} \quad (3-18)$$

- für Laubhölzer

$$K_Y [m^2 / kg] = \frac{1,35}{\sqrt{CWA [\mu m^2]}} \quad (3-19)$$

- für praktisch lignin- und hemicellulosefreie Faserstoffe (Linters)

$$K_Y [m^2 / kg] = \frac{0,95}{\sqrt{CWA [\mu m^2]}} \quad (3-20)$$

Die indirekte Proportionalität folgt aus der Tatsache, dass Fasern mit kleineren Querschnitten dichtere Faserpackungen erlauben und somit mehr absorptionsfähige Faser Oberfläche je Masseinheit des Blattes zur Verfügung stellen. Bei gleicher Faserquerschnittsfläche besitzen Laborblätter auf Basis von Nadelholzstoffen den höchsten und Linters den geringsten Lichtabsorptionskoeffizienten. Laubholzzellstoffe ordnen sich in der Mitte ein, da diese Holzart geringere Ausgangsligningehalte besitzt und bei leichterer Bleichbarkeit zu weitestgehend ligninfreien Stoffen führt. Diese Reihenfolge entspricht dem mittleren Ligningehalt in den Faserstoffen, der im erheblichen Maße das Absorptionsverhalten steuert.

3.3.3 Morphologische und optische Eigenschaften gemahlener Zellstoffe

3.3.3.1 Lichtstreuungskoeffizient

Bisher bekannte Modelle zum Verhalten optischer Papiereigenschaften bei Mahlprozessen gehen von einer nahezu linearen Reduzierung des Lichtstreuungskoeffizienten mit wachsender eingesetzter spezifischer Mahlenergie aus. Basierend auf den nunmehr durchgeführten

Mahlversuchen muss dieses Modell deutlich variiert (modifiziert/überarbeitet?) werden. Insbesondere ist die Wirkung der bereits erwähnten gegensätzlichen Prozesse

1. Zunahme optisch wirksamer, d.h. reflexionsfähiger Faseroberfläche (in der Suspension) durch Aufreißen bzw. Fibrillierung der Primär- und Sekundärfaserwände ,
2. Reduzierung optisch wirksamer ungebundener Faseroberfläche durch Zunahme der relativen Bindungsfläche infolge der Oberflächenaktivierung

zu berücksichtigen. Grundsätzlich sind in Abhängigkeit der eingesetzten Mahlenergie drei Phasen zu unterscheiden (**Abb. 8**):

- Phase 1: Bis zum Erreichen eines definierten Energieeintrages W_0 wird die Vergrößerung der Faseroberfläche in der Suspension durch Fibrillierung erreicht. Im Papier wird diese Oberfläche vor allem Bindungsfläche. Der Lichtstreuoeffizient geht zurück.
- Phase 2: Bei weiterem Mahlungsfortschritt wird die Faser weiter fibrilliert. Gleichzeitig wird Feinstoff durch Abscheren von Fibrillen gebildet. Die maximal mögliche Packungsdichte von Fasern lässt trotz zunehmender Oberflächenaktivierung nur ein Wachstum der relativen Bindungsfläche zu einem Grenzwert zu. Der Lichtstreuoeffizient erreicht sein Minimum S_{Min} . Bei höheren Energieeinträgen als W_0 wird freigelegte bzw. fibrillierte Faseroberfläche nicht mehr gebunden. Der Lichtstreuoeffizient nimmt wieder zu.
- Phase 3: Noch höhere spezifische Mahlenergien homogenisieren die fasermorphologischen Eigenschaften der Fasern. Diese neu gebildeten Oberflächen werden in einem kompakteren Faserhaufwerk wieder gebunden und dadurch immer weniger reflexionswirksam. Der Lichtstreuoeffizient strebt einen stationären Zustand S_{Stat} zu.

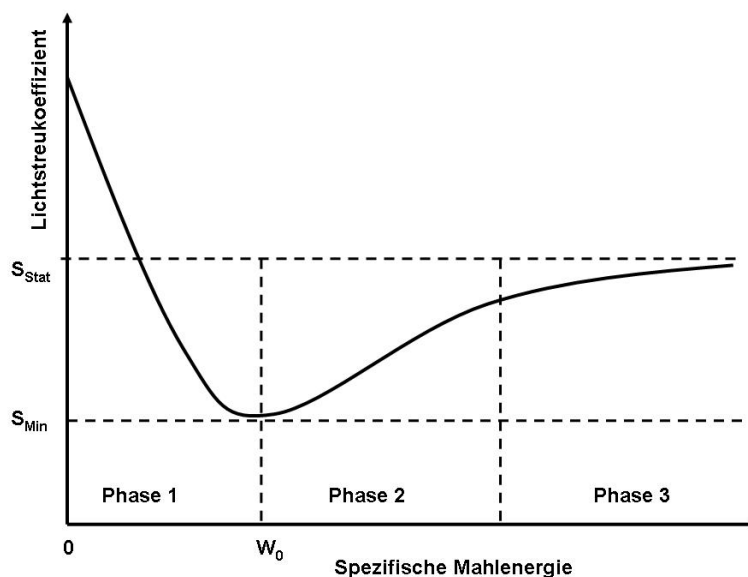


Abb. 8: Einfluss wachsender spezifischer Energieeinträge auf den Lichtstreuoeffizienten

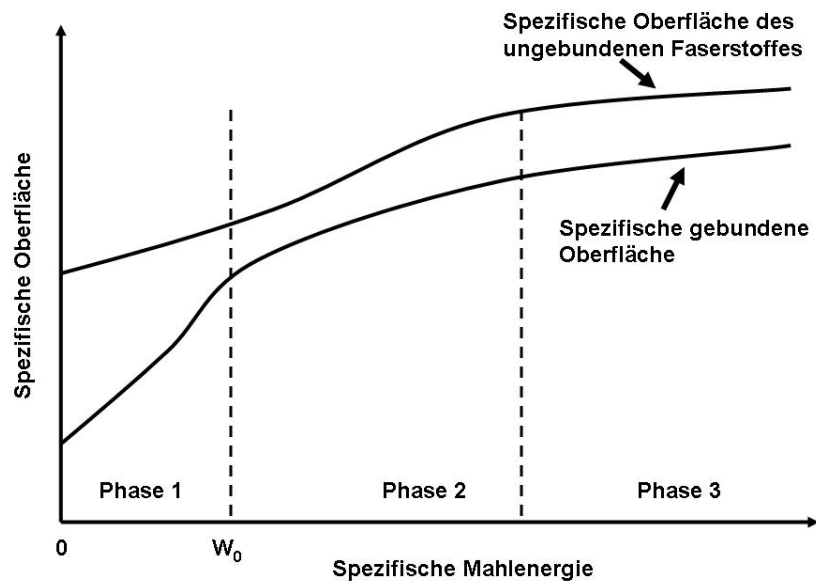


Abb. 9: Simulation der Entwicklung der (optisch wirksamen) spezifischen Oberfläche eines ungebundenen Faserstoffes sowie der spezifischen gebundenen Oberfläche

Abb. 9 gibt entsprechend zu **Abb. 8** in den einzelnen Phasen eine mögliche Entwicklung der optisch wirksamen spezifischen Oberfläche (SSA) des ungebundenen Faserstoffes sowie der gebundenen Faseroberfläche wieder. Das Wachstum der spezifischen Oberfläche des ungebundenen Faserstoffes erfolgt nach [2] proportional zum Wachstum des Entwässerungswiderstandes ($^{\circ}\text{SR}$). Das Wachstum der spezifischen gebundenen Oberfläche SBA kann aus SSA und der relativen gebundenen Faseroberfläche RBA gemäß

$$SBA = RBA \cdot SSA \quad (3-21)$$

berechnet werden. Beispiele zur Entwicklung des RBA in Abhängigkeit der eingesetzten Mahlenergie zeigen GOSH und MOORHOUSE in [3].

Für die meisten Zellstoffe wird bei technologisch sinnvollen Energieeinträgen in der Regel nur die Phase 1 beobachtet. Für Zellstoffe, deren Fasern sehr schnell hohe relative Bindungsflächen erreichen (z.B. nordamerikanische Nadelhölzer) kann das Minimum des erreichbaren Lichtstreuoeffizienten bereits im Rahmen der üblichen Energieeinträge erreicht werden (**Abb. 10**).

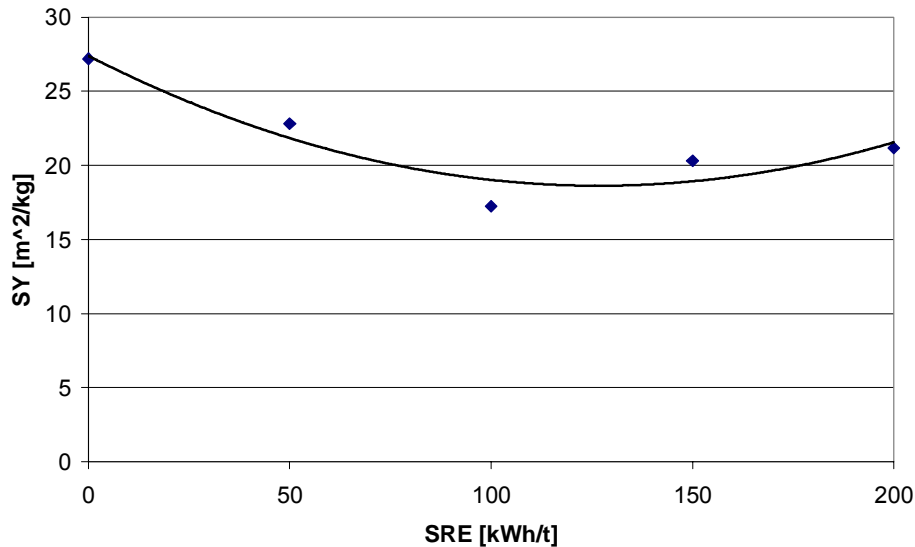


Abb. 10: Entwicklung des Lichtstreckoeffizienten von Laborblättern eines ungebleichten nord-amerikanischen Zellstoffes (Nh-NA-Sa-unbl) in Abhängigkeit von der eingetragenen spezifischen Mahlenergie.

In ähnlicher Weise bedingt eine stark kürzende Mahlung (etwa bei Einsatz einer Mahlgarnitur mit einem Schnittwinkel von 10°) dass weit mehr reflektierende Oberfläche gebildet wird, als durch Faser-Faser-Bindungen optisch unwirksam gemacht werden (**Abb. 11**).

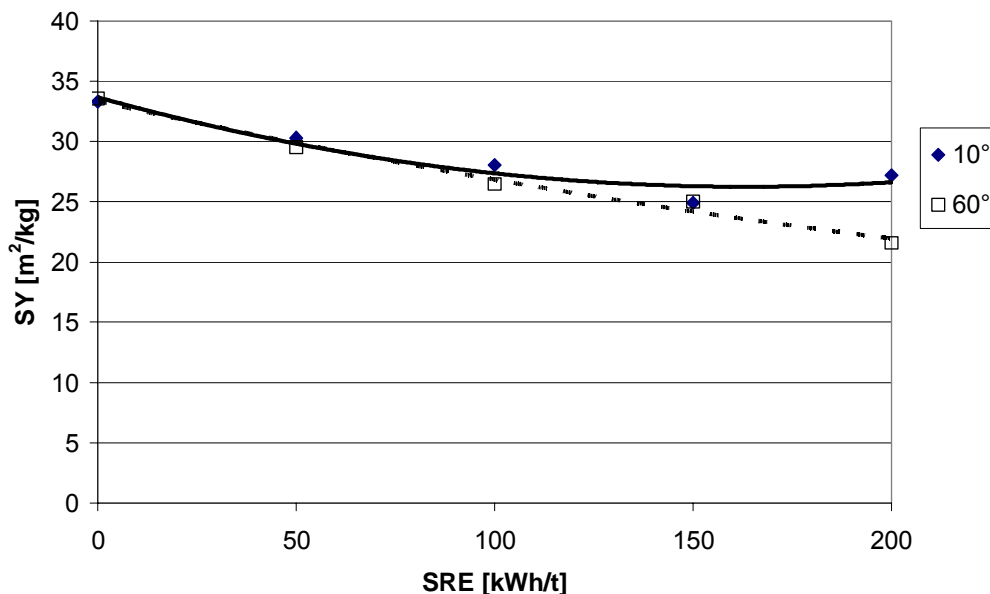


Abb. 11: Entwicklung des Lichtstreckoeffizienten von Laborblättern der Mahlreihen 10 und 18 (Lh - NE - Sa - ECF) in Abhängigkeit von der eingetragenen spezifischen Mahlenergie bei Verwendung von Mahlgarnituren mit unterschiedlichem Schnittwinkel.

Einen gewissen Grenzfall stellen auf Linters basierte Zellstoffe dar. Lignin- und hemicellulosefreie Fasern, wie Baumwoll-Linters liefern aufgrund der fehlenden Hemicellulose im Ergebnis der Mahlung nur geringfügige Zuwächse an bindungsfähiger Oberfläche. Folgerichtig nimmt schon für niedrige spezifische Energieeinträge das Lichtstreuvermögen deutlich zu (**Abb. 12**). Die Phase 1, welche bei nahezu allen laub- und nadelholz-basierten Zellstoffe über dem gesamten papiertechnisch interessanten Energiebereich der Mahlung dominiert, ist für Linters kaum ausgeprägt.

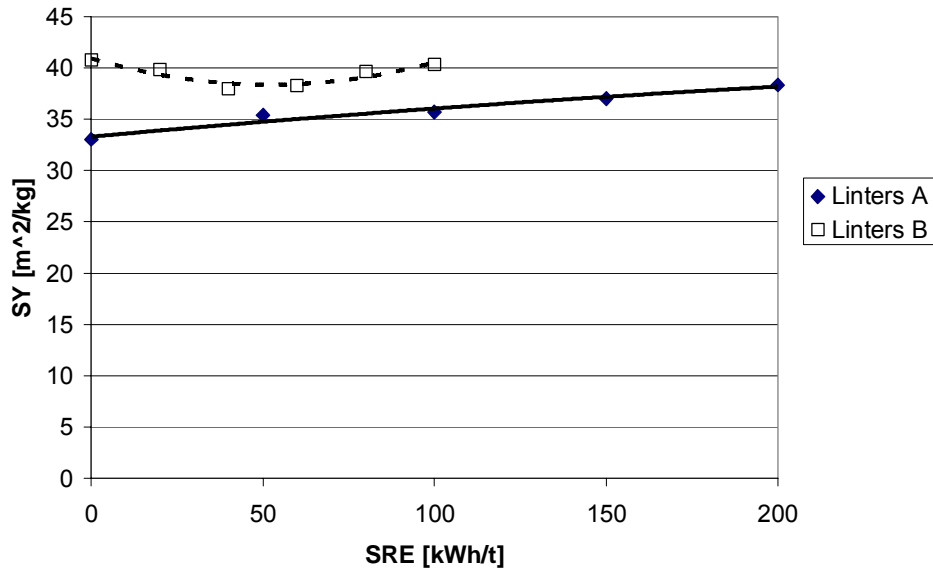


Abb. 12: Entwicklung des Lichtstreuoeffizienten der Laborblätter von zwei unterschiedlichen Lintersqualitäten (Mahlreihen 7 und 20) in Abhängigkeit von der eingetragenen spezifischen Mahlenergie

Aus **Abb. 9** ist ersichtlich, dass der Lichtstreuoeffizient als proportional zur Differenz von SSA und SBA angesetzt werden kann. Da die Abhängigkeit beider Oberflächen von der spezifischen Mahlenergie durch kubische Polynome zweckmäßig approximiert werden kann, bietet sich derselbe Ansatz auch für den Lichtstreuoeffizienten an. Da allerdings die meisten Mahlreihen nur die Phase 1 und ggf. die Phase 2 widerspiegeln, wurde aus numerischen Gründen grundsätzlich der folgende quadratische Ansatz

$$S_y = a + b \cdot SRE + c \cdot SRE^2 \quad (3-22)$$

verwendet. Die Parameter a , b , und c werden über eine quasi-lineare Regression berechnet. Für dieselben Faserstoffe wurden im Rahmen einiger Mahlversuche sowohl die Mahlgarnitur (beschrieben durch Schnittwinkel SW und halben Öffnungswinkel $HÖW$) als auch die Mahlkantenbelastung SEL variiert. Auf diesen Versuchen aufbauend können die Wirkungen der Einflussgrößen SW , $HÖW$, SEL auf die Parameter a , b , und c in Form linearer Funktionen

$$\begin{aligned} b &= b_0 + b_1 \cdot SEL + b_2 \cdot SW + b_3 \cdot HÖW \\ c &= c_0 + c_1 \cdot SEL + c_2 \cdot SW + c_3 \cdot HÖW \end{aligned} \quad (3-23)$$

erfasst werden.

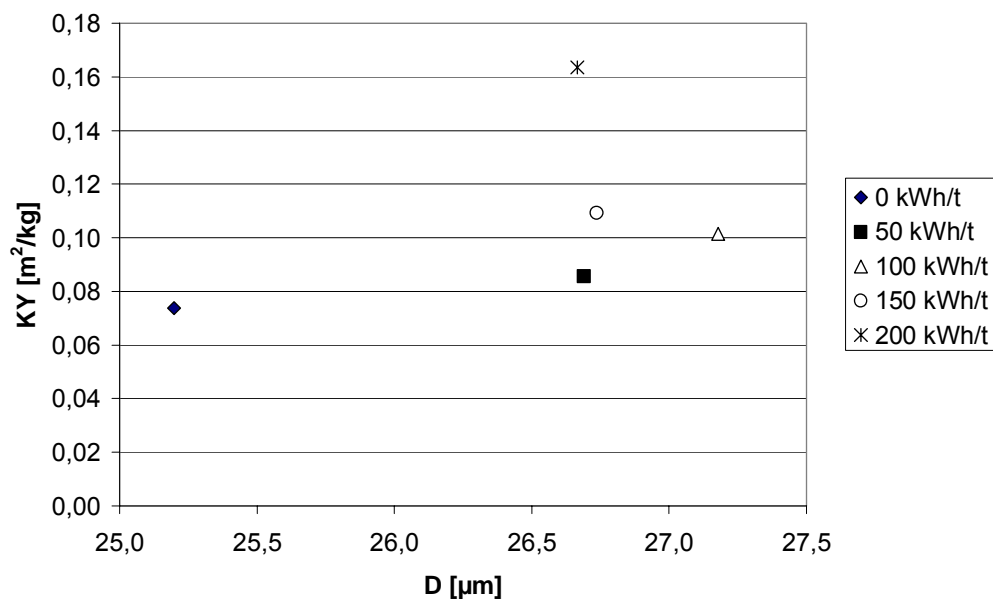
Für den Zellstoff Nh-NA-Sa-unbl enthält **Tab. 5** eine Übersicht der Wirkungen von Prozessparametern der Mahlung auf den Lichtstreuoeffizienten.

Tab. 5: Wirkungen der Einflussgrößen SEW, HÖW, SEL auf den Lichtstreuungskoeffizienten für den Zellstoff Nh-NA-Sa-unbl

Typ			Gültigkeitsbereich			SY								
			SEL	SW	HÖW		SEL		SW		HÖW			
			Ws/m	o	o		Ws/m		o		o			
						a	b1	c1	b2	c2	b3	c3	b0	c0
Nh (NA)	Sa	unbl.	2	10-60	20-90	26,50			-0,11	0,08	0,08	-0,04	-11,82	3,56

3.3.3.2 Lichtabsorptionskoeffizient

Obwohl die Mahlung ein mechanisches Stoffaufbereitungsverfahren ist, erfolgt im Ergebnis dieser Behandlung eine mehr oder weniger deutliche Zunahme des Lichtabsorptionskoeffizienten. Durch das Aufreißen der Primärwand und die Fibrillierung der Sekundärwand wird das Lignin in der Faserwand optisch zugänglich gemacht, d.h. es werden absorptionsfähige Oberflächen erzeugt. Eine direkte Beobachtung der aus den Sekundärwänden gerissenen Fibrillen ist aber bei der derzeitigen Auflösung bei der Bestimmung des Faserdurchmessers [z.B. FIBERLAB: 1µm] nicht möglich. Über Kontrastveränderungen am Faserrand wird im Zuge der Fibrillierung eine scheinbare Zunahme des Faserdurchmessers beobachtet. Diese korreliert stark mit der Zunahme des Lichtabsorptionskoeffizienten, wie anhand von **Abb. 13** und **Abb. 14** verfolgt werden kann.

**Abb. 13:** Entwicklung von Faserdurchmesser und Lichtabsorption bei der Mahltreihe 17 (Nh - NE - Sa - TCF)

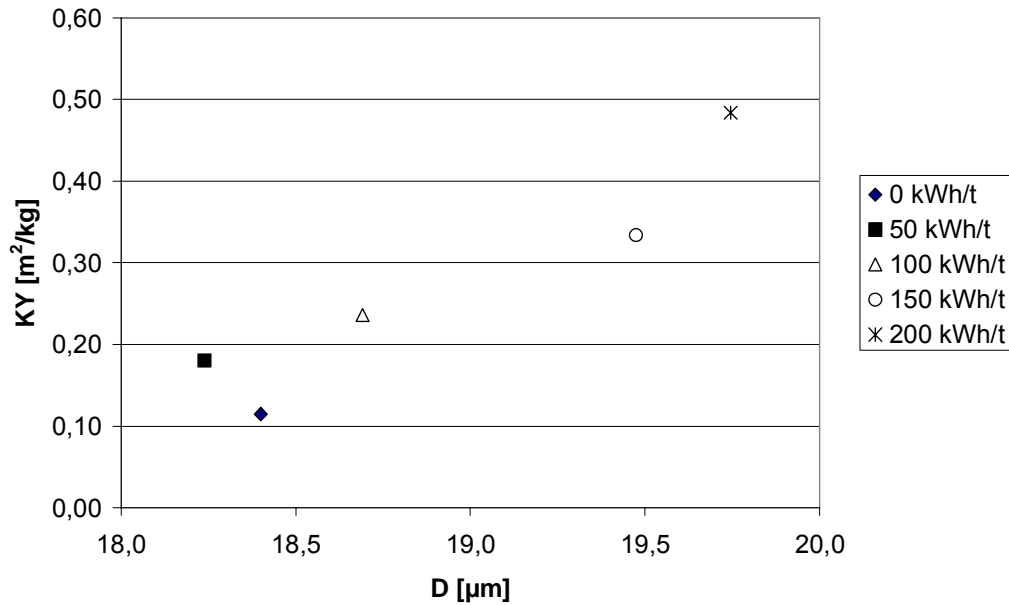


Abb. 14: Entwicklung von Faserdurchmesser und Lichtabsorption bei der Mahlreihe 30 (Lh - NE - Sa - ECF)

Etwa ab einem Energieeintrag von 150 kWh/t sind allerdings die Messwerte für den Faserdurchmesser zur Bewertung der Fibrillierung kaum noch geeignet.

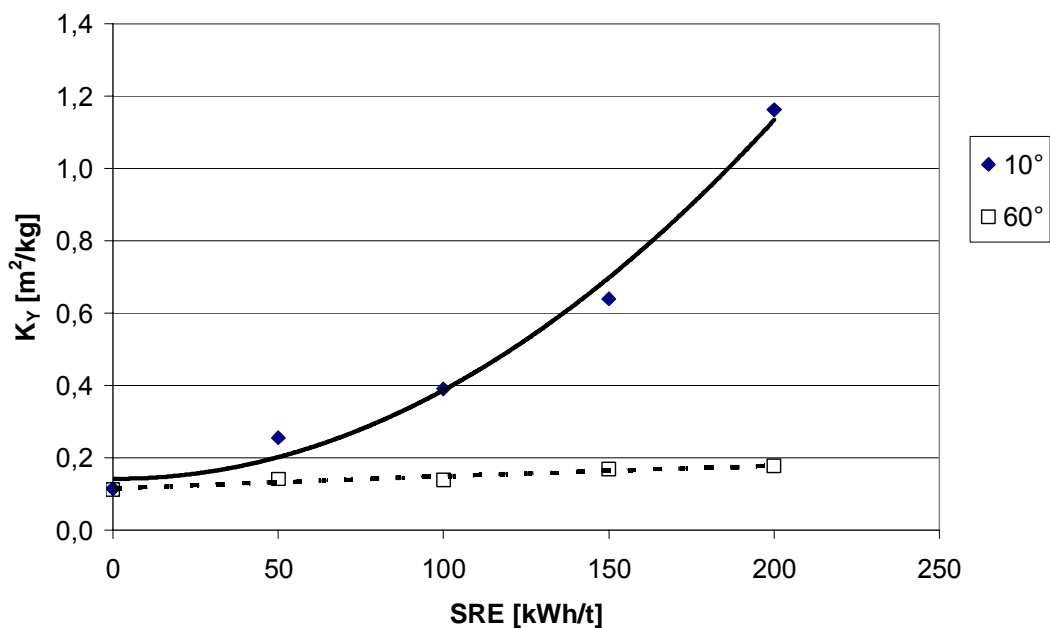


Abb. 15: Entwicklung des Lichtabsorptionskoeffizienten von Laborblättern der Mahlreihen 10 und 18 (Lh - NE - Sa - ECF) in Abhängigkeit von der eingetragenen spezifischen Mahlenergie bei Verwendung von Mahlgarnituren mit unterschiedlichem Schnittwinkel.

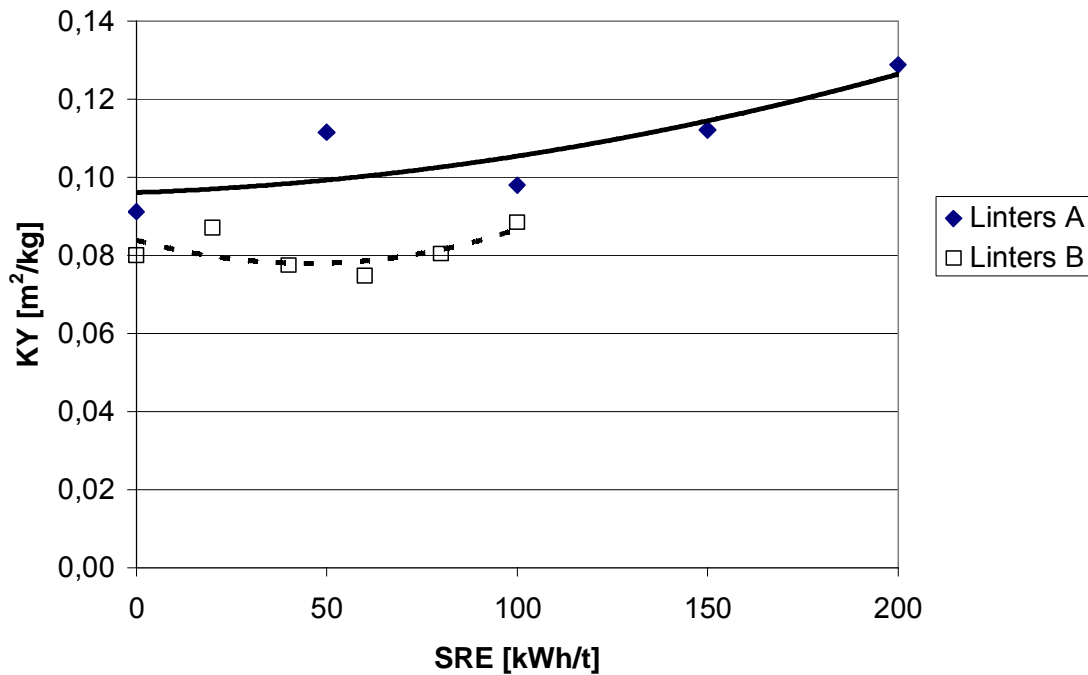


Abb. 16: Entwicklung des Lichtabsorptionskoeffizienten von Laborblättern zweier unterschiedlicher Lintersqualitäten (Mahlreihen 7 und 20) in Abhängigkeit von der eingetragenen spezifischen Mahlenergie

Wie für den Lichtstreuoeffizienten wird auch für die Abhängigkeit zwischen dem Lichtabsorptionskoeffizienten K_Y und der spezifischen Mahlenergie SRE ein quadratischer Ansatz der Form

$$K_Y = a + b \cdot SRE + c \cdot SRE^2 \tag{3-24}$$

verwendet. Die Parameter a , b , und c werden über eine quasi-lineare Regression berechnet. Analog zu (3-23) werden die Wirkungen der Einflussgrößen SEW , $HÖW$, SEL auf die Parameter a , b , und c in Form linearer Funktionen erfasst.

$$\begin{aligned} b &= b_0 + b_1 \cdot SEL + b_2 \cdot SW + b_3 \cdot HÖW \\ c &= c_0 + c_1 \cdot SEL + c_2 \cdot SW + c_3 \cdot HÖW \end{aligned} \tag{3-25}$$

Für den Zellstoff Nh-NA-Sa-unbl enthält **Tab. 6** eine Übersicht über die Wirkungen der Einflussgrößen SEW und $HÖW$.

Tab. 6: Wirkungen der Einflussgrößen SEW , $HÖW$, SEL auf den Lichtabsorptionskoeffizienten für den Zellstoff Nh-NA-Sa-unbl

Typ			Gültigkeitsbereich			KY								
						SEL		SW		HÖW		b0		c0
			Ws/m	o	o	Ws/m	o	o						
						a	b1	c1	b2	c2	b3	c3	b0	c0
Nh (NA)	Sa	unbl.	2	10-60	20-90	10,70			-0,06	0,04	0,06	-0,03	-3,70	1,25

3.4 Implementierung und Beispiele

Alle im Rahmen des Abschnittes 3.3 bereitgestellten Formeln erfordern keine spezielle mathematische Software, sondern können in übliche Standardsoftware integriert werden. Die Umsetzung soll am Beispiel einer Simulation der Wirkung verschiedener Mahlparameter für ungebleichte Zellstoffe auf Basis nordamerikanischer Hölzer (Sulfataufschluss, ungebleicht) demonstriert werden.

Schritt 1:

Aus **Tab. 5** und **Tab. 6** sind die Wirkungen der Einflussgrößen spezifische Kantenlast (*SEL*), Schnittwinkel (*SW*) und halber Öffnungswinkel (*HÖW*) für die Zellstoffklasse Nh – NA – Sa - unbl zu importieren.

Tab. 7: Wirkungen

Eigenschaft	SEL			SW		HÖW			
	a	b1	c1	b2	c2	b3	c3	b0	c0
Lichtstreu- koeffizient SY	26,50			-0,11	0,08	0,08	-0,04	-11,82	3,56
Lichtabsorptions- koeffizient KY	10,70			-0,06	0,04	0,06	-0,03	-3,70	1,25

Schritt 2:

Es sind Werte für die zu simulierenden Einflussgrößen innerhalb der Gültigkeitsbereiche vorzugeben. Anhand derer werden die Koeffizienten a, b, c und d in den SRE-Gleichungen berechnet. Im Beispiel sollen folgende Fälle simuliert werden:

- $SW = 60^\circ, HÖW = 90^\circ$
- $SW = 30^\circ, HÖW = 90^\circ$
- $SW = 30^\circ, HÖW = 30^\circ$

Die Fälle a) und c) entsprechen den in den Mahlreihen 1 und 21 verwendeten Mahlgarnituren. Fall b) simuliert eine hypothetische Steilkegelgarnitur. Für bestimmte Einflussgrößen ist der Gültigkeitsbereich auf Grund verfügbarer Kalibrierdaten und papiertechnologischer Relevanz nur auf einen Festwert beschränkt. Varianten dieser Einflussgröße können nicht simuliert werden. Entsprechende Einträge von Wirkungen der Einflussgröße bleiben deshalb in **Tab. 7** frei. Im vorliegenden Beispiel (Zellstofftyp Nh – NA – Sa - unbl) kann deshalb die spezifischer Kantenbelastung $SEL = 2 \text{ Ws/m}$ nicht variiert werden.

Tab. 8: Koeffizienten der SRE-Funktionen

Eigenschaft (SRE-Gleichung)	Bei- spiel Einheit	SEL:2 SW:60 HÖW:90			SEL:2 SW:30 HÖW:90			SEL:2 SW:30 HÖW:90		
		a	b	c	a	b	c	a	b	c
Lichtstreu- koeffizient SY (3-22)	m ² /kg	26,50	-11,5	4,078	26,50	-8,16	1,795	26,50	-12,8	4,494
Lichtabsorptions- koeffizient KY (3-24)	m ² /kg	10,70	-1,96	1,174	10,70	-0,3	0,039	10,70	-3,67	1,602

Die Gleichungen (3-16) bzw. die für Nadelhölzer gültige Gleichung (3-18) können herangezogen werden, um zusätzlich die Startwerte a, d.h. die Lichtstreu- und Lichtabsorptionsko-

effizienten der Papiere aus ungemahlene Faserstoffen, aus den Suspensionskenngrößen SR und A_o bzw. CWA der ungemahlene Faserstoffe abzuschätzen.

Schritt 3:

Mit Hilfe der SRE-Gleichungen kann für jede Konfiguration der Mahlbedingungen der Einfluss des spezifischen Energieeintrages SRE simuliert werden. Wie eingangs des Abschnitts 3.3 festgelegt, beziehen sich die Koeffizienten in allen SRE-Gleichungen auf 100 kWh/t als Grundeinheit, d.h. der reale Energieeintrag (in kWh/t) ist vor der Simulation durch 100 zu dividieren.

Schritt 4:

Mit den Koeffizienten aus **Tab. 3** und **Tab. 4** für ungebleichte Nadelholzzellstoffe (**Tab. 9**) können über die Transformationsbeziehungen (3-10) und (3-11) aus den Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten im Y-Spektrum in Schritt 3 die jeweiligen Koeffizienten in den übrigen Spektren berechnet werden.

Tab. 9: Koeffizienten für die Transformation der spektralen Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten

	a_X	a_Z	a_{457}	c_X	c_Z	c_{457}
Nh (unbl.)	1,0847	0,8265	0,8148	0,8249	1,6789	1,6774

Schritt 5:

Aus den spektralen Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten sind mittels der Formel (3-3) bis (3-9) alle wesentlichen optischen Eigenschaften des Papiers ableitbar. Weiterhin sind die jeweiligen Koeffizienten von Papieren auf der Basis gemischter Faserstoffe berechenbar über

$$K_* = \sum_{i=1}^n \frac{m_i}{m} K_{*i} \quad (3-26)$$

$$S_* = \sum_{i=1}^n \frac{m_i}{m} S_{*i} \quad (3-27)$$

wobei $m = \sum m_i$ die aus den Einzelmassen sich ergebende Gesamtmasse beschreibt.

In **Abb. 17** bis **Abb. 18** sind Ergebnisse der Simulation für die Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten S_Y und K_Y visualisiert.

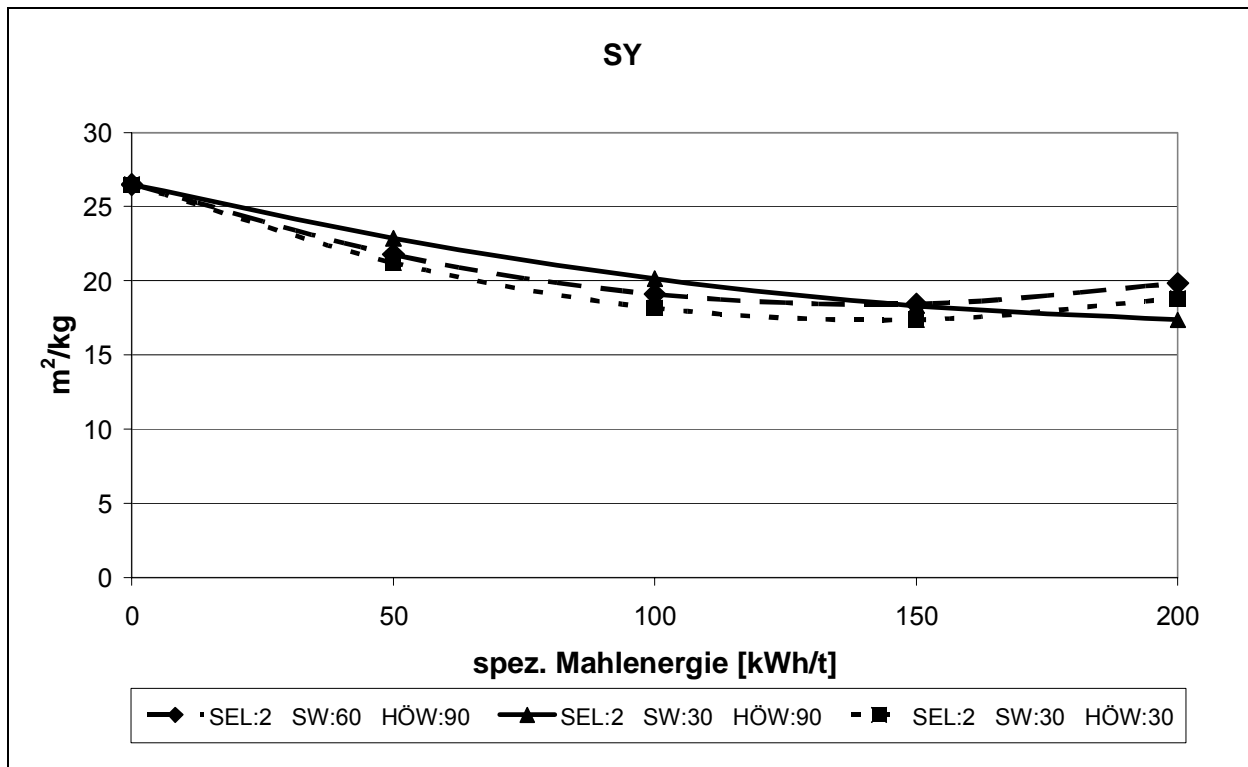


Abb. 17: Simulation der Entwicklung des Lichtstreuungskoeffizienten S_Y

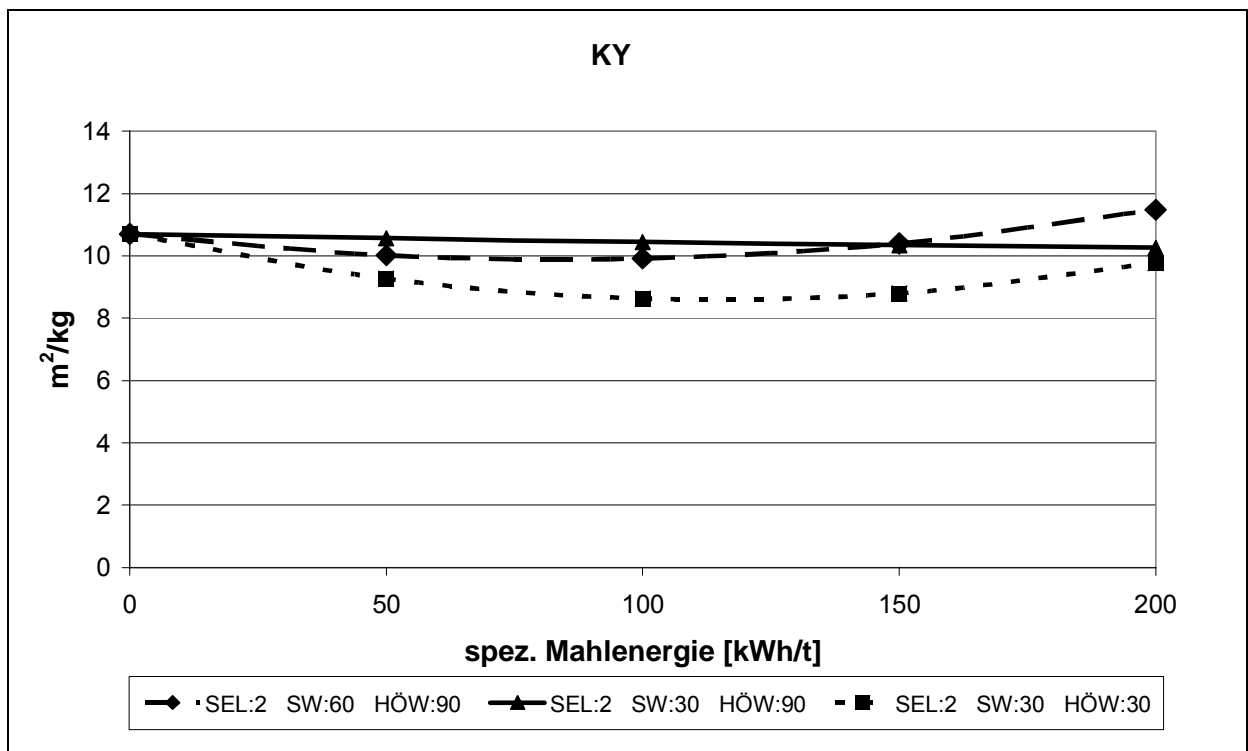


Abb. 18: Simulation der Entwicklung des Lichtabsorptionskoeffizienten K_Y

Weitere Informationen: g.meinl@ptspaper.de

Autor:

Dr. Gert Meinl

PTS Heidenau

Pirnaer Str. 37

01809 Heidenau/Sa.

Tel. 03529 - 551630

Fax 03529 - 551899

Danksagung

Das Forschungsvorhaben AiF 13476 wurde durch die Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen e.V. (AiF) Köln mit finanziellen Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Arbeit gefördert. Dafür sei an dieser Stelle gedankt.

4 Literatur

- 1 BÄR G., MEINL G.:
Entwicklung von Algorithmen zur Prognose des Mahlungsverhaltens morphologisch unterschiedlicher Zellstoffe.
[Abschlußbericht, PTS FB-04/05.](#)
- 2 ERHARD K., MEINL G.:
Der Einfluss der spezifischen Oberfläche von Faserstoffen auf die Wirkungsweise von chemischen Additiven und auf wesentliche Papiereigenschaften.
[Abschlussbericht, PTS-FB 23/03](#)
- 3 GOSH A.J., RAE C., MOORHOUSE B.:
Determination of the optimal refining strategy separate or co-refining – using a 16” double disc refiner.
Appita J., 56 (2003) Nr.7, S. 301-307