

Modellierung und Simulation eines kontinuierlichen Strömungsrohrreaktors für biomassebasierte Stoffumwandlungen

Manuel Stöckermann,^a Christopher Schmetz,^{a,b} Sahel Khanna,^a

Alexander Echtermeyer,^b Jörn Viell,^b Ronald Gebhardt,^a

a) Aachener Verfahrenstechnik – Soft Matter Process Engineering (AVT.SMP),

b) Aachener Verfahrenstechnik – Systemverfahrenstechnik (AVT.SVT)

RWTH Aachen University, Forckenbeckstraße 51, 52074 Aachen, Germany

Aufgrund der Verknappung fossiler Rohstoffe und deren ungünstiger CO₂-Bilanz gewinnt die Nutzung von lignocellulose-basierter Biomasse für den Energiesektor und die chemische Industrie immer mehr an Bedeutung. Als Reaktionsprodukt der Lignocellulose ist Lävulinsäure von besonderem Interesse, da sie in eine Vielzahl von organischen Basismolekülen umgesetzt werden kann, die aktuell aus fossilen Rohstoffen hergestellt werden (Bozell und Petersen 2010; Werpy und Petersen 2004). Ein erster Schritt zur Verwendung von Biomasse ist der Aufschluss in die Bestandteile Cellulose, Hemicellulose und Lignin (Sun et al. 2004). Reaktionsmechanismen und Kinetiken für die Umwandlung von Cellulose zu Lävulinsäure wurden von (Dussan et al. 2013) veröffentlicht. Als unerwünschtes Nebenprodukt entstehen dabei sog. Humine (Kang et al. 2018).

Im Rahmen des BMBF-Projekts ContiHighSolid wird die kontinuierliche, säure-katalysierte Umwandlung von hohen Massenanteilen Cellulose in einem Strömungsrohrreaktor untersucht. Mit Hilfe von Computational Fluid Dynamics (CFD) Simulationen können dabei Vorhersagen über die ortsbezogene Bildung von Huminen gemacht werden (Zhang et al. 2018), die sich als unerwünschtes Nebenprodukt aus Cellulose, Glucose und Hydroxymethylfurfural bilden (Tsilomelekis et al. 2016). Diese schwarzen, teerartigen Partikel lagern sich während der Reaktion an Oberflächen wie Reaktorwänden oder Messsonden ab. Sie erschweren so Wärmeübergang, Strömungsführung und Prozessüberwachung und verringern die Ausbeute und Wirtschaftlichkeit der Reaktion. Ziel dieser Untersuchung ist es, die Abbaukinetik der Cellulose nach (Dussan et al. 2013) im Strömungsfeld zu simulieren, um 1. die Konzentration der chemischen Komponenten räumlich und zeitlich im Strömungsrohrreaktor aufzulösen und 2. den Einfluss der unerwünschten Humine zu identifizieren.

Es bildet sich ein Strömungskanal aufgrund der unreaktierten Cellulose in der Kühlstrecke aus. Eine Variation des Temperaturprofils im Reaktor hat gezeigt, dass eine niedrige Reaktionstemperatur von 150 °C die Ausbeute im Reaktor auf 39,6 % erhöht, da die Huminbildung verringert wird. Gegenwärtig wird die Simulation auf Zweiphasigkeit erweitert, um den Flüssig-Fest-Übergang bei der Deckschichtbildung realitätsnäher abzubilden.

Parallel zur Simulation werden die Ergebnisse experimentell in einem Strömungsrohrreaktor in den angegebenen Dimensionen validiert. Um die Genauigkeit der Simulation zu erhöhen, werden gegenwärtig scherratenabhängige Messungen in einer rheo-optischen Zelle durchgeführt. Für die Strömung ist der Einfluss der Stoffdaten signifikant, da die Viskosität durch den Abbau von Cellulose stark variiert. Entsprechende Stoffwerte werden gegenwärtig experimentell erfasst.

Literaturverzeichnis

- Bozell, Joseph J.; Petersen, Gene R. (2010): *Green Chemistry* 12 (4), S. 539–554.
- Christopher Schmetz (2019): Modellierung und Simulation eines kontinuierlichen Strömungsrohrreaktors für biomassebasierte Stoffumwandlungen. Masterarbeit. RWTH Aachen University, Aachen. Aachener Verfahrenstechnik.
- Dussan, K.; Girisuta, B.; Haverty, D.; Leahy, J. J.; Hayes, M. H. B. (2013): *Bioresource technology* 149, S. 216–224.
- Kang, Shimin; Fu, Jinxia; Zhang, Gang (2018): *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 94, S. 340–362.
- Sun, J.X; Sun, X.F; Zhao, H.; Sun, R.C (2004): *Polymer Degradation and Stability* 84 (2), S. 331–339.
- Tsilomelekis, George; Orella, Michael J.; Lin, Zhexi; Cheng, Ziwei; Zheng, Weiqing; Nikolakis, Vladimiro; Vlachos, Dionisios G. (2016): *Green Chem.* 18 (7), S. 1983–1993.
- Werpy, T.; Petersen, G. (2004): Top Value Added Chemicals from Biomass: Volume I -- Results of Screening for Potential Candidates from Sugars and Synthesis Gas.
- Zhang, Xin; Liu, Hui; Samb, Amar; Wang, Guofeng (2018): *Chinese Journal of Chemical Engineering* 26 (6), S. 1340–1349.