

Väitöstiedote

Väitös 23.03.2021

Uusi mallinnustyökalu tukemaan metsäteollisuuden kestävien prosessien suunnittelua

Väitöskirjan nimi	Alkalisen sellunkeittoprosessin ilmiöperustainen mallinnus
Väitöskirjan sisältö	<p>Metsäteollisuus on Suomen toiseksi suurin teollisuudenala. Sen tärkein tuote on kemiallinen massa eli sellu, jota tuotetaan vuosittain yli 8 miljoonaa tonnia. Kansainväliset kulutustottumukset ja ympäristönsuojelumääräykset pakottavat metsäteollisuuden suuriin muutoksiin. Perinteisiä sellu- ja paperitehtaita muutetaan biojalostamoiksi, joissa biotuotteita ja -energiaa valmistetaan ilman fossiilisia polttoaineita.</p> <p>Sulfaattikeitto on tärkein sellunvalmistusmenetelmä. Puuhaketta kuumennetaan natriumhydroksidin ja -sulfidin vesiliuoksessa. Prosessi aiheuttaa laajamittaisia reaktioita puun komponenteissa: valtaosa ligniinistä, n. 50 % hemiselluloosista ja vähäinen osa selluloosasta liukenee. Jäljelle jäävä kiinteä aines on sulfaattisellua, lujuudesta tunnettua kemiallista massaa.</p> <p>Mallinnusta voidaan hyödyntää monissa prosessien elinkaaren vaiheissa, niin suunnittelussa kuin myös prosessin käytön aikana. Teollisten prosessien rationaalinen suunnittelu on menestyksen avain. Laskennalliset mallit auttavat tutkijoita ja insinöörejä näkemään tarkasti prosessien rajoittavat tekijät ja kriittiset parametrit. Simulointityökalut, kuten sellunkeiton mallinnus, ovat erinomaisia ja edullisia valintoja, kun halutaan kehittää, laajentaa tai optimoida uusia ideoita.</p> <p>Tämän väitöstyön tavoite oli kehittää sulfaattikeiton kokonaismalli. Tärkeimmät kemialliset reaktiot koottiin ilmiöperustaiseksi malliksi, joka auttaa uusien teollisten ideoiden kehittämistä, koska malli sisältää yksityiskohtaista tietoa niin prosessikemiasta kuin materiaalivirroistakin. Viimeksi mainittu on nykyään erityisen tärkeää: kaikki materiaalit tulee hyödyntää tuottamatta jätettä. Tämän lisäksi mallia voidaan soveltaa suoraviivaisessa reaktioiden mekanismien tutkimuksessa, koska kemialliset reaktiot on mallinnettu molekyylytasolla. Suunniteltua mallia voidaan hyödyntää täysin uusien prosessien kehittämisessä kuin myös jo olemassa olevien parantamisessa.</p>
Väitöskirjan ala	Puukemia
Väittelijä ja väittelijän yhteystiedot	Diplomi-insinööri Olesya Fearon olesya.fearon@aalto.fi
Väitöksen ajankohta	23.03.2021 klo 12
Etäväitöksen osoite	https://aalto.zoom.us/j/63585702463
Paikka	Aalto-yliopiston kemian tekniikan korkeakoulu, Biotuotteiden ja biotekniikan laitos, Neuvotteluhuone Halko (220), Vuorimiehentie 1, Espoo
Vastaväittäjä(t)	Professori Gérard Mortha, Universitetet Grenoble INP-Pagora, Ranska
Valvoja	Professori Tapani Vuorinen, Aalto-yliopiston kemian tekniikan korkeakoulu
Väitöskirjan verkko-osoite	https://aalto.doc.aalto.fi/handle/123456789/102700
Avainsanat	alkalinen keitto, mallinnus, reaktiokinetiikka, reaktiomekanismi

Press release

Defence on 23 March 2021

New modelling tool targets to help forest industry in designing sustainable processes

Title of the doctoral thesis Phenomena-based Modeling of Alkaline Pulping Processes

Content of the doctoral thesis Forest industry is the second largest industry in Finland. The production of its principal product, namely chemical pulp, is annually over 8 million tons. Global consumer trends and environmental regulations drive the forest industry through massive changes. The traditional pulp and paper mills are upgraded to fossil-free biorefineries where a wide set of bioproducts and bioenergy are produced.

Kraft pulping is the most important pulping process. Wood chips are heated in an aqueous solution of sodium hydroxide and sodium sulfide. During the process the main components of wood react extensively: majority of lignin, ~50% of hemicelluloses, and a small part of cellulose dissolve. The remaining solid material is kraft pulp, a cellulosic pulp known for its good strength.

Modelling supports different stages of the process life cycle, from planning and design to operation. Rational design of the industrial processes is the key to success. Different types of models are helping researchers and engineers to look deeper and to identify the limiting factors and the critical process parameters. Simulation tools, such as pulping models, are excellent and cheap choices for developing, scaling up and optimizing new ideas.

The objective of this dissertation was to create a comprehensive model of kraft pulping. The most important chemical reactions were combined into a phenomena-based model, which can support new ideas in the industry through detailed knowledge on the process chemistry, as well as composition of the process streams. This is especially important today: all streams must be utilized with zero waste formation. Moreover, the model can be utilized for straightforward studies on reaction mechanisms, as the chemical reactions are modeled on molecular scale. The designed model can provide support in developing completely new processes, as well as help improving the already existing ones.

Field of the doctoral thesis Wood Chemistry

Doctoral candidate and contact information M.Sc. (Tech.) Olesya Fearon
olesya.fearon@aalto.fi

Defence date and time 23 March 2021 at 12 o'clock

Remote defence <https://aalto.zoom.us/j/63585702463>

Place of defence Aalto University School of Chemical Engineering, Department of Bioproducts and Biosystems, meeting room Halko (220), Vuorimiehentie 1, Espoo

Opponent(s) Professor Gérard Mortha, University of Grenoble INP-Pagora, France

Custos Professor Tapani Vuorinen, Aalto University School of Chemical Engineering

Link to electronic thesis <https://aaltodoc.aalto.fi/handle/123456789/102700>

Keywords alkaline pulping, modeling, reaction kinetics, reaction mechanism