

Projektreferat

Projektreferatet får vara på max 2 sidor med 12 punkters text.

Projektreferatet ska ge en kortfattad publik beskrivning av projektet som BioInnovation kan använda som informationsmaterial. Fånga upp startpunkt, slutpunkt och planerad förflyttning i TRL, MRL och SRL från ansökan. Projektreferatet kan med fördel vara en kondenserad version av projektbeskrivningen. Projektreferatet ska kunna spridas och publiceras fritt och får inte innehålla konfidentiella eller på annat sätt känsliga uppgifter.

Projektreferatet ska skickas in till BioInnovations programkontor: info@bioinnovation.se. Om det finns bilder tillgängliga som kan illustrera projektet, t.ex. för användning på BioInnovations webb, får även dessa gärna skickas till BioInnovation.

BioInnovation behöver dessa uppgifter för projektuppföljning och statistik, och även om uppgifterna kan ha lämnats till Vinnova i samband med ansökan så får Vinnova inte lämna dem vidare till BioInnovation. Det är anledningen till att detta projektreferat efterfrågas.

Detta inledande instruktionsavsnitt ska vara kvar i dokumentet. Text i grå kursiv stil i resten av dokumentet är vägledande för förväntat innehåll och bör tas bort ur projektreferatet innan det skickas in.

Projekttitel: Flerskalig modellering av delignifieringskinetiken under massakokning; Multi scale modeling of the delignification kinetics during kraft cooking

Projektstorlek: Totalt 7,4 MKr, 4 år

Kontaktuppgifter till projektledare: malin.wohlert@angstrom.uu.se

Short summary (in English)

The kraft process is today the dominant industrial technology for the production of pulp from wood. In this process, wood chips are boiled with chemicals in order to dissolve lignin, hemicellulose and extractives. The process itself contains several complex mass transport mechanisms, where the chemicals are to be transported into the wood chip and then further into the fiber wall to react with, among other things, the lignin. The reaction products are then transported out into solution in the subsequent steps. Even if the process works, there is a need for better understanding of its governing physical and chemical mechanisms. To that end, this project aims to develop a multi-scale model, based on atomistic models of solution and fiber wall components. Solubility, structure and adhesion are examined with molecular dynamic (MD) simulations, after which the various mass transport steps are systematically examined with suitable continuum models for diffusion. With such a complete model, both troubleshooting and optimization of the process will be easier to implement.

1. Projektets bidrag till en biobaserad samhällsekonomi

Svensk skogsindustri spelar en betydande roll i den globala omställningen till en biobaserad samhällsekonomi. En viktig del av skogsindustrin är pappers- och massatillverkning där processen massakokning är central. Under kokningen sker transport av både kemikalier och restprodukter, men förståelsen för hur detta går till är fortfarande begränsad. Detta projekt syftar till att beskriva dessa masstransporter med en multiskalmodell och därmed bidra till att hela processen kan göras mer resurseffektiv, både vad gäller energianvändning och användningsgrad. Med en högre användningsgrad av råvaran kan vi låta fler träd stå kvar levande och fylla sin funktion som naturlig kolsänka.

2. Syfte och mål

Syftet är att uppnå en mer resurseffektiv delignifieringsprocess i massakoket och målet med detta projekt är att bidra med en matematisk flerskalig modell för dess delprocesser, som tar hänsyn till olika kemiska och fysikaliska fenomen på längdskalor från nanometer upp till makroskopisk skala.

3. Förväntade resultat och effekter

Ett förväntat resultat är en multiskalmodell som beskriver den komplexa delignifieringsprocessen. Modellen kommer utvecklas i flera steg och beskriva både molekylära och makroskopiska fenomen. Detta är direkt relaterat till den vanligt förekommande sulfatprocessen i massakoket. Modellen förväntas bidra till en mer resurseffektiv massakokningsprocess.

	Start	Mål
TRL	1	3
MRL	1	1
SRL	1	1

4. Innehåll och genomförande

Då delignifieringsprocessen innehåller flera komplexa steg, kommer vi fokusera på den minsta skalan först (fiberväggen) och därefter gå vidare med modellering av porsystemet i en flisbit. I samtliga delar kommer vi utgå från existerande experimentella data samt tillämpa molekylodynamiska simuleringar i kombination med kontinuumbaserade masstransportmodeller. Den doktorand som arbetar med detta projekt kommer få fundamental förståelse för massakokning samt god insikt i den industriella processen.

5. Aktörer och projektorganisation

	Företag	Institut	Akademi	Offentlig sektor
Projektledande organisation			X	

	Kvinna	Man
Projektledande person	X	

	Företag	(varav SME)	Institut	Akademi	Offentlig sektor
Antal projektparter	5			3	

Uppsala Universitet, Chalmers, KTH, Stora Enso, Södra, Valmet, Holmen, Billerud-Korsnäs

6. Varför är projektet viktigt?

Projektet är en viktig pusselbit för att skapa fysikalisk förståelse för, och därmed kunna optimera processparametrar i den viktiga delignifieringsprocessen under massakoket.