

## Bachelorarbeit / Masterarbeit

### Berechnung von Aktivitätskoeffizienten in Pyrolyseölen mittels Gruppenbeitragsmethoden

Im Rahmen der Energiewende soll Biomasse langfristig Erdöl als Kohlenstoff basierenden Energieträger ersetzen. Biomasse hat jedoch den Nachteil, dass aufgrund ihrer relativ niedrigen Energiedichte ein Transport über größere Strecken nicht wirtschaftlich ist. Eine Möglichkeit dieses Problem zu umgehen, ist die Biomasse in einem ersten Schritt dezentral mittels Schnellpyrolyse zu verflüssigen und dabei die Energiedichte zu erhöhen. Hierbei wird die Biomasse unter Luftabschluss möglichst schnell erhitzt. Das entstehende Pyrolysegas wird wiederum möglichst schnell abgekühlt, wobei Pyrolyseöl auskondensiert. Dieses Verfahren wird bereits im bioliq®-Prozess am KIT Campus Nord im Pilotmaßstab umgesetzt ( <http://www.bioliq.de/> ).

Pyrolyseöle weisen einen sehr charakteristischen Geruch auf und haben aufgrund vieler unterschiedlicher funktioneller Gruppen ein stark reales Verhalten. Da sie neben Wasser und Koks aus über 300 verschiedenen organischen Verbindungen bestehen, ist eine Stoffdatenberechnung nur mit einer vereinfachten Modellmischung aus Schlüsselkomponenten möglich. Um alle funktionellen Gruppen und die verschiedenen Siedebereiche ausreichend genau zu beschreiben wird eine Modellmischung aus mindestens 11 Stoffen angenommen. Für klassische Zustandsgleichungen, wie z.B. Peng-Robinson, werden jedoch experimentell bestimmte binäre Mischungsparameter benötigt. Eine Alternative sind Zustandsgleichungen, die auf dem Gruppenbeitragsprinzip beruhen. Hierbei werden Moleküle aus vordefinierten Gruppen aufgebaut, deren kombinierte Beiträge die Stoffeigenschaften bestimmen. Da für eine große Anzahl von Gruppen bereits binäre Wechselparameter bestimmt wurden, können auch reale Mischungen gut beschreiben werden.

Inhalt der Arbeit ist es mit Hilfe der Gruppenbeitragsmethode Modified UNIFAC ( <http://unifac.ddbst.de/> ) und einer vorgegeben Modellmischung die physikalischen Eigenschaften von Pyrolyseölen zu berechnen. Dafür sollen Stoffdatenfunktionen implementiert werden, die direkt in das am ITTK entwickelte Simulationstool AerCoDe eingebunden werden können. Schwerpunkt der Arbeit ist dabei die Definition der Schlüsselkomponenten durch die einzelnen Gruppen und die Berechnung der Aktivitätskoeffizienten. Hierzu sollen verschieden Ansätze verglichen und nach Möglichkeit mit experimentellen Daten validiert werden. Im Falle einer Masterarbeit sollen weitere Stoffparameter wie Dichte und Viskosität bestimmt werden.

|                           |  |
|---------------------------|--|
| <b>Beginn der Arbeit:</b> | 01.04.2015   |
| <b>Art der Arbeit:</b>    | theoretisch  |
| <b>Aufgabensteller:</b>   | Prof. Dr.-Ing. K. Schaber                                      |
| <b>Betreuer:</b>          | Dipl.-Ing. Yannik Ille<br>Dipl.-Math. techn. Philipp Hamberger |

**Kontakt:**

yannik.ille@kit.edu