

Forslag til hovedoppgaver våren 2003

ved

Institutt for kjemisk prosessteknologi

Fagområder/-grupper:

1. Katalyse og petrokjemi
2. Polymerkjemi
3. Prosess-systemteknikk
4. Reaktorteknologi
5. Separasjons- og renseteknikk
6. Trefoedling

Katalyse og petrokjemi

EAB: **Professor Edd A. Blekkan**

EAB-1. Prosessvariablers innvirkning på polysulfidproduksjon ved katalytisk oksidasjon av hvitlut (Reservert: Ida Vassmo Andersen)

Prosjektarbeidet utført høsten 2002 viste at polysulfid (PS) produsert etter Moxy-prosessen vil på nåværende tidspunkt være best egnet til fremstilling av PS, og det videre arbeid i diplomarbeidet vil derfor omhandle denne prosessen.

Planen er å bygge Moxy i labskala etter en modell som eksisterer på Peterson Moss. En optimalisering av den katalytiske oksidasjonen ved bruk av hvitlut fra Tofte ville vært interessant. Det vil være aktuelt å se på innvirkningen av ulike prosessvariabler som temperatur, luft/oksygen mengder, trykk osv. Hvordan kan man minke dannelsen av tiosulfat? Hvilken innvirkning av hvitlutens sammensetning/sulfidinnhold ?

Södra Cell Tofte skal fatte en avgjørelse i mai 2003 om videre arbeid med prosjektet og en foreløpig konklusjon om laboratoriearbeidet vil derfor være klar innen dette, mens hovedrapporten blir klar juni 2003. Det videre prosjektet er planlagt å starte på Tofte høsten 2003 og med bygging av anlegget fra 2004. Oppgaven vil derfor være nært tilknyttet bedriftene Peterson Linerboard, Moss og Södra Cell, Tofte.

Medveileder: dr.ing. student David Vaaler

EAB-2 Karakterisering av surhet på faste overflater. (Oppgaven er reservert Espen Standal Wangen)

Oppgaven er en eksperimentell undersøkelse av surhet på faste katalysatorer som f.eks. zeolitter, sulfatert zirkonia og andre faste katalysatormaterialer med sure egenskaper. Teknikker som skal benyttes er bl.a. adsorpsjons-/desorpsjonsstudier av ammoniakk og andre baser.
Faglærer. Professor Edd A. Blekkan, medveileder: Dr.ing. student Thomas Løften

AH: **Professor Anders Holmen**

AH-1 Propan til hydrogen i trinnvise katalytiske reaksjoner. (Oppgaven er reservert for Kristin Herder Kaggerud).

AH-2 Betydning av bæreren for koboltbaserte Fischer-Tropsch katalysatorer. (Oppgaven er reservert for Øyvind Borg).

AH-3 Katalytisk dehydrogenering av etan. (Oppgaven er reservert for Kenneth Bruer)

AH-4 Katalysatorer for framstilling av hydrogen fra metanol for bruk i brenselceller (Oppgaven er reservert for Cathrine Bræin Nilsen)

Polymerkjemi

AB: **Professor Arvid Berge**

AB-1 Mikroinnkapsling av dråper i polymerskall.

Mikroinnkapsling (Microencapsulation) er en prosess der små mengder gass, væske eller faste aktive ingredienser pakkes inn i et annet materiale i den hensikt å beskytte den aktive agens mot omgivelsene. Slike kapsler som kan være av størrelseorden fra en um (eller mindre) og opp til flere millimeter avgir sitt innhold på et senere tidspunkt på en måte som er tilpasset anvendelsen.

Kapselveggen kan brytes mekanisk, løses opp, smeltes, eller det kan skje en diffusjon gjennom veggen eventuelt etter at den først starter å degradere.

Anvendelsesområdet kan være i "slow release" medisiner, innpakking av enzymer i vaskemidler, fargestoffer i kopipapir, parfyme/luktstoffer, landbrukskjemikalier etc.

For å studere prosessen har vi tenkt å benytte dråper i mikronområdet, fortrinnsvis monodisperse systemer. Polymerskall legges på ved polymerisasjonsprosess, eller ved utfelling fra polymerløsning.

Veiledere: forskningssjef Ruth Schmid, SINTEF Polymer

AB-2 Innføring av elektrisk ledende polymerer i partikler.

En vil fremstille partikler av polyanilin eller også legge et skall av nevnte polymer på ferdige polymerpartikler. Monodisperse partikler vil være et egnet modellsystem der en lett kan følge fremstilling/polymerisasjon i lysmikroskop. Elektrisk ledningsevne bestemmes ved motstandsmålinger på små volumer (pakninger) av tørre partikler. Ledningsevnen søkes forbedret ved å benytte kjente dopingteknikker for ledende polymerer. Anvendelsesområdet vil være innen ulike former av mikroelektronikk og som antistatika.

Det er tidligere utført en hovedoppgave der en innførte polypyrrol som ledende polymer i visse typer monodisperse partikler.

Veileder: Forsker Heidi Johnsen, SINTEF Polymer

AB-3 Modifisering av silikon-overflater ved hjelp av plasmabehandling.

Polydimetylsiloksanbaserte elastomere er mye benyttet innen biomedisin. Det er ønskelig å modifisere overflaten på denne polymeren for å forbedre dens egenskaper, for eksempel å hindre bakterievekst og infeksjoner. Denne oppgaven vil være et ledd i dette arbeidet, og bestå i å innføre reaktive grupper ved hjelp av plasmabehandling, deretter belegging av polymere filmer og karakterisering av disse.

Veiledere: Per Stenstad og Heidi Johnsen SINTEF Polymer

AB-3 Undersøkelse over diffusjonshastighet av bacteriociner i polymergeler.

Inkorporering av konserveringsmidler i emballasjen er et alternativ til tilsetning direkte i næringsmiddelet. Det innebærer bl.a. at det kan benyttes lavere mengder enn om det skulle tilsettes til matvaren. Konserveringsmidler i emballasjen kan tilføres matvaren ved langsom frigivelse. Denne undersøkelsen kan gi viktig informasjon som kan benyttes til å regulere frigivelsen av konserveringsmidler til matvarer.

Veileder: Per Stenstad, SINTEF Polymer

PCM: **Professor Preben C. Mørk**

PCM-1 Dataprogram for beregning av midlere radikalantall pr partikkel ved bidispers seedpolymerisasjon med oljeløselig initiator.

Kvalifikasjoner / forutsetninger.

Kjennskap til programmering og bruk av iterative prosedyrer.

Beskrivelse av oppgaven

De midlere radikalantall pr partikkel i et bidisperst system er bestemt av flere ulike reaksjoner og transportprosesser. En probabilistisk analyse av den stasjonære tilstand for systemer initiert av oljeløselige initiatorer leder til 3. ordens rekursjonsformler (i motsetning til de lettere løsbare 2.ordens likninger for vannløselige initiatorer). Disse 3. ordens uttrykk må løses med konfluente hypergeometriske Kummerfunksjoner. Løsningen på rekursjonsformlene foreligger. De inneholder Kummerfunksjoner og gir radikalantallet i partikler med ulik diameter i form av implisitte uttrykk som inneholder en rekke dimensjonsløse variable. Iterasjonsprosedyrer er nødvendig for å beregne tallverdier for gitte sett av eksperimentelle variable. Oppgaven går ut på å utarbeide et dataprogram som beregner midlere radikalantall som funksjon av initiator-konsentrasjonen for variende verdier av de øvrige parametere.

ER: **Professor II Erling Rytter**

ER-1 Heterogeniserte katalysatorer for polymerisering av eten.
(Oppgaven er reservert Stian Engebretsen.)

Hensikten med oppgaven er å kartlegge faktorer som har betydning for partikkelmorfologien ved polymerisering av eten og kopolymerisering av eten og 1-heksen. Det skal gjennomføres en komparativ studie av ulike kommersielle typer katalysator, Ziegler-Natta og metallocenbasert på ulike bærere, men med tilnærmet samme partikkelstørrelsefordeling. Viktige faktorer som bør studeres er effekten av temperatur, trykk og type løsningsmiddel. Polymerene undersøkes ved hjelp av SEM og andre relevante metoder.

Medveileder: Siw Bodil Fredriksen, Borealis/Rønningen.

ER-2 Effekt av kjedeterminering på polymerstrukturen ved eten/1-heksen kopolymerisasjon. (Oppgaven er reservert Silje Hårberg.)

Ved kopolymerisering av eten og heksen er det ønskelig å kunne kontrollere den detaljerte kjedestrukturen, f.eks. ved å kunne danne lineære blokk-kopolymere. Hensikten med oppgaven er å studere kopolymerisasjon vha nye katalysatorsystemer og katalysatorblandinger og inkluderer både selve polymeriseringen og karakterisering av produktene. Spesielt er det ønskelig å studere hvordan styrte endringer i termineringsmekanismene påvirker polymerstrukturen og en eventuell kjedeoverføring fra en site til en annen. Terminering kan styres ved for eksempel ved tilsats av hydrogen, TMA (trimethyl aluminium) og endret temperatur eller trykk.

Medveileder: Dr. student Ingvild Bruaseth.

ER-3 Polypropen med kontroll av intermolekylær struktur.

(Oppgaven er reservert Andreas Hannisdal)

Ved polymerisering av propen er det ønskelig å kunne kontrollere den detaljerte kjedestrukturen, f.eks. ved å kunne danne lineære blokk-polymere av ataktiske og isotaktiske sekvenser. Hensikten med oppgaven er å studere polymerisasjon vha nye katalysatorsystemer, spesielt med fleksible/roterende ligander, og inkluderer både selve polymeriseringen og karakterisering av produktene. Det er ønskelig å studere effekten av reaksjonsmedium, temperatur, og eventuelt kjedefragmentering vha hydrogen. Noen av katalysatorene fremskaffes av samarbeidende grupper.

Medveiledere: Dr. student Andreas Möller og dr. Richard Blom ved SINTEF/Oslo.

JOHS:Professor Johan Sjöblom

JOHS-1 Struktur og stabilitet av SiC suspensjoner for anvendelse innenfor produksjon av solcellepanel

Solcellepanel fremstilles fra tynne silisiumwafer som produseres i en trådsagprosess under påsprøyting av en SiC suspensjon. Denne oppgaven vil fokusere på utvikling og testing av nye og mer miljøvennlige suspensjoner enn de som benyttes idag. Samarbeidspartner: ScanWafer

Utføres ved Ugelstadlaboratoriet

Veileder: Post.doc. Gisle Øye

JOHS-2 Kontrollert oksidering av asfaltener og betydningen av overflateegenskapene for emulsjonsstabilitet

Ved prosessering av olje dannes ofte vann-i-olje emulsjoner (w/o) som et resultat av trykkfall og turbulens i rørledninger. Emulsjonsstabiliteten bestemmes hovedsakelig av asfaltener og resiner, som er naturlige overflateaktive komponenter i råoljen. Distribusjonen av polare grupper på asfaltenene er en viktig parameter med tanke på emulsjonsstabilitet, skumstabilitet og inversjonsegenskaper. Fokuset i oppgaven vil være på anvendelse av plasmakjemiske teknikker for å kontrollere overflatepolariteten til asfaltener, og videre studere hvordan polariteten påvirker emulsjonsstabiliteten. Asfaltenene vil blant annet karakteriseres ved hjelp av kontaktvinkel målinger og Langmuir film egenskaper. Samarbeidspartnere: Statoil, Norsk Hydro, TotalFinaElf og ABB

Utføres ved Ugelstadlaboratoriet

Veileder: Post.doc. Gisle Øye

JOHS-3 Fremstilling og karakterisering av katalytiske materialer og bærere

Heterogen katalyse er viktig med tanke på en miljøvennlig utnyttelse av olje- og gass reservene innenfor kjemisk industri. Katalysatorer består vanligvis av metaller eller metalloksider, og målet med denne oppgaven er å gi økt fundamental innsikt innen fremstilling av slike nanostrukturerte materialer. Micellære templat vil benyttes for å kontrollere strukturen (porestørrelse, partikkelstørrelse osv.) til materialene, og våtkjemiske og plasmakjemiske metoder vil benyttes til å kontrollere overflateegenskapene. Samarbeidspartnere: Katalysegruppen ved NTNU og SINTEF kjemi.

Utføres ved Ugelstadlaboratoriet

Veileder: Post.doc. Gisle Øye

JOHS-4 Fysikalsk-kjemiske egenskaper for naturlige naftensyrer og korresponderende modellforbindelser i olje og vann system

Formålet med oppgaven er å øke forståelsen av molekylære egenskaper til naturlige og syntetiserte naftensyrer, samt korresponderende naftenater.

Bakgrunnen for prosjektet er den stadig økende utvinningen av sure råoljer, også i Nordsjøen. Syntetiserte og naturlige naftensyrer og deres salter vil bli karakterisert med hensyn på fundamentale fysikalsk-kjemiske egenskaper i vann og olje. Dette vil omfatte micelledannelse, fordeling mellom olje og vann faser, utfelling av metallsalter, egenskaper med hensyn til filmdannelse, faselikevekter (inkludert dannelse av flytende krystallinske faser), adsorpsjon til faste faser og evnen til å stabilisere vann-i-olje og olje-i-vann emulsjoner. Samarbeidspartner: Statoil
Utføres ved Ugelstadlaboratoriet
Veileder: Post.doc. Gisle Øye

JOHS-5. Isolasjon og tekniske anvendelser av naftensyrer

Produksjon av sure råoljer (inneholder naftensyrer) blir stadig mer aktuelt også innen oljeutvinningen i Nordsjøen. Denne typen råoljer utgjør et prosessproblem ved separasjon, transport i rørledninger og raffinering. For å kunne prosessere sure oljer kreves det teknikker for isolering (av råoljer), karakterisering og oppgradering. Oppgaven vil omhandle disse tre teknikkene, samt komme med forslag til tekniske anvendelser av produktene i syre- eller saltform.

Samarbeidspartner: Statoil
Utføres ved : Ugelstadlaboratoriet
Veileder: Post.doc. Gisle Øye

Prosess-systemteknikk

THz: Professor Terje Hertzberg

THz1 Parameterestimering og forsøksplanlegging ved on-line identifisering av prosessmodeller.

Oppgave med Borealis.

Ved on-line identifisering av prosessmodeller er en viktig problemstilling å vite om prosessen er tilstrekkelig eksitert, dvs. utsatt for endringer i manipulerbare variable og forstyrrelser, slik at modellen kan identifiseres. Målsetningen med oppgaven er å finne metoder som sikrer at prosessen er eksitert slik at en oppnår nok informasjon til at modellen kan identifiseres. Det er samtidig viktig å ta hensyn til at prosessen ikke utsettes for uakseptable forstyrrelser som følge av eksitasjonen. Dataverktøy som skal benyttes er MATLAB.

Borealis har stilt til rådighet forskjellige datasett og forslag til modeller som skal benyttes innledningsvis hvor oppgaven blir å undersøke identifiserbarhet av parametrene i modellene med de gitte datasett. Modellene skal så brukes til å generere forslag til prosesspådrag som gir god identifisering av utvalgte parametre.

Oppgaven krever interesse for forsøksplanlegging/statistikk og prosessdynamikk.

Faglig kontakt ved Borealis: Kristian Helland

Oppgaven utføres ved NTNU og er en videreføring av tilsvarende oppgave høsten 2000.

THz2 Modelltilpassing når alle variable er beheftet med feil.

I vanlig regresjonsanalyse, kurvetilpassing og modell-tilpassing er de fleste metodene for bestemmelse av parametrene basert på at kun de avhengige variable er beheftet med "feil". I mange situasjoner blir imidlertid alle variable bestemt eksperimentelt og således belagt med målefeil.

Oppgaven går ut på å utvikle et MATLAB-program for parameterestimering i en generell modell hvor alle variable er beheftet med feil. Et litteraturstudie vil gi en oversikt over alternative metoder og noen av disse skal prøves ut på enkle problemer hvor man vil generere "data" ved simulering fra kjente modeller hvor det legges inn tilfeldig feil i variablene som benyttes til etterfølgende tilpassing. En aktuell metode er basert på "vektet minste kvadrat tilpassing" hvor vektene bestemmes ved vanlig feilpropagering fra de uavhengige variable til de avhengige.

Programmet MODFIT for generell parametertilpassing i ikke-lineære modeller finnes allerede ved instituttet, men antar feil bare i de avhengige variable. MODFIT er konvertert til MATLAB slik at en god del av rutinene herfra kan benyttes i oppgaven.

Interesse for statistikk og numeriske metoder er en fordel.

THz3. Modelltilpassing i systemer av ikke-lineære, ordinære differensial-ligninger.

Ved parameterestimering i systemer beskrevet av ordinære differensialligninger blir beregningstiden høy hvis man benytter et generelt program for modelltilpassing som f.eks MODFIT. Dette skyldes spesielt tungvint bestemmelse av Jacobi-matrisen ved pertubasjon av parametrene. Jacobi-matrisen kan imidlertid beregnes med lite ekstra "kostnader" ved å integrere "følsomhetsligningene" simultant med modellligningene. Dette ble implementert i et programsystem, COLPAR, av T. Hertzberg i FORTRAN for mange år siden. Her må brukeren i tillegg til å kode høyresiden i diffiligningene også lage en rutine for de deriverte av høyresiden mhp parametrene. I COLPAR blir differensialligningene diskretisert ved ortogonal kollokasjon og integrasjonen gjort simultant over hele "tidshorisonten".

Oppgaven går ut på å lage en moderne utgave av COLPAR i MATLAB hvor blandt annet de analytiske deriverte av høyresiden i diffiligningene genereres automatisk ved hjelp av Symbolic Toolbox eller Maple.

Innledende arbeid rundt automatisk differensiering og løsning av differensial- og sensitivitetsligningene med ortogonal kollokasjon er gjennomført i et fordypnings-prosjekt høsten 2002 (G. Aaboen).

Interesse for matematikk, numerikk og programmering er en fordel.

THz4. Reaktorberegninger i MATLAB basert på "vektede residual-metoder".

Vektete residual-metoder benyttes til løsning av partielle differenssialligninger og består av forskjellige underklasser hvor "kollokasjon" og "Galerkin" er de mest kjente. Instituttet har mottatt en MATLAB-toolbox fra University of Maryland med alle basisrutiner for "Weigheted Residual Methods". Oppgaven går ut på å sette seg inn i denne og prøve ut metodene i ved modellering og simulering av "fixed bed" reaktorer. Eksempel vil være en metanol reaktor.

Oppgaven krever interesse for modellering, numeriske metoder og programmering.

Medveileder: Magne Lysberg, Sintef kjemi.

THz5. Optimalisering av adsorber i C5 og C6 isomeriseringsanlegg på Mongstad. (Oppgaven er reservert Stein Undheim.)

I dag benyttes adsorpsjonsanlegg for separasjon av iso/normalparafiner basert på zeolitt som adsorbent. Raffinatet i disse prosessene inneholder forgrenede og sykliske isomerer som brukes til høyoktan bensin eller jet drivstoff. Målet med dette arbeidet er å optimalisere driften av anlegget på Mongstad.

Oppgaven går ut på å lage en modell av adsorberanlegget med både adsorpsjon og desorpsjon. Anlegget består av flere kolonner i parallell og arbeidet vil bestå i å benytte gPROMS til modellering og optimalisere driften av anlegget.

Medveiledere: Magne Lysberg, Sintef kjemi/Anne Hoff, Statoil.

THz6. Modelldiskriminering

Ved utvikling av mekanistiske, matematiske modeller av kjemitekniske systemer basert på eksperimentelle data er man ofte i den situasjonen at det finnes flere modellalternativer og problemet er å velge eksperimentelle betingelser som gir data som best skiller mellom modellene. Denne type forsøksplanlegging kalles "modelldiskriminering" og krever bruk av modellene for planlegging av forsøkene.

Ved instituttet finnes en generelt modelltilpassingssystem MODFIT for parameterestimering i matematiske modeller. MODFIT er nylig reimplementert i MATLAB i samarbeid med SINTEF Kjemi og systemet skal utvides til å tilby forskjellig verktøy for forsøksplanlegging hvor "modelldiskriminering" er en opsjon.

Oppgaven går ut på å lage et MATLAB program i tilknytning til MODFIT der forskjellige kriterier for modelldiskriminering prøves ut. Interesse for forsøksplanlegging og programmering (MATLAB) er en god forutsetning for oppgaven.

Thz7. Fyllestasjoner for hydrogen – optimalt design.

I samarbeid med Norsk Hydro ASA

Med bakgrunn i sin interesse for "hydrogensamfunnet", er Norsk Hydro i ferd med å bygge de første fyllestasjonene for hydrogenkjøretøyer basert på fremstilling av hydrogen ved elektrolyse av vann. Fyllestasjonene tilføres dermed bare vann og elektrisk kraft utenfra.

Ved design av slike anlegg er det en rekke parametere som har betydning for stasjonens virkemåte.

I denne diplomoppgaven skal det utvikles en metode for å finne optimalt design av stasjonene for en gitt tilstrømning av hydrogenkunder.



Veileder er Truls Gundersen, og gjennomføring av oppgaven og den faglige veiledningen vil foregå ved NTNU, Institutt for energi og prosessteknikk. Problemformulering og teknisk veiledning gis av Norsk Hydro ved Konsernforskningscenteret i Porsgrunn.

Oppgavetekst

Hydrogen fremstilles ved elektrolyse av vann, og komprimeres inn i lagertanker. Fra disse lagertankene overføres så hydrogenet til kjøretøyer med trykkforskjell som drivende kraft. Det kan være nødvendig å fylle fra flere lagertanker til ett kjøretøy. Spørsmål av følgende type skal besvares for en gitt tilstrømning av kjøretøyer:

- Finn optimalt antall lagertanker og deres størrelse samt produksjonsbehov, gitt fyllesekvensen.
- Finn optimal sekvens for tømning og fylling av lagertanker.
- Kombinasjon av 2 og 3.

Kriterium for optimaliseringen vil innbefatte investeringskostnader, arealbruk, og driftskostnader. De fri variable vil være en kombinasjon av kontinuerlige variable og heltallsstørrelser, slik at problemet skal formuleres som et MINLP- problem (=Mixed Integer Non-Linear Programming).

Kontaktperson for oppgaven er:

Audun Faanes

Tel: 3592 4021

Norsk Hydro ASA

e-mail: audun.faanes@hydro.com

Konsernforskningsenter, Postboks 2560, 3907 Porsgrunn

SiS: Professor Sigurd Skogestad

SiS-1a Modeller for "severe Slugging"

(medveileder: Espen Storkaas)

SiS-1b Stabilisering av stasjonært strømningsregime for å unngå slugging

(medveileder: Espen Storkaas)

SiS-1c Slugregulering for lange rør (i samarbeid med Statoil v/ John-Morten Godhavn)

(medveileder: Espen Storkaas)

SiS-2a Selv-optimaliserende regulering: Valg av optimale målekombinasjoner for "inferential control"

(medveileder: Vidar Alstad)

SiS-2b MPC- og selvoptimaliserende regulering anvendt på Petlyuk destillasjon

(medveiledere: Vidar Alstad og Ivar Halvorsen, SINTEF Reguleringsteknikk)

SiS-3a Modellering og MPC-regulering av destillasjonskolonner

(utføres i samarbeid med Stig Strand, Statoil F-senter og Tore Lid, Statoil Mongstad.

Opgaven planlegges delvis utført ved Statoil F-senter).

SiS-3b "Closed-loop identification for use with MPC control"

(utføres i samarbeid med Stig Strand, Statoil F-senter.

Opgaven planlegges utført ved Statoil F-senter).

SiS-4a Plantwide control av LNG-prosesser

(Planlegges utført i samarbeid med Statoil F-senter v/ Håvard Nordhus)

SiS-4b Dynamisk modellering og simulering av LNG-prosesser.

(Planlegges utført i samarbeid med Statoil F-senter v/ Ingvild L. Sperle)

SiS-4c "Plantwide control": Systematisk metode for å bygge opp basisreguleringen

(medveiledere: Marius Govatsmark og Eduardo Hori)

SiS-4d Plantwide control of a gas power plant

(medveiledere: Marius Govatsmark og Eduardo Hori)

SiS-5a Multivessel batch distillation: Energy savings by eliminating vapor bypass

(medveileder: Stathis Skouras)

- SiS-5b** **Multivessel batch distillation: Control structures for separating azeotropic mixtures**
(medveileder: Stathis Skouras)
- SiS-6** **Optimalisering og regulering av integrerte destillasjonskolonner med ulikt trykk**
(medveileder: Hilde Engelen)
- SiS-7** **Reguleringsstrukturer i biologiske metabolske nettverk**
- SiS-8** **Enkle regler for PID-tuning: Utvidelse til å dekke ustabile og svingende systemer**
- SiS-9** **Dynamisk modellering, simulering og regulering av brenselceller**

TH-W: **Førsteamanuensis Tore Haug-Warberg**

TH-W-1 **Automatisert dokumentasjon av termodynamiske modeller**
(Oppgaven er reservert Bjørn-Tore Løvfall)

Utfyllende oppgavetekst: Bruk av objekt-orientert programmering for automatiske dokumentasjon av termodynamiske modeller i LaTeX.

Bakgrunn for oppgaven: I beregningsprogrammer hvor det gjøres bruk av termodynamiske modeller er det behov for en nøyaktig dokumentasjon av a) modellens oppbygging og b) fysiske størrelser og modellparametre som inngår i modellen. Termodynamiske modeller er ofte komplekse og det ligger i sakens natur at feil i dokumentasjonen lett kan oppstå. Verdien av en slik dokumentasjon synker raskt med antall feil og det er følgelig av stor praktisk interesse at modellen er selv-dokumenterende. Dette kan gjennomføres ved at modellen implementeres som et dataobjekt hvor dokumentasjonen hentes ut som en egenskap av objektet, uten ytterligere menneskelig innsats. En objekt-orientert beskrivelse av termodynamiske modeller (skrevet i Ruby) er for tiden under utvikling ved Institutt for prosessteknologi. Det eksisterer allerede muligheter for å ta ut dokumentasjon i XML og Matlab, og et naturlig skritt videre er å utvide mulighetene til LaTeX (som er et typografverktøy spesielt egnet for matematiske modell-fremstillinger).

Innhold: Kandidaten må først utarbeide en litteraturoversikt over tilsvarende muligheter utviklet i andre programmeringsmiljøer. Han må dernest sette seg inn i de muligheter som eksisterer i LaTeX for en objekt-orientert beskrivelse av matematiske uttrykk (eng. markup languages). Det er også nødvendig at han setter seg tilstrekkelig inn i Ruby til å forstå hvordan dataobjektet er oppbygd. Avhandlingen skal inneholde minst ett konkret eksempel på en komplett termodynamisk blandingsmodell (f.eks. UNIFAC + ideell blanding + poynting faktor + varmekapasitetsintegral + standardtilstand).

Reaktorteknologi

Gruppe for reaktorteknologi/fordypningsemne reaktorteknologi

Gruppe for reaktorteknologi arbeider i videste forstand med eksperimentelle studier og modellering av kjemiske reaktorer. Eksempler på applikasjoner vi har arbeidet med er: reformerreaktorer for syntesegassproduksjon (Tjeldbergodden), fixed bed metanol-reaktor (Tjeldbergodden), slurry metanolreaktor, Fluidised Catalytic Cracker (Mongstad), Propan dehydrogeneringsreaktor (fixed bed), Slurry og fixed bed Fischer-Tropsch reaktor, avsvovlingsreaktorer, monolittreaktorer, polymerreaktorer (HDPE loopreaktor, polyolefinreaktorer og PVCreaktorer), og flere ulike bioreaktorer fra encelle protein produksjon og fermenteringsprosesser til kloakkbehandling.

I tillegg arbeider gruppen sammen med separasjonsgruppen innen fagfeltet absorpsjon med kjemisk reaksjon. Dette arbeidet er særlig rettet mot fjerning av sure komponenter fra naturgass (eks. CO_2 , H_2S) og fjerning av CO_2 fra eksos- og mellomtrykksgasser i forbindelse med utvikling av gasskraftverk med akseptable CO_2 -utslipp.

Den store bredden i applikasjonene gjør at vi samarbeider med mange andre faggrupper; grupper for petrokjemi og katalyse, polymer og overflatekjemi, separasjon, biokjemi og prosess-systemanalyse.

På eksperimentalsiden konsentrerer vi oss om studier av masse og varmeoverføring i reaktorer og beskrivelse av strømning. Spesielt arbeider vi med flerfasesystemer da dette ofte inngår i kjemiske reaktorer, og også innen separasjon. Sammen med Separasjonsgruppen arbeider vi også med måling av likevekter og kinetikk i systemer som har interesse for surgassfjerning (CO_2 og H_2S).

På modelleringssiden arbeider vi med alle typer modeller, fra tradisjonelle røretank/stempelstrømsmodeller, dispersjonsmodeller, "fenomenologiske" modeller som prøver å beskrive og predefinere strømmingen ut fra visuelle observasjoner og målinger, og til de mer komplekse strømningsmodellene (CFD) som beregner strømmingen i en gitt apparatur. I tillegg utarbeider vi modeller for absorpsjonstårn og membranapparaturer for surgassfjerning sammen med separasjonsgruppen.

Forskningsaktiviteten.

Det er i Norge i dag et stort behov for avansert forskning og bred kompetansebygging innen fagfeltene flerfase kjemisk reaktorteknologi og flerfase prosesstrømning, feks ved høytrykks gass/væskeseparasjon. Gjennom de siste 30 årene spesielt er industrien, i tillegg til sine økonomiske betingelser, stadig blitt stilt overfor krav om forbedringer i ressurs og energiutnyttelse. Dette har spesielt vært koblet til miljømessige gevinster og utslippsproblematikk. I dag så har industrien redusert sine utslipp dramatisk i forhold til bare for 20 år siden. De enkle og middels vanskelig forbedringene er utført og ny utvikling fordrer stor forskningsinnsats og høy kompetanse. Et eksempel som kan nevnes er de utfordringene man står overfor når man skal ha full undervannskomplettering av brønner med utskilling og retur av vann, og muligens separasjon av gass. Man forlanger stadig bedre selektivitet og omsetning av de kjemiske prosessene. Dette vil kunne gi store gevinster ikke minst i separasjonsprosessene før og etter reaktorene. Dette fordrer utvikling av nye katalysatorer og, ikke minst, bedre kontroll med masse og varmeoverføring og strømning i reaktorene.

For å møte disse utfordringene er det ved NTNU/SINTEF startet to forskningsprogrammer med støtte fra Norges Forskningsråd og norsk og utenlandsk industri

Det ene programmet fokuserer på eksperimentelle studier og modellering av kjemiske reaktorer og flerfase prosesser. Hovedhensikten med det andre programmet er å forbedre forståelsen av de fysiske og kjemiske prosesser som er involvert i høytrykk gass/væske separasjon for derved å skape en pålitelig basis for design og drift av sub-sea gass/væske separasjonssystemer.

Felles for begge er modellering og eksperimentelle studier av flerfase strømming i ulike geometrier og de underliggende mekanismer for dråpe/boble-dannelse ved oppbrekking, medrivning, avsetning og koalescens. Totalt skal vi ha 10 dr.gradene innen disse to prosjektene.

Nærmere opplysninger om arbeidet innen disse prosjektene er gitt på hjemmesidene: <http://www.CARPET.ntnu.no> og <http://www.HiPGaS.ntnu.no>.

Innen fjerning av CO₂ har vi et forskningsprosjekt sammen med SINTEF Kjemi. Dette prosjektet er rettet mot utvikling av nye absorpsjonsvæsker for mer økonomisk og miljøvennlig fjerning av CO₂ fra spesielt eksosgasser. Fokus vil også være på desorber-delen (stripper) av prosessen for å forsøke å få ned energiforbruket ved en ny utforming av denne.

I tillegg så arbeider vi sammen med Kværner Process Systems (KPS) og Gore for å utvikle en ny membranabsorpsjonsteknologi. Dette prosjektet er rettet mot å få ned apparaturstørrelser og -kostnader, samtidig som man får drifts- og miljøgevinster.

Vi har pr. idag 2 dr.gradene studenter innen dette fagfeltet, men vil snart ha to til.

HAJ Professor Hugo Atle Jakobsen

HAJ-1. Modellering av strømningsforhold i flerfasereaktorer.

(Oppgaven er reservert for Joanne Grundseth).

Det skal utvikles en programpakke for å beskrive strømningsforhold i flerfasereaktorer. Det tas utgangspunkt i en eksisterende programpakke (utviklet av tidligere studenter ved instituttet) som beskriver tofasestrømming i 1D og 2D for vertikale rør (en såkalt 'algebraic-slip model'). Modellen skal oppdateres ved at en vilkårlig boblestørrelsesfordeling innføres i populasjonsbalansen. Det skal så utføres simuleringer for å validere modellen mot eksisterende data for gas-vækestrømming i boblekolonner.

I neste fase skal modellen utvides til en full multifluidmodell, dvs. at vi beskriver begge fasene og interaksjonen mellom fasene eksplisitt. De nødvendige modelligningene for å beskrive systemet vil bli gitt. Hoveddelen av arbeidet vil være å implementere en numerisk algoritme for å løse disse modelligningene.

Oppgaven vil gi en innføring i fortran-programmering, noe som er meget nyttig for studenter som vurderer å arbeide innen reaktorteknologi/strømming. Videre har prosjektet mye til felles med noen av de andre oppgavene og samarbeid kan være nyttig.

Faglærer: Hugo A. Jakobsen, veileder: Carlos Durao

HAJ-2. Numerisk analyse av strømming og fasefordeling i scrubbere.

I denne oppgaven skal vi modellere et ikke-reaktivt system, luft og vann/olje. De nødvendige transportligningene for å beskrive fase- og dråpestørrelsesfordelingen i systemet vil bli gitt. Det tas utgangspunkt i en eksisterende programpakke (utviklet av tidligere studenter ved instituttet) som beskriver strømming av gassbobler i væske i 1D og 2D for vertikale rør. Modellen og programmet

skal forbedres og utvides til å kunne takle faseinversjon (en gasstrøm med dråper). Hoveddelen av arbeidet vil være å modifisere modellene for koalesens og oppbrytning. Oppgaven vil gi en innføring i fortran-programmering, noe som er meget nyttig for studenter som vurderer å arbeide innen separasjon/reaktorteknologi/strømning. Videre har prosjektet mye til felles med noen av de andre oppgavene og samarbeid kan være nyttig.

Faglærere: Hugo A. Jakobsen og Hallvard F. Svendsen

HAI-3. Parallellisering og/eller optimalisering av programmer for numerisk analyse av strømning og fasefordeling.

I denne oppgaven skal vi forsøke å redusere regnetiden for det eksisterende programmet beskrevet under oppgavene HAI 1-2. Det tas altså utgangspunkt i en eksisterende programpakke (parallel versjon) som beskriver enfasestrømning i 1D og 2D for vertikale rør. En skal forsøke å forbedre implementasjonen av løsningsalgoritmene slik at tidsforbruket reduseres, eventuelt også parallellisere nye moduler i programmet. Programmet skal kjøres på NOTURs superdatamaskiner.

Parallelt med dette prosjektet vil en eller flere studenter fra industriell matematikk jobbe med å optimalisere en liknende modell for flerfase kjemiske reaktorer. Samarbeid kunne være nyttig og ønskelig.

Faglærer: Hugo A. Jakobsen, veiledere: Håvard Lindborg og Carlos Durao

HAI-4. Statistisk teori for å beskrive turbulens i reaktorer.

Det er ingen som til nå helt har forstått hva turbulens egentlig er, selv om en har en viss oversikt over de viktigste egenskapene til turbulente strømninger. Likevel, siden en finner svært mange turbulente strømninger i kjemisk industri og i naturen rundt oss, er det ønskelig at en i det minste kan beskrive effekten av disse fenomenene. Et konsept som har vært forsøkt brukt er basert på statistisk teori.

I dette prosjektet skal vi sette oss inn i denne teorien, utrede hvordan denne kan anvendes for bedre å kunne forstå de fysiske prosessene som foregår i dispergert flerfasestrømning, samt finne ut hvordan vi kan beregne de viktigste størrelsene fra tilgjengelige måledata for å validere teorien. Det er også viktig å spesifisere sterke og svake sider ved dette konseptet.

Faglærere: Hugo A. Jakobsen og Hallvard F. Svendsen

HAI-5. Numerisk analyse av strømning og varmetransport i scrubbere.

I denne oppgaven skal vi ta utgangspunkt i en termodynamisk ikke-ideell gassblanding, naturgass med litt vanndamp under høye trykk i scrubbere. Oppgaven består i å utlede og implementere de nødvendige modellligningene for å beskrive varmetransport og transport av kjemiske komponenter i dette systemet. Modellen skal kunne beskrive kondensasjon av gassblandingen og fordampning av eventuelle dråper.

Det tas utgangspunkt i to eksisterende programpakker, en som beskriver strømningsforholdene i separatoren og en annen programpakke som beskriver termodynamikken i systemet. Modellen og programmet skal dokumenteres, utvides og forbedres.

Oppgaven vil gi en innføring i fortranprogrammering, noe som er meget nyttig for studenter som vurderer å arbeide innen reaktorteknologi/separasjonsteknologi/strømning. Videre har prosjektet mye til felles med noen av de andre oppgavene og samarbeid kan være nyttig.

Faglærer: Hugo A. Jakobsen og Jørgen Løvland

HAI-6. Modellering av masse- og varmetransport i kjemiske reaktorer.

Forelesningene i fag SIK 2053, reaktorteknologi, er under kontinuerlig omlegging. Den delen av faget som omhandler *fixed bed reaktorer* skal forbedres ved at teorien fremlegges med økt vekt på praktiske eksempler.

Oppgaven vil gå ut på å lage enkle eksempler på reaktormodellering og simulering ved bruk av matlab og fortran. Vi skal se på to kjemiske systemer som utgjør en viktig del av STATOILs anlegg på Tjeldbergodden, produksjon av syntesegass og metanol. De nødvendige modelligningene som beskriver systemene vil bli oppgitt, og det tas utgangspunkt i eksisterende programpakker utviklet av tidligere studenter ved instituttet. Modellen skal utvides til en såkalt heterogen, todimensjonal dispersjonsmodell med både aksiell og radiell dispersjon.

Prosjektet vil gi en innføring i fortranprogrammering, noe som er meget nyttig for studenter som vurderer å arbeide innen reaktorteknologi/strømning.

Faglærer: Hugo A. Jakobsen

HAI-7. Modellering og numerisk analyse av boble-/dråpekollisjon.

For å kunne optimalisere faseseparasjonsprosessen i scrubbere, og masseoverføringen mellom fasene i flerfasereaktorer, er det viktig å forstå mekanismene som styrer boble-/dråpekoalesens. De tre viktigste trinnene i koalesensprosessen er partikkelkollisjon, filmdrenering, og brytning av partikkeloverflatene.

I denne oppgaven skal vi modellere kollisjon mellom fluidpartikler. De nødvendige modelligningene for å beskrive systemet vil bli gitt. Det tas utgangspunkt i en eksisterende programpakke (utviklet av en Dr. ing. student ved instituttet) som beskriver kollisjon mellom to partikler som beveger seg rett mot hverandre. Vi skal prøve å finne ut hvilke variable som kan påvirke utfallet av disse kollisjonene. Modellen og programmet skal utvides og forbedres.

Parallelt med arbeidet med å modellere partikkelkollisjonene vil det bli utført eksperimentelle forsøk for å validere modellen. Om ønskelig kan det være aktuelt å delta på den eksperimentelle siden også.

Faglærere: Hugo A. Jakobsen og Hallvard F. Svendsen, veileder: Cecilie Gotaas

HAI-8. Simulering av CO₂-absorpsjon gjennom en membran.

Ved instituttet er det utviklet en modell for å beskrive CO₂-absorpsjon gjennom en membran. Modelligningene er forsøkt løst både ved hjelp av 'finite volume' FV- og 'finite difference' FD metoder. FD metoden er implementert i matlab og konvergerer rimelig raskt, men det er problemer knyttet til massebevarelse. FV algoritmen er implementert i et fortranprogram og sikrer at massen er bevart i systemet, men løsningen av det resulterende sett av algebraiske ligninger er relativt

tidkrevende. Oppgaven går ut på å optimalisere FV løseren og evaluere fordeler og ulemper ved de to løsningsalgoritmene, både for uniforme og ikke-uniforme grid.

Prosjektet vil gi en innføring i matlab og i fortranprogrammering, noe som er nyttig for studenter som vurderer å arbeide innen separasjonsteknologi/reaktorteknologi/strømning. Videre har arbeidet mye til felles med noen av de andre oppgavene og samarbeid kan være nyttig.

Faglærere: Hugo A. Jakobsen og Hallvard F. Svendsen

HSv **Professor Hallvard Svendsen**

HSv-1. Eksperimentelle studier av strømning og varmeoverføring i røretank.

Innenfor forskningsprogrammet REPP (Reaktorteknologi innen petro- og polymer-industrien) har vi, i samarbeid med Høgskolen i Telemark(HIT), en dr.ing-student som arbeider med strømningsmålinger og varmeoverføringsstudier i røretanker. Dette er et program som er støttet av NFR sammen med Statoil, Norsk Hydro, Reichold, Dyno og Borealis. Vi har alt eksperimentalutstyret på plass og dr.ing kandidaten kjører nå forsøk. Vi ønsker imidlertid å utvide med videre forsøk, spesielt i høyviskøse og ikke-Newtonske systemer. Oppgave vil kunne vinkles mot den strømningsmessige delen, med målinger basert på LDV (Laser-Doppler-Velosimetri), eller mot varmeoverføringssiden. I tillegg til målinger er det også meningen å utvikle nye forbedrede korrelasjoner. Oppgaven vil kunne tas av to studenter, som gjør hver sin del.

Faglærer: Hallvard Svendsen, veileder: Rune Engeskaug

HSv-2. CO₂ absorpsjon: Modellering av likevekter.

For å få til en optimalisering av absorpsjonstårn og best mulig enrgiutnyttelse, er det nødvendig med stadig bedre modeller for likevekter og kinetikk i de kjemiske systemene som brukes. Man snakker i dag om såkalte "rigorøse" modeller som ikke bare modellerer f. eks. partialtrykket av CO₂ over en løsning som inneholder en gitt mengde CO₂, men også modeller som er aktivitetskoeffisientbaserte og som predikterer fordelingen av de ulike kjemiske komponentene, ioniske så vel som ikke ioniske, som funksjon av CO₂-innhold og temperatur. Vi har laget en slik modell for systemet MDEA (Metyl-dietanolamin) - CO₂ -vann. Dette ønsker vi å forbedre og utvide til også å omfatte en hastighetspromotor, piperazin. Prosjekt oppgaven vil sannsynligvis gå med til å sette seg inn i den eksisterende modellen for MDEA, og så formulere den utvidete modellen, eventuelt å gjøre forbedringer på MDEA-modellen.

Faglærer: Hallvard F. Svendsen og Jørgen Løvland, veiledere: Jana Poplsteinova

HSv-3. CO₂ absorpsjon: Likevekt- og kinetikkmålinger. NB NB

Som nevnt i forrige oppgave så er det et stort behov for bedre likevekts og kinetikkm modeller for ulike absorpsjonssystemer. For validering av disse modellene trenger vi gode eksperimentelle data. Vi har ved instituttet tre forskjellige likevektsapparaturer for ulike trykk og temperaturområder, og tre ulike kinetikapparaturer. En dr.ingkandidat arbeider på en membranabsorberapparat for kinetikkmålinger og det er der behov for å utvide forsøksmassen. Videre er det stort behov for likevektemålinger. Dette innebærer at det her vil være rom for flere enn én diplomoppgave. Modellering av likevektene vil også være aktuelt. Alle apparaturene er operative og assistanse fra SINTEF kan også påregnes.

Faglærer: Hallvard F. Svendsen, Veileder: Karl Anders Hoff og Olav Juliussen

HSv-4. Modellering av Fischer-Tropsch prosess i Slurry Bobblekolonner.

(Oppgaven er reservert Jarle Kirkeby Ruud)

Slurry bobblekolonner har svært gode egenskaper når det gjelder varmetransport og brukes derfor ofte i sterkt endo- eller eksoterme prosesser.

Oppgaven, som er en videreføring av et prosjekt i høst, har som formål å beskrive en Fischer-Tropsch prosess (produksjon av hydrokarboner fra syntesegass) i en reaktor med 2-fase gass/væske flow gjennom en slurry bobblekolonne. Modellene som skal brukes er såkalte fenomenologiske modeller hvor hovedfysikken i reaktoren er beskrevet halvempirisk. Det foreligger allerede en programstruktur og hoveddelen av oppgaven vil gå på å få implementert reaksjon i denne. Denne oppgaven er gitt i samarbeid med STATOIL.

Faglærer: Hallvard F. Svendsen, medveiledere: Bente Sannæs og Magne Lysberg

HSv-5. Modellering av reaktor for autoterm dehydrogenering av alkaner (ADH).

(Oppgaven er forbeholdt Hans Kristian Rusten)

De lette olefinene eten og propen utgjør det desidert viktigste råstoffet for polymerindustrien. Disse olefinene fremstilles i hovedsak ved steam cracking av lette alkaner (NGL og nafta). En alternativ prosess for å lage olefiner er ved direkte dehydrogenering av etan og propan, og det eksisterer kommersielle prosesser for dette. Det er katalytiske prosesser som går ved relativt høy temperatur og lavt trykk. Dehydrogenering er en sterkt endoterm prosess, og utfordringen ved disse prosessene er å bringe varme inn til reaksjonssonen. I de fleste av de eksisterende prosessene skjer dette ved å tilføre varme gjennom reaktorveggen, eller ved å varme opp katalysatoren eksternt eller internt i reaktoren.

En alternativ måte å gjøre dette på er å gjennomføre eksoterme forbrenningsreaksjoner inne i reaktoren, parallelt med dehydrogeneringsreaksjonene. På denne måten er det mulig å operere reaktorene termisk nøytralt. Det er kjent at ved å tilføre oksygen og forbrenne halvparten av hydrogenet som dannes ved dehydrogeneringen vil man oppnå den ønskede termiske nøytralitet.

Oppgaven går ut på å videreutvikle en modell påbegynt i høst for ADH reaktoren.

Denne oppgaven er gitt i samarbeid med STATOIL.

Faglærer: Hallvard F. Svendsen, veiledere: Erling Rytter, Arne Grislingås

HSv-6. Reaktor "Toolbox".

Vi ønsker å etablere en "verktøykasse" av reaktormodeller og tilhørende rutiner for beregning av fysikalske-, termodynamiske- og transportdata. Dette vil forenkle arbeidet med nye reaktormodeller og bruken av dem på nye systemer.

Verktøykassen vil bestå av små enkeltmoduler som gjør bestemte oppgaver, f. eks. beregner viskositet, dispersjonskoeffisienter, el.. Disse må være standardiserte i grensesnitt og struktur slik at de lett kan benyttes i nye sammenhenger. Vi vil starte med enkle allerede eksisterende reaktor-

modeller og hovedoppgaven vil ligge på å få til en mest mulig funksjonell dataflyt i programmet. Programspråk vil være Matlab og den som tar oppgaven bør ha interesse for data og datastrukturer.

Faglærer: Hallvard F. Svendsen

Veileder: Magne Lysberg, SINTEF Kjemi.

Separasjons- og renseteknikk

M-B.H **Professor May-Britt Hägg**

M-B.H-1 Framstilling av karbonmembraner (Oppgaven forbeholdt Anne Eidissen)

Mikroporøst amorft karbon er et lovende materiale for gasseparasjon, enten i ren form eller som en dispergert fase i en polymer. Rensing av biogass eller separasjon av alkener fra alkaner vil være aktuelle målprosesser. Karbonet framstilles ved pyrolyse av polymere.

Utførelse av oppgaven:

Ved hjelp av utstyr som nå blir anskaffet, skal pyrolyseparametrene innflytelse på karbonets struktur og separasjonsegenskaper kartlegges. Parametrene vil være bl.a. oppvarmingshastighet, slutt-temperatur, total pyrolysetid, type atmosfære/inert (vakuum anbefales i første omgang) og inertgassens strømningshastighet.

Pyrolyserte membraner monteres i modul, og permeansen av aktuelle gasser måles.

M-B.H-2 CO₂-håndtering for bærekraftig energiproduksjon

Gasseparasjon med membraner er en voksende teknologi som viser seg lovende i prosesser relatert til brensel- og kraftproduksjon. Fleksibiliteten i membransystemer mht. størrelse og operasjon, gjør teknologien relevant for anvendelser både i småskala og storskala (eksempelvis gasskraftverk). Materialer med aktive matriser er gode kandidater til CO₂-selektive membraner. En aktiv matrise kan være en polymer som inneholder aktive bærere for CO₂, eller en polymer som inneholder sikteenheter/fyllenheter (mixed matrix membranes) som favoriserer transporten av CO₂.

Utførelse av oppgaven:

Det er aktuelt å framstille membraner fra polymerløsninger og innblanding av karbonpartikler i disse løsningene. Karbonet er i form av et finmalt materiale som en allerede kjenner framstillingsmåten og separasjonsegenskapene til (se foregående prosjekt). Ulike polymere og ulike syntetiseringsmetoder testes for å optimalisere separasjonsegenskapene til kompositten, som bl.a. avhenger av adhesjonen mellom polymeren og karbonet. Permeasjonsforsøk gjøres med CO₂, CH₄ og N₂.

NoN: **Professor Norvald Nesse**

NoN-1 Oppholdstid for vannstrømmer i membranmoduler.

(Oppgaven er reservert for Joakim Hansen)

NoN-2 Fjerning av fluor fra drikkevann.

Noen steder, bl.a. i Rift Valley -området i Etiopia og i visse områder i India inneholder grunnvannet store mengder fluorider, helt opp mot 20-25 ppm. Befolkningen i disse områdene er for en stor del avhengige av grunnvannet til drikkevann. Dette fører til at de rammes av fluorose, en lidelse som først angriper tennene slik at de blir sterkt misfarget og deformert, senere til angrep på skjelettet med invaliditet eller død som følge.

Verdens helseorganisasjon har satt en grense for fluor i drikkevann på 1-1,5 ppm, i tropiske strøk der drikkevannbehovet er stort til 0,8 ppm.

Fluor kan bl.a. fjernes ved revers osmose eller nanofiltrering, men er forløpig lite undersøkt. Det finnes mange kommersielt tilgjengelige membraner som antagelig er brukbare til dette formålet. I denne oppgaven ønsker vi å kartlegge problemer og muligheter ved fjerning av fluor fra drikkevannet ned til et akseptabelt nivå med membraner. Apparaturen er etablert, fluoranalysene må delvis utføres eksternt.

Oppgaven har tilknytning til et planlagt prosjektsamarbeid med University of Addis Ababa i Etiopia.

NoN-3. Nanofiltrering av saltløsninger.

Nanofiltreringsmembraner har vanligvis ladede molekylgrupper i overflaten. Dette gir membranene en ekstra separasjonsevne idet det ikke bare er porestørrelse som bestemmer denne, men også ladningene på membranen og ionestyrken i løsningen. Ved nanofiltrering kan man f.eks skille toverdige og enverdige ioner, positive eller negative, avhengig av ladningene på membranen. Separasjonsevnen er også avhengig av pH og av trykket over membranen.

I denne oppgaven ønsker vi å gå videre med undersøkelser som tidligere er arbeidet med i dr.-arbeidet til Edvard Sivertsen, i høstprosjektet til Trond Haldorsen samt i et prosjekt som dr. Pardon Kuipa fra Zimbabwe for øyeblikket holder på med.

Apparaturen er klar til bruk. Analysemetodene er etablerte.

DM-S: Professor II Dick Malthes-Sørensen

DM-S-1 Industriell Krystallisasjon

Industriell krystallisasjon er en viktig kjemiteknisk enhetsoperasjon for den kjemiske prosessindustri. Den benyttes i stort omfang til separasjon og rensing av kjemiske produkter i fremstillingen av produkter som gjødsel/salt, metaller, finkjemikalie- produkter, farmasøytiske produkter, fargestoffer og nanopartikler (nye funksjonelle materialer). I tillegg benyttes kunnskapen om krystallisasjon innen miljøteknologi (fellingsprosesser) og oljeindustrien (gasshydrater, vokskrystaller).

Krystallasjonsprosessen har stor betydning for det kvalitetsmessige og økonomiske resultat i prosessen og dermed verdiskapningen i industrien. Grunnleggende kunnskap om industriell krystallisasjon er et fortrinn for prosessingeniører til den kjemiske prosessindustrien.

Amersham Health, Lindesnes fabrikk har i sine prosesser omfattende bruk av krystallisasjon både til separasjon og rensemetode.

Diplomoppgaver innen produksjon av farmasøytiske bulkprodukter.

Diplomoppgavene er planlagt gjennomført ved Institutt for kjemisk prosesseteknologi. De baserer seg begge på resultatene til to diplomoppgaver i 2001.

1. Reaksjonskrystallisering av et kontrastmiddel intermediat - prosessoptimalisering.

I oppgaven skal en studere hvordan variasjoner i tilsetningen av den ene reaktanten til reaksjonsblandingen påvirker krystallasjonsprosessen og egenskapene til krystallene som dannes. Variasjoner av reaksjonsbetingelsene under krystallasjonen skal undersøkes med hensyn til reaktantkonsentrasjon, omrøringshastighet i reaktor og salter i reaksjonsblandingen for å finne de betingelser som gir store partikler med liten størelsesspredning og partikler med god fysisk stryke. Resultatene kan ha direkte virkning på utbytte av prosessen, filtrerings-egenskapene og tørkeegenskapene.

2. Optimalisering av en krystallasjonsprosess for et kontrastmiddel intermediat – påvirkning av krystallveksten for å styre prosessen ved hjelp av forskjellige prosess- parametre .

I oppgaven vil en undersøke hvordan kjernedannelsen- og veksthastigheten av krystaller påvirkes av forurensninger fra prosessen og i hvilken grad pH (tilsetningshastigheten av syre) er med på å kontrollere krystallveksten og utbyttet i prosessen. En ønsker å komme frem til betingelser som gir en raskere krystallasjonsprosess og filtrering, men samtidig opprettholder høye utbytter og

krystallkvalitet. Det vil være aktuelt å undersøke sammenhengen mellom veksthastighet og krystallkvalitet ved hjelp av mikroskopiske metoder.

Nærmere opplysninger om oppgavene kan fås av
Profesor II Dick Malthe-Sørenssen
Institutt for kjemisk prosessteknologi, M8C, dms@chebio.ntnu.no eller
Amersham Health, Lindesnes fabrikk, didrik.malthe-sorensen@amersham.com

Treforedling

SM Førsteamanuensis Størker Moe

SM-1 Fjerning av ekstraktivstoffer fra mekanisk masse (Oppgaven er reservert for Ole-Kristian Nygård)

Ved består mange ulike kjemiske komponenter som har ulike funksjoner i det levende treet. Det finnes blant annet en viss mengde ekstraktivstoffer som har til oppgave å dels beskytte treet mot angrep fra insekter og sopp og dels så anvendes lipofile komponenter som næring under visse deler av året for treet. Både mengden og sammensetningen av disse komponenter varierer fra art til art (t ex så inneholder furu mer ekstraktivstoffer enn gran) men den er også avhengig av hvert treet vokser.

I den mekaniske massaprosessen kan ekstraktivstoffer stille til med problemer i selve prosessen gjennom at de danner avsetninger og gjennom at de minsker styrken i det ferdige papiret. De legger seg gjerne på ytan av fibrer og kan derfor forårsake problemer ved trykking av aviser og magasiner.

Oppgaven skal i første hand handle om å fjerne ekstraktivstoffer i lab-skala der masse/flis behandles under ulike pH, temperatur og med tilsetning av kjemikalier/enzymer for å avsluttes med utvaskning av ekstraktivstofferne. Når gode betingelser er funnet på lab-skala vil vi videre og utføre forsøk i pilot-skala der vi bruker blant annet pulper og skruepress. Det kan så bli aktuelt å gjøre forsøk i enda større skala men disse gjør vi da i Finland eller i USA innen ombygging av fabriker og

Medveileder: Lars Johansson, PFI

SM-2 Fraksjonering av mekanisk masse med hydrosyklon (Oppgaven er reservert for Morten Letnes.)

Mekanisk masse består av fibre og partikler med ulike egenskaper. Størrelsen varierer fra millimeter lange fibre, til finstoff i kolloidal størrelsesorden. Også viktige fibre-egenskaper som fiberform, fiberveggtykkelse og spesifikk overflateareal varierer mye for mekaniske masser. For å undersøke egenskapene for ulike fiber/partikkel fraksjoner, og deres påvirkning på papiret, er det derfor ønskelig å separere massen i fraksjoner ved hjelp av hydrosyklon. Hydrosykloner separerer hovedsakelig på basis av partikkelenes densitet og det spesifikke overflatearealet. Fiberdensiteten er relatert til fiberveggtykkelsen og det spesifikke overflatearealet til den ytre fibrilleringen.

En serie med fraksjoneringsforsøk er tenkt utført for å fremstille ulike fiber/finstoff-sammensetninger. Det er i etterhånd tenkt å lage lab-ark av de ulike fiber/finstoff sammensetningene for å se på endringene i ark-kvaliteten. Masse som er tenkt benyttet vil bli hentet fra Norske Skog sine fabriker.

Medveileder: Arild Hegdal, PFI

SM-3 Ny lavtemperatur tørkeprosess for sulfat- og sulfittcellulose (Oppgaven er reservert for Jon Reino Heum.)

Plantefiber har en unik egenskap: Innebygd "lim" som gjør at fibre binder seg til hverandre. De lange cellulose- og hemicellulosemolekylene som fibre består av har mange hydroksylgrupper som inngår i hydrogenbindinger både med vann og med hydroksylgrupper i samme og i andre fibre. De elektrostatiske kreftene binder ("limer") fibre sammen. Det minner om en glidelås, men er på molekylnivå. Når fibre tørkes reduseres kvaliteten, først og fremst ved at bindingsevnen svekkes og at porøsiteten til fibre blir lavere. Dette kalles forhorning, og fenomenet har vært studert i flere

tiår. Det er fortsatt diskusjon om hva som er de grunnleggende årsakene til fenomenet, og foreløpig er ingen tørkemetode som hindrer eller reduserer forhorning i bruk.

Oppgaven har sitt utgangspunkt i teorien om at det ved tørking dannes hydrogenbindinger internt i fibre, mellom mikrofibriller og mellom porevegger slik at de lukker seg. Dette fører til at fibre får færre porer, mindre overflate og blir stivere. Ved vanlig tørking vil væskemenisk trekke mikrofibriller og porevegger sammen slik at de kommer i kontakt og får mulighet til å danne hydrogenbindinger. Løsningen på dette problemet kan være å tørke massen under dens frysepunkt. Vannet vil da sublimere, og man unngår at væskemenisk trekker overflater internt i fiberen sammen med den mulighet det gir for dannelse av hydrogenbindinger.

Det er gjort tørkeforsøk med kombinert tørking under og over massens frysepunkt. Dette har vist seg å gi forbedret vannretensjonsverdi og slitstyrke. I diplomoppgaven vil man gå videre med karakterisering av sulfitt- og sulfatmasse tørket over og under frysepunktet for å få kunnskap om hvilke forhold ved fibre som påvirkes av tørkemetode.

Medveileder: Kristin Syverud, PFI

SM-4 Effekten av mikrofibrillvinkel på malbarhet av gran og furu sulfatmasse (Oppgaven er reservert Christian Nygård)

Malbarhet, dvs. energiforbruket som trengs for å male frem en viss arkstyrke, er en viktig kvalitetsparameter for markeds-sulfatmasse. Det har vist seg at sulfatmasse av furu er mer tungmalt enn sulfatmasse av gran. Dette medvirker til at furu er et mindre attraktivt råstoff for sulfatmasse-produsentene. En faktor som kan innvirke på malbarhet og som kan være forskjellig mellom furu og gran er mikrofibrillvinkelen (MFA). Med MFA menes orienteringen av cellulosemikrofibriller i S2-laget av fiberveggen i forhold til fiberaksen. Årringnummer og veksthastighet på treet er viktig for MFA. For å frembringe materiale med ulik MFA er et furutre og et gran tre med relativt lik veksthastighet kuttet i ulike årringsfraksjoner. Oppgaven går ut på å karakterisere utgangsmaterialet, koke, bleke og male de ulike årringsfraksjonene, for deretter å undersøke om det er sammenheng mellom malbarhet og MFA eller andre råvareegenskaper.

Medveiledere: Kai Toven, PFI og David Vaaler

SM-5 Effekten av fiberkollaps på malbarhet av gran og furu sulfatmasse

Både fibrenes tverrsnittsdimensjoner og trolig mikrofibrillvinkelen innvirker på fibrenes evne til å kollapse. Fibrenes kollapsbarhet er viktig for fibrenes evne til å danne ark med høy styrke og densitet, og er dermed viktig for malbarhet. Oppgaven går ut på å undersøke effekten av fiberkollaps på malbarhet av gran og furusulfatmasse. Kollapsbarheten analyseres med bildebehandling av SEM-bilder av fibertversnitt. Oppgaven innebærer hovedsaklig bildebehandling og innebærer analyse av fiberkollaps på følgende materiale:

1) tidligere analyserte tverrsnittsbilder av gran og furu-sulfatmasser som er karakterisert med hensyn på malbarhet.

2) tverrsnittsbilder av ulike årringsfraksjoner i både utgangsved og blekt sulfatmasse fremstilt av et gran- og et furutre. Disse årringsfraksjonene har forskjellig mikrofibrillvinkel, og dette kan ha betydning for fiberkollaps.

Oppgaven gjøres i samarbeid med diplomarbeidet til Christian Nygård.

Medveiledere: Kai Toven, PFI og David Vaaler

SM-6 Hydrogenperoksidbleking av ulike fraksjoner av mekanisk masse

(Oppgaven er forbeholdt Anders Fruseth Solberg)

Det er tidligere funnet at det er vanskeligere å bleke finstoff enn fiber og man skal i denne oppgaven se om det stemmer, og i tilfelle finne ut hvor mye vanskeligere det er og eventuelt finne grunner til hvorfor det er vanskeligere. Stor utvikling og økende bruk av fraksjoneringsutstyr i masse- og papirindustrien gjør at det til en viss grad er, og det ihvertfall i fremtiden kommer til å være, teknisk mulig å behandle eller fjerne de fraksjonene som bidrar negativt til blekeresponsen til massen.

Oppgaven vil gå ut på at man først fraksjonerer en TMP masse ved hjelp av Bauer McNett-fraksjonator i fem forskjellige fraksjoner (30, 50, 100, 200). De forskjellige fraksjonene skal deretter blekes til deres minimale lysabsorpsjonskoeffisient (tilsvarer optimal ISO-lyshet) ved en gitt peroksidkonsentrasjon, det vil i praksis si at man varierer lutmengden til man finner den minimale absorpsjonskoeffisienten (optimal ISO-lyshet). Grunnen til at man måler absorpsjonskoeffisienten isteden for ISO-lysheten er at ISO-lysheten er avhengig av både spredningskoeffisienten (s) og absorpsjonskoeffisienten (k) og dermed ikke gir noen kjemisk informasjon. Absorpsjonskoeffisienten er avhengig av den kjemiske sammensetningen av prøven og er dermed et mål på kromofor innholdet i massen.

Kandidaten skal deretter bestemme lignininnholdet i hver av de forskjellige fraksjonene.

Veileder: Marianne Haugan

ØG Professor Øyvind Gregersen

ØG-1 Assessment of printing paper surface roughening and its implication on print quality (Oppgaven er forbeholdt Tove Stoen)

Roughening is a major concern in offset printing where coarse fibres rise due to swelling and decollapse. This is a major problem in LWC and SC printing paper where surface roughening may cause a reduction in gloss and disturb print quality. In order to shed more light on the roughening phenomenon, it is desirable to study the effect of drying temperature, moistening water and printing ink on roughening during HSWO printing.

Laser profilometry is a suitable method for assessing characteristic paper surface details. This technique can be used to quantify the surface structure before and after printing. SEM (Scanning Electron Microscope) analysis may also complement the surface structural analysis and give more information on the coating structure details and the underlying fibre structure that causes the roughening.

Topography images will be recorded in Halden before and after moistening. The moistening/-printing (Prüfbau) may be performed in Skien (NSR Union). SEM surface and cross-sectional analysis will be performed at PFI.

Medveileder fra PFI: Gary Chinga, Tove Schult

Kontaktperson: Ann Kristin Øverås (Saugbrugs), Morten Eilertsen (Union)

ØG-2 Sammenheng mellom papirstruktur og optiske egenskaper

(Oppgaven er forbeholdt Håvard Grande Urhamar)

Papirets optiske egenskaper blir bestemt av spesifikt overflateareal, brytningsindeks, mengde fargede substanser og orienteringen til flater i papiroverflaten og inne i arket. Vi har nå metoder for å måle alle disse parameterne. Slike målinger kan brukes til å beregne de optiske egenskapene til papir.

I dette arbeidet skal overflate- og tverrsnittsparemetere til et utvalg av industrielle trykkipapir måles. Samtidig skal de optiske egenskapene til de samme arkene måles. Ut fra målingene av papirstruktur skal det dels utføres simuleringer med GRACE for å beregne optiske egenskaper. Disse sammenlignes med de målte. Videre skal det lages empiriske statistiske modeller der de optiske målingene er en funksjon av strukturdataene.

Medveileder: Per Nygård, PFI

Ny lavtemperatur tørkeprosess for sulfat- og sulfitt cellulose

(Oppgaven er reservert for Kristin G. Lauritsen)

Plantefiber har en unik egenskap: Innebygd "lim" som gjør at fibre ne binder seg til hverandre. De lange cellulose- og hemicellulosemolekylene som fibre ne består av har mange hydroksylgrupper som inngår i hydrogenbindinger både med vann og med hydroksylgrupper i samme og i andre fiber. De elektrostatiske kreftene binder ("limer") fibre ne sammen. Det minner om en glidelås, men er på molekylnivå.

Når fibre tørkes reduseres kvaliteten, først og fremst ved at bindingsevnen svekkes og at porøsiteten til fibre ne blir lavere. Dette kalles forhorning, og fenomenet har vært studert i flere tiår. Det er fortsatt diskusjon om hva som er de grunnleggende årsakene til fenomenet, og foreløpig er det ingen tørkemetode som hindrer eller reduserer forhorning.

Opgaven har sitt utgangspunkt i teorien om at det ved tørking dannes hydrogenbindinger internt i fibre ne, mellom mikrofibriller og mellom porevegger slik at de lukker seg. Dette fører til at fibre ne får færre porer, indre overflate og blir stivere. Ved vanlig tørking vil væskemenisker trekke mikrofibriller og porevegger sammen slik at de kommer i kontakt og får mulighet til å danne hydrogenbindinger. Løsningen vil da sublimere, og man unngår at væskemenisker trekker overflater internt i fiberen sammen med den mulighet det gir for dannelselse av hydrogenbindinger.

Det er gjort tørkeforsøk med kombinert tørking under og over massens frysepunkt. Dette har vist seg å gi forbedret vannretensjonsverdi og slitestyrke. I hovedoppgaven vil man gå videre med karakterisering av sulfitt- og sulfatmasse tørket over og under frysepunktet for å få kunnskap om hvilke forhold ved fibre ne som påvirkes av tørkemetode.

I hovedoppgaven vil man gjennomføre supplerende tørkeforsøk samt å frembringe sentrale tørketekniske data knyttet til industriell avvanning av fibermasse. Oppgaven skal omfatte:

1. Videreføring av entalpimålinger ved hjelp av DSC-utstyr evt. "Termisk multimeter".
2. Videreføring av sorpsjonsisoterm-måling evt. modellering av disse.
3. Supplerende tørkeforsøk ved kombinert tørking under/over frysepunkt.
4. Studier av evt. frysepunktsendringer ved vasking av massen.
5. Forslag til prosessbetingelser ved industriell gjennomføring av ny lavtemperatur tørkeprosess.

Besvarelsen redigeres mest mulig som en forskningsrapport med et sammendrag på norsk og engelsk, konklusjon, referanseliste, innholdsfortegnelse etc. Ved utarbeidelsen av teksten skal kandidaten legge vekt på å gjøre teksten oversiktlig og velskrevet. Med henblikk på lesing av besvarelsen er det viktig at de nødvendige henvisninger for korresponderende steder i tekst, tabeller og figurer anføres på begge steder. Ved bedømmelsen legges det stor vekt på at resultatene er grundig bearbeidet, og at de oppstilles tabellarisk og/eller grafisk på en oversiktlig måte og diskuteres utførlig.

Hovedveileder : Professor Ingvald Strømmen, Institutt for energi- og prosessteknikk.

Medveileder: Kristin Syverud, Papirindustriens Forskningsinstitutt.