



# **Forslag til masteroppgaver våren 2009**

**ved**

**Institutt for kjemisk prosessteknologi**

**Fagområder/-grupper:**

- 1. Katalyse og petrokjemi**
- 2. Kolloid- og polymerkjemi**
- 3. Prosess-systemteknikk**
- 4. Miljø- og reaktorteknologi**
- 5. Papir og fiberteknologi**

# Katalyse og petrokjemi

**AH:** Professor Anders Holmen

**AH-1:** Optimalisering av driftsprosedyrer for polymeriseringsanlegget på Mongstad.

*Oppgaven er reservert Kathrine Storsæter*

*Medveiledere: Rune Prestvik, Ingrid Aartun, StatoilHydro*

**AH-2:** Katalysatorsystemer for Fischer-Tropsch syntesen

*Oppgaven er reservert Ragnhild Høye*

*Medveiledere: Erling Rytter, Øyvind Borg, StatoilHydro*

**AH-3: Partiell oksidasjon av metan uten bruk av gassfaseoksygen**

Metan kan oksideres til  $H_2$  og  $CO/CO_2$  uten bruk av gassfaseoksygen (anaerobt), dvs at oksygenet taes direkte fra katalysatoren. Det er etablert et forsøksanlegg/metodikk for studier av partiell oksidasjon over blandoksider uten bruk av gassfaseoksygen (Chemical Looping). Oppgaven omfatter framstilling og karakterisering av oksydene samt testing ved aktuelle betingelser.

*Medveiledere: Anders Holmen, De Chen, Mihai Oana*

**AH-4: Katalytisk partiell oksidasjon av metan ved moderate temperaturer**

Oppgaven fokuserer på framstilling av nye katalysatorer for hydrogenproduksjon, på karakterisering (ved hjelp av TPO, kjemisorpsjon, BET, etc.) og på utprøving av de framstilte katalysatorene.

*Medveiler: Sara Boullosa Eiras*

**AH-5: Katalysatorstudier ved transiente betingelser (SSITKA)**

SSITKA (Steady-State Isotopic Transient Kinetic Analysis) kombinerer undersøkelser ved stasjonære betingelser og ved transiente betingelser og har vist seg å være en særlig effektiv metode til å studere reaksjoner på faste overflater. Oppgaven omfatter bruk av SSITKA til å studere CO hydrogenering på Co katalysatorer (Fischer-Tropsch) samt partiell oksidasjon av metan/etan over blandoksider. Oppgaven inngår som en del av satsningen på konvertering av naturgass.

*Medveileder: Jia Yang*

**AH-6: Fremstilling av bærermaterialer for heterogene katalysatorer.**

Dette prosjektet er en del av det strategiske universitetsprosjektet "Scientific Design of Catalysts and Supports". Målsetningen er å benytte ulike metoder (eks.: spray-tørking), for framstilling av katalysatorbærere med bestemte egenskaper. Arbeidet vil i særlig grad være konsentrert om  $Al_2O_3$  og  $SiO_2$  og bærerne bli brukt til framstilling av metall/ bærerkatalysatorer. Arbeidet vil omfatte framstilling, karakterisering og testing.

*Medveileder: Anna Lind. SINTEF Materialer og kjemi*

**AH-7: EDC cracking – mikrokinetisk modellering**

Det er tidligere utført en omfattende eksperimentell studie av EDC cracking. Det er nå planlagt å bruke disse resultatene til å utvikle en mikrokinetisk modell som beskriver de oppnådde resultatene. Dette er et system hvor samspillet mellom katalytiske overflatreaksjoner og homogene gassfasreaksjoner er meget viktig og det planlegges derfor å lage en modell som beskriver både reaksjonene på katalysatoroverflaten og i gassfasen.

*Medveileder: De Chen,*

**EAB:**      **Professor Edd A. Blekkan**

**EAB-1:      Gassifisering av biomasse**

Flytende drivstoff fra biomasse (trevirke, tømmer, skogsavfall etc.) kan fremstilles ved først å gassifisere biomasse til syntesegass og deretter syntetisere rene produkter (Fischer-Tropsch syntese, DME eller metanol). Gassifisering av tunge oljer og kull er kjent teknologi, men ved bruk av biomasse opptrer nye problemer knyttet til forurensninger i gassen og fjerning av disse ved rensing, og til gassens sammensetning (til dels svært lave H<sub>2</sub> : CO –forhold), slik at justering av gassens sammensetning ved hjelp av vanngas-skift er nødvendig. Denne oppgaven er del av et større samarbeidsprosjekt finansiert av EU, hvor vår oppgave er å se på reformering av rågass fra et gassifiseringsanlegg for å fjerne tjære og andre komponenter og vanngass skift for å justere syntesegassens sammensetning. Oppgaven er eksperimentell, med hovedvekt på katalysatorstudier og reaktorforsøk.

*Oppgaven er reservert Kristin Rem Trehjørningen*

*Medveileder: Espen Wangen*

**EAB-2:      Karakterisering av produkter fra omsetning av tunge oljer.**

Tilgangen på konvensjonelle lette råoljer er avtagende. I fremtiden vil verdens raffinerier i større grad måtte benytte seg av tyngre råoljer. Dette er oljer som tradisjonelt er blitt vurdert som mindre attraktive på grunn av deres dårlige prosesserbarhet og relativt lave verdi. For å muliggjøre produksjon, transport og markedsføring må oljene oppgraderes. Dette innebærer blant annet reduksjon av molekylvekt, C/H-forhold og innhold av heteroatomer. I forbindelse med et pågående prosjekt foreslås det fordypningsoppgave innen tungoljeoppgradering, med mulighet for påfølgende diplomoppgave. I tillegg til selve utbyttet ved omsetning av tunge oljer vil også kvaliteten på produktene gi meget viktig informasjon. Denne oppgaven vil i hovedsak dreie seg om karakterisering av produkter fra forsøk med tunge oljer utført i ulike reaktorsystemer. Informasjon om produkter som kan være aktuelle å innhente vil være kokepunktsfordeling (destillasjon, TGA eller simulert destillasjon), aromatisitet og innholdet av olefiner (ved NMR), C/H-forholdet, svovelinnhold, konsentrasjon av metaller (ved elementanalyse), SARA-fraksjonering (ved væskekromatografi) eller bruk av andre teknikker.

Oppgavene utføres i samarbeid med StatoilHydro Forskningssenter.

*Oppgaven er reservert Inger Lise Biørn*

*Medveileder: Anne Hoff (StatoilHydro).*

**EAB-3:      Fremstilling av bærermateriale med skreddersydd porestørrelse**

Målet med prosjektet er å syntetisere alumina bærermaterialer med "skreddersydde" porestørrelser opp til ca. 100 nm. Vi forsøker å identifisere de faktorene som styrer aktivitet og selektivitet for Fischer-Tropsch-katalysatorer, og disse materialene er meget interessante som modellsystemer i dette arbeidet. Arbeidet vil bestå i syntese (bl.a. ved hjelp av en dedikert spray-tørker) og karakterisering av nye bærermaterialer, og i senere faser fremstilling, karakterisering og testing av FT-katalysatorer.

*Medveiledere: Anna Lind (SINTEF Materialer og kjemi), Anders Holmen.*

**EAB-4:      Korrosivt svovel i transformatoroljer**

Korrosjon av kobber og uønsket utfelling av kobber-svovel-forbindelser som leder til kortslutning i store transformatorer er (av ukjente årsaker) et voksende problem. Det spekuleres i om problemet skyldes kvaliteten på transformatoroljen (som brukes som isolator og kjølemedium), men rollen til papiret som isolerer vikinglene spiller trolig også en rolle. Oppgaven består i studier (eksperimentelle og teoretiske) av korrosjonsfenomener knyttet til kobber i høyspenningstransformatorer, utfelling av kobber - svovelforbindelser og rollen til svovelkomponenter i oljen i denne sammenhengen. Modellstudier, bruk av standardtester og analytisk kjemi knyttet til svovelkomponenter er aktuelle arbeidsoppgaver. Oppgaven gjennomføres i samarbeid med SINTEF Energiforskning (SEFAS) og er knyttet til et større forskningsprosjekt.

*Medveiledere: Ingvild Trondstad (stipendiat), fra SEFAS: Marit-Helen Glomm Ese (marit-helen.ese@sintef.no).*

## **EAB-5: Hydrogenbehandling av oksygenforbindelser**

Hydrogenbehandling (hydrotreating) er en av de viktigste katalytiske prosessene, og flere hydrogenbehandlingsanlegg inngår i alle oljeraffinerier. Nye miljøkrav, og ikke minst nye råstoffe gir nye utfordringer i hydrotreating. I dette prosjektet skal hydrogenbehandling av oksygenforbindelser som er vanlige i biomasse (og kullbaserte råstoffe) studeres teoretisk og eksperimentelt. Slike forbindelser er tidligere lite studert, og det er nødvendig å skaffe seg videre kunnskap både om hvordan disse komponentene reagerer og hvordan de påvirker avsvovling og fjerning av nitrogen (inhibering).

*Medveileder: Håkon Bergem (SINTEF)*

## **EAB-6. Reaksjonskinetisk simulering av oksygenering/dehydrogenering av metanol til formaldehyd over sølvkatalysator.**

Sølvprosessen for produksjon av formaldehyd er fortsatt like aktuell og meget konkurransedyktig i forhold til andre prosesser basert på andre katalysatorer.

Prosessens forbruk av metanol er imidlertid fortsatt høyere enn prosesser basert på jern-molybdat-katalysator. For å kunne forbedre prosessens utbytte ytterligere er det viktig å forstå reaksjonsmekanismen bedre. Wachs et al. (Surf. Sci. 76 (1978) 531) foreslo en detaljert reaksjonsmekanisme for prosessen. Denne mekanismen har vært forsøkt simulert av Andreasen et al. (Applied Catalysis A 289 (2005) 267). Det er ønskelig å teste modellen og dens forutsetninger nærmere, og sammenligne resultatene med data fra fullskala reaktorer, slik at modellens parametre og forutsetninger kan verifiseres og eventuelt optimaliseres. Verktøyet for arbeidet vil være "COMSOL™ Reaction lab", et simuleringstøy for reaksjonskinetikk, som antas å egne seg for testing av modellen.

Det foreslås at arbeidet vil foregå dels ved Dynea's anlegg på Lillestrøm, dels ved Institutt for Prosessteknikk, NTNU. Oppgaven vil passe for kandidater med bakgrunn fra Prosessteknikk. Kjennskap og interesse for reaksjonskinetikk er selv sagt en fordel, men ingen absolutt betingelse.

*Medveiledere: NN (Stip), Hans Schjønsby (Dynea, [Hans.schjonsby@dynea.com](mailto:Hans.schjonsby@dynea.com))*

## **EAB-7 Katalytisk forbrenning av metan**

Oppgaven er i første rekke rettet mot å eliminere små mengder av metan (VOC, volatile organic compounds) knyttet til ulike prosesser. Metangass bidrar sterkt til drivhuseffekt, og katalytisk forbrenning er en effektiv rensemetode (tyngre VOC-komponenter kan fjernes ved ulike adsorbenter, noe som ikke er mulig for metan). Oppgaven vil bestå i etablering av eksperimentell metode og eksperimentelle studier av katalysatorer for forbrenning av metan.

Oppgaven utføres i samarbeid med StatoilHydro.

*Medveileder: Prof. II Kjell Moljord, StatoilHydro ([kmol@statoilhydro.com](mailto:kmol@statoilhydro.com))*

## **EAB-8 Characterization of crude oils according to corrosivity using the Fe powder test and tan**

*Reserved Rafael Vera*

*Supervisor at StatoilHydro: Tore Arnesen: TOA@StatoilHtdro.com*

**DeC:** Professor De Chen

## **DeC-1: Design, synthesis and characterization of bimetallic catalysts**

Bimetallic catalysts play an important role in heterogeneous catalysts for manipulating catalyst properties in terms of activity, selectivity and stability. A combination of density functional calculation and microkinetic modeling has been proven to be a powerful tool for catalyst design. The present project will focus on synthesis, characterization and catalytic test of designed bimetallic system. Carbon nanofiber form methane decomposition will be selected as a probe reaction in the project. Catalysts will be further tested in other reactions such as methanation and steam reforming reaction with cooperation with other students in the group.

*Reserved by Xi Zhang*

*Medveiledere: Dr. Tiejun Zhao, Muthuswamy Navaneethan*

## **DeC-2: Hydrogen production from sorption enhanced reforming**

Hydrogen production with CO<sub>2</sub> management is the current national efforts for production of clean energy, which is extremely important for Norwegian industrial. A new method has been developed in our group to synthesize nanosized CO<sub>2</sub> absorbents, which capture a large amount of CO<sub>2</sub> with a good kinetics. It can be used in the sorption enhanced steam reforming for one step production of hydrogen with is-situ removal of CO<sub>2</sub> by solid CO<sub>2</sub> acceptors. The project will focus on experimental study of hydrogen production from sorption enhanced steam reforming of bio-liquids in a fixed bed reactor. Modification of the catalyst will be the main focus to improve the efficiency for hydrogen production in the presence of metal oxides. The method will provide a promising method of bio-hydrogen delivery.

*Medveileder: Li He*

## **DeC-3: New solid acceptors for CO<sub>2</sub> capture**

CO<sub>2</sub> capture is one of the solutions to reduce the CO<sub>2</sub> emission. There are a lot of research activities in Norway in this area. CO<sub>2</sub> capture with high temperature acceptors is one of the technologies in development. Nanostrcutured materials play a very important role to make process technically and economically feasible. Project deals with preparation of nanocomposites as high temperature solid CO<sub>2</sub> acceptor by different modern preparation methods including spray drying, sol-gel and surface coating to modify the structure and properties. The main focus is to improve the stability of solid CO<sub>2</sub> acceptor in the presence of steam. The materials will be characterized by different techniques including SEM and TEM and CO<sub>2</sub> capture testing.

*Medveiledere: Saima Sultana Kazi, Tayyaba Noor*

## **DeC-4: Advanced steam reforming catalysts**

Steam reforming of natural gas is the main reaction step in gas to liquids process and hydrogen production. A cooperative project between MIT, NTNU and Statoilhydro has been established. The main objective of the project is to design a new catalyst through desnsity functional calculation and detailed experimental investigation fro high temperature membrane reactor. This project will focus on synthesis, characterization and test of Ni based bimetallic catalysts with well controlled particle size and surface composition. A relationship between composition and coking resistance will be addressed. The candidate has opportunity to work in the team including experts form MIT, NTNU and StatoilHydro.

*Medveiledere: Anh Hoang Dam, Dr. Hongmin Wang*

## **DeC-5: Synthesis and applications of carbon nanotube arrays on metallic substrates**

Carbon nanotube arrays on metallic substrates such as foils and wires can have many applications in new and renewable energy such as microreactors, electrodes of supercapacitors, batteries and solar cells, which are The project focus on catalytic synthesis and control the alignment and nanostructure of carbon nanofiber, multiwall and single wall nanotubes.

*Medveileder: Dr. Estelle Vanhaecke*

## **DeC-6: In-situ polymerization on carbon nanotubes**

Carbon nanotube(CNT)-polymer composites is a large class of nanocomposite materials to improve the mechanical properties and introduce multifunctions into the composite, for example, make polymer conductive. In-situ polymerization on carbon nanotubes will coat one layer of polymer on the CNT surfaces to improve the interface interaction between the polymer and CNT. Synthesis and characterization of composite materials will be the main objectives of the project.

*Medeileder: Fan Huang*

## **DeC-7: Microkinetic model assisted catalyst design**

Microkinetic modelling use theoretic prediction of the kinetic parameters of each reaction elementary steps involved in the reaction system, which provides a powerful predictive model, not only predicting kinetic behaviour but also designing new catalysts with high activity and selectivity. The project will extend our existing model of steam methane reforming, water gas shift reaction and F-T synthesis to the ethanol steam reforming to use the results from density functional calculation. Catalyst design using microkinetic model will be the final goal of the project.

**MR: Førsteamanuensis Magnus Rønning**

### **MR-1: Avansert karakterisering av Fischer-Tropsch katalysatorer**

*In situ* karakteriseringsmetoder er i stand til å gi informasjon om katalysatorer ved reaksjonsbetingelser som ligger nært opp til industrielle betingelser. Det tas stadig i bruk nye avanserte metoder for å studere katalysatorene under bruk. Katalysegruppa anvender blant annet spektroskopiske teknikker som Raman, IR og UV-vis. I tillegg benyttes det europeiske synkrotronanlegget (ESRF) i Grenoble, Frankrike for röntgen-spektroskopi (EXAFS).

Oppgaven går ut på å benytte *in situ* Raman og röntgen-spektroskopi for å studere Fischer-Tropsch katalysatorer ved relevante reaksjonsbetingelser. Arbeidet vil omfatte metodeutvikling, optimalisering og data-analyse. Oppgaven er knyttet til InGAP, et nylig opprettet senter for forskningsbasert innovasjon og vil bli utført i nært samarbeid med StatoilHydro og SINTEF.

**Oppgaven er reservert Elisabeth Windstad**

**Medveileder: Alexey Voronov**

### **MR-1: Selektiv CO oksidasjon over katalysatorer på strukturerte karbon nanofiber kompositmateriale**

Prosjektet omhandler anvendelse av en ny type mikroreaktor der Au/TiO<sub>2</sub> katalysatorer på karbon filt/karbon nanofiber kompositmateriale blir direkte oppvarmet ved hjelp av elektrisk motstand i karbonmaterialet. På denne måten oppnås en veldig lokal og rask oppvarming av materialet. Strukturerte katalysatorer som dette har egenskaper som kan utnyttes i formål der katalysatorer i pulverform er dårlig egnet. Et nytt reaktorkonsept er utviklet til dette formålet.

Arbeidet vil omfatte framstilling av karbon nanofiber på karbon filt og å avsette Au og TiO<sub>2</sub> nanopartikler på overflaten til karbon nanofibrene. Materialene vil bli karakterisert ved hjelp av teknikker som temperaturprogrammert oksidasjon, elektronmikroskopi og XRD. Mikroreaktoren vil bli testet i selektiv CO oksidasjon.

# Kolloid- og polymerkjemi

**JOHS:** Professor Johan Sjöblom

## JOHS-1: Influence of paraffin waxes on emulsion stability

This work package will focus on the influence of paraffin wax on emulsion stability and separation. Paraffin waxes are non-polar molecules, and are not inherently interfacially active in the dissolved state. However, at temperature conditions below the Wax Appearance Temperature (WAT), paraffin waxes precipitate into micrometer-sized crystals or amorphous aggregates, providing solid particles onto which polar species such as resins and asphaltenes can adsorb. Hence, waxy crude oils effectively behave as Pickering emulsions at low temperatures when water is present. Interfacial electrostatic and van der Waals interactions between modified paraffin crystals can provide significant mechanical stability to an oil-water interfacial layer, and hinder emulsion separability. We plan on mechanistically investigating the interfacial activity of paraffin wax using techniques such as:

- Dynamic Interfacial Tension
- Critical Electric Field Emulsion Stability Cell
- Rheometry
- NMR (droplet size distribution)
- High precision densitometer ( $10^{-6}$  g/cm<sup>3</sup>)
- Langmuir-Blodgett Deposition & AFM (interfacial transfer and imaging)
- Oscillating Pendant Drop
- QCM (adsorption onto model surfaces)

The investigation will build up a fundamental understanding of the mechanistic behavior of paraffin wax crystals at the water-oil interface. Waxes containing linear, branched, and cyclic paraffin molecules will be utilized in the investigations. In addition, model fluids will be prepared containing various carbon number distributions, in order to gauge the effect of paraffin chain length. The wax activity will ultimately be mapped to the interfacial activity of the resin and asphaltene fractions. We aim to develop a complete aggregation model in which the synergistic effects of all SARA components are explicitly accounted for in terms of emulsion formation conditions, which will predict the emulsion stability and separability.

*Cosupervisor: Kristofer Paso*

## JOHS-2: Microsimulation of the Hydrodynamics of Particle Suspensions: Sedimentation

The hydrodynamic and rheological properties of suspensions and emulsions are determined by the hydrodynamic forces exerted by the particles on the liquid and the electrostatic repulsion forces exerted between the particles themselves. The simulation method of Stokesian dynamics can be used to account for these forces and track the dynamic evolution of the microstructure of the particle suspension so that macroscopic physical properties of the dispersion can be calculated by ensemble averaging.

The scope of this work will be to introduce the student to the microsimulation technique of Stokesian dynamics and to learn the numerical methods employed to arrive at the solution. In particular, sedimentation of particle suspensions and emulsions will be studied. Furthermore, numerical methods for solving ordinary differential equations will be introduced to describe the electrostatic interactions between particles. The student will be expected to create and run original Matlab programs to obtain solutions to the given problem and to provide appropriate interpretation of the results. Consequently, a strong background in mathematics and basic understanding of the Matlab programming environment is desirable.

*Cosupervisor: Brian Grimes*

### **JOHS-3: Stability of SiC suspensions.**

SiC suspensions (polyethylene glycol/SiC) are central in REC's (Renewable Energy Corporation ASA) wafer process for solar panels. In the process it is of importance that the SiC suspension has the correct stability (determined from electrophoretic measurements and sedimentation measurements). Also wettability measurements will be central in order to understand the process. The diploma work will be performed in collaboration with REC in Porsgrunn.

#### **GØ: Førsteamanuensis Gisle Øye**

#### **GØ-1: Partikler i produsert vann**

Utslipp av vann produsert ved utvinning av olje er et økende miljøproblem ved mange offshore installasjoner. Det er derfor viktig å utvikle ny teknologi for å rense det produserte vannet før det slippes ut i sjøen. Prosjektoppgaven fokuserer på å forstå mekanismer som vil stabilisere eller destabilisere partikler i produsert vann, for dermed kunne utvikle ny teknologi for å fjerne disse partiklene fra vannet. Partikkelsuspensjoner vil bli studert ved eksperimentelle teknikker som, dynamisk lysspredning, zeta potensialmålinger og Turbiscan.

Oppgaven utføres ved Ugelstadlaboratoriet, og er en del av TOP Water programmet som utføres i samarbeid med Statoil, DNV, Total, Champion Technology, Shell, Vetco og Chevron.

#### **GØ-2: Lignosulfonater på olje-vann grensesikt**

Lignosulfonater kan benyttes som stabilisator for emulsjoner innen jordbruks- og næringsmiddelindustrien og partikler i for eksempel cement. Oppgaven fokuserer på å utvikle nye lignosulfonatsystem for stabilisering av oljedråper og faste partikler. Lignosulfonater på olje-vann og vann-fast stoff grensesikt vil bli studert ved eksperimentelle teknikker som quartz crystal microbalance, dynamiske grensesiktsmålinger og grensesikts reologi.

Oppgave utføres ved Ugelstadlaboratoriet, og er et samarbeid med Borregaard Lignotech.

### **WRG: Førsteamanuensis Wilhelm R. Glomm**

#### **WRG-1: Alternative trebeskyttelses-systemer**

Norsk institutt for skog og landskap (Ås, Oslo) jobber med å utvikle miljøvennlige trebeskyttelses systemer. Det er et generelt ønske om at trestrukturer (kledninger, vinduer, terrasser osv) ikke bør råtna bort med det første. Derfor blir dagens materiale til dette formålet impregnert med kobber (CU-HDO). Kobber har flere uønskede negative innvirkninger på naturen og det er fra myndighetenes side et ønske om å stoppe bruken av kobber som trebeskyttelses middel.

Norsk institutt for skog og landskap ønsker derfor sammen med NTNU å utvikle en in-situ polymerisasjon som kan gi et alternativt materiale. Da en inntringning i celleveggen krever en max størrelse på 20-30 nano meter, er det viktig at base-kjemikaliet er i nano skala. Etter innbringning av base kjemikaliet, må materialet etterpåvirkes av en utvendig faktor (f.eks varme) for å sette i gang polymeriseringen. Base kjemikaliet skal med fordel binde seg til -OH gruppene på celluloseveggen for å hindre vannopptak.

Ved opphold i Ås vil leilighet bli betalt.

**Medveiledere: Dr. Erik Larnøy, Dr. Sondre Volden**

# Prosess-systemteknikk

**SiS:** **Professor Sigurd Skogestad**

**SIS-1: Stabilization of two-phase flow in risers from reservoirs (anti-slug control) (co-supervisor: from StatoilHydro)**

This project is motivated problems with riser slugs in offshore fields in the North Sea. Based on a simplified model of the process the objectives are the following

1. Tune the simple model so that it represents the actual behavior
2. Analyze the simple model, for example, finding the possible steady-states and by linearization and controllability analysis of the desired flow regime
3. Discuss the possibility for avoiding the slug flow, for example, by use of active control.

**SIS-2: Simulering, optimal drift og selvoptimaliserende regulering av LNG-anlegg**

Produksjonen av LNG skjer ved at naturgass kjøles i et nettverk av kjølesykluser før den blir lagret flytende ved atmosfærisk trykk (volumet er da redusert mer enn 600 ganger). Dette krever at naturgassen kjøles ned til omlag -162 C, noe som er en svært energikrevende prosess. For å redusere energibehovet har det blitt utviklet komplekse kjølenettverk som reduserer de termodynamiske tapene i varmeverkslerne.

Disse avanserte designene gjør at prosessen får flere manipulerte pådrag og større interaksjoner, noe som fører til reguleringsproblemer.

Prosessens Mixed Fluid Cascade (MFC) er utviklet av et Statoil/Linde-samarbeid.

For en slik komplisert prosess er det viktig å ha en systematisk fremgangsmåte for å bestemme hva som skal reguleres.

Begrepet selvoptimaliserende regulering betyr at man ved å holde et sett av regulerte variabler konstante oppnår nær-optimal drift for alle forventede forstyrrelser.

Prosjektoppgaven vil for eksempel kunne gå ut på å lage en modell av en enkel LNG-prosess i MATLAB eller gPROMS, for så å simulere prosessen dynamisk og studere hvordan ulike valg av regulering fungerer for denne prosessen. Det vil også være gode muligheter for å bygge videre på oppgaven i en diplomoppgave til våren.

Dette er en meget aktuell oppgave siden Snøhvit-feltet er i oppstartfasen. Vi har et meget godt samarbeid med StatoilHydro og med ABB.

*Medveileder: Magnus G. Jacobsen*

**SIS-3: Regulering av Kaibel destillasjonskolonne med MPC**

*Medveileder: Ivar J. Halvorsen, SINTEF*

**SIS-4: Regulering av Kaibel destillasjonskolonne (eksperimentell)**

Petlyuk-kolonner tas i stigende bruk i verden pga. mulighetene for reduksjoner i energi og investering. Vi har en flott eksperimentell rigg i hall C. Foreløpig kjører vi alkoholer, men vi planlegger et samarbeid med Statoil på kjøring av C5-C6 blandinger. Det arbeides også med å legge inn automatisk regulering av dampsplitten som vil være helt nytt når det gjelder denne type .

*Medveileder: Ivar J. Halvorsen, SINTEF*

## **SIS-5: Stabilization of two-phase flow with parallel branches**

This project is motivated by serious operational problems encountered at StatoilHydro's new LNG facility in Hammerfest. Based on a simplified model of the process the objectives are the following

1. Tune the simple model so that it represents the actual behavior
2. Analyze the simple model, for example, finding the possible steady-states and by linearization and controllability analysis of the desired flow regime
3. Discuss the possibility for avoiding the operational problems, for example, by use of active control.

*Medveileder: Magnus Glosli Jacobsen*

## **SIS-6: Explicit MPC**

For systems with a small number of states the model predictive control (MPC) problem may be solved off-line giving an optimal control law as a function of the present state. The solution is such that the state space will be divided into regions with different optimal state feedback laws. A key issue in implementation of an explicit MPC controller is to identify the region that contains the current state. Previous work on this topic includes utilization of a binary search tree throughout the regions. If not all states are measured a state observer needs to be included in the loop.

Recent work in the control group has showed that it can be possible to avoid both the binary search tree and the state observer by finding invariant combinations of measurements in each region that are such that when controlled at constant setpoint yields zero loss from optimality. These variable combinations serve both for optimal control and identification of the current region.

A project in this area will consist of at least these two topics:

- 1) Compare measurement feedback with state estimation from a robust control point-of-view. This means finding calculation of performance and robustness measures for both techniques.
- 2) Compare the computational load of using a binary search tree to the present method which will be described in more detail to prospective students.

*Medveileder: Henrik Manum*

## **SIS-7: Dynamisk simulering av prosess med alternative reguleringssstrukturer**

Oppgaven tar utgangspunkt i bruk av en dynamisk prosess-simulator (Hysys) og Honeywells MPC software (Profit Controller) som er integrert i UniSims Profit Controller. Målet for oppgaven vil være å lage et undervisningsopplegg for industrielle anvendelser av MPC i en dynamisk prosesssimulator. Arbeidet vil bestå av dynamisk prosessmodellering, modellidentifisering og kontrollerdesign, samt å lage et øvingsopplegg med ferdige UniSim modeller og kontrollstrukturer som kan benyttes videre i undervisning.

Kursmateriale for egenopplæring i UniSim er tilgjengelig fra Honeywell.

Linker til beskrivelse av software:

<http://hpsweb.honeywell.com/Cultures/en-US/Products/ControlApplications/AdvancedControlOptimization/ProfitController/default.htm>

[http://hpsweb.honeywell.com/Cultures/en-US/Products/ControlApplications/Simulation/default.htm”](http://hpsweb.honeywell.com/Cultures/en-US/Products/ControlApplications/Simulation/default.htm)

*Medveiledere: Mehdi Panahi og Ramprasad Yelchuru*

*Medveileder Honeywell: Bjørn Einar Bjartnes*

## **SIS-8: Selvoptimaliserende regulering av satsvis destillasjon**

Oppgaven vil gå ut på å sette opp en dynamisk modell av en satsvis destillasjonsprosess og bruke tilgjengelig teori til å designe et selvoptimaliserende reguleringssystem for denne kolonnen. Ytelsen av reguleringssystemet skal vurderes ved å se på avvik i objektfunksjonen. Et av følgende mål kan velges for driften av prosessen:

1. Maks produkt med gitt minimumsrenhet ved fast driftstid per batch
2. Minimum tid for gitt renhet og mengde (absolutt eller gjenvinningsgrad)

Naturlige beregningsverktøy vil være gProms og Matlab. Oppgaven krever interesse for optimalisering og numeriske beregninger. Se hjemmeside S. Skogestad for mer informasjon

### Litteratur

1. Sigurd Skogestad og Ian Postlethwaite: Multivariable feedback control – analysis and design (Kap. 10 spesielt), Wiley & Son Ltd, 2005
2. Arthur E. Bryson: Dynamic optimization, Addison-Wesley, 1999
3. Desineni Subbaram Naidu: Optimal control systems, CRC Press, 2002

*Medveileder: Håkon Dahl-Olsen*

## **SIS-9: Self-optimizing control of polynomial systems**

To obtain optimal operation, it is important to identify “self-optimizing” controlled variables. In this project the objective is to find higher-order self-optimizing variables

- Literature study on polynomial systems
- Deriving a polynomial model approximation
- Finding polynomial self-optimizing control variables using elimination techniques
- Implementing the control structure in Simulink

*Medveileder: Johannes Jåaschke*

## **SIS-10: Optimalization of process steps in a production line of contrast agents including charcoal filtration, water and 2- methoxyethanol removal. Increased throughput in the process steps through maximized reactor utilization and optimal regulation**

Several process steps in a production line have to play together to maximize the throughput in the line through regulation of reactor volum, optmal distillation, filtration, concentration and regulation of energy input.

The work will include modelling of the process steps using excisting process parameters and process information.

Concering the secrecy, if we are able to keep the actual names of the product involved out there should not be any problem with that. We need anyway a secrecy agreement with the actual student concerning information we give him/her concerning our process. This will also include the right to exclude information from the master work which we like to be kept secret.

*Medveileder: Didrik Malthe-Sørensen*

**HP Professor Heinz Preisig**

## **HP-1: On time scaling in chemical processes**

### Project description

The Process Systems Engineering group is heavily involved in process modelling. The objective is to generate a very general framework in which models for the process industry can be generated quickly and rapidly.

Making time-scale assumptions is done very frequently in the modelling process. Mostly it is not really done explicitly, but just kind of happens. Examples are decision on how to model a heat transfer, for example using an overall heat transfer model is making a time-scale assumption about

the distributed transfer system to be of negligible capacity. Similar assumptions appear all over the place and we would like to put this problem into a more systematic framework.

The problem of getting measures for the relative dynamic of parallel fundamental transfer process is a common problem in chemical engineering. Probably best known are the “modules” such as the Thiele modules and dimensionless numbers. The derivation of such modules is very frequently based on “pseudo steady-state” assumptions, which in mathematical terms is a standard singular perturbation.

The project should look into the literature and analyse the mechanism behind the derivation of the different modules and the like with the aim of deriving a generic understanding behind these measures. In the next stage we want to know if such measures are useful in deciding if or if not the underlying pseudo steady-state assumption can be made or not and if possible on how wrong one is if one does make the assumption dependent on the dynamics.

## **HP-2: Computer-aided modelling**

Project description

We are building on a new tool expanding on three previous generations of modelling tools. The project could be any combination of the following:

- use the existing theory definition tool to include the main balances (mass, energy, momentum)
- explore the possibilities of using the tool for distributed systems.
- implement thermo component
- expand to include entropy

## **HP-3: Control lab rejuvenation**

Project description

The control lab shall be updated and augmented with a couple of experiments. Initial plans have been developed. We invite to help thinking about possible, interesting processes and their realisation.

## **HP-4: Reduced- order models for distillations**

Project description

Starting with complex models we seek to construct simpler models using frequency-domain techniques.

## **HP-5: Felles Lab Experiments**

Project description

What is called the felleslab has a number of experiments we would like to look at and explore their potential to be tighter linked to a computing device, both on the measurement as well as on the control side.

Objective of the project is to improve the teaching value of the experiments by bringing them up to the current standard.

The idea is to use standard components on the measurement side, like pressure difference modules and circuits for temperature measurements using small scale, embedded-system based data acquisition and control devices.

## **HP-6: Model reduction**

Project description

In the past years we have been involved in an EU project about model reduction. A couple of ideas are waiting to be tried and realised. An important subject for control. Processes range from glass ovens to chemical reactors and separation processes.

## **HP-7: Automatic Safety and Hazard Analysis**

Project description

Safety and hazard analysis are done mostly in a systematic way, but based on mental models of the process. We would like to change this and use a model-based approach. Starting from a model of a continuous process, we have software that computes the possible things that may happen if the environment changes or faults occur.

Since we can do this computation, this method could be used to study if indeed something could possibly happen, which is precisely what a safety and hazard analysis does.

This type of analysis would give a systematic way of exploring the possible faults in a system, a subject of great interest to industry.

## **HP-8: Simple Thermo Server**

Project description

The Process Systems Engineering group is heavily involved in process modelling particularly distillation. Distillation models and associated material models are used at a high frequency.

The project is aiming at implementing a server that provides:

- Interface requesting material information over the net
- Generic distillation simulation, freely configurable running on the server

The material model software is running and we are using it in a variety of ways. We thought it would be fun and very useful to build a little user interface that enables the interactive use of what the core can generate. This could then be put on-line in the form of a web page, for example. We have a rather generic distillation column model that is quite generally parameterised, which could be augmented with an appropriate interface to make it usable on the web.

*Supervisors: Heinz A Preisig, Tore Haug-Warberg*

*Cosupervisor: Bjørn Tore Løvfall, SINTEF Materialer og kjemi*

# Miljø- og reaktorteknologi

## Reaktorteknologi

**HAJ**      **Professor Hugo Atle Jakobsen**

**HAJ-1: Numerical investigation of integrated reactor-separator designs for pre-combustion with CO<sub>2</sub> Capture.**

Based on models of different complexity for describing fluidized bed and fixed bed reactor process performance various reactor designs will be evaluated for the steam methane process with CO<sub>2</sub> capture. A superior purpose with this investigation is to decide which of these two reactor types is best suited for the given process.

In this work we intend to simulate the whole process cycle considering the reformer reactions, adsorption of CO<sub>2</sub> and desorption of CO<sub>2</sub> from the adsorbents. To optimize the reactor performance with CO<sub>2</sub> capture, we may consider the possibility to reduce the operating temperature, reduce the reactor volume, lower pressure, intensify heat integration and to reduce emissions fluxes compared to the conventional steam methane reformer process. The first part of the work consists in deriving suitable models for the different reactor types. Then, the models should be implemented in matlab and solved with a suitable numerical method.

It is possible to split the project into two parts so that one student may study the process operated within fixed bed reactors and a second student investigate the process operated within fluidized bed reactors.

*Medveileder: De Chen*

**HAJ-2: Numerical analysis of multicomponent mass diffusion in catalyst pellets for combustion with and without CO<sub>2</sub> capture.**

En konsistent modell for multikomponent massediffusjon er utledet og vi ønsker nå å validere denne. Tradisjonelt er Maxwell-Stefan modellen formulert for mol-flukser og ikke masseflukser. Dette begrenser bruken av Maxwell-Stefan formuleringen da varme og impulsbalansene er formulerte basert på massemidlene hastigheter og ikke molmidlene formuleringer. Vi skal vise at den nye masseformuleringen er konsistent med den tradisjonelle molbaserte formuleringen.

Til dette formål skal vi bruke katalysatorpelletene for steam metan reforming og partiklene for sorption enhanced steam metan reforming som testeksempler. Videre skal vi evaluere hvorvidt det er rimelig å neglisjere konvektive bidrag i disse modellene noen som er en vanlig antagelse i tradisjonell reaktormodellering.

Modellene skal implementeres i matlab og løses vha ortogonal kollokasjon.

*Oppgaven er reservert Jannike Solsvik.*

*Medveileder: Magne Hillestad*

**HS:**    **Professor Hallvard F. Svendsen**

**HS-1: 2D Droplet-droplet study at different pressures studied using a high resolution model at the NJORD supercomputer.**

High resolution models can be used to interpolate and extrapolate from experimental data on droplet-droplet collisions. From a parametric investigation of such models the main differences in the collision regime



between low and high pressures can be reproduced and important mechanisms elucidated. The goal is to study, for a given system, how the collision efficiency changes with variations in the pressure.

A computational code has been developed based on a meso-scale model. The work will be split in two stages, firstly to understand the model on a basic level and secondly to use it as a black box to compute the desired results. Therefore little programming is intended for the student. The work will consist in generating batch files for running the model in the NJORD supercomputer. The results will thereafter be extensively examined and interpreted.

**Thesis:** Completing the mapping. Discussion on the missing regions.

Optional: During the thesis stage a publication can be prepared for international scientific journal where the master student will figure as co-author.

Requirements for the candidate

- Basic Matlab (required)
- Modelling course (preferred)
- Programming (preferred)
- Unix platform (preferred)

Reference for the student: "Two--Phase flow lattice Boltzman method for simulation of high pressure natural gas systems" Dupuy, Fernandino, Jakobsen, Svendsen(to be published)

**Reserved Yi Lin**

**Cosupervisors:** Pablo Dupuy, Hugo Jakobsen

### **HS-2: CO<sub>2</sub> absorpsjon: Likevekt- og kinetikkmålinger.**

For validering av likevekts og kinetikkmodeller for CO<sub>2</sub> absorpsjon trenger vi gode eksperimentelle data. Vi har, sammen med SINTEF Materialer og kjemi mange ulike apparaturer for bestemmelse av CO<sub>2</sub>-likevekter ved varierende trykk og temperatur, kinetikk, løslighet avd CO<sub>2</sub>, damp/væske-likevekter og termokjemiske data. Vi har tre PhD-kandidater som arbeider med disse målingene og det er et stort behov for å utvide forsøkene. Sammen med flere utenlandske universiteter er vi med i et stort EUprogram hvor denne aktiviteten inngår. Det vil være stor fleksibilitet med hensyn til oppgaveinnretning noe som også innebærer at det her vil være rom for flere prosjektoppgaver. Alle oppgavene vil bestå i eksperimentelt arbeid kombinert med modellering i Matlab.

Alle apparaturene er operative og vil kjøres sammen med PhD-stipendiater eller personale fra SINTEF. Denne oppgaven vil spesielt legge vekt på VLE-målinger i uladete systemer med ebulliometer og modellering av disse i en NRTL-modell.

**Oppgaven er reservert Øystein Jonassen**

**Veileder:** Karl Anders Hoff, og Olav Juliussen, Sholeh Ma'mun, Inna Kim

### **HS-2: CO<sub>2</sub> absorpsjon: Modellering av absorpsjonsprosesser.**

I forbindelse med utvikling av nye absorpsjonssystemer for CO<sub>2</sub>-innfangning er det utviklet et eget simuleringstverktøy for absorpsjonsprosessen. Videre har vi nylig fått Aspen Tech sine programmer som kan brukes til det samme samtidig som vi har brukt et kommersielt verktøy kalt Protreat. Vi ønsker å sammenligne disse, enten alle tre eller to av dem, og vurdere konsistens og identifisere problemer med dem. Videre ønsker vi å kjøre optimaliseringstudier for nye aminblandinger. Kunnskap og interesse for modellering og programmering er en forutsetning

**Oppgaven er reservert Ane Dyb Løvold**

**Medveiledere:** Xiao Luo og Andrew Tobiesen

## **MH: Professor Magne Hillestad**

### **MH-1: Effekten av driftsbetingelser i metanolanlegget**

StatoilHydros metanolfabrikk på Tjeldbergodden konverterer naturgass til metanol. Fabrikken består av en luftgassfabrikk, et syntesegassanlegg, metanolsyntese og et destillasjonsanlegg. Denne oppgave er knyttet til syntesegass anlegget og metanolsyntese loopen.

Det er av interesse å studere effekten av ulike faktorer i metanolsyntese loopen ved forskjellige katalysatoraktiviteter, som resirkulasjonsforholdet, utløpstemperatur av reaktor, syntesegass sammensetning, støkiometrisk tall i "makeup gas" og inert mengde, samt tykk. Etterhvert som katalysatoren deaktiviserer, vil effekten av faktorene endres. Dette skal kartlegges.

Andre faktorer vil være aktuelt å studere for syntesegassanlegget.

Prosessen må modelleres i et passende verktøy. Det er nødvendig å ta med en modell av reaksjonskinetikk. Vi baserer dette på en publisert modell. Mulig verktøy kan være Hysys eller Aspen Plus, men andre verktøy kan også vurderes.

### **MH-2: Systematisk design av kjemiske anlegg**

Det er et stadig press på å øke effektiviteten av prosesstekniske anlegg. Av økonomiske og miljømessig årsaker må volum (masse katalysator), og innsatsfaktorer som råvarer og energi utnyttes mest mulig effektivt til å produsere ønsket produkt. Et kriterium som ofte brukes for å rangere reaktor og katalysator er "space-time-yield", som sier noe om hvor produktiv reaktor og katalysator er. Andre kriterier som inkluderer energieffektivitet kan også brukes.

Den sentrale delen av et prosessteknisk anlegg er kjemisk konvertering, som består av en eller flere reaktorer, varmevekslere, kompressorer, separatorer og resirkulasjon. Med utgangspunkt i et kjent kjemisk system med kjent kinetikk osv, hvordan skal reaktanter fødes inn, varme fjernes/tilføres, fluid blandes, katalysator fordeles mv for at produktiviteten blir maksimal? En metode for systematisk design av en produksjonslinje er foreslått og skal videreført. Designfunksjoner som beskriver blandeprofil, fordeling av fødestrømmer, fordeling av varmeoverflate, temperaturprofil av kjølevarmemedium, katalysator fortynnning og trykk blir beregnet slik at produktiviteten eller tilsvarende kriterier maksimaliseres. En konsistent modellformulering er en sentral del av metoden og beskriver de fenomen som er viktig for design. Reaksjoner og faseoverganger behandles på enhetlig måte.

Prosessintegrasjon, der energi og masse utveksles internt og med andre anlegg, er en parallel aktivitet. Metoden skal anvendes på et kjent system der kinetikk og andre fenomener er beskrevet. Modellen skal programmeres i Matlab.

### **MH-3: Katalysator ytelsesevaluering**

Katalysatoren i metanolsyntesen deaktiviserer over tid. Deaktiveringshastigheten vil variere med driftsbetingelser i anlegget. Det er av interesse å beregne (estimere) katalysatoraktiviteten fra målinger i anlegget. Det vil være temperaturmålinger, sammensetningsmålinger, strømningshastigheter mv som skal brukes til å estimere en gjennomsnittlig aktivitet i reaktor. Dersom temperaturmålingene i metanolreaktorene er gode, kan det også være mulig å estimere fordelingen av aktivitet langs reaktorene. Oppgaven går ut på å kartlegge hvilke målinger som finnes og som bør brukes, samt å konstruere en modell og algoritme for estimering av aktivitet. Det er redundans i målingene, som skal brukes til å beregne usikkerhet og det vil være aktuelt å rekonsilliere målingene mot stasjonære massebalanser.

### **MH-4: Maksimal utnyttelse av katalysatoraktivitet**

Når tidpunkt for skifte av katalysator er kjent, kan problemstillingen i noen tilfeller være å utnytte gjenværende katalysatoraktivitet til maksimalisere total produksjon (evt inkludert andre kostnader som kompressorarbeid). En slik problemstilling kan formuleres som et dynamisk optimalisering problem med kjent sluttid. Til dette kreves en prediktiv modell av reaktor inkludert

deaktiveringshastighet. Dersom det er tilstrekkelig gjenværende aktivitet, kan reaktorene kjøres hardere for å få større omsetning per pass.

**MH-4: Modellering av deaktivering og verifisering av modell for metanolsyntesekatalysator**

Mekanismer for deaktivering skal kartlegges og mulige modeller skal foreslås. Basert på data fra metanolfabrikken på Tjeldbergodden skal en prediktiv modell for deaktiveringshastigheten av syntesekatalysator verifiseres og tilpasses.

*Oppgaven er reservert Inger Roksvåg Mæhle.*

**Separasjons- og miljøteknologi**

**M-BH Professor May-Britt Hägg**

**M-BH-1: Én oppgave innen polymerkjemi/osmotiske prosesser**

Detaljer diskuteres med veileder.

*Veileder: Tom-Nils Nilsen*

**M-BH-2: To oppgaver innen simulering og optimalisering av spesifikk brønnstrøm**

For Aker Subsea. Detaljer diskuteres med veileder og Aker Subsea.

*Reservert Kristine Røsting og Tone Kalstad*

*Veileder: Tom-Nils Nilsen*

**M-BH-3: A discussion of separation equipment vs fluid velocity**

Background / Intro

A pressure boosting subsea process station may consist of a gas-liquid separator and a liquid pump for pressure boosting of the separated liquid phase to a host platform. The gas phase is transported to the host by natural pressure. The separator liquid level is controlled by rotational speed of the pump, while the pressure in the separator is controlled by topsides choking of the gas flow. This process system is particularly beneficial for deep water application where a substantial increase in pressure is required. This is more easily obtained by boosting of a single liquid phase compared with pressure boosting of a multiphase fluid flow.

**Problem**

One important flow assuring aspect with this type of process system is related to the multiphase flow in the gas phase flowline/ riser. The fluid is in equilibrium at the separator condition. When pressure and temperature is reduced along the flow path liquid will condensate from the gas phase. A proper system design shall facilitate condensed liquid in the form of droplets to be continuously be carried out by the gas phase.

The size and the number of gas flowlines and risers must be selected in order suit the production profile so that sufficient high gas velocity is maintained. This velocity must be considered with respect to the liquid droplet size formed by the condensing liquid. The settling velocity of the liquid droplets shall then nor exceed the gas bulk velocity.

**Task**

Based on a defined case (defined design basis, fluid properties, production profile).

Establish rate of condensation

Calculate droplet size

Establish settling velocity

Calculate gas bulk velocity

Evaluate and discuss alternative separator technology solutions

Propose size and configuration of the process system (may limit degree of freedom for candidate).

#### **M-BH-4: Development of pilot scale FSC (fixed-site-carrier) flat sheet membrane preparation and characterization of the membrane**

According to Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC)'s report, "there is new and stronger evidence that most of the warming observed over the past 50 years is attributable to human activities and human influences are expected to continue to change atmospheric composition throughout the 21st century." - Carbon dioxide (CO<sub>2</sub>) is the greenhouse gas that makes the largest contribution from human activities.

**Thus there is a strong and urgent need for solutions that capture CO<sub>2</sub> from especially burning fossil fuels & biomass and natural gas sweetening. There are currently several different approaches under development in addition to the proven & widely exploited technology of CO<sub>2</sub> scrubbing by amine solvent though environmentally hazardous and high energy consuming.**

Use of membrane for CO<sub>2</sub> capture has many advantages of low energy consumption and non-use of additional chemicals that may cause an extra environmental problem.

A new type of membrane for CO<sub>2</sub> capture has been developed in MEMFO group (IKP, NTNU) for several years. This type of membrane (FSC) has a polymer layer of special carriers fixed onto polymer backbone on proper support to capture and transport exclusively CO<sub>2</sub> from various sources such as flue gas, natural gas and biogas.

The performance of this membrane has been proven to be one of the best ever documented among various CO<sub>2</sub> capture membranes though it has been in small lab scale, which thus has brought much attention to many relevant companies.

Now the development is at a crucial stage of scaling-up and it will be supported by Statoil-Hydro and worldwide known membrane company UOP (USA) through new cooperative contracts with them.

According to the contracts, membrane performance is to be confirmed at a pilot scale set-up firstly and thus it is necessary to prepare membranes of pilot scale much bigger than lab scale., which will constitute the very essential part of the further development of this membrane into real commercialization.

The preparation of large scale membrane will need a new set of preparation parameters different from but based on the small scale parameters developed so far because of different film forming property of casting solution on support, different temperature profile when heat-treated, difficulty in obtaining uniform thickness of cast layer and keeping flatness without wrinkles on the whole area (for flat sheet membrane), etc.

The project of "masteroppgave" will be focused on two tasks: 1) optimization of parameters for large scale (pilot scale) preparation of flat sheet membrane & preparation of enough number of membranes for pilot set-up test and 2) performance characterization of the membranes prepared.

In task 1) a device (already partly developed) will be used & improved for more effective & stable production of a number of large scale flat sheet membrane together with finding optimum parameters for casting, heat-treatment and device operation (vacuum), etc.

In task 2) the performance (permeance and selectivity) of small membrane cuts from the prepared large flat sheet membrane will be characterized at various temperature and pressure conditions for CO<sub>2</sub>-N<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub>-CH<sub>4</sub> gas mixtures including SEM picture taking if necessary.

*Supervisor: Taek-Joong Kim*

**M-BH-5: Clean technology: Production and regeneration of carbon hollow fibre membranes for gas separation (biogas upgrading to fuel quality as user case)**

Membrane materials have been identified and developed in the membrane research group (Memfo) at IKP/NTNU over the last years, and we are now in the process of upscaling from flat sheets to hollow fibers. Hollow fibers result in a high membrane packing density, which is attractive for industrial applications. A spinning machine (extruder) for the production of such fibers is in operation in our lab. Suitable polymeric hollow fibres can be carbonized, resulting in membranes with excellent combination of selectivity (efficiency) and permeability (productivity) for gas separation. However, carbon membranes may suffer from aging effects, i.e. some loss of permeability after being in operation for some time.

Memfo has developed a new regeneration method for restoring the permeability of carbon membranes. The method is based on electrothermal treatment of the carbon, by applying a low voltage current through the membrane. One of its benefits is that regeneration can be done on-stream without losing selectivity, so down-time in the separation process is avoided and there is no need for an extra set of membranes (area saving). The method has been demonstrated on flat carbon membranes.

It is the scope of this MSc candidate project to identify the mechanisms between the carbon material, the current and the gas atmosphere. Valuable characterization methods should be identified and, if possible, applied.

Research in the lab includes the formation of a concept *hollow fibre* module with non-conducting housing, the selection of a suitable conductive resin for wiring the fibres, the sealing of a single fiber in the module and then gas testing (selected gases with and without current). Important factors for module formation are pressure resistance, cost of module parts and ease of fabrication.

Next, the concept module should be scaled up to a multi-fibre module. The effect of the applied current should be investigated as a function of module scale. The approximate minimum current needed for keeping a stable permeability for a given module should also be found.

In August 2008, a new company called MemfoACT was established, which is aiming at commercializing carbon membranes for different applications. The company is owned by NTNU Technology Transfer AS and the inventors listed below. This MSc project will be part of a project funded by the Norwegian Research Council and Innovation Norway.

*Supervisors: Jon Arvid Lie (Memfo/MemfoACT), Arne Lindbråthen (MemfoACT)*

## **Krystallisasjon**

**J-PA: Førsteamanuensis Jens-Petter Andreassen**

**J-PA-1: Absorpsjonskinetikk og faststoffkrystallisasjon under innfanging av CO<sub>2</sub> i ammonium-løsninger.**

*To oppgaver som er reservert Kjersti Blytt-Tøsdal Kolås og Hege Holsæter*

*Medveileder: Ellen Flaten*

**J-PA-2: Scale formation and bulk precipitation of calcium carbonate in the presence of scale inhibitor**

*Oppgaven er reservert Elin Bergstedt*

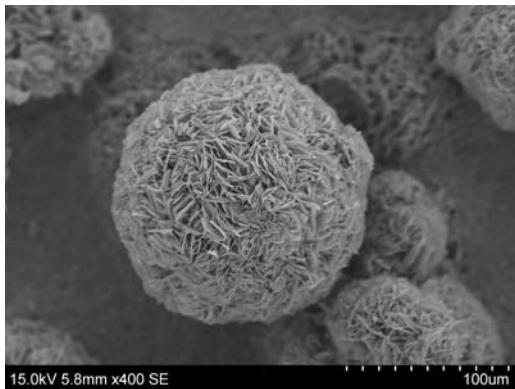
*Medveileder: Ellen Flaten*

**J-PA-3: Effekten av jern og magnesium på krystallveksten av ulike polymorfer av kalsiumkarbonat ved islandføring av naturgass.**

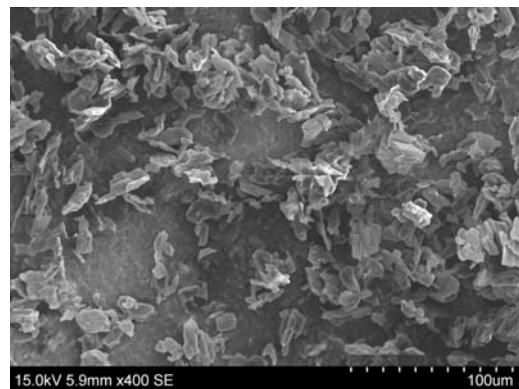
*Oppgaven er reservert Vaseeharan Sivanesan*

*Medveileder: Ellen Flaten*

#### J-PA-4: Transformasjonsmekanismen til polykristallinske partikler av glutaminsyre



bilde 1



bilde 2

Hørt om glutamin syre? Nei? Men du har sikkert smakt det ettersom L-glutamin syre er en aminosyre som blir brukt som smaksforsterker, spesielt i det asiatiske kjøkkenet. I denne hovedoppgaven blir det lagt fokus på å studere hvordan runde krystaller (bilde 1) av L-glutamin syre omdannes til platekrystaller (bilde 2). Mekanismen synes å være grunnleggende for slike forbindelser og ved en ordentlig kartlegging kan dette føre til en publikasjon i et internasjonalt tidsskrift. Det skal brukes flere metoder for å få en bedre forståelse av transformasjonsmekanismen. XRD (røntgen pulver diffraksjon) er en metode for å studere krystallgitteret og vil kunne kaste lys på mulige forskjeller mellom de sphærulitiske (bilde 1) og de plate-aktige krystallene som videre skal karakteriseres med SEM (scanning electron microscopy). I tillegg vil det bli brukt UV-spektroskopi for å studere krystallenes løselighet som på en indirekte måte også kan forklare omdanningsmekanismen. Påvirkingen av inhiberingssubstanser og podekrystaller med ulik form, størrelse og gitterstruktur på transformasjonsprosessen er en viktig del av arbeidet.

*Medveileder: Ralf Beck*

#### J-PA-5: Krystallisjon av antibiotika

*Axellia Pharmaceuticals is a leading producer of Active Pharmaceutical Ingredients, with more than 50 years experience in fermented antibiotics.*

Axellia Pharmaceuticals strive towards having the best technology available for purification of their new and existing Active Pharmaceutical Ingredients (mainly antibiotics). A specific antibiotic is produced by fermentation and is isolated and purified through several purifications steps. Today, two crystallization steps are needed in order to achieve the required low content of impurities in the final product.

Axellia is already producing this antibiotic in large scale. Recently, the crystallization process has been optimized, giving a product with improved quality. This resulted in improved insight to the crystallization mechanisms and especially a better understanding of the importance of controlling the degree of supersaturation throughout the crystallization process. However, there are still issues to investigate and further improvements are requested, and most probably within reach.

The project will focus on the recrystallization step, and should result in further information and understanding of the crystallization mechanisms. The work will include aspects such as:

- Establishment of the solubility curve and metastable zone width
- Investigation of the effect of various process parameters (temperature profile, concentration, seed amount, stirring, etc.) on product quality, filtration speed and efficiency, drying properties etc.
- Determination of optimal process conditions

The work will be performed by use of automated laboratory reactors, in-line particle size measurements (Focused Beam Reflectance Measurements, Lasentech), microscopy and general laboratory techniques such as evaporation and filtration. HPLC will be an important analytical tool for determination of product quality and process yield.

**Supervisor at Axellia Pharmaceuticals: Lene Aassveen ([lene.aassveen@alpharma.no](mailto:lene.aassveen@alpharma.no))**

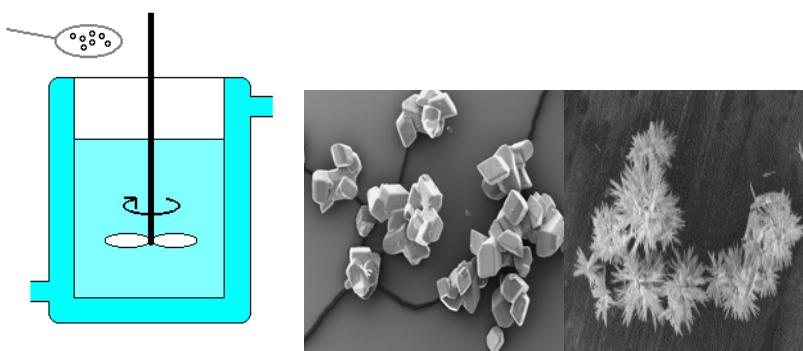
**DM-S: Professor II Dick Malthe-Sørensen**

**DM-S-1: Krystallvekst av et aromatisk amin, en modellsubstans for produksjon av røntgenkontrastmidler.**

I produksjonen av basis substanser til kontrastmidler har GE-Healthcare en omfattende bruk av krystallisering som en separasjon og rensemetode. For å kunne styre disse prosessene optimalt(kvalitetsmessig og økonomisk) er det viktig med en grunnleggende forståelse av hvilke parametere som kan påvirke krystallisjonsprosesser. Noen ganger kan krystallisjonsprosesser stoppe opp og skape et stort problem i produksjonslinjen.

Et viktig mål med denne oppgaven er å forstå hvordan spesifikke forbindelser kan hemme krystallveksten i en slik prosess ved å studere virkningen av slike forbindelser på løseligheten, kjernedannelsen og krystallveksten i et modellsystem.

Utgangspunktet er å finne hvordan uorganiske ioner påvirker løseligheten og krystallveksten under forskjellige forhold. Krystallveksten vil måles som funksjon av gjenværende konsentrasjon i krystallisjonsløsningen. En vil også undersøke dannelsen av forskjellige polymorfer av krystallene og følge utviklingen av krystallfordelingen under krystallisjons- prosessen. En ønsker å forstå følgende forhold ved krystalliseringen:



**Krystallisjonsparametere**

- Løselighet
- Kjernedannelse
- Krystallvekst



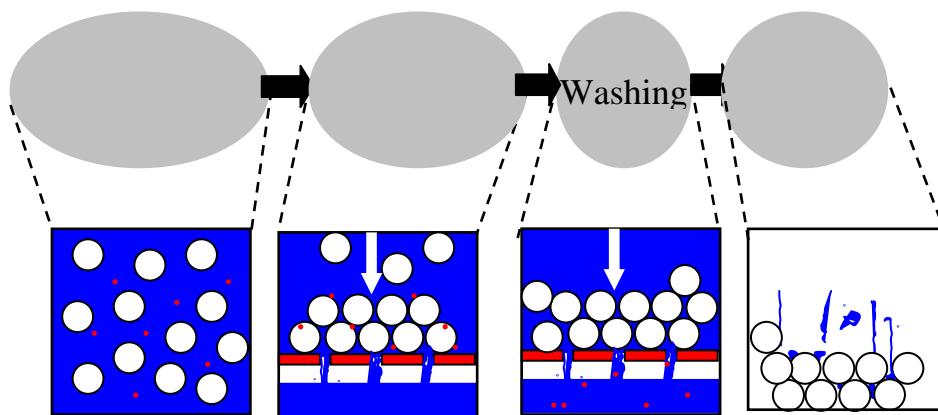
**Løselighetskurver**

Type krystall  
Krystallstørrelsesfordeling

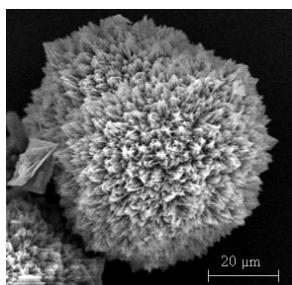
$$\text{Vekst: } G[m/s] = \frac{dL}{dt}$$

**DM-S-2: Stabilitet av spherulitiske krystaller i krystallisjonsprosesser, betydningen av krystallisjons – og prosessparametre på morfologi og filtreringsegenskaper.**

Krystallisering fremstår som en viktig separasjons- og rensemetode i produksjonen av finkjemikalier og farmasøyitiske produkter. Krystallenes egenskaper som størrelsesfordeling, morfologi og kjemisk/fysikalske egenskaper har stor innflytelse på hvordan prosesstrinn som filtering vasking og tørking kan gjennomføres. En vil undersøke hvordan krystalliseringsbetingelser og prosessparametre kan påvirke krystallegenskaper og filtreringsegenskaper. Utgangspunktet vil være observasjoner som har vist at det skjer klare fysiske endringer i krystallmorfologien hos spherulitter med hensyn på krystallisjonstid og temperatur/overmetning og påfølgende kakemotstand. I oppgaven vil en undersøke hvordan temperatur, overmetning, rørehastighet og tid påvirker krystallmorfologien og dermed filtrerbarheten av det faste stoffet.



Figur etter Ralf Beck som viser de enkelte steg i en krystalliserings og separasjonsprosess. En ønsker å forstå følgende forhold ut fra gitte krystalliserings- og prosessbetingelser.



- Betingelser
- Temperatur
  - Overmetning
  - Rørehastighet
  - Tid



- Krystall og filteringsegenskaper
- Krystallmorfologi
  - Størrelsesfordeling
  - Kakemotstand
  - Porøsitet
  - Krystalloverflate

**Oppgaven er reservert Rita Heskestad.**

Medveileder: Ralf Beck

# Papir og fiberteknologi

ØWG      Professor Øyvind Weiby Gregersen

ØWG-1: Colloidal wood resin: characterization, stability, flocculation and interaction with surfaces

## Background

Mechanical pulping is an energy-intensive process. In the production of mechanical pulp a large amount of extractives is dispersed into the process water as colloidal droplets and they continue to be a concern to pulp and paper manufacturers. Particles of insoluble extractives may later aggregate and deposit onto paper machine equipment or the formed sheet, thus affecting the runnability of the paper machine as well as the quality of paper.

Deposits are often formed when the colloidal stability is disturbed and resin droplets are aggregated. The droplet stability is dependent on, for example, pH, electrolyte concentration, viscosity, temperature and also on the chemical composition of the resin (Allen, 1979). The behavior of the different extractive fractions and their individual components in water closure and pulp washing is not well known. In most process studies the extractives have been treated as a single group despite their complex composition and nature.

Extractives can have a serious negative effect on the environment and may also cause problems in the operation of a pulp and paper mill and thus severely affect its productivity. Removal of extractives from the process water (as soon as possible in the beginning of the mechanical process) is important because the extractives are responsible for increased energy consumption in the subsequent refining process. The extractives handling strategy should give an improved paper quality.

Using an Impressafiner it is possible to remove up to 40% of the incoming extractives from the wood chips and it is also possible to reduce the total energy consumption during subsequent refining. The Impressafiner is designed to compress the chips to a uniform size distribution as they proceed to the discharge of the screw press. Inside the Impressafiner there is a high compression ratio which squeezed out extractives both from resin canals as well as from parenchyma cells inside the wood structure.

Extractives which are removed from the process have to be taken care in an economical way. They have to be in a form making it possible to remove them from process water before the water is released from the mill or reused in the mill. In that respect, the extent to which the extractives are present in either a colloidal or fibre-bound phase is important.

The stability of colloidal resin against salt-induced aggregation was studied extensively by Sundberg et al.(1996), Mosbye (2003), Jonhnsen et al. (2004). The results showed that the dissolved substances from unbleached mechanical pulp play an important role in the stability of the colloidal extractives.

## The MSc project

The main objective of the work is to study the stability and flocculation of extractives in the process water and the interaction with surfaces. In this way it will be necessary to create model water dispersions (characteristics of the model water dispersion should be close to the water from the Impressafiner) and also to study the behavior of different types of cationic polymers and simple electrolytes on the flocculation behavior of extractives from the model water.

In pure dispersions the colloidal extractives are electrostatically stabilized and can thus be destabilized by addition of simple electrolytes or polymers. However, in the process water extractives are quite stable against electrolyte-induced aggregation because dissolved polymers adsorb to the colloid surfaces and stabilize them. To be able to remove extractives from the process water it should be possible to flocculate them and to use flotation technique (i.e. Dissolved Air Flotation). The loss of colloidal stability will be followed as electrolyte-induced aggregation of DCS and the subsequent sedimentation of the aggregates by gravity or centrifugation using a Turbiscan instrument.

***Supervisors: Dr Per Stenius and Professor Øyvind Gregersen***

***PhD. Student Mihaela Tanase***

## **References**

1. Allen L.H., 1979 –“Characterisation of colloidal wood resin in newsprint pulps”, Colloid and Polymer Science, vol.257, no.5
2. Mosbye J., 2003 – “Colloidal wood resin: Analyses and interactions”, PhD Thesis, NTNU, Department of Chemical Engineering
3. Johnsen I., Lenes M., Magnusson L., 2004 – “Stabilization of colloidal wood resin by dissolved material from TMP and DIP”, Nordic Pulp and Paper Research Journal, vol.19, no.1
4. Sundberg K., Thornton J., Holmbom B., Ekman R., 1996 –“Effects of wood polysaccharides on the stability of colloidal wood resin”, Journal of Pulp and Paper Science, vol.22, no.7