

# Wiskunde onmisbaar onderdeel van proceschemie

**Duurzame energie is in opmars. Toch zijn we nog voor een groot deel afhankelijk van fossiele brandstoffen. Hoe benut je die brandstoffen zo efficiënt mogelijk met zo min mogelijk schade voor het milieu? De NLT-module 'Oude energie in nieuwe vaten' gaat hier uitgebreid op in. Naast de nodige scheikunde bevat de module een flinke portie wiskunde.**



Martin van Sint Annaland, hoogleraar Chemical Process Intensification aan de Technische Universiteit in Eindhoven, was betrokken bij de ontwikkeling van de NLT-module en vertelt ons iets over de achtergronden. "In de proceschemie ontstaat er steeds meer belangstelling voor het efficiënter benutten van grondstoffen en energie", legt Van Sint Annaland uit. "Daarnaast wil je schadelijke bijproducten zoveel mogelijk voorkomen. Het komt dus neer op meer en veiligere producten maken met minder grondstoffen en minder energie."

## Minder CO<sub>2</sub>

Dit is makkelijker gezegd dan gedaan. "De natuur heeft zo zijn eigen wetten", stelt Van Sint Annaland. "Naast de gewenste chemische reacties heb je altijd te maken met bijproducten. Je moet daarom niet alleen de reactie zelf ontwikkelen maar ook scheidingsmethoden om de ongewenste producten af te scheiden. Het mooiste is het als je dat in één apparaat kunt integreren. De reactie verloopt vaak beter als de bijproducten meteen worden afgescheiden, de scheiding zelf kan beter verlopen en soms verlopen allebei de processen beter als je ze integreert. Het grote voordeel is dat je zo kleinere en compactere reactoren kunt maken met een hogere efficiency."

## *"De natuur heeft zo zijn eigen wetten."*

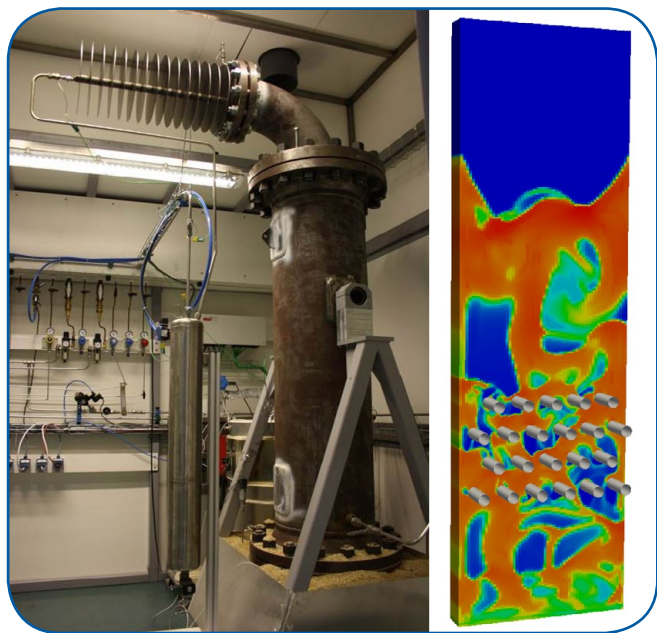
Een belangrijk onderwerp is de afvangst van CO<sub>2</sub>. Bijvoorbeeld bij de productie van waterstof. "Waterstof staat in de belangstelling vanwege zijn rol in een mogelijke waterstofeconomie", licht Van Sint Annaland toe. "Niet alleen als energiedrager, maar ook als grondstof bij allerlei chemische syntheses." Een manier om waterstof te produceren, is via een reactie van aardgas met stoom:  $\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + 3 \text{H}_2$ . Het gevormde CO kan doorreageren met stoom via:  $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}_2$ . "Dit zijn evenwichtsreacties die op een gegeven moment stoppen.

Als je tijdens de reactie waterstof onttrekt, verschuiven beide evenwichten en kun je de grondstoffen volledig omzetten in hun gewenste eindproduct, in dit geval waterstof. Bij een reactietemperatuur van 600 à 700°C kun je de afscheiding van waterstof in het proces integreren. Bij dit proces ontstaat er echter ook CO<sub>2</sub>." Een belangrijke vraag is dus: Kan het productieproces van waterstof schoner?

Van Sint Annaland en zijn medewerkers onderzoeken wat mogelijk is met een flinterdun membraan dat in het reactievat wordt aangebracht. Dit membraan werkt als een filter waarmee je ultrazuiver waterstofgas uit het reactiemengsel kunt filteren. Het mooie is, dat deze manier van extractie bij veel lagere temperaturen en dus met veel lagere energieverliezen kan plaatsvinden. Het bijkomende grote voordeel is dat je het CO<sub>2</sub> dat geproduceerd wordt tijdens het proces zelf – via stoomcondensatie – af kunt vangen. Het komt dus niet in de atmosfeer terecht.

## Van theorie naar de praktijk via wiskundige modellen

Het principe lijkt duidelijk, maar hoe voer je het uit in de praktijk? Het membraan is een metalen laagje van 5 tot 10 µm dat op een keramische drager is aangebracht. Als je deze drager in het reactievat plaatst, kom je allerlei problemen tegen. Hoe zorg je voor optimaal transport van het reactiemengsel naar het membraan? Wat gebeurt er als alles opwarmt tot de reactietemperatuur? Krijg je problemen door het verschil in uitzettingscoëfficiënten van het metalen reactorvat en de keramische drager? Hoe voorkom je lekstromen langs de afdichting van het membraan? Krijg je wervelingen, temperatuurverschillen, menging van stoffen? Er zijn allerlei varianten die je kunt proberen, maar een reactorvat bouw je niet zomaar even. Wiskundige modellen brengen uitkomst en zijn dan ook een belangrijk hulpmiddel voor Van Sint Annaland. Aan de hand van de berekeningen worden daarna in een testopstelling gericht een aantal situaties getest.



Links: Een testopstelling waarin temperaturen tot 1200°C en een druk tot 20 bar worden gerealiseerd. Met behulp van ingebouwde sensoren worden metingen aan het reactiemengsel gedaan. Rechts: berekeningen van een membraan-wervelbed, de kleuren geven de concentraties van de katalysatordeeltjes weer (rood=dicht gepakte deeltjes, blauw=gasbellen), de grijze cilindertjes zijn de membranen.

“We maken veel gebruik van *Computational Fluid Dynamics* (CFD)”, legt Van Sint Annaland uit. “Dit zijn numerieke stromingsmodellen waarbij je een reactorvat als het ware ophakt in een heleboel kleine elementjes, zogenaamde *grid cellen*. Voor elk elementje los je een wiskundig stelsel van vergelijkingen op (impuls-, massa- en energiebalansen). Zo kun je de toestand van het hele reactorvat berekenen.”

In de NLT-module ‘Oude brandstof in nieuwe vaten’ voeren leerlingen metingen uit aan verschillende types reactorvaten. Daarbij leren ze hoe je dit met eenvoudige wiskundige modellen beschrijft. De wiskundige modellen die in de proceschemie gebruikt worden, variëren in complexiteit. De industrie werkt vooral met fenomenologische modellen die in grote lijnen de werking van een proces beschrijven. Deze modellen zijn heel geschikt om processen te optimaliseren en worden veel in de proceschemie toegepast. “Als onderzoekers willen we tot op atoomniveau begrijpen wat er gebeurt”, vertelt Van Sint Annaland. “De modellen die we daarvoor gebruiken, beschrijven wat er gebeurt op basis van wat we nu weten. Je kunt ze ook toepassen om nog onbekende condities te simuleren zodat je er nieuwe inzichten mee op kunt doen. We gebruiken CFD’s dan als *learning model*. In het voorbeeld van het membraan willen we graag weten wat er precies gebeurt. Welke concentratieverschillen ontstaan er in de reactor? Hoe transporteer je het geproduceerde waterstof naar het membraan? Wat gebeurt er in de buurt van het membraan?”

### Tot op de kleinste schaal

Samen met wiskundigen neemt Van Sint Annaland ook de wiskundige modellen zelf onder de loep. Hoe maak je modellen waarin je fenomenen tot op de kleinste schaal mee kunt nemen zonder dat je daar eindeloos voor hoeft te rekenen. “Hoe twee deeltjes in een wervelbed botsen, is bepalend voor hoe deze reactor zich uiteindelijk gedraagt. Hoe je dit soort vragen in een model vertaalt is een hot topic binnen de natuurwetenschappen. Wiskunde speelt hierin een belangrijke rol.”

Het lesmateriaal van de NLT-module ‘Oude brandstof in nieuwe vaten’ vindt u op: [http://betavak-nlt.nl/lesmateriaal/modules/gecertificeerde\\_vwo\\_modules/modules/Schonere\\_en\\_efficiëntere\\_fossiele\\_energie/](http://betavak-nlt.nl/lesmateriaal/modules/gecertificeerde_vwo_modules/modules/Schonere_en_efficiëntere_fossiele_energie/).