

Modellering ontrafelt fysisch/chemische processen

# Simulatiesoftware bekort R&D complexe vloeistoffen

**R&D-afdelingen in de chemie kunnen met software het stromingsgedrag van complexe vloeistoffen simuleren. Daarmee kunnen ze laboratoriumexperimenten overslaan, onderzoek finetunen en de ontwikkelingstijd versnellen. Voor praktisch ingestelde analisten is het nog wel wennen aan deze theoretische benadering.**

Redactie Marjolein Roggen, Innovatielink | fotografie: FOODnote

**Complexe vloeistoffen als cement, bloed, slib, verf en vla kunnen zich tijdens het proces of het transport anders gaan gedragen dan gedacht.** Onder invloed van temperatuur, licht, geluid, elektromagnetische velden of chemische reacties kunnen ze gaan klonteren, ketens kunnen zich opsplitsen en herschikken en de viscositeit kan plots veranderen. Het fysisch-chemische gedrag van complexe vloeistoffen doorgronden is een tijdrovend proces. Het kan tot wel twee jaar duren voordat een enkel bouwsteentje aan de specificaties voldoet, typisch trial & error-onderzoek. Vanuit die problematiek begon natuurkundige Eric Lorenz als VU-spin-off anderhalf jaar geleden het bedrijf Electric Ant Lab. Naast hem bestaat het team



Links van boven naar beneden: Eric Lorenz (director & CTO), Alexander Chalikiopoulos (full stack developer), Ulrike Körner (business assistant). Rechts van boven naar beneden: Lampros Mountrakis (computational scientist), Mikolaj Baranowski (back-end developer), Sandra Veen (research scientist).

## RheoCube

Naast contractresearch ontwikkelt Electric Ant zijn eigen software-service voor het meten van het gedrag van vloeistoffen op sub-deeltjesschaal. RheoCube is daar een voorbeeld van. Dit is een virtuele rheometer, waarmee bedrijven hun proces of product virtueel kunnen analyseren. Op de achtergrond voert een supercomputer de berekeningen uit, bijvoorbeeld voor de aggregatie van deeltjes, de verandering van de viscositeit of een snellere reactietijd. Eind dit jaar moet een prototype gereed zijn.

uit nog twee gepromoveerden, een promovendus, en twee afgestudeerden. Samen ontwikkelen ze in opdracht van R&D-afdelingen simulatiemodellen voor complexe vloeistoffen. De modellen geven de werkelijkheid nagenoeg exact weer. Daarmee kunnen laboratoria R&D-trajecten bekorten. Uitdaging is nog wel de sector hiervan te overtuigen.

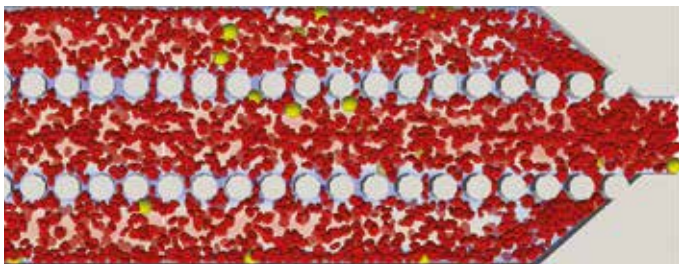
### Bottom-up

Simulatiemodellen zijn vaak een te simpele weergave van de werkelijkheid. “We doen daarom vooraf bijna geen aannames over hoe de vloeistoffen zich waarschijnlijk gedragen”, verklaart Lorenz. “We werken zeer gedetailleerd, bottom-up. Dat voorkomt dat je steeds weer je hele model moet aanpassen als het toch niet helemaal blijkt te kloppen. In ons model verloopt het proces precies zoals in het echt. Als we eenmaal een model hebben ontwikkeld, kun je willekeurig de variabelen invoeren.” Voor de benodigde rekenkracht dienen de supercomputers van SURFsara en van HLRS in Stuttgart. Ook neemt de start-up deel aan het Europese onderzoeksproject Fortissimo dat deze rekenkracht voor het mkb toegankelijk wil maken. “Want met één processor red je het niet,” verzekert Lorenz, “Je hebt minstens honderd parallele processoren nodig.” Intussen draait op het scherm een animatie. Te zien is dat rode bolletjes, die bloedlichaampjes voorstellen, door geluidstrillingen veel sneller op elkaar gaan plakken dan kleinere, gele bloedplaatjes. “Die visuele presentatie van de modellen is een kunst op zich,” verzekert collega Sandra Veen. “Iedereen moet het kunnen snappen.”

### Toepassingen

De simulatiesoftware is breed inzetbaar, stellen de twee. Neem de optimalisatie van dempers in auto's. “Hoe sneller dempers reageren, hoe groter het comfort. Door sensoren in te bouwen die in milliseconden het magneetveld omdraaien en zo de viscositeit van de vloeistof in de dempers veranderen, wordt de klap direct opgevangen en gedempt.” Microfluidics is een





*Passive continuous-flow bloedcelscheiding in een 'cross-flow filtration' microfluidic chip (rood = rode bloedcellen, geel = witte bloedcellen).*

meer voor de hand liggende toepassing. "Een voorbeeld daar is het nabootsen hoe bloed door heel dunne kanaaltjes stroomt. Zo komt een chip voor het passief scheiden van bloedcellen of met akoestiek dichterbij. Uit de simulaties blijkt namelijk dat rode bloedcellen door geluidsgolven eerder samenkomen dan de kleinere bloedplaatjes." Toepassingen liggen er verder in de cementindustrie, de farmacie en de voedingssector. "Ons model is ook te gebruiken voor het simuleren van de uitharding van cement, een gerichtere opname van medicijnen en het voorkomen van klonten in vla."

Ioniqa, een Eindhovense start-up in de recycling van PET-flessen, kreeg dankzij de software een beter inzicht in de eigenschappen van de magnetische microdeeltjes in hun vloeistoffen. Veen: "Voor hen is het grootste probleem de stabiliteit: samenklonteren en uitzakken van de deeltjes zonder dat er een magnetisch veld op staat. Als er klonten in blijven zitten, kan dat de eigenschappen beïnvloeden. Ze kunnen echter niet in het monster zelf kijken, daar bieden simulaties uitkomst."

*'Een enorme winst in tijd en in geld'*

## Richting geven

Hoe veelbelovend dit ook klinkt, het valt niet mee om chemisch analisten aan de modellen te krijgen. Veen: "Chemisch analisten zijn niet opgeleid om te programmeren. Simulatiemodellen vinden ze bij voorbaat al gauw te theoretisch. Toch kan het hun werk enorm helpen. Wanneer je een normale cyclus om een synthetisch deeltje te maken van 1,5 à 2 jaar terug kunt brengen naar een paar maanden of nog minder, boek je een enorme winst in tijd en in geld." Het is dus vooral een hulp bij het begrijpen van fysisch/chemische processen, geen vervanger. "Alles moet natuurlijk nog wel in de praktijk getest worden," benadrukt Lorenz. "Maar je kunt veel beter richting geven aan het testen. Dat is interessant om uit te proberen." **L**

## ChemieLink

Electric Ant Lab presenteert zich onder de vlag van ChemieLink, het netwerk van innovatielaboratoria en Centers of Open Chemical Innovation. ChemieLink brengt partijen bij elkaar, wijst ze de weg, helpt bedrijven zich te presenteren tijdens evenementen en biedt ondersteuning bij externe communicatie. De Amsterdamse start-up is niet gevestigd op de iLAB-locatie van de UvA, die deel uitmaakt van ChemieLink. Er is wel nauw contact met de universiteit waar de simulatiemethoden ontwikkeld zijn en de start-up zijn wortels heeft. Oprichter Eric Lorenz begeleidt ook een AIO op de UvA die de simulatiesoftware gebruikt in zijn onderzoek.

*De magneto-rheologische vloeistof van Ioniqa. De grijze deeltjes vormen ketens die in de shear flow breken en nieuwe ketens vormen. De kleur geeft drukverschillen in de vloeistof aan door veranderingen in de ketens, de rode pijltjes geven de magnetisering van de deeltjes aan.*

