

BTO 2014.019 | Juni 2014

BTO rapport

Inzicht en oplossingen voor kwesties in de waterzuivering door Computational Fluid Dynamics (CFD)

BTO

Inzicht en oplossingen voor kwesties in de waterzuivering door Computational Fluid Dynamics (CFD)

BTO 2014.019 | Juni 2014

Opdrachtnummer

C222015

Projectmanager

D. Vries, L. Palmen (per 1-1-2014)

Opdrachtgever

Vitens (BTO- Speerpuntonderzoek)

Kwaliteitsborger

J.A.M.H. Hofman

Auteurs

B.A. Wols, B. van den Akker

Verzonden aan

Dit rapport is selectief verspreid onder medewerkers
van BTO-participanten en is verder niet openbaar.

Jaar van publicatie
2014

Meer informatie

Bas Wols
T +31 30 6069 604
E bas.wols@kwrwater.nl

PO Box 1072
3430 BB Nieuwegein
The Netherlands

T +31 (0)30 60 69 511
F +31 (0)30 60 61 165
E info@kwrwater.nl
I www.kwrwater.nl



BTO 2014.019 | Juni 2014 © KWR

Alle rechten voorbehouden.

Niets uit deze uitgave mag worden verveelvoudigd,
opgeslagen in een geautomatiseerd gegevensbestand,
of openbaar gemaakt, in enige vorm of op enige wijze,
hetzij elektronisch, mechanisch, door fotokopieën,
opnamen, of enig andere manier, zonder voorafgaande
schriftelijke toestemming van de uitgever.

Samenvatting

Drinkwaterzuiveringsinstallaties zijn meestal ontworpen op basis van vuistregels en/of proefinstallatie-onderzoek, zonder dat er precies bekend is wat er op microschaal gebeurt. Hierbij is vaak een overcapaciteit ingebouwd. Bovendien zijn er vaak verschillende typen installaties voor hetzelfde proces, zonder dat bekend is welke installatie nu beter werkt. De lokale waterstroming kan de werking van de zuivering beïnvloeden en daarbij een lager rendement geven dan oorspronkelijk werd aangenomen. Voor een optimale werking van de diverse zuiveringsstappen is het soms noodzakelijk om het proces op microschaal te benaderen. Fysiek is dit vaak niet mogelijk. Modellen, zoals Computational Fluid Dynamics (CFD), zijn hiertoe wel in staat. Met CFD kan op kleine schaal de stroming, menging en evt. relevante chemische reacties in kaart gebracht worden. In dit onderzoek zal met behulp van CFD-modellering het ontwerp van ontharding en beluchtingsinstallaties nader onderzocht worden.

Er zijn verschillende manieren om meerfasenstromingen te modelleren met CFD. Meest gebruikt in de literatuur is de Euler-Euler benadering, waarbij de twee fasen beide als een soort vloeistof worden behandeld, die elkaar beïnvloeden. 'Fluidized beds' zoals ze voorkomen in onthardingsreactoren zijn op deze manier ook gemodelleerd in de literatuur. Er zijn ook voorbeelden te vinden in de literatuur waar beluchting in bijvoorbeeld afvalwaterbehandeling wordt gesimuleerd met deze Euler-Euler benadering. Hierbij wordt de exacte positie van individuele bellen niet opgelost. Daarvoor wordt een andere techniek gebruikt, die het grensvlak lucht en water precies oplost voor iedere bel. Deze methodiek is veel rekenintensiever en wordt daarom alleen toegepast voor een klein aantal bellen tegelijkertijd.

Voor zowel ontharding als beluchting zijn allereerst proof-of-principle-modellen opgesteld om het proces te simuleren. Met behulp van het softwareprogramma OpenFOAM zijn beide processen met succes gemodelleerd. Voor de ontharding is het vooralsnog alleen mogelijk om met één korrel diameter te werken, en hierbij de waterstroming, beweging van pellets en verblijftijdspreiding te berekenen. Validatie van het model is gedaan met een gemeten verblijftijdspreiding van de cilindrische reactor in Goor. Het model komt goed overeen met de gemeten verblijftijdspreiding. Verschillende ontwerpen die bij Vitens in bedrijf zijn, zijn met dit model doorgerekend. De ontwerpen hebben uiteenlopende eigenschappen die de effectiviteit van zuivering beïnvloeden:

- Het cilindrische ontwerp is op basis van de verdeling van de contacttijd van het water met het pelletbed het meest efficiënt van de vier.
- De diffusor legt het op diezelfde eigenschap af tegen het cilindrische ontwerp, en biedt qua menging geen voordelen.
- Het ontwerp met tangentiële invoer levert een onwenselijke heterogeniteit in de korrelbedverdeling op en een stromingsprofiel dat een ongunstige contacttijd met het pelletbed oplevert, maar zou wel een goede menging met kalkmelk kunnen faciliteren.
- Het ontwerp met een flappenbodemp en conisch onderstuk zou een gulden middenweg kunnen representeren tussen een goede contacttijd en een goede menging van het doseermiddel.

Voor beluchting is er een model ontwikkeld dat de vorming van individuele luchtbellen uit een gaatje op plausibele wijze kan simuleren voor lage instroomsnelheden. Er is gekozen om de individuele bellen in detail te beschouwen, omdat de karakteristieken van de bel (grootte,

stijgsnelheid, vorm) van groot belang zijn voor de stofoverdracht (methaan, CO₂, lucht) tussen de gas- en waterfase en daarmee het rendement van de beluchting bepalen. Uit deze berekening blijkt dat vergroting van de gaatjesdiameter zoals verwacht tot grotere bellen geeft. Een grotere contacthoek leidt eveneens tot grotere bellen. De invloed van langstroming op de vorming van bellen lijkt klein. Ook is onderzocht hoe vervuiling van de beluchtingsplaten door de aangroei van ijzeroxides de vorming van de bellen beïnvloedt. Vervuiling lijkt een kleinere bel diameter te geven, omdat de contacthoek omlaag gaat en de opening kleiner wordt. Verandering van de vorm van het gaatje heeft een kleiner effect, de bel kan daardoor iets groter worden doordat die iets minder snel loslaat.

Verder is er voor de beluchting een macromodel ontwikkeld om de conclusies die uit de CFD-modellen gehaald zijn te vertalen naar de bedrijfsvoering. Op basis van de belkarakteristieken die berekend zijn in het CFD model kunnen de verwijderingsrendementen van methaan en CO₂ en opname van zuurstof voor de hele plaat berekend worden. Hierbij kan ook een verblijftijdspreiding meegenomen worden (deze verblijftijdspreiding moet vooraf eerst bepaald worden).

De hoge instroomsnelheden die typisch zijn voor plaatbeluchters konden pas in een zeer laat stadium van het project onderzocht worden. Een eerste berekening laat zien dat deze snelheden leiden tot significant grotere bellen dan bij de lagere snelheden. Toepassing van deze belkarakteristieken in het macromodel geeft realistische waarden voor methaanverwijdering over de gehele plaatbeluchters. De vervorming van de luchtbellen speelt dan echter ook een rol, waar nog geen rekening mee gehouden is in het macromodel.

Inhoud

Samenvatting	2
Inhoud	4
1 Inleiding	5
1.1 Aanleiding	5
1.2 Waarom Computational Fluid Dynamics (CFD)?	5
1.3 Onderzoeksofzet	6
2 Literatuurstudie	7
2.1 Meerfasenmodellering	7
2.2 CFD-modellering van pelletreactoren	9
2.3 CFD modellering van beluchting	10
3 Zuiveringsprocessen	13
3.1 Ontharding: theorie, praktijk en model	13
3.2 Beluchting: theorie, praktijk en model	14
4 Modellering ontharding	16
4.1 Proof-of-principle	16
4.2 Modelontwikkeling	17
4.3 Experimentele resultaten verblijftijdspreiding	19
4.4 Resultaten Vitens-reactoren	20
4.5 Evaluatie optimale reactor	36
5 Modellering beluchting	39
5.1 Proof-of-principle	39
5.2 Modelontwikkeling	40
5.3 Modellering van één gaatje	42
5.4 Effect van vervuiling	44
5.5 Effect van langstroming	45
5.6 Belgroottes en stijgsnelheden	46
5.7 Luchtinstroomsnelheid	47
5.8 Ontwerp en bedrijfsvoeringsparameters	48
6 Conclusies en aanbevelingen	53
6.1 Conclusies	53
6.2 Aanbevelingen	54
6.3 Valorisatie	54
Referenties	56
Bijlage I Rekeningtijden simulaties	59

1 Inleiding

1.1 Aanleiding

Het ontwerp van een drinkwaterzuivering wordt door procestechnologen veelal gebaseerd op vuistregels en/of proefinstallatie-onderzoek, een zogenaamde ‘black-box’ benadering op macroschaal. Daarbij wordt vaak in het uiteindelijke ontwerp een overcapaciteit ingebouwd. Voor een optimale werking van de diverse zuiveringsstappen is het soms noodzakelijk het proces op microschaal te benaderen. Fysiek is dit vaak niet mogelijk. Bovendien zijn er vaak verschillende typen installaties voor hetzelfde proces, zonder dat bekend is welke installatie nu beter werkt. In dit onderzoek zal met behulp van CFD-modellering het ontwerp van ontharding en beluchtingsinstallaties nader onderzocht worden.

Op dit moment worden 4 typen onthardingsreactoren gebruikt binnen Vitens:

- Cilindrische reactor met vlakke bodem (Overijssel)
- Conisch onderstuk met flappenbodem (Friesland)
- Conisch onderstuk met tangentiële invoer (Midden-Nederland)
- Diffusor (Gelderland)

Uitgebreidere beschrijvingen van deze onthardingsreactoren zijn te vinden in Mededelingen 102 (Kostense 1988), KWR 02.087 (Siegers 2003), KWR 08.017 (Reijnen & Siegers 2008). Elke reactor voldoet aan zijn voorgestelde criteria die met betrekking tot efficiëntie ruim zijn opgezet, en elke reactor heeft zijn eigen voor- en nadelen. Het is niet goed bekend welk type reactor het beste resultaat geeft. Daarnaast is er behoefte aan standaardisatie, wat door Vitens gebruikt kan worden bij de bouw van nieuwe reactoren.

Beluchtingsystemen, zoals ontzuringstorens en plaatbeluchters, zijn vaak ontworpen (bijvoorbeeld in Reijnen (1992)) op basis van ervaring en hebben meestal een overcapaciteit. Bij plaatbeluchters wordt de grootte en de positionering van de gaatjes in de plaat op basis van vuistregels bepaald. Het is echter niet goed bekend wat de invloed van de gaatjesgrootte is op de belvorming en stofoverdracht (opname zuurstof en afgifte CO₂ en methaan). De efficiëntie van het proces wordt hierdoor sterk beïnvloed. Daarnaast kunnen de plaatbeluchters vervuilen door het neerslaan van ijzerhydroxides. Deze neerslag kan de belvorming beïnvloeden.

1.2 Waarom Computational Fluid Dynamics (CFD)?

De zuiveringsprocessen, zoals de chemische reacties bij ontharding en massaoverdracht bij beluchting, vinden in essentie plaats op microschaal. De lokale stroming van het water kan daarbij een belangrijke invloed hebben op de werking en efficiëntie van de zuivering. Bovendien wordt de waterstroming beïnvloed door de beweging van de pellets (bij ontharding) en luchtbellen (bij beluchting). Met CFD kunnen deze processen op microschaal gesimuleerd worden, zodat we als het ware een kijkje kunnen nemen in de full-scale installatie in bedrijf. Met behulp van experimenten kan dit slechts ten dele door gebruik te maken van schaalmodellen, terwijl voor full-scale installaties slechts afgeleide parameters gemeten kunnen worden. CFD levert daarom belangrijke informatie over de werking van het proces. Bovendien kunnen verschillende geometrieën relatief eenvoudig getest worden. Ontwerpen kunnen dan “scherper”, zonder overcapaciteit, ontworpen worden. Daarnaast kunnen hydraulisch zwakke punten (zoals kortsluitstromen en recirculaties) van bestaande installaties zichtbaar gemaakt worden en verbeterd worden. Hierdoor kunnen zowel investeringskosten (en bijbehorende afschrijving) als gebruikskosten (energie- en grondstoffenverbruik) lager uitvallen. Uit eerdere (BTO-) onderzoeken is gebleken dat CFD belangrijke inzichten verwerft in de stromingscondities in ozoninstallaties en UV installaties

(Wols 2010) . Door het aanpassen van het ontwerp kunnen dode zones of kortsluitstromen worden verminderd, waardoor de prestaties van het proces verbeteren.

Wat is Computational Fluid Dynamics (CFD)?

CFD is een modelleringstechniek om de stroming van een medium (bijv. water of lucht) in kaart te brengen. Hierbij wordt een domein opgedeeld in kleine cellen (het mesh), waarop de wiskundige vergelijkingen voor de (vloeistof)stroming wordt opgelost. Omdat deze stromingen en met name de turbulente stromingen erg complex kunnen zijn, is vaak een heel fijn mesh nodig. Deze berekeningen kunnen zo een paar dagen duren, ondanks het gebruik van zware computers. CFD wordt gebruikt in allerlei toepassingen, zoals het stroomlijnen van vliegtuigen en auto's, voorspellen van het weer en overstromingsberekeningen. In de watertechnologie wordt CFD veel gebruikt voor het ontwerp van UV-installaties, ozoninstallaties en membraaninstallaties. Hier is de stroming van het water van groot belang voor de efficiëntie van de installatie.

1.3 Onderzoeksopzet

De CFD modellering zal toegepast worden voor de zuiveringsprocessen ontharding en beluchting. Voor het onthardingsproces (Hoofdstuk 4) zullen de verschillende typen reactoren die bij Vitens in gebruik zijn met elkaar worden vergeleken. Voor het beluchtingsproces (Hoofdstuk 5) zal in detail naar de vorming van de bel uit een gaatje van de beluchtingsplaat gekeken worden, omdat dit van belang is voor de efficiëntie van de overdracht van lucht. De CFD resultaten zullen vervolgens vertaald worden naar een macromodel, waarmee de werking van de gehele beluchtingsplaat beschreven kan worden.

Voor beide zuiveringsprocessen is de volgende aanpak gehanteerd: Omdat het modelleren van meefasen CFD complex en rekenintensief is, is eerst in een proof-of-principle onderzocht of de problemen met bestaande CFD software gemodelleerd kunnen worden. Vervolgens is het model verder ontwikkeld, en zijn verschillende cases doorgerekend en geëvalueerd.

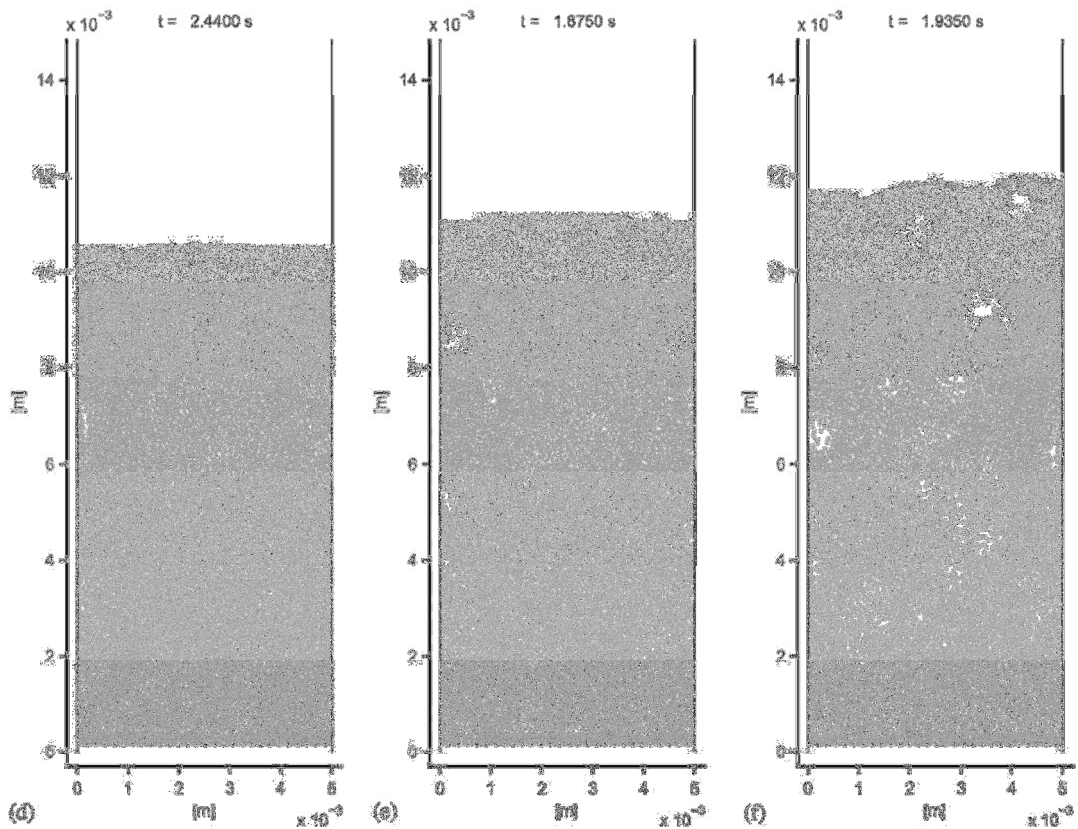
2 Literatuurstudie

2.1 Meerfasenmodellering

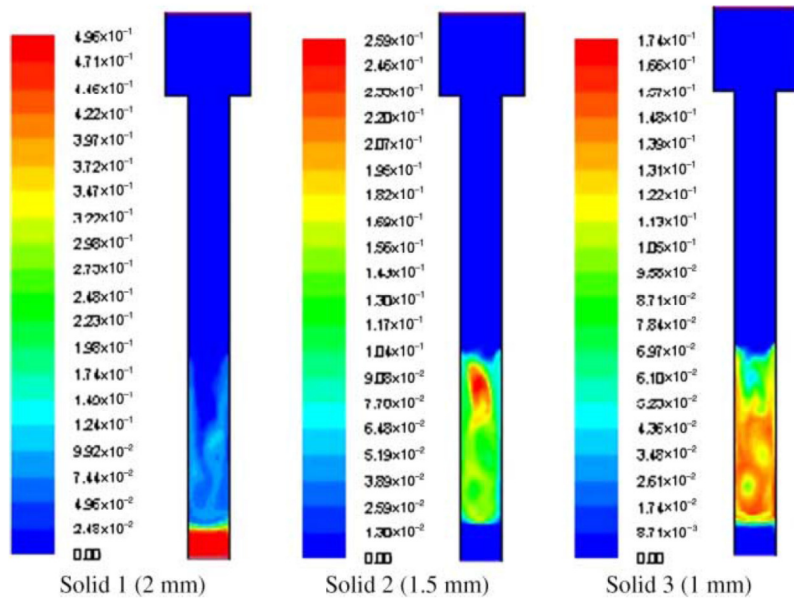
Zowel bij ontharding als bij beluchting spelen de twee fasen en de interacties tussen de fasen een belangrijke rol. Voor een nauwkeurige beschrijving van de stroming is het daarom noodzakelijk om beide fasen mee te nemen in de CFD modellering. Hierdoor wordt de modellering complexer. Meerfasenstroming kan op de volgende manieren gemodelleerd worden (in volgorde van complexiteit, rekenintensiteit en nauwkeurigheid):

- Meerfasen Euler-Lagrange. Hier wordt één fase beschouwd als bestaande uit losse deeltjes en de andere fase als een continu medium (bijv. een vloeistof). Zo wordt bijvoorbeeld iedere pellet afzonderlijk gemodelleerd. Gezien het grote aantal pellets in een reactor is dit erg rekenintensief en niet toepasbaar voor full-scale installaties.
- Meerfasen Euler-Euler. Hierbij worden beide fasen als een soort vloeistof gemodelleerd. Voor iedere fase wordt de massa- en impulsbalans opgelost met impulsoverdracht tussen de fasen. Iedere rekencel bevat een fractie van beide fasen, die samen optellen tot 1.
- Mengmodel ("mixture model"). Hier wordt voor één fase de volledige massa- en impulsbalans opgelost en voor de andere fase (in ons geval lucht of vaste fase) wordt alleen transport door krachtoverdracht gemodelleerd. De stroming binnen deze fase wordt dan niet beschouwd.
- Enkefase met een verhoogde viscositeit, waarbij de vaste fase of luchtfase wordt verdisconteerd in een hogere viscositeit van de vloeistoffase.
- Enkefase, waarbij geen rekening wordt gehouden met de vaste fase of luchtfase.

De meest gebruikte modellering voor tweefasen stroming voor industriële toepassingen is het Euler-Euler model. Hierbij kunnen goede resultaten behaald worden binnen aanvaardbare rekentijden. Omdat niet alle deeltjes van de vaste of gasfase opgelost kunnen worden, zijn er extra wiskundige vergelijkingen nodig om de impulsoverdracht tussen beide fasen (zoals drag forces en lift forces) en binnen de fase (zoals botsingen tussen deeltjes) te beschrijven. Dit worden de sluitingsvergelijkingen genoemd, welke gebaseerd zijn op fysische modellen, meetresultaten of meer nauwkeurige CFD modellen. Een voorbeeld hiervan voor wervelbed (fluidized bed) reactoren is de kinetic theory of granular flow (KTGF), die uitgaat van het behoud van energie in de fluctuaties van de vaste fase.



Figuur 1: Voorbeeld van een Euler-Lagrange modellering van een fluidized bed (Di Renzo en Di Maio, 2007). Dit betreft luchtstroming door een bed van vaste deeltjes.



Figuur 2: Voorbeeld van een Euler-Euler modellering van een fluidized bed (Rahaman en Mavinic, 2009). De volumefractie van de vaste fase is aangegeven in kleur.

Daarnaast kunnen er in het geval van een tweefasesysteem dat bestaat uit water en vaste deeltjes extra fasen geïntroduceerd worden om rekening te houden met verschillende deeltjesgroottes (Wojcik & Plewik 2009). Deze kunnen vervolgens weer gekoppeld worden

aan populatiebalansvergelijkingen, om massatransport, groei en samensmelting van deeltjes te beschrijven (Genin et al. 2007).

Een belangrijk aspect bij CFD-modellering is turbulentie. De meeste stromingen voor toepassingen in de industrie zijn turbulent. Turbulentie is een complex verschijnsel, omdat dit resulteert in wervelingen en fluctuaties van zeer kleine omvang en op zeer kleine tijdschalen. En deze kleinschalige fenomenen hebben weer een grote invloed op wat er gebeurt op de grotere schaal en omgekeerd (dit wordt ook wel het cascadeproces genoemd: grootschalige stromingsfenomenen worden omgezet in kleinere wervels, die weer worden omgezet in nog kleinere wervels. Vervolgens wordt de bewegingsenergie van de allerkleinste wervels door wrijving omgezet in warmte). Met de huidige computerkracht is het echter onmogelijk om alle kleinschalige fenomenen op te lossen, zodat ook hier vereenvoudigingen nodig zijn. Een veelgebruikte oplossing hiervoor is het $k-\epsilon$ turbulentiemodel. Dit is een standaard in de industrie. Hierbij wordt uitgegaan van een gemiddeld stromingsveld en worden de kleine wervels opgelost middels balansvergelijkingen voor turbulente kinetische energie (k) en turbulente dissipatie (ϵ).

2.1.1 Softwarepakketten

Veelgebruikte softwarepakketten voor CFD modellering zijn: COMSOL, CFX, Fluent en OpenFOAM. COMSOL, CFX en Fluent zijn commerciële pakketten en vragen een behoorlijke investering wat betreft aanschaf. OpenFOAM is gratis (open-source), maar is daarentegen minder gebruiksvriendelijk. COMSOL wordt bij KWR en bij Vitens gebruikt voor enkelfase stromingen. CFX en Fluent (beide ANSYS) zijn duurder in aanschaf en zijn niet in licentie bij KWR of Vitens. Voorbeelden van OpenFOAM in de waterindustrie zijn de modellering van een fluidized bed met Euler-Lagrange door Ku et al. (2012) en stroming rond membraanspacers in Al-Sharif et al. (2013).

Een belangrijk aspect bij CFD modellering is convergentie. Bij het oplossen van de vergelijkingen voor vloeistofstroming itereert het model als het ware in stapjes naar de juiste oplossing. En als het verschil tussen opeenvolgende stapjes klein genoeg is de oplossing geconvergeerd. Omdat de wiskundige vergelijkingen die opgelost moeten worden complex en niet-lineair zijn, gebeurt regelmatig dat de oplossing niet convergeert. Het is dan vaak niet bekend waar dit precies aan ligt. Aanpassen van het rekenrooster (mesh), instroomcondities, geometrie of solverinstellingen wil dan soms helpen, maar is geen garantie voor succes. Het kan dan ook een tijdrovende zaak om tot een geconvergeerde oplossing te komen.

2.2 CFD-modellering van pelletreactoren

Er is weinig literatuur beschikbaar over CFD modellering van ontharding in de internationale literatuur, omdat ontharding internationaal niet veel wordt toegepast. In Nederland is er wel een aantal onderzoeken naar CFD modellering van ontharding verricht. Zo heeft KWR in 2010 een onthardingsreactor van WML doorgerekend met CFD (Vries 2010). WML kampte met problemen met het bezinken van pellets in de bodempot. Hierbij is met COMSOL echter alleen naar de waterfase gekeken, omdat het meerfasenmodel niet convergeerde. De spiraalvormige stroming in de bodempot van de reactor is hierbij onderzocht. Hieruit bleek dat er inderdaad recirculaties optreden die het bezinken kunnen veroorzaken. Daarnaast heeft Waternet in 2000 onderzoek laten doen naar de ontharding (uitgevoerd door het CFD-bedrijfje rND). In dit onderzoek is het aftappen van de pellets onder de loep genomen. Er is gebruik gemaakt van een enkelfase model met een variabele viscositeit.

Er is meer literatuur beschikbaar over CFD modellering van wervelbedreactoren in het algemeen. Sommige onderzoeken gebruiken ook het Euler-Lagrange model (Sha et al. 2001; Di Renzo & Di Maio 2007), zie Figuur 1, maar dit betreft dan kleine of eenvoudige domeinen. Sha et al. (2001) onderzochten het effect van intensiteit van mengen en locatie van aftappen op de kristallisatie.

Verreweg de meeste modellen gaan uit van het Euler-Euler model in 2D (Genin et al. 2007; Doroodchi et al. 2005; Zhang et al. 2012; Rahaman & Mavinic 2009) of 3D (Wojcik & Plewik 2009; Zhang et al. 2013; Kalaga et al. 2012; Vuthaluru et al. 2009). Wojcik & Plewik (2009) laten zien dat de voorspellingen van meerfasemodellen voor een wervelbedkristallisatie aanzienlijk afwijken van enkelfase modellen. Het verschil tussen 2D en 3D modellering wordt onderzocht door Zhang et al. (2013) voor een wervelbedreactor met een rechthoekvorm. Voor bepaalde inlaatsnelheden en diametergrootte van deeltjes ontstaan er verschillen tussen 2D en 3D. In een eerder onderzoek van Zhang et al. (2012) wordt de ontwikkeling van de bedhoogte in een wervelbedreactor vanaf opstarten van de reactor onderzocht.

Een voorbeeld uit de afvalwaterbehandeling staat in Figuur 2. Dit onderzoek van Rahaman & Mavinic (2009) richt zich op kristallisatie van struviet om nutriënten terug te winnen in een wervelbedreactor. Met een 2D Euler-Euler meerfasen model wordt de stroming en verschillende deeltjesgroottes beschreven. Uit de berekeningen volgt dat bij lage instroomsnelheden de deeltjes goed gemengd zijn, en bij hoge instroomsnelheden de grote deeltjes gescheiden zijn. Ook hier komen bij de experimentele validatie met behulp van zeefkrommes van de deeltjes verschillen tussen model en meting aan het licht. Dit wordt mogelijk veroorzaakt omdat gebruik gemaakt is van laminaire stroming in het model in plaats van turbulente.

Genin et al. (2007) gebruiken een Euler-Euler CFD-model met populatiebalans om de neerslag van gips (calciumsulfaat) in een kristallisatiereactor te voorspellen in afvalwaterbehandeling. Validatie van het CFD-model wordt uitgevoerd met verblijftijdcurves en zeefkrommes van de deeltjes. De gemeten verblijftijdspreiding komt goed overeen met modelresultaten, de grootteverdeling van kristallen komt minder goed overeen.

In Vuthaluru et al. (2009) wordt de werking van een wervelbedreactor onderzocht, die bestaat uit kalksteen om zuur afvalwater te behandelen dat gebruikt wordt bij het mijnen van steenkool. Uit een pilot-scale onderzoek bleek dat een conische reactor het beste werkt, omdat dan meerdere klassen van deeltjesgrootte in suspensie kunnen blijven door de verschillen in stijgsnelheid van het water. Het CFD-model wordt verder gebruikt voor het opschalen van de reactor.

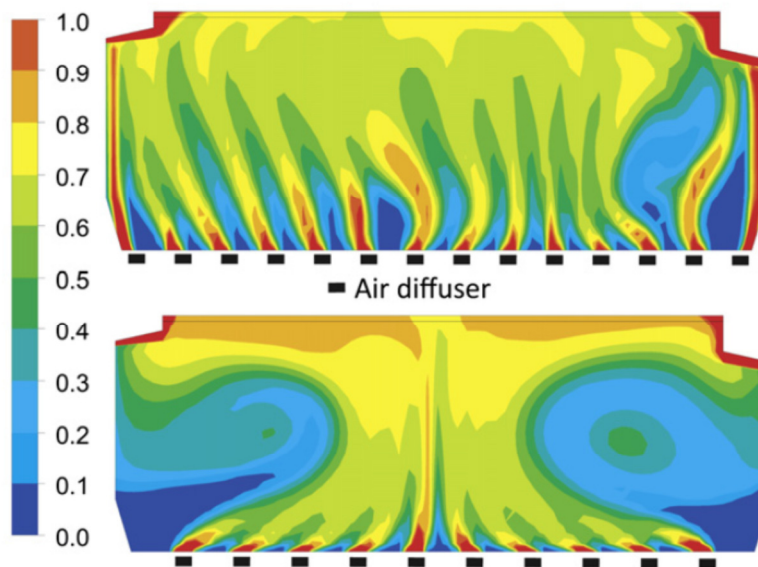
Validatie van de CFD modellen is meestal uitgevoerd aan de hand van schaalmodellen. Hier worden parameters als vloeistof- of gassnelheden (Di Renzo & Di Maio 2007) of verblijftijdspreiding (Kalaga et al. 2012) gemeten.

2.3 CFD modellering van beluchting

De meeste voorbeelden van meerfasenmodellering in drinkwaterbehandeling beschouwen ozonisatie. Een aantal publicaties beschrijft de modellering van de bellenkolom, bestaande uit ozonbellen en water (Chen et al. 2002; Cockx, Do-Quang, Audic, et al. 1999; Bartrand 2007; Cockx, Do-Quang, Line, et al. 1999). Bartrand (2007) laat in zijn proefschrift zien dat recirculaties versterkt worden door de aanwezigheid van bellen. Voor afvalwaterbehandeling wordt naast ozonisatie ook beluchtinstallaties doorgerekend met CFD. In Cockx et al. (2001) wordt een Euler-Euler-model gebruikt om de ontwerpen van een "airlift internal loop reactor" en actiefslibsystemen te optimaliseren. Diezelfde airlift loop reactors worden met Euler-Euler gemodelleerd door Huang et al. (2010). Het model is gevalideerd met metingen van de massatransfer en wordt gebruikt om ontwerp van de airlift loop reactor te verbeteren en op te schalen. In Fayolle et al. (2007) wordt de zuurstofoverdracht van de beluchting in het actiefslibproces nader onderzocht. Hier wordt gebruik gemaakt van het Euler-Euler model. De voorspelde zuurstofoverdracht komt goed overeen met metingen. Hiervoor is het wel nodig om de juiste diameter van de bellen te weten als invoer voor het model. Gresch et al. (2011) gebruikt eveneens het Euler-Euler model om de beluchting in afvalwatersystemen te modelleren. De stroming wordt sterk beïnvloed door de plaatsing van de "air diffusors". Ze tonen met behulp van CFD aan dat "line diffusors" betere ammoniumverwijdering geven dan

“uniform diffusors”, wat te wijten is aan het optreden van recirculaties en niet-beluchte delen van het water. Deze stromingsverschijnselen zijn sterk afhankelijk van de plaatsing van de diffusors. Een full-scale actiefslibinstallatie met diverse beluchtingsstappen wordt gemodelleerd in Yang et al. (2011), gebruik makend van een enkelfase model met massatransport voor zuurstof. Het model is gevalideerd voor zuurstofconcentraties. Door het aanpassen van het ontwerp en bedrijfsvoering van de installatie zijn betere condities gecreëerd voor (de)nitrificatie.

Air volume fraction in %



Figuur 3: Concentratie van lucht in een beluchtingssysteem (Gresch et al. 2011)

Naast de effecten van beluchting op macroschaal wordt ook de ontwikkeling en beweging van individuele belen onderzocht. Vanuit een wiskundige basis kunnen voor simpele systemen al voorspellingen gemaakt worden die goed overeenkomen met experimentele waarnemingen (Bozzano & Dente 2001). Bij complexere domeinen (bijvoorbeeld het gedrag van een luchtbel in een bewegende waterstroom of het ontstaan van een bel op een oppervlak) is een CFD-benadering wenselijk.

De modellering van een enkele luchtbel in water is fundamenteel verschillend van de macromodellen die hierboven beschreven zijn: een gegeven punt in het domein wordt óf bezet door lucht, óf door water, óf is onderdeel van het (zeer dunne) grensvlak tussen de twee fasen. De Euler-Eulerbenadering voor tweefasestroming is hier dus niet toepasbaar. Het interface (grensvlak) tussen de twee fasen moet in plaats daarvan expliciet gevolgd worden, en de krachten als gevolg van de oppervlaktespanning en het drukverschil moeten meegenomen worden.

Het volgen van het interface kan op verschillende manieren plaatsvinden. Een nauwkeurige methode is front-tracking (bijv. (Dijkhuizen et al. 2010)), waarbij tijdens de simulatie twee meshes worden gebruikt: een stilstaand mesh voor het domein en een meebewegend mesh voor de bel, die steeds opnieuw wordt berekend. Een alternatief is de volume-of-fluid (VOF) benadering, waarbij één mesh wordt gebruikt en de volumefractie tussen de twee fasen als interne variabele wordt toegekend aan elke cel (soortgelijk aan de Euler-Eulermethode voor gefluidiseerde bedden). Deze variabele is overall exact 0 of 1, behalve op het grensvlak, dat niet meer dan enkele cellen dik kan zijn. Aan de hand van deze parameter kunnen de relevante krachten op het interface berekend worden. In het algemeen is de VOF-methode sneller, maar minder nauwkeurig, dan front-tracking-algoritmes. De VOF-methode wordt

bijvoorbeeld succesvol toegepast in (Koebe et al. 2002; Samkhaniani et al. 2012) om stijgende bellen te simuleren.

Het ontstaan van gasbellen in vloeistof wordt op analytische wijze gemodelleerd in (Lesage et al. 2009) voor een geïdealiseerde ronde opening. Een uitgebreide experimenteel onderzoek gekoppeld aan een theoretische beschouwing is te vinden in (Di Bari & Robinson 2013). Hier wordt onder andere gerapporteerd dat de grootte van de bel afhangt van de grootte van het gat waardoor de luchttoevoer plaatsvindt (hoe groter het gaatje, des te groter de bel) en wordt de vorm van de gecreëerde bellen besproken, waarvoor geldt dat kleine bellen dichter bij een perfecte bolvorm liggen dan grotere bellen.

In (Gerlach et al. 2007) wordt de belvorming met behulp van CFD gemodelleerd, via de VOF-methode. Hierin worden verschillende gaatjesdiameters getest en wordt de invloed van de contacthoek van het grensvlak tussen lucht en water met het vaste materiaal (de plaat) onderzocht. Ook wordt de vorm van de bel tijdens en na de vorming bekeken voor verschillende condities en vloeistofsoorten.

3 Zuiveringsprocessen

3.1 Ontharding: theorie, praktijk en model

Ontharding wordt in de praktijk gebruikt om de hoeveelheid calcium in het water te verlagen. Bij ontharding in een korrelreactor wordt door het toevoegen van natronloog (NaOH) of kalkmelk (CaOH_2) de pH van het water verhoogd, zodat het water oververzadigd wordt waardoor kalk (calciumcarbonaat) neerslaat. Deze kalk slaat neer op de oppervlakten die aanwezig zijn in het water. De aanwezigheid van een groot aantal korrels in het water zorgt voor een groot effectief oppervlakte zodat er veel kalk kan neerslaan en dat al het kalk ook kristalliseert op de korrels en niet tussen de korrels. Als korrelmateriaal wordt meestal zand gebruikt. Omdat het een doorlopend proces is worden er met een bepaalde frequentie kalkkorrels afgetapt en nieuw entmateriaal toegevoegd. Voor het ontwerp van korrelreactoren is een aantal aspecten van belang:

- Dosering van natronloog of kalkmelk: de dosering moet zo gebeuren dat de natronloog of kalkmelk goed mengt met het water. Dosering geschiedt door middel van een doppenbodem, doseerlans of doseerkruis. Kalkmelk is een dikke substantie die vanwege de hoge viscositeit extra energie kost om goed te mengen.
- Instroom van het water: deze kan gelijkmatig zijn of juist tangentieel in een bodempot om extra menging te genereren.
- Stroomprofiel van de reactor. Bij een propstroom is de stroming gelijkmatig. Er kunnen echter ook recirculaties optreden.
- Aftappen van de pellets. Pellets boven een bepaalde diameter moeten afgetapt worden. Dit gebeurt meestal als de drukval over het fluide bed boven een bepaald maximum komt. Omdat grotere pellets naar beneden zakken, vindt het aftappen van de pellets onderin de reactor plaats.

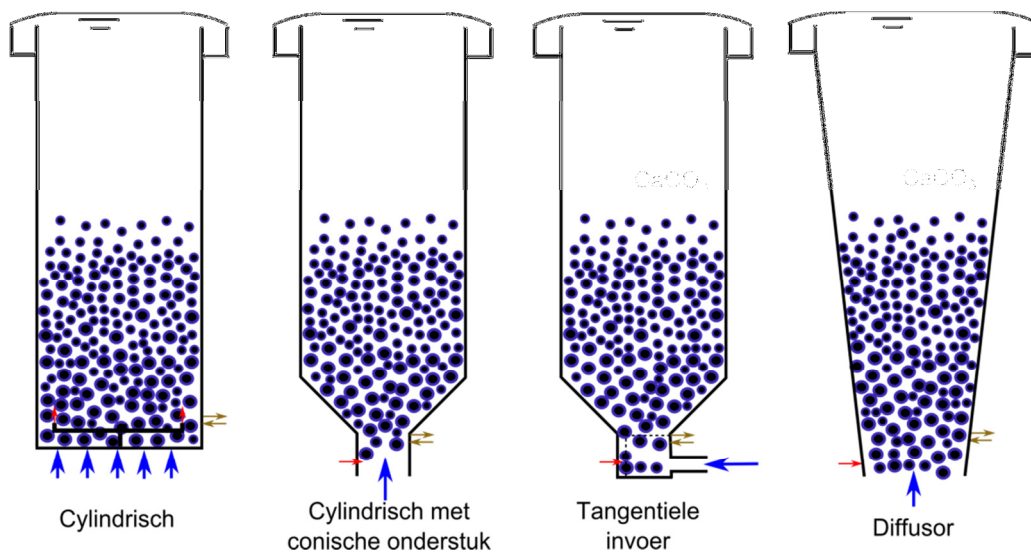
Een ideale reactor heeft dus een goede menging van het doseermiddel onderin de reactor. Vervolgens stroomt het water volgens een propstroom zodat het calcium in het water gelijkmatig over de hoogte afneemt. De pellets moeten ook niet teveel bewegen, zodat er een mooi gelaagd bed ontstaat, waarbij de grootste pellets onderin komen. Zo zullen alleen de grote pellets afgetapt worden.

Binnen Vitens bestaan er globaal gezien verschillende type reactoren voor de ontharding. Dit is historisch zo gegroeid. De ontwerpen zijn meestal gebaseerd op vuistregels en ervaringen van de ontwerpers. De vier typen reactoren zijn (Figuur 4):

- Cilindrische reactor met vlakke bodem. In deze reactor moet een propstroming zorgen voor een goede stratificatie van de korrels. Dosering van natronloog of kalkmelk moet echter zorgvuldig gebeuren om een gelijkmatige verdeling te krijgen. Dit kan op verschillende manieren gebeuren: doppenbodem, doseerlans, doseerkruis. Nadeel is dat door de lagere menging deze reactoren niet geschikt zijn voor kalkmelkdosering. Dit type reactor is bijvoorbeeld toegepast in Goor.
- Cilindrische reactor met conisch onderstuk met flappenbodem. De flappenbodem moet de snelheid van het water verhogen zodat er meer menging optreedt. Vanwege de grote snelheidsverschillen kunnen recirculaties ontstaan en is het stratificatie van het bed minder. Bovendien zorgen de hoge snelheden van de korrels voor meer slijtage. Eén van de Vitenslokaties waarin dit ontwerp gebruikt wordt is Spannenburg.

- Cilindrische reactor met conisch onderstuk met tangentiële invoer. De tangentiële invoer in combinatie met een flappenbodem moet voor extra menging zorgen. Dit maakt dit type reactor geschikt voor kalkmelkdosering. De onthardingsreactoren in onder andere Cothen en Tull en 't Waal maken gebruik van dit ontwerp.
- Diffusor. In een diffusor neemt de diameter van de reactor langzaam toe over de hoogte. Vaak wordt een hoek van 7° gebruikt, omdat bij een enkelfase stroming hier geen loslating van de wand optreedt en de stroming gelijkmatig blijft. Dit type reactor wordt bijvoorbeeld gebruikt in Kolff.

Een uitgebreide beschrijving van de voordelen en nadelen van deze reactorontwerpen is te vinden in KWR rapport 08.017 (Reijnen & Siegers 2008). (Siegers 2003) geeft een (licht verouderde) inventarisatie van de reactoren die in gebruik zijn.



Figuur 4: Overzicht verschillende onthardingsreactoren

De verschillende typen reactoren zijn met CFD-modellen doorgerekend. Uit de CFD-resultaten ontstaat een beeld van de menging van het natronloog en de stroming van het water en de pellets in de reactoren. Ook is de verblijftijdspreiding bepaald door de concentratie van een passieve tracer te volgen. Dit geeft een kwantitatief beeld van in hoeverre een propstroom benaderd wordt in de reactor.

3.2 Beluchting: theorie, praktijk en model

Beluchting wordt gebruikt om zuurstof aan het anoxische grondwater toe te voegen en om tevens het water te ontdoen van ongewenste gassen zoals methaan en CO_2 . Dit gebeurt door het te behandelen water in contact te brengen met lucht. Om het proces effectief te laten verlopen moet er een groot oppervlakte tussen water en lucht gecreëerd worden. Bij plaatbeluchting wordt het water over geperforeerde platen geleid, waar onder hoge druk lucht wordt ingebracht. De ontstane belletjes zorgen voor voldoende oppervlakte. Vanwege het grote aantal belletjes ontstaat er een sterk dynamisch gedrag. Het waterbed expandeert sterk door de belletjes en er ontstaat een schuimbed. Het schuimbed ontstaat bij een voldoende groot luchtdebiet. In het algemeen wordt aangenomen dat de beluchting goed blijft werken als het schuimbed in stand wordt gehouden. Vanwege het oplossen van zuurstof in het water zullen er ook oxidatie van ijzer gaan plaatsvinden, wat resulteert in het neerslaan van ijzerhydroxides op de beluchtingsplaat. Om die reden zullen de beluchtingsplaten regelmatig schoongemaakt moeten worden. Hoe deze neerslag de vorming van de belletjes beïnvloedt is niet bekend.

Deze beluchtingsplaten worden op basis van ervaring ontworpen. In de jaren '90 heeft Vitens onderzoek gedaan naar uitbreiding van de capaciteit van de beluchtingsinstallatie op locatie Spannenburg (Oostelbos & Meulen 1991). In dit onderzoek is ook gekeken naar het ontwerp van de beluchtingsplaten. Platen met verschillende gaatjesdiameters en afstand tussen de gaatjes zijn getest bij variatie van de lucht-water verhouding. De luchtwaterverhouding is tot een waarde van 50:1 (deels) bepalend voor de methaanverwijdering, bij hogere waarden niet meer. Met betrekking tot het ontwerp van de platen bleek dat een gaatjesdiameter van 1mm betere resultaten gaf dan een gaatjesdiameter van 1,5mm, en dat de verwijderingsrendementen bij een open oppervlak van 1,5% beter zijn dan bij 2%.

Uit deze rapportage en uit metingen in 2012 blijkt dat het energieverbruik van de beluchting op locatie Spannenburg tussen de 0,02 en 0,05 kWh/m³ ligt.

De gasoverdracht bepaalt in sterke mate het rendement van de beluchting. We beschouwen een enkele bel die opstijgt in het water en daarbij concentraties van gassen uitwisselt met het water. Het principe van de beluchting berust op het gasoverdracht tussen bel en water, welke wiskundig kan worden beschreven met:

$$\frac{dc_L}{dt} = k_L a (C_s - C_L) \quad (1)$$

Waarin C_L de concentratie van het opgeloste gas in water is, C_s de verzadigingsconcentratie van het opgeloste gas, $k_L a$ een globale massa-uitwisselingscoëfficiënt. De evenwichtsconcentratie van het opgeloste gas volgt uit de wet van Henry:

$$C_s = k_H C_g \quad (2)$$

Waarbij k_H de constante van Henry is en C_g de concentratie van het gas in lucht. De concentratie van gas in lucht bij een bepaalde temperatuur en druk volgt uit de ideale gaswet en de partiële druk van de gasfracties in lucht:

$$C_g = f_g \frac{P}{RT} \quad (3)$$

met P de druk, T de temperatuur, R de ideale gasconstante en f_g de gasfracties in lucht. De coëfficiënt k_L kan beschreven worden met de klassieke penetratietheorie van Higbie, zodat (Cockx et al. 2001):

$$k_L = 2 \sqrt{\frac{D_L u_b}{\pi d_b}}, \text{ en } a = \frac{6 \alpha_g}{d_b}, \quad (4)$$

waarbij D_L de diffusiecoëfficiënt is, u_b de snelheid van de bel, d_b de diameter van de bel en α_g de fractie gas-water. De fractie gas-water volgt uit de bellendichtheid van het systeem (totaal volume aan bellen t.o.v. totaal volume aan water). In Tabel 1 wordt een overzicht gegeven van de belangrijkste constanten van zuurstof, CO₂ en methaan.

Tabel 1: Gegevens van de gassen die uitgewisseld worden bij de beluchting.

	Zuurstof	CO ₂	Methaan
Gasfractie in lucht (f_g , %)	20,95	0,039	0,000179
Diffusie coëfficiënt (D_L , cm ² /s)	$1,58 \cdot 10^{-9}$	$1,47 \cdot 10^{-9}$	$1,31 \cdot 10^{-9}$
Henry's constant bij 20°C (k_H , -)	0,0337	0,94	0,034
Henry's constant bij 10°C (k_H , -)	0,0398	1,23	0,043
Bij 10°C en atm. druk:			
Concentratie gas in lucht (C_g , mg/L)	285	0,73	0,0012
Verzadigingsconcentratie opgelost gas in water (C_s , mg/L)	11,3	0,90	0,00005

4 Modellerings ontharding

4.1 Proof-of-principle

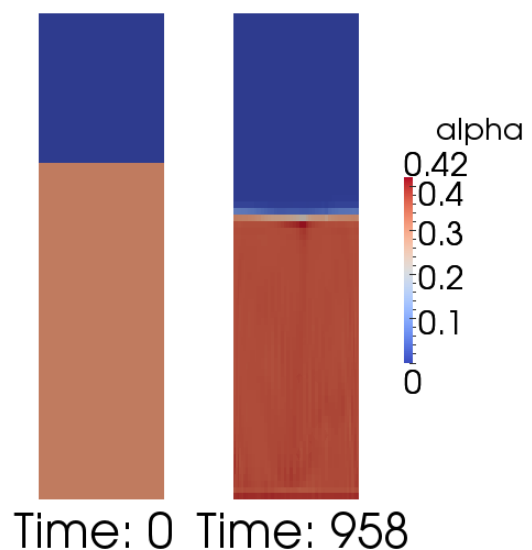
Op basis van ervaring, bekendheid en beschikbaarheid, zowel bij de KWR als bij Vitens, is aanvankelijk getracht om het programma COMSOL te gebruiken voor de tweefasemodellerings. Al snel bleek echter dat de meerfasemodellen die in COMSOL geïmplementeerd zijn niet geschikt zijn voor simulaties van gefluidiseerde bedden: voor een simpele probleembeschrijving lukte het al niet om convergentie te bereiken. Hiervoor werd ook de technische ondersteuning van COMSOL geconsulteerd, maar ook met die hulp is er geen oplossing gevonden.

Na de mislukte pogingen met COMSOL is gekozen om een ander softwarepakket te proberen. Hiervoor is de keuze gevallen op OpenFOAM, deels vanwege de hoge kosten van andere, commerciële CFD-softwarepakketten zoals het ANSYS-produkt *Fluent*. OpenFOAM is een open-sourcepakket en dus volledig gratis, en is net als COMSOL en Fluent een volwaardig CFD-pakket met wetenschappelijke onderbouwing en veel gebruikers (vooral voor academische doeleinden).

OpenFOAM heeft een zeer modulair karakter: het softwarepakket bestaat uit een grote verzameling libraries die hulpfuncties bevatten om verschillende fysische concepten in een model te vangen. Zo zijn er functies voor verschillende turbulentiemodellen, voor thermodynamische processen, voor transportmodellen tot aan low-level systemen zoals het definiëren van een matrix. De vele solvers die voor OpenFOAM geschreven zijn beschrijven elk een specifiek probleemtype, en maken alleen gebruik van de libraries en functies die ze nodig hebben. Op deze manier kan code efficiënt hergebruikt worden en zijn de individuele solvers relatief eenvoudig aan te passen en uit te breiden.

Met behulp van het OpenFOAM-pakket zijn testsimulaties uitgevoerd om de mogelijkheden van deze software voor de simulatie van onthardingsreactoren te evalueren. De solver *twoPhaseEulerFoam* is hiervoor gebruikt: deze is ontworpen om een Euler-Euler tweefasemodel te beschrijven en bevat o.a. de effecten van turbulentie en een benadering op macroschaal van de effecten van de fysieke interacties tussen korrels.

Deze solver was toegepast in 3D op een simpel cilindrisch systeem met een diameter van 1,68m en een hoogte van 6,5m. Deze gesimuleerde reactor werd deels gevuld met zandkorrels met een diameter van 0,7mm. Het is gelukt om dit model een stabiele oplossing te laten vinden (Figuur 5). In deze eindtoestand behoudt het wervelbed een constante hoogte die afhankelijk is van de korrel diameter en de instroomsnelheid van het water. De stromingsprofielen die worden gegenereerd nemen verschillende vormen aan afhankelijk van de turbulentie bij de invoer, en worden verder besproken in paragraaf 4.4.

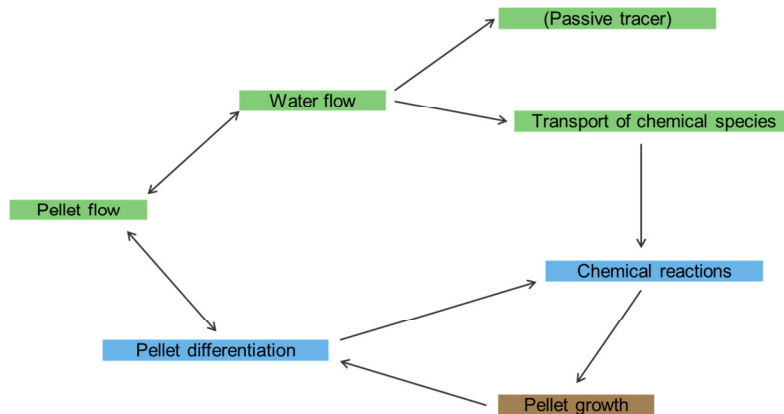


Figuur 5: De volumefracties vaste stof over een doorsnede van een cilinder met opwaartse stroming: begintoeestand en de stabiele toestand, hier getoond na 958 gesimuleerde secondes.

Op basis van deze simulaties is de keuze gemaakt om met OpenFOAM verder te gaan.

4.2 Modelontwikkeling

In Figuur 6 zijn de relevante processen voor de ontharding weergegeven en de processen in groen zijn daadwerkelijk gemodelleerd.



Figuur 6: Overzicht van de gemodelleerde processen voor de ontharding. De processen getekend in groen zijn gemodelleerd, de processen in blauw (nog) niet en de processen in bruin hebben een hele andere tijdschaal en zijn daarom niet gemodelleerd.

De OpenFOAM-solver *twoPhaseEulerFoam* is gebruikt om de water flow en pellet flow te berekenen. Deze solver is één van de resultaten van een lang onderzoeksproces om meerfasestroming in een CFD-model te vangen. De eigenschappen van de solver worden uitgebreid beschreven in (Rusche 2002). Het belangrijkste aspect van het model is dat elke cel verdeeld wordt in twee fracties, waarvan één gedisperseerd is. In het geval van ontharding representeert één fractie de vloeibare fase en de andere fractie de vaste korrels. Deze tweede, feitelijk discrete, fase wordt eveneens als vloeistof gemodelleerd, met de toevoeging van continue benaderingen van de effecten van wrijvingskrachten en de fysieke interacties tussen korrels.

In dit tweefasemodel wordt de fractie van een cel die gevuld is met de korrelfase gerepresenteerd door de variabele α_1 . Voor de vloeibare fase geldt $\alpha_2 = 1 - \alpha_1$. Als $\alpha_1 = 0$ bestaat een cel alleen uit water; als $\alpha_1 = \alpha_{1,max}$ is de cel maximaal gevuld met korrels. Voor het geval van vaste, onvervormbare korrels geldt dat $\alpha_{1,max} < 1$: het is immers onmogelijk om korrels zo te stapelen dat er helemaal geen ruimte tussen de korrels overblijft (enkele triviale, onnatuurlijke gevallen daargelaten); en deze ruimte wordt in het model opgevuld met de vloeibare fase. Voor bollen met gelijke straal zou het theoretische maximum $\alpha_{1,max} \cong 0,74$ gelden, maar omdat er in praktijksituaties doorgaans afwijkingen zullen zijn in straal en vorm zal de werkelijke waarde lager uitvallen. Voor CFD-doeleinden is een veelgebruikte waarde $\alpha_{1,max} = 0,62$ geschikt, die goed overeenkomt met wat in de praktijk wordt gevonden.

Om de menging van natronloog of kalkmelk in de onthardingsreactoren te visualiseren en om de verblijftijd van water te bepalen was het nodig om een tracer toe te voegen aan het model. Hiervoor is gebruikgemaakt van de modulariteit van OpenFOAM om *twoPhaseEulerFoam* uit te breiden met een extra fase, namelijk een tracerfase die precies de stroming van het water volgt. Hiermee wordt een bepaalde fractie van het water 'gemarkt' om deze over de tijd te kunnen volgen.

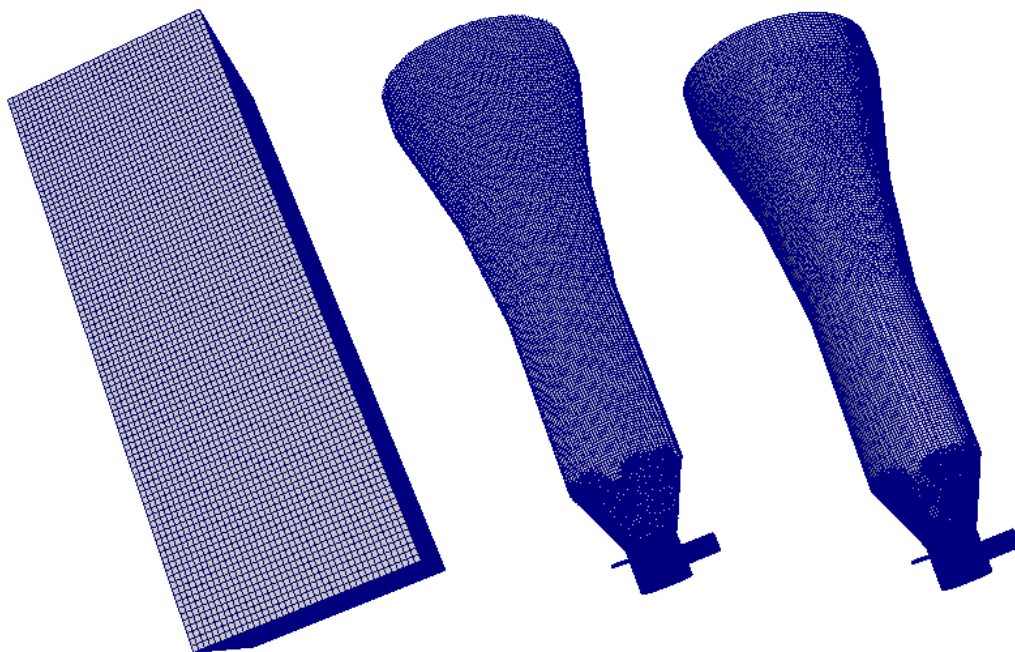
Er zijn pogingen ondernomen om het model verder uit te breiden naar n fasen (pellet differentiation), om meerdere korrelgroottes in één model te vangen. Dit werd getracht

volgens de Direct Quadrature Method of Moments (DQMOM) als oplossing van de population balance equation (PBE) zoals geïmplementeerd in (Silva & Lage 2011). Het lukte echter niet om met dit model een fysisch plausible uitkomst te bereiken. Vanwege de wiskundige complexiteit van de DQMOM-implementatie zou het vinden van een functionele oplossing veel tijd in beslag kunnen nemen. Hierdoor werd besloten om voor dit project het originele model met slechts één korrelfase te gebruiken.

De chemische reacties zijn nog niet gemodelleerd, omdat de focus in eerste instantie lag op de meerfasen stroming. Het berekenen van de pelletsangroei is ook niet meegenomen, omdat de tijdschalen hiervoor veel groter zijn dan die van de stromingsvariaties.

4.2.1 Meshes

Een belangrijk onderdeel van CFD is het creëren van een *mesh*, de representatie van de geometrie door vele kleine volume-elementen. Voor dit project is gebruikgemaakt van twee applicaties die in OpenFOAM beschikbaar zijn: *blockMesh* en *snappyHexMesh*. Met behulp van *blockMesh* kunnen alleen elementaire geometrieën (blokken, cilinders) gemaakt worden op basis van een simpele en beperkte instructieset. Het programma *snappyHexMesh* biedt de mogelijkheid om complexere domeinen te definiëren: op basis van een bestand in het STL-formaat, een formaat voor (de oppervlaktes van) 3D-objecten dat voornamelijk voor CAD (computer-aided design) wordt gebruikt, kan een complexe vorm 'gebeiteld' worden uit een simpele vorm die door *blockMesh* gecreëerd is (Figuur 7). Deze methode is gebruikt om de meshes voor alle onthardingsreactoren te creëren. De benodigde STL-bestanden zijn met het programma *SALOME* (SALOME 2014) gemaakt op basis van de reactorontwerpen van de gemodelleerde lokaties. De meshes van alle onthardingsreactoren bestaan voornamelijk (90+%) uit hexaëders: de rest wordt door *snappyHexMesh* gevuld met prisma's en polyeders om de geometrie compleet te maken en het geheel wiskundig kloppend te maken.



Figuur 7: Het creëren van een complex mesh met behulp van snappyHexMesh. Uit een simpel blok (links) worden eerst alle cellen verwijderd die compleet buiten de geometrie vallen (midden). Daarna worden de randen gladgestreken (rechts) en wordt het mesh bijgeschaafd om de CFD-berekeningen gemakkelijker te maken door bijvoorbeeld grootteverschillen tussen naburige cellen te verkleinen en het ontstaan van geëlongeerde cellen te voorkomen. Voor de getoonde reactor is gebruikgemaakt van de mogelijkheid in snappyHexMesh om de grofheid van het domein te variëren: hier is de bodem van de reactor fijner gemeshd om de sterkere en complexere stroming die zich daar bevindt beter te kunnen berekenen.

4.2.2 Randvoorwaardes

De belangrijkste randvoorwaardes die gebruikt zijn voor de simulaties, evenals de startwaardes binnen het gehele domein op $t = 0$, worden weergegeven in Tabel 2. Deze informatie is toegevoegd ten behoeve van de reproduceerbaarheid van de resultaten, maar is niet nodig voor het inhoudelijke begrip hiervan. Voor het gebruik en de wiskundige interpretatie wordt verwezen naar de interne documentatie van OpenFOAM. Bij laminaire stroming worden de parameters k en ϵ niet gebruikt.

Tabel 2: Randvoorwaardes voor onthardingsmodel (zie tekst voor uitleg)

	α_1	$\{k, \epsilon\}$	p	U_1	U_2
Inlet	0	$\{k, \epsilon\}_{\text{init}}$	U -linked	(0 0 0)	$U_{z, \text{in}}$
Wanden	ZG	ZG	U -linked	(0 0 0)	(0 0 0)
Outlet	IO	ZG	0	(0 0 0)	p -linked
Startconditie	$\alpha_{1, \text{vast bed}}$	$\{k, \epsilon\}_{\text{init}}$	0	(0 0 0)	(0 0 0)

Enkele randvoorwaardes zijn afgekort in Tabel 2:

- ZG – De gradiënt van de parameter wordt op nul gezet op de betreffende rand (*zeroGradient* in OpenFOAM).
- IO – De gradiënt is nul bij netto uitstroom; bij instroom wordt puur water ingevoerd (*inletOutlet* in OpenFoam). Met de gebruikte instellingen heeft deze randvoorwaarde hetzelfde effect als *zeroGradient*, omdat de vaste fase het domein niet kan verlaten (het snelheidsveld U_1 is nul op alle randen).
- $\alpha_{1, \text{vast bed}}$ – De situatie van het pelletbed bij aanvang van de simulatie (dichtheid, hoogte) wordt ingevoerd met behulp van de OpenFoam-applicatie *setFields*.
- U -linked – De druk wordt berekend op basis van het snelheidsveld, met als referentie een druk van 0 bij de outlet (*fixedFluxPressure* in OpenFOAM).
- p -linked – De gradiënt van de snelheid is nul bij positieve uitstroom; bij instroom wordt deze afgeleid van de flux van de aanliggende cel in de richting loodrecht op het oppervlak (*pressureInletOutletVelocity* in OpenFOAM).

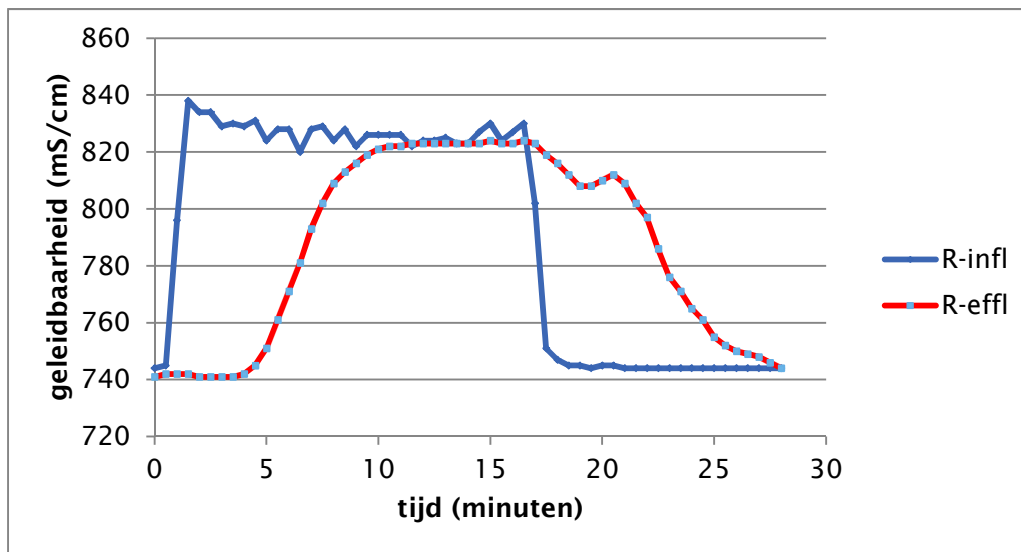
4.2.3 Hardware

Voor de simulaties is gebruikgemaakt van een HP Z820 2x6C E5-2640 workstation met 64 GB RAM. Dit systeem bevat 12 processorcores, maar door hyper-threading zijn er 24 virtuele cores beschikbaar. Een overzicht van de rekentijden voor iedere simulatie is gegeven in Bijlage I.

4.3 Experimentele resultaten verblijftijdspreiding

Om de voorspellingen van het model te valideren is een zoutproef uitgevoerd op de reactor in Goor door Vitens. Er is zout gedoseerd op de zuig van de reactorpomp, en EGV gemeten op de toevoerleiding en de afvoerpijp (Figuur 8). Hiermee kan het stromingspatroon dat uit het model volgt geëvalueerd worden op basis van de verblijftijdscurve.

Tijdens de proef heeft bij toeval een pelletaftap plaatsgevonden. Dit is te zien aan de knik in de EGV-curve van het effluent na ca. 19 minuten.



Figuur 8: Resultaten van de zoutproef uitgevoerd door Gerrit Jan Zweere bij een onthardingsreactor in Goor met een instroomsnelheid van 80 m/h. Getoond is het EGV op meetpunten op de toevoerleiding (blauw) en op de afvoerpijp (rood).

4.4 Resultaten Vitens-reactoren

Als modellocaties zijn gekozen:

- Goor: een cilindrische reactor met vlakke bodem
- Kolff: een diffusor
- Spannenburg: een cilindrische reactor met conisch onderstuk en flappenbodem
- Cothen: een cilindrische reactor met conisch onderstuk en tangentiële invoer
- Tull en 't Waal: een cilindrische reactor met conisch onderstuk en tangentiële invoer

Hiermee zijn alle vier types onthardingsreactoren die door Vitens worden gebruikt alle gerepresenteerd. Oorspronkelijk zou Tull en 't Waal niet gesimuleerd worden; deze locatie werd tijdens de projectuitvoering toegevoegd omdat de ontwerp-tekening van de bodempot van Cothen niet beschikbaar was.

De pellets in de reactoren worden gemodelleerd als bollen van 0,7 mm met een soortelijke dichtheid van 2600 g/L. Voor één reactor (Goor) zijn ook andere diameters geïnventariseerd. Het is helaas binnen dit project niet gelukt om meerdere korrelgroottes in één simulatie toe te passen, om het ontstaan en de gevolgen van de stratificatie van de pelletgroottes te bekijken. Ook de aangroei van kalk op de pellets is niet gesimuleerd, maar dit langzame proces zou het stromingsprofiel niet moeten beïnvloeden op de tijdschaal die hier behandeld wordt.

De menging van natronloog (of, beter gezegd, de verspreiding van de pH-verhoging als gevolg van de toevoeging van natronloog) is kort geëvalueerd voor de modelreactor in Goor. De twee reactoren met tangentiële invoer (Cothen en Tull en 't Waal) maken gebruik van kalkmelk dat via aparte doseerpunten de reactor binnenstroomt; deze kalkmelk wordt in de simulaties gevolgd met behulp van een passieve tracer in de vloeistoffase.

Voor zowel natronloog als kalkmelk geldt dat processen als reactiekinetiek en moleculaire diffusie niet expliciet meegenomen worden in de simulaties, en in het geval van kalkmelk geldt daarnaast vanwege de slechte oplosbaarheid en hogere viscositeit van calciumhydroxide dat de beweging ervan licht af zal wijken van de waterstroming. Desalniettemin zou de toegepaste passieve tracer een redelijke benadering moeten geven van de menging van de gedoseerde producten binnen de reactoren.

De precieze turbulentie van het water zoals het uit een doppenbodem stroomt is bij ons weten onbekend. Op basis van de aanname van vrije stroming met een karakteristieke lengteschaal l en een (gemiddelde) snelheid U kunnen de turbulente kinetische energie k en de turbulente dissipatie ϵ als volgt bepaald worden:

$$k = \frac{3}{2}(UI)^2 \quad (5)$$

$$\epsilon = \frac{C_\mu k^2}{l} \quad (6)$$

Hierin is C_μ een modelconstante die doorgaans op 0,09 gesteld wordt. l is de initiële turbulente intensiteit, die voor grote pijpstroming op lage snelheid tussen de 0,01 en 0,05 ligt. Voor de lengteschaal l geldt voor volledig ontwikkelde stroming door een cilindrische pijp dat $l \cong 0,038d$, met voor d de diameter. Voor de reactor in Goor zou bijvoorbeeld voor een volledig ontwikkelde pijpstroom gelden dat $d = 1,84$ m en $U = 0,025$ m/s. Met $l = 0,05$ volgt dat $k = 2,34 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^{-2}$ en $\epsilon = 5,06 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}^{-3}$.

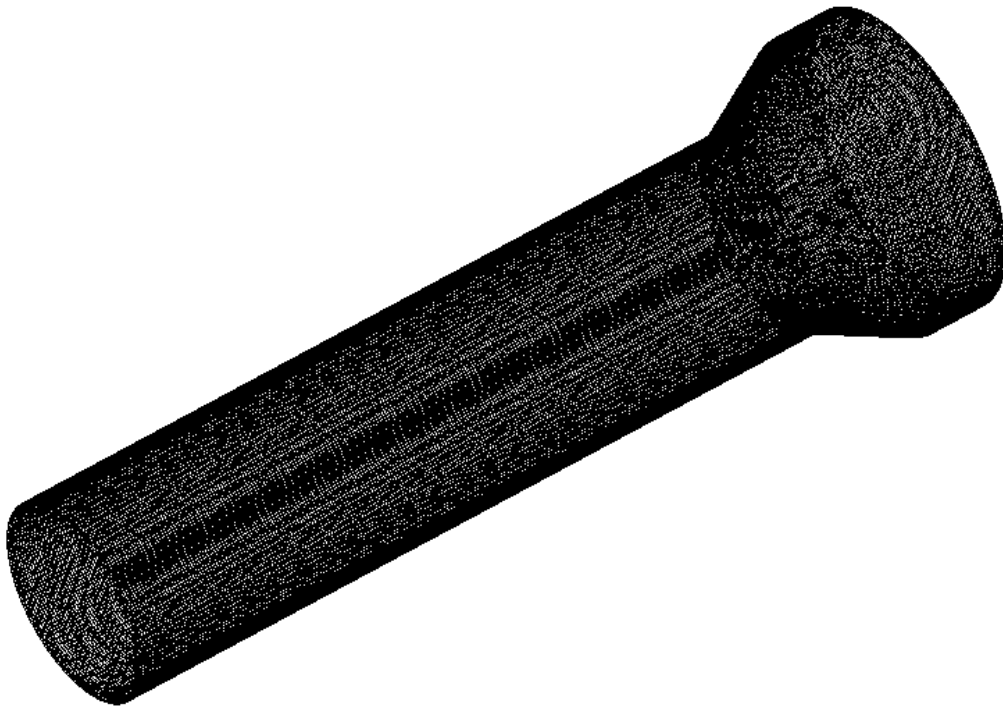
Indien deze waarden voor k en ϵ als randvoorwaarden ingevoerd worden lukt het het model niet om te convergeren, om tot dusver onbekende redenen. Om toch bruikbare resultaten te verkrijgen is gekozen om twee verschillende simulaties te draaien: één met zeer hoge turbulentie ($k = 10 \text{ m}^2/\text{s}^{-2}$ en $\epsilon = 10 \text{ m}^2/\text{s}^{-3}$ bij de instroom) en één met volledig laminaire stroming. Deze twee simulaties vinden beide zonder probleem een oplossing en de daaruit gehaalde resultaten vertegenwoordigen twee uitersten; hiertussenin ligt dan de werkelijke oplossing. Omdat de instroom meestal via een doppenbodem gebeurt zal de turbulente intensiteit, afhankelijk van de ligging van de doppen, in ieder geval hoger zijn dan bij een volledig ontwikkelde pijpstroming.

4.4.1 Goor

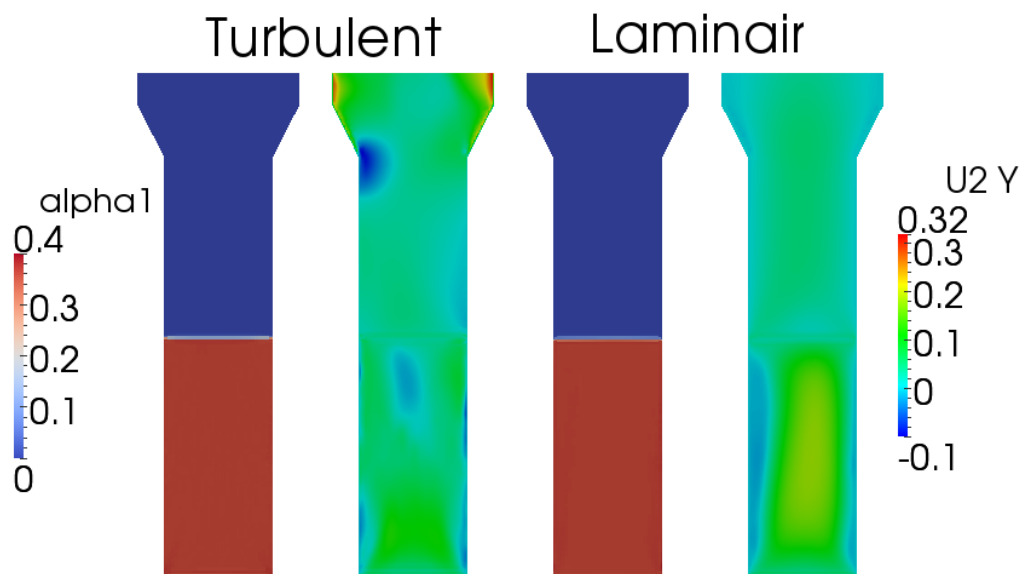
De onthardingsreactor in Goor maakt gebruik van een cilindrisch ontwerp en loogdosering (Siegers 2003). Deze reactor met een diameter van 1,68m en een hoogte (cilindrisch deel) van 6,5m heeft een ontwerpcapaciteit van 200m³/h, wat overeenkomt met een gemiddelde opwaartse snelheid van 0,025 m/s. Op basis van het ontwerp is een mesh gemaakt met ca. 288.000 cellen (Figuur 9: Mesh voor de onthardingsreactor in Goor).

De reactor bevat een doppenbodem. De keuze is gemaakt om deze niet expliciet te modelleren, maar om in plaats daarvan een homogene opwaartse stroming op te leggen aan de invoer. Hiermee is veel reken- en ontwikkeltijd bespaard.

De hoogte van korrelbed is gegeven als (2,0-2,5) m en dat van het fluïde bed is (4,0-5,0) m (Siegers 2003). Als startconditie van het model is een hoogte van 3,375 gebruikt met een volumefractie van 0,4. Dit komt overeen met een hoogte van 2,18 m voor het vaste korrelbed. De keuze voor deze startconditie in gefluïdiseerde toestand is gemaakt om de rekentijd tot een stabiele toestand te verkorten en omdat de berekeningen in OpenFoam moeizaam verlopen, en soms helemaal niet convergeren, als de volumefractie van de pellets in de buurt van het maximum komt, wat het geval is voor een vast bed.

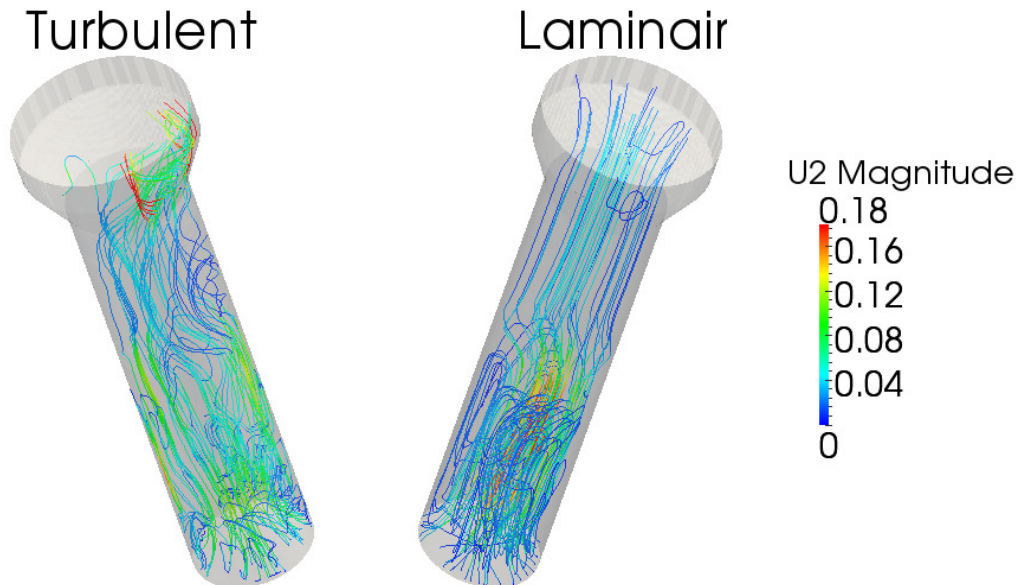


Figuur 9: Mesh voor de onhardingsreactor in Goor



Figuur 10: Doorsnedes van de modelreactor van Goor. Getoond is de volumefractie van pellets (α_1) en de snelheid van de vloeibare fractie in de verticale richting ($U_{2,y}$) in m/s voor zowel het turbulente (links) als het laminaire model (rechts) nadat het pelletbed een stabiele hoogte heeft bereikt. Getoond zijn momentopnames na 600 s. Vooral voor turbulente stroming is het snelheidsprofiel nog steeds veranderlijk in de eindtoestand.

De eindtoestand van beide modellen wordt geschetst in Figuur 10. Te zien is dat het pelletbed een zekere hoogte bereikt die gelijk is voor beide modellen. De dichtheid van de pellets is zeer homogeen in het fluïde bed. Zoals verwacht levert het turbulente model een chaotischer stromingsprofiel op in en boven het bed. In beide gevallen is de opwaartse stroming redelijk verdeeld over de horizontale doorsnede van het reactor, al is er zeker geen sprake van een perfecte propstroom en toont het model met laminaire stroming neerwaartse beweging langs de wand.

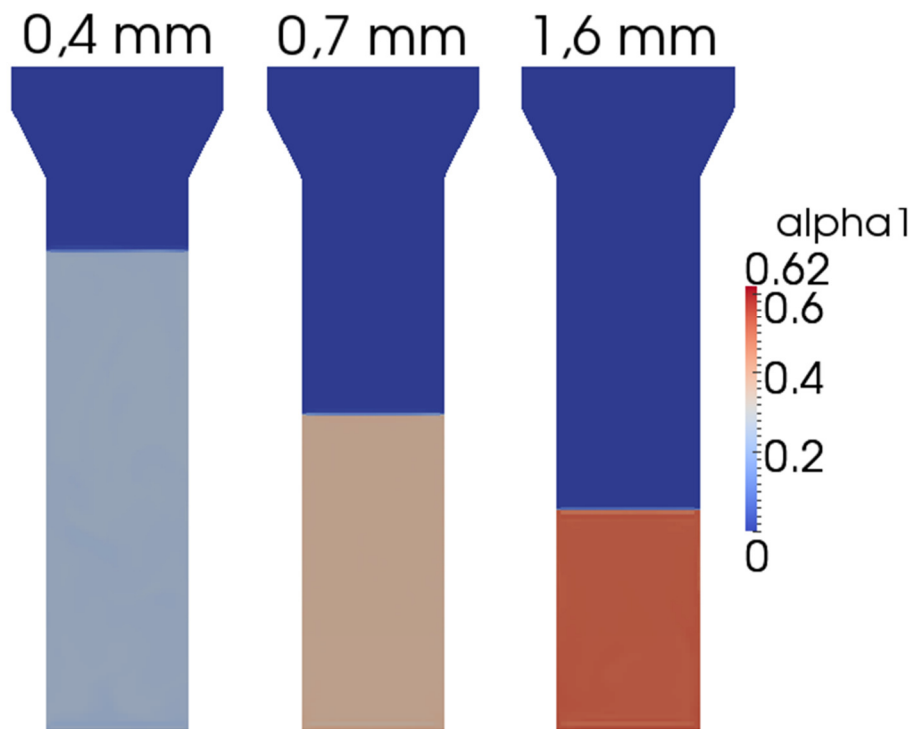


Figuur 11: Stroomlijnen van de vloeibare fase voor de modelreactor in Goor, gebaseerd op een momentopname van het stromingsprofiel na 600 s. De kleur geeft de snelheid van het water aan in m/s.

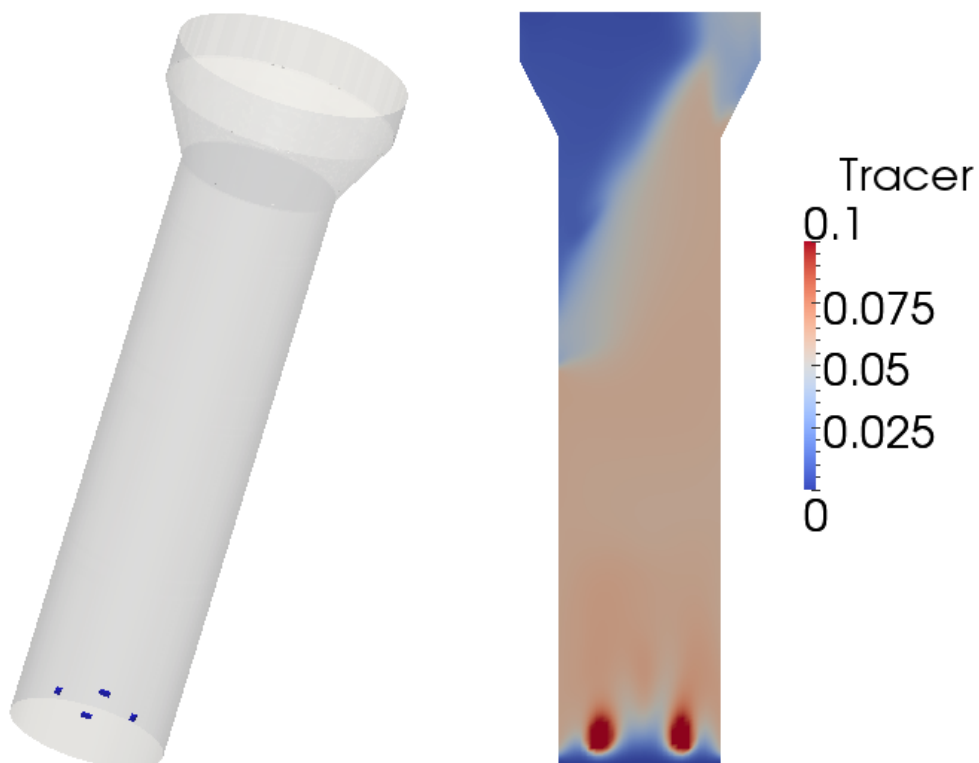
De stroomlijnen van de vloeibare fase (Figuur 11) bevestigen dit beeld. Hier is duidelijk zichtbaar dat bij laminaire stroming langs de wand circulatiestromen ontstaan.

Om de invloed van korrelgrootte te evalueren is het model gedraaid met twee afwijkende korreldiameters. Hieruit blijkt dat een kleinere korreldiameter leidt tot een hoger, sterker gefluïdiseerd, bed (Figuur 12). De homogene verdeling van de korreldichtheid binnen het bed blijft intact. Dit komt overeen met de verwachting vanuit een theoretisch perspectief en vanuit de praktijkervaring, die zegt dat de grotere, zwaardere korrels onderin de reactor te vinden zijn en de kleinere korrels bovenin het pelletbed zweven.

Om de mogelijkheden van het model weer te geven is ook een model geconstrueerd met een loogdoseerkruis (met fictieve positie en afmetingen). Dit is bewerkstelligd door op bepaalde punten in het domein continu een tracer te injecteren (Figuur 13, links). Deze tracer beweegt passief mee met de vloeibare fase en geeft een indicatie van de menging van de geïnjecteerde vloeistof (of de pH-verandering die daardoor veroorzaakt wordt). Uit de resultaten blijkt dat de tracer na enkele tientallen centimeters goed verdeeld is over de breedte van de reactor (Figuur 13, rechts). Dit impliceert dat het aantal injectiepunten voor natronloog geen sterk effect heeft op de menging binnen de reactor, mits deze punten zich laag genoeg in de reactor bevinden.



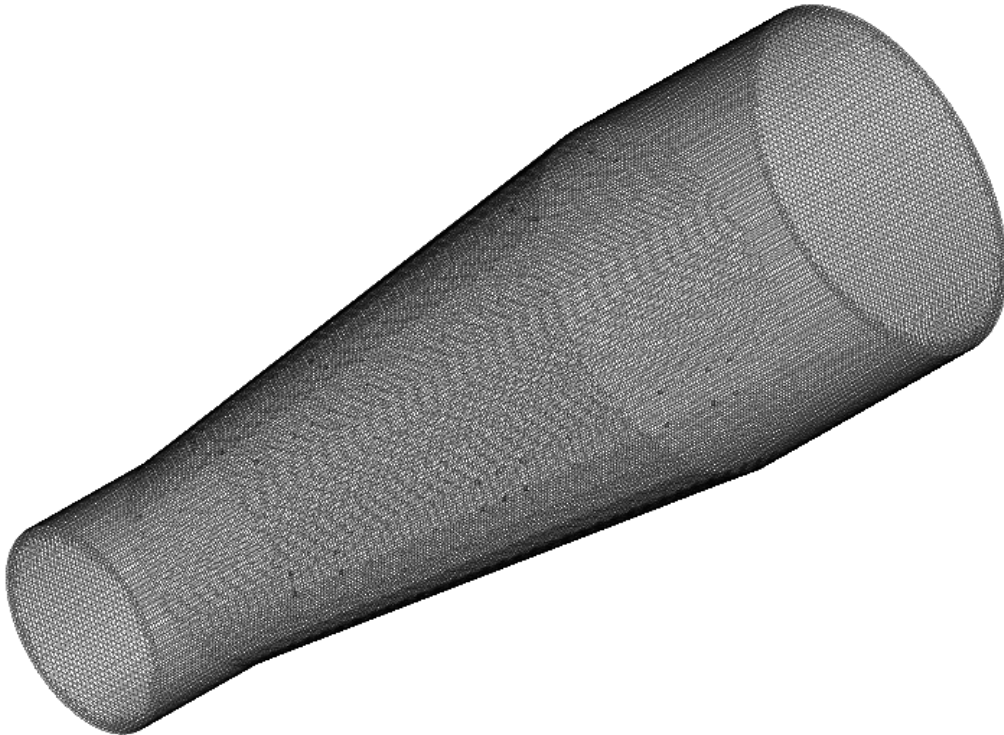
Figuur 12: Hoogte en korrel dichtheid van het pelletbed in de stabiele toestand bij drie verschillende korreldiameters met turbulente stroming.



Figuur 13: De toevoeging van een loogdoseerkruis aan het onthardingsmodel van Goor met hoogturbulente stroming. Links: locatie van de injectiepunten. Rechts: concentratie van een passieve tracer op een doorsnede van de reactor waar twee doseerpunten binnen vallen. De injectie startte op $t = 0$ s; op het getoonde tijdstip na 600 gesimuleerde seconden heeft de tracer de uitvoer van de reactor bereikt, maar is het nog niet uniform verdeeld over het bovenste deel van de reactor.

4.4.2 Kolff

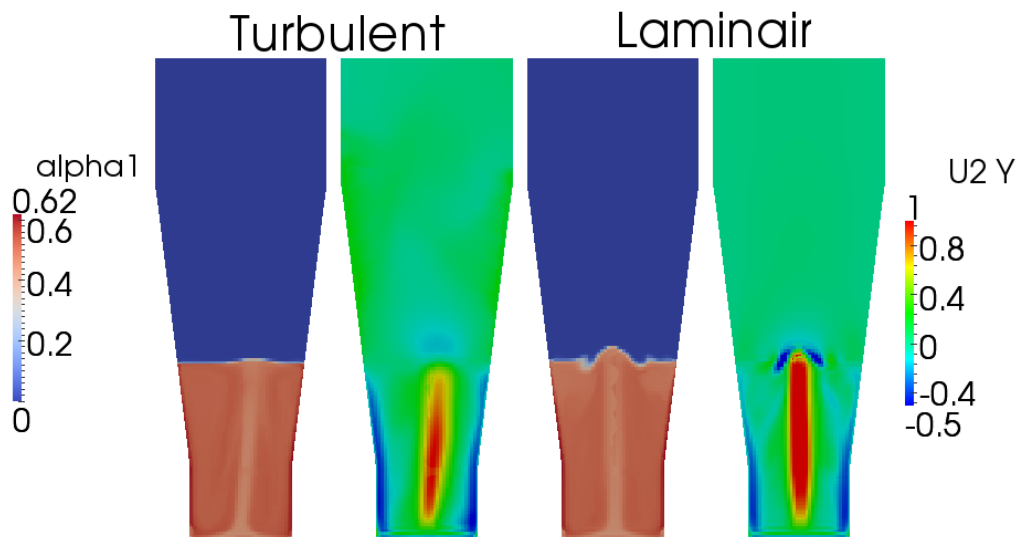
Als model voor een diffusor is een reactor in Kolff gekozen. De reactor bevat een verwijding van 7,06° van een diameter van 2,2 m tot een diameter van 3,7 m (Leijssen 2013). Het mesh voor deze reactor (Figuur 14) bevat ca. 519.000 cellen. Het pelletbed is bij stilstand (2,5-3,5) m hoog; in bedrijf is deze hoogte (3,0-4,0) m. Met een volumestroom van 250 m³/h is de gemiddelde instroomsnelheid 0,018 m/s.



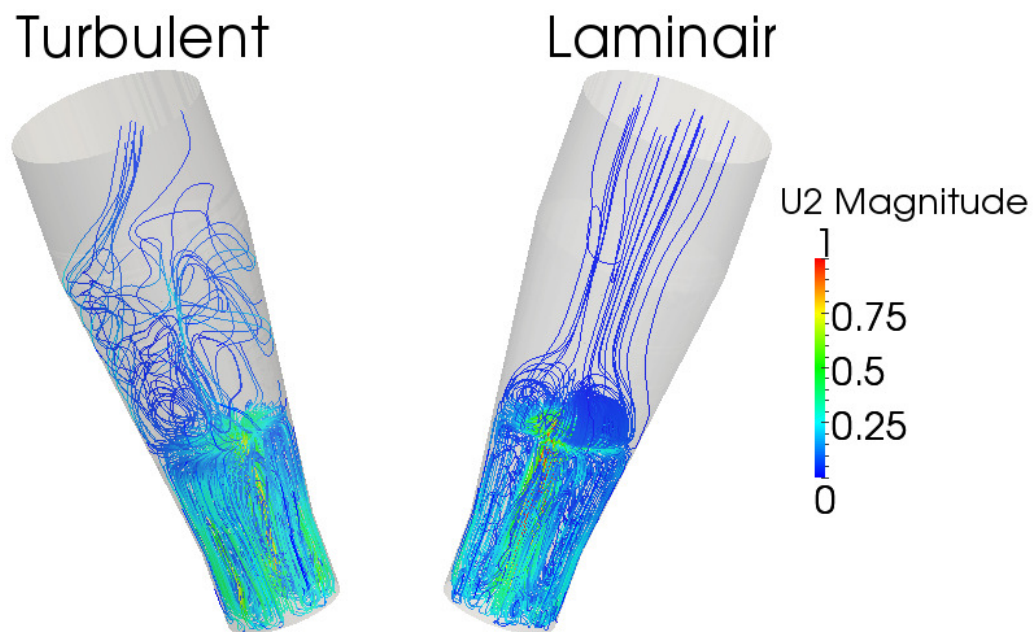
Figuur 14: Mesh voor de onthardingsreactor in Kolff

Net als bij de reactor in Goor wordt hier als randvoorwaarde een homogene instroom opgelegd. Als startconditie is een fluïde bed gedefinieerd met een hoogte van 4,5 m en een volumefractie van 0,4 aan pellets. Dit correspondeert met een hoogte van 3,2 m voor het vaste bed.

In tegenstelling tot de reactor in Goor ontstaat er bij deze reactor geen homogene verdeling van de pelletdichtheid in de stabiele eindtoestand (Figuur 15): aan de zijwanden van de reactor is een hogere volumefractie aan korrels, terwijl op de as van de reactor een gebied ontstaat met een verlaagde korrelfractie. Dit gebied valt samen (en wordt veroorzaakt door) een sterke opwaartse stroming van het water. Opvallend is dat deze stroming een significant hogere snelheid heeft dan de stroming voor Goor (vergelijk met Figuur 10), terwijl de instroom juist een lagere snelheid heeft (0,018 m/s ten opzichte van 0,025 m/s in Goor). Circulatie treedt bij deze reactor in grote mate op, zowel bij hoogturbulente als bij laminaire stroming (Figuur 16).



Figuur 15: Doorsnedes van de modelreactor van Kolff. Getoond zijn momentopnames van de volumefractie van pellets (α_1) en de snelheid van de vloeibare fractie in de verticale richting ($U_{2,Y}$) in m/s voor zowel het turbulente (links) als het laminaire model (rechts) nadat het pelletbed een stabiele hoogte heeft bereikt. Het turbulente model heeft 420 gesimuleerde secondes gedraaid; het geval van laminaire stroming is getoond na 341 s.



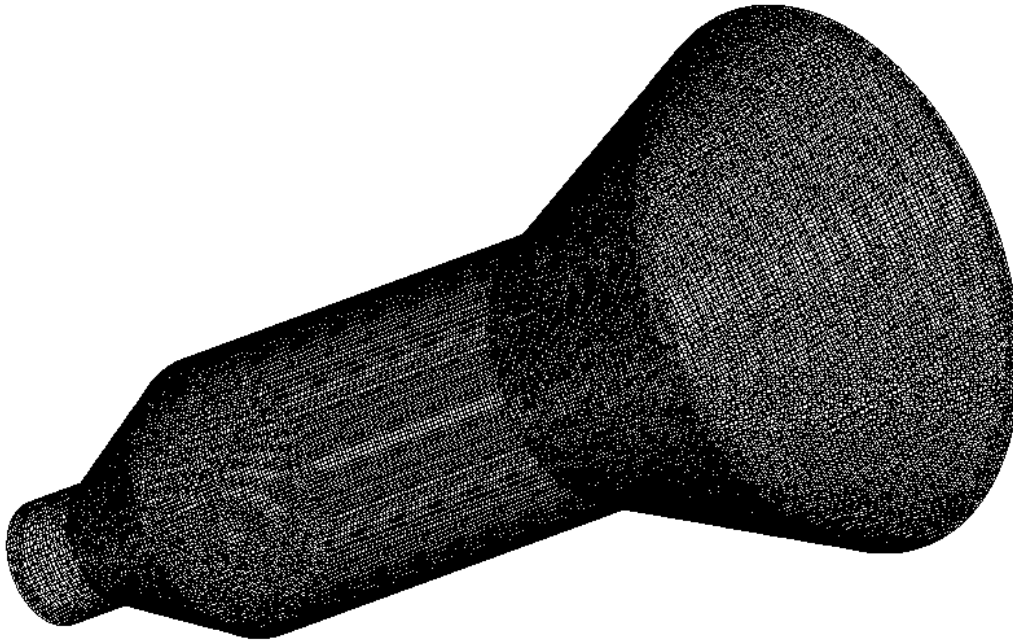
Figuur 16: Stroomlijnen van de vloeibare fase voor de modelreactor in Kolff in de stabiele eindtoestand. De kleur geeft de snelheid van het water aan in m/s.

4.4.3 Spannenburg

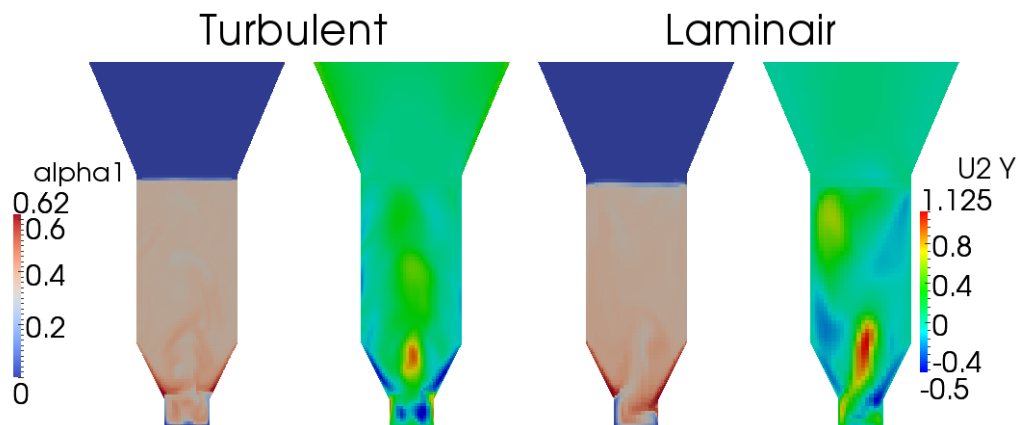
In Spannenburg worden twaalf onthardingsreactoren gebruikt: twee grote reactoren met een ontwerpcapaciteit van $520 \text{ m}^3/\text{h}$ en tien kleinere met een ontwerpcapaciteit van $260 \text{ m}^3/\text{h}$ (Siegiers 2003). Voor het model is gekozen voor het kleinere ontwerp. Deze cilindrische reactor met conisch ondergedeelte maakt gebruik van een flappenbodem; ook voor deze reactor gaat het model uit van homogene instroom vanuit de bodem. De reactor is 7,2 m hoog. De bodem heeft een diameter van 0,9 m, bovenin de reactor is dit 3,6 m. De gemiddelde instroomsnelheid is hierdoor 0,14 m/s. Figuur 17 toont een mesh van deze

reactor, bestaande uit ~309.000 cellen. Voor het laminaire model is gebruikgemaakt van een kleiner mesh om rekentijd te besparen; deze bevat ongeveer 135.000 cellen.

De bedhoogte is voor de reactoren in Spannenburg (2,7-3,2) m voor het vaste bed, en (5,2-5,7) m voor het fluïde bed. Voor de simulaties is als startconditie een bedhoogte van 4,0 m gebruikt met een volumefractie 0,4 voor de korrels. Dit komt overeen met een vaste bedhoogte van 2,9 m.



Figuur 17: Mesh voor de onthardingsreactor in Spannenburg

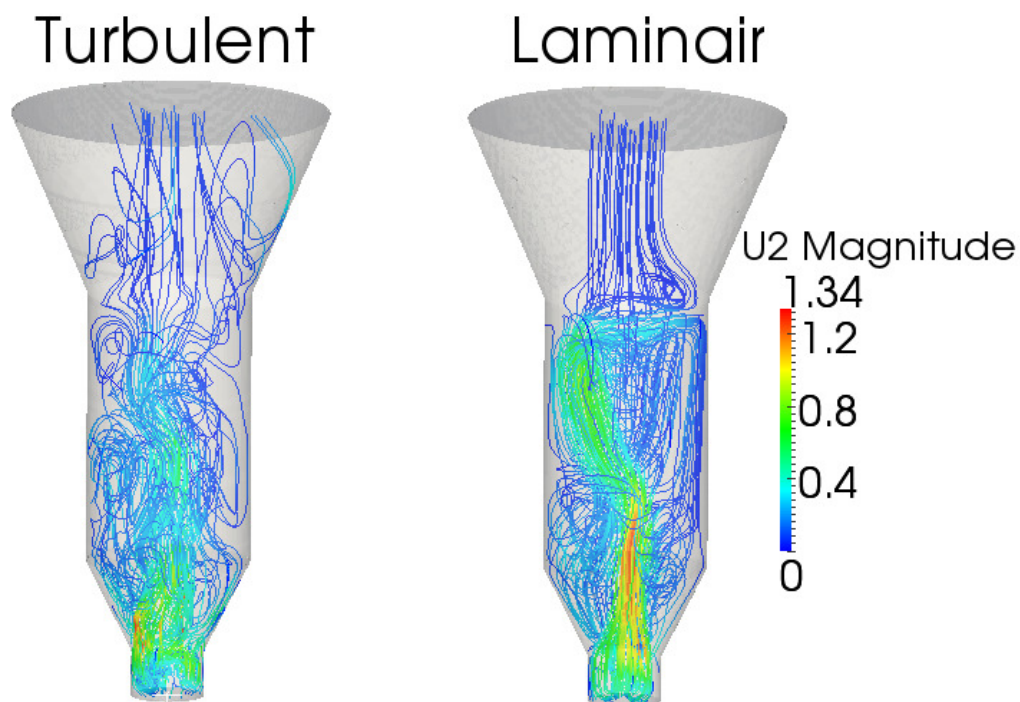


Figuur 18: Doorsnedes van de modelreactor van Spannenburg. Getoond zijn momentopnames van de volumefractie van pellets (α_1) en de snelheid van de vloeibare fractie in de verticale richting (U_2) in m/s voor zowel het turbulente (links) als het laminaire model (rechts) nadat het pelletbed een stabiele hoogte heeft bereikt. Het turbulente model heeft 242 gesimuleerde secondes gedraaid; het geval van laminaire stroming is getoond na 600 s.

Zowel met als zonder turbulentie vindt het model een toestand waarin de hoogte van het pelletbed constant is (Figuur 18). Deze hoogte is voor het laminaire model een fractie kleiner dan voor het geval met turbulentie. Dit verschil kan verklaard worden door de verschillende meshes: door het grovere mesh dat voor het laminaire model gebruikt is was de initiële hoogte van het filterbed kleiner, doordat het afgekapt werd op hele cellen.

Duidelijk te zien is dat er complexe stromingspatronen optreden aan de onderkant van de reactor. Daar stroomt het water met relatief grote snelheid omhoog en komt het in aanraking met de grote pelletdichtheid die langs de verwijding ontstaat en naar beneden zakt. Het resultaat is een chaotisch verloop waarin zowel de korreldistributie als de voorkeursstroom van het water continu verandert in de onderste helft van de reactor. Dit voltrekt zich ook in het geval van laminaire stroming.

De stroomlijnen bevestigen dit beeld en tonen dat vooral in het geval van turbulente stroming circulatiestromen ontstaan in het deel van het korrelbed boven de verwijding (Figuur 19). De voorkeursstroom die daar ontstaat is veranderlijk, maar wijkt niet ver af van de as van de reactor.



Figuur 19: Stroomlijnen van de vloeibare fase voor de modelreactor in Spannenburg, gebaseerd op een momentopname van het stromingsprofiel na 242 s voor het turbulente stromingsmodel en na 600 s voor laminaire stroming. De kleur geeft de snelheid van het water aan in m/s.

4.4.4 Cothen

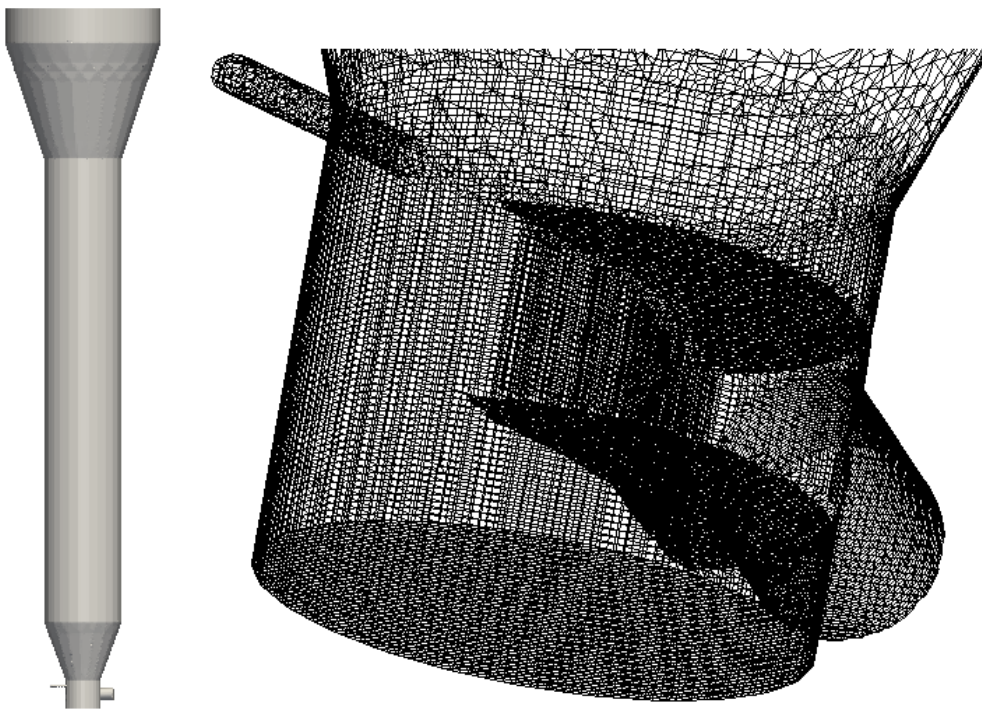
In Cothen wordt voor ontharding gebruikgemaakt van cilindrische reactoren met conische ondergedeeltes en tangentiële invoer (Siegers 2003). Bij deze reactoren wordt kalkmelk toegevoegd via een apart invoerpunt. Elke reactor heeft een ontwerpcapaciteit van 120 m³/h, een totale hoogte van 12,1 m en een diameter van 1,35 m voor het cilindrische deel.

De ontwerptekening van de reactoren in Cothen was helaas niet beschikbaar. Voor de geometrie van de invoer van het water en kalkmelk is gebruikgemaakt van het ontwerp voor de onthardingsreactoren in Tull en 't Waal (Figuur 20). Van het kalkmelkinvoerpunt is bekend dat de diameter 43 mm is, wat met een toevoer van 4 m³/h een gemiddelde snelheid betekent van 0,77 m/s. Voor de invoer van het water is een diameter van 0,214 m gebruikt, corresponderend met een instroomsnelheid van 0,93 m/s.

De hoogte van het vaste korrelbed is ongeveer 5,0 m; het fluïde bed bereikt een hoogte van (9,0-10,0) m. Als startconditie voor het model is gekozen om de pelletvolumefractie te initiëren op 0,4 over 7,5 m van het cilindrische gedeelte. De onderpot bevat dus bij aanvang

alleen water, en kan gedurende de simulatie gevuld worden met de pellets die erboven starten. Deze keuze is gemaakt vanwege de complexe geometrie van de onderpot en de verwachte heterogeniteit van het pelletbed in die zone.

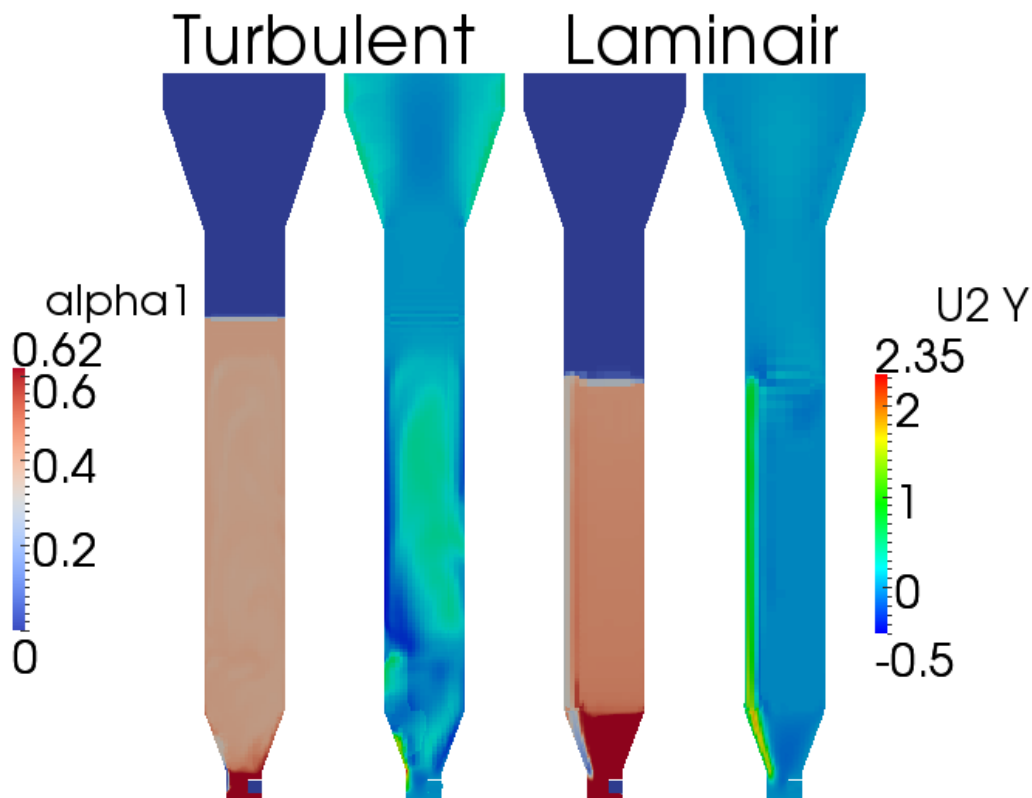
Voor dit model zijn twee meshes gemaakt: turbulente stroming is gesimuleerd met een mesh van ca. 475.000 cellen; het laminaire stromingsmodel is toegepast op een mesh met ca. 95.000 cellen. De complexe geometrie van deze reactor maakten dat het model moeite had te convergeren. Dit heeft als gevolg gehad dat de simulatie met turbulente stroming na 21,5 gesimuleerde seconden afgebroken werd. Met laminaire stroming is dit niet het geval, echter verloopt de simulatie wel traag. Hierdoor werd de keuze gemaakt om met een relatief grof mesh te werken, om de benodigde rekentijd binnen perken te houden.



Figuur 20: Links: 3D-weergave van de onthardingsreactor in Cothen. Rechts: mesh voor de bodemconstructie, gebaseerd op de reactoren in Tull en 't Waal.

Gezien het vroege afbreken van de simulatie met turbulente stroming wordt de stabiele eindtoestand besproken zoals die met laminaire stroming ontstaat. De ontwikkeling van het eerdergenoemde model (Figuur 21, links) lijkt vergelijkbaar met de situatie met laminaire stroming, wat erop zou kunnen duiden dat een soortgelijke eindtoestand ontstaat met turbulente stroming.

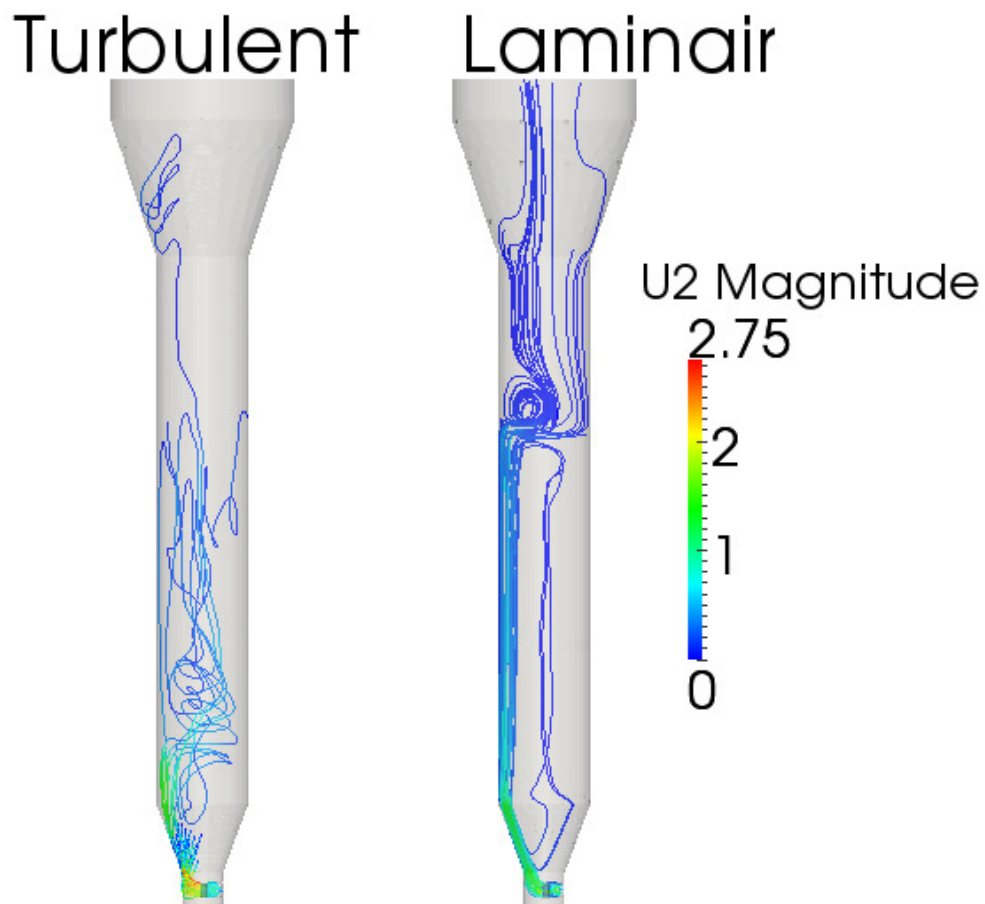
De korrelverdeling van de reactor neemt een opvallende vorm aan (Figuur 21, rechts): de korrel dichtheid neemt in de onderpot en de verwijding de maximale waarde aan, behalve daar waar het water met grote snelheid stroomt. Een maximale korrel dichtheid houdt in dat er een volledig vast bed ligt; de sterke voorkeursstroom van het water creëert daarnaast een gebied waar relatief weinig pellets te vinden zijn. In het cilindrische deel van de reactor ontstaat een gefluïdiseerd bed dat overeenkomsten heeft met de eerder besproken reactoren. Echter is ook in dit deel van de reactor duidelijk een voorkeursstroom langs de zijkant, waar de korrel dichtheid tevens lager is.



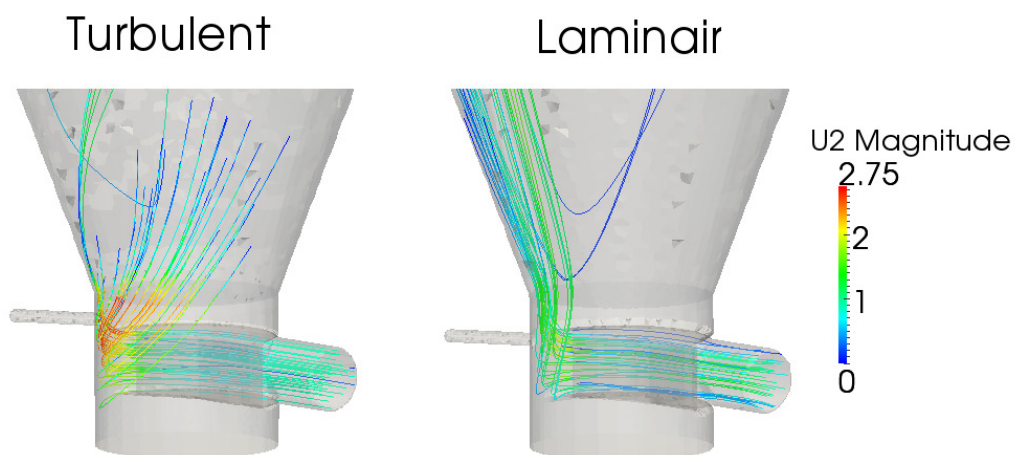
Figuur 21: Doorsnedes van de modelreactor van Cothen, met momentopnames van de volumefractie van pellets (α_1) en de snelheid van de vloeibare fractie in de verticale richting (U_{2y}) in m/s voor zowel het turbulente (links) als het laminaire model (rechts). Het turbulente model heeft 21,5 gesimuleerde secondes gedraaid; het geval van laminaire stroming is getoond na 600 s.

De stroomlijnen die op basis van het snelheidsveld van het water getekend worden (Figuur 22) bevestigen het geschetste beeld. Het instromende water (Figuur 23) vindt zijn weg langs het vastliggende korrelbed en blijft daarna grotendeels aan de zijkant van de reactor. Ook hier heeft het model met turbulente stroming niet lang genoeg kunnen draaien om er verdere conclusies uit te kunnen trekken.

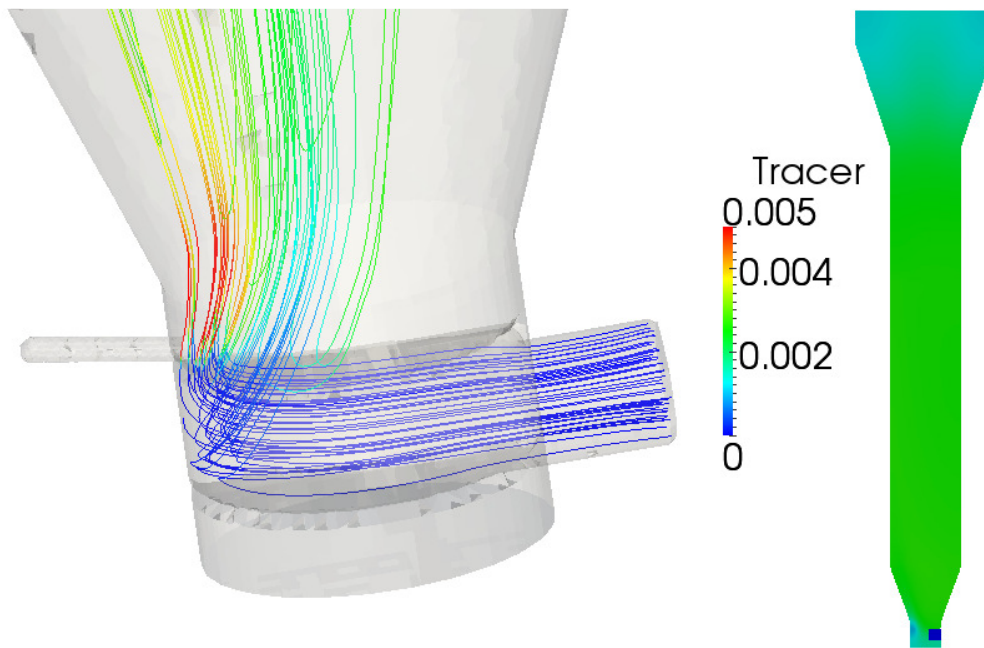
De toevoeging van kalkmelk aan het langsstromende water kan bekeken worden door een passieve tracer toe te voegen bij het kalkmelkdoseerpunt. Hieruit volgt dat de kalkmelk goed wordt meegenomen door het water (Figuur 24, links), al is het doseerpunt hier niet op een ideale positie geplaatst. Deze positie is in het model gekozen op basis van een visuele inschatting om de situatie in Tull en 't Waal te benaderen, en vanwege de afwijkende vorm van de reactor kunnen hier dus geen verstrekkende conclusies aan worden verbonden.



Figuur 22: Stroomlijnen van de vloeistoffase voor de modelreactor in Cothen, gebaseerd op een momentopname van het stromingsprofiel na 21,5 s (turbulent) en 600 s (laminair). De kleur geeft de snelheid van het water aan in m/s.



Figuur 23: Stroomlijnen van het water bij de invoer van de modelreactor voor Cothen na 21,5 s (turbulent) en 600 s (laminair).



Figuur 24: Menging van kalkmelk in het onthardingsmodel in Cothen na 600 gesimuleerde seconden, gevolgd met behulp van een passieve tracer. De kleur geeft de (arbitrair geschaalde) concentratie van de tracer aan. Links: stroomlijnen van de vloeistoffase. Rechts: dwarsdoorsnede van de reactor. Er is op dit tijdstip aan de bovenkant van de reactor nog geen volledige menging; verwacht is dat deze wel wordt bereikt.

4.4.5 Tull en 't Waal

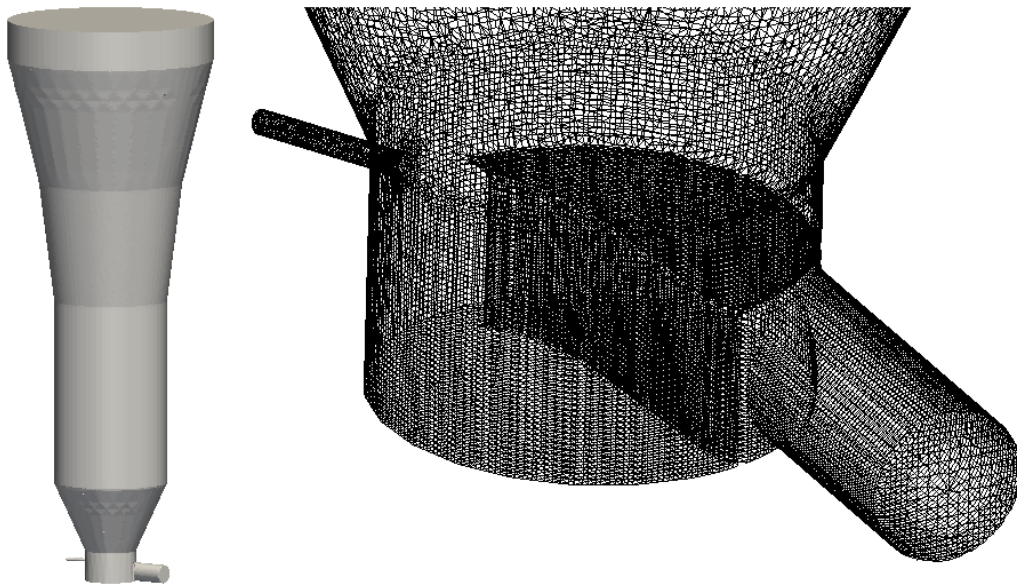
Evenals de reactoren in Cothen maken de drie onthardingsreactoren in Tull en 't Waal gebruik van een tangentiële invoer. Elke reactor is 10 m hoog en heeft op het breedste punt een diameter van 3,65 m (Siegers 2003). Bij een invoerpijp met diameter 0,32 m en een volumestroom van 250 m³/h is de instroomsnelheid 0,84 m/s. Het kalkmelkinvoerpunt heeft een diameter van 50 mm en met een toevoer van 8 m³/h is de snelheid daar 1,13 m/s.

Doordat de resultaten voor Cothen aangaven dat er geen significante stroming is op de bodem van de reactor is de keuze gemaakt om het gedeelte van de onderpot dat onder de invoer ligt niet mee te nemen in het mesh (Figuur 25). Het mesh bedraagt ca. 503.000 cellen.

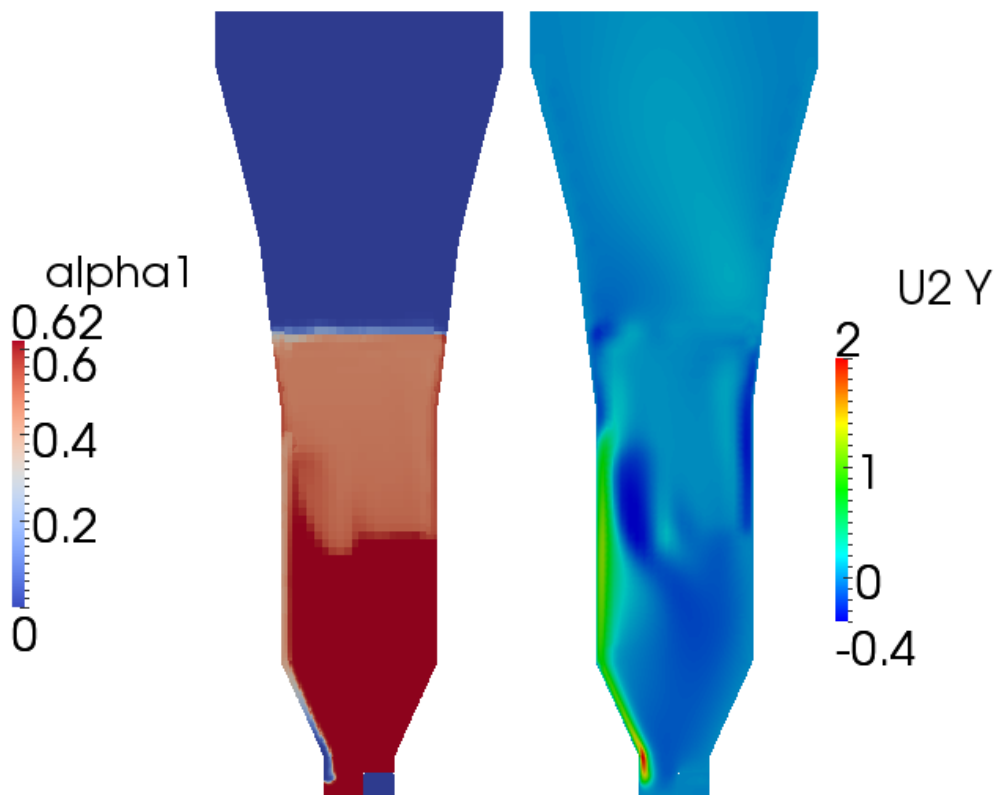
De hoogte van het vaste korrelbed is (2,5-3,0) m; voor het fluïde bed wordt een hoogte van ong. 6,0 m geschat (Siegers 2003). Als startconditie voor het model wordt in het cilindrisch gedeelte een pelletvolumefractie van 0,4 ingesteld over een hoogte van 6,2 m.

Het is niet gelukt om het model met turbulente stroming werkend te krijgen; na enkele gesimuleerde seconden kon het model niet convergeren. De simulatie met laminaire stroming heeft tot dusver niet de stabiele toestand bereikt.

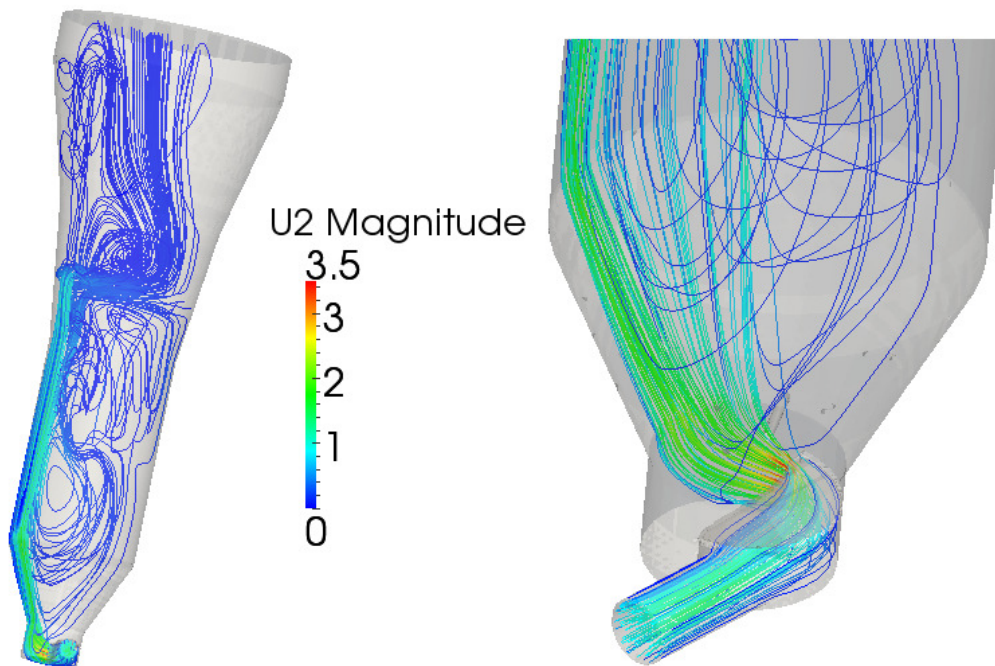
Het resultaat op dit tijdstip wordt getoond in Figuur 26. Het korrelbed en het stromingsprofiel nemen vergelijkbare vormen aan als het model voor Cothen: er is een sterke voorkeursstroom aan de onderzijde met daarbuiten een vast korrelbed, en daarboven stroomt het merendeel van het water langs de zijkant. Dit vaste korrelbed bereikt hier wel een grotere hoogte; helaas heeft het model niet lang genoeg kunnen draaien om te kunnen zien wat de uiteindelijke hoogte hiervan is. De stroomlijnen (Figuur 27) bevestigen de voorkeursstroom, maar in tegenstelling tot het model voor Cothen (maar op een minder ver ontwikkeld stadium) volgt een significant deel van het water een ander pad.



Figuur 25: Links: 3D-weergave van het onthardingsreactormodel voor Tull en 't Waal. Rechts: mesh voor de bodemconstructie, waarbij het domein onder de invoer verwijderd is (zie tekst).



Figuur 26: Doorsnedes van de modelreactor van Tull en 't Waal met laminaire stroming, met momentopnames na 174 s van de volumefractie van pellets (α_1) en de snelheid van de vloeibare fractie in de verticale richting ($U_{2,y}$) in m/s.



Figuur 27 Stroomlijnen van het water voor de modelreactor voor Tull en 't Waal. De kleur geeft de snelheid aan.

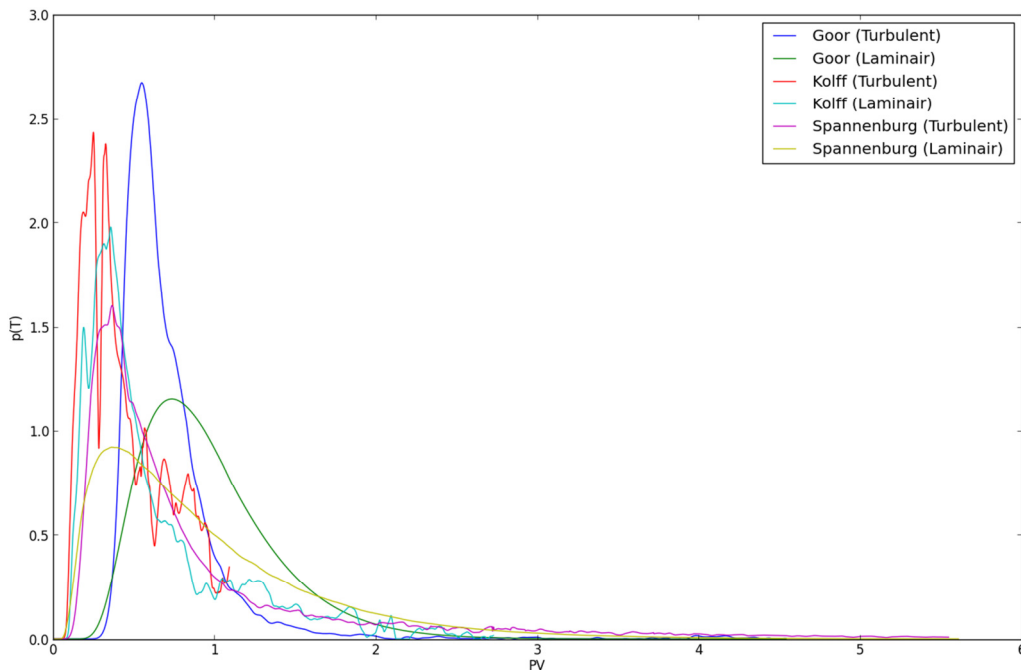
4.4.6 Verblijftijdsspreiding en validatie

Met behulp van een passieve tracer is voor drie modelreactoren de verblijftijdsspreiding bepaald voor zowel turbulente als laminaire stroming. Hiervoor is een momentopname van de reactor in stabiele toestand genomen en de tracer geïnjecteerd in de onderste laag cellen van het mesh. Deze laag is typisch slechts enkele centimeters hoog. Hierna wordt het model weer gestart en wordt de concentratie van de tracer aan de top van de reactor gevolgd. Aan de hand van deze concentratie kan bijgehouden worden hoe lang het water erover doet om de gehele reactor door te komen. Het is helaas niet gelukt om deze simulaties uit te voeren voor de reactoren met tangentiële invoer: vanwege de uitzonderlijk lange rekentijd die nodig is voor deze modellen was het niet mogelijk om de simulaties lang genoeg te draaien om een bruikbare verblijftijdscurve te verkrijgen.

De resultaten worden weergegeven in Figuur 28. Voor een propstroom zou gelden dat er een zeer smalle piek bij de waarde $x=1$ zou zijn. De berekende pieken zijn echter uitgesmeerd over een langere tijd. Voor laminaire stroming geldt een langere staart dan voor turbulente stroming. Voor sommige modellen blijkt dat de gemiddelde verblijftijd lager is dan de hydraulische verblijftijd; dit betekent dat er dode zones in de reactor bestaan: gebieden waar het water niet of nauwelijks stroomt (zie bijvoorbeeld de top van de reactor in Spannenburg bij laminaire stroming in Figuur 19). De reden voor het afwijkende gedrag bij het model voor Kolff met turbulente stroming is onbekend.

In Figuur 29 wordt de cumulatieve verdeling van de verblijftijd weergegeven. De waarden voor de karakteristieke tijden t_{10} en t_{90} staan in Tabel 3. Op basis van deze resultaten lijkt de cilindrische reactor in Goor het meest gunstige profiel te genereren. Hierbij moet wel de kanttekening gemaakt worden dat de verblijftijd over de gehele reactor berekend is; dit kan niet direct vertaald worden naar een verwijderingsrendement. Met name het bestaan van dode zones boven het pelletbed (wat op basis van een visuele inspectie van de resultaten vooral bij de reactor in Spannenburg een significante factor kan zijn) kan van invloed zijn op het verwijderingsrendement.

Om het model te valideren is gebruikgemaakt van een zoutproef die uitgevoerd is op een onthardingsreactor in Goor (zie paragraaf 4.3). Er zijn kleine verschillen tussen de modelreactor en de echte reactor ten tijde van het experiment: bij de zoutproef was de vaste bedhoogte bepaald op 2,50 m (2,18 m in het model) en was de gemiddelde opwaartse snelheid van het water 80 m/h (90 m/h in het model).



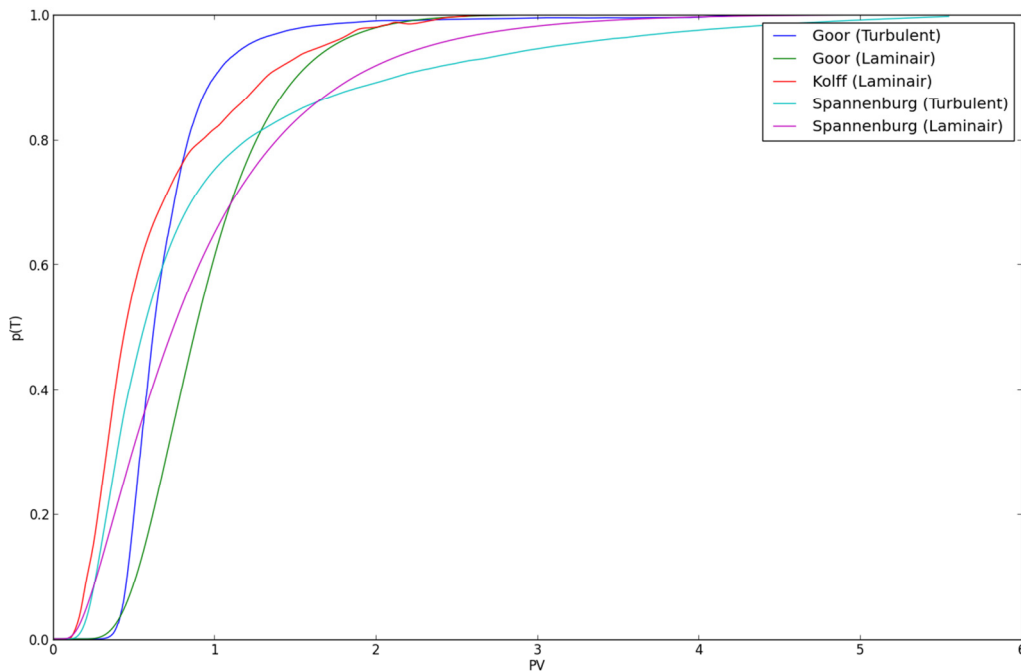
Figuur 28: Berekende verblijftijdsspreidingen als gevolg van een instantane input aan de bodem van de reactor. Op de x-as staat de tijd genormeerd op de hydraulische verblijftijd. De waarden op de y-as zijn genormeerd zodat de oppervlakte onder elke curve 1 is. Indien de volledige tracer de reactor heeft gepasseerd (wat bij benadering waar is voor alle modellen behalve Kolff met turbulente stroming) kan dit geïnterpreteerd worden als een kansverdeling.

Om de resultaten van het model te vergelijken met die van de zoutproef zijn de verblijftijden van de modellen van Goor zoals getoond in Figuur 28 geïntegreerd¹ over een duur van $T = 16,5$ min, een schatting van de pulsduur gehaald uit Figuur 8. De keuze voor deze methode boven een volledige simulatie van de input was gemaakt vanuit praktische overwegingen betreffende de benodigde rekentijd en schijfruimte.

¹ De verblijftijd voor een langdurige zoutpuls wordt als volgt berekend:

$$y(t) = \frac{1}{C} \int_0^T x(t-w)dw$$

Hierbij is $x(t)$ de oorspronkelijke verblijftijdsverdeling als gevolg van een instantane input aan de onderzijde van de reactor (de 'impulsrespons') en is $y(t)$ de berekende verblijftijdscurve bij een constante instroom gedurende een periode T . Vergelijking 7 is gelijk aan de convolutieintegraal van de impulsrespons met een blokfunctie van breedte T en hoogte $1/C$. Deze integraal is correct als het stromingsveld stabiel is. Als dat niet zo is, dan is de impulsrespons zoals getoond in Figuur 28 niet tijdsafhankelijk. De simulaties van Goor tonen een stabiele korrelbedverdeling en een snelheidsveld dat licht veranderlijk is, maar op langere termijn (tientallen seconden) stabiel is. Op basis hiervan kan worden verwacht dat vergelijking 7 een betrouwbare methode is om de impulsrespons te vertalen naar een blokrespons (of, met een aangepaste formule, de respons op elke willekeurige andere input). Vanwege de numerieke aard van het model is deze integraal discreet benaderd met een stapgrootte van 0,5 s.



Figuur 29: Cumulatieve verdeling van de verblijftijdsspreiding als gevolg van een instantane input aan de bodem van de reactor. Op de x-as staat de tijd genormeerd op de hydraulische verblijftijd. Het model voor Kolff met turbulente stroming ontbreekt hier de resultaten niet volledig/betrouwbaar bevonden worden.

Tabel 3: Karakteristieke waarden t_{10} (tijd waarop 10% van de tracer de reactor gepasseerd heeft) en t_{90} (idem voor 90%), en de fractie t_{10}/t_{90} .

Locatie (stroming)	t_{10}	t_{90}	t_{10}/t_{90}
Goor (Turbulent)	0,46	1,00	0,46
Goor (Laminair)	0,52	1,51	0,34
Kolff (Laminair)	0,21	1,32	0,16
Spannenburg (Turbulent)	0,27	2,11	0,13
Spannenburg (Laminair)	0,27	1,86	0,15

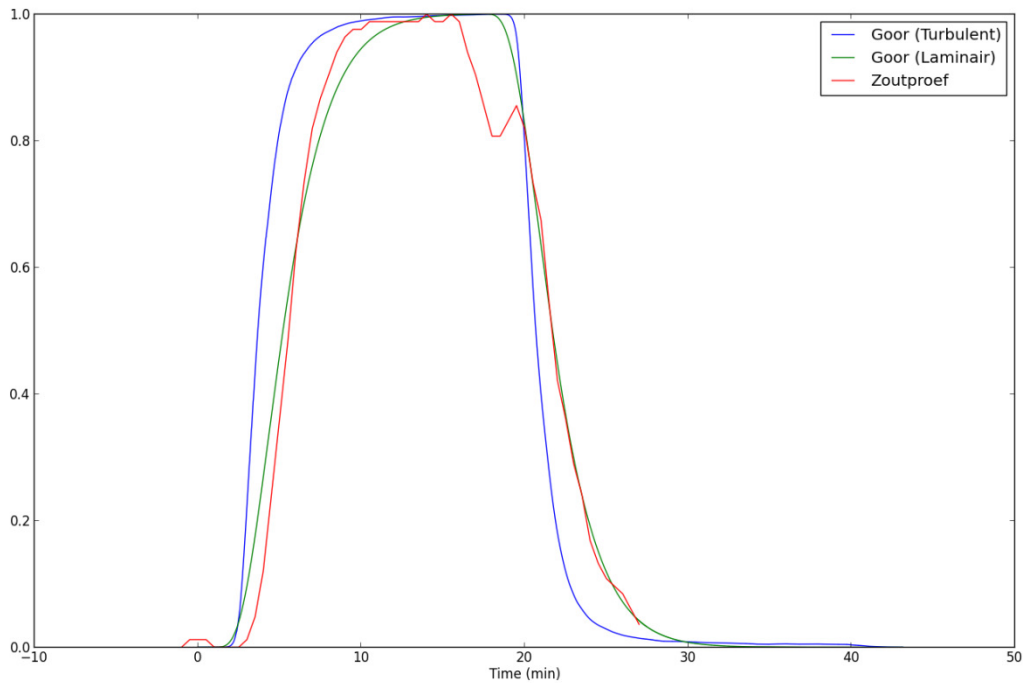
In Figuur 30 is te zien dat het model een goede voorspelling maakt van het EGV-verloop na de zoutpuls (in acht nemende dat de gemeten dip na 18 minuten het gevolg is van een pelletaftap). Met dit resultaat kan verondersteld worden dat het CFD-model een goede beschrijving biedt van de waterstroming, en dat de eventuele aanwezigheid van sterke turbulentie in dit geval geen sterk effect heeft op de verblijftijdsspreiding.

4.5 Evaluatie optimale reactor

Op basis van het validatieëxperiment kan gepostuleerd worden dat systemen van de aard en schaal van de onthardingsreactor in Goor goed gekarakteriseerd kunnen worden door het CFD-model. Dit is een goede indicatie voor de modellen voor Kolff en Spannenburg, al is een experimentele validatie uiteraard nog steeds wenselijk.

Op basis van de verblijftijdscurve kan geconstateerd worden dat de cilindrische reactor met conisch onderstuk, zoals toegepast in Spannenburg, een ongunstige verblijftijdscurve heeft: de lage gemiddelde verblijftijd indiceert de aanwezigheid van stilstaand water in de reactor (wat ook een lange staart van de curve als gevolg heeft). Dit blijkt op basis van de stromingsprofielen (Figuur 19) het geval te zijn aan de bovenkant van de reactor, mogelijk

vanwege de verwijding. Dit houdt dus niet in dat de contacttijd met het pelletbed net zo breed verdeeld is als de totale verbijftijd.



Figuur 30: Verblijftijdsspreidingen voor het model met turbulente (blauw) en laminaire stroming (groen) als gevolg van een puls van 16,5 min, startend op $t=0$, geplot met de EGV-meting aan de effluent (rood). De y-assen van de plots zijn ter vergelijking geschaald tussen 0 en 1. De EGV-plot is ten opzichte van de meting één minuut naar links geschoven, een inschatting van de aanvang van de zoutpuls op basis van de meting aan het influent.

Uit de stromingsprofielen kan geconstateerd worden dat, van de onderzochte lokaties, de reactor in Goor de beste verdeling heeft van het opstromende water binnen het korrelbed, en dus een gunstige situatie creëert voor ontharding. De menging lijkt bij Spannenburg het best te zijn, al is met een passieve tracer geconstateerd dat er bij Goor ook al snel een goede menging ontstaat (Figuur 13), althans voor een goed in water oplosbaar doseermiddel als natronloog.

Voor de reactoren met tangentiële invoer (Cothen en Tull en 't Waal) kunnen vanwege de afwezigheid van geslaagde simulaties met turbulente stroming geen verstrekkende conclusies worden getrokken. Wel is er duidelijk een sterke heterogeniteit van de korrelverdeling aan de onderkant van de reactor. In de zone waardoor de sterke voorkeursstroom beweegt worden bijna geen pellets aangetroffen. De reactor lijkt wel geschikt om de menging van kalkmelk te faciliteren (Figuur 24), wat doorgaans het doel is van dit ontwerp. In hoeverre dit doel beter behaald wordt dan bij de andere ontwerpen valt niet te zeggen op basis van deze simulaties.

Samenvattend geven de simulaties aan dat (met de gekozen parameters voor bijvoorbeeld instroomsnelheid en de reactordimensies) het cilindrische ontwerp de best verdeelde stroming oplevert door het pelletbed. Als menging van het doseermiddel een probleem is, kan het cilindrische ontwerp met conisch onderstuk een uitkomst bieden. De diffusor is op basis van het model een minder efficiënte onthardingsreactor dan het cilindrische ontwerp, vanwege een sterke voorkeursstroom door het midden van het korrelbed. Bij het tangentiële ontwerp maakt het korrelbed (op basis van de beperkte resultaten) relatief weinig contact met het langsstromende water, en zou het vaste korrelbed dat op de bodem ontstaat

operationele moeilijkheden kunnen creëren. Daarnaast ontstaat er op basis van het model met laminaire stroming geen opwaartse helixstroom in de reactor, maar stroomt het water recht omhoog. Dit reactorontwerp heeft dus alleen een mogelijk voordeel als voor kalkmelk gekozen wordt en de overige ontwerpen niet in staat zijn om een efficiënte menging hiervan te realiseren.

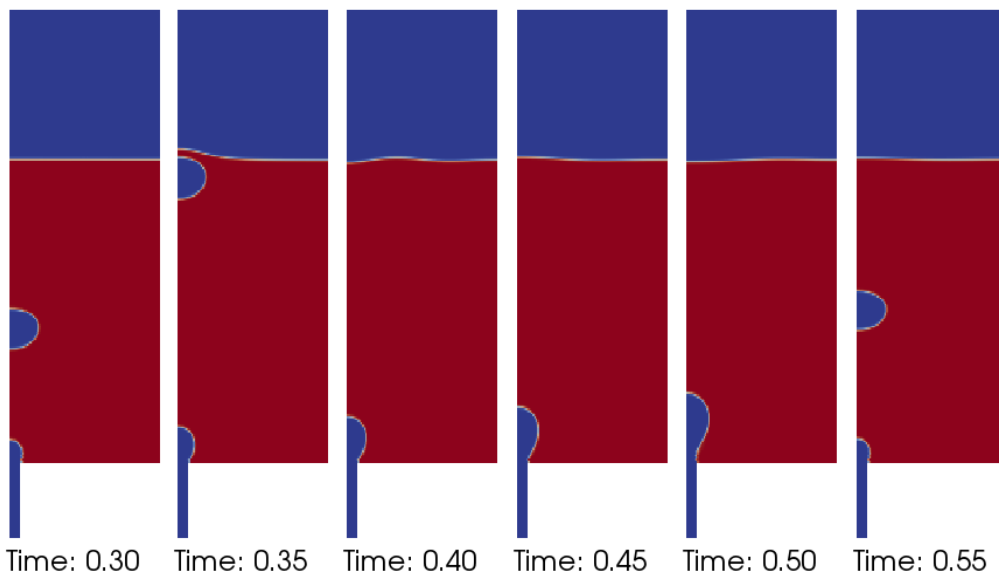
5 Modellerings beluchting

5.1 Proof-of-principle

De solver *interFoam* binnen het OpenFOAM-pakket is ontworpen om twee niet-comprimeerbare vloeibare fases te modelleren waartussen een strak interface heerst. Deze solver berekent één snelheidsveld voor het gehele systeem en berekent op basis van de druk en de oppervlaktespanning het gedrag op het interface. Er wordt hierbij gebruik gemaakt van de volume-of-fluid-methode (VOF): voor elke cel in het mesh wordt een variabele α_1 berekend die de fractie van fase 1 bepaalt (voor de tweede fase geldt $\alpha_2 = 1 - \alpha_1$). Bij $\alpha_1 = 1$ is een cel gevuld met de eerste fase, bij $\alpha_1 = 0$ de tweede fase, en voor elke tussenliggende waarde ligt de cel op het interface tussen de twee fases. Op dit interface wordt op basis van de waardes in de omliggende cellen bepaald in welke richting de normaal van het interface staat. In onze toepassing is fase 1 water en fase 2 lucht.

Met behulp van *interFoam* zijn testsimulaties uitgevoerd om te evalueren in hoeverre het ontstaan van bellen in een plaatbeluchter hiermee gemodelleerd kan worden. OpenFOAM biedt de mogelijkheid om een cilindersymmetrie te implementeren om vanuit een 2D-structuur een driedimensionaal systeem te beschrijven (de *wedge*-randvoorwaarde). Hiervan is gebruikgemaakt om één enkel gaatje te simuleren van 1 mm in doorsnede, met daarboven 20 mm water waarin de luchtbel kan stijgen. Daarboven is een atmosfeer van lucht, zodat ook het opbreken van een bel aan het oppervlak gesimuleerd kan worden. De luchttoevoer geschiedt met 5 cm/s.

Het resultaat wordt weergegeven in Figuur 31. Het model is in staat om opeenvolgende bellen op plausible wijze te creëren, waarna ze stijgen en het oppervlak bereiken. De bellen hebben een ellipsoïde vorm die praktisch onveranderlijk is na de vorming, wat overeenkomt met de verwachting voor een diameter van enkele millimeters en de eigenschappen van lucht en water (Samkhaniani et al. 2012). Op basis van deze resultaten is besloten om *interFoam* te gebruiken om de relevante parameters voor belontwikkeling en gasuitwisseling te evalueren.



Figuur 31: Volumefracties voor water (rood) en lucht (blauw) tijdens het ontstaan en stijgen van een bel. Het model gaat uit van cilindersymmetrie, en de resultaten kunnen 360° gedraaid worden rond de verticale as om het volledige domein te verkrijgen.

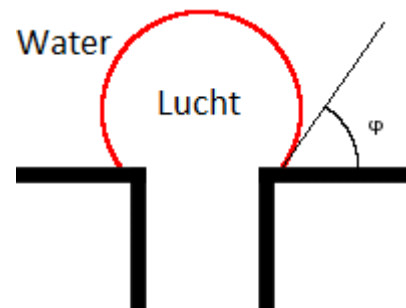
5.2 Modelontwikkeling

Het doel van beluchting is om gasuitwisseling tussen het water en lucht te bewerkstelligen. Hiervoor is van belang om zoveel mogelijk oppervlak te creëren tussen het water en luchtbellen. De parameters die bij een plaatbeluchter belangrijk zijn voor dit totaal oppervlak zijn:

- De afmetingen van de plaat
- De stroomsnelheid van het water
- De dichtheid van de gaatjes in de plaat per oppervlakte-element
- De grootte van de bellen
- De frequentie waarmee bellen worden gevormd
- De stijgsnelheid van de bellen
- De effecten van samenvoeging en splitsing van bellen in het bellenbed

Met behulp van een CFD-model met één enkel gaatje kunnen de grootte, frequentie en stijgsnelheid van bellen berekend worden op basis van enkele parameters:

- De diameter van het gaatje
- De vorm van het gaatje
- De toevoer van lucht door het gaatje (in de vorm van een snelheid of opgelegde druk)
- De contacthoek van het lucht-water-interface op de plaat (Figuur 32)

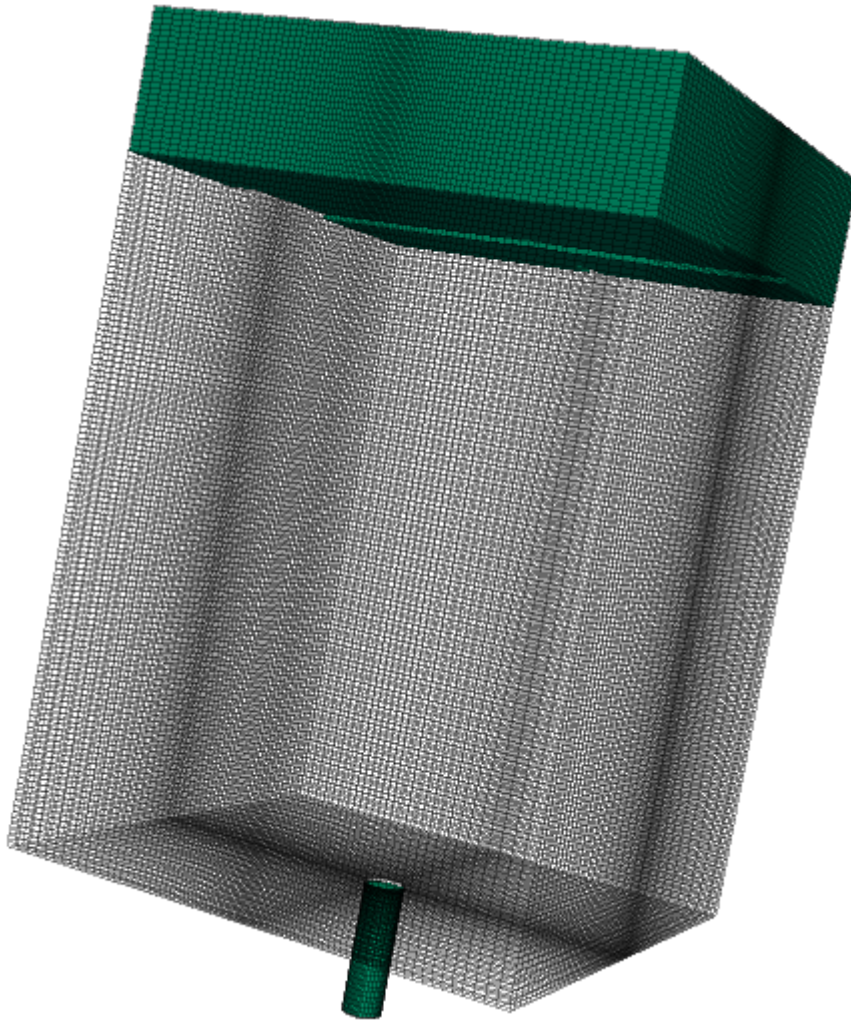


Figuur 32: Schematische weergave van de contacthoek

Deze parameters zijn alle geëvalueerd op hun kwalitatieve en kwantitatieve effecten op de belvorming, en daarmee het lucht-wateroppervlak en de effectiviteit van de gasoverdracht.

Naast de 2D-modellen zijn er ook enkele 3D-simulaties gestart (Figuur 33). Voor deze meshes is net als bij de onthardingsmodellen gebruikgemaakt van het programma *snappyHexMesh* in combinatie met SALOME (zie paragraaf 4.2.1). Voor de 2D-modellen is de applicatie *blockMesh* gebruikt.

De rekestijden zullen niet individueel opgegeven worden; deze variëren tussen de 18 uur tot enkele dagen per gesimuleerde seconde voor een 2D-model op één enkele core (met de specificaties zoals genoemd in paragraaf 4.2.2). De 3D-modellen zijn veel zwaardere berekeningen, waar meerdere cores voor ingezet moeten worden. Met één core kan ongeveer 0,004 s per uur gesimuleerd worden voor de geometrie in Figuur 33; met meerdere (6+) cores duurt het dus enkele dagen om een seconde te simuleren.



Figuur 33: Voorbeeld van een driedimensionaal mesh voor een enkel gaatje. Het mesh is fijner op de as van het domein om de bellen zo nauwkeurig mogelijk te kunnen simuleren. Het totale mesh is 35 mm hoog en 20 mm breed; het gaatje heeft een diameter van 1,5 mm. Dit mesh bestaat uit 1.195.000 cellen.

5.2.1 Randvoorwaardes

De belangrijkste randvoorwaardes die gebruikt zijn voor de simulaties, evenals de startwaardes binnen het gehele domein op $t = 0$, worden weergegeven in Tabel 4. Net als voor het onthardingsmodel geldt dat deze informatie is toegevoegd ten behoeve van de reproduceerbaarheid van de resultaten, maar niet nodig is voor het inhoudelijke begrip hiervan. Voor het gebruik en de wiskundige interpretatie wordt verwezen naar de interne documentatie van OpenFOAM. Bij laminaire stroming worden de parameters k en ϵ niet gebruikt.

Enkele randvoorwaardes zijn afgekort in Tabel 4:

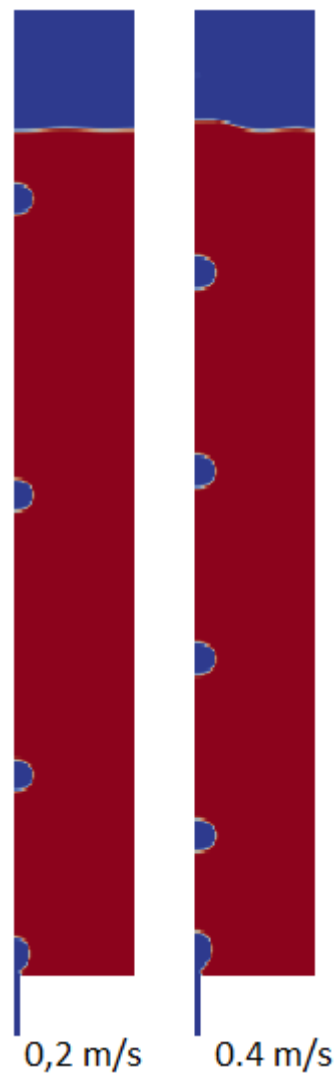
- ZG – De gradiënt van de parameter wordt op nul gezet op de betreffende rand (*zeroGradient* in OpenFOAM).
- $\alpha_{1, \text{start}}$ – De situatie van het domein bij aanvang van de simulatie (waterbed met luchtlaag erboven en een smal, met lucht gevuld gat eronder) wordt ingevoerd met behulp van de OpenFoam-applicatie *setFields*.
- CA – Het opleggen van een contacthoek op de bodem van de waterbak wordt uitgevoerd via de parameter α_1 (*dynamicAlphaContactAngle* in OpenFOAM)

Tabel 4: Randvoorwaardes voor beluchtingsmodel in gesloten bak

	α_1	$\{k, \epsilon\}$	p	U
Inlet	0	$\{k, \epsilon\}_{\text{init}}$	ZG	U_{in}
Wanden	ZG	ZG	ZG	(0 0 0)
Bodem	CA	ZG	ZG	(0 0 0)
Outlet	ZG	ZG	0	ZG
Startconditie	$\alpha_{1, \text{start}}$	$\{k, \epsilon\}_{\text{init}}$	0	(0 0 0)

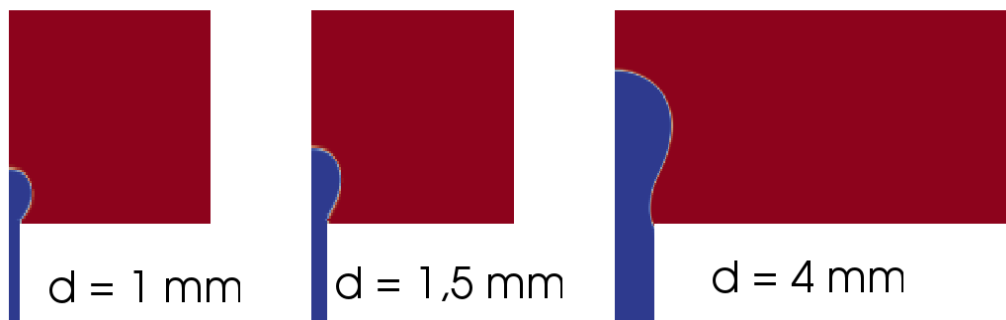
5.3 Modelling van één gaatje

Het kwalitatieve gedrag van het model onder invloed van de onderzochte parameters is uitgebreid bekeken en vergeleken met verwachtingen vanuit een theoretisch perspectief. Wanneer de instroomsnelheid van het water wordt aangepast is de belgrootte nagenoeg gelijk, mits de snelheid laag blijft (Figuur 34). Grotere snelheden konden pas aan het eind van het projectverloop worden bekeken, en de resultaten hiervan worden besproken in paragraaf 5.7.

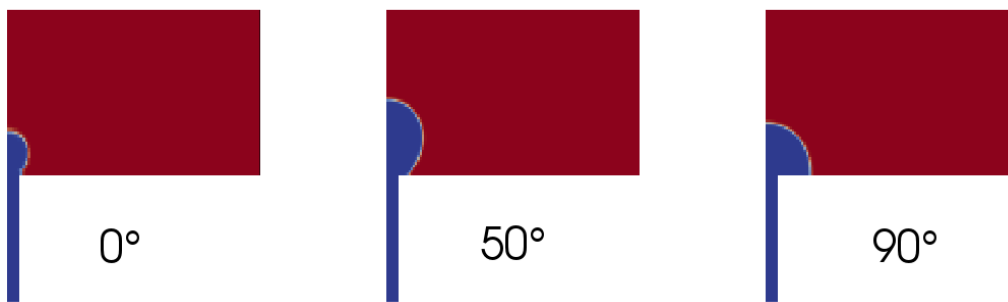


Figuur 34: Momentopnames van een 2D-beluchtingsmodel met instroomsnelheden van 0,2 m/s (links) en 0,4 m/s (rechts). De contacthoek φ kan vrij variëren tussen 0° en 20° .

De invloeden van de gaatjesdiameter en de contacthoek van het lucht-waterinterface met het oppervlak zijn getoond in Figuur 35 en Figuur 36. Beide parameters zijn relevant voor de vorming van bellen: bij zowel een grotere gaatjesdiameter als een grotere contacthoek reikt het contactpunt van het lucht-waterinterface verder naar buiten, wat resulteert in een grotere bel.

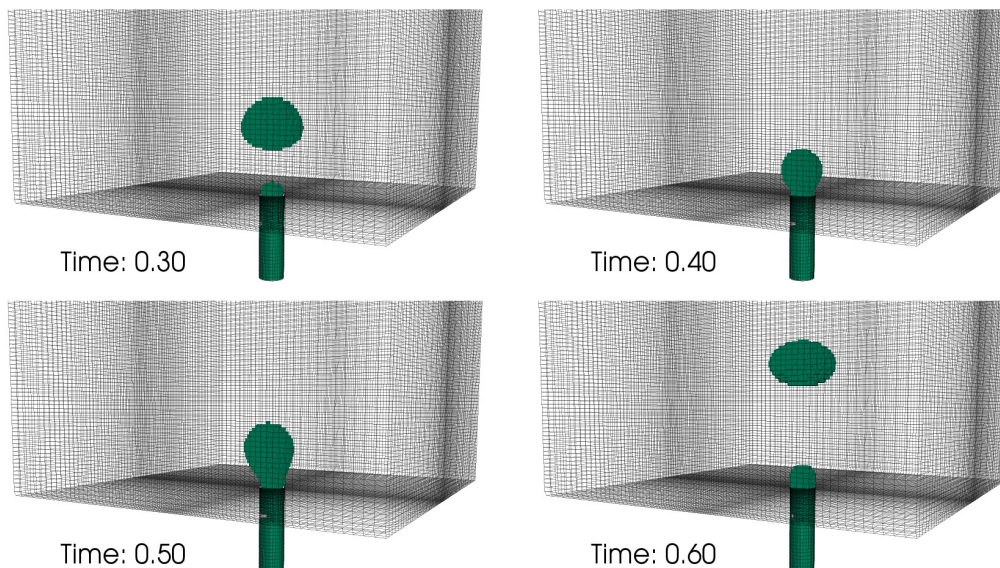


Figuur 35: Momentopnames van een 2D-beluchtingsmodel met drie verschillende diameters voor het gaatje. De contacthoek φ kan vrij variëren tussen 0° en 20° .



Figuur 36: De groei van bellen op drie oppervlakken met verschillende contacthoeken φ .

Een aantal 2D-modellen zijn herhaald in 3D (Figuur 37). Deze zijn uitgevoerd om de kwalitatieve resultaten te verifiëren en de kwantitatieve resultaten te nuanceren. Vanwege beperkingen aan de beschikbare ontwikkel- en rekentijd zijn niet alle parameters in 3D bekeken. Wel is het gedrag van groeiende bellen onder invloed van de contacthoek zoals hierboven benoemd op kwalitatieve basis bevestigd met 3D-simulaties (zie ook kwantitatieve beschrijving in paragraaf 5.6).

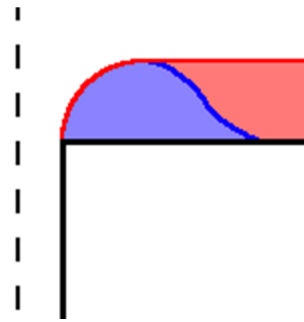


Figuur 37: Momentopnames van de vorming van een bel in een 3D-domein. Getoond zijn resultaten voor een model met een gaatjesdiameter van 1,5 mm en een contacthoek φ die vrij kan variëren tussen 0° en 20° .

5.4 Effect van vervuiling

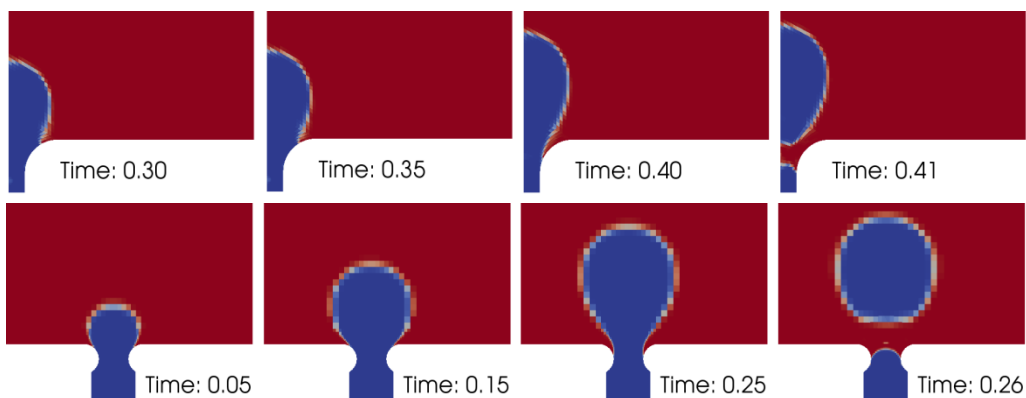
Bij het gebruik van een plaatbeluchter ontstaat geleidelijk een vervuilingsslaag op de plaat van voornamelijk ijzeroxides. Deze heeft als gevolg dat de vorm van de luchtgaatjes verandert; het komt ook voor dat gaatjes helemaal door de vervuiling dichtslibben. Daarnaast heeft de vervuilingsslaag als contactoppervlak andere eigenschappen dan de plaat, wat leidt tot een andere contacthoek φ : staal heeft bijvoorbeeld een contacthoek van rond de 85° (Lu et al. 1998) terwijl de contacthoek van ijzeroxides kan variëren tussen 0° en 74° , afhankelijk van de samenstelling (Iveson et al. 2004). Hier is in eerste instantie uitgegaan van een contacthoek van 0° . Het is niet gelukt om een model te ontwikkelen met vervuiling en grotere contacthoeken, omdat deze niet convergerden.

Om de gevolgen van een vervorming van het plaatoppervlak in de buurt van een gaatje te analyseren zijn simulaties uitgevoerd met verschillende vervormingen van de plaat direct naast een gaatje (Figuur 38). Eerst werd getracht om een smalle laag rondom het gaatje te simuleren (blauwe arcering). Het modelleren van dit domein bleek echter problematisch, en er zijn geen geslaagde simulaties uitgevoerd. Tussentijdse resultaten gaven aan dat er wiskundige problemen optreden in het domein 'onder' de vervuiling (rood gearceerd). Op basis hiervan is de keuze gemaakt om dit deel geheel buiten het domein te laten, en de vervuiling te karakteriseren met een cirkelboog van 90° . De veronderstelling is dat deze verandering geen significant effect heeft op de eigenschappen van de gevormde bellen, omdat de bellen het verwijderde domein niet zouden bereiken en het bestaan van dit domein geen sterke gevolgen zou moeten hebben voor de stromingspatronen van het water. Na deze verandering doorgevoerd te hebben zijn er geslaagde simulaties gedraaid.



Figuur 38: Schematische voorstelling van vervuiling op het oppervlak van een plaatbeluchter. De gestreepte lijn geeft de rotatie-symmetrieas aan. Zie tekst voor uitleg arcering.

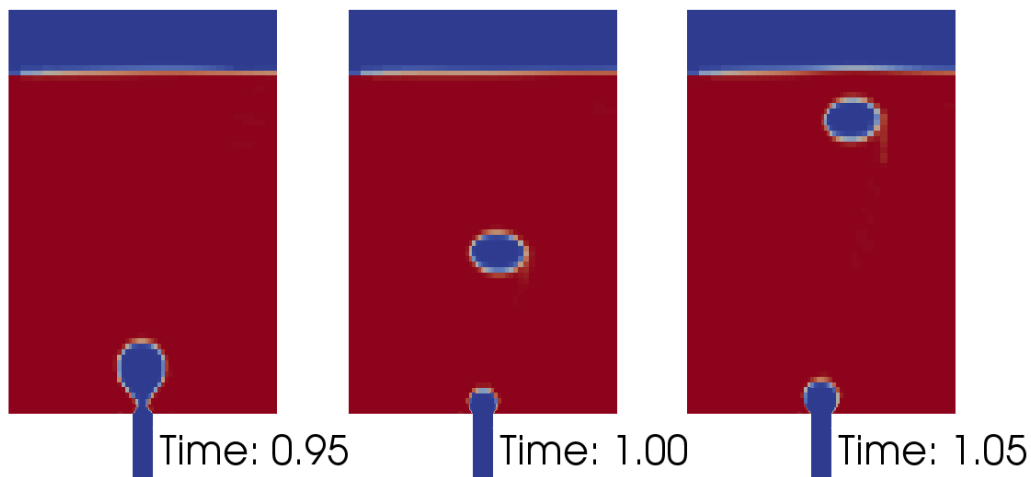
De simulaties wijzen uit dat de vorming van de bel beïnvloed kan worden doordat het lucht-waterinterface over het vervormde oppervlak beweegt (Figuur 39). Op het moment van loslaten is de bel gehecht op het smalste punt van het gaatje.



Figuur 39: Weergave voor groeiende bellen met vervormde gaatjes in 2D (boven) en als doorsnede van een 3D-simulatie (onder). De vorm van het gaatje wijkt iets af; in beide gevallen heeft het gaatje op het smalste punt een diameter van 1 mm, maar de cirkelboog heeft in het 2D-model een straal van 1,0 mm en bij het 3D-model is deze straal 0,5 mm. De contacthoek ϕ kan vrij variëren tussen 0° en 20° .

5.5 Effect van langsstroming

Het water in een plaatbeluchter staat uiteraard niet stil maar stroomt horizontaal langs de gaatjes. In een poging om de effecten van deze langsstroming op de belvorming te onderzoeken zijn 3D-simulaties gestart waarbij de randvoorwaarden zo gekozen zijn dat er horizontale stroming aan het water wordt opgelegd. Het is niet mogelijk om deze simulaties in 2D uit te voeren met rotatiesymmetrie omdat de stroming niet conformeert aan die symmetrie. In Figuur 40 is te zien dat de langsstroming geen effect lijkt te hebben op de vorming van bellen bij een snelheid van 2,5 cm/s voor het water; wel gedragen de ontstane bellen zich anders doordat ze meegenomen worden door de stroming. Bij simulaties met hogere langsstroomsnelheden (bijvoorbeeld 10 cm/s) werd geen convergentie bereikt. De reden hiervoor is onbekend.



Figuur 40: Doorsnede van momentopnames van een 3D-model met een langsstroming van 2,5 cm/s (van links naar rechts op deze figuur). De diameter van het gat is 1,5 mm; de contacthoek ϕ kan vrij variëren tussen 0° en 20°.

5.6 Belgroottes en stijgsnelheden

Om de invloeden van de geïnventariseerde parameters op de vorm en beweging van de ontstane bellen te kwantificeren zijn voor een aantal simulaties de karakteristieke diameter en de terminale stijgsnelheid bepaald (Tabel 5).

De karakteristieke diameter is berekend aan de hand van het volume van een bel als de diameter van een bol met gelijk volume. Het belvolume wordt numeriek bepaald uit een momentopname van de simulatie als het totale volume van de cellen waaruit de bel opgemaakt is, gewogen met de parameter α_2 die de volumefractie lucht in elke cel beschrijft. Dit is uitgevoerd voor meerdere bellen (minstens tien voor 2D-simulaties en minstens vijf voor 3D-simulaties) en de resultaten zijn gemiddeld voor de waarden in Tabel 5.

Tabel 5: Belangrijkste parameters en geëxtraeerde variabelen voor de simulaties met één gaatje in een stilstaande kolom. De luchtinvoer onderin het gaatje is 0,05 m/s voor alle simulaties; deze waarde is gebruikt voor de berekening van het tijdsinterval tussen bellen.

Diameter (mm)	Contacthoek (°)	Vervuiling	Dimensies	Karakteristieke diameter (mm)	Stijgsnelheid (m/s)	Tijdsinterval, gemeten (s)	Tijdsinterval, berekend (s)
1	0	Nee	2D	2,859	0,303	0,312	0,312
1,5	0	Nee	2D	3,466	0,249	0,247	0,247
4	0	Nee	2D	5,578	0,233	0,144	0,145
1	90	Nee	2D	4,728	0,239	²	1,410
1,5	90	Nee	2D	4,793	0,200	0,653	0,652
1,5	0	Nee	3D	3,599	0,230	0,278	0,276
1,5	90	Nee	3D	4,921	0,206	0,713	0,706
1	0	Ja	2D	3,046	0,212	0,376	0,377
1 ³	0	Ja	3D	3,405	0,226	0,234	0,234

De kwalitatieve effecten van de bekeken parameters op de belgrootte wordt bevestigd door deze data: voor zowel de gaatjesdiameter als de contacthoek geldt dat een vergroting van de

² Bij deze simulatie werden er niet genoeg bellen gevormd om een nauwkeurige bepaling te verkrijgen.

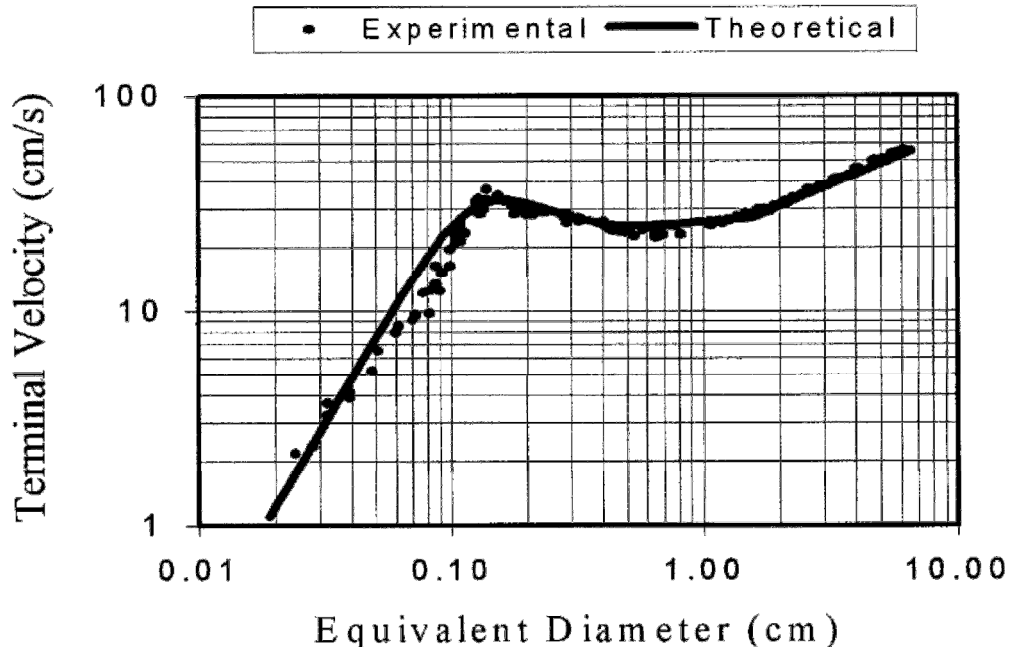
³ Dit is de diameter op het smalste punt van de opening (zie Figuur 39). Voor de berekening van het tijdsinterval tussen bellen is de diameter van 1,5 mm gebruikt die onderin het domein geldt.

parameter ook een vergroting van de belgrootte als gevolg heeft. Verder geldt voor vervuiling op en rond het contactpunt van het gaatje met de plaat dat het de belgrootte in kleine mate kan beïnvloeden, maar lijkt de verandering van de contacthoek door de vervuiling en de verkleining van de opening belangrijker. Met als gevolg dat de bellen kleiner worden door de vervuiling.

Tussen de 2D-simulaties en de 3D-simulaties zijn kleine maar significante verschillen gevonden. Een volledige 3D-simulatie lijkt dus nodig te zijn voor een nauwkeurige numerieke beschrijving van belvorming. 2D-simulaties kunnen voor veel toepassingen toch volstaan, en hebben het grote voordeel dat er veel minder rekentijd en schijfruimte nodig is dan voor 3D-modellen.

De stijgsnelheden zijn berekend door op meerdere hoogtes de momenten bij te houden waarop een bel langsbeweegt. De hoogtes zijn gekozen nadat via een visuele inspectie vastgesteld is dat de bel niet meer versnelt in het meetregime. Tijdens de simulaties werd er data geschreven na intervallen van 10 ms in gesimuleerde tijd; dit was gekozen als balans tussen de benodigheden qua schijfruimte en de nauwkeurigheid van de resultaten. Om toch goede resultaten te verkrijgen is steeds gemiddeld over minstens tien bellen voor de 2D-simulaties en minstens vijf bellen voor de 3D-simulaties. De resulterende terminale snelheden komen in grote lijnen overeen met wat verwacht wordt vanuit de literatuur (Figuur 41).

Het tijdsinterval tussen twee bellen is op twee manieren bepaald: handmatig op basis van de resultaten (met een tijd van 10 ms tussen twee datapunten) en op basis van de luchttoevoer en de belvolume. Deze resultaten komen, zoals verwacht, goed overeen.



Figuur 41: Stijgsnelheid als functie van de karakteristieke diameter voor luchtbelletjes in water: een theoretische voorspelling en experimentele waarnemingen. Uit (Bozzano & Dente 2001).

5.7 Luchtinstroomsnelheid

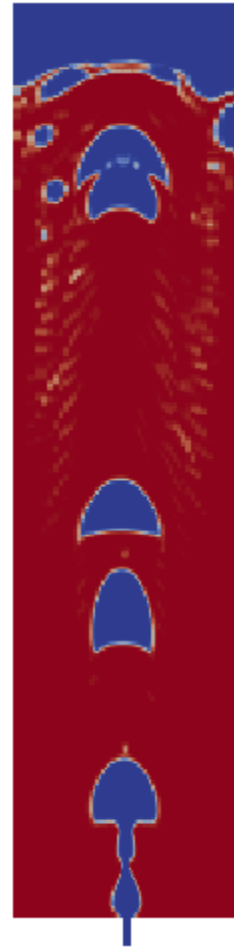
Pas aan het einde van het project was de kennis en kunde vergaard om een succesvolle simulatie uit te voeren met een hoge instroomsnelheid van de lucht door het gaatje. In Figuur 42 worden de resultaten weergegeven voor een typische instroom zoals er in de

praktijk gevonden kan worden. De resulterende bellen zijn duidelijk groter dan voorspeld wordt door de simulaties met langzame instroom; er zijn echter niet genoeg bellen gesimuleerd om een betrouwbare kwantitatieve beschouwing hiervan te kunnen rapporteren. Een globale inschatting kunnen we wel maken: dit geeft een bel diameter van 12 mm, en een tijdsinterval tussen de bellen van 0.052 s. Als we dit combineren met een stijgsnelheid van 0.3 m/s (volgens Figuur 41), geeft dit een onderlinge afstand van 16 mm (uitgaande van perfecte bollen).

5.8 Ontwerp en bedrijfsvoeringsparameters

De werking van de beluchtingsinstallatie wordt beschreven met een macromodel, dat gebruikt maakt van de gedetailleerde CFD berekeningen. De volgende aannames worden gebruikt:

- De contacttijd tussen de bellen en water in verticale richting is klein t.o.v. de contacttijd tussen water en bel in horizontale richting. In andere woorden: het beluchtingsproces vindt plaats langs het waterpakketje dat in horizontale richting beweegt.
- De concentratie in de bel verandert niet. Dit is aannemelijk als de contacttijd in verticale richting klein is t.o.v. van horizontale richting.



Figuur 42: Doorsnede na 0,87 s van een 3D-simulatie met een luchtinstroom van 10 m/s, wat overeenkomt met een volumestroom van 70 mL/s.

Met deze aannames kunnen we een model opstellen waarbij een pakketje water gedurende de zijn verblijftijd in de installatie in contact is met een bel (Figuur 43). Het oplossen van vergelijking 1 geeft dan:

$$C_T = C_s - (C_s - C_0)e^{-k_L a t_h} \quad (7)$$

Waarbij C_0 de concentratie van het opgeloste gas in het inkomende water is, t_h de hydraulische verblijftijd van het pakketje water, en het product $k_L a$ de globale massa-overdracht coëfficiënt (zie vergelijking 4).

Daarnaast moet voor de bepaling van a , eerst de fractie gas en water berekend worden. Deze volgt uit de bellendichtheid van het systeem (volume van een bel met omringende kubus van water, zie ook (Figuur 43)):

$$\alpha_g = \frac{\pi a_{bel}^3}{6b_{gat}^3 h_{bel}} \quad (8)$$

Met deze vergelijkingen kan de gasconcentratie na de beluchting berekend worden (C_T). De efficiëntie van de gasoverdracht is dan gelijk aan:

$$\eta = \frac{c_0 - c_T}{c_0 - c_s} \quad (9)$$

Dit is een maat in hoeverre de evenwichtssituatie genaderd is. Dit moet niet verward worden met de verwijdering, welke is:

$$R = \frac{c_0 - c_T}{c_0} \quad (10)$$

Het totale luchtdebiet wordt ook berekend uit de karakteristieke gegevens van de bel. Het totaal aantal gaatjes wordt vermenigvuldigd met het volume en stijgduur van de bel:

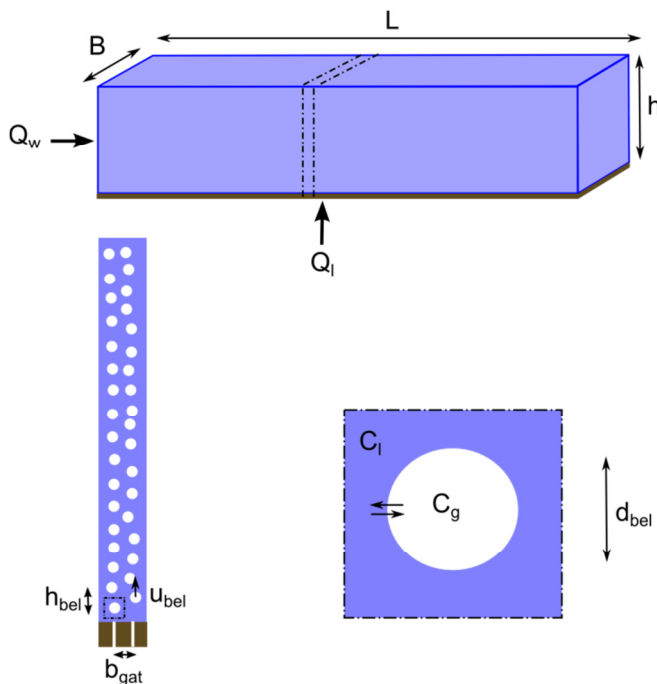
$$Q_l = \frac{LB}{b_{gat}^2} \frac{\pi}{6} d_{bel}^3 u_s \quad (11)$$

Hieruit kan de RQ , verhouding lucht-water, bepaald worden.

Voor de verblijftijd kan een gemiddelde hydraulische verblijftijd (T_H) gekozen worden, die volgt uit de gemiddelde snelheid (u) en lengte van de beluchtingsinstallatie (L):

$$T_H = \frac{L}{u} = \frac{LBh}{Q_w} \quad (12)$$

Ook kan een verblijftijdspreiding ingevoerd worden. Daarvoor worden voor verschillende fracties met verschillende verblijftijden vergelijkingen 8 opgelost, zodat voor iedere fractie een concentratie berekend wordt. De concentraties voor zuurstof, CO_2 en methaan worden uiteindelijk berekend (fysische parameters van deze gassen staan in Tabel 1). De verblijftijdspreiding kan bepaald worden met een zoutproef of met CFD.



Figuur 43: Schematische weergave van macromodel voor beluchting.

5.8.1 Voorbeeldberekening macromodel beluchting

Het vereenvoudigde model voor de beluchting is geïmplementeerd in een Excel-sheet. Hier kunnen de macroparameters (afmetingen beluchttingsplaat, afmetingen gaatjes en debieten) en microparameters van de luchtbel ingevoerd worden. Uit de CFD berekeningen volgen de belddiameter, stijgsnelheid en het tijdsinterval tussen opeenvolgende bellen. Als de waarden uit Tabel 5 voor de lage instroomsnelheden worden gekozen, zijn de water-lucht verhoudingen (RQ-waarden) te klein. Daarom wordt als voorbeeld de geschatte belkarakteristieken van de CFD berekening met hoge instroomsnelheid gebruikt. Een voorbeeld van de Excel-sheet staat in Figuur 44, met een verblijftijdspreiding als aangegeven in Figuur 45. Hier zijn de volgende gegevens gebruikt:

- een plaat van 2m bij 5.5m en 0.3 m waterdiepte,
- een gaatjesgrootte van 1,5 mm, en 12 mm onderlinge afstand tussen de gaatjes
- een waterdebiet van 180 m³/h
- een belgrootte van 12 mm, stijgsnelheid van 0.3 m/s en tijdsinterval van 0.052 s

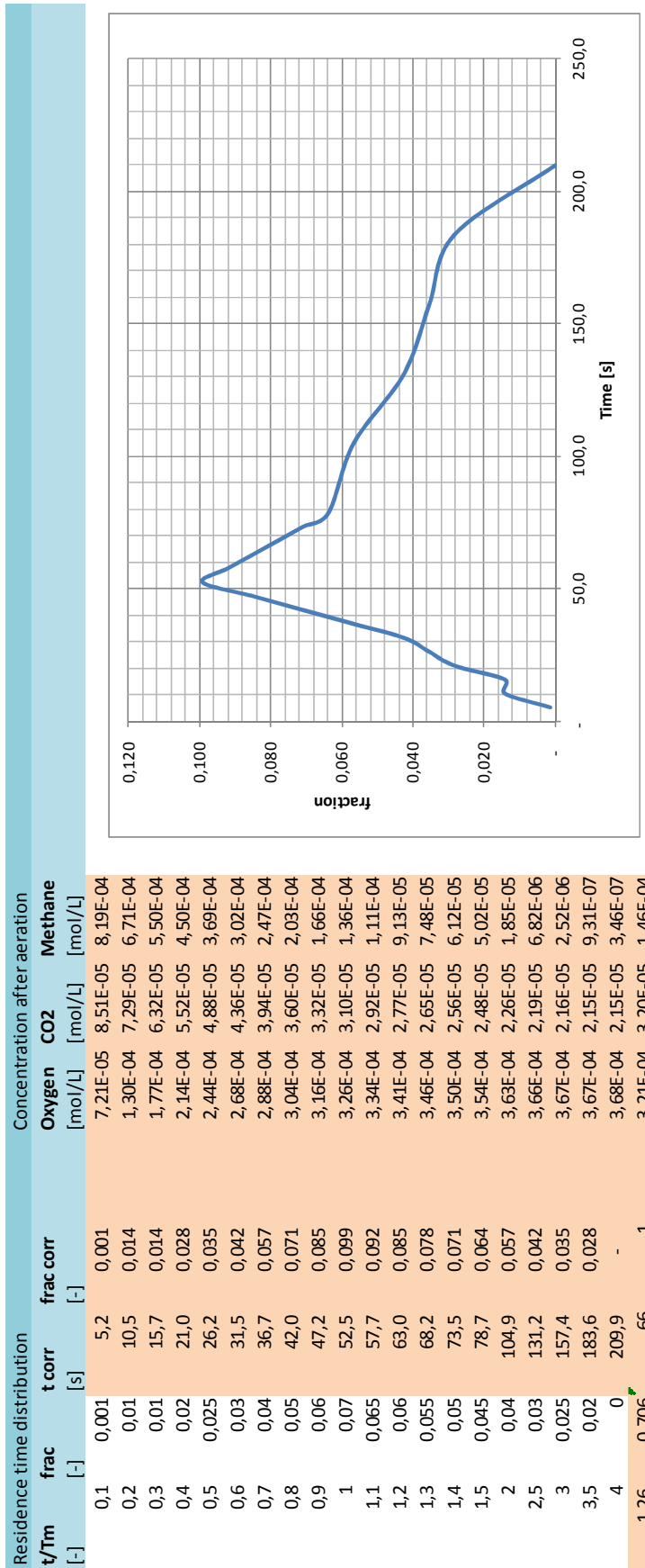
Dit resulteert in een RQ van 26.6 met een methaanverwijdering van 92% bij alleen een gemiddelde verblijftijd, en een methaanverwijdering van 85% als de verblijftijdspreiding volgens Figuur 45 wordt meegenomen. De berekende waarden zijn iets lager dan de gemeten waarden uit de praktijk. Een mogelijke verklaring is dat het macromodel uitgaat van een perfecte bol, terwijl de bellen bij de hogere instroomsnelheden kunnen vervormen (zie Figuur 42), waarbij het specifieke oppervlakte en daarmee de stofoverdracht groter wordt.

		Oxygen		CO2	Methane	
Molecular weight	MW	[g/mol]	31,9988	44,01	16,043	8
Gas fraction in air	n_gas	[-]	0,20948	3,90E-04	1,79E-06	
Diffusion	D_L	[cm ² /s]	1,32E-09	1,24E-09	1,11E-09	12,0
Henry's constant at 20 C	m	[-]	3,37E-02	9,40E-01	3,40E-02	1,5
Henry's constant at 10 C	m	[-]	3,98E-02	1,23E+00	4,30E-02	12,0
Henry's constant at T	mT	[-]	4,10E-02	1,29E+00	4,48E-02	0,30
Initial conc in water	CO	[mol/L]	0,00E+00	1,00E-04	1,00E-03	0,052
Concentration gas in air	Cg	[mol/L]	8,96E-03	1,67E-05	7,66E-08	1,00
Saturation conc in water	Cs	[mol/L]	3,68E-04	2,15E-05	3,43E-09	
Mass transfer coefficient	kL	[m/s]	2,05E-04	1,99E-04	1,88E-04	
Total mass transfer rate	kLa	[1/s]	4,14E-02	4,00E-02	3,78E-02	0,30
Concentration in water after aeration	Ct	[mol/L]	3,44E-04	2,71E-05	8,26E-05	2,00
	Ct	[mg/L]	11,00	1,19	1,32	5,50
Efficiency	nu	[%]	93,5%	92,9%	91,7%	
Efficiency RTD	nu	[%]	87,2%	86,5%	85,3%	
Removal				73%	92%	
Removal RTD				68%	85%	
Properties of bubbles						
Volume of bubble	Vbel	[m ³]	9,05E-07			
Number of holes	nhole	[-]	76.389			
Open surface of plate	S	[-]	1,23%			
Inflow velocity air	vair	[m/s]	9,85			
Time of bubble rising	tbel	[s]	1,00			
Distance between bubbles	hbel	[mm]	15,6			
Fraction gas/liquid	alfa_G	[-]	0,403			
	a	[1/m]	2,01E+02			
Velocity in x-direction	ux	[m/s]	0,08333333			
Time to travel plate	tx	[s]	66			

Parameters			
Temperature	T	[C]	
Parameters bubbles (from CFD)			
Diameter bubble	dbel	[mm]	12,0
Diameter hole	dhole	[mm]	1,5
Distance between holes	hhole	[mm]	12,0
Velocity bubble	ubel	[m/s]	0,30
Time interval bubbles	tint	[s]	0,052
Pressure in bubble	Pbel	[atm]	1,00
Parameters aerator			
Water depth	h	[m]	0,30
Total width	B	[m]	2,00
Length	L	[m]	5,50
Water flow	Qw	[m ³ /h]	180
Water flow	Qw	[m ³ /s]	5,00E-02
Air flow	Ql	[m ³ /h]	4,78E+03
	Ql	[m ³ /s]	1,33E+00
Air-water	RQ	[-]	26,6

Constants			
Gas constant	R	[J/K/mol]	8,31E+00

Figuur 44: Voorbeeld van het macromodel in Excel.



Figuur 45: Voorbeeld van het macromodel in Excel: verblijftijdspreiding.

6 Conclusies en aanbevelingen

6.1 Conclusies

Voor zowel ontharding als beluchting zijn proof-of-principle-modellen geconstrueerd die een plausible beschrijving bieden van de spelende processen. De resultaten komen overeen met de verwachting uit de theorie. De modellen zijn verder uitgewerkt om de effecten van verschillende geometrieën en parameterwaardes op de effectiviteit van de zuiveringsprocessen te onderzoeken.

Voor de onthardingsmodellen geldt dat de vier ontwerpen uiteenlopende eigenschappen hebben die de effectiviteit van zuivering beïnvloeden:

- Het cilindrische ontwerp is op basis van de verdeling van de contacttijd van het water met het pelletbed het meest efficiënt van de vier.
- De diffusor legt het op diezelfde eigenschap af tegen het cilindrische ontwerp, en biedt qua menging geen voordelen.
- Het ontwerp met tangentiële invoer levert een onwenselijke heterogeniteit in de korrelbedverdeling op en een stromingsprofiel dat een ongunstige contacttijd met het pelletbed oplevert, maar zou wel een goede menging met kalkmelk kunnen faciliteren.
- Het ontwerp met een flappenbodem en conisch onderstuk zou een gulden middenweg kunnen representeren tussen een goede contacttijd en een goede menging van het doseermiddel.

Voor beluchting is er een model ontwikkeld dat de vorming van luchtbellen uit een gaatje op plausible wijze kan simuleren voor lage instroomsnelheden. De effecten van parameters als gaatjesdiameter, contacthoek, vervorming door plaatvervuiling en langsstroming van water zijn hiermee onderzocht. Vergroting van de gaatjesdiameter leidt zoals verwacht tot grotere bellen. Een grotere contacthoek leidt eveneens tot grotere bellen. De invloed van langsstroming op de vorming van bellen lijkt klein. Vervuiling lijkt een kleinere bel diameter te geven, omdat de contacthoek omlaag gaat en de opening kleiner wordt. Verandering van de vorm van het gaatje heeft minder effect, de bel kan daardoor iets groter worden doordat die iets minder snel loslaat.

Verder is er een macromodel ontwikkeld om de conclusies die uit de CFD-modellen gehaald zijn te vertalen naar de bedrijfsvoering. Op basis van de belkarakteristieken die berekend zijn in het CFD model kunnen de verwijderingsrendementen van methaan en CO₂ en opname van zuurstof voor de hele plaat berekend worden. Hierbij kan ook een verblijftijdspreiding meegenomen worden (deze verblijftijdspreiding moet vooraf eerst bepaald worden).

De hoge instroomsnelheden die typisch zijn voor plaatbeluchters konden pas in een zeer laat stadium van het project onderzocht worden. Hierdoor kunnen er geen betrouwbare kwantitatieve voorspellingen worden gedaan voor de relevante variabelen. Er is wel gevonden dat deze snelheden leiden tot significant grotere bellen dan wordt voorspeld door de overige modellen die ontwikkeld zijn. Een eerste inschatting van de belkarakteristieken bij deze hoge instroomsnelheden geeft realistische waarden voor methaanverwijdering over de gehele plaatbeluchters. De vervorming van de luchtbellen speelt dan echter ook een rol, waar nog geen rekening mee gehouden is in het macromodel.

6.2 Aanbevelingen

Het onthardingsmodel is gevalideerd voor één reactor door middel van een experiment, waaruit een goede overeenstemming bleek tussen modelvoorspelling en realiteit. Als dit experiment bij meerdere reactortypes, en onder verschillende omstandigheden (bijvoorbeeld met andere debieten) wordt herhaald kan de betrouwbaarheid van het model nog beter geëvalueerd worden.

Op twee hoofdpunten kan het model nog verder ontwikkeld en verbeterd worden:

1. De verdeling van korreldiameter;
2. de menging van kalkmelk (of vergelijkbare substanties); en
3. de chemische reacties (kristallisatie)

Deze onderwerpen konden niet afdoende behandeld worden in het kader van dit project, en verdere modelontwikkeling is wenselijk om hier beter grip op te krijgen.

Daarnaast was er in dit project geen ruimte meer om nieuwe of aangepaste ontwerpen te testen. Wanneer een uitgebreidere validatie en verdere ontwikkeling van het model goede resultaten oplevert, kan het model toegepast worden om nieuwe ontwerpen te ontwikkelen en testen, waarmee ontwikkelings- en onderhoudskosten bespaard kunnen. Bovendien kunnen dan ook bedrijfsvoeringaspecten, zoals debieten, aftapmomenten, etc. onderzocht worden, waarmee de ontharding efficiënter bedreven kan worden.

Het beluchtingsmodel is vooralsnog toegepast voor lage instroomsnelheden. Hoewel meerdere relevante parameters zijn onderzocht op hun invloed op de belvorming is deze aanpak nog niet gecombineerd met de hoge instroomsnelheden die toegepast worden in plaatbeluchters. Een eerste voorbeeldberekening laat wel zien dat dat mogelijk is. Hierbij moet ook goed rekening worden gehouden met de belvorm en de vertaling hiervan naar het macromodel. Als de bellen groter worden, gaat de vorm afwijken van de bolvorm, die in eerste instantie is aangenomen. Hierdoor zal het contactoppervlakte tussen water en lucht veranderen. Het is aan te bevelen om de conclusies m.b.t. gaatjesgrootte, contacthoek en vervuiling ook te toetsen bij de hogere instroomsnelheden.

Bovendien is de interactie tussen bellen in het bed (bijvoorbeeld samensmelting) niet geëvalueerd. Om deze aspecten te behandelen is verdere ontwikkeling nodig van het CFD-model. Idealiter wordt dit gecombineerd met een experimentele benadering waarbij de vorm en grootte van de bellen gemeten wordt in de omstandigheden die gelden in een plaatbeluchter.

Daarnaast kan met behulp van CFD modellen de verblijftijdspreiding in de hele installatie onderzocht worden. De lucht/water stroming in een specifieke plaatbeluchter kan door de lokale geometrie bepaalde kortsluitstromen geven en daarmee limiterend werken als hoge verwijderingsrendementen benodigd zijn.

6.3 Valorisatie

De resultaten van het onderzoek kunnen voor Vitens op de volgende manieren nuttig zijn:

- Overzicht van zwakke en sterke punten van bestaande onthardingsreactoren.
- Standarisatie van onthardingsreactoren: Met de CFD modellen (zeker na verdere ontwikkeling van de modellen) kan een standaardreactor ontworpen worden.
- Ontwerpen van plaatbeluchters en inschatten van het effect van vervuiling op het rendement van de plaatbeluchter.

Mede door de inzichten van de CFD modellering van de onthardingsreactor in Tull en 't Waal heeft Vitens een kleine aanpassing aan de reactor gedaan. Uit de simulaties bleek dat de pellets onderin snel vast kwamen te zitten. Vitens heeft daarom de pelletinvoer verplaatst

van de bodem van de reactor naar boven de waterinvoer. Hiermee is de bedrijfsvoering van de reactor verbeterd.

Vitens heeft zelf ervaring met het modelleren in COMSOL. De modellen zijn echter ontwikkeld in OpenFOAM, omdat het modelleren van meefasenstroming niet mogelijk was in COMSOL. De ontwikkelde OpenFOAM modellen kunnen in principe gebruikt worden door Vitens. Het gebruik hiervan vraagt echter wel veel expertise en is tijdrovend. Daarnaast is OpenFOAM in tegenstelling tot COMSOL minder gebruiksvriendelijk.

Het macromodel voor de beluchting kan eenvoudig toegepast worden om het effect van verschillende belkarakteristieken en bedrijfscondities op het rendement van de beluchting te berekenen.

Referenties

- Di Bari, S. & Robinson, A.J., 2013. Experimental study of gas-injected bubble growth from submerged orifices. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 44, pp.124-137.
- Bartrand, T.A., 2007. *High resolution experimental studies and numerical analysis of fine bubble ozone disinfection contactors*, PhD thesis, Drexel University.
- Bozzano, G. & Dente, M., 2001. Shape and terminal velocity of single bubble motion: a novel approach. *Computers and Chemical Engineering*, 25, pp.571-576.
- Chen, Y.H. et al., 2002. Dynamic model of ozone contacting process with oxygen mass transfer in bubble columns. *Journal of Environmental Engineering*, 128(11), pp.1036-1045.
- Cockx, A., Do-Quang, Z., Audic, J.M., et al., 1999. Computational fluid dynamics applied to water and wastewater treatment facility modelling. *Environmental Engineering and Policy*, (1), pp.137-147.
- Cockx, A. et al., 2001. Global and local mass transfer coefficients in waste water treatment process by computational fluid dynamics. *Chemical Engineering and Processing*, 40(2), pp.187-194.
- Cockx, A., Do-Quang, Z., Line, A., et al., 1999. Use of computational fluid dynamics for simulating hydrodynamics and mass transfer in industrial ozonation towers. *Chemical Engineering Science*, 54(21), pp.5085-5090.
- Dijkhuizen, W., Roghair, I. & Van Sint Annaland, J.A.M. M. Kuipers, 2010. DNS of gas bubbles' behaviour using an improved 3D front-tracking model — Drag force on isolated bubbles and comparison with experiments. *Chemical Engineering Science*, 65, pp.1415-1426.
- Doroodchi, E., Galvin, K.P. & Fletcher, D.F., 2005. The influence of inclined plates on expansion behaviour of solid suspensions in a liquid fluidised bed - A computational fluid dynamics study. *Powder Technology*, 160(1), pp.20-26.
- Fayolle, Y. et al., 2007. Oxygen transfer prediction in aeration tanks using CFD. *Chemical Engineering Science*, 62(24), pp.7163-7171.
- Genin, A. et al., 2007. Impact of hydrodynamics on the precipitation efficiency - Application to HARDTAC reactor. , 56, pp.101-108.
- Gerlach, D. et al., 2007. Numerical simulation of periodic bubble formation at a submerged orifice with constant gas flow rate. *Chemical Engineering Science*, 62, pp.2109-2125.
- Gresch, M. et al., 2011. Effects of aeration patterns on the flow field in wastewater aeration tanks. *Water Research*, 45(2), pp.810-818.
- Huang, Q. et al., 2010. CFD simulation of hydrodynamics and mass transfer in an internal airlift loop reactor using a steady two-fluid model. *Chemical Engineering Science*, 65(20), pp.5527-5536.
- Iveson, S.M., Holt, S. & Biggs, S., 2004. Advancing contact angle of iron ores as a function of their hematite and goethite content: implications for pelletising and sintering. *International Journal of Mineral Processing*, 74, pp.281-287.

- Kalaga, D.V. et al., 2012. Liquid phase axial mixing in solid-liquid circulating multistage fluidized bed: CFD modeling and RTD measurements. *Chemical Engineering Journal*, 191, pp.475-490.
- Koebe, M. et al., 2002. 3D Direct numerical simulation of air bubbles in water at high Reynolds numbers. In *Proc. 2002 ASME Joint U.S.-European Fluids Eng. Conf., Montreal, Canada*.
- Kostense, A., 1988. *mededeling nummer 102: ontharden in korrelreactoren*, Kiwa.
- Ku, X.K., Li, T. & Lovas, T., 2012. Eulerian-lagrangian simulation of a bubbling fluidized bed reactor: Assessment of drag force correlations. *Thermal Science*, 16(5), pp.1442-1445.
- Leijssen, H., 2013. Personal correspondence.
- Lesage, F.J., Cotton, J.S. & Robinson, A.J., 2009. An equation of motion for bubble growth. In *ECI International Conference on Boiling Heat Transfer*.
- Lu, W., Fu, X. & Chung, D.D.L., 1998. A comparative study of the wettability of steel, carbon and polyethylene fibers by water. *Cement and Concrete Research*, 28, pp.783-786.
- Oostelbos & Meulen, J. van der, 1991. *Het toepassen van plaatbeluchters op pompstation Spannenburg*, NV Waterleiding Friesland.
- Rahaman, M.S. & Mavinic, D.S., 2009. Recovering nutrients from wastewater treatment plants through struvite crystallization: CFD modelling of the hydrodynamics of UBC MAP fluidized-bed crystallizer. *Water Science and Technology*, 59(10), pp.1887-1892.
- Reijnen, G. & Siegers, W., 2008. *Tips voor het ontwerpen en verbeteren van korrelreactoren*, Kiwa Water Research, 08.017.
- Reijnen, G.K., 1992. *Ontwerpcriteria plaatbeluchter pompstation de laak*, Kiwa, 92.129.
- Di Renzo, A. & Di Maio, F.P., 2007. Homogeneous and bubbling fluidization regimes in DEM-CFD simulations: Hydrodynamic stability of gas and liquid fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, 62(1-2), pp.116-130.
- Rusche, H., 2002. *Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions*. Imperial College of Science, Technology & Medicine, London, UK.
- SALOME, 2014. SALOME: The open-source integration platform for numerical simulation. Available at: www.salome-platform.org.
- Samkhaniani, N. et al., 2012. Direct numerical simulation of single bubble rising in viscous stagnant liquid. In *International Convergence on Mechanical, Automobile and Robotics Engineering, Penang, Malaysia*.
- Sha, Z. et al., 2001. Application of CFD simulation to suspension crystallization - Factors affecting size-dependent classification. *Powder Technology*, 121(1), pp.20-25.
- Al-Sharif, S. et al., 2013. Modelling flow and heat transfer in spacer-filled membrane distillation channels using open source CFD code. *Desalination*, 311, pp.103-112.
- Siegers, W., 2003. *Overzicht van de korrelreactoren in Nederland*, Kiwa N.V., 02.087.
- Silva, L.F.L.R. & Lage, P.L.C., 2011. Development and implementation of a polydispersed multiphase flow model in OpenFOAM. *Computers & Chemical Engineering*, 35(12), pp.2653-2666.
- Vries, D., 2010. *Stromingsverschijnselen in de onthardingsreactor van Pompstation Hunsel. Verkennende simulaties met Computational Fluid Dynamics*, KWR Watercycle Research Institute.

- Vuthaluru, R. et al., 2009. Application of CFD modelling to investigate fluidized limestone reactors for the remediation of acidic drainage waters. *Chemical Engineering Journal*, 149(1-3), pp.162-172.
- Wojcik, J. & Plewik, R., 2009. Hydrodynamic modeling of fluidized-bed crystallizers with use of the multiphase CFD method. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 48(11-12), pp.1527-1533.
- Wols, B.A., 2010. *CFD in drinking water treatment*, PhD thesis, Delft University of Technology.
- Yang, Y. et al., 2011. Study on two operating conditions of a full-scale oxidation ditch for optimization of energy consumption and effluent quality by using CFD model. *Water Research*, 45(11), pp.3439-3452.
- Zhang, K. et al., 2012. CFD simulation of dynamic characteristics in liquid-solid fluidized beds. *Powder Technology*, 227, pp.104-110.
- Zhang, K. et al., 2013. Two- and three-dimensional computational studies of liquid-solid fluidization. *Powder Technology*, 235, pp.180-191.

Bijlage I Rekentijden simulaties

Voor de simulaties is gebruikgemaakt van een HP Z820 2x6C E5-2640 workstation met 64 GB RAM. Dit systeem bevat 12 processorcores, maar door hyper-threading zijn er 24 virtuele cores beschikbaar. Een overzicht van de rekestijden voor iedere simulatie van de ontharding is gegeven in onderstaande Tabel. Bij elk model wordt de rekestijd gerapporteerd die nodig was om de simulatie uit te voeren met een bepaald aantal virtuele cores. Deze tijden zijn gehaald uit het outputbestand van OpenFoam (vermeld als de variabele *ClockTime*) en zijn een conservatieve inschatting van de werkelijke benodigde rekenkracht: aangezien de gebruikte PC vele processen tegelijk draait en door meerdere gebruikers toegepast wordt zijn de virtuele cores niet altijd volledig beschikbaar voor de toegewezen berekeningen. Dit zal voor sommige simulaties betekenen dat de werkelijke rekestijd met geoptimaliseerde toewijzing van processorcracht enkele tientallen procenten lager is.

Simulatie	Aantal CPU cores	Simulatietijd (s)	Rekestijd (h)
Ontharding Goor turbulent (4.4.1)	4	600	58
Ontharding Goor laminair (4.4.1)	1	600	81
Ontharding Kolff turbulent (4.4.2)	4	420	147
Ontharding Kolff laminair (4.4.2)	8	341	47
Ontharding Spannenburg turbulent (4.4.3)	4	242	143
Ontharding Spannenburg laminair (4.4.3)	4	600	50
Ontharding Cothen laminair (4.4.4)	1	500	264
Ontharding Tull en 't Waal laminair (4.4.5)	1	174	720