



Bas Wols, KWR Watercycle Research Institute / TU Delft
 Jan Hofman, KWR Watercycle Research Institute / TU Delft
 Wim Uijtewaal, TU Delft
 Hans van Dijk, TU Delft

Verbeteren van drinkwaterinstallaties met computermodellering

De energie-efficiëntie van drinkwaterzuiveringsinstallaties wordt grotendeels bepaald door de stroming van het water. In het bijzonder voor desinfectieprocessen, waarbij UV en/of ozon gebruikt worden, is de hydrodynamica van groot belang. Het gebruik van computermodellen als *computational fluid dynamics* (CFD) helpt, omdat het inzicht verschaft in de stromingspatronen en de interactie van de stroming met (bio)chemische processen. CFD-modellen zijn toegepast op ozoninstallaties en UV-reactoren en voorspellen een aanzienlijke verbetering in desinfectierendement door aanpassing van het reactorontwerp, bijvoorbeeld met extra schotten of stromingsgeleiders.

Bij desinfectieprocessen in drinkwaterinstallaties is de stroming van het water en de ruimtelijke verspreiding van het desinfectans van groot belang voor de efficiëntie van het proces. Met behulp van CFD-modellering is het mogelijk om de desinfectie in deze installaties te voorspellen. Hierbij worden de stroming, de verspreiding van het desinfectans, en het effect op afzonderlijke deeltjes (micro-organismen) berekend, zodat voor ieder deeltje de hoeveelheid opgenomen desinfectans bepaald kan worden (UV-dosis of CT-waarde). Met behulp van deze dosis kan vervolgens de desinfectie voorspeld worden.

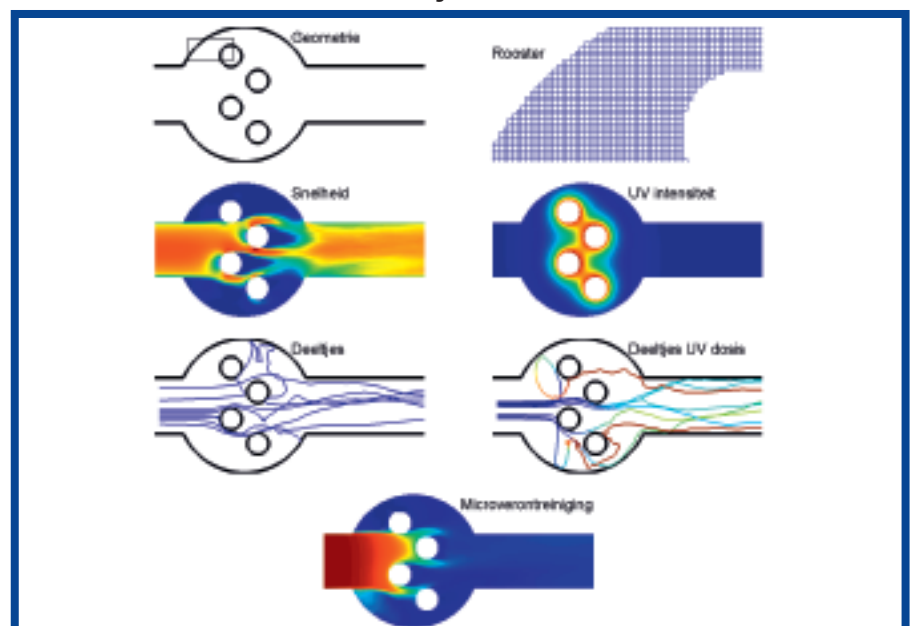
CFD-modellering

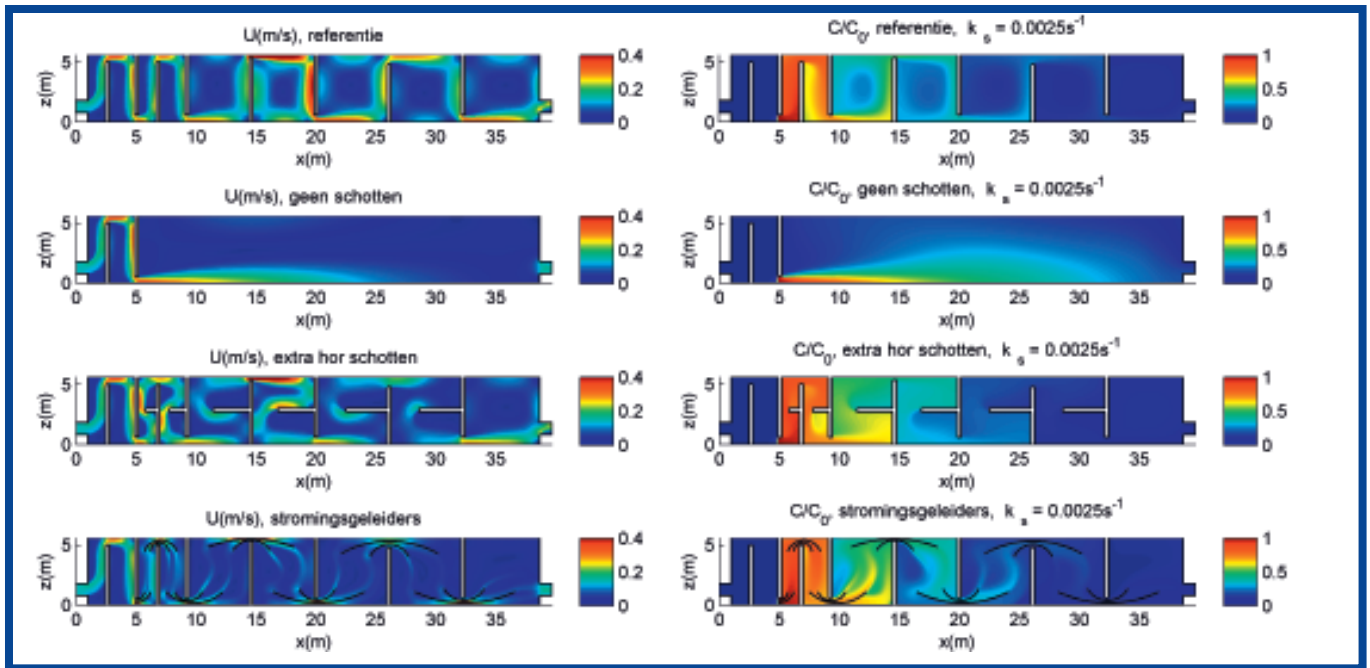
Een CFD-model kan worden toegepast op zowel UV-reactoren als ozoninstallaties^(1,2). Het model deelt de installatie in kleine elementen op. Zo leg je als het ware een 'rooster' over de reactor heen. Vervolgens worden voor elk element apart de wiskundige vergelijkingen voor de stroming en de (bio)chemie opgelost. Afbeelding 1 geeft een voorbeeld van een CFD-berekening voor een UV-reactor met vier lampen. Bij de berekeningen moet men er rekening mee houden dat de stroming in een reactor meestal turbulent is. Verschillende wiskundige modellen kunnen deze turbulente stroming beschrijven. Een veel toegepast turbulentiemodel is

het k-ε-model, dat gebruik maakt van een gemiddeld snelheidsveld en een artificiële viscositeitsterm om de effecten van de turbulente fluctuaties weer te geven. Een meer geavanceerd turbulentiemodel is de *large eddy simulation*. Dit model geeft betere resultaten, maar vergt meer rekentijd. Na de berekening van de stroming worden individuele deeltjes, die meebewegen met

de waterstroming, virtueel losgelaten in de reactor. De deeltjes simuleren de banen van bacteriën in de reactor. Vervolgens wordt de verdeling van de intensiteit van de UV-straling berekend (of voor ozonsystemen de ozonconcentratie). Door de lichtintensiteit of de ozonconcentratie te integreren over de baan van het deeltje, wordt de dosis verkregen. Voor

Afb. 1: Overzicht van onderdelen van CFD-modellering van een UV-reactor.





Afb. 2: Overzicht van stroming (links) en ozonconcentraties (rechts). Het tweede compartiment is telkens het doseercompartiment. De ozonconcentratie is genormaliseerd met de ozonconcentratie bij de instroom van de contactcompartimenten. Er is een (langzame) afbraakcoëfficiënt van $2.5E-3s$ voor opgelost ozon gebruikt, wat in overeenstemming is met gemeten afbraakcoëfficiënten in Leiduin⁶⁾.

ozonsystemen is dit de CT-waarde: concentratie maal tijd. Door het simuleren van een groot aantal deeltjes wordt de dosisverdeling van de reactor berekend. Aan de hand van *batch*-experimenten³⁾ kan een dosis-responsrelatie voor een specifiek micro-organisme worden bepaald. Door deze relatie te combineren met de dosisverdeling in de reactor, kan de desinfectie in de reactor worden berekend. De dosisverdeling is een belangrijke maat voor de efficiëntie van de reactor, omdat de lage doses beperkend zijn voor de desinfectie. Er geldt dus: hoe smaller de dosisverdeling, hoe beter de reactor. Daarnaast kan ook zonder gebruik te maken van virtuele deeltjes de concentratie van micro-organismen in de reactor berekend worden door het oplossen van de transportvergelijkingen (advectie, diffusie en afbraak). CFD-modellen zijn toegepast voor de verbetering van een ozonkelder (Leiduin, Waternet), en het ontwerp van een UV-reactor. De waterstroming is in beide voorbeelden gevalideerd met metingen en kwam goed overeen met het CFD-model.

Modellering van ozoninstallaties

Waternet wil in de ozonkelder van Leiduin de vorming van desinfectiebijproducten zoals bromaat verlagen en tegelijkertijd het desinfectieniveau handhaven^{4),5)}. Optimalisatie van de stroming zal een kleinere verdeling geven van CT-waarden (ozonconcentratie maal tijd), zodat de desinfectiecapaciteit verbetert. Vervolgens kan de dosering van ozon worden verlaagd, zodat de bromaatvorming vermindert.

De ozonkelder bestaat uit een aantal compartimenten. In het tweede compartiment wordt ozon gedoseerd in de vorm van ozonhoudende gasbellen. Het ozongas lost op in het water en het ozonhoudende water stroomt vervolgens door de andere compartimenten, die zorgen voor voldoende contacttijd. In het CFD-model is de verspreiding van de opgeloste ozon

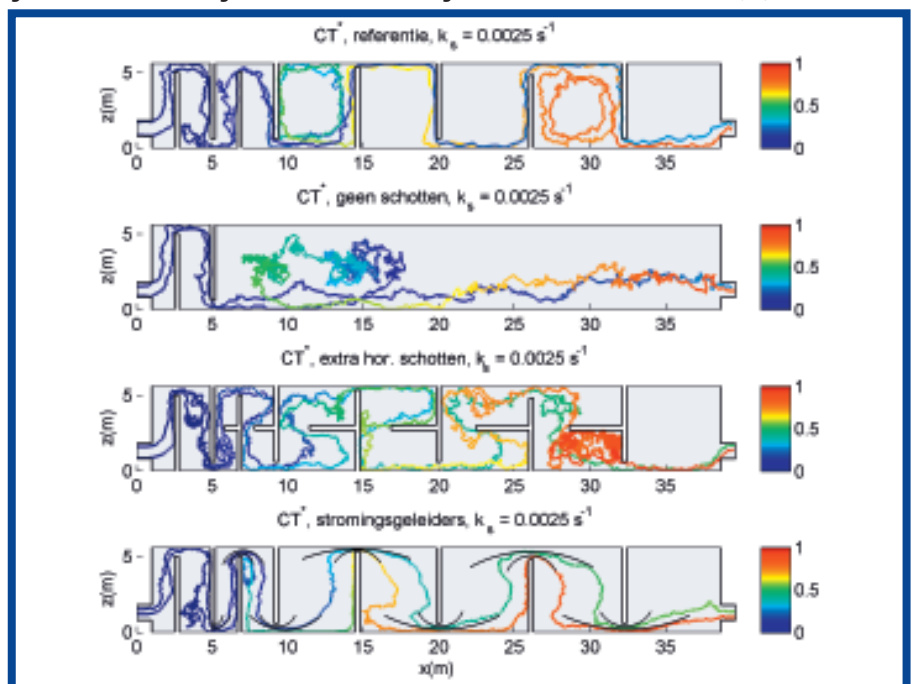
berekend, waarbij is aangenomen dat de concentratie opgeloste ozon na de bellenkomst gelijkmatig verdeeld is over de doorsnede van de installatie. De stroming in de contactcompartimenten is geoptimaliseerd in de installatie met behulp van CFD. Hierbij is een aantal varianten onderzocht. De 'referentie' is de situatie zoals die in Leiduin in gebruik is. Dit ontwerp, waarbij de reactor in compartimenten is verdeeld, wordt wereldwijd veel toegepast voor ozoninstallaties.

Ook is gekeken naar wat er zou gebeuren als men de schotten weglaat en er één groot contactcompartiment ontstaat. Daarnaast is een situatie doorgerekend met extra

horizontale schotten om de kortsluitstromen te verminderen. Het stromingspatroon in de reactor wordt op deze manier gelijkmatiger. Ten slotte is de situatie bekeken waarbij de stroming in de opening boven en onder de schotten beïnvloed wordt door middel van stromingsgeleiders, die kortsluitstromen en grote circulaties in het compartiment moeten voorkomen.

De resultaten van deze berekeningen zijn weergegeven in afbeelding 2. Voor de referentiesituatie worden hoge snelheden gemeten, wat veroorzaakt wordt door de smalle openingen boven en onder de schotten. Hierdoor ontstaat een duidelijke

Afb. 3: Overzicht van de banen van twee deeltjes in de ontwerpen: het deeltje behorend bij de laagste CT-waarde en een deeltje behorend bij een gemiddelde CT-waarde. De kleur van de baan geeft de CT-waarde aan. Deze is genormaliseerd met de beginconcentratie ozon en langzame afbraakcoëfficiënt: $CT^* = CT k_d / C_0$.



voorkeursstroming: een klein gebiedje met hoge snelheden en een groot gebied met een recirculatiezone. Als de schotten worden weggelaten, is de voorkeursstroming nog sterker: hoge snelheden onderaan het compartiment en een zeer groot recirculatiegebied. Het plaatsen van extra horizontale schotten doorbreekt het patroon van de recirculaties in een compartiment. Dit leidt tot een gelijkmatiger verdeling van de ozonconcentratie in de compartimenten. De stromingsgeleiders hebben een soortgelijk effect.

Afbeelding 3 geeft de banen van twee deeltjes weer voor ieder ontwerp: een baan behorend bij een deeltje dat de gemiddelde CT-waarde heeft ontvangen en een baan behorend bij een deeltje dat de minimale CT-waarde heeft ontvangen. Het deeltje met de minimale CT-waarde volgt de kortsluitstroming in de installatie en is kritisch voor de desinfectiecapaciteit. In de situatie zonder schotten is dit bijna een rechte lijn naar de uitgang. In de referentiesituatie loopt dit deeltje langs de schotten en de bodem of het wateroppervlak. Omdat de snelheid hier hoger is dan in de situatie zonder schotten, is de minimale CT-waarde ongeveer gelijk voor beide gevallen. De maatregelen om kortsluitstromen te verminderen, zoals extra horizontale schotten en stromingsgeleiders, lijken te werken: de minimale CT-waarden nemen toe want de banen worden langer of de snelheden lager. Het deeltje met de gemiddelde CT-waarde neemt meer ozon op dan dat met de minimale CT-waarde, omdat dit deeltje in gebieden komt met lagere snelheden of in gebieden met recirculaties. De gemiddelde CT-waarden zijn ongeveer gelijk voor de vier ontwerpen.

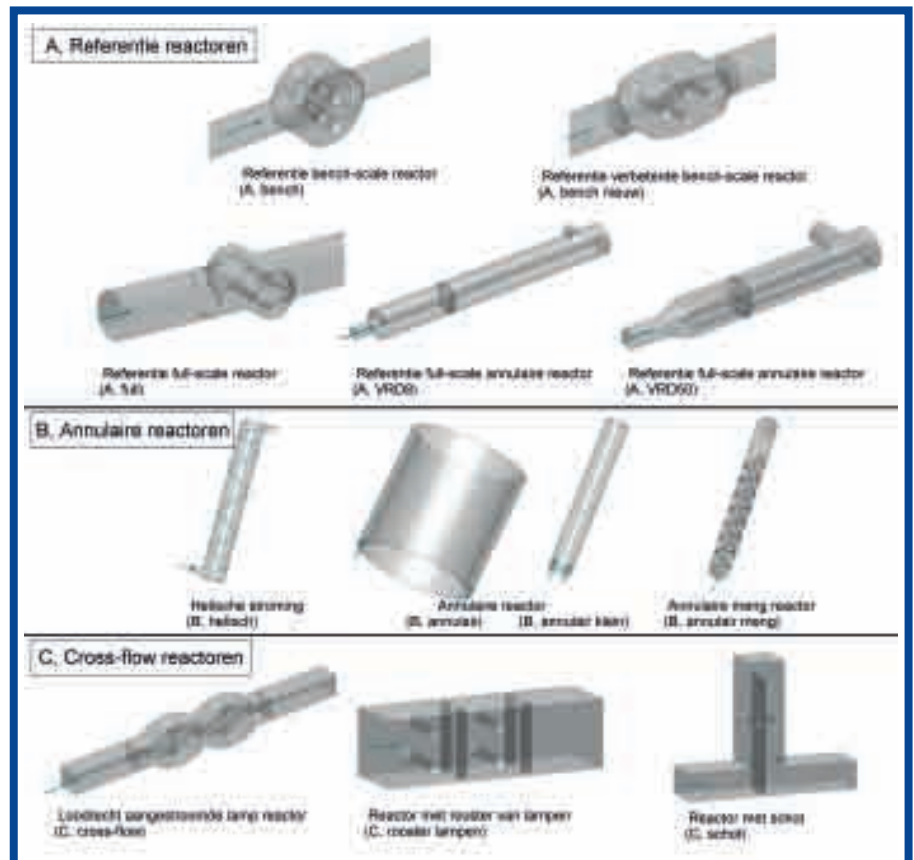
De resultaten van de desinfectie voor de verschillende ontwerpen zijn weergegeven in de tabel. Uit de desinfectieberekening blijkt dat de maatregelen, zoals extra horizontale schotten en stromingsgeleiders, de desinfectie aanzienlijk kunnen verbeteren (toename van 27 procent ten opzichte van de referentiesituatie). De situatie zonder schotten resulteert in een verslechtering van de desinfectie, omdat een groot aantal bacteriën te lage CT-waarden krijgt.

Overzicht van de desinfectie voor de verschillende ontwerpen. Uitgegaan is van de desinfectie van *Cryptosporidium*, gebruik makend van een Chick-Watson inactivatiemodel met een gevoeligheid van de bacterie voor ozon van $0,8 \text{ l}/(\text{mg min.})^2$ en een beginconcentratie van ozon van $0,5 \text{ mg/l}$.

desinfectie (log-eenheden)	
referentie	1,48
geen schotten	1,18
extra horizontale schotten	1,88
stromingsgeleiders	1,86

Modellering van UV-reactoren

Voor het ontwerp van UV-reactoren is het van belang om voor voldoende verwijdering van bacteriën te zorgen bij een zo laag mogelijk energieverbruik. Met behulp van CFD-modellen kan het ontwerp worden



Afb. 4: Overzicht van de geometrie van de diverse UV-reactoren.

geoptimaliseerd. Hierbij is de verdeling van de UV-intensiteit en de stroming van het water belangrijk: de positie en snelheid waarmee micro-organismen door de reactor bewegen, bepaalt de UV-dosisverdeling. Deze verschilt per reactor en bepaalt uiteindelijk het rendement van de desinfectie. Een groot aantal verschillende typen UV-reactoren is doorgerekend met het CFD-model. Voor iedere reactor zijn hetzelfde debiet (5 l/s), lampvermogen (steeds in totaal 200 W UVC) en transmissie van het water (80 procent over 1 cm) gebruikt. Zowel bestaande als nieuwe reactorontwerpen zijn doorgerekend. Voor de desinfectie is uitgegaan van de kinetiek van de inactivatie van *Bacillus subtilis*-sporen³⁾.

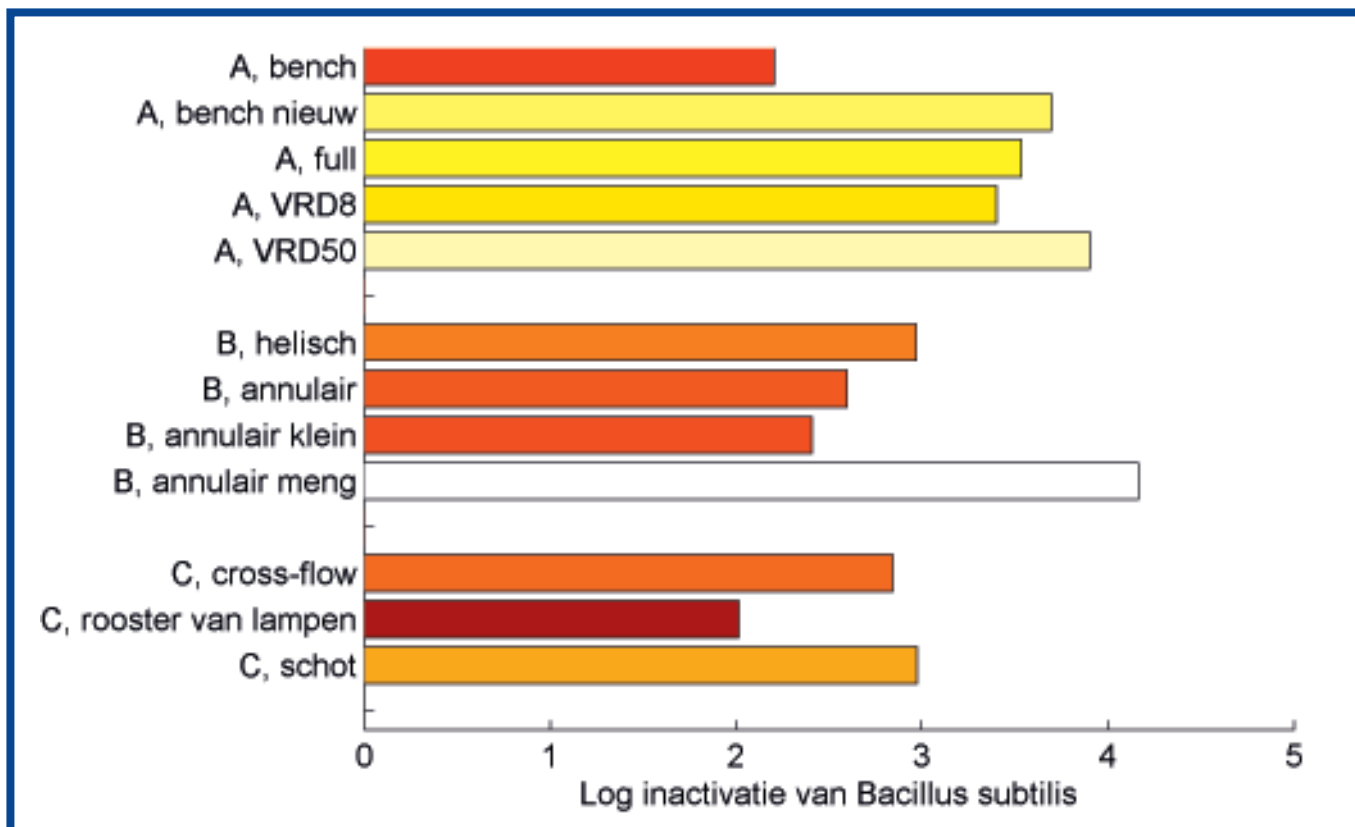
Afbeelding 4 geeft een overzicht van de geometrie van de gebruikte reactoren, onderverdeeld in drie categorieën:

- referentiereactoren. Deze categorie bevat bestaande reactoren in onderzoek of in de praktijk. De *bench scale*-reactor is een onderzoeksreactor, die onder meer gebruikt is voor validatie van de snelheidsvelden. Een aanpassing van dit ontwerp met kleinere lampen en een beter gestroomlijnde reactorvorm is eveneens onderzocht. Daarnaast is uit de praktijk een *full scale*-reactor met loodrecht-aangestroomde lampen doorgerekend en een annulaire reactor;
- annulaire reactoren. In deze categorie zijn alleen annulaire reactoren onderzocht waarin maatregelen zijn genomen om de menging te bevorderen (helische stroming en statische menger) en om het lichtveld gelijkmatiger te verdelen (variatie van

de diameter van de quartz-buis rond de UV-lamp). Beide maatregelen hebben als doel om de dosisverdeling te versmallen en daarbij de efficiëntie te vergroten;

- *cross-flow*-reactoren. In deze categorie zijn reactoren ondergebracht waarin de lampen loodrecht worden aangestroomd. Gezocht is naar maatregelen om de stroming te optimaliseren, zoals stroomlijning van de reactorvorm of een rooster van lampen en schotten, zoals in de ozoninstallatie.

De ruimtelijke verdeling van UV-intensiteit en de stroming van het water verschillen per reactor, zodat ook de banen en snelheden van micro-organismen sterk verschillen. Dit leidt tot grote verschillen in desinfectiecapaciteit van de reactoren (zie afbeelding 5). De *bench scale*-reactor uit de eerste groep is niet erg efficiënt, maar deze reactor kan aanzienlijk worden verbeterd door stroomlijning en verkleining van de lampdiameter. De andere bestaande reactoren lijken het goed te doen. De beste reactor is te vinden in de tweede groep: de annulaire mengreactor. Hier is de UV-dosisverdeling smal, omdat door de menging alle deeltjes dicht bij de lamp komen. Het verschil tussen de annulaire reactor met een kleine en een grote lampdiameter is klein, oftewel de grootte van de lampdiameter voor de annulaire reactor heeft weinig effect op de desinfectie. Uit de resultaten van de loodrecht aangestroomde reactoren (de laatste groep) blijkt dat de reactor met een rooster van lampen niet goed werkt, omdat de gebieden in de hoeken van de reactor een te lage UV-dosis ontvangen.



Afb. 5: Overzicht van desinfectie voor de diverse UV-reactoren.

CFD als ontwerpgereedschap

De voorbeelden geven aan dat CFD-modellering bijdraagt aan een beter ontwerp van installaties. Een bestaande ozoninstallatie is verbeterd door het plaatsen van extra horizontale schotten, zodat de kortsluitstromen worden verminderd. Hierdoor kan de ozondosering worden verlaagd, zodat de vorming van bijproducten (bromaat) vermindert, terwijl de desinfectiecapaciteit gelijk blijft. Uit de simulaties van de UV-reactoren blijkt dat de hydrodynamica van groot belang is voor de efficiëntie van het systeem. Daardoor kan de verwijdering van micro-organismen per reactor sterk verschillen. Een annulaire reactor, die is ontworpen als een statische menger, geeft de beste resultaten.

De belangrijkste ontwerpregels voor desinfectie-installaties blijken:

- het stroomlijnen van de installatie om grote recirculaties te voorkomen,
- het voorkomen van kortsluitstromen met behulp van schotten of stromingsgeleiders,
- het genereren van extra menging met behulp van schotten of manipulatie van de instroom of uitstroom.

Voor het verbeteren van de prestaties van ozon- of UV-installaties zijn CFD-modellen onontbeerlijk: zij maken het mogelijk de beoogde verbeteringen goed in te schatten en zodoende tot het juiste ontwerp te komen. Daarnaast is het CFD-model geschikt als gereedschap om de sturing van UV-installaties te optimaliseren, zodat energie kan worden bespaard, bijvoorbeeld door de dosis te sturen op basis van inkomende waterkwaliteit (UV-transmissie).

Naast de optimalisatie van desinfectiesystemen kan CFD in de watersector ook

gebruikt worden voor het optimaliseren van pelletreactoren, (membraan)filtratie, reinwaterkelders, actiefslibsystemen en verdeelsystemen in pompstations.

LITERATUUR

- 1) Sozzi D. en F. Taghipour (2006). UV reactor performance modeling by Eulerian and Lagrangian methods. Environmental Science and Technology nr. 5, pag. 1609-1615.
- 2) Wols B., J. Hofman, W. Uijtewaal, L. Rietveld en H. van Dijk (2010). Evaluation of different disinfection calculation methods using CFD. Environmental Modelling and Software nr. 4, pag. 573-582.
- 3) Hijnen W., E. Beerendonk en G.-J. Medema (2006). Inactivation credit of UV radiation for viruses, bacteria and protozoan (oo)cysts in water: A review. Water Research nr. 1, pag. 3-22.
- 4) Kappelhof J., L. van Breukelen, Y. Dullemont, P. Nienhuis en R. van der Aa (2007). Desinfectiescenario's Leiduin. Intern rapport Waternet.
- 5) Smeets P. (2008). Stochastic modelling of drinking water treatment in quantitative microbial risk assessment. TU Delft. PhD thesis.
- 6) Van der Helm A. (2007). Integrated modeling of ozonation for optimization of drinking water treatment. TU Delft. PhD thesis.
- 7) Rennecker J., B. Marinas, J. Owens en E. Rice (1999). Inactivation of *Cryptosporidium parvum* oocysts with ozone. Water Research nr. 11, pag. 2481-2488.
- 8) Wols B. (2010). CFD in drinking water treatment. TU Delft. PhD thesis.

Een uitgebreide verhandeling over CFD-modellering in drinkwaterinstallaties is te vinden in het proefschrift van Bas Wols, getiteld 'CFD in drinking water treatment'⁽⁸⁾. De achtergronden van het CFD-modellieren, validatietechnieken, toepassingen voor ozon en UV en ontwerprichtlijnen voor reactoren komen hierin aan bod.

De openbare verdediging van het proefschrift vindt plaats op 21 juni om 15.00 uur in de aula van de TU Delft.

Het project is gefinancierd door de TU Delft, het bedrijfstakonderzoek van de drinkwaterbedrijven en KWR Watercycle Research Institute. Voor de laatste twee jaar is het medegefinancierd in het TTIW van Wetsus.