




Bas Wols, Technische Universiteit Delft
Jan Hofman, Kiwa Water Research / Waternet
Wim Uijttewaal, Technische Universiteit Delft
Hans van Dijk, Technische Universiteit Delft / Kiwa Water Research

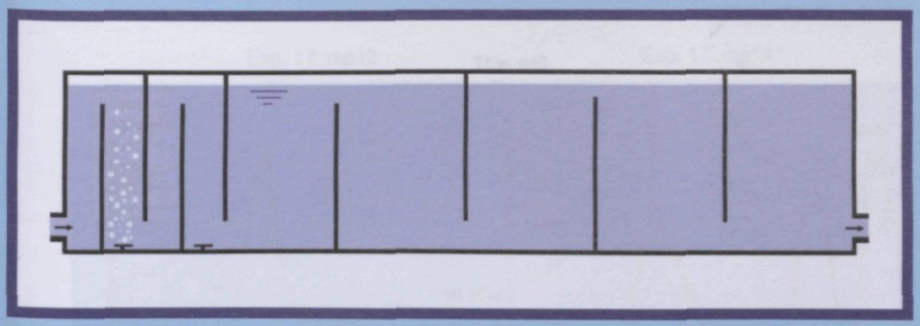
Numerieke modellering van desinfectieprocessen

Het gebruik van numerieke stromingsmodellen is van belang om de effectiviteit van desinfectieprocessen te vergroten. Dit artikel behandelt turbulente menging en het optreden van propstroming, aspecten die spelen bij de toepassing van ozonisatie. De resultaten van metingen en berekeningen geven aan dat opschaling van de propstroomreactor (Dissolved Ozone Plug Flow-reactor of DOPFR) naar de huidige proefinstallatieschaal mogelijk is. Ook geven de resultaten vertrouwen in de verdere opschaling naar praktijkschaal. Daarmee is aangetoond dat een nieuwe innovatieve wijze van ozondosering weer een stap dichterbij is gekomen. De resultaten vormen bovendien de opmaat voor een uitgebreid onderzoek naar de optimalisering van de stroming in de bestaande ozonkelders van pompstation Leiduin van Waternet.

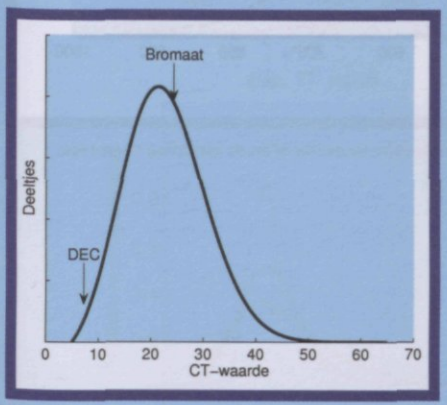
Een belangrijk aspect bij de productie van veilig drinkwater is desinfectie. In Nederland wordt drinkwater als veilig beschouwd als het infectierisico door het nuttigen van drinkwater minder is dan 10^{-4} per jaar, dat wil zeggen dat maximaal 1 op de 10.000 personen per jaar geïnfecteerd mag worden door pathogene micro-organismen als gevolg van het gebruik van drinkwater[2]. Waterleidingbedrijven hebben de plicht om dit infectierisico aantoonbaar te maken[1]. In veel gevallen is de concentratie van pathogene micro-organismen in het water echter zo laag dat de verwijdering niet direct aan te tonen is. Een indirecte meting met behulp van indicatororganismen is dan noodzakelijk.
Veelgebruikte desinfectietechnieken voor de zuivering van drinkwater zijn ozonisatie en UV-desinfectie. Bij toepassing van ozon wordt het ozongas meestal met een bellenkolom gedoseerd aan het water (zie afbeelding 1). In de daaropvolgende contactkamers worden de aanwezige pathogenen afgedood en reageert het opgeloste ozon met allerlei micro-verontreinigingen in het water. Bij UV-desinfectie stroomt het water door een reactor waar het wordt blootgesteld aan UV-C-licht, zodat inactivatie van de aanwezige micro-organismen plaatsvindt. Bij beide technieken is de stroming van cruciaal belang voor de effectiviteit van de desinfectie. Van der Helm *et al.*[5] hebben het effect van propstroming onderzocht in een lange propstroomreactor met kleine diamater (8 mm), waarin ozon opgelost in bromidevrij water als deelstroom wordt gedoseerd. In een vergelijking met de resultaten uit de praktijkinstallatie kwamen zij tot de conclusie dat een aanzienlijke verbetering van de desinfectie en reductie van bromaatvorming gerealiseerd kon worden. Smeets *et al.*[6] heeft het effect van de propstroom verder gekwantificeerd. Daarbij is aangetoond dat een geringe kortsluitstroom bepalend kan zijn voor de effectiviteit van het gehele proces.
Kennis over de - meestal complexe - vloeistofstroming en de menging bij desinfectieprocessen is daarom van groot belang. Om inzicht te krijgen in de effecten van stroming bij de desinfectie door ozon of UV biedt het gebruik van modellen vaak uitkomst[3]. Sinds 1 januari van dit jaar voert Bas Wols een promotieonderzoek uit aan de Technische Universiteit Delft (in samenwerking met Kiwa Water Research en Waternet) om de invloed van stroming bij desinfectieprocessen te modelleren en experimenteel vast te stellen. Hierbij heeft de turbulente menging een grote invloed op de beweging van individuele deeltjes (micro-organismen) in de desinfectie-installatie.

Problematiek

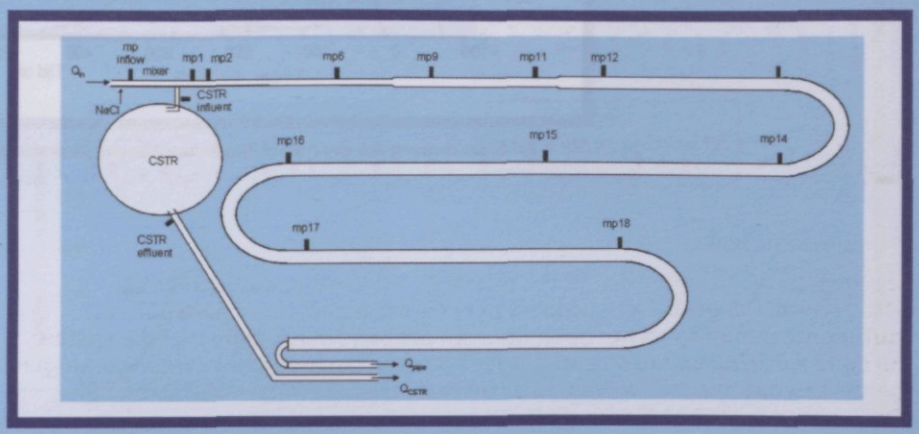
Bij het gebruik van ozon moet het water niet met te weinig of te veel ozon reageren. Reactie met te weinig ozon betekent dat onvoldoende desinfectie plaatsvindt. Ook is de kans groot dat organische micro-verontreinigingen onvoldoende worden verwijderd. Reactie met te veel ozon betekent een toename in bromaatvorming.
De blootstelling van het water aan ozon wordt uitgedrukt in de Ct-waarde, het product van de concentratie opgelost ozon (C) en contacttijd (t). Wanneer de spreiding in Ct-waarden groot is, bijvoorbeeld door een grote verblijftijdspreiding in de reactor, zal een deel van het water een te geringe ozondosis ontvangen, terwijl een ander deel juist een te hoge ozondosis ontvangt. Omdat de desinfectie wordt omschreven in log-eenheden (Decimale Eliminatie-Capaciteit of DEC), kan een kleine staart in de Ct-spreiding van grote invloed zijn op de desinfectiecapaciteit (zie afbeelding 2). Het is daarom van belang om de spreiding in Ct-waarden zo klein mogelijk te houden. Dan kan een zo groot mogelijke desinfectie behaald worden met een minimum aan ozondosering en bromaatvorming. De vraag is nu: wat veroorzaakt deze spreiding in Ct-waarden? Zowel concentratieverschillen van opgelost ozon in de contactkelder als variaties in verblijftijd zorgen voor een spreiding in Ct-waarde.
Dit laatste omvat de hydrodynamische eigenschappen van de contactkelder. Concentratieverschillen kunnen reeds ontstaan in de bellenkolom, waar het ozongas geïnjecteerd wordt en oplost in het water. De mate waarin het opgeloste ozon gemengd is met het water hangt onder meer af van de manier van doseren. In de propstroomreactor wordt ozon gedoseerd in opgeloste vorm en gemengd met een statische menger, zodat



Afb. 1: Dwarsdoorsnede ozoninstallatie.



Afb. 2: Spreiding Ct-waarden. Te lage waarden zorgen voor een te kleine desinfectie, te hoge voor de vorming van bromaat.



Afb. 3: Schematische weergave experiment (met ligging meetpunten).

een goede menging optreedt. In de huidige praktijkinstallatie wordt een bellenkolom toegepast. De menging van het opgeloste ozon hangt dan af van de mate van turbulente menging in de bellenkolom. De turbulente menging is een belangrijke stromingseigenschap, die een grote invloed heeft op de desinfectiecapacteit. Een grote turbulente menging betekent dat de ozonconcentratie over een dwarsdoorsnede uniform verdeeld is, zodat alleen de verblijftijdspreiding zorgt voor variaties in Ct-waarden. Bij geringe turbulente menging kunnen er grote concentratieverschillen ontstaan in dwarsrichting, wat leidt tot een aanvullende spreiding in Ct-waarden (Van der Veer *et al.*[8]). Bovendien kunnen stromingsverschijnselen als loslating zorgen voor een verdere ruimtelijke variatie in ozonconcentraties. Verschillen in verblijftijd worden eveneens veroorzaakt door grootschalige stromingsverschijnselen, bijvoorbeeld door loslatingsgebieden zoals aanwezig in de praktijkinstallatie in Leiduin[4]. Het water blijft dan een lange tijd 'hangen' in zo'n gebied, wat zorgt voor een lange staart in de verblijftijdspreiding. Anderzijds kunnen kortsluitstromen juist zorgen voor gebieden met veel kortere verblijftijden. Bovendien zal door de ruimtelijke en tijdafhankelijke variaties in snelheden de verblijftijdspreiding altijd toenemen in de tijd. Dit laatste is omschreven door Taylor (1954), die een volledig ontwikkelde turbulente stroming in een lange rechte pijp heeft onderzocht, vergelijkbaar met de propstroomreactor. Hij heeft daarbij concentratieverschillen in longitudinale richting in ogenschouw genomen. De verblijftijdspreiding kan analytisch worden bepaald met een model analoog aan de advectie-diffusie vergelijking. Hierbij geeft Taylor een uitdrukking van de turbulente diffusiecoëfficiënt op basis van het snelheidsprofiel.

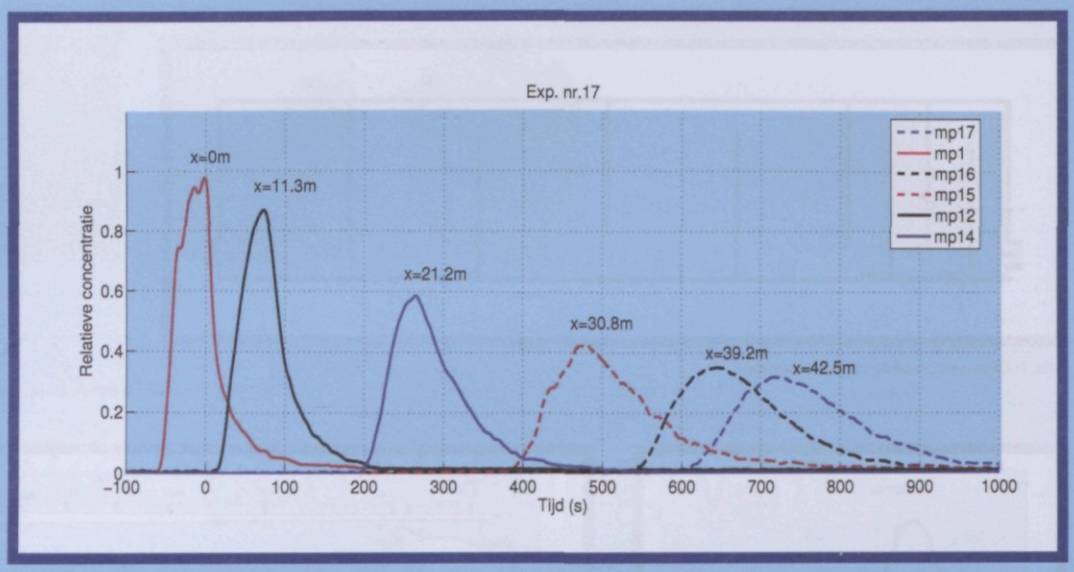
Numeriek modelleren van de stroming

Gezien de grote invloed die de stroming en de turbulente menging hebben op de desinfectie is het van belang dit op een juiste manier te omschrijven. Omdat metingen in de ozonkelder heel beperkt mogelijk zijn - het is een ontoegankelijke betonnen bak - is de numerieke modellering van de stroming (CFD) een krachtig instrument om de desinfectie te inventariseren. Op deze manier kunnen de zwakke plekken in het huidige desinfectieproces aangetoond worden en verbeteringen aangedragen worden door de stroming te optimaliseren.

Experiment met propstroomreactor

Als eerste opstap naar de beschrijving van de ozonkelder zijn experimenten uitgevoerd naar de verblijftijdspreiding van de opgeschaalde DOPFR in de proefinstallatie van Waternet op de vestiging Leiduin. In deze propstroomreactor wordt een voorbehandelde opgeloste ozonconcentratie toegevoegd aan een waterstroom in een buizencircuit. Uit metingen in een 8 mm buisreactor blijkt dat de goede propstroom zorgt voor een zeer goede desinfectie[5),6)]. In vergelijking tot de ozoninstallatie op ware grootte kan volstaan worden met een veel lagere ozondosis. De hier omschreven experimenten zijn daarom uitgevoerd om te onderzoeken of dit ook geldt voor een propstroomreactor met grotere afmetingen. De stroming door een buizencircuit is hierbij vergeleken met een stroming door een ideaal geroerd vat (CSTR). De waterstroom is daarom verdeeld in twee gelijke delen: het ene deel beweegt door de buisvormige reactor en het andere deel door het vat. Afbeelding 3 toont een schets van de proefopstelling. Het eerste deel van het leidingstelsel heeft een kleine diameter, na twee verbredingen is de diameter 15 cm. In het brede deel van het leidingstelsel zijn de verblijftijdspreidingen onderzocht (vanaf mp12).
Een keukenzoutoplossing is aan het begin van het circuit geïnjecteerd. Op verschillende posities langs de pijpas is vervolgens de zoutconcentratie gemeten als functie van de tijd. Dit gebeurt door continu water af te tappen uit het midden van de pijp, waarbij het elektrische geleidingsvermogen (EGV) wordt gemeten. Het EGV geeft aan hoe groot de concentratie keukenzout is.

Er zijn drie soorten tracerproeven uitgevoerd, twee daarvan hebben te maken met de manier van injecteren: als een stapfunctie of als een pulsfunctie. Bij de stapfunctie wordt gedurende een langere tijd de zoutoplossing



Afb. 4: Relatieve concentratie voor verschillende meetpunten. De maximale concentratie neemt af en de spreiding neemt toe.

toegevoegd aan de hoofdstroom (tijd gelijk aan de looptijd van het circuit), bij de puls gedurende een kortere tijd (rond de 1 minuut). In de bespreking van de resultaten, zullen we ons beperken tot de situatie van de pulsfunctie. Het debiet door het leidingstelsel is 2,5 kubieke meter per uur. Dit geeft een Reynoldsgetal van rond de 6000; met andere woorden de stroming is turbulent. De gemiddelde verblijftijd van het water in het hele circuit is daarbij circa een half uur.

Resultaten experiment

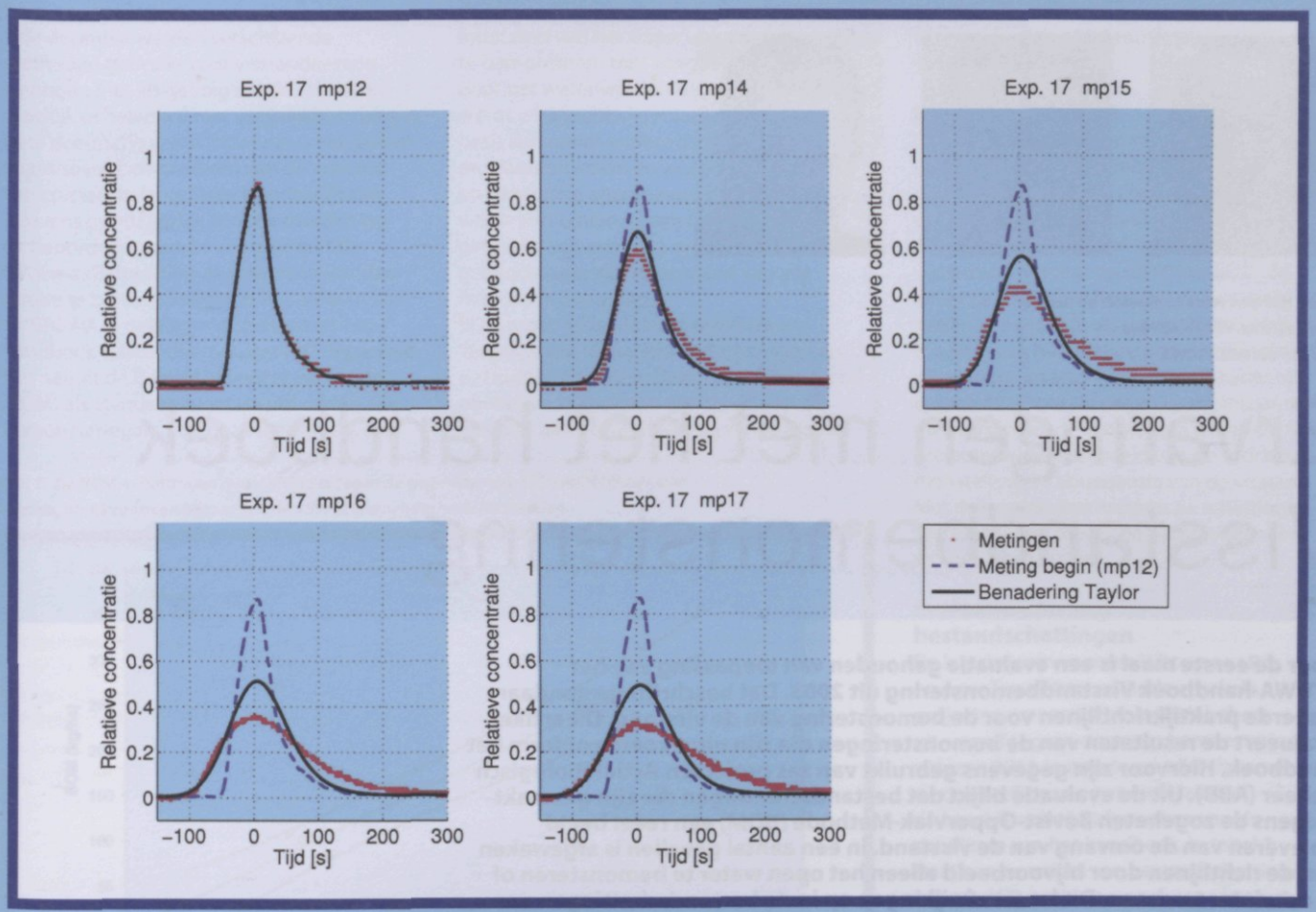
In afbeelding 4 zijn de relatieve zoutconcentraties uitgezet tegen de tijd. In dit experiment is gedurende een minuut zout toegevoegd aan het systeem (met een saliniteit van 0.1 g/l, wat correspondeert met een relatieve concentratie van 1).
Het is duidelijk te zien dat de turbulente diffusie zorgt voor een spreiding van de zoutconcentratie: de pieken worden lager en breder. Ook is een asymmetrie zichtbaar in de metingen: de zoutconcentratie, die als laatst langskomt ('de langzame staart'), heeft een grotere spreiding. De resultaten zullen vergeleken worden met de aanpak volgens Taylor.

Vergelijking met de theorie van Taylor

Taylor geeft een analytische uitdrukking voor de spreiding van een oplossing in een pijpstroming. Hij gaat hierbij uit van een volledig ontwikkelde turbulente stroming in een oneindig lange rechte pijp. Dit beschrijft dan een ééndimensionale situatie, waarbij de spreiding wordt gekarakteriseerd met een longitudinale turbulente diffusiecoëfficient. In deze geïdealiseerde stromingsituatie zal de concentratieverdeling altijd symmetrisch worden (volgens een Gauss kromme), ook voor een a-symmetrische beginconditie.
Als beginconcentratie voor de berekening van Taylor is gekozen voor de concentratie op meetpunt 12, het eerste meetpunt na de laatste verbreding van de pijp, zodat met eenzelfde leidingdiameter wordt gewerkt. Het middelpunt (getransleerd naar t = 0 sec.) is gelijk gekozen met de top van de piek. De benadering van Taylor geeft een kleinere toename in verblijftijdspreiding dan het geval is bij de metingen (afbeelding 5). Met name 'de langzame staart' is meer uitgerekt en de piek is meer ingezakt bij de metingen. De a-symmetrie is opvallend: op het eerste meetpunt is de concentratieverdeling reeds a-symmetrisch, maar waar de benadering van Taylor richting een symmetrische verdeling gaat, is voor de metingen het omgekeerde het geval.
Een verklaring voor de waargenomen a-symmetrie is het verstoorde snelheidsprofiel. Volgens Taylor duurt het minstens 100 pijpdiameters (wat in dit experiment een lengte betekent van 15 meter) voordat de stroming volledig ontwikkeld is. De bochten en de verbreding van de pijp verstoren het snelheidsprofiel, zodat het een tijd duurt voordat het volledig logaritmisch snelheidsprofiel hersteld is (dit wordt alleen bereikt na het doorlopen van het lange rechte stuk in de proefopstelling). Bovendien wordt de stroming verstoord door het aftappen op de meetpunten.
Ondanks de verschillen geeft de benadering van Taylor een goed beeld van hoe de verblijftijdspreiding in een pijpstroom zich ontwikkelt en wat de belangrijke mechanismen zijn. Volgens deze benadering is de verblijftijdspreiding afhankelijk van de diameter van de pijp, de wandruwheid en de stroomsnelheid.
Voor de opschaling van de propstroomreactor is het van belang te weten dat eenzelfde mate van propstroom in de 15 cm buis na een grotere lengte bereikt wordt dan in geval van de 8 mm buis.

Conclusies

De resultaten van de metingen en berekeningen geven aan dat opschaling van de propstroomreactor naar de huidige proefinstallatieschaal mogelijk is. Ook geven de resultaten vertrouwen in de verdere opschaling naar praktijkschaal. Daarmee is aangetoond dat een nieuwe innovatieve wijze van ozondosering weer een stap dichterbij is gekomen.
Voor de vertaling van de resultaten naar de stromingssituatie in de contactkelders van de ozoninstallatie te Leiduin liggen de zaken wat gecompliceerder. Waar de pijpstroom grotendeels met een ééndimensionaal model



Afb. 5: Vergelijking van de metingen met de benadering volgens Taylor (1954) voor de relatieve zoutconcentraties uitgezet tegen de tijd. De spreiding en met name de a-symmetrie lijken in de metingen groter te zijn dan in de benadering van Taylor.

beschreven kan worden (volledig gemengd over de breedte, zodat alleen de spreiding in longitudinale richting wordt beschouwd), gaat dit voor de stroming in de ozonkelder niet op. Naast de longitudinale spreiding (in stroomrichting), treden hier ook recirculatie zones op, variaties in de breedte richting en vrije oppervlakte effecten. Die beïnvloeden allemaal de turbulente menging (welke dan sterk per richting kan verschillen) en daarmee de verblijftijdspreiding. Bovendien kan de ozonverdeling in de contactkamers sterk verschillen, afhankelijk van de menging in de bellenkolom en de turbulente menging in de contactkamers zelf.

De metingen geven wel een beeld hoe de verblijftijdspreiding tot stand komt en kunnen in een later stadium bovendien ter validatie van numerieke modellen voor de ozonkelder worden gebruikt.

De resultaten vormen daarmee de opmaat naar een uitgebreid onderzoek naar de effecten van stroming bij desinfectie-processen. Vanwege de complexe geometriën is het hierbij noodzakelijk gebruik te maken van numerieke stromings-modellen. Op deze manier kunnen de deeltjesbanen worden berekend, waaruit de verblijftijd, contacttijd of UV-dosis kan worden bepaald. Het uiteindelijke doel daarbij is om te bepalen hoe de beweging van het water en de aanwezige deeltjes door de ozonkelders of de UV-reactoren kan worden aangepast om de desinfectie optimaal te laten verlopen. Daarnaast zullen ook innovatieve combinaties van ozon en UV worden onderzocht. De resultaten van het onderzoek kunnen leiden tot concrete bouwkundige aanpassingen van het ozonsysteem.

Literatuur

1) VROM Inspectie (2005). Inspectierichtlijn analyse microbiologische veiligheid drinkwater.
2) Waterleidingbesluit 2001. Besluit van 9 januari 2001 tot wijziging van het waterleidingbesluit in verband met de richtlijn betreffende de kwaliteit van voor menselijke consumptie bestemd water. Staatsblad van het Koninkrijk der Nederlanden nr. 31, pag. 1-53.
3) Hofman J., D. Wind en R. Janssens (2005). Toepassing stromingsberekeningen voor het optimaliseren van waterbehandeling. H_2O nr. 7, pag. 54.
4) Hofman J., P. Smeets, A. van der Veer, A. Gijsbertsen-Abrahamse, A. Wind en J. van Dijk (2005). Improvement of ozone disinfection: application of integrated flow modeling and full-scale validation. Proceedings van de 2005 Water Quality and Technology Conference (AWWA) in Quebec.
5) Van der Helm A., Th. Bosklopper, P. Smeets en L. Rietveld (2005). Technologie kan ons helpen. Bundel 57e Vakantiecursus Drinkwatervoorziening.
6) Smeets P., A. van der Helm, Y. Dullemont, L. Rietveld, J. van Dijk en G-J. Medema (2006). Inactivation of Escherichia Coli by ozone under bench-scale plug flow and full-scale hydraulics conditions. Kiwa Water Research. In voorbereiding.
7) Taylor G. (1954). The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe. Proceedings of the Royal Society of London, series A. Mathematical and Physical Sciences 223 (1155), pag, 446-468.
8) Van der Veer A., R. Schotsman, B. Martijn, R. Schurer en J. van Dijk (2005). Comparative small technical scale study on ozone disc diffusers and ejector system. 17th IOA conference, Straatsburg.