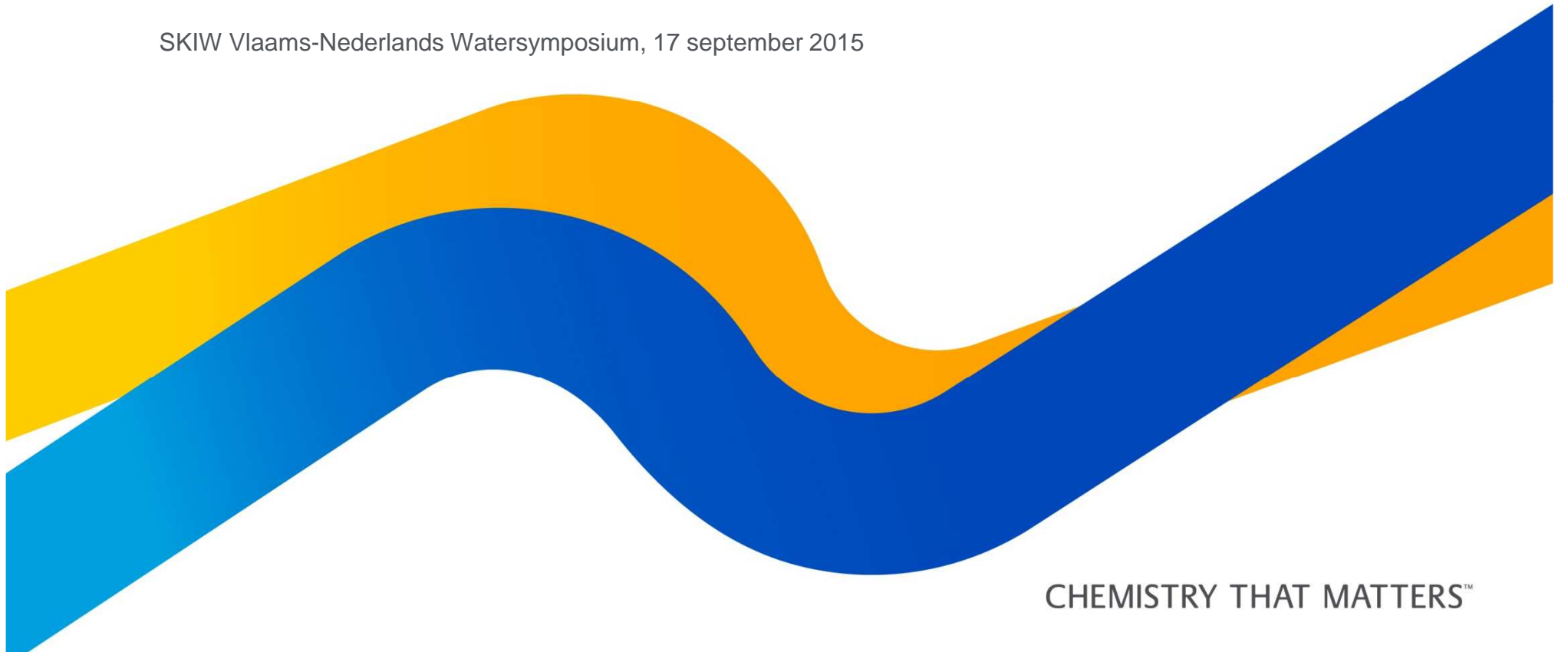




MODELLERING VAN INDUSTRIËLE KOELWATERSYSTEMEN – VERGELIJKING TUSSEN COMMERCIEEL BESCHIKBARE EN OPEN-SOURCE SOFTWARE

© Roy van Lier, Peter de Moel en Paul Bänziger

SKIW Vlaams-Nederlands Watersymposium, 17 september 2015



CHEMISTRY THAT MATTERS™

INLEIDING

KADER

Achtergronden/context

Sustainability van waterkringloop

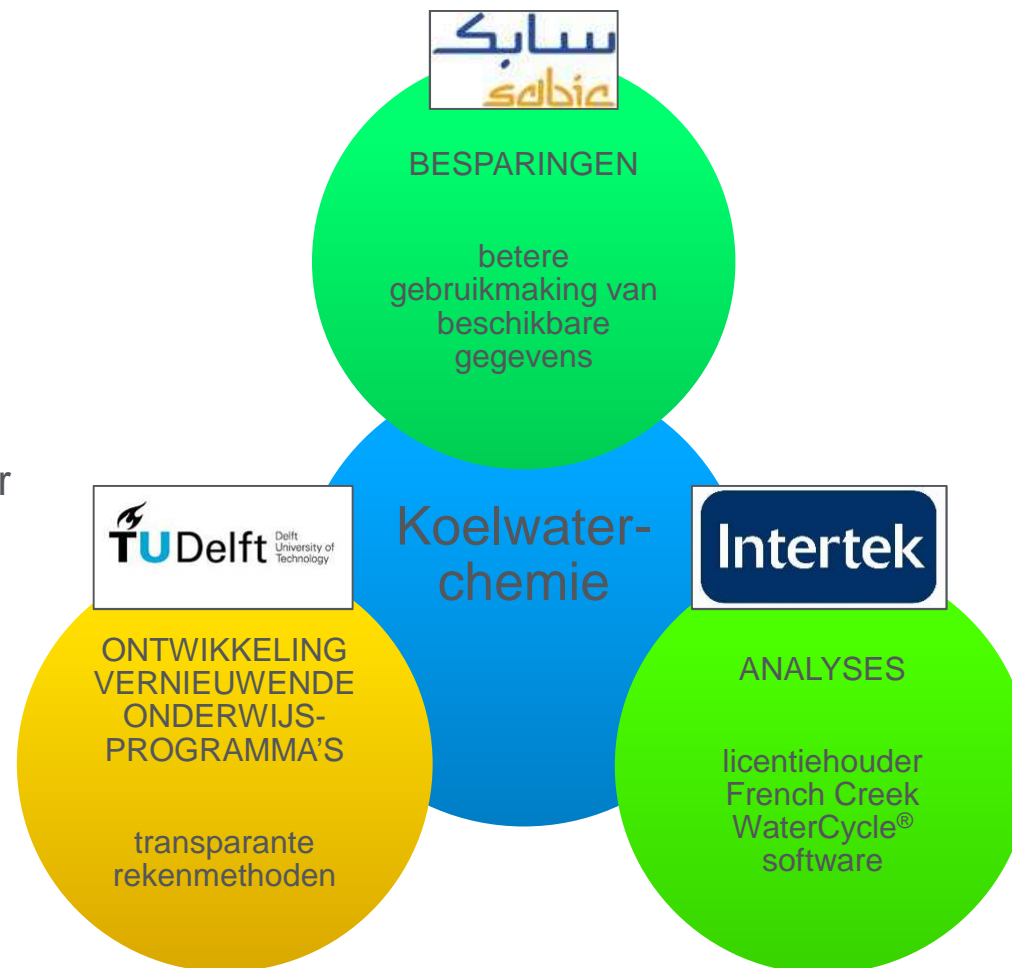
Big Data tijdperk

Betere/meer rekenkracht beschikbaar



PHREEQC voor modellering van industriewater, te beginnen bij koelwatersystemen

Studiedeelnemers en drijfveren



GELEEN SITE



KOELWATERTRADITIE DSM/GELEEN SITE

Rijke historie met grote namen:

Frederik van Iterson
1877-1957



Grondlegger van koeltorenbouw o.b.v.
zelfdragende constructie van gewapend beton
Hoogleraar Delft
Directeur Staatsmijnen
Oprichter Tebodin

NB: oud logo Staatsmijnen



Jo Savelkoul
gepensioneerd



Waterexpert Geleen site
Ontwikkelaar van recepturen voor Geleense
koelwaterbehandeling
Pionier nieuwe chemie & analysetechnieken
Co-auteur normen & referentiedocumenten

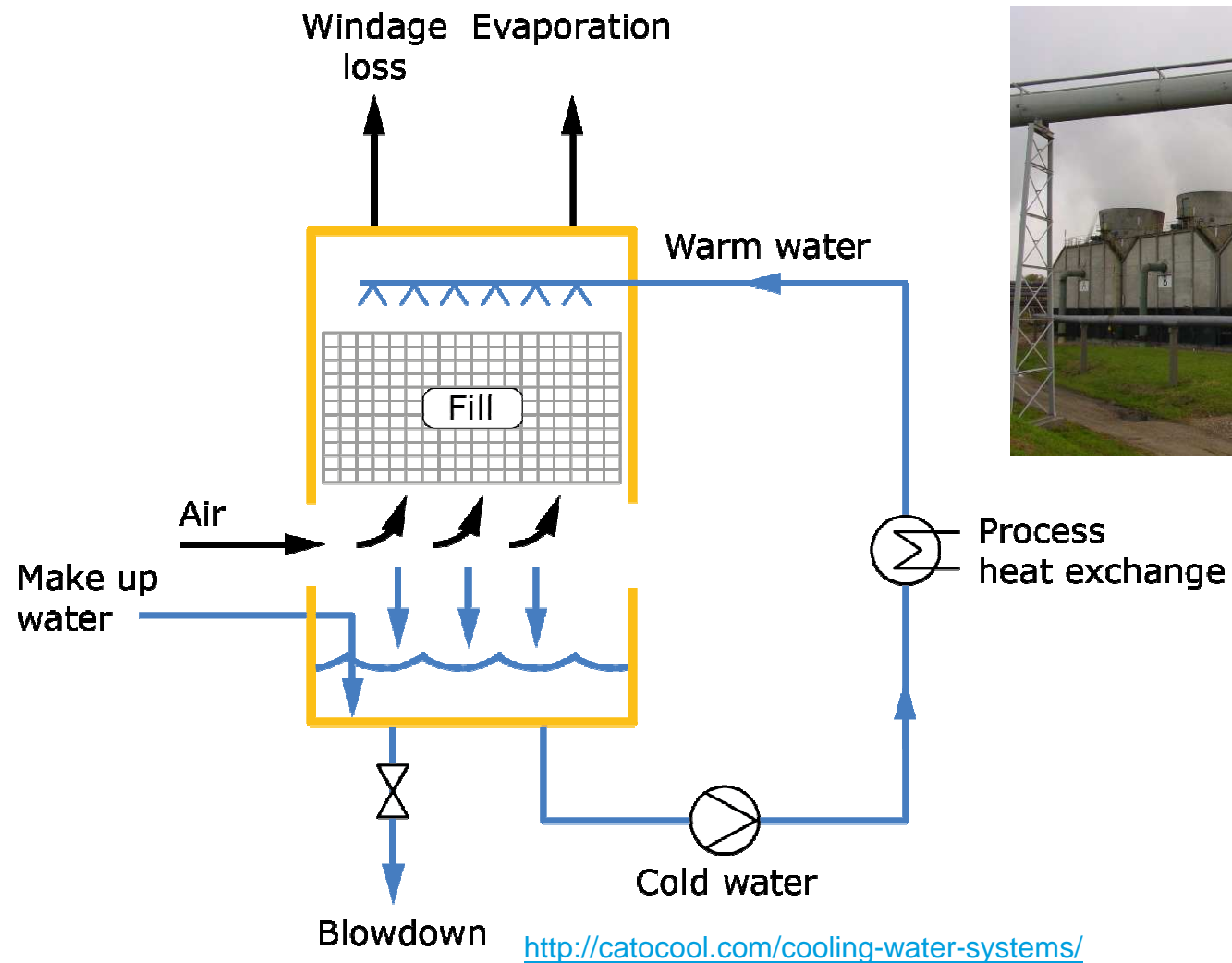
Tijdlijn:

Civiele aspecten

Conditionering

Modellering

OPEN KOELWATERSYSTEMEN



PROGRAMMA'S

SOFTWARE VOOR MODELLERING VAN KOELWATERSYSTEMEN

Onderdeel van deze chemische modelleringsstudie:

- Commercieel:



French Creek Software – WaterCycle® (versie 6.00C)

- Open-Source:



California Energy Commission – PIER program




United States Geological Survey – PHREEQC (versies 3.1.7 en 3.2.0)


Omvangrijkere, meer op flowsheeting gerichte programma's, m.n. van AspenTech en OLI Systems, buiten beschouwing gelaten

FRENCH CREEK SOFTWARE WaterCycle®

<http://www.frenchcreeksoftware.com/WaterCycle/>



Version 7
 Suite Compatible



WaterCycle
Cooling Water Modeling

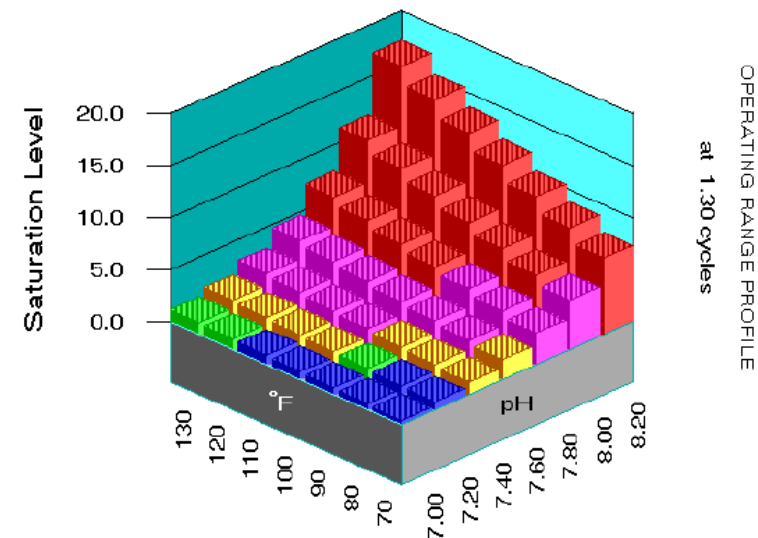
WaterCycle User Manual

Copyright © 2011 French Creek Software, Inc. All Rights Reserved.

The following are trademarks of French Creek Software Inc. and may only be used with permission: French Creek, French Creek Software, WaterCycle, WaterCycle Rx, hyd-RO-dose, hyd-RO-sat, DownHole SAT, WatSIM and MineSAT. The absence of a name or logo in this list does not constitute a waiver of any and all intellectual property rights that French Creek Software has established in any product, feature, or logos.

WaterCycle's "Fuzzy Chemistry"™ Profiles Predict Problems Over A Broad Range of Operating Conditions

Calcite Saturation Level



Color coding identifies the severity of the problem.

Blue signifies a safe range.

Green indicates a mild problem potential if conditions change slightly.

Yellow warns you to check measurements, trouble is near.

Magenta indicates a problem is likely. Take corrective action.

Red warns of a problem. Treatment or other remedial action is required.

FRENCH CREEK SOFTWARE WaterCycle®

Sinds 1989 op de markt

“Standaard” voor chemische simulaties van koelwatersystemen in de industrie, ook door waterbehandelingsfirma's zoals Nalco, Solenis (voorheen Ashland) etc.



Gebruiksvriendelijke interface




Handig in gebruik, maar toegang tot onderliggende berekeningen zeer beperkt



CEC-PIER

<http://www.energy.ca.gov/2005publications/CEC-500-2005-170/>



Arnold Schwarzenegger
Governor

COOLING TOWER WATER QUALITY PARAMETERS FOR DEGRADED WATER

Prepared For:
California Energy Commission
Public Interest Energy Research Program

Prepared By:
Michael N. DiFilippo, Consultant

April 2006
CEC-500-2005-170

PIER FINAL PROJECT REPORT

CEC-500-2005-170.XLS [Read-Only] [Compatibility Mode] - Excel

FILE HOME INSERT PAGE LAYOUT FORMULAS DATA REVIEW VIEW Accolade INQUIRE POWERPIVOT ENTERPRISE CONNECT

E63

Source Water Data Input

Source San Juan Generating Station
Project Unit 3 CT Evaluatin
Date Entered 5-2-2003

Enter values in pink-colored boxes as applicable.
Note range limitations and default conditions.

Red/bolded species must be entered

Species	Reported as	Reported Concentration	Concentration Units	Default Values	Default Conditions
Sodium	Na ⁺¹	35	mg/l as Na	10	No value, negative value
Potassium	K ⁺¹	3.1	mg/l as K	5	Negative value
Calcium	Ca ⁺²	54	mg/l as Ca	10	No value, negative value
Magnesium	Mg ⁺²	10.6	mg/l as Mg	10	No value, negative value
M or Total Alkalinity	CO ₃ ⁻² + HCO ₃ ⁻¹ + CO ₃ ⁻²	104	mg/l as CaCO ₃	Enter only one value	100 mg/l _{CaCO3} No value, negative value, multiple values
	HCO ₃ ⁻¹		mg/l as CaCO ₃		
	HCO ₃ ⁻¹		mg/l as HCO ₃		
Chloride	Cl ⁻¹	13.3	mg/l as Cl	10	No value, negative value
Sulfate	SO ₄ ⁻²	107	mg/l as SO ₄	10	No value, negative value
Nitrate	NO ₃ ⁻¹	0	mg/l as N mg/l as NO ₃	Enter only one value	3 mg/l _N Negative value, multiple values
Nitrite	NO ₂ ⁻¹	0	mg/l as N mg/l as NO ₂	Enter only one value	1 mg/l _N Negative value, multiple values
Ammonia	NH ₃	0	mg/l as N mg/l as NH ₃	Enter only one value	5 mg/l _N Negative value, multiple values
Ortho-Phosphate	H ₂ PO ₄ , H ₂ PO ₄ ⁻¹ , HPO ₄ ⁻² , PO ₄ ⁻³	0.42	mg/l as P mg/l as PO ₄	Enter only one value	1 mg/l _P Negative value, multiple values
Silica	SiO ₂	12.1	mg/l as SiO ₂	10	No value, negative value
pH		7.99	(Must be within range of 6.0 to 9.0)	7.5	Outside of range
Cooling Tower pH		9.0	(Must be within range of 6.0 to 9.0)	7.5	Outside of range
Hot-Side Cooling Tower Temperature, F		135	(Must be within range of 55 F to 135 F)	135	Outside of range
Cold-Side Cooling Tower Temperature, F		80	(Must be within range of 55 F to 135 F)	70	Outside of range

Data Input Bal-Spec Source Analysis Summary Relative Saturation Ca Salts-SiO2 Bu ...

READY CIRCULAR REFERENCES Posivok IN ... aanvullende ... TUD and PHR... SKIW present... SABIC Lezing ... Directory List... CEC-500-200... 15:54

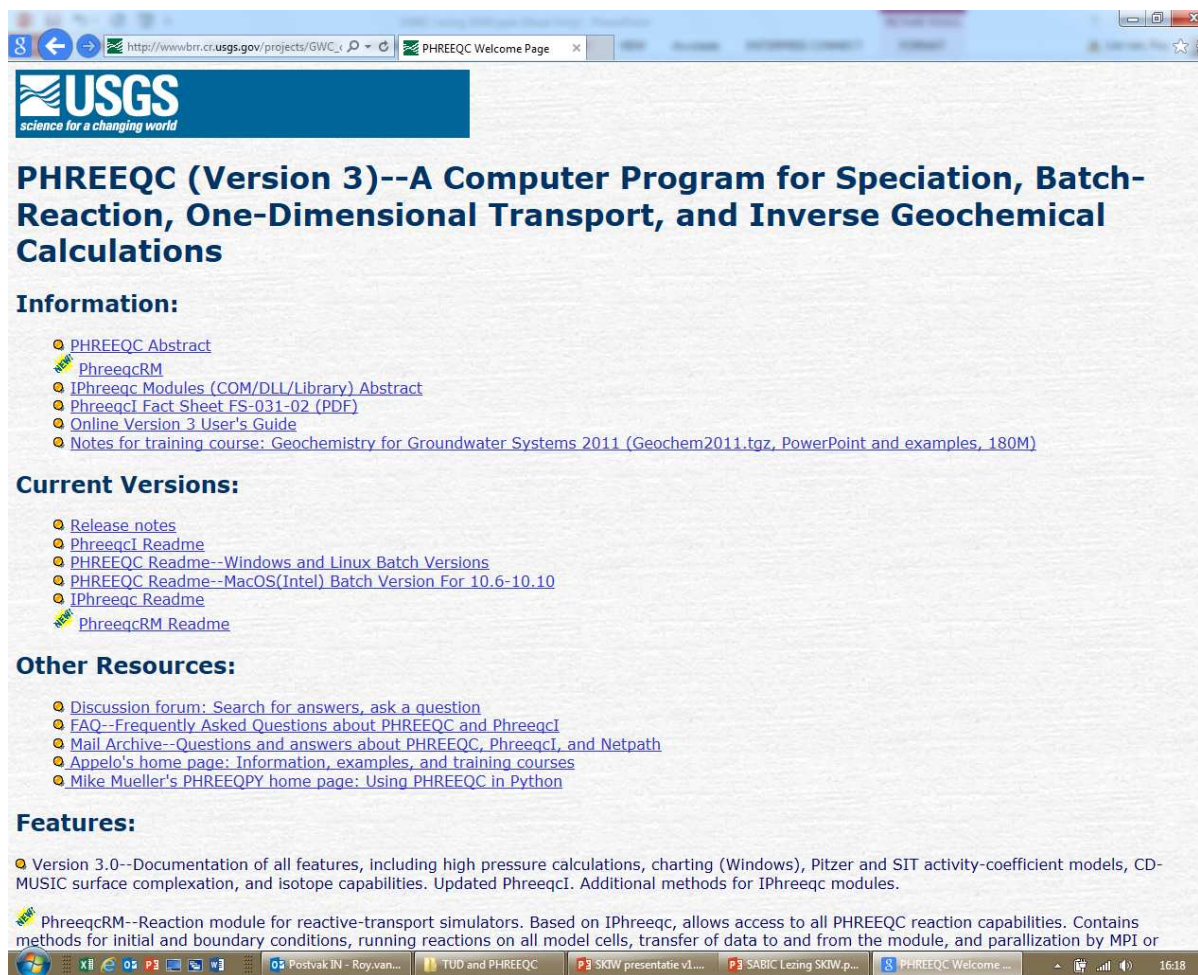


Interessant programma, maar met foutmelding in Excel sheet



USGS-PHREEQC

http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC_coupled/phreeqc/



The screenshot shows the PHREEQC Welcome Page on the USGS website. The page features the USGS logo and the title "PHREEQC (Version 3)--A Computer Program for Speciation, Batch-Reaction, One-Dimensional Transport, and Inverse Geochemical Calculations". It is organized into several sections:

- Information:**
 - PHREEQC Abstract
 - PhreeqcRM
 - IPhreeqc Modules (COM/DLL/Library) Abstract
 - PhreeqcI Fact Sheet FS-031-02 (PDF)
 - Online Version 3 User's Guide
 - Notes for training course: Geochemistry for Groundwater Systems 2011 (Geochem2011.tgz, PowerPoint and examples, 180M)
- Current Versions:**
 - Release notes
 - PhreeqcI Readme
 - PHREEQC Readme--Windows and Linux Batch Versions
 - PHREEQC Readme--MacOS(Intel) Batch Version For 10.6-10.10
 - IPhreeqc Readme
 - PhreeqcRM Readme
- Other Resources:**
 - Discussion forum: Search for answers, ask a question
 - FAQ--Frequently Asked Questions about PHREEQC and PhreeqcI
 - Mail Archive--Questions and answers about PHREEQC, PhreeqcI, and Netpath
 - Appelo's home page: Information, examples, and training courses
 - Mike Mueller's PHREEQPY home page: Using PHREEQC in Python
- Features:**
 - Version 3.0--Documentation of all features, including high pressure calculations, charting (Windows), Pitzer and SIT activity-coefficient models, CD-MUSIC surface complexation, and isotope capabilities. Updated PhreeqcI. Additional methods for IPhreeqc modules.
 - PhreeqcRM--Reaction module for reactive-transport simulators. Based on IPhreeqc, allows access to all PHREEQC reaction capabilities. Contains methods for initial and boundary conditions, running reactions on all model cells, transfer of data to and from the module, and parallization by MPI or



David Parkhurst
USGS



Dr. Tony Appelo
voorheen VU

USGS-PHREEQC

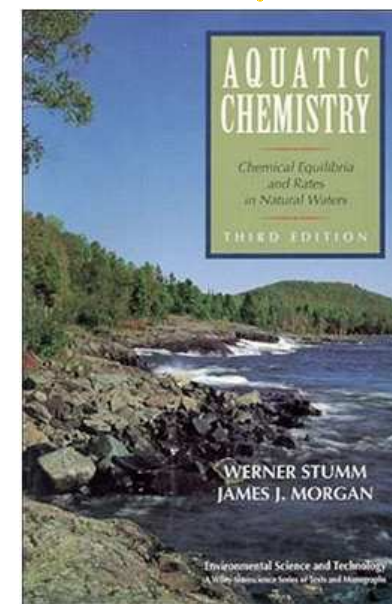
pH-redox-equilibrium calculations met geochemische inslag

- 25 elementen C Ca Mg Na etc.
- 21 oxidatietoestanden C(+4) C(-4) etc.
- 180 species C(+4): CO₂ HCO₃ CO₃ etc.
 C(-4): CH₄ etc.
- 72 vaste fasen CaCO₃ Fe(OH)₃ etc.
- 8 gasfasen CO₂ H₂S etc.
- + uitwisselingsevenwichten (ionenwisseling)
- + sorptie-evenwichten (actieve kool)
- + tijdseffecten (kinetiek)

8 databases



Fundamenteel raamwerk van Stumm & Morgan in digitale vorm



USGS-PHREEQC

Sinds 1983 beschikbaar, goed onderhouden

“Standaard” voor modellering van geochemische/hydrologische systemen binnen de academische wereld

Afgelopen jaren sterk uitgebreid op grond van behoeften fracking industrie

Transparant, aanpasbaar, ontwikkelbaar



Nog niet eerder gebruikt voor modellering van koelwatersystemen



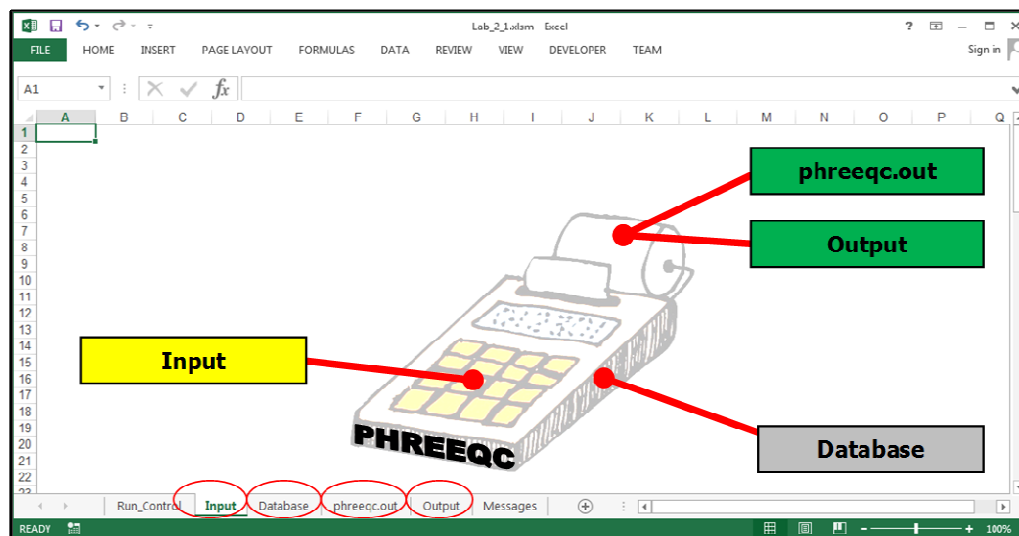
PHREEQCXCEL

PHREEQC lastig toegankelijk voor niet-ingewijden

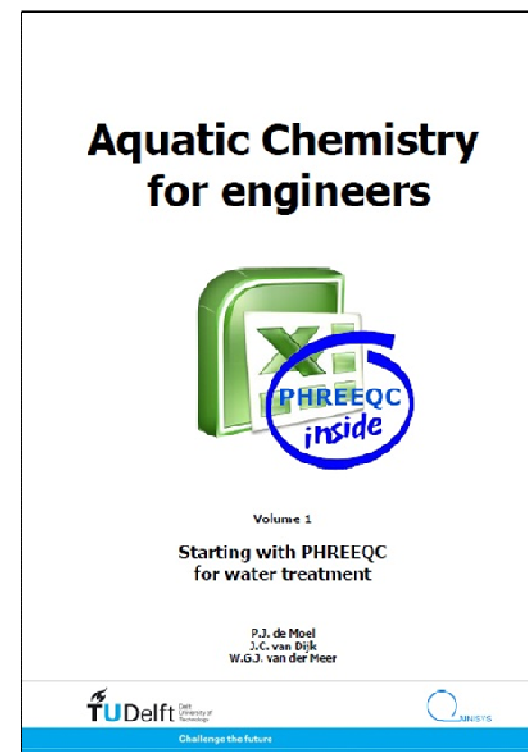


Microsoft Excel interface voor PHREEQC gemaakt door Peter de Moel *et al.*

Gebaseerd op IPhreeqcCOM en stimela.dat database



Basis voor nieuwe onderwijsmodules



BEREKENINGEN

SUPPLETIEWATER – GEGEVENS

Geleen site neemt t.h.v. Haven Stein Maaswater in uit Julianakanaal tussen Maastricht en Maasbracht

Kanaalwater wordt na flocculatie en zandfiltratie o.a. als suppletiewater voor koelwatersystemen gebruikt

Samenstelling van Maaswater is sterk seizoensafhankelijk – Maas is “regenrivier”

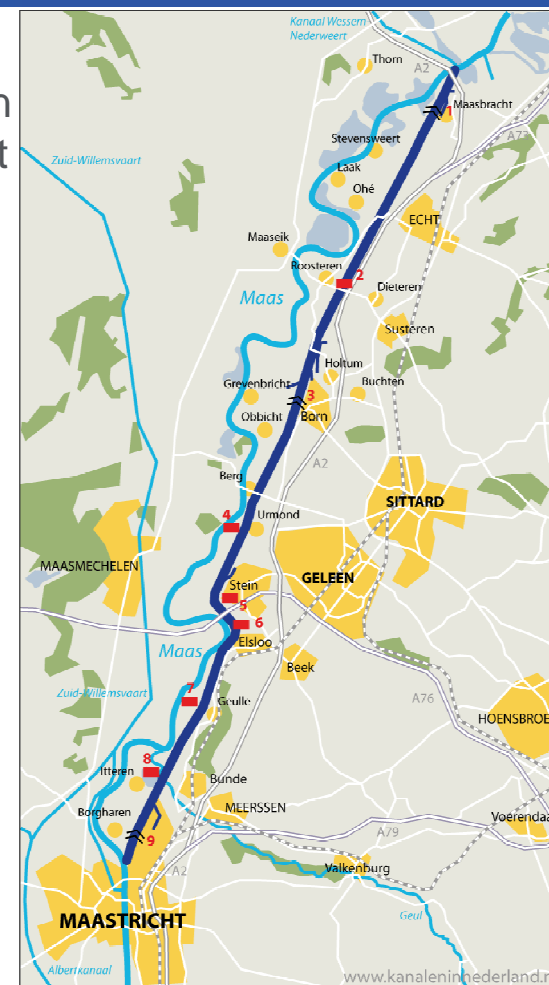
Maaswaterkwaliteit wordt door Rijkswaterstaat gemonitord t.h.v. Ponton Eijsden



Rijkswaterstaat
Ministerie van Infrastructuur en Milieu



<https://ssl.panoramio.com/photo/4709508>



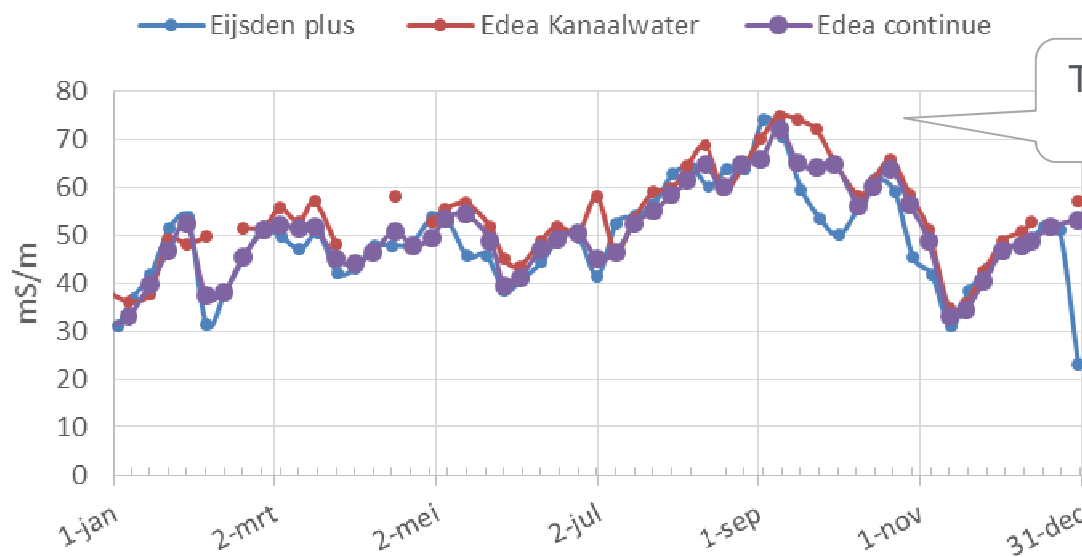
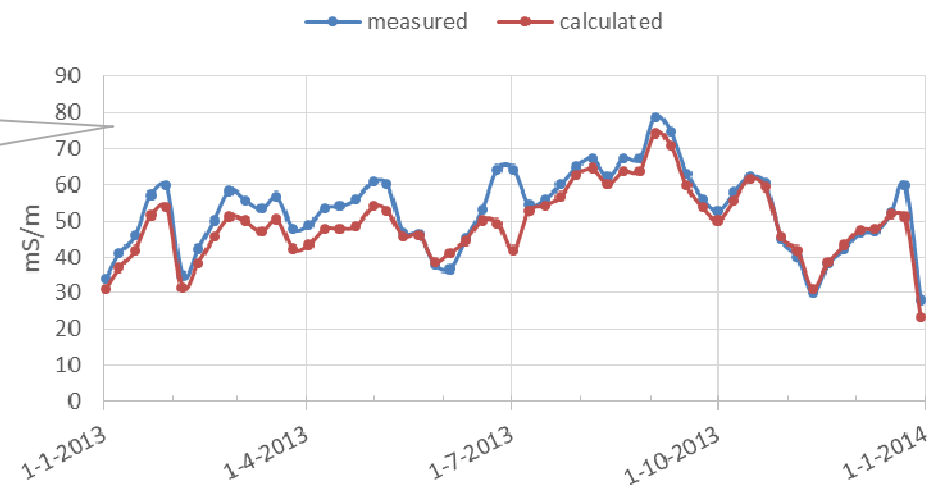
Gegevens beschikbaar via:

http://www.rijkswaterstaat.nl/water/waterdata_waterberichtgeving/watergegevens/

http://live.waterbase.nl/waterbase_wns.cfm?taal=nl

SUPPLETIEWATER – RESULTATEN PHREEQC BEREKENINGEN

Goede overeenkomst tussen berekende en gemeten specifieke geleidbaarheid



Tijdverschuiving watersamenstelling Maas-Julianakanaal herkenbaar



noot: analyses kanaalwater door Intertek voor EdeA, utility partner Geleen site

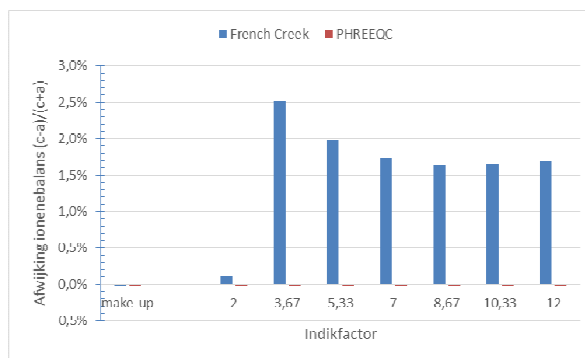
KOELWATER – INVOERGEGEVENS SUPPLETIEWATER

	SABIC waterfa.	EdeA online	RWS Eijsden	Case
2013	27-aug di	26-aug ma	27-aug di	27 aug di
CATIONS				
Calcium (as CaCO ₃)	212	208	191	212
Magnesium (as CaCO ₃)	40	20	36	40
Sodium (as Na)	-	-	40,4	40,4
Potassium (as K)	-	-	4,3	4,3
Iron (as Fe)	-	-	0,02	0,02
Ammonia (as NH ₃)	-	-	0,21	0,2
Aluminum (as Al)	-	-	0,02	0,02
Zinc (as Zn)	-	-	0,0032	0,0032
Boron (as B)	-	-	0,0411	0,0411
ANIONS				
Chloride (as Cl)	-	52	51,8	52
Sulfate (as SO ₄)	73	-	62,8	73
Acidity	-	-	-	-
"M" Alkalinity	132	192	177	132
"P" Alkalinity	-	-	-	-
Oxalate (as C ₂ O ₄)	-	-	-	-
Cyanide (as HCN)	-	-	< 0,001	-
Silica (as SiO ₂)	-	-	6,8	6,8
Phosphate (as PO ₄)	1	1,4	1,04	1
Pyrophosphate (PO ₄) (= totaal - ortho)	-	-	0,21	-
H ₂ S (as H ₂ S)	-	-	-	-
Fluoride (as F)	-	-	0,6	0,6
Nitrate (as NO ₃)	-	-	12,4	12,4
PARAMETERS				
pH	7,7	7,7	7,72	7,7
Temperature (°C)	-	18,7	20,9	20
Calculated TDS	-	-	-	-
Calculated Cond.	-	-	-	-
Suspended Solids(mg/L) = Turbidity (NTU)	1	0,17	< 5	1
98% Sulfuric Acid	-	-	-	-
Niet in French Creek				
Total Hardness	252	228	227	252
Electrical Conductivity 25C (measured) (uS/cm)	668	649	682	668
Oxygen	-	-	7,4	7,4
Barium	-	-	0,0248	0,0248
Strontium	-	-	0,223	0,223
Bromide	-	-	0,12	0,12
Density	-	-	-	0,9986

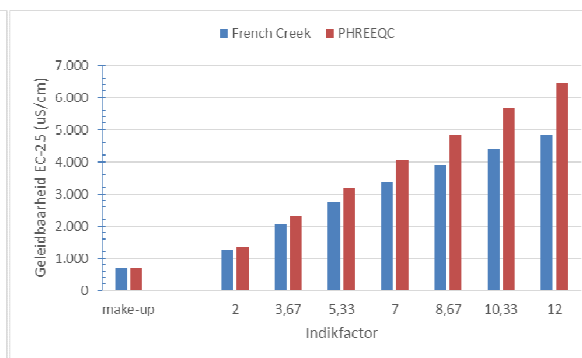
noot: concentraties
in ppm

KOELWATER – RESULTATEN VERGELIJKENDE BEREKENINGEN

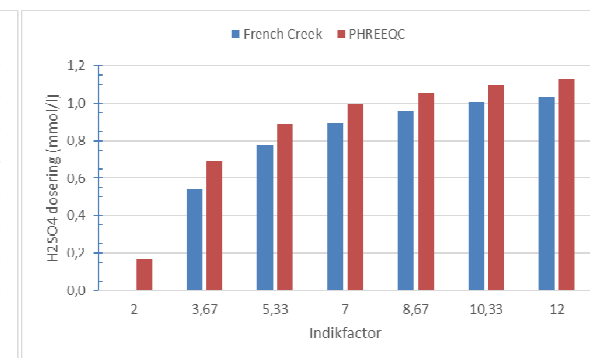
Ionenbalans



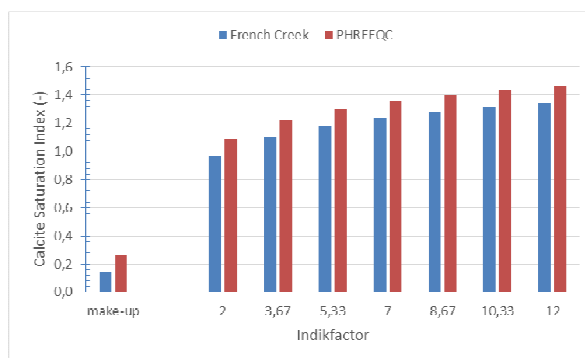
Geleidbaarheid



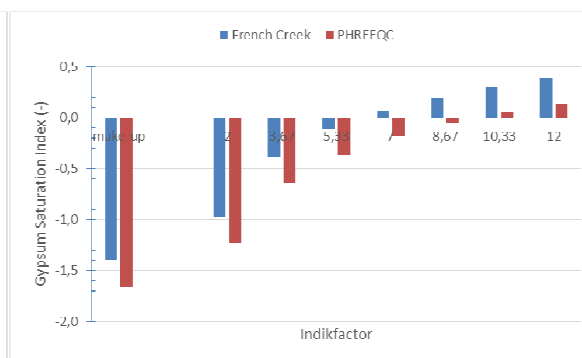
Zuurverbruik



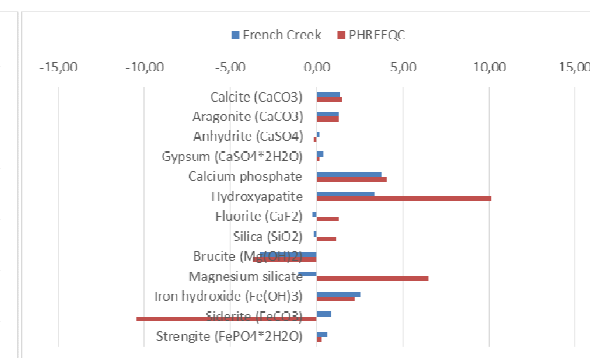
SI calciet



SI gips

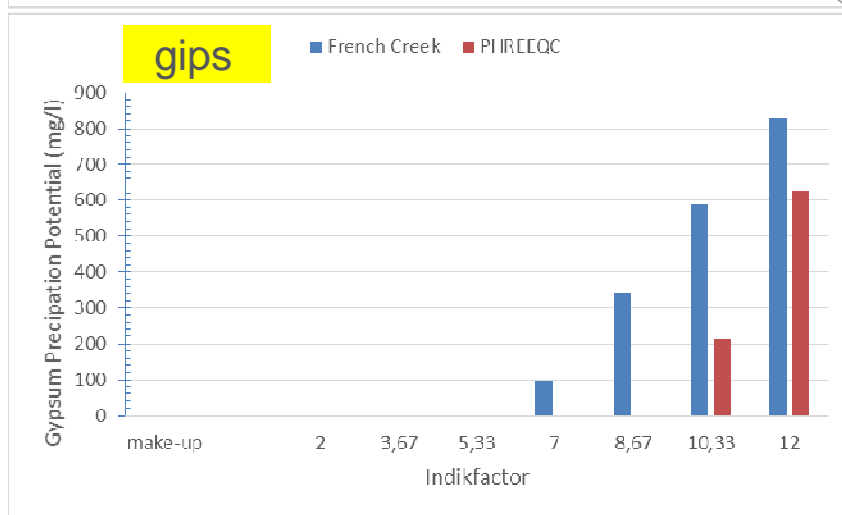
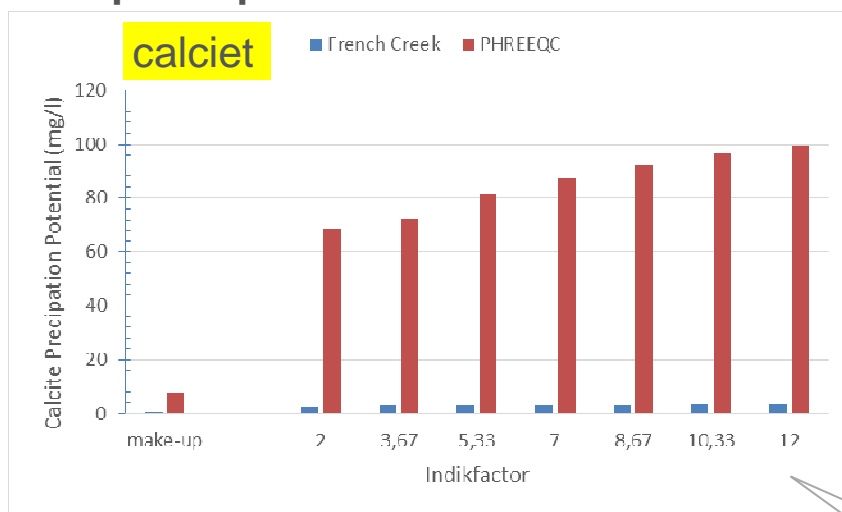


SI andere zouten



KOELWATER – RESULTATEN VERGELIJKENDE BEREKENINGEN

Precipitatiepotentieel



Alkaliteit

De default (Puckorius) relatie tussen pH en m-alkaliteit in WaterCycle® werkt niet voor SABIC koelwater

Waarom dit zo is wordt nader onderzocht



Momentary Excess berekeningen in WaterCycle® schieten hier ernstig te kort



Berekeningen in aanwezigheid van inhibitoren in voorbereiding

VERGELIJKING WaterCycle[®]-PHREEQC

Criteria	WaterCycle [®]	PHREEQC
Fundamentele rekenprincipes:		
• ionenassociatie	√	√
• activiteiten	√	√
• verzadigingsindices	√ (diverse verouderde)	X (via PHREEQXCEL uit te rekenen)
• precipitatiepotentieel	X (Momentary Excess)	√ (balansen over S/L/G fasen!)
Inzichtelijkheid, transparantie berekeningen en algorithmen	-	++
Aanpasbaarheid, uitbreidingsmogelijkheden	0	++
Gebruiksgemak	+	- (veel beter met PHREEQXCEL)
Kosten	--	++



Balans zeer positief voor PHREEQC/PHREEQXCEL

GEVOLGTREKKINGEN

CONCLUSIES, OPVOLGING – STUDIE

Met een verkennende SABIC-TU Delft-Intertek studie is aangetoond dat industriële koelwatersystemen chemisch gemodelleerd kunnen worden met open-source PHREEQC/PHREEQXCEL software

Het tot op heden meest gebruikte (commerciële) programma, French Creek Software WaterCycle[®], laat inhoudelijk op diverse fronten te wensen over



Vervolgonderzoeken en artikelen in voorbereiding

CONCLUSIES, OPVOLGING – BEDRIJFSVOERING

Door koppeling en nadere ontsluiting van beschikbare gegevens in een PHREEQC/PHREEQXCEL omgeving kan een hogere huismeesterschapstandaard voor koelwatersystemen bereikt worden

Of: door beter gebruik van gegevens kunnen significante water- en chemicaliënbesparingen in koelsystemen bereikt worden – los van evt. automatisering van doserings- en bewakingsapparatuur



Hoe e.e.a. concreet ingevuld kan worden voor SABIC fabrieken (om te beginnen in Geleen) dient nog nader uit te worden gewerkt

CONTACT

CONTACTGEGEVENS

Roy van Lier



SABIC
T&I Chemicals
Geleen

roy.van.lier@SABIC.com

tel. nr. 06 53 38 27 68

Peter de Moel



TU Delft
CITG
Water Management

p.j.demoel@tudelft.nl

tel. nr. 015 278 3347

Paul Bänziger



Intertek
MSS Chemicals
Geleen

paul.banziger@intertek.com

tel. nr. 06 10 94 72 46

Omnisys V.O.F.
Hoewelaken



info@omnisys.nl

tel. nr. 06 54 99 23 07