

## Dichtslibbende filters en vastlopende computers

*Drinkwaterbedrijven halen medicijnresten en andere verontreinigingen uit de bronnen voor ons drinkwater. De filters hiervoor verzadigen na verloop van tijd, maar na hoeveel tijd precies? Dat wil wateronderzoeksinstituut KWR Water graag modelleren. KWR kwam naar de Studiegroep Wiskunde met de Industrie voor hulp bij een vastlopende berekening.*

Ongeveer een derde van het Nederlandse drinkwater wordt bereid uit oppervlaktewater. Drinkwaterbedrijven gebruiken actievekoolfilters om water te zuiveren van pesticiden, medicijnresten en andere soorten microvervuiling. “We willen graag weten wanneer die filters vol zijn”, vertelt Dirk Vries. Hij is onderzoeker bij het team Drinkwater van KWR, het kennis- en onderzoeksinstituut voor de watersector. De organisatie ontwikkelt momenteel een model dat voorspelt hoe vol een filter is.

“Het onderwerp is actueel, in het nieuws zag ik laatst weer een bericht over het belang van het zuiveren van medicijnresten uit water. Het is leuk om in zo’n week te werken aan iets wat maatschappelijk zó relevant is”, aldus Karel Keesman, hoogleraar aan de WUR. Hij werkte tijdens de Studiegroep Wiskunde met de Industrie aan de vraag van KWR.

Een drinkwaterbedrijf produceert veel water, dus de actievekoolfilters die het gebruikt zijn ook groot. “Actieve kool zit in metersgrote bakken of in drukketels. Een ketel is dan snel vier meter hoog en anderhalf in doorsnee”, vertelt Vries om gevoel te geven voor de omvang. Actieve kool is een opgeschoonde vorm van koolstof met een fijne structuur, en daardoor een groot oppervlak. De vervuiling blijft in de poriën van de koolstofkorrels in het filter steken. Daarnaast plakt de vervuiling aan de koolstofatomen – vandaar de naam *actieve* kool. De filters raken uiteindelijk verzadigd: de drinkwaterbedrijven vervangen een deel van de actieve kool om de twee tot drie jaar. Het dichtslibben

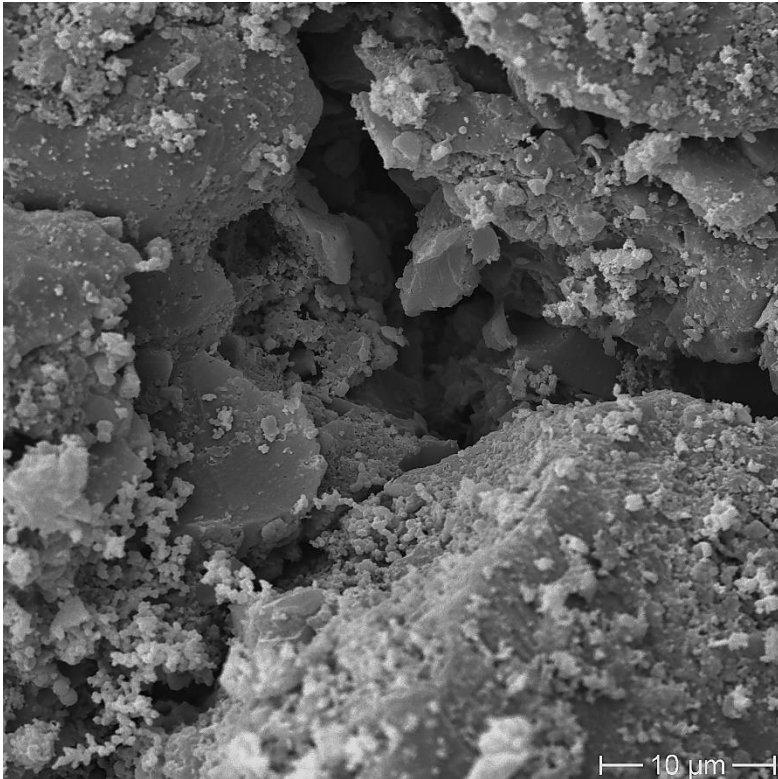
gebeurt met name door restjes organisch materiaal in het water, de concentraties van de andere stoffen zijn beduidend lager.



*Korrels actieve kool.*

Het model dat KWR ontwikkelt voorspelt hoe goed een actievekoolfilter vervuiling door de tijd heen adsorbeert. Daarmee kan ook worden bepaald wanneer een filter aan vervanging toe is. Bovendien kan bij vervuiling met een specifieke stof worden berekend hoe goed het filter deze stof uit het water haalt. “Dat laatste is belangrijk”, benadrukt Vries. “Soms moet een drinkwaterbedrijf een tijdje dicht wanneer er een stof in het oppervlaktewater belandt, enkel omdat we niet goed weten of de filters deze stof voldoende zuiveren. We hebben namelijk niet van alle soorten vervuiling zogeheten adsorptiekenmerken.” Dat is niet gek: er zijn immers honderdduizenden verschillende stoffen die in het oppervlaktewater terecht kunnen komen. “Daar komt bij dat het niet alleen om de stof zelf gaat, maar ook om de interactie met de andere stoffen in het water”, voegt Vries toe. “Soms heeft een combinatie van stoffen namelijk een negatief effect op de binding in het filter. Het omgekeerde komt ook voor:

een stof die zich juist beter aan het filter hecht door de aanwezigheid van organisch materiaal op het filter. Dat maakt het complex.”



*Microscopieopname van actieve kool. Beeld KWR.*

KWR verwacht de adsorptie van de filters beter te kunnen voorspellen door gebruik te maken van chemische families, stoffen die op elkaar lijken. “In ons model willen we pakweg 150 stoffen opnemen, die samen representatief zijn voor een veel grotere groep”, legt Vries uit. Bij het ontwikkelen van het model liep KWR echter tegen een rekenkundig probleem aan: de berekeningen liepen vast bij het doorrekenen van meerdere stoffen, of duurden eindelijk. “Hoe kan dat, en hoe lossen we het

op? Dat waren onze vragen aan de wiskundigen van de studiegroep”, zegt Vries.

Mia Jukic, promovendus in Leiden, deed mee aan de studiegroep. Zij koos voor de vraag van KWR, omdat die het best aansloot bij de wiskunde die zij in haar daagse leven ook doet. “KWR heeft een groot simulatiepakket, maar in de studieweek hebben we gewerkt met een vereenvoudigd model voor het zuiveren van slechts één stof”, vertelt Jukic. “Ons eerste doel was uitzoeken wat er in de berekeningen precies misging.”

Het eenvoudige model bestond uit twee partiële differentiaalvergelijkingen, die de toestand van het filter beschrijven. De eerste vergelijking beschrijft de concentratie in het water door de tijd heen. De tweede beschrijft de toestand van de kool zelf, namelijk de afname van het actieve oppervlak. Samen beschrijven die twee vergelijkingen het massatransport door het filter. Zo weet je hoe vol het filter is, waar de verontreiniging blijft steken en hoe lang het nog duurt voordat het filter een zogeheten doorbraak bereikt en er verontreiniging door het filter gaat lekken. Keesman: “Het eerste wat je probeert met zo’n set vergelijkingen is om ze expliciet op te lossen, rechttoe, rechtaan. Dat betekent dat je berekent wat er nú in het filter gebeurt op basis van wat er vlak daarvoor gebeurde.” Dat werkte zacht gezegd voor geen meter, de wiskundigen liepen tegen hetzelfde probleem aan als KWR. Keesman: “Het duurde uren om één component door te rekenen.” Jukic: “Het ging uiteindelijk mis doordat de oplossing van één van de vergelijkingen door 0 schiet: we kregen dan een negatieve concentratie vervuiling, wat natuurlijk niet kan. Om dat te vermijden koos het model steeds kleinere tijdstapjes, waardoor de berekening trager en trager werd.”

Het goede nieuws was dat de oorzaak van het probleem nu bekend was, maar daarmee waren de vergelijkingen nog niet opgelost. Nou zijn wiskundigen niet voor één gat te vangen. Want als van voor naar achter niet wil, dan probeer je een set partiële differentiaalvergelijkingen van achter naar voor op te lossen. Jukic: “Het was een logische stap, tijd voor de impliciete aanpak.”

“Dan hangt alles wat er nu gebeurt af van de toekomstige toestand”, legt Keesman uit. Maar ook deze methode liep vast. “Inmiddels waren we twee dagen verder. Mijn verwachting dat we de vergelijkingen wel in een dag zouden kraken, waren dus wat te optimistisch”, geeft Keesman toe. ’s Avonds, tijdens het gezamenlijke Studiegroepdiner, ging het gesprek verder – over wiskunde natuurlijk. “Tihomir Ivanov, een Bulgaarse wiskundige uit onze groep, stelde voor om het dan eens semi-impliciet te proberen”, aldus Keesman. Jukic: “Wanneer impliciet niet werkt, en expliciet ook niet, dan kan een combinatie van beide de oplossing zijn.”

“In de vergelijking met de concentratie in het water zat één niet-lineaire term, die voor het gedoe zorgde”, legt Jukic uit. “Die term losten we expliciet op, de rest impliciet.” Deze aanpak werkte, de berekeningen liepen nu soepeler. “Best blij”, antwoordt Jukic met een glimlach op de vraag hoe dat voelde. De groep visualiseerde de resultaten door grafiekjes te plotten van de vervuiling in het filter. Jukic: “KWR zal moeten kijken of de parameters allemaal kloppen, maar het verloop van de grafieken ziet er goed uit. Je ziet het filter vollopen en verzadigen.”

De resultaten van de groep gingen over het filteren van één stof uit het water. Tijd om het model uit te breiden naar meerdere stoffen was er niet. “Daar zal KWR zelf mee aan de slag moeten, maar ik zie geen reden om te denken dat deze oplossing voor meerdere componenten níet zou werken”, zegt Jukic. Ook Keesman verwacht dat de methode uit te breiden is naar meer stoffen.

Vries van KWR is tevreden met de uitkomst van de week. “Goed dat we hebben meegedaan. De wiskundigen waren zeer gemotiveerd, het was hartstikke leuk om met ze naar de wiskunde te kijken. En mooier nog, het is nu duidelijk waar het probleem zit en hoe we dat op kunnen lossen.” Vries kijkt er naar uit de oplossing te implementeren: “Ik heb er een goed gevoel bij.” De berekening is ook snel, en dat is belangrijk: “Uiteindelijk willen we toe naar een webapplicatie. Dan moet het model wel snel zijn, mensen willen niet lang hoeven wachten op de uitkomsten.” De

uitkomsten van de wiskundigen zijn mogelijk ook nog breder toepasbaar, voegt Vries nog toe, bijvoorbeeld voor het modelleren van filtering bij riool- of afvalwaterzuiveringen.

“Volgend jaar doe ik weer mee”, zegt Jukic, die voor het eerst meedeed aan de studieweek. “De sfeer is leuk, je ontmoet andere wiskundigen, en ik heb een inkijkje gekregen in wat bedrijven precies met wiskunde doen.” Keesman: “Het is fijn om in een week echt tot een oplossing te komen. Dat vind ik ook het goede aan de studieweek, dat je met wiskunde echt bij kan dragen. De wiskunde die we hebben gebruikt is niet superingewikkeld, maar je hebt wel wiskundigen nodig om tot een goede analyse te komen.”