

CONTRIBUȚII LA MODELAREA ȘI SIMULAREA INSTALAȚIILOR DE POTABILIZARE A APELOR DE SUPRAFAȚĂ

Teză destinată obținerii
titlului științific de doctor inginer
la
Universitatea "Politehnica" din Timișoara
în domeniul INGINERIE CHIMICĂ
de către

Ing. Cosmina–Mariana Militaru

Conducător științific:
Referenți științifici:

Prof. Univ. Dr. Ing. Teodor Todinca
Conf. Univ. Dr. Ing. Mircea Cristea
CS I Dr. Ing. Cecilia Savii
Conf. Univ. Dr. Ing. Florica Manea

Ziua susținerii tezei: 29.03.2013

Seriile Teze de doctorat ale UPT sunt:

- | | |
|------------------------|---|
| 1. Automatică | 7. Inginerie Electronică și Telecomunicații |
| 2. Chimie | 8. Inginerie Industrială |
| 3. Energetică | 9. Inginerie Mecanică |
| 4. Ingineria Chimică | 10. Știința Calculatoarelor |
| 5. Inginerie Civilă | 11. Știința și Ingineria Materialelor |
| 6. Inginerie Electrică | |

Universitatea „Politehnica” din Timișoara a inițiat seriile de mai sus în scopul diseminării expertizei, cunoștințelor și rezultatelor cercetărilor întreprinse în cadrul școlii doctorale a universității. Seriile conțin, potrivit H.B.Ex.S Nr. 14 / 14.07.2006, tezele de doctorat susținute în universitate începând cu 1 octombrie 2006.

Copyright © Editura Politehnica – Timișoara, 2013

Această publicație este supusă prevederilor legii dreptului de autor. Multiplicarea acestei publicații, în mod integral sau în parte, traducerea, tipărirea, reutilizarea ilustrațiilor, expunerea, radiodifuzarea, reproducerea pe microfilme sau în orice altă formă este permisă numai cu respectarea prevederilor Legii române a dreptului de autor în vigoare și permisiunea pentru utilizare obținută în scris din partea Universității „Politehnica” din Timișoara. Toate încălcările acestor drepturi vor fi penalizate potrivit Legii române a drepturilor de autor.

România, 300159 Timișoara, Bd. Republicii 9,
tel. 0256 403823, fax. 0256 403221
e-mail: editura@edipol.upt.ro

Cuvânt înainte

Teza de doctorat a fost elaborată pe parcursul activității prestate în perioada stagiului de doctorat la Facultatea de Chimie Industrială și Ingineria Mediului a Universității „Politehnica” din Timișoara.

Sincere mulțumiri însoțite de recunoștință și respect, se cuvin conducătorului de doctorat, domnului Prof. Dr. Ing. Teodor Todinca pentru îndrumarea competentă, dăruirea și încurajarea permanentă acordată în această perioadă de studiu.

De asemenea, doresc să aduc mulțumiri domnului Prof. Dr. Ing. Alain Liné și doamnei Prof. Dr. Ing. Ligia Barna din cadrul Universității “INSA” (Laboratoire d’Ingénierie des Procédés de l’Environnement) din Toulouse, Franța, pentru ajutorul acordat în ultimul an de doctorat.

Totodată, adresez mulțumiri doamnei Dr. Ing. Adina Păcală din cadrul firmei “AQUATIM” din Timișoara și doamnei Ș.I. Dr. Ing. Gabriela-Alina Dumitrel pentru ajutorul acordat pe parcursul întregii perioade de stagiou.

Îmi exprim întreaga considerație față de membrii comisiei de doctorat, domnului președinte al comisiei Prof. Dr. Ing. Nicolae Vaszilcsin, Universitatea „Politehnica” din Timișoara, domnului Conf. Dr. Ing. Mircea Cristea de la Universitatea “Babeș-Bolyai” din Cluj-Napoca, doamnei CS I Dr. Ing. Cecilia Savii de la Institutul de Chimie din Timișoara și doamnei Conf. Dr. Ing. Florica Manea de la Universitatea „Politehnica” din Timișoara, care au răspuns solicitării de a face parte din comisia de analiză a tezei și pentru timpul acordat analizei lucrării.

Sincere mulțumiri aduc colegilor mei, colaboratorilor și prietenilor care mi-au fost alături pe tot parcursul activității mele.

Nu în ultimul rând, cele mai alese gânduri de mulțumire și dragoste doresc să le acord cu acest prilej părinților mei Vasile și Sanda Militaru, fratelui și cumnatei mele Cristian și Gabriela Militaru, care mi-au fost alături și m-au susținut în toți acești ani.

ACKNOWLEDGMENT

Această lucrare a fost parțial finanțată din contractul POSDRU/88/1.5/S/50783, proiect strategic ID 50783 (2009), cofinanțat din Fondul Social European – Investește în Oameni, prin Programul Operațional Sectorial Dezvoltarea Resurselor Umane 2007 – 2013.

Timișoara, Martie 2013

Cosmina - Mariana Militaru

Părinților mei

Militaru, Cosmina-Mariana

Contribuții la modelarea și simularea instalațiilor de potabilizare a apelor de suprafață

Teze de doctorat ale UPT, Seria 4, Nr. 72, Editura Politehnica, 2013, 146 pagini, 79 figuri, 21 tabele.

ISSN:1842-8223

ISBN:978-606-554-653-0

Cuvinte cheie:

apă de suprafață, apă potabilă, distribuția duratelor de staționare, Matlab, Ansys Fluent (CFD), distribuția mărimii particulelor, sulfatul de aluminiu, numărul particulelor, modelul Argaman-Kauffman.

Rezumat:

Obiectivul principal al tezei a fost modelarea și simularea unei stații pilot de tratare a apei de suprafață din Timișoara. În vederea îndeplinirii obiectivului urmărit, cercetările experimentale s-au cristalizat pe următoarele direcții:

- dezvoltarea și validarea unor modele matematice privind hidrodinamica unei stații pilot de tratare a apei de suprafață prin determinarea distribuției duratelor de staționare pentru echipamentele principale ale unității (Matlab);
- modelarea hidrodinamicii echipamentelor stației pilot cu mediul de programare ANSYS Fluent 14.0 (CFD);
- determinarea distribuției mărimii particulelor dintr-o suspensie sintetică bazată pe particule de bentonită, suspensie care întrunește caracteristici asemănătoare cu cele ale unei ape tipice de suprafață (râul Bega), în timpul procesului de coagulare-floculare;
- deducerea numărului de particule în funcție de distribuția mărimii particulelor pentru același sistem de particule coloidale;
- estimarea constantelor de floculare ale modelului Argaman-Kauffman pentru suspensia bazată pe particule de bentonită.

Luând în considerare conținutul și modul de tratare al obiectivelor stabilite, prelucrarea datelor experimentale, lucrarea de față abordează tema propusă din punct de vedere al ingineriei chimice, urmărind îmbunătățirea performanțelor stației pilot de tratare a apei din Timișoara.

CUPRINS

NOTAȚII, ABREVIERI, ACRONIME	8
LISTA DE TABELE	9
LISTA DE FIGURI	10
INTRODUCERE	15
OBIECTIVELE LUCRĂRII	16
PARTEA I. STADIUL ACTUAL AL CUNOAȘTERII ÎN DOMENIU	17
<i>Capitol 1. Considerații generale privind obținerea apei potabile</i>	17
1.1. Introducere	17
1.2. Surse de alimentare cu apă și caracteristici calitative	18
1.2.1. Surse de apă de suprafață	18
1.2.2. Surse de apă subterană	20
1.3. Calitatea apelor naturale	22
1.4. Tratarea apei	26
1.4.1. Tehnologii de tratare a apei	27
1.4.1.1. Tehnologii de tratare a apei de suprafață	27
1.4.1.2. Tehnologii de tratare a apei subterane	29
1.4.2. Procese de tratare	30
1.4.2.1. Reținerea pe grătare și site	30
1.4.2.2. Deznisiparea (presedimentarea)	31
1.4.2.3. Coagularea	32
1.4.2.3.1. Teoria procesului de coagulare	32
1.4.2.3.2. Mecanismele coagulării	33
1.4.2.3.3. Factori care influențează procesul de coagulare-floculare	36
1.4.2.3.4. Agenți de coagulare-floculare	41
1.4.2.3.4.1. Sulfatul de aluminiu [Al ₂ (SO ₄) ₃]	41
1.4.2.3.4.2. Policlorura bazică de aluminiu (PAC)	42
1.4.2.3.4.3. Clorura ferică (FeCl ₃)	43
1.4.2.3.5. Stabilitatea sistemului coloidal	44
1.4.2.3.6. Distribuția mărimii particulelor	46
1.4.2.4. Flocularea	47

1.4.2.5. Sedimentarea	49
1.4.2.6. Filtrarea	49
1.4.2.7. Dezinfecția	50
PARTEA A II-A. STUDII TEORETICE ȘI EXPERIMENTALE	52
Capitol 2. Modelarea și simularea proceselor chimice	52
2.1. Introducere	52
2.2. Matlab	53
2.2.1. Distribuția duratelor de staționare (DDS)	54
2.3. Dinamica computerizată a fluidelor (CFD)	59
2.3.1. Regim de curgere turbulent	61
2.3.2. Model de turbulență k-ε	64
Capitol 3. Modelarea hidrodinamicii unei stații pilot de tratare a apei de suprafață cu mediul de programare Matlab	67
3.1. Introducere	67
3.2. Descrierea stației pilot	68
3.3. Descrierea modelelor hidrodinamice	70
3.4. Metode experimentale	73
3.5. Rezultate experimentale	74
3.5.1. Comportarea hidrodinamică a unei stații pilot de tratare a apei de suprafață folosind experimente DDS bazate pe semnal impuls la diferite debite de apă brută	74
3.5.1.1. Evaluarea parametrilor hidrodinamici pentru camera de amestec și conductă	74
3.5.2. Comportarea hidrodinamică a unei stații pilot de tratare a apei de suprafață folosind experimente DDS bazate pe semnal treaptă la diferite debite de apă brută	84
3.5.2.1. Evaluarea parametrilor hidrodinamici pentru camera de reacție și decantor	84
3.5.3. Validarea modelelor hidrodinamice	88
3.6. Concluzii	90
Capitol 4. Modelarea hidrodinamicii unei stații pilot de tratare a apei de suprafață cu mediul de programare ANSYS FLUENT 14.0 (CFD)	91
4.1. Introducere	91
4.2. Descrierea echipamentelor	92

4.3. Distribuția duratelor de staționare (DDS)	94
4.4. Mediul de programare ANSYS Fluent (CFD)	94
4.5. Dezvoltarea modelelor în CFD	96
4.5.1. Camera de amestec și conductele aferente	96
4.5.2. Floculatorul hidraulic	98
4.6. Rezultate experimentale	99
4.7. Concluzii	106
Capitol 5. Evoluția distribuției mărimii particulelor coloidale dintr-o suspensie în timpul procesului de coagulare-floculare	107
5.1. Introducere	107
5.2. Compoziția și stabilitatea suspensiei	108
5.3. Doza optimă de coagulant (Jar-test)	113
5.4. Metoda de difuziune a luminii – măsurarea dimensiunii particulelor	115
5.5. Rezultate experimentale	117
5.6. Concluzii	126
Capitol 6. CONCLUZII GENERALE ȘI CONTRIBUȚII PERSONALE	127
BIBLIOGRAFIE	130
ARTICOLE PUBLICATE	143

NOTAȚII, ABREVIERI, ACRONIME

NTPA	normativ tehnic de potabilizare a apelor
MON	materie organică naturală
COD	carbon organic dizolvat
CMA	concentrație maximă admisă
COT	carbon organic total
UV	radiații ultraviolete
UNT	unități nefelometrice de turbiditate
PDA	analizor fotometric de dispersie a luminii
PAC	policlorura bazică de aluminiu
DDS	distribuția duratelor de staționare
CFD	dinamica computerizată a fluidelor (Computational Fluid Dynamics)
RANS	ecuația Reynolds Navier-Stokes de mediere a timpului (Reynolds Averaged Navier-Stokes equation)
LES	simulare cu vârtejuri mari (Large Eddy Simulation)
P.I.V.	metodă de vizualizare a vitezei particulelor (Particle Image Velocimetry)
RNG	modelul $k-\varepsilon$ renormalizat
PVC	policlorura de vinil
CC	modelul Cholette-Cloutier
Pe	număr Peclet
rpm	rotații pe minut
UDF	funcție definită de utilizator (user-defined function)
UDS	scalar definit de utilizator (user-defined scalar)

LISTA DE TABELE

Tabel 1.1.	Caracteristicile surselor de apă.
Tabel 1.2.	Impurități întâlnite în apele naturale.
Tabel 1.3.	Parametrii microbiologici.
Tabel 1.4.	Parametrii chimici.
Tabel 1.5.	Parametrii indicatori.
Tabel 1.6.	Fazele procesului de agregare a coloizilor.
Tabel 3.1.	Valori număr Peclet pentru conductă la diferite debite de apă brută.
Tabel 3.2.	Volum apă brută în decantor.
Tabel 4.1.	Planul schematic al camerei de amestec.
Tabel 4.2.	Nivelul de lichid pentru echipamentele de coagulare-floculare.
Tabel 4.3.	Planul schematic al floculatorului hidraulic.
Tabel 4.4.	Precizia modelării în CFD (timp de staționare în secunde).
Tabel 4.5.	Valori medii ale gradului de disipare a energiei pentru camera de amestec.
Tabel 4.6.	Precizia modelării în CFD pentru floculatorul hidraulic (125 m ³ /h).
Tabel 4.7.	Rădăcina medie a gradului de disipare a energiei pentru floculator.
Tabel 5.1.	Proprietăți ale substanțelor.
Tabel 5.2.	Compoziția suspensiei.
Tabel 5.3.	Valori finale ale parametrilor fizico-chimici.
Tabel 5.4.	Valorile parametrilor măsurați după jar-test.
Tabel 5.5.	Valorile caracteristicilor hidrodinamice ale jarului.
Tabel 5.6.	Valorile dispozitivului de control al pompei.

LISTA DE FIGURI

- Figura 1.1.** Schema tehnologică de tratare convențională a apelor de suprafață.
- Figura 1.2.** Schema convențională de tratare a unei ape de suprafață provenită dintr-o sursă cu variații sezoniere.
- Figura 1.3.** Schema de tratare a apei de suprafață cu filtrare directă.
- Figura 1.4.** Schema de tratare a apei de suprafață cu coagulare pe filtre.
- Figura 1.5.** Scheme tehnologice de tratare a apei subterane.
- Figura 1.6.** Reprezentarea schematică a modelului tip punte pentru destabilizarea particulelor coloidale cu polimeri.
- Figura 1.7.** Ansamblul reacțiilor în mecanismele de coagulare:
A=Coprecipitare; B=Adsorbție; C=Neutralizarea sarcinilor/Destabilizare; D=Complexare/Precipitare.
- Figura 1.8.** Încărcarea electrică a coloizilor.
- Figura 1.9.** Destabilizarea și agregarea particulelor.
- Figura 2.1.** Determinarea experimentală a distribuției duratelor de staționare (t este timpul, iar C_t este concentrația traserului).
- Figura 2.2.** Metode des utilizate pentru injecția unui traser într-un sistem.
- Figura 2.3.** Concentrația traserului la ieșire din sistem în funcție de timp.
- Figura 2.4.** Semnificația funcției $E(t)$.
- Figura 2.5.** Exemplu de funcție de repartiție integrală: 50% din moleculele de traser au staționat în reactor 40 de secunde.
- Figura 2.6.** Model de reactoare în serie.
- Figura 2.7.** Dispersia traserului într-un reactor de tip piston cu dispersie axială.
- Figura 3.1.** Diagrama procesului de tratare a râului Bega din stația pilot.
- Figura 3.2.** Camera de amestec.
- Figura 3.3.** Camera de reacție.
- Figura 3.4.** Decantor longitudinal.
- Figura 3.5.** Model Cholette-Cloutier: model de amestecare reală care conține zone stagnante.

- Figura 3.6.** Rezultate experimentale 1 versus simulare pentru camera de amestec la 125 m³/h. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,13$ și $\beta = 0,058$.
- Figura 3.7.** Rezultate experimentale 2 versus simulare pentru camera de amestec la 125 m³/h. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,13$ și $\beta = 0,058$.
- Figura 3.8.** Rezultate experimentale 3 versus simulare pentru camera de amestec la 125 m³/h. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,13$ și $\beta = 0,058$.
- Figura 3.9.** Rezultate experimentale medii versus simulare pentru camera de amestec la 125 m³/h. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,13$ și $\beta = 0,058$.
- Figura 3.10.** Rezultate experimentale 1 versus simulare pentru camera de amestec la 145 m³/h. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,12$ și $\beta = 0,041$.
- Figura 3.11.** Rezultate experimentale 2 versus simulare pentru camera de amestec la 145 m³/h. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,12$ și $\beta = 0,041$.
- Figura 3.12.** Rezultate experimentale 3 versus simulare pentru camera de amestec la 145 m³/h. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,12$ și $\beta = 0,041$.
- Figura 3.13.** Rezultate experimentale medii versus simulare pentru camera de amestec la 145 m³/h. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,12$ și $\beta = 0,041$.
- Figura 3.14.** Rezultate experimentale 1 versus simulare pentru camera de amestec la 180 m³/h. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,075$ și $\beta = 0,0081$.
- Figura 3.15.** Rezultate experimentale 1 pentru conductă la 125 m³/h. Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 9193$.
- Figura 3.16.** Rezultate experimentale 2 pentru conductă la 125 m³/h. Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 11952$.
- Figura 3.17.** Rezultate experimentale 3 pentru conductă la 125 m³/h. Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 10943$.
- Figura 3.18.** Rezultate experimentale medii pentru conductă la 125 m³/h.

- Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 10772$.
- Figura 3.19.** Rezultate experimentale 1 pentru conductă la $145 \text{ m}^3/\text{h}$. Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 7803$.
- Figura 3.20.** Rezultate experimentale 2 pentru conductă la $145 \text{ m}^3/\text{h}$. Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 9300$.
- Figura 3.21.** Rezultate experimentale 1 pentru conductă la $180 \text{ m}^3/\text{h}$. Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 8570$.
- Figura 3.22.** Rezultate experimentale versus simulare pentru camera de reacție la $125 \text{ m}^3/\text{h}$. Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 156$.
- Figura 3.23.** Rezultate experimentale versus simulare pentru camera de reacție la $145 \text{ m}^3/\text{h}$. Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 674$.
- Figura 3.24.** Rezultate experimentale versus simulare pentru camera de reacție la $180 \text{ m}^3/\text{h}$. Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 1323$.
- Figura 3.25.** Număr Peclet funcție de debitul apei brute pentru camera de reacție.
- Figura 3.26.** Rezultate experimentale versus simulare pentru decantor la $125 \text{ m}^3/\text{h}$. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,2$ și $\beta = 0,15$.
- Figura 3.27.** Rezultate experimentale versus simulare pentru decantor la $145 \text{ m}^3/\text{h}$. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,2$ și $\beta = 0,15$.
- Figura 3.28.** Rezultate experimentale versus simulare pentru decantor la $180 \text{ m}^3/\text{h}$. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,2$ și $\beta = 0,15$.
- Figura 3.29.** Camera de amestec și conducta către camera de reacție: rezultate experimentale versus predicțiile modelelor la $145 \text{ m}^3/\text{h}$.
- Figura 3.30.** Camera de reacție și decantor: rezultate experimentale versus predicțiile modelelor la $145 \text{ m}^3/\text{h}$.
- Figura 4.1.** Diagrama echipamentelor de coagulare-floculare: camera de amestec și camera de reacție.

- Figura 4.2.** Poziția planurilor create în CFD pentru floclatorul hidraulic.
- Figura 4.3.** Vedere de ansamblu a echipamentelor în DesignModeler: 1 – conducta de alimentare; 2 – camera de amestec; 3 – conducta de legătură.
- Figura 4.4.** Discretizarea camerei de amestec, conductei de alimentare și conductei de legătură.
- Figura 4.5.** Discretizarea floclatorului hidraulic.
- Figura 4.6.** Profil de viteză pentru camera de amestec și conducta de legătură la 125 m³/h.
- Figura 4.7.** Profil de viteză pentru camera de amestec și conducta de legătură la 180 m³/h.
- Figura 4.8.** Profil de trasor pentru camera de amestec și conducta de legătură la 95 de secunde pentru 125 m³/h.
- Figura 4.9.** Profil de trasor pentru camera de amestec și conducta de legătură la 85 de secunde pentru 180 m³/h.
- Figura 4.10.** Ieșire din camera de amestec: date experimentale versus predicțiile CFD pentru 125 și 180 m³/h.
- Figura 4.11.** Ieșire din conducta de legătură: date experimentale versus predicțiile CFD pentru 125 și 180 m³/h.
- Figura 4.12.** Profil de viteză pentru floclatorul hidraulic la 125 m³/h.
- Figura 4.13.** Profil de trasor la 1230 de secunde pentru floclatorul hidraulic, la 125 m³/h.
- Figura 4.14.** Ieșire din floclator: date experimentale versus predicțiile CFD.
- Figura 5.1.** A. Rotor axial – A315 Lightnin; B. Rezervor standard de amestecare de 70 L.
- Figura 5.2.** Granulometru Malvern Mastersizer 2000.
- Figura 5.3.** Evoluția în timp a pH-ului, COD, turbidității inițiale și d₅₀.
- Figura 5.4.** Distribuția mărimii particulelor primare (% vol.) (romb gol în figura 5.9; d₅₀= 13,45 μm).
- Figura 5.5.** Numărul de particule în funcție de diametrul particulelor primare.
- Figura 5.6.** Turbiditatea reziduală funcție de doza de coagulant.
- Figura 5.7.** Distribuția mărimii particulelor în procente de volum la 150 rpm după 2 minute de amestecare (cerc plin în figura 5.9;

- $d_{50} = 79,5 \mu\text{m}$).
- Figura 5.8.** Numărul de particule în funcție de diametru la 150 rpm după 2 minute de amestecare.
- Figura 5.9.** Evoluția valorii parametrului d_{50} în timpul procesului de coagulare-floculare.
- Figura 5.10.** Distribuția mărimii particulelor (% vol.) la d_{50} maxim (punct 1 în figura 5.9; $d_{50} = 165,4 \mu\text{m}$).
- Figura 5.11.** Numărul de particule în funcție de diametru la d_{50} maxim.
- Figura 5.12.** Distribuția mărimii particulelor (% vol.) la 45 rpm (punct 2 în figura 5.9; $d_{50} = 70,7 \mu\text{m}$).
- Figura 5.13.** Numărul de particule în funcție de diametru la 45 rpm.
- Figura 5.14.** Distribuția mărimii particulelor (% vol.) la 90 rpm (punct 3 în figura 5.9; $d_{50} = 55,6 \mu\text{m}$).
- Figura 5.15.** Numărul de particule în funcție de diametru la 90 rpm.
- Figura 5.16.** Distribuția mărimii particulelor (% vol.) la 150 rpm (punct 4 în figura 5.9; $d_{50} = 34,9 \mu\text{m}$).
- Figura 5.17.** Numărul de particule în funcție de diametru la 150 rpm.
- Figura 5.18.** Dimensiunea particulelor versus gradient de viteză.
- Figura 5.19.** Validarea modelului de floculare Argaman-Kauffman.

INTRODUCERE

Apa este un element esențial atât pentru existența și evoluția materiei vii cât și pentru dezvoltarea societății umane. Problematika tratării apei din punct de vedere calitativ și cantitativ este foarte importantă pentru sănătatea publică din cauza relației dintre calitatea și cantitatea de apă disponibilă pentru populație.

Procesele de tratare a apei în vederea potabilizării sunt alese în funcție de calitatea sursei de apă, de costul operării și al întreținerii. Calitatea apei este dată de totalitatea substanțelor minerale sau organice, a gazelor dizolvate, de particulele în suspensie și organismele vii prezente în apă.

Una din cele mai importante probleme în potabilizarea apelor de suprafață este conținutul ridicat în substanțe coloidale cu o masă specifică aproape de cea a apei și care rămân în suspensie o perioadă lungă de timp. Îndepărtarea coloizilor din apă se realizează prin coagulare-floculare, procese importante într-o stație de tratare a apei.

Rolul unei stații de tratare a apei este de a prelucra apele provenite din diferite surse de apă naturală prin diverse construcții și instalații, realizând astfel un lanț de procese (un flux tehnologic continuu) prin care, în final, apa trimisă la consumator să fie încadrată în normele de potabilitate. Abordarea tradițională a instalațiilor de tratare se bazează pe observații, experimente și măsurători. Cantitatea de informații care poate fi obținută în acest mod este limitată și supusă erorilor de măsurare. În instalațiile de tratare automatizate se poate realiza un studiu analitic sau de optimizare, pe baza unui model matematic adecvat. Prin folosirea simulării în asociere cu monitorizarea on-line, operațiunea de tratare a apei poate fi îmbunătățită, ducând la o calitate mai bună și mai stabilă a apei, o utilizare mai bună a infrastructurii instalate și costuri mai mici.

De aici a apărut ideea temei prezentei lucrări, cercetările și studiile efectuate referindu-se la modelarea și simularea unei stații pilot de tratare a apei de suprafață din Timișoara cu ajutorul a două medii de programare, Matlab și ANSYS Fluent (CFD). Pentru a simula comportamentul particulelor coloidale prezente în apele naturale s-a preparat o suspensie bazată pe particule de bentonită, suspensie ale cărei caracteristici principale au fost foarte apropiate de cele ale unei ape tipice de suprafață (râul Bega). Îndepărtarea particulelor coloidale din suspensie s-a realizat prin coagulare-floculare. Parametrul măsurat a fost dimensiunea medie a particulelor, d_{50} , deoarece acesta oferă informații despre natura particulelor din apă și este unul din factorii responsabili de stabilitatea coloizilor dispersați în apă.

Luând în considerare conținutul și modul de tratare al obiectivelor stabilite, prelucrarea datelor experimentale, lucrarea de față abordează tema propusă din punct de vedere al ingineriei chimice, urmărind îmbunătățirea performanțelor stației pilot de tratare a apei din Timișoara.

OBIECTIVELE LUCRĂRII

Principalele obiective ale lucrării sunt următoarele:

1. Analiza și alegerea soluțiilor adecvate privind modelarea matematică și simularea numerică a proceselor de tratare a apei în vederea potabilizării.
2. Dezvoltarea și validarea unor modele matematice privind hidrodinamica unei stații pilot de tratare a apei de suprafață prin determinarea distribuției duratelor de staționare (DDS) pentru echipamentele principale ale unității.
3. Modelarea hidrodinamicii echipamentelor stației pilot cu mediul de programare ANSYS Fluent 14.0 (CFD).
4. Determinarea distribuției mărimii particulelor dintr-o probă sintetică bazată pe particule de bentonită, suspensie care întrunește caracteristici asemănătoare cu cele ale unei ape tipice de suprafață (râul Bega), în timpul procesului de coagulare-floculare.
5. Deducerea numărului de particule în funcție de distribuția mărimii particulelor pentru același sistem de particule coloidale.
6. Estimarea constantelor de floculare ale modelului Argaman-Kauffman pentru suspensia bazată pe particule de bentonită.

PARTEA I. STADIUL ACTUAL AL CUNOAȘTERII ÎN DOMENIU

Capitol 1. Considerații generale privind obținerea apei potabile

1.1. Introducere

Apa este substanța cea mai răspândită de pe suprafața globului și constituie un element esențial atât pentru existența și evoluția materiei vii, cât și pentru dezvoltarea societății umane. Apa este în același timp și factorul de mediu cel mai expus poluării în circuitul ei din natură din cauze naturale sau în urma activităților umane.

În organism, apa intră în compoziția organelor, țesuturilor și lichidelor biologice. Rolul apei este de a dizolva și transporta substanțele asimilate și dezasimilate, de a menține constantă concentrația sărurilor în organism și de a lua parte la reglarea temperaturii prin evaporare pe suprafața corpului. În procesul de fotosinteză, apa are o importanță deosebită și totodată contribuie și la fenomenele osmotice din plante [1].

Pentru a nu aduce prejudicii sănătății, apa destinată consumului uman nu trebuie să conțină substanțe chimice sau microorganisme dăunătoare sănătății. Apa trebuie să aibă o compoziție echilibrată și satisfăcătoare în săruri minerale și oligo-elemente, necesare metabolismului [2, 3].

În România, condițiile pe care trebuie să le satisfacă o apă pentru a avea calitatea de "apă potabilă" sunt reglementate de Legea nr. 311/2004 care completează Legea nr. 458/2002 și, care adoptă și particularizează Directiva 98/83/EC. Aceste condiții sunt:

- să fie lipsită de microorganisme, paraziți sau substanțe care prin număr sau concentrație pot constitui un potențial pericol pentru sănătatea umană;
- să fie limpede, incoloră, fără miros sau gust deosebit;
- să aibă temperatura cuprinsă între 7°C și 15°C și să nu varieze mult în timpul anului;
- să nu conțină materii străine în suspensie sau germeni patogeni;
- să conțină aer și CO₂ în soluție;
- substanțele dizolvate raportate la un litru trebuie să se încadreze între anumite limite [4-6].

Conform legii nr. 458/2002, prin apa potabilă destinată consumului uman se înțelege:

- orice tip de apă în stare naturală sau după tratare folosită pentru băut, la prepararea hranei sau în alte scopuri casnice, indiferent de originea ei și indiferent dacă este furnizată prin rețea de distribuție, din rezervor sau este distribuită în sticle ori în alte recipiente;
- toate tipurile de apă folosite ca sursă în industria alimentară pentru fabricarea, procesarea, conservarea sau comercializarea produselor ori substanțelor destinate consumului uman;

- apa provenită din surse locale precum fântâni, izvoare etc., folosită pentru băut, gătit sau în alte scopuri casnice [4].

Raportat la numărul de locuitori, consumul zilnic de apă potabilă este mare deoarece aceasta nu se utilizează numai pentru băut ci și în cadrul activităților casnice, al serviciilor publice și în industria alimentară. Cu toate acestea, apa potabilă are ponderea cea mai mică din consumul total de apă. O dată cu dezvoltarea urbanizării și creșterilor gradului de industrializare a economiei au crescut și livrările și consumul de apă potabilă [7].

Toată apa distribuită consumatorilor prin sistemele de distribuție trebuie tratată chiar dacă numai o mică parte din aceasta este consumată de oameni. Pentru a realiza acest lucru este necesară determinarea calității apei brute, care este dată de totalitatea substanțelor minerale sau organice, a gazelor dizolvate, de particulele în suspensie și de organisme vii prezente în apă [8].

1.2. Surse de alimentare cu apă și caracteristici calitative

Următoarele surse naturale pot fi utilizate pentru alimentarea cu apă a centrelor populate și industriilor:

- surse de apă de suprafață, care sunt constituite din ape curgătoare (râuri, afluenți și fluvii) și ape stătătoare (lacuri naturale și artificiale și apele mărilor și oceanelor);
- surse de apă subterană (ape freatice, ape de adâncime).

Aceste surse naturale se disting prin calitate, regim de curgere și posibilități de captare și tratare [9].

1.2.1. Surse de apă de suprafață

Creșterea consumului de apă potabilă a determinat utilizarea apelor de suprafață, care reprezintă pe de o parte avantajul unor debite mari dar pe de altă parte au indici de calitate mai reduși. Obținerea apei potabile din apele de suprafață este condiționată de compoziția fizico-chimică a acesteia, compoziție care determină metodele și costul potabilizării apei [10].

Ape curgătoare. În general, cursurile de apă (râuri și afluenți) sunt caracterizate printr-o mineralizare mai scăzută, sărurile fiind formate din bicarbonați, cloruri și sulfatați de sodiu, potasiu, calciu și magneziu [11]. Compoziția chimică a apei depinde de natura solurilor traversate de cursul de apă, a solurilor din bazinul de recepție dar și de prezența cvasi-generală a gazelor dizolvate, în special oxigenul [12].

Pentru România, apele curgătoare (în special râurile) reprezintă principala sursă de apă potabilă și industrială. Proprietățile apelor curgătoare sunt influențate de fenomene datorate curgerii (care influențează cantitatea de materii în suspensie și coloidale, caracteristici fizico-chimice, forma albiei, variația debitului și a nivelului de apă); de suprafața de contact apă-atmosferă (care influențează capacitatea de oxigenare, variația de temperatură zilnică și pe anotimpuri) și de capacitatea de autoepurare [9].

În ceea ce privește calitatea apei, râurile prezintă anumite dezavantaje și anume: apa este tulbure, iar temperatura este variabilă în cursul anului (între 0°-26°C) [2]. În general, râurile sunt caracterizate de prezența următoarelor impurități existente în stare naturală:

- săruri dizolvate (bicarbonați, cloruri, azotați, fosfați, sulfatați), provenite din eroziunea rocilor, solului și datorită precipitațiilor.

- materii în suspensie și coloidale (argile, nisip, silice), apărute ca urmare a eroziunii, inundațiilor și schimbărilor climaterice;
- compuși organici biogeni proveniți din descompunerea materiei organice și vegetale antrenate de curgerea apei sau cele proprii ecosistemului;
- compuși poluanți toxici de natură organică sau anorganică, proveniți din deversarea unor efluenți insuficient epurați de la stațiile de epurare, efluenți de la fermele de creștere a animalelor, unități de mică producție fără racordare la sistemul de canalizare;
- detergenți; aceștia, prin formarea unei spume stabile la suprafața apei în care sunt deversați au efecte negative asupra procesului de autoepurare și asupra eficienței stațiilor de tratare;
- uleiuri și grăsimi: provin din deversări ale reziduurilor de combustibili, poluări accidentale, operații de curățire a utilajelor industriale etc.;
- microorganisme, viruși, protozoare provenite din deversări ale apelor uzate contaminate cu dejecții umane sau animale, microorganisme proprii ecosistemului [9].

Compoziția specifică este însă dependentă de natura solurilor traversate de cursul de apă, a solurilor din bazinul de recepție, a apelor uzate deversate de diferiți utilizatori și a capacității de dizolvare a gazelor din atmosferă [9].

Ape stătătoare. În cazul apelor stătătoare, a lacurilor sau a rezervoarelor artificiale de stocare, apa este imobilă în contact cu atmosfera, adâncimile sunt relativ mari, timpul de retenție fiind de asemenea mare. Stagnarea apei în lac conduce la o decantare naturală a materiilor în suspensie, apa lacurilor fiind mai limpede și mai puțin sensibilă la condițiile meteorologice. Pentru lacuri adânci, stratificarea termică combinată și stratificarea minerală conduce în perioada de vară și toamnă la excluderea aproape completă a circulației apei pe verticală, fapt ce atrage după sine scăderea concentrației oxigenului dizolvat în zona de fund și la apariția proceselor de oxidare anaerobă. În perioadele de destratificare termică și minerală, primăvara și toamna, are loc o circulație a apei pe verticală și o uniformizare calitativă a proprietăților apei lacului. Conținutul de substanțe organice și nutrienți combinat cu insolarea puternică conduce la posibilitatea dezvoltării unei biomase fito- și zoo-planctonice apreciabile [13-15].

Cele mai răspândite surse din rezerva de apă a globului și în același timp sursele cele mai puțin utilizate actualmente pentru consumul uman sau industrial îl constituie: mările și oceanele. Aceste ape sunt caracterizate de o mineralizare puternică care le conferă o agresivitate deosebită față de construcțiile din metal și beton. Sărurile frecvent întâlnite sunt NaCl, KCl și CaCl₂. Principalii impurificatori prezenți în apele mărilor și oceanelor sunt:

- săruri dizolvate în concentrație mare (pH alcalin);
- compuși organici biogeni;
- materii în suspensie și coloidale;
- compuși poluanți toxici (în special datorită poluărilor accidentale);
- microorganisme (în număr mai redus comparativ cu celelalte surse de apă de suprafață).

Pentru tratarea apelor marine în scopul obținerii apei potabile sau industriale se utilizează procedeul numit *desalinare* și se poate realiza prin reținerea materiilor solide și în suspensie a sărurilor, a compușilor organici și microorganismelor, utilizând procedee de membrană (ultrafiltrarea, osmoza inversă, electrodializa) în combinație cu procedee de tratare convențională (sedimentare, dezinfecție) [9].

În lumina celor prezentate anterior, această lucrare se referă la tratarea unei ape de suprafață (râul Bega) din Timișoara.

1.2.2. Surse de apă subterană

Apele subterane în comparație cu apele de suprafață satisfac unitățile industriale și gospodăriile individuale în măsură mai mică din punct de vedere cantitativ decât calitativ deoarece straturile acvifere oferă o apă cu debite mici, dar în majoritatea cazurilor corespunzătoare calitativ.

În afara calității corespunzătoare apei potabile, apele subterane prezintă și alte avantaje:

- compensarea debitelor exploatate prin reînnoire naturală;
- protecția împotriva pierderilor prin evaporare;
- protecția împotriva poluării de la suprafață și a dezvoltării vegetației eutrofe.

Apele de adâncime prezintă indici de calitate net superiori apelor de suprafață, dar inconvenientul prezenței fierului și manganului conferă apei un gust neplăcut, o culoare galben opalescentă, produce depuneri în conducte și instalații (unde, prin apariția în paralel a bacteriilor feruginoase care se dezvoltă în colonii, se creează pericolul depunerilor până la înfundarea secțiunilor de scurgere), pătează rufele la spălat și obiectele sanitare. Apa subterană provine din infiltrația directă a precipitațiilor atmosferice, din infiltrarea apei de suprafață prin malurile permeabile ale râurilor și lacurilor sau din condensarea vaporilor de apă în porii rocilor subterane [2, 10]. Apele subterane se caracterizează și prin turbiditate redusă, temperatură constantă și absența aproape totală a oxigenului [7].

Concentrațiile impurificatorilor anorganici, organici și microorganisme sunt foarte mici în apele subterane. Principalii impurificatori caracteristici apei subterane sunt:

- săruri dizolvate (în concentrație mai mare față de apele de suprafață);
- solide în suspensie și materii coloidale (concentrații reduse);
- compuși organici bio- sau nebiodegradabili proveniți din poluări accidentale;
- gaze dizolvate, CO₂ și O₂, H₂S, CH₄;
- microorganisme [9].

Principalele diferențe din punct de vedere calitativ între apele de suprafață și cele subterane sunt prezentate în tabelul 1.1.

Tabel 1.1. Caracteristicile surselor de apă [16, 17]

Caracteristici	Apă subterană	Apă de suprafață
Temperatura	Relativ constantă	Variabilă, în funcție de sezon
Turbiditate, materii în suspensii	Slabă, cu excepția terenului carstic	Variabilă, uneori ridicată
Culoare	Funcție de elementele dizolvate	Legată mai ales de materiile în suspensie, coloidale și de acizi humici
Mineralizare globală	Sensibil constantă, în general mai mare decât a apelor de suprafață din aceeași regiune	Variabilă în funcție de soluri, de precipitații, de evacuări
Fier și mangan în stare dizolvată	Prezenți în general	Absenți în general, cu excepția părților din adâncimea apei în stare de eutrofizare
Gaz carbonic agresiv	Adesea prezent în cantitate mare	Absent în general
Oxygen dizolvat	Absent în general	Absent în apele foarte poluate, prezent în apele nepoluate, în general în jurul saturării
Amoniac	Prezent în general, fără a fi un indice sistematic de poluare bacteriană	Prezent numai în apele poluate
Azotiți	Conținut uneori ridicat	În general, conținut redus
Silice	Conținut adesea ridicat	Conținut moderat
Hidrogen sulfurat	Adesea prezent	Absent
Micropoluanți minerali și organici	În general absenți, dar în caz de poluare accidentală rămân remanenți	Prezenți în caz de micropoluări sau de degradare a calității resursei
Organisme vii	Frecvent ferobacterii	Bacterii patogene, virusuri, plancton
Solvenți clorurați	Deseori prezenți	Absenți în general
Fenomenul de eutrofizare	Nu apare	Apare deseori, cu creșterea temperaturii

În vederea alimentării cu apă potabilă sau industrială, criteriile de alegere ale unei surse de apă trebuie să fie de natură:

1. *Calitativă* – este necesară cunoașterea compoziției apei la sursă pe categorii de impurificatori de natură organică, minerală, biologică și radioactivă, cauzele posibile de impurificare și necesarul de îmbunătățiri artificiale sau tratări, eventual chiar în zona de captare;
2. *Cantitativă* – debitul de apă necesar consumatorilor trebuie corelat cu capacitatea sursei;

3. *Economică* – costul minim pe metru cub de apă este corelat cu calitatea sursei și gradul de tratare [9].

1.3. Calitatea apelor naturale

În general, calitatea apelor naturale este determinată de totalitatea substanțelor minerale sau organice, a gazelor dizolvate, de particulele în suspensie și organismele vii prezente în apă [8]. Impuritățile care pot fi întâlnite în apele naturale sunt prezentate în tabelul 1.2. O anumită apă nu poate conține concomitent toate aceste impurități, mai cu seamă când coexistența acestora este incompatibilă cu echilibrul chimic stabilit în apă. În afara acestora, în apele naturale se mai pot găsi și alte tipuri de impurități precum:

- plumb sau cupru, rezultate în urma proceselor de tratare a apei sau datorită sistemului de transport precum și din apele meteorice;
- seleniu sau arsen (cantitate suficientă ca să le afecteze calitatea);
- substanțe radioactive (în principal radium), dar numai în unele cazuri de ape subterane concentrația acestora atinge valori periculoase de mari;
- crom, cianuri, cloruri, acizi, diferite metale sau poluanți organici, toate aduse în receptori de apele uzate provenite din industrie sau aglomerații urbane[18].

Parametrii de calitate ai apei sunt grupați în parametri microbiologici, chimici și indicatori [4-6]. Valorile și concentrațiile maxime admise pentru acești parametri sunt cuprinse în tabelele 1.3 - 1.5.

Tabelul 1.2. Impurități întâlnite în apele naturale [8]

Proveniența	Suspensii	Coloizi	Gaze	Cationi	Anioni
Contactul apei cu minereuri, soluri și roci	Argilă, măr, nisip și alte soluri anorganice	Argilă, silice, oxid feric, oxid de aluminiu, dioxid de mangan	Dioxid de carbon (CO ₂)	Calciu Fier Magneziu Mangan Potasiu Sodiu Zinc	Bicarbonați Carbonați Cloruri Fluoruri Nitrați Fosfați Hidroxizi Sulfați Silicați Borați
Din atmosferă, prin ploaie	Praf, polen		Dioxid de carbon, Azot, Oxigen, Dioxid de sulf	Hidrogen	Bicarbonați Cloruri Sulfați
Descompunerea materiilor organice din mediul înconjurător	Sol vegetal, reziduuri organice	Materii vegetale colorate, reziduuri organice	Dioxid de carbon, Azot, Oxigen, Hidrogen sulfurat, Amoniac, Hidrogen, Metan	Amoniu, Hidrogen, Sodiu	Bicarbonați Cloruri, Sulfuri acide Nitrați Nitriți Radicali organici
Organisme vii din mediul înconjurător	Alge, diatomee, pești, organisme minuscule	Bacterii, alge, viruși	Dioxid de carbon, Amoniac, Metan		
Din industrie, agricultură și alte activități umane	Argilă, măr, nisip grosier sau alte solide anorganice, compuși organici, petrol, compuși corozivi	Substanțe solide anorganice, organice, colorate, compuși organici clorurați, bacterii, viermi, viruși	Clor, Dioxid de sulf	Ioni anorganici, Metale grele	Ioni anorganici, molecule organice, coloranți

Tabelul 1.3. Parametrii microbiologici [4-6]

Parametru	Valoare admisă (număr/100 ml)
Escherichia coli (E. Coli)	0
Enterococi	0

24 Considerații generale privind obținerea apei potabile-1

Tabelul 1.4. Parametrii chimici [4-6]

Parametru	Valoare CMA	Unitate de măsură
Acrilamidă	0,10	μg/L
Arsen	10	μg/L
Benzen	1,0	μg/L
Benz(a)piren	0,01	μg/L
Bor	1,0	mg/L
Bromați	10	μg/L
Cadmiu	5,0	μg/L
Clorură de vinil	0,50	μg/L
Cianuri totale	50	μg/L
Cianuri libere	10	μg/L
Crom total	50	μg/L
Cupru	0,1	mg/L
Diclorețan	3,0	μg/L
Epiclorhidrină	0,10	μg/L
Fluor	1,2	mg/L
Hidrocarburi policiclice aromatice	0,10	μg/L
Mercur	1,0	μg/L
Nichel	20	μg/L
Nitrați	50	mg/L
Nitriți	0,50	mg/L
Pesticide	0,10	μg/L
Pesticide total	0,50	μg/L
Plumb	10	μg/L
Seleniu	10	μg/L
Stibiu	5,0	μg/L
Tetraclorētan și Triclorētenă (suma concentrațiilor compușilor specificați)	10	μg/L
Trihalometani total (suma concentrațiilor compușilor specificați)	100	μg/L

CMA=concentrație maximă admisă;

Tabelul 1.5. Parametrii indicatori [4-6]

Parametru	Valoare CMA	Unitate de măsură
Aluminiu	200	µg/L
Amoniu	0,50	mg/L
Bacterii coliforme	0	număr/100 ml
Carbon organic total (COT)	Nici o modificare anormală	
Cloruri	250	mg/L
Clostridium perfringens (specia, inclusiv sporii)	0	număr/100 ml
Clor rezidual liber	0,50	mg/L
Conductivitate	2.500	µS/cm la 20 °C
Culoare	Acceptabilă consumatorilor și nici o modificare anormală	
Duritate totală, minim	5	grade germane
Fier	200	µg/L
Gust	Acceptabilă consumatorilor și nici o modificare anormală	
Mangan	50	µg/L
Miros	Acceptabilă consumatorilor și nici o modificare anormală	
Număr de colonii la 22 °C	Nici o modificare anormală	
Număr de colonii la 37 °C	Nici o modificare anormală	
Oxidabilitate	5,0	mg O ₂ /L
pH	≥ 6,5; ≤ 9,5	Unități de pH
Sodiu	200	mg/L
Sulfat	250	mg/L
Sulfuri și hidrogen sulfurat	100	µg/L
Turbiditate	≤ 5	UNT
Zinc	5.000	µg/L
Tritiu	100	Bq/L
Doza efectivă totală de referință	0,10	mSv/an
Activitatea alfa globală	0,1	Bq/L
Activitatea beta globală	1	Bq/L

Notă: Pentru o apă rezultată din tratarea unei surse de suprafață nu se va depăși 1,0 UNT (unități nefelometrice de turbiditate) înainte de dezinfecție. Prin măsurarea activității alfa și beta globale se poate caracteriza calitatea apei din punct de vedere al conținutului radioactiv [5].

1.4. Tratarea apei

Tratarea apelor din diferite surse de alimentare în scopul obținerii apei potabile și pentru utilizări industriale este absolut necesară și are ca obiective:

- îndepărtarea impurităților și compușilor poluanți de origine organică și anorganică, a microorganismelor existente în apă, în mod natural sau apărute datorită unor poluări accidentale;
- asigurarea necesarului de apă potabilă și industrială, corelat cu necesitățile dezvoltării societății omeneste [8].

Pentru a avea o calitate corespunzătoare, apele sunt supuse unor procese de tratare în vederea potabilizării, procese care sunt alese în funcție de calitatea sursei de apă, de condițiile prescrise pentru calitatea apei necesare unei anumite folosințe, de costul operării și al întreținerii [10, 19, 20].

Proiectarea unei stații de tratare va ține cont de diferențele privind calitățile apei de alimentare a stației comparativ cu cele ale apei necesară utilizării, în scopul corectării unora din caracteristicile fizice, chimice, biologice și bacteriologice stabilite prin buletinele de analiză. Pentru realizarea eficientă a procesului de tratare a apei s-a introdus conceptul *operațiilor unitare*, adică operații de un singur tip care printr-o înșiruire coordonată (serie și paralel) realizează tratarea apei [19].

Procedeele de tratare a apei se pot clasifica în funcție de:

I. Tipul impurificatorilor reținuți:

- Procedee de tratare care permit reținerea materiilor solide de diferite dimensiuni și coloizilor:* reținerea pe grătare și site, deznisipare, sedimentare, coagulare-floculare, filtrare rapidă, filtrare lentă, ultrafiltrare, microfiltrare;
- Procedee de tratare care permit reținerea durtății:* dedurizare, schimb ionic, precipitare chimică;
- Procedee de tratare care permit dezinfectia (eliminarea bacterii și virusi):* clorinare, ozonizare, iradiere cu radiații ultraviolete, filtrare lentă (parțial);
- Procedee de tratare care permit eliminarea substanțelor organice:* adsorbția pe cărbune activ, coagulare-floculare (parțial), ozonizare, filtrare lentă, ultrafiltrare, osmoză inversă;
- Procedee de tratare care permit reținerea compușilor cu fier și mangan:* aerarea;
- Procedee de tratare care permit eliminarea sărurilor dizolvate (ionilor):* electroodializă, osmoză inversă, nanofiltrare, schimb ionic.

II. Eficiența tratării corelată cu scopul utilizării:

- Procedee de tratare convențională:* sitare, deznisipare, sedimentare, filtrare, coagulare-floculare, aerare, dezinfectie cu clor, dedurizare;
- Procedee de tratare avansată:* adsorbția pe cărbune activ, ozonizare, iradiere cu radiații UV, procedee folosind membrane semipermeabile (microfiltrare, ultrafiltrare, osmoză inversă, electroodializă, nanofiltrare) [9].

NTPA-013/2002 (Normativ Tehnic de Potabilizare a Apelor) prin care se stabilesc normele de calitate pe care trebuie să le îndeplinească apele de suprafață utilizate pentru potabilizare, clasifică apele de suprafață în funcție de valorile limită în trei categorii, fiecărei categorii îi corespunde o tehnologie standard de tratare:

- Categoria A₁: tratare fizică simplă (filtrare rapidă) și dezinfectie;
- Categoria A₂: tratare fizică, chimică și dezinfectie (pre-clorinare, coagulare, floculare, decantare, filtrare, clorinare finală);

- Categoria A₃: tratare fizică, chimică avansată, perclorare și dezinfecție (clorinare intermediară, coagulare, floculare, decantare, filtrare prin adsorbție pe cărbune activ, ozonizare și clorinare finală)[1].

Pentru tratarea apei de suprafață din Timișoara se utilizează procedeele de tratare convențională (categoria A₂).

1.4.1. Tehnologii de tratare a apei

Eliminarea poluanților indezirabili din apă este realizată parțial sau total prin fluxul tehnologic de tratare, fiecare procedeu de tratare fiind destinat să îmbunătățească unul sau mai mulți indicatori calitativi [9].

Tehnologiile de tratare a apei se diferențiază în funcție de sursă în:

- Tehnologii de tratare a apei de suprafață și
- Tehnologii de tratare a apei subterane.

1.4.1.1. Tehnologii de tratare a apei de suprafață

Tratarea apelor de suprafață (în special a râurilor) pentru modificarea caracteristicilor fizice, chimice, biologice și bacteriologice ridică probleme de tratare cum sunt:

- Eliminarea materialului plutitor de dimensiuni mai mari sau mai mici (sitare);
- Eliminarea suspensiilor grosiere printr-o simplă staționare relativă (presedimentare);
- Eliminarea suspensiilor coloidale, fapt ce necesită utilizarea coagulării (flocularea și decantarea);
- Limpezirea finală prin instalații de filtrare;
- Dezinfecția apei limpezite (dacă este necesară obținerea apei potabile)[21].

În figura 1.1 este prezentată schema tehnologică de tratare convențională a apei de suprafață.

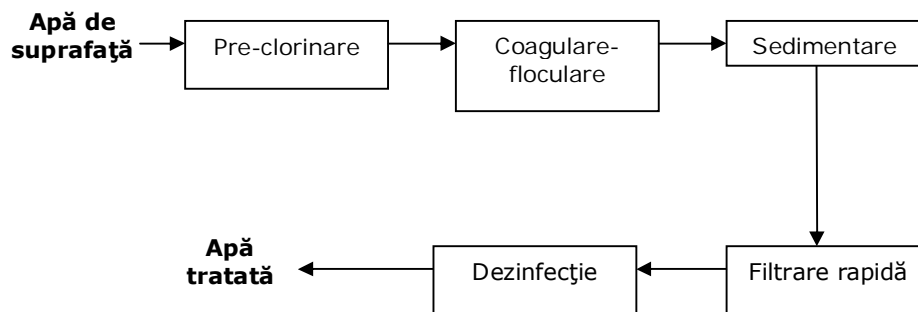


Figura 1.1. Schema tehnologică de tratare convențională a apelor de suprafață [9]

O schemă convențională de tratare a apei de suprafață provenită dintr-o sursă cu variații sezoniere ale turbidității, culorii, gustului și mirosului este prezentată în figura 1.2.

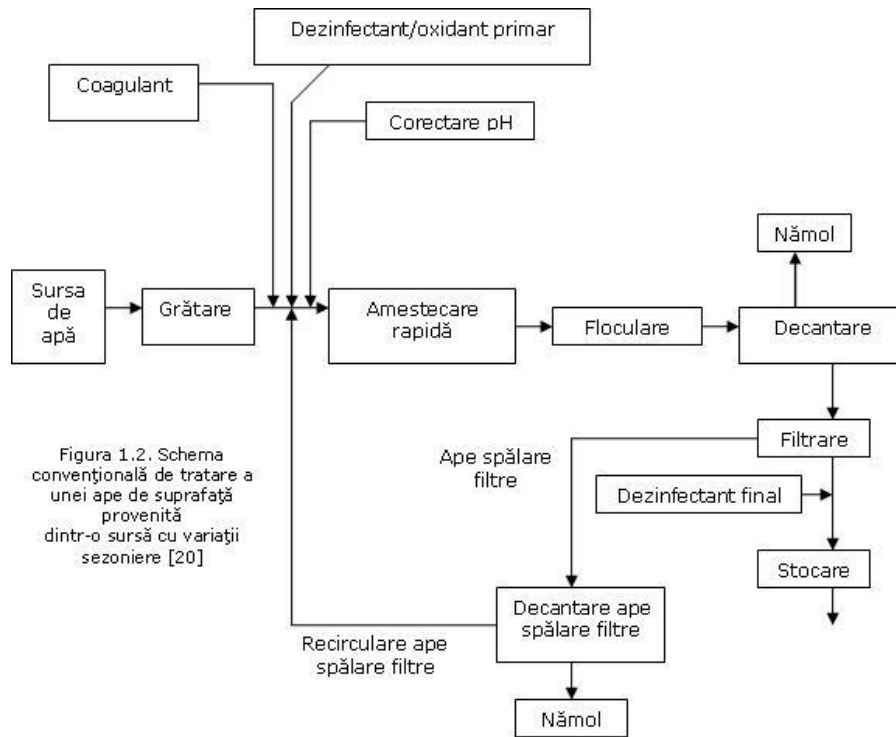


Figura 1.2. Schema convențională de tratare a unei ape de suprafață provenită dintr-o sursă cu variații sezoniere [20]

În general, apele cu un conținut scăzut de suspensii și cu culoare, miros, gust, duritate reduse pot fi tratate fără decantare, cu coagulare și floculare urmate de filtrare. Acest tratament poartă numele de *filtrare directă* [22]. Schema de tratare a apei de suprafață cu filtrare directă este prezentată în figura 1.3.

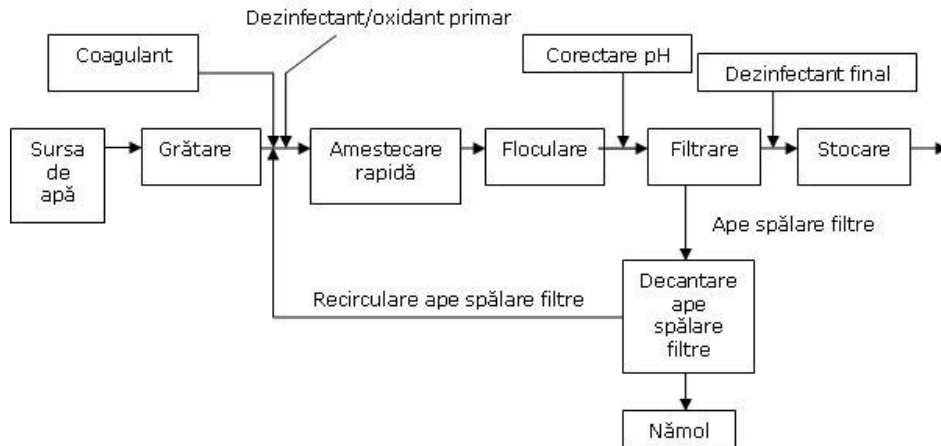


Figura 1.3. Schema de tratare a apei de suprafață cu filtrare directă [20]

Atunci când flocularea poate fi eliminată și coagulantul poate fi adăugat printr-o amestecare potrivită chiar înaintea filtrării, tratamentul poartă denumirea de *coagulare pe filtre* [20]. Schema de tratare a apei de suprafață cu coagulare pe filtre este prezentată în figura 1.4.

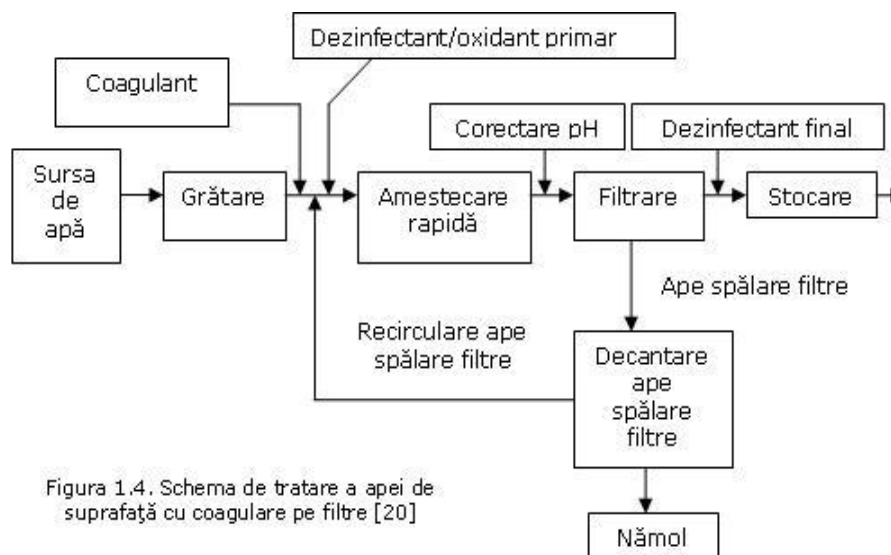


Figura 1.4. Schema de tratare a apei de suprafață cu coagulare pe filtre [20]

În reprezentările schematice ale proceselor nu au mai fost simbolizate etapele de pompare și depozitare a apei, accentul fiind pus pe operațiile și procesele unitare din schema tehnologică și modalitatea lor de conectare.

După cum se poate observa din figurile 1.1-1.4, procesul de coagulare-floculare este prezent în toate schemele de tratare a apei de suprafață, fapt ce denotă importanța acestuia în tratare. Acest fapt a determinat abordarea procesului de coagulare-floculare în lucrarea de față.

1.4.1.2. Tehnologii de tratare a apei subterane

Prin tratare pot fi îmbunătățiți indicatorii calitativi ai apelor subterane, care se stabilesc în funcție de compoziția apei de sursă și se referă la: microorganisme, conținutul de Fe^{2+} , Mn^{2+} , NH_4^+ , H_2S , CH_4 , CO_2 (agresivitate), oxigenul dizolvat (apele subterane pot fi aerobe sau anaerobe) și compuși organici [9]. În figura 1.5 sunt prezentate schemele tehnologice de tratare a apei subterane.

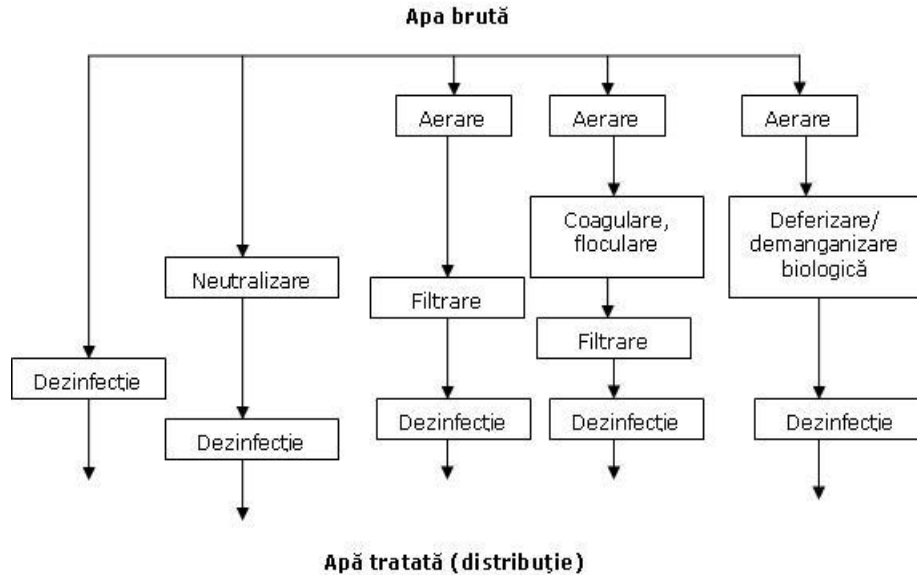


Figura 1.5. Scheme tehnologice de tratare a apei subterane [9, 18]

1.4.2. Procese de tratare

Principalele procese de tratare care intervin în potabilizarea apelor de suprafață sunt:

- a. Reținerea pe grătare și site
- b. Deznisiparea (presedimentarea)
- c. Coagularea
- d. Flocularea
- e. Sedimentarea
- f. Filtrarea
- g. Dezinfecția

1.4.2.1. Reținerea pe grătare și site

În general, grătarele sunt situate la punctele de captare a apelor de suprafață (prize de apă). Reținerea pe grătare este cunoscută și sub denumirea de *sitare grosieră*. Apa intră în camerele de priză prin ferestrele așezate paralel cu malurile râului pe unul sau mai multe nivele. Cele mai des utilizate nivele sunt cel pentru ape de adâncime mică și cel pentru perioada de viitură când nivelul apei este mult crescut. Rolul grătarelor este de a reține impuritățile grosiere din sursa de apă. Viteza apei la intrarea în grătare trebuie să fie de 0,2-0,5 m/s pentru a evita antrenarea impurităților reținute pe grătare, dar nu mai mare de cca. 1 m/s pentru a nu întepeni corpurile grosiere între bare. Îndepărtarea corpurilor solide reținute se realizează prin diferite operații de curățire cum ar fi:

- curățire manuală (greble);
- curățire mecanică (perii rotative);

- curățire hidraulică (jet de apă) [9, 23].

Reținerea pe site se utilizează pentru retenția impurităților nedizolvate de dimensiuni mai mici. Sitele asigură accesul apei către camerele de pompare, fiind dispuse în camerele de priză (captare). Sitele pot fi confecționate din table metalice perforate, plăci de material plastic perforate, țesături din oțel sau fire sintetice, în variantă statică sau mobilă (ciururi cu mișcare de vibrație sau giratoare). Îndepărtarea materialelor din site se realizează, de obicei, cu jet de apă sub presiune, aer comprimat sau cu ajutorul unor perii. Pentru împiedicarea dezvoltării microorganismelor, algelor și chiar înfundarea micrositelor se utilizează iradierea cu radiații ultraviolete sau spălarea sitelor cu hipoclorit de sodiu [9, 23].

1.4.2.2. Deznisiparea (presedimentarea)

Deznisiparea este operația mecanică care se aplică atunci când apa brută conține cantități mari de nisip sau alte substanțe grele de natură minerală. Acest proces are drept scop reținerea în bazine special amenajate a nisipului, pietrișului și a particulelor minerale grele care se pot depune ulterior pe canale și conducte, pentru a proteja pompele și restul aparaturii de acțiunea lor abrazivă [9, 20].

Presedimentarea se folosește mai ales în următoarele cazuri:

- pentru tratarea apei din zonele aride în care au loc frecvent furtuni ce pot antrena particulele de nisip;
- pentru tratarea apelor de suprafață puternic afectate de topirea zăpezilor;
- pentru cazul când în perioadele de viitură sursa de apă este încărcată cu materii în suspensie, în concentrații care pot depăși capacitatea celorlalte instalații din stația de tratare [24, 25].

Pentru a realiza această operație se folosesc aparate care poartă denumirea de *deznisipatoare*. Rolul acestor aparate este de a reduce încărcarea în suspensii a apei brute pentru ca apoi acestea să poată fi reținute fără probleme în decantoare. Deznisipatoarele mai pot fi utilizate ca bazine de stocare a apei de rezervă pentru cazurile de avarii la priză, poluări accidentale grave, pentru recuperarea apelor la spălarea filtrelor sau a apei cu nămol în exces de la decantoare. Utilajele de presedimentare pot fi amplasate în instalații independente, în apropierea captării sau împreună cu construcția prizei de apă [26].

Curățarea deznisipatoarelor se poate realiza:

1. Manual – recomandată pentru instalații mici și necesită scoaterea din funcțiune a compartimentului respectiv;
2. Mecanic – recomandată pentru instalații mari, unde se ajunge la un volum important de depuneri. Aceasta se poate realiza prin mecanisme de dragare, care se deplasează de-a lungul bazinului de deznisipare cu ajutorul dispozitivelor de racleți, cu pompe sau ejectoare;
3. Hidraulic – se realizează prin sifonare, prin intermediul unor tuburi verticale [26].

Deznisipatoarele se pot clasifica după direcția de curgere a apei în *deznisipatoare orizontale* și *verticale*. Deznisipatoarele orizontale sunt cele mai utilizate și cele mai simple atât din punct de vedere constructiv cât și din punct de vedere al exploatării. În aceste aparate, apa circulă orizontal, particulele minerale depunându-se în partea de jos a camerei de sedimentare. Deznisipatoarele verticale sunt mai puțin utilizate pentru că nu realizează o deznisipare performantă, reținând doar particulele mari. Mișcarea apei se realizează pe verticală în mod ascendent, nisipul depunându-se în partea de jos a instalației. Deznisipatoarele verticale se folosesc acolo unde se

impune economie de spațiu și unde nu sunt necesare lucrări dificile și excavări costisitoare [20, 26].

1.4.2.3. Coagularea

1.4.2.3.1. Teoria procesului de coagulare

În tehnologia de tratare a apei în scop potabil, coagularea este un proces care constă în agregarea particulelor mici în agregate mari, care apoi pot fi îndepărtate prin decantare sau filtrare. Coagularea provine din latinescul "coagulare" și înseamnă "a închea, a se face dens, a merge împreună" [3, 20].

Coagularea s-a definit de-a lungul timpului astfel:

- proces care necesită un adaos de substanțe care să formeze în apă specii chimice, care ulterior pot acționa la destabilizarea particulelor încărcate electric și măresc eficiența de agregare și înlăturare a lor [27];
- proces de destabilizare și unire a particulelor fine și a sistemelor coloidale în agregate mari, combinate cu procese de adsorbție a carbonului organic dizolvat (COD) [27, 28];
- proces complex care implică o succesiune de reacții chimice între diferite specii chimice organice și/sau anorganice și etape concomitente de adsorbție a unor specii chimice organice și/sau anorganice, de transfer de masă, etc. [27, 29].
- proces prin care particulele mici încărcate electric sunt destabilizate și sunt unite în agregate mari numite flocoane sau floccule, care sedimentează sub acțiunea forței gravitaționale [30].

Flocoanele sunt definite ca agregate poroase care se conectează liber și care sunt compuse din mai multe particule primare [31].

Procesul de coagulare în traterea apei brute este un proces de neutralizare a sarcinii particulelor coloidale prin folosirea unui reactiv chimic sau a unui proces de condiționare a particulelor solide în suspensie pentru a promova aglomerarea lor și pentru a produce astfel, particule mai mari care pot fi eliminate mai ușor în procesele de tratare ulterioare [32, 33].

Practic, procesul de coagulare prezintă patru faze și anume:

1. Introducerea în apă a unui agent de coagulare în regim de agitare energetic, astfel încât speciile coagulante pre-formate sau formate în situ să se amestece bine cu materia organică naturală (MON);
2. Destabilizarea particulelor minerale și a materiei organice naturale;
3. Coliziunea particulelor destabilizate, agregarea lor sub formă de microflocule, agregarea microfloculelor cu formare de macroflocule și cu înglobare de substanțe humice solubile, adsorbția compușilor MON dizolvați pe particule și floccule;
4. Separarea prin sedimentare gravitațională a flocculelor din apa tratată [27].

Particulele care contribuie la culoare și turbiditate în apa brută sunt, în principal, argilele, virușii, bacteriile, acizii humici, mineralele (inclusiv azbest, silicați, dioxid de siliciu și particulele radioactive) și particulele organice. La un pH mai mare de 4, astfel de particule sau molecule sunt, în general, cu sarcină negativă [34].

Flocculele rezultate în urma procesului de agregare se împart în trei categorii:

- floccule mari și grele, care sedimentează sub acțiunea forței gravitaționale din jar-test;

- particule coloidale, care nu pot sedimenta în urma aplicării jar-test dar care pot fi înlăturate prin filtrare pe filtre de cărbune activ;
- microflocule de MON, care nu pot fi înlăturate prin filtre obișnuite și necesită membrane speciale [27].

Frecvent, coagularea este utilizată pentru eliminarea materiei organice naturale din apă, eliminare dorită din mai multe motive și anume:

- în primul rând, prezența ei în apă a fost pusă în strânsă legătură cu formarea produșilor cancerigeni de dezinfecție în timpul procesului de dezinfecție cu clor;
- în al doilea rând, poate duce la scăderea performanțelor de filtrare cu membrană din cauza adsorbției ce are loc pe materialul filtrant și
- în al treilea rând, poate cauza culoarea apei [35, 36].

În sistemele naturale, MON poate fi prezentă într-o formă solubilă ca și COD și sub formă de particule, ca și agent de stabilizare [35, 37].

Coagularea trebuie condusă în așa fel încât eficacitatea potabilizării să fie cât mai mare și concentrația reziduală a coagulanților să fie cât mai mică [15].

1.4.2.3.2. Mecanismele coagulării

Agregarea particulelor coloidale și MON poate fi obținută prin patru mecanisme primare:

1. Neutralizarea sarcinilor electrice/destabilizare (doar pentru coloizi);
2. Coagularea prin coprecipitare ("sweep coagulation", doar pentru coloizi);
3. Coagularea prin adsorbție – agregare (pentru MON);
4. Coagularea prin complexare/precipitare (pentru MON) [38-42].

Toate aceste mecanisme au fost caracterizate ca mecanisme de reacție primară și ele pot exista individual sau în combinație, datorită naturii complexe a procesului de coagulare (atunci când s-a adăugat un coagulant chimic) [42].

Neutralizarea sarcinilor electrice (coagulare electrostatică) a suprafeței particulelor coloidale se poate realiza prin ajustare de pH sau prin adăugare de coagulant. Sarcina coagulantului trebuie să fie opusă sarcinii particulelor coloidale pentru ca adsorbția ionilor pe suprafața particulelor coloidale și neutralizarea sarcinii suprafeței să aibă loc. Acest lucru duce la o agregare mai ușoară. Ca urmare, doza de coagulant necesară neutralizării sarcinilor electrice este dependentă de concentrația particulelor și de cea a MON [37, 43].

Destabilizarea prin compresia unui strat dublu electric este obținută prin creșterea tăriei ionice, prin adăugare de electroliți anorganici (NaCl). Compresia are loc odată ce disponibilitatea contraionilor crește, reducând grosimea stratului difuz care înconjoară particulele. Cu toate acestea, utilizarea electroliților anorganici care duc la compresia dublului strat nu este o metodă de destabilizare practică pentru că duce la creșterea salinității în apă, fapt care ar necesita un tratament ulterior pentru eliminarea concentrației mari de săruri [37].

Coagularea prin coprecipitare – ca și coagulanți chimici sunt frecvent utilizați sulfatul de aluminiu, clorura ferică și varul pentru a forma precipitatele: $\text{Al}(\text{OH})_3$, $\text{Fe}(\text{OH})_3$ și CaCO_3 . Aceste precipitate rețin fizic particulele coloidale suspendate, în special, în timpul procesului de floculare. Atunci când particulele coloidale propriu-zise servesc drept nuclee pentru formarea de precipitate, floculele sunt formate în jurul particulelor coloidale și procesul de coagulare prin coprecipitare poate fi dezvoltat. Astfel, gradul de precipitare crește cu creșterea concentrației de particule coloidale (turbiditatea) în soluție [44]. Comparat cu alte mecanisme, mecanismul de

coagulare prin coprecipitare este relativ mai lent și, în general, oferă apelor o bună limpezire [45].

Coagularea prin adsorbție – agregare presupune adsorbția contraionilor agentului de coagulare pe suprafața particulei coloidale, încărcată negativ, având ca rezultat neutralizarea sarcinilor electrice ale coloizilor și, respectiv, precipitarea lor ulterioară. Deoarece adsorbția este un proces nespecific, este posibilă apariția unui exces de sarcini pozitive la suprafața coloidului care contribuie la o inversare a potențialului zeta de la valori negative la valori pozitive și la o mărire a volumului particulei coloidale cu rezultate favorabile asupra eficienței procesului de coagulare în ansamblul său. În practică se obține o eficiență mărită a procesului de coagulare chiar dacă valoarea potențialului zeta nu este redusă la zero, acest aspect fiind explicat în modelul de tip punte elaborat de Stumm și O'Melia în 1968, și rezumat de Bagwell în 2001 (figura 1.6) [9].

Deoarece compușii sintetici de tip polimeri au dimensiuni moleculare mari și sarcini electrice multiple de-a lungul unui lanț molecular de atomi de carbon, aceștia sunt eficienți pentru destabilizarea coloizilor în apă. Figura 1.6.a prezintă cea mai simplă formă de punte, când o moleculă de polimer se va atașa de o particulă coloidală în unul sau mai multe puncte. Acest atașament coloidal se datorează atracției Coulombiene atunci când sarcinile sunt diferite, sau prin schimb ionic, legături de hidrogen sau forțe van der Waals. Figura 1.6.b prezintă o a doua reacție, în care porțiunea moleculei de polimer rămasă din particula coloidală din prima reacție se va extinde în soluție. Atașamentul se poate realiza pentru a forma o punte, dacă o altă particulă care are câteva puncte de adsorbție vacante intră în contact cu molecula de polimer extinsă. Astfel, polimerul servește ca punte în acest caz. Cu toate acestea, în cazul în care molecula de polimer extinsă nu intră în contact cu o altă particulă, aceasta se poate plia și adsorbi pe suprafața ei de la sine (figura 1.6.c), particula originală fiind restabilizată. Dacă se adaugă o supra doză de polimer, segmentul polimerului poate satura suprafețele coloidale dar nici un punct de pe suprafețe nu ar mai fi disponibil pentru a crea o punte. Această reacție determină restabilizarea particulelor (figura 1.6.d). O agitare intensă în soluție poate provoca restabilizarea deoarece punțile polimer-suprafață sunt distruse. Aceste reacții sunt prezentate în figura 1.6.e și 1.6.f [33].

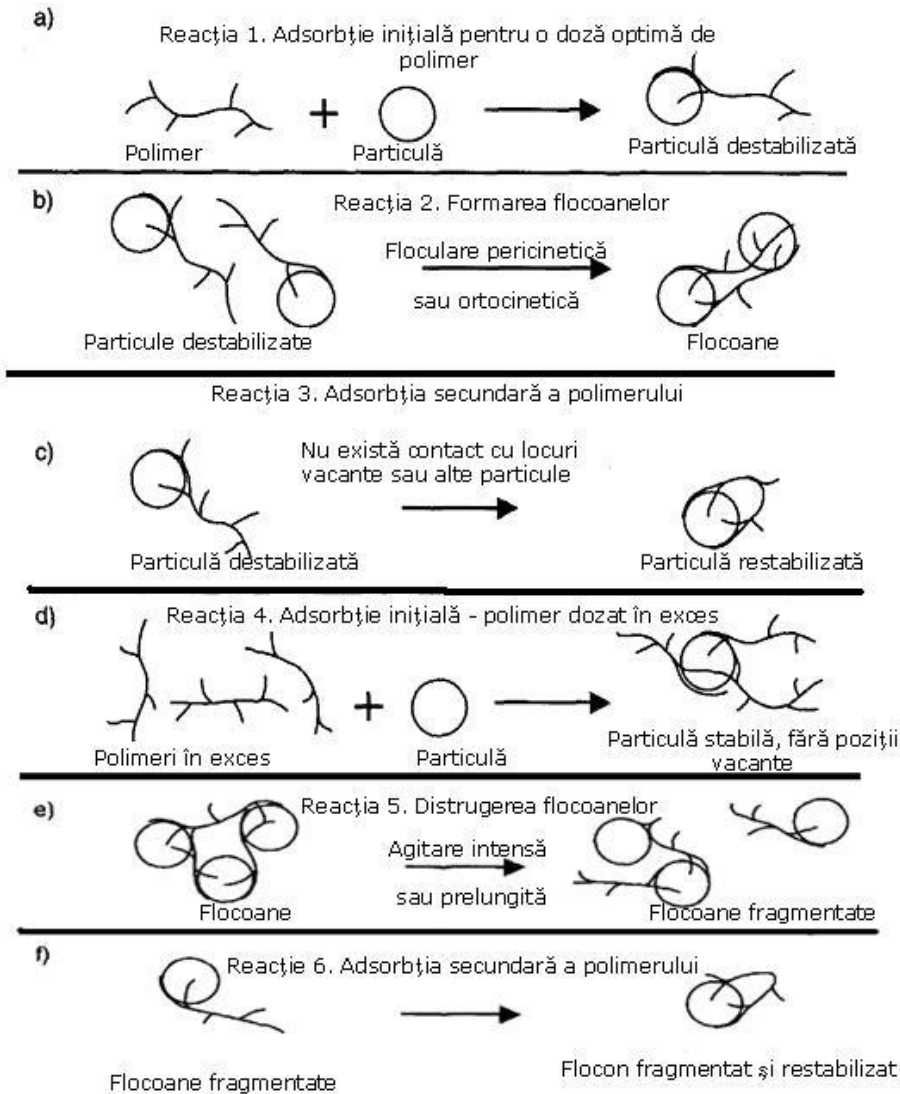


Figura 1.6. Reprezentarea schematică a modelului tip punte pentru destabilizarea particulelor coloidale cu polimeri [43]

Polimerii cationici, în general, ajută la destabilizarea particulelor prin neutralizarea sarcinilor și, prin urmare, ajută și la eliminarea culorii și turbidității. Polimerii anionici cu dimensiuni moleculare mari sunt în măsură să elimine bariera de energie între două particule încărcate negativ, măbind astfel eficiența procesului de coagulare. Utilizarea de polimeri oferă o serie de beneficii cum ar fi: creșterea gradului de floculare; produc floccule mari, dense, care se sedimentează mai rapid și

ajută la consolidarea floculelor, proces care are ca rezultat îmbunătățirea filtrării[46].

Coagularea prin complexare/precipitare se referă la reacția chimică între speciile metalice hidrolizate, încărcate pozitiv și moleculele organice negative [42]. Conform acestui mecanism, agenții de coagulare reacționează cu grupările ionizate de la suprafața particulelor coloidale cu formare de produși, cu solubilitate mică sau insolubili, reacția chimică fiind mult dependentă de pH-ul mediului [47].

Pentru tratarea unei ape de suprafață din Timișoara în vederea potabilizării, în această lucrare s-a ales ca agent de coagulare sulfatul de aluminiu. Eventualele reacții ce apar în timpul mecanismelor de coagulare folosind sulfatul de aluminiu ca și coagulant sunt prezentate conceptual în figura 1.7.

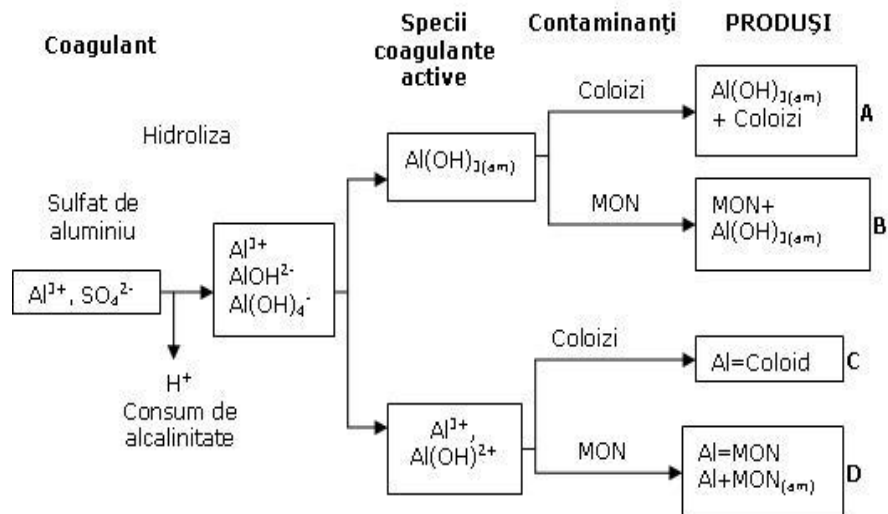


Figura 1.7. Ansamblul reacțiilor în mecanismele de coagulare: A=Coprecipitare; B=Adsorbție; C=Neutralizarea sarcinilor/Destabilizare; D=Complexare/Precipitare [48-50]

1.4.2.3.3. Factori care influențează procesul de coagulare-floculare

Eficiența procesului de coagulare-floculare este influențată de următorii factori:

- Doza și tipul agentului de coagulare-floculare;
- pH-ul și alcalinitatea;
- Temperatura;
- Turbiditatea;
- Culoarea și materiile organice;
- Gradientul de viteză (G);
- Timpul de staționare;
- Amestecarea.

a. Doza și tipul agentului de coagulare-floculare

În tratarea unei ape de caracteristici date, o etapă importantă în procesul de limpezire îl constituie determinarea dozei optime de coagulant deoarece aceasta

influențează calitatea apei tratate. Pentru determinarea dozei optime de coagulant se utilizează următoarele tehnici:

- *Jar-test* este o metodă de simulare a unui întreg proces de tratare a apei, oferind operatorilor o idee despre modul în care un tratament chimic se comportă și operează cu un anumit tip de apă brută. Scopul metodei jar-test este de a selecționa tipul și doza de coagulant, tipul și doza de coagulanți/floculanți ajutători, de a determina pH-ul optim și de a optimiza timpul de amestecare și intensitatea pentru amestecarea rapidă și lentă [30].
- *Potențialul zeta* este o mărime care caracterizează gradul de stabilitate a suspensiilor coloidale și se măsoară cu un aparat numit zetametrul. Doza optimă de coagulant se obține la anularea încărcării electrice a coloizilor [51].
- *Titrarea coloizilor* se bazează pe constatarea că încărcarea coloidală a unei suspensii poate fi neutralizată stoichiometric prin adăugarea unei suspensii coloidale de încărcare opusă. Ca indicator de punct final se utilizează albastru de toluidină. Deoarece la apele de suprafață încărcarea coloidală este variabilă, se adaugă în apă un polimer ionic în exces care neutralizează încărcarea coloidală negativă a apei. Excesul de polimer cationic este neutralizat de o soluție de polimer anionic; încărcarea coloidală a apei fiind dată de diferența dintre cantitatea de polimer introdusă în exces și cantitatea de polimer anionic necesară neutralizării polimerului în exces [17, 52].
- *Alte metode* – determinarea dozei de coagulant se poate realiza prin urmărirea continuă a distribuției mărimii flocoanelor (metodă optică)[19].

Doza care asigură cea mai bună limpezire (turbiditate reziduală scăzută) a apei este doza optimă de coagulant [19]. Doza optimă de coagulant produce floccule grele și compacte, care sedimentează aproape total. O subdozare de coagulant determină scăderea eficienței tratării (proba este tulbure) și îndepărtarea insuficientă a particulelor solide (fără floccule și sedimentare). O supradozare de coagulant determină formarea unor floccule dense care pot fi fragile și pufoase, dar care nu vor sedimenta bine atunci când amestecarea va fi oprită. Supradozarea cu coagulant determină costuri ridicate în operare și periclitarea sănătății populației [53, 54].

În lucrarea de față, pentru determinarea dozei optime de coagulant s-a utilizat metoda jar-test.

b. pH și alcalinitate

pH-ul este unul din parametri de calitate ai apei brute. Acesta determină natura speciilor prezente și solubilitatea lor [8].

pH-ul procesului de coagulare este influențat de:

- solubilitatea coagulantului;
- sarcina de suprafață a flocculelor;
- sarcina speciilor de coagulant dizolvate;
- sarcina suprafeței coloizilor;
- încărcarea electrică a grupelor funcționale ale MON;
- alcalinitate [55-57].

Alcalinitatea și pH-ul sunt două modalități diferite de a exprima caracterul acido-bazic al apei. Alcalinitatea se referă la capacitatea de neutralizare a speciilor acide din apă, în timp ce pH-ul este parametrul ce măsoară nivelul acido-bazic din apă.

Totuși, între alcalinitate și pH există o relație bine definită și anume creșterea alcalinității determină creșterea pH-ului. Pentru ape cu alcalinitate mică, adaosul de coagulant poate să consume toată alcalinitatea disponibilă cu efecte de scădere a pH-ului la valori mai mici decât este necesar tratamentului. Pentru ape cu alcalinitate mare este necesară introducerea unei cantități mai mari de coagulant pentru a cobori pH-ul la valori adecvate pentru procesul de coagulare. În general, agenții de coagulare pe bază de metale polivalente au caracter acid și adaosul de coagulant acid consumă alcalinitate [58, 59].

Doza de coagulant se alege astfel încât să se realizeze un pH optim de coagulare, care, pentru sursele de apă este 6-7. Experimental, pH-ul optim de coagulare se determină prin metoda jar-test în funcție de caracteristicile calitative ale apei, de agenții de coagulare-floculare utilizați, etc. [8, 9].

c. Temperatura

Temperatura este un alt parametru de calitate al apei brute (al apei de tratat) care este necesar pentru desfășurarea procesului de coagulare-floculare. Aceasta afectează proprietățile chimice ale apei cum ar fi gradul de reacție, solubilitatea, pH-ul și speciile de hidroliză ale coagulanților. Gradul de reacție și cinetica reacțiilor scad cu reducerea temperaturii (legea lui Arrhenius). Solubilitatea solidelor și a lichidelor, în general, este foarte dependentă de temperatură. La majoritatea solidelor, solubilitatea scade cu scăderea temperaturii [43]. În procesul de coagulare-floculare, pentru formarea floculelor este necesară existența unui pH optim care crește o dată cu scăderea temperaturii [60].

Temperatura apei poate influența distribuția speciilor de hidroliză a coagulanților folosiți în proces, atât în soluție cât și pe suprafețele particulelor datorită schimbării gradului de reacții implicate. Temperatura poate afecta formarea de specii coagulante în soluție prin influențarea adsorbției diferitelor specii și implicit a proprietăților suprafeței particulei [33].

Temperatura afectează și proprietățile fizice ale apei precum: densitatea, vâscozitatea și constanta dielectrică a apei. Vâscozitatea dinamică și constanta dielectrică a apei crește o dată cu scăderea temperaturii, iar densitatea crește cu scăderea temperaturii până la nivelul său maxim (4°C) după care scade ușor până când schimbarea fazei are loc (0°C), apoi densitatea scade brusc [60]. Temperatura scăzută a apei determină reducerea gradului de dizolvare a coagulantului, de precipitare și formare a floculelor, în special când se folosește sulfatul de aluminiu ca și coagulant. Apele cu temperaturi ridicate determină creșterea nivelului de alge și al altor materii organice în apa brută [53].

Temperatura afectează semnificativ turbiditatea și numărul particulelor în timpul coagulării [61]. În schimb, îndepărtarea COD și a culorii din apă nu sunt afectate de temperatură [41]. Pentru desfășurarea procesului de coagulare-floculare, temperatura apei de tratat este importantă datorită influenței acesteia asupra posibilităților de coliziune a particulelor coloidale cât și a sedimentării floculelor formate [9].

d. Turbiditatea

Turbiditatea este definită ca fiind cantitatea de lumină difuzată de particulele existente într-o suspensie. Turbiditatea unei ape brute este determinată de prezența particulelor coloidale în suspensie precum argila, nămolul, zgura, organisme microscopice, compuși organici colorați solubili și materie organică și anorganică [62, 63].

Turbiditatea este un factor important în tratarea apei, având capacitatea de a controla procesul de coagulare atunci când concentrația carbonului organic total (COT) este scăzută în apa brută. Pentru o apă cu turbiditate mare (≥ 100 UNT) sunt necesare doze mari de coagulant, timp de floculare lung și grade de filtrare mici [48].

Experimental, turbiditatea se măsoară cu ajutorul unui turbidimetru, unitatea de măsură fiind exprimată în unități nefelometrice de turbiditate (UNT). Măsurarea turbidității este o măsură brută, indirectă, simplă, ușor de operat și care nu este sensibilă la particulele mici precum microorganismele patogene *Giardia* și *Cryptosporidium* [53]. Turbiditatea este un parametru frecvent utilizat în evaluarea procesului de coagulare-floculare, fiind totodată și un bun indicator în determinarea calității apei potabile [62].

e. Culoarea și materiile organice

Culoarea este determinată de formele coloidale ale fierului și manganului sau mai bine zis, de MON [63]. În general, apele puternic colorate care conțin cantități mari de MON necesită doze mari de coagulant. Principalul responsabil pentru culoarea apei este materialul humic, care este un amestec complex de molecule atât ca dimensiune cât și ca și compoziție chimică. Acizii fulvici și humici sunt cel mai frecvent întâlniți și reprezintă aproximativ jumătate din COT prezent în apele naturale. Aceste substanțe humice sunt de natură coloidală și contribuie, de asemenea, la turbiditatea apei și la eficiența coagulării. Materialul humic poate fi îndepărtat prin diferite metode precum coagulare-floculare, adsorbție pe cărbune activ, metode care nu afectează structura lor sau prin ozonizare, când este descompus în molecule mai mici [8].

f. Gradientul de viteză (G)

Amestecarea rapidă este utilizată ca parte din procesul de coagulare pentru a distribui coagulanții chimici pe întregul flux de apă. Intensitatea amestecării este, de obicei, cuantificată cu un număr cunoscut sub numele de *gradient de viteză* sau "valoarea G ", care este funcție de puterea de intrare în procesul de amestecare rapidă și de volumul bazinului de reacție [34].

Gradientul de viteză reprezintă viteza relativă între două particule dintr-un fluid la o anumită distanță. Dacă gradientul de viteză nu este suficient, între particule nu vor avea loc coliziuni adecvate și totodată nu se vor forma flocule corespunzătoare. Dacă gradientul de viteză este prea mare, forțele excesive de forfecare vor preveni formarea floculelor dorite [64]. În regim laminar, gradientul de viteză (G^0) este definit ca diferența de viteză (dv) între două straturi lichide adiacente raportată la distanța lor pe direcția perpendiculară vitezei de deplasare:

$$G^0 = dv / dz \quad (1.1)$$

Pentru că este mai greu de realizat regimul laminar, în practică se folosește gradientul de viteză, G , corespunzător regimului turbulent:

$$G = \sqrt{\frac{P}{V\eta}} \quad (1.2)$$

În care, G este gradientul de viteză mediu, în s^{-1} ; P este puterea de disipare efectivă, în $(m^2 \cdot kg)/s^3$; η este vâscozitatea dinamică, în $kg/(m \cdot s)$ și V este volumul ocupat de lichid, în m^3 . Această definiție se aplică prin extindere și la regimul de curgere laminar [19].

Gradientul de viteză depinde de temperatură prin intermediul coeficientului de viscozitate dinamică. El este un parametru important care influențează

probabilitatea de ciocnire a particulelor. Totuși, valoarea gradientului de viteză este limitată de fragilitatea flocculelor. La valori prea mari ale lui G , floconul format suferă o forfecare mecanică urmată de distrugerea lui. Valorile admise pentru gradientul de viteză sunt:

- la coagulare: $400 \text{ s}^{-1} - 1000 \text{ s}^{-1}$ (amestecare rapidă);
- la floculare: de ordinul a 100 s^{-1} (amestecare lentă) [19, 3].

Pentru regim laminar, puterea transmisă fluidului prin intermediul rotorului poate fi definită astfel:

$$P = K_L n^2 D_i^3 \mu \quad (1.3)$$

În care, K_L este constanta rotorului pentru regim laminar; n este viteza de amestecare, în rpm ; D este diametrul rotorului, în m iar μ este vâscozitatea, în $\text{kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$. Pentru regimul turbulent, puterea dată de rotor poate fi definită astfel:

$$P = K_T n^3 D_i^5 \rho \quad (1.4)$$

În care K_T este constanta rotorului pentru regim turbulent iar ρ este densitatea lichidului, în kg/m^3 [33].

g. Timpul de staționare

Pentru etapa de coagulare-floculare, timpul de staționare are o mare importanță deoarece influențează în mod direct probabilitatea ciocnirii particulelor coloidale, destabilizarea sarcinilor electrice și, respectiv, formarea flocoanelor. Parametrul adimensional care înglobează atât influența timpului de staționare cât și cea a gradientului de viteză este numărul lui Camp:

$$K = (G)^a \cdot t \quad (1.5)$$

În care, G este gradientul de viteză, în s^{-1} ; t este timpul de staționare, în s iar a este un coeficient care depinde de natura și doza agentului de coagulare utilizat [47]. Numărul lui Camp se va alege în funcție de tehnologia de limpezire folosită ulterior și de natura coagulantului folosit. Comparativ cu flocularea, coagularea este un proces ireversibil care necesită un timp de reacție destul de mic dacă agitarea este realizată corespunzător. O amestecare ineficientă în timpul coagulării înseamnă o reacție incompletă, particule nedestabilizate, ceea ce conduce la pierderi de reactiv și deficiențe în limpezirea apei [3, 9].

h. Amestecarea

Două etape importante sunt cuprinse în procesul de coagulare și anume:

- Agitarea/amestecarea rapidă;
- Agitarea/amestecarea lentă.

Amestecarea rapidă este necesară procesului de coagulare pentru o dizolvare completă a coagulantului în apa brută. În această etapă are loc destabilizarea particulelor și formarea speciilor coagulante. Pentru un sistem cu amestecare rapidă, un motiv de îngrijorare ar fi timpul total de detenție sau durata de amestecare. Proiectarea corectă a unei unități de amestecare rapidă poate determina optimizarea procesului de coagulare și îmbunătățirea agregării în procesul de floculare [53].

Amestecarea lentă este etapa în care se realizează legătura între particule, soli suspensionali și hidroxidul metalic. Aceste specii care acționează în etapa lentă asupra unor componente MON depind de amestecarea rapidă și de contactul impus între particule [58].

1.4.2.3.4. Agenți de coagulare-floculare

Coagulanții sunt reactivi chimici care pot promova procesul de coagulare prin distrugerea forțelor de stabilizare între particulele coloidale și prin agregarea particulelor coloidale și MON [53].

Agenții de coagulare minerali sunt frecvent utilizați datorită necesității neutralizării sarcinilor electrice ale coloidului care se poate realiza prin creșterea concentrației de cationi în apa de tratat. În acest scop se folosesc săruri ale acizilor tari cu bazele slabe. Conform teoriei lui Schulze-Hardy, coagularea este cu atât mai eficientă cu cât încărcarea cationului este mai mare. Ca urmare, ionii trivalenți sunt de zece ori mai eficienți decât ionii bivalenți. Din acest motiv se utilizează ca și agenți de coagulare: sărurile unor ioni trivalenți (aluminii sau fier) [3, 9, 20].

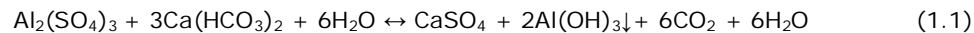
Reactivii de coagulare-floculare se aleg în funcție de următoarele aspecte:

- Costul agenților de coagulare-floculare;
- Gradul de toxicitate al produsului format;
- Eficiența procesului, exprimată prin gradul de tratare calculat în funcție de turbiditate, culoare și compuși organici [9].

Principalii coagulanți utilizați în tratarea apelor în vederea potabilizării sunt sărurile de aluminiu (sulfatul de aluminiu, clorura de aluminiu, aluminatul de sodiu, compuși de aluminiu polimerizați, etc.) și sărurile de fier (clorura ferică, sulfatul feric, clorosulfatul feric, etc.).

1.4.2.3.4.1. Sulfatul de aluminiu [Al₂(SO₄)₃]

Sulfatul de aluminiu este un produs comercial în stare solidă (denumit și "alaun") și se folosește, în general, sub formă hidratată: Al₂(SO₄)₃·18H₂O. La introducerea sulfatului de aluminiu în apă are loc reacția de hidroliză pe baza alcalinității naturale a apei, dată de bicarbonați și carbonați conform reacției:



Reacția are loc la un pH= 6,5-7,5, care reprezintă pH-ul solubilității minime a Al(OH)₃. Hidroxidul de aluminiu obținut se repartizează în apă dispersat în particule fine, încărcate cu sarcină electrică pozitivă și care neutralizează sarcina electrică negativă a particulelor coloidale din apa brută [19, 65].

În apă, ionul de aluminiu există în forma hexahidratată, Al(H₂O)₆³⁺, ion scris în literatură sub formă de Al³⁺. De compoziția chimică a apei de tratat și de pH depinde existența ionilor hidratați complecși de aluminiu. În echilibru cu hidroxidul de aluminiu solid format, Al(OH)₃↓, sunt speciile ionice care sunt prezente în concentrație mai mare: Al³⁺, 2Al(OH)²⁺ ↔ Al₂(OH)₂⁴⁺, Al(OH)₄⁻. În procesul de coagulare, ionii complecși de aluminiu sunt activi, intervenind prin adsorbție cu sau fără efect de punte la suprafața particulelor coloidale. Conținutul de Al³⁺ rezidual în apa tratată variază în funcție de doza de sulfat adăugată și de pH [9, 65].

Avantajele utilizării sulfatului de aluminiu în tratarea apei sunt:

- produce decolorarea apei;
- permite eliminarea turbidității;
- reduce materiile organice în proporție de 70%;
- reduce duritatea temporară a apei;
- la temperaturi scăzute, gradul de hidrolizare scade [3, 8, 19, 66, 67].

Dezavantajele utilizării sulfatului de aluminiu în tratarea apei sunt:

- reduce puternic pH-ul și alcalinitatea apei;

42 Considerații generale privind obținerea apei potabile-1

- acțiune corozivă asupra metalelor feroase încât se recomandă folosirea vaselor și instalațiilor din material plastic sau materiale protejate;
- produce un volum ridicat de nămol, care, prin diferite operații consumă cantități mari de apă;
- în anumite situații, aluminiul rezidual depășește limitele impuse. Diferite studii au arătat că un nivel ridicat de ioni de aluminiu în apa potabilă poate produce boala Alzheimer;
- mărește duritatea permanentă a apei;
- operează într-un interval limitat de pH [3, 8, 19, 66, 67].

pH-ul apei brute la care se recomandă folosirea sulfatului de aluminiu este 5,5-7. Pentru limpezirea apelor de suprafață se recomandă utilizarea soluțiilor de sulfat de aluminiu cu o concentrație de 5-100 g/m³. Concentrația optimă a coagulantului depinde de compoziția apei tratate, de adaosul de agenți de floculare și de modalitatea de realizare a procesului [3, 9].

1.4.2.3.4.2. Policlorura bazică de aluminiu (PAC)

Policlorura bazică de aluminiu este un produs comercial cunoscut în Europa sub denumirea de PAC. Formula chimică condensată a acestuia este $Al_n(OH)_mCl_{3n-m}$. PAC este un polimer care se poate prepara în situ, chiar înainte de utilizare sau se livrează în soluție concentrată [3]. Obținerea PAC se realizează în condiții controlate prin neutralizarea parțială a sărurilor de aluminiu. Cercetătorii au demonstrat că speciile de aluminiu predominante sunt sub formă de polimeri, având formula $Al_{13}O_4(OH)_{24}(H_2O)_{12}^{7+}$ (prescurtat Al_{13}) [53, 68, 69].

Acest polimer a apărut ca o necesitate a creșterii eficienței procesului de coagulare-floculare, care în varianta clasică (cu săruri de Al^{3+} și Fe^{3+}) prezintă o serie de neajunsuri precum:

- controlul redus asupra naturii speciilor ionice formate cu influențe asupra destabilizării sistemelor coloidale, în special, atunci când apa tratată prezintă variații de compoziție și temperatură;
- necesitatea menținerii pH-lui într-un domeniu restrâns de valori, în special, pentru doze mici de coagulanți pentru a evita interacțiunea acestora cu alte impurități din apă sau fenomene de restabilizare a sistemelor coloidale [9].

Avantajele utilizării acestui agent de coagulare în tratarea apei sunt:

- prezintă o eficiență ridicată în reducerea turbidității și a culorii;
- operează într-un interval larg de pH;
- conținutul de Al rezidual în apa tratată este mic;
- volumul de nămol rezultat este diminuat;
- nu cere adjuvant de floculare;
- realizează o coagulare rapidă;
- elimină eficient substanțele organice;
- se utilizează în doze mai mici în raport cu alaunul;
- reacționează foarte rapid cu apa;
- nu modifică deloc pH-ul și alcalinitatea temporară deoarece în momentul hidrolizei sale este prepolimerizat;
- preț de cost mai mic decât alți agenți de coagulare;
- speciile polimerice și coloidale din PAC sunt stabile;
- indice de tratare mai mic (exprimat în ioni de Al^{3+}) [3, 8, 19, 66, 70, 73].

În tratarea apei se utilizează doze de PAC între 10 și 100 g/m^3 pentru un domeniu de pH relativ extins [8]. PAC are acțiune corozivă asupra metalelor încât pentru stocare și transport sunt folosite bazine și conducte din materiale plastice [3]. În procesul de coagulare-floculare, acest compus este eficient datorită efectului de adsorbție și formării de legături tip punte [9].

Unii cercetători relatează că acest tip de coagulant are capacitatea de a precipita acizii fulvici într-un domeniu bine stabilit de pH, fiind un agent de coagulare mai bun decât sulfatul de aluminiu [42, 74]. Alți cercetători care au efectuat o anchetă de analize chimice, dinamice pe sulfat de aluminiu și PAC au descoperit că PAC destabilizează particulele mai rapid și reduce mai multe particule decât sulfatul de aluminiu [53].

1.4.2.3.4.3. Clorura ferică ($FeCl_3$)

Clorura ferică se poate folosi în tratarea apelor de suprafață fie sub formă de soluție apoasă, fie sub formă cristalizată. În general, se utilizează produsul comercial solid care este sub formă hidratată, $FeCl_3 \cdot 6H_2O$. Dozele folosite pentru limpezirea apei de râu sunt 5-100 g/m^3 de clorură ferică, produs comercial solid [3, 8]. Avantajele utilizării acestui coagulant în tratarea apei sunt:

- reduce duritatea temporară a apei;
- operează într-un domeniu de pH mai larg (pH= 5,5-9);
- viteza de hidroliză este mai mare datorită formării $Fe(OH)_3$, cu proprietăți autocatalitice;
- prezintă o afinitate mai mare pentru substanțele humice decât sulfatul de aluminiu;
- permite o îndepărtare mai bună a MON (în special a celor cu dimensiuni medii) decât alaun;
- în comparație cu alaun, nu este așa sensibil la schimbările de temperatură;
- este utilizat în cazul apelor puternic colorate și puțin mineralizate [3, 8, 9, 54, 75].

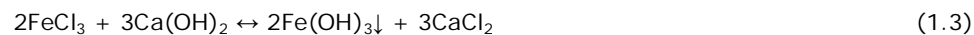
Dezavantajele utilizării acestui agent de coagulare în tratarea apei sunt:

- mărește duritatea permanentă a apei;
- produs acid și coroziv;
- ionul feric induce o colorare a apei tratate [3, 8, 9, 54, 75].

La introducerea clorurii ferice în apă are loc următoarea reacție chimică:



Pentru eliminarea agentului agresiv, CO_2 , se folosește combinația acestuia cu varul:



Adaosul de hidroxid de calciu se recomandă la tratarea apelor cu încărcare mare de coloizi [3, 9].

1.4.2.3.5. Stabilitatea sistemului coloidal

Particulele coloidale prezintă următoarele caracteristici:

- sarcină electrică negativă;
- grad mare de stabilitate;
- structură complexă;
- dimensiuni mici;
- viteze mici de sedimentare [9].

Substanțele coloidale din apă pot fi de natură anorganică (argilă, nisip, etc.) sau organică (provenite din procese de degradare a plantelor, algelor, bacteriilor, precum și din procese de degradare a impurificatorilor evacuați de industrie sau din apele orășenești) [76].

Termenul de "stabil" este folosit pentru suspensiile coloidale care nu se aglomerează natural [77]. Există două tipuri de coloizi și anume: *coloizi hidrofobi* și *coloizi hidrofili*. Coloizii hidrofobi sunt cei care nu au o afinitate pentru apă, în timp ce coloizii hidrofili prezintă afinitate pentru apă. Pentru coloizii hidrofobi (particule de argilă și oxizi metalici), particulele individuale sunt ținute în afară prin compresie electrostatică sau forțe de respingere de către cationii adsorbiți pe suprafața lor [64, 78]. Stabilitatea acestui tip de coloizi se datorează sarcinii electrice pe care o posedă. În principal, în apa de suprafață, materia organică și anorganică este hidrofobă. Coloizii hidrofili sunt stabili datorită atracției lor pentru moleculele de apă. Exemple tipice de coloizi hidrofili sunt: săpunul, amidonul solubil, detergenții sintetici și serul de sânge. Acești coloizi nu pot fi ușor îndepărtați din suspensie și astfel este necesar de zece până la douăzeci de ori mai mult coagulant decât doza normală utilizată în tratarea convențională a apei [79].

Forțele motrice care există în mod natural între două particule sunt numite *mișcarea Browniană* și *forțe Van der Waals*. Mișcarea Browniană este o mișcare aleatoare a coloizilor cauzată de 'bombardamentele' moleculelor de apă care au tendința de a spori această forță fizică [80].

Apele de suprafață conțin o cantitate mare de substanțe coloidale care rămân în suspensie o perioadă lungă de timp. Acest fenomen se datorează stabilității lor în apă. În jurul acestor particule coloidale se formează pelicule cu aceeași sarcină electrică care duc la o respingere reciprocă provocând, în acest fel, imposibilitatea de sedimentare a acestora sau depunerea într-un timp foarte lung [81].

Stabilitatea suspensiei coloidale în apa de suprafață se datorează efectului de respingere a particulelor, care sunt încărcate cu sarcini electrice de același fel (de obicei, negative). La suprafața particulelor ia naștere o zonă staționară, încărcată pozitiv. Această zonă staționară generează o a doua zonă difuză în care concentrația cationilor descrește spre periferie. Diferența de potențial din acest strat este zeta, ζ (figura 1.8) [76].

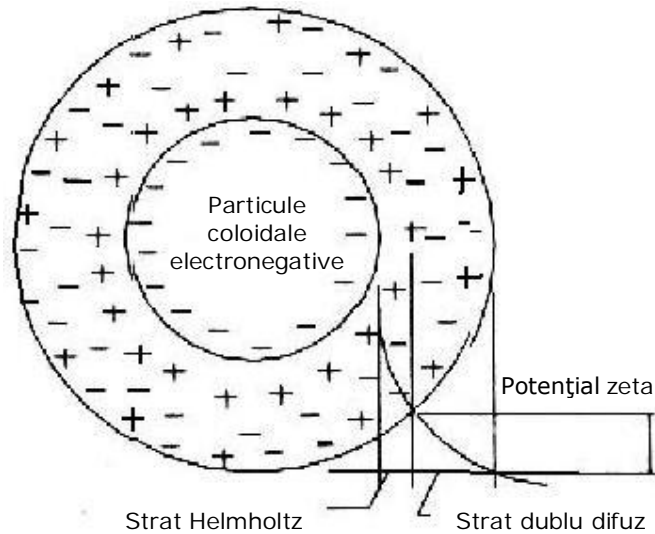


Figura 1.8. Încărcarea electrică a coloizilor [64, 78]

Potențialul zeta este caracteristica electrocinetică a stabilității dispersiei coloidale și are valoare atât la deplasarea coloizilor cât și la interacțiunea lor mutuală. Potențialul zeta reprezintă o parte din potențialul total (denumit și potențialul Nernst) [3, 8].

Dublul strat difuz (sau stratul Gouy-Chapman) este stratul de contraioni inegal repartizat în jurul coloidului. Neutralitatea acestui strat este realizată la o distanță mare de nucleu. Stratul Helmholtz este un strat dublu fix format din stratul Helmholtz fix interior și stratul Helmholtz fix exterior. Acest strat de ioni acoperă integral suprafața coloidului și asigură neutralitatea ansamblului numindu-se *strat aderent* [3, 8].

Cu cât potențialul zeta este mai mare cu atât forțele de respingere dintre particulele coloidale sunt mai mari și, prin urmare, suspensia coloidală este mai stabilă. Un potențial zeta mare înseamnă forțe puternice de separare (prin respingere electrostatică) și un sistem stabil, adică particulele au tendința de a rămâne suspendate. Un potențial zeta scăzut indică sisteme relativ instabile, adică particulele tind să formeze agregate/flocoane [64].

Pentru a îndepărta coloizii din apă, în primul rând trebuie să fie destabilizați și apoi vor putea forma flocoane mari și grele, care pot fi eliminate prin tratare fizică convențională [33].

1.4.2.3.6. Distribuția mărimii particulelor

O proprietate importantă a multor procese care implică sisteme de particule în suspensie este distribuția mărimii particulelor. Aceasta controlează aspecte cheie ale procesului și afectează proprietățile de utilizare finală a produsului. Aceste sisteme, în general, sunt caracterizate prin variații puternice în timp a distribuției mărimii particulelor cu privire la dimensiunea medie a particulei și la forma distribuției (lățimea sau/și înclinația distribuției, caracter unimodal sau/și bimodal, etc.). Pentru procesele în care intervin particule reactive, calculul cantitativ al evoluției distribuției mărimii particulelor presupune o bună cunoaștere a nucleației, creșterii și a mecanismelor de agregare [82].

Agregarea particulelor (coagulare/floculare) este un proces important în tratarea apei și a apelor uzate, având efecte semnificative asupra eficienței proceselor de separare solid-lichid [83]. Pentru optimizarea procesului de agregare este necesar să se măsoare următorii indicatori:

- numărul, densitatea, rezistența și dimensiunea particulelor/flocoanelor;
- turbiditatea;
- filtrabilitatea;
- gradul de sedimentare;
- conductivitatea.

Dintre indicatorii enumerați mai sus, în procesele de tratare a apei, dimensiunea particulelor/flocoanelor este o caracteristică cu rol major în îndepărtarea particulelor [53, 83]. Dimensiunea particulelor este o proprietate importantă care oferă informații despre natura particulelor din apă și care este responsabilă de stabilitatea colorilor dispersați în apă. Pentru obținerea dimensiunii particulelor/flocoanelor se pot utiliza următoarele metode:

- a. *Metoda microscopică* este una dintre cele mai utilizate tehnici pentru măsurarea dimensiunii particulelor [84, 85]. Avantajul acestei metode este că permite particulelor individuale să fie vizualizate, verificate și analizate la o amplificație mare. Prin această metodă se poate determina dimensiunea statică și dinamică a agregatelor [86].
- b. *Metoda de fotografiere și analiza imaginii*: permite obținerea dimensiunii statice a flocoanelor dintr-o suspensie și dimensiunea dinamică a agregatelor în regim laminar și turbulent [86].
- c. *Metoda luminii transmise* stă la baza analizorului fotometric de dispersie a luminii (PDA - Photometric Dispersion Analyser), aparat care măsoară atât dimensiunea particulelor cât și frecvența unei suspensii coagulate. Dispozitivul constă dintr-o sursă de lumină, un detector și un echipament de prelucrare care monitorizează fluctuațiile de turbiditate în probă [86].
- d. *Metoda luminii difuzate* presupune trecerea luminii printr-o suspensie în care o parte din lumină este absorbită de către particule, o altă parte este difuzată (împrăștiată), iar restul de lumină trece direct prin suspensie. Modul în care suspensia realizează acest lucru depinde de dimensiunea particulelor, natura particulelor și mediul în care sunt suspendate [87, 88]. Cel mai comercializat instrument de măsurare a dimensiunii particulelor care folosește metoda luminii difuzate este granulometrul Malvern Mastersizer 2000 [86].

Prin analiza și măsurarea cantității de particule cu dimensiuni diferite dintr-o apă brută se poate realiza:

- evaluarea eficienței procesului de tratare a apei și a problemelor operaționale;
- proiectarea proceselor de tratare a apei pentru potabilizare și a apelor reziduale [53].

Pentru a determina dimensiunea particulelor coloidale dintr-o suspensie, în această lucrare s-a utilizat metoda luminii difuzate.

1.4.2.4. Flocularea

Procesul de floculare constă în aglomerarea particulelor destabilizate în microflocoane și mai târziu în flocoane voluminoase, care apoi pot fi decantate ușor [44, 89]. În timp ce procesul de coagulare destabilizează particulele prin reacții chimice între coagulant și coloizi, flocularea este procesul de transport care provoacă ciocnirile/coliziunile necesare între particulele destabilizate și agregările ulterioare ale flocoanelor sau fragmentarea acestora (figura 1.9) [44].

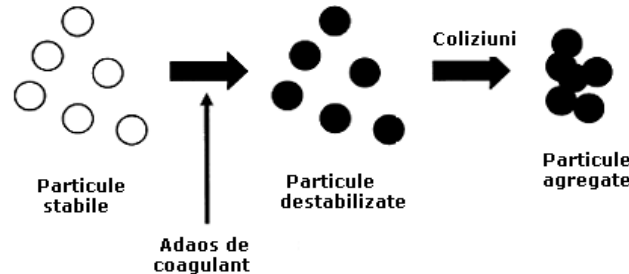


Figura 1.9. Destabilizarea și agregarea particulelor [90]

Flocoanele formate în urma procesului de floculare pot fi separate ușor prin următoarele operații: sedimentare, filtrare și flotație. În procesul de floculare, contactul dintre particule este foarte important, acesta fiind influențat de gradul de agitare al apei, timpul de agitare și temperatura apei [9].

Procesul de aglomerare a particulelor cuprinde mai multe faze succesive și anume: neutralizarea sarcinilor electrice, formarea microflocoanelor prin ciocnirea particulelor ca urmare a mișcării Browniene (fază numită "pericinetică" pentru că mișcarea particulelor are loc în toate direcțiile) și formarea macroflocoanelor (flocoane voluminoase) în care mișcarea particulelor are loc pe verticală (fază numită "ortocinetică"). În tabelul 1.6 sunt prezentate fazele procesului de agregare a colozilor [76].

Flocularea pericinetică permite agregarea particulelor datorită unei mișcări termice aleatoare (difuziune Browniană). Forța motrice pentru mișcarea particulelor este energia termică a fluidului. Cel mai probabil, această fază se produce atunci când cel puțin una dintre particule are diametrul mic (diametru $< 1 \mu m$), deci nu este un factor major în tratarea apelor [43, 91].

Tabelul 1.6. Fazele procesului de agregare a coloizilor [3, 76]

Stadiu	Fenomene	Denumirea fazei
Adaos de coagulant	Reacția cu apa, ionizare, hidroliză, polimerizare	HIDROLIZA
Destabilizare	Comprimarea dublului strat	COAGULARE
	Adsorbția specifică a ionilor coagulantului pe suprafața particulelor	
	Includerea coloidului într-un precipitat de hidroxid	
	Legarea particulelor între ele prin specii polimere ale coagulantului	
Transport	Mișcare Browniană	FLOCULARE PERICINETICĂ
	Energie disipată (gradient de viteză)	FLOCULARE ORTOCINETICĂ

Frecvența coliziunilor/ciocnirilor, N_{ij} , între particule de dimensiuni d_i și d_j , și de concentrație n_i și n_j poate fi exprimată prin ecuația [32]:

$$N_{ij} = k(i, j)n_i n_j \quad (1.6)$$

În care $k(i, j)$ este funcția de frecvență a coliziunilor. Această funcție este legată de fazele procesului de floculare și de mărimea particulei. Pentru flocularea pericinetică, ecuația de frecvență a coliziunilor este:

$$(N_{ij})_{pe} = \frac{2}{3} \frac{kT}{\mu} \frac{(d_i + d_j)^2}{d_i d_j} n_i n_j \quad (1.7)$$

În care, k este constanta lui Boltzmann, T este temperatura absolută, d este diametrul particulei și μ este vâscozitatea absolută a fluidului [53].

În concluzie, flocularea pericinetică are ca rezultat formarea microfloanelor, se produce numai pentru particule mai mici de un micron, iar probabilitatea contactului pericinetic scade pe măsură ce crește dimensiunea particulelor [9].

Flocularea ortocinetică (numită și floculare lentă) produce macrofloane ușor separabile, contactul dintre particule fiind indus de gradientul de viteză creat în masa lichidului. Această floculare este o aglomerare dirijată după o anumită direcție (deplasare pe verticală), în care contribuția mișcării Browniene la transport este neînsemnată [3, 9, 20]. Cel mai probabil, flocularea ortocinetică apare atunci când ambele particule au diametrul mai mare de un micron și o mărime destul de similară [91].

Ecuația de frecvență a coliziunilor pentru această fază este:

$$(N_{ij})_{or} = \frac{1}{6} n_i n_j (d_i + d_j)^3 G \quad (1.8)$$

În care G este gradientul de viteză mediu, s^{-1} [53].

În practică, flocularea ortocinetică se produce datorită unui gradient de viteză creat prin agitare mecanică [3].

1.4.2.5. Sedimentarea

Sedimentarea este un proces gravitațional de separare solid-lichid. Vizual, acesta poate fi împărțit în două operațiuni funcționale: îngroșare și clarificare. Scopul principal al îngroșării este de a crește concentrația particulelor solide suspendate într-un curs de apă, iar clarificarea are ca scop eliminarea unei cantități mici de particule suspendate și de a produce un efluent limpede. Aceste două operațiuni apar simultan, distincția între rezultatele dorite ale procesului primar fiind de ordin terminologic [92].

Sedimentarea depinde de dimensiunea și densitatea particulelor și de vâscozitatea fluidului [93]. Particulele cu o densitate mai mare decât a apei se abat de la curgerea fluidului datorită gravitației și se stabilizează în partea de jos a bazinului de sedimentare [25, 79, 94]. În același timp, aceste particule sunt supuse unor procese hidrodinamice și fizice datorită forțelor de forfecare din apă [95].

În tratarea apei, sub acțiunea câmpului gravitațional, particulele solide care pot fi îndepărtate sunt: măr, particule de nisip, solide în suspensie și flocoanele particulelor coloidale [9]. După tipul particulelor solide și natura interacțiunilor dintre acestea se pot deosebi patru mecanisme de sedimentare [96, 97]:

1. *Sedimentarea particulelor discrete* are loc atunci când concentrația particulelor este mică, iar flocularea și alte efecte între particule sunt neglijabile [98, 99].
2. *Sedimentarea particulelor floculante* se realizează în timp ce procesul de floculare are loc. Odată cu aglomerarea particulelor, structura și greutatea acestora crește iar sedimentarea are loc mai rapid [98].
3. *Sedimentarea stânjejită* este mecanismul în care concentrația particulelor determină efecte între particule, care ar putea include și procesul de floculare [98].
4. *Sedimentare și compresie a masei solide depuse* se realizează prin acumularea particulelor sedimentate în partea de jos a bazinului de sedimentare, unde particulele intră în contact una cu cealaltă și sunt susținute de masa lor compactată [99].

Sedimentarea se poate realiza în diferite bazine de sedimentare, unde apa este lăsată fie să circule cu viteză redusă fie în repaus astfel ca suspensiile să se depună datorită greutății lor proprii, îndepărtându-se astfel suspensiile gravitaționale, suspensiile coagulate. Suspensiile depuse pot fi îndepărtate discontinuu, continuu sau pot fi reintroduse în circuit [22].

1.4.2.6. Filtrarea

Procesul de filtrare este utilizat foarte des în industrie, medicină, industria chimică, minerit precum și în întreprinderile din industria alimentară și hârtie [100]. În tratarea apei, obiectivul principal al procesului de filtrare este realizarea separării particulelor solide care sunt suspendate în apă precum: nisipul, materiile organice coloidale sau agenții patogeni (bacterii sau viruși) [101]. Materiile aflate în suspensie sunt separate de lichid prin trecerea amestecului printr-un material poros (filtrant), care reține materiile solide și permite trecerea lichidului denumit și *filtrat* [18, 21]. Materialul filtrant trebuie să fie stabil chimic și să aibă o compoziție granulometrică și grosime adecvată [102-104]. În general, în procesul de filtrare au loc:

- *procesul de transport* – proces fizic, în care particulele suspendate sunt transportate în imediata vecinătate a stratului filtrant;

50 Considerații generale privind obținerea apei potabile-1

- *procesul de atașare* – proces fizico-chimic, în care particulele se atașează de suprafața stratului filtrant sau de o altă particulă reținută anterior pe filtru [105].

Operația de filtrare este influențată de următorii factori:

- *factori caracteristici influentului*: natura apei brute, gradul de tratare anterior filtrării, concentrația și natura impurităților;
- *factori caracteristici mediului filtrant*: natura, compoziția granulometrică, înălțimea și rezistența hidraulică a stratului filtrant, precum și utilizarea straturilor multiple;
- *condițiile hidrodinamice ale filtrării*: viteza de filtrare, presiunea de operare și pierderile de sarcină hidraulică prin stratul filtrant [106].

Pentru ca filtrarea să fie eficientă este esențial ca tratamentul aplicat apei înainte de filtrare să fie adecvat [20].

1.4.2.7. Dezinfecția

Dezinfecția este operația de distrugere/inactivare a microorganismelor obișnuite și a celor patogene și de reducere a numărului de germeni saprofiți din apă, germeni care sunt dăunători sănătății organismului uman. Ea poate fi primară (la finele filierei de tratare) prin introducerea oxidantului în rezervorul de înmagazinare (ca dezinfectant) sau secundară (în rețeaua de distribuție) ca biostabilizator [107].

Dezinfecția apei se realizează cu ajutorul unor dezinfectanți/oxidanți chimici sau fizici dintre care cel mai utilizat este clorul (adăugat în apă ca un gaz sau solid), iar procesul de dezinfecție se numește clorinare [108].

Procesul de tratare a apei cu clor prezintă următoarele avantaje:

- necesită instalații relativ simple și ieftine;
- dezinfecție bacteriană sigură la un cost scăzut;
- doza reziduală de clor menținută în apă asigură securitatea apei potabile [109].

Dezavantajele procesului de dezinfecție cu clor sunt:

- provoacă probleme de securitate a muncii;
- oxidează amoniacul la azot;
- clorul cu substanțele organice din apa brută formează compuși organo-clorurați;
- efect virucid puțin eficient [109].

În tratarea apei, dezinfecția depinde de mai mulți factori precum:

- tipul de dezinfectant;
- doza de dezinfectant;
- tipul de organism și starea fiziologică a acestuia;
- timpul de contact;
- pH;
- temperatura;
- turbiditatea;
- substanțe organice dizolvate [110].

Agenții de dezinfecție utilizați în tratarea apei trebuie să îndeplinească următoarele caracteristici:

- solubilitate ridicată în apă;
- determinare și control analitic facil;
- toxicitate mică pentru organismul uman și viața acvatică;
- absența efectelor secundare (gust, culoare, miros);

- preț de cost moderat [111].

Clorinarea, ozonizarea și dezinfectia cu UV sunt trei tehnologii importante folosite pentru dezinfectia apei [33].

Procesul de dezinfectie trebuie condus în așa fel încât să se asigure o protecție de-a lungul rețelei de transport (fără a mări concentrația produșilor de dezinfectie) la un cost cât mai mic [14, 103].

PARTEA A II-A. STUDII TEORETICE ȘI EXPERIMENTALE

Capitol 2. Modelarea și simularea proceselor chimice

2.1. Introducere

Scopul companiilor de apă potabilă este de a furniza clienților o apă potabilă de bună calitate, timp de 24 h/zi [112]. Nevoia de a obține o creștere a eficienței și a calității apei a determinat ca instalațiile de tratare a apei să fie modificate în instalații complet automatizate [113].

Abordarea tradițională a instalațiilor de tratare a apei se bazează pe observații, experimente și măsurători. Cantitatea de informații care poate fi obținută în acest mod este limitată și supusă erorilor de măsurare. În instalațiile de tratare automatizate se poate realiza un studiu analitic sau de calcul pe baza unui model matematic adecvat [114]. Un astfel de model este format dintr-un ansamblu de relații matematice, ecuații și inecuații care caracterizează și descriu interdependențele dintre parametrii constructivi și funcționali ai sistemului [115-118].

Prin folosirea simulării în asociere cu monitorizarea on-line, operațiunea de tratare a apei poate fi îmbunătățită (calitate mai bună a apei, costuri mai mici, etc.) [119]. Simularea poate fi definită ca fiind o tehnică de realizare a experimentelor, reprezentarea unui proces fizic sau doar conceptual, cu ajutorul calculatorului numeric, ce implică realizarea unor modele matematice logice ce descriu comportarea sistemului real sau a unor componente ale sale, cu scopul precis de a obține informații în ceea ce privește comportarea lui [120-122]. Avantajele simulării constau în faptul că se pot face experiențe pe un model ce este o reprezentare simbolică a sistemului. Datorită simulării este posibilă obținerea unor detalii despre sistemele studiate, a unor adevărate instantanee privind comportarea la diferite momente și în diferite condiții în care utilizatorul consideră modelul [123].

Modelarea reprezintă activitatea de elaborare propriu-zisă a modelului unui sistem sursă, activitățile desfășurate în acest sens fiind materializate prin tehnici și proceduri de căutare și analiză (tehnici de simulare și tehnici și proceduri complementare) [124, 125].

Avantajele modelării matematice sunt:

- utilă în toate fazele de dezvoltare ale unei tehnologii;
- operare optimă;
- controlul optim al proceselor;
- optimizarea exploatarei instalațiilor în funcțiune;
- proiectarea optimă a instalațiilor;
- aprofundarea cunoașterii și înțelegerii procesului [126].

Un puternic mijloc de calcul numeric și de reprezentare grafică este Matlab, care are la bază operații asupra tablourilor (vectori și matrici) și care include aplicații

specifice numite *Toolbox-uri* [118, 127]. O nouă ramură a matematicii aplicate care se ocupă cu simularea numerică a fluxurilor de fluide este Computational Fluid Dynamics (CFD, adică dinamica computerizată a fluidelor). Modelele CFD sunt folosite în mod curent pentru a prezice o varietate de fenomene de curgere din ce în ce mai complexe [114]. În esență, CFD este o metodă operabilă pe calculator folosită pentru a rezolva ecuațiile fundamentale ale dinamicii fluidelor: ecuații de continuitate (conservarea masei), de moment și de energie [128].

Modelarea matematică și simularea numerică sunt astăzi de neevitat atât în cercetare cât și în dezvoltarea tehnologiilor și operarea instalațiilor în funcțiune [129].

În această lucrare, pentru simularea și modelarea sistemelor dinamice s-a utilizat atât Matlab și Toolbox-uri ale acestuia, cât și CFD (ANSYS Fluent).

2.2. MATLAB

În ultimul deceniu, utilizarea mediului de programare Matlab a fost într-o continuă creștere în instituțiile academice științifice precum și în mai multe ramuri ale industriei. Acest software s-a dovedit a fi foarte eficient și robust în analiza numerică a datelor, în modelare, programare, simulare și vizualizare grafică computerizată [130].

Matlab provine de la *MATRIX LABORATORY* și este un produs al The Math Works Inc. Matlab este atât un mediu de calcul eficient cât și un limbaj de programare care operează cu ușurință cu matrici [131]. Versiunea inițială a Matlab-lui a fost scrisă în limbajul de programare *Fortran*, în 1970, de către analistul Cleve Moler. După care, în anii 80 a fost rescris de către firma Math Works în limbajul *C*. Acest mediu de programare dispune de o notație simplă și de o viteză mare de calcul deoarece codificarea sa în *C* a fost atent optimizată, ciclurile interne principale fiind prelucrate în limbaj de asamblare. Matlab înglobează analiza numerică, calculul vectorial, calculul matriceal, procesarea semnalelor și realizarea graficelor într-un mediu ușor de utilizat în care problemele și soluțiile sunt exprimate așa cum sunt scrise ele matematic, fără a utiliza programarea tradițională [132].

Matlab este un ansamblu de componente care cuprinde:

- un nucleu – reprezintă componenta minimală necesară dezvoltării și rulării unor aplicații scrise în acest limbaj;
- opțiunea Simulink – instrument de simulare a sistemelor dinamice; bazat pe scheme bloc și având o importantă componentă grafică;
- Toolbox-urile – colecții cuprinzătoare de funcții Matlab, care permit, pe baza unor tehnici avansate, rezolvarea unor clase particulare de probleme [131]. Dintre domeniile în care sunt utile aceste toolbox-uri fac parte: teoria reglării automate, statistica și prelucrarea semnalelor, proiectarea sistemelor de reglare, simularea sistemelor dinamice, identificarea sistemelor, rețele neuronale, etc. [132].

Față de mijloacele de calcul numeric tradiționale, Matlab prezintă următoarele avantaje:

- permite codarea rapid și ușor la un nivel înalt de limbaj;
- structurile de date necesită o atenție minimă;
- interfața interactivă permite experimentarea rapidă și o remediere ușoară;
- disponibilitatea unor grafice de înaltă calitate și facilități de vizualizare;
- fișierele *'m.'* pot fi ușor transferate într-o gamă largă de platforme;

- Toolbox-urile pot fi adăugate pentru a extinde sistemul oferind, de exemplu, facilități de procesare specializate ale semnalului și o capacitate de manipulare simbolică [133].

Cu ajutorul mediului de programare Matlab se pot efectua diverse calcule numerice precum:

- matematica generală:
 - operații cu matrici și câmpuri de date;
 - operatori relaționali și logici;
 - funcții trigonometrice și alte funcții elementare;
 - aritmetica polinomială;
- algebra liniară și funcții matriciale:
 - analiza matriceală, logaritmi, exponențiale, determinanți, inverse;
 - sisteme de ecuații liniare;
 - valori proprii, descompuneri după valori singulare;
 - construirea de matrici;
 - operații cu matrici;
- analiza de date și transformări Fourier;
- metode numerice neliniare;
- programare [132].

În mediul academic, Matlab este un instrument standard de instruire pentru cursurile introductive și avansate din matematică, inginerie și științe. În industrie, în general, acesta este utilizat pentru a obține o productivitate ridicată în cercetare, dezvoltare și analize [134].

2.2.1. Distribuția duratelor de staționare (DDS)

Timpul petrecut de o moleculă într-un sistem reactiv afectează probabilitatea ei de a reacționa [135]. Distribuția duratelor de staționare permite înțelegerea comportamentului unui flux și ne-idealitatea oricărui reactor [136]. Timpul petrecut de molecule/atomi într-un reactor este numit *timp de staționare* și distribuția diferiților atomi/molecule care ies din reactor în timp se numește *distribuția duratelor de staționare* (DDS). Experimental, DDS poate fi determinată prin injectarea unei substanțe chimic inertă numită *trasor* [137]. Testele cu trasor (DDS) sunt frecvent utilizate în caracterizarea hidrodinamicii, primele dezvoltări având loc cu aproape 80 de ani în urmă [138].

Alegerea trasorului este foarte importantă în măsurarea DDS și, pentru ca aceasta să fie corectă, trasorul trebuie să îndeplinească următoarele caracteristici:

- să fie inert (să nu reacționeze, să nu se degradeze sau să se dezintegreze cu celelalte componente din sistem);
- să fie ușor de măsurat;
- să se diferențieze ușor de ionii sau materialele existente în sistemul respectiv;
- să nu adsorbă la pereți sau alte elemente din sistem;
- să nu sedimenteze;
- să nu fie volatil;
- să nu fie toxic pentru mediu și organismul uman [139].

Pentru un experiment simplu de DDS, o cantitate cunoscută de trasor este introdusă la intrarea în sistem (sub formă de semnal) fără a perturba curgerea, iar la ieșirea din sistem se observă evoluția concentrației trasorului în timp (așa-numitul "răspuns" al sistemului), după ce aceasta a fost modificată de procesele din sistem (figura 2.1)[140].

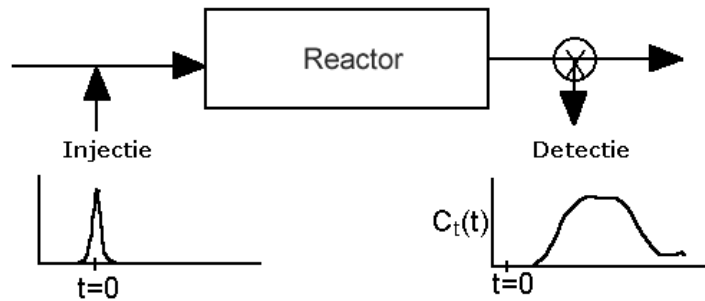


Figura 2.1. Determinarea experimentală a distribuției duratelor de staționare (t este timpul, iar C_t este concentrația traserului) [141]

În general, pentru injecția unui traser se folosesc două tehnici foarte comune și anume: semnalul impuls și semnalul treaptă (figura 2.2).

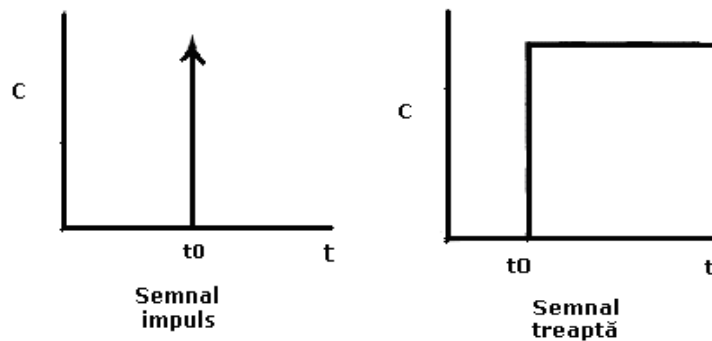


Figura 2.2. Metode des utilizate pentru injecția unui traser într-un sistem [142]

Semnalul impuls se realizează prin injectarea unei cantități date de traser (N_0) la intrare în sistem, într-o perioadă foarte scurtă de timp și apoi se măsoară concentrația traserului la ieșirea din sistem în funcție de timp. În analiza DDS, curba obținută ca și răspuns la ieșirea din sistem (curba concentrației în funcție de timp) se numește "curba C " (figura 2.3). Pentru o injecție de tip impuls, se definește funcția $E(t)$ care descrie într-un mod cantitativ intervalul de timp petrecut în reactor de diferite elemente ale fluidului:

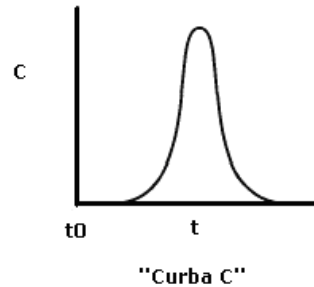
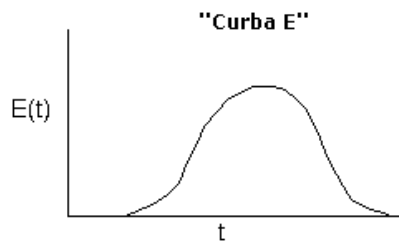


Figura 2.3. Concentrația traserului la ieșire din sistem în funcție de timp [142]

$$E(t) = \frac{F_v C(t)}{N_0} \quad (2.1)$$

Astfel încât:
$$\frac{\Delta N}{N_0} = E(t) \Delta t \quad (2.2)$$

În care, $E(t)$ este denumită funcția densității de distribuție a duratelor de staționare (figura 2.4), $C(t)$ este concentrația traserului, ΔN este cantitatea de traser care a stat un interval de timp în reactor ($t, t+\Delta t$) și F_v este debitul volumetric al efluentului [137].

Figura 2.4. Semnificația funcției $E(t)$ [142]

Dacă debitul volumetric este constant, atunci $E(t)$, după rescrierea ecuațiilor 2.1 și 2.2 în formă diferențială și după integrarea lor, se definește astfel:

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t) dt} \quad (2.3)$$

În care integrala de la numitor reprezintă suprafața de sub "curba C" [137].

Dezavantajele acestei tehnici sunt:

- injecția trebuie să fie făcută într-un timp foarte scurt;
- când "curba C" are o coadă lungă, analiza poate da naștere la inexactități;
- cantitatea de traser utilizată trebuie să fie cunoscută [142].

În comparație cu semnalul treaptă, această tehnică necesită o cantitate foarte mică de traser [142].

Semnalul treaptă se realizează prin creșterea concentrației traserului la intrarea în sistem de la 0 la C_0 , menținerea ei constantă, iar la ieșirea din sistem se urmărește evoluția concentrației traserului în funcție de timp. Concentrația traserului la ieșirea din sistem se definește astfel:

$$C(t) = C_0 \int_0^t E(t) dt \quad (2.4)$$

Pe baza funcției $E(t)$ se poate defini funcția de repartiție integrală a distribuției, $F(t)$ (numită și "curba F" a lui Dankwerts), conform ecuației:

$$E(t) = \frac{dF(t)}{dt} \quad (2.5)$$

În care $F(t)$ se definește ca fiind fracția din elementele de fluid care au staționat în sistem un timp mai mic sau cel mult egal cu t [137]. Un exemplu de funcție de repartiție integrală este reprezentat în figura 2.5.

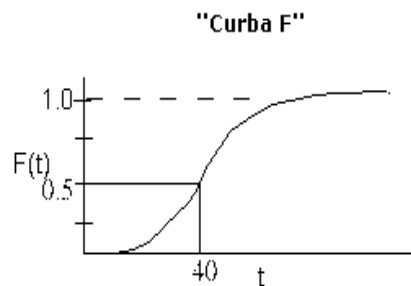


Figura 2.5. Exemplu de funcție de repartiție integrală: 50% din moleculele de traser au staționat în reactor 40 de secunde [142]

Dezavantajele acestei tehnici sunt:

- dificultatea de a menține concentrația traserului constantă la intrarea în sistem;
- funcția de DDS necesită diferențiere și acest lucru poate duce la erori;
- necesită o cantitate mare de traser [142].

Injectia traserului și detecția acestuia se poate face și în alte locații decât la intrare și ieșire din sistem [140]. Detecția traserului poate fi obținută, de exemplu, cu ajutorul unei metode conductometrice [143, 144].

Aplicațiile tehnice ale ingineriei chimice de multe ori se bazează pe interacțiunea dintre cinetica chimică și dinamica fluidelor. În reactoarele chimice, interacțiunea dintre cele două procese este adesea caracterizată în termeni de distribuție a duratelor de staționare (DDS) a reactoarelor. DDS este de o importanță fundamentală în estimarea randamentului și selectivității oricărei reacții dintr-un anumit reactor [145]. Datorită analizei lui Dankwerts privind un număr important de DDS, acest concept a devenit o noțiune importantă în caracterizarea oricărui reactor chimic sau sistem tehnic [146]. O analiză recentă a teoriei distribuției duratelor de staționare și aplicațiile sale în diverse domenii precum inginerie chimică, ingineria proceselor biochimice, cromatografie, medicină, geologie și oceanografie a fost realizată de Nauman [147]. În reactoarele chimice clasice de mari dimensiuni, curgerea fluidului este, de obicei, turbulentă și DDS este adesea descris de modelul reactoarelor în serie sau de modelul unidimensional de dispersie axială [148, 149].

În aplicațiile practice din ingineria chimică, comportamentul fluxului din reactoare este diferit de cel din reactoarele ideale (reactorul cu amestecare perfectă și reactorul de tip piston). În cele mai multe studii sunt utilizate reactoarele ideale pentru că toate elementele fluidului din reactor au același timp de staționare.

Modelele simplificate sunt utilizate, în general, pentru a caracteriza și modela reactoarele ne-ideale, DDS din sistem și calitatea amestecării [149]. Modelarea reactoarelor ne-ideale se poate realiza printr-o combinație de reactoare ideale deoarece de regulă fluxurile interne dintr-un reactor nu pot fi caracterizate ca fiind perfect amestecate sau de tip piston cu dispersie axială [150].

Există două tipuri de reactoare ideale care sunt frecvent utilizate pentru descrierea fluxului din reactoare și anume reactorul cu amestecare perfectă și reactorul de tip piston. Primul reactor presupune amestecare perfectă, iar al doilea nu presupune amestecare în direcția curgerii. Nici un reactor real nu are exact caracteristicile unuia dintre cele două reactoare ideale. Modelul de dispersie axială și cel de reactoare în serie sunt modele cu un singur parametru, care descriu comportamentul amestecării. Parametrul din modelul reactoarelor în serie este numărul necesar de reactoare, " N ", iar în modelul de dispersie axială este numărul Peclet, Pe . Acești parametri sunt o măsură a amestecării din reactor [151].

În figura 2.6 este prezentat un exemplu de model de reactoare cu amestecare ideală în serie, iar în figura 2.7 un exemplu de reactor de tip piston cu dispersie axială.

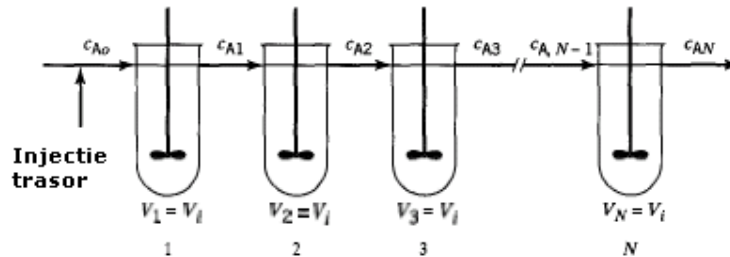


Figura 2.6. Model de reactoare în serie [142]

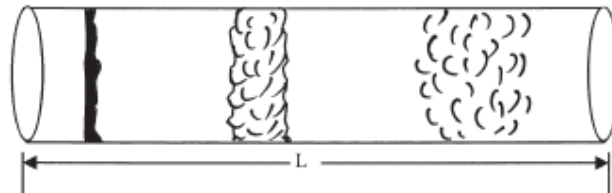


Figura 2.7. Dispersia traserului într-un reactor de tip piston cu dispersie axială [142]

În modelele de curgere reală pot apărea mai multe modificări importante cum ar fi formarea de regiuni stagnante în interiorul reactorului, zone de recirculare, etc. [152]. În 1959, Cholette și Cloutier au prezentat câteva modele pentru reactoarele ne-ideale prin combinarea modelului de curgere de tip piston cu zone de by-pass și zone stagnante ("zone moarte"), împreună cu ecuațiile și diagramele care descriu caracteristicile modelelor de reactoare [153]. DDS oferă informații cu privire la cât de mult timp au petrecut diferite elemente în reactor, dar nu oferă nici o informație despre schimbul de materie între elementele fluidului [154].

Printre mediile de programare utilizate pentru modelarea bazată pe DDS se regăsește și mediul de programare Matlab. Odată cu avansarea rapidă a tehnologiei

de calcul, a crescut și numărul de studii privind DDS în reactoare și mixere folosind CFD, inclusiv și un număr limitat de publicații despre DDS în reactoare cu amestecare continuă [155].

În general, există două metode principale pentru a calcula DDS cu CFD. Ambele metode cuprind două etape, dintre care prima constă în a rezolva câmpul de curgere. Acest câmp de curgere rămâne fix pentru etapa ulterioară, în ambele metode. Metodele diferă doar la etapa a doua. Prima metodă constă în a crea o simulare tranzitorie de scalari pasivi și de a prezice răspunsul la ieșire pentru un semnal impuls sau treaptă, demarat la intrare [156-159]. Această metodă, practic, imită metodele utilizate în măsurătorile experimentale de DDS. Pasul de timp trebuie ales cu grijă pentru a minimiza erorile în simularea tranzitorie [156, 158-160]. De obicei, la intrare este de preferat semnalul treaptă față de semnalul impuls care poate avea concentrațiile scalarului la ieșire foarte mici. Astfel, erorile pot fi suficient de mari iar bilanțul global de materiale pentru reactor invalid [158-160]. A doua metodă constă în urmărirea particulelor pentru a calcula statistic DDS [156]. Dacă sunt modelate particule suficiente, această metodă poate fi rezonabil de exactă [155]. Metoda constă în introducerea unor particule virtuale la intrare în sistem, a căror traiectorie este calculată din domeniul de viteză cunoscut și obținut din calculul cu CFD. Diferența dintre cele două metode este că în metoda de urmărire a particulelor numai proprietățile convective ale fluxului sunt monitorizate, în timp ce prin evaluarea câmpului de concentrație instabil este luat în considerare și transportul difuziv [161, 162].

Analiza DDS este un instrument de diagnostic foarte eficient care poate fi folosit și pentru a inspecta funcționarea defectuoasă a reactoarelor chimice. De asemenea, acesta este foarte util în modelarea comportamentului unui reactor și în estimarea proprietăților efluenților [152].

În această lucrare, analiza distribuției duratelor de staționare (DDS) s-a realizat în primul rând cu ajutorul mediului de programare Matlab, folosind ambele tehnici descrise anterior și două modele hidrodinamice: modelul de dispersie axială și modelul Cholette-Cloutier și în al doilea rând cu mediul de programare CFD, folosind metoda bazată pe crearea unei simulări tranzitorii.

2.3. Dinamica computerizată a fluidelor (CFD)

Mișcarea fluidelor este guvernată de următoarele principii fundamentale: conservarea masei, legea a doua a lui Newton (ecuația de impuls) și conservarea energiei. Aceste principii fundamentale pot fi exprimate prin ecuații diferențiale parțiale. Acest sistem neliniar de ordinul doi cu ecuații diferențiale parțiale, în cazul general, nu poate fi rezolvat prin metode analitice în timp ce în multe aplicații concrete este posibil să fie rezolvat prin metode numerice.

CFD este disciplina care se ocupă cu tratamentul numeric al sistemului de ecuații diferențiale parțiale care conține ecuații de continuitate, impuls și energie. Astfel, toate metodele numerice dezvoltate pentru ecuațiile diferențiale parțiale (cum ar fi diferențe finite, volum finit, metode cu elemente finite și metode spectrale) constituiesc domeniul dinamicii computerizate a fluidelor. Aceste metode numerice transformă sistemul de ecuații menționat mai sus într-un sistem neliniar mai mare de ecuații algebrice [163]. Metodele CFD au fost dezvoltate acum 40 de ani de către ingineri și matematicieni pentru rezolvarea unor probleme de curgeri în domeniul ingineriei industriale, iar ecuațiile fundamentale ale mișcării fluidelor care stau la baza acestor metode au fost cunoscute încă din secolul al XIX-lea [164].

CFD este o procedură numerică frecvent utilizată pentru a calcula proprietățile fluidului în mișcare. Multe procese de tratare a apei implică mișcarea apei. Această mișcare este adesea complexă și dificil de a fi observată [165]. CFD face posibilă evaluarea vitezei, presiunii, temperaturii și concentrației speciilor (de exemplu, un traser) în timpul curgerii fluidului de-a lungul unui domeniu de soluție, permițând astfel ca modelul proiectat să fie optimizat înaintea fazei prototip [166]. CFD prezintă următoarele avantaje:

- capacitatea de a examina comportamentul sistemelor la limită;
- capacitatea de a studia sisteme mari, unde experimentele la scară largă ar fi dificil de controlat dacă nu chiar imposibil de realizat;
- reducerea timpului de introducere a datelor și a costurilor pentru noile proiectări;
- folositor în înțelegerea hidrodinamicii standard a proceselor de curgere în structuri [167];
- poate să reprezinte sisteme adecvate în detaliu cu cerințe minime pentru datele empirice;
- util pentru sistemele care sunt bine conectate [165];
- odată calculul finalizat, există informații disponibile pentru fiecare celulă de discretizare din echipament [168];
- permite un control complet asupra condițiilor la limită;
- simulările pot fi efectuate la scară;
- permite o analiză eficientă a parametrilor pentru diferite configurații și pentru diferite condiții [164].

Limitările CFD sunt:

- soluțiile CFD depind de modelele fizice ale proceselor reale;
- soluțiile CFD sunt la fel de precise ca și modelele fizice pe care se bazează;
- rezolvarea ecuațiilor cu ajutorul unui calculator introduce invariabil erori numerice (erori de trunchiere datorate aproximării în modelele numerice etc.);
- acuratețea soluției CFD este la fel de bună ca și a condițiilor inițiale/limită prevăzute în modelul numeric [169].

În timpul dezvoltării și utilizării oricărui model CFD, mai multe criterii specifice trebuie avute în vedere printre care enumerăm:

- densitatea discretizării;
- alegerea modelului de turbulență;
- selecția unor condiții limită adecvate [170].

Atunci când se utilizează CFD, procedura generală este:

1. Crearea geometriei, în care fluidul trebuie să fie modelat;
2. Generarea discretizării;
3. Aplicarea condițiilor limită (viteza fluidului, etc.);
4. Rezolvarea ecuațiilor de transport ale fluidului;
5. Examinarea rezultatelor (post-procesarea) [171].

Generarea discretizării (sau pre-procesarea) se realizează înainte de a calcula orice parametru cu CFD prin divizarea spațiului fizic prin care trece fluidul într-un număr de puncte discrete, formând o rețea. În general, orice tip de metodă analitică care poate fi aplicată peste un set discret de puncte poate fi folosită ca baza unei analize CFD. Cu toate acestea, instrumentele de analiză actuale ale CFD rezolvă ecuații instabile, tridimensionale și compresibile ale lui Euler sau Navier-Stokes. Aceste ecuații iau în considerare efecte precum compresibilitatea, rotația și interacțiunea dintre componente care sunt neglijate în alte metode mai puțin

cuprinzătoare. Principala diferență între soluțiile Euler și Navier-Stokes este includerea vâscozității: soluțiile Euler sunt valabile pentru fluide ne-vâscoase, în timp ce soluțiile derivate din ecuațiile Navier-Stokes includ și efecte vâscoase. Odată ce analiza este completă, rezultatele trebuie să fie convertite într-o formă care este ușor de înțeles. Vizualizarea rezultatelor obținute în urma calculului realizat de CFD se mai numește și post-procesare [172].

Pentru a rezolva numeric ecuațiile Euler sau Navier-Stokes se folosește frecvent metoda diferențelor finite, fie cea a volumului finit. În formularea diferențelor finite, valorile proprietăților de curgere a fluidului în fiecare punct din rețea sunt găsite prin utilizarea unei ecuații algebrice specifică acestui punct, care aproximează ecuațiile diferențiale parțiale. Ecuațiile algebrice ale diferențelor finite calculează proprietățile de curgere într-un punct dat bazându-se pe proprietățile de curgere ale punctelor adiacente; deci această formulare necesită utilizarea unei rețele structurate pentru a determina relațiile dintre punctele rețelei. În formularea volumului finit, ecuațiile care guvernează sunt scrise sub formă de integrală astfel încât restricția privind tipul de rețea care poate fi folosit nu se mai aplică. Formularea diferențelor finite este mai eficientă deoarece folosește rețele structurate, în schimb formularea volumului finit este mult mai utilă deoarece poate folosi fie rețele structurate, fie rețele nestructurate [172].

CFD este un instrument flexibil care poate fi folosit pentru simularea sistemelor în diferite moduri: de la modele "de precizie" tridimensionale, extrem de complexe la investigații bidimensionale, rudimentare/simpliste [173].

FLUENT este un software CFD care simulează problemele de curgere ale fluidelor și care oferă posibilitatea de a folosi modele fizice diferite cum ar fi incompresibil sau compresibil, ne-vâscos sau vâscos, laminar sau turbulent, etc. FLUENT oferă următoarele opțiuni de modele turbulente [89]:

- *Modelul Spalart-Allmaras* este modelul cu o singură ecuație, care rezolvă două ecuații de transport pentru un fluid care este o formă modificată a vâscozității cinematice turbulente;
- *Modelele $k-\varepsilon$* sunt modele cu două ecuații, care rezolvă două ecuații de transport: una pentru k (energia cinetică turbulentă) și una pentru ε (gradul de disipare a energiei). Aceste modele se clasifică în modelul $k-\varepsilon$ standard, modelul $k-\varepsilon$ realizabil și modelul $k-\varepsilon$ renormalizat (RNG);
- *Modelele $k-\omega$* sunt tot modele cu două ecuații, care rezolvă două ecuații de transport: una pentru k și una pentru ω (gradul de disipare specific). Aceste modele încorporează modificări pentru numere Reynolds mici și se clasifică în modelul $k-\omega$ standard și modelul $k-\omega$ de transport a forței de forfecare;
- *Modelul forței Reynolds* încheie ecuațiile Navier-Stokes cu numere Reynolds medii prin rezolvarea ecuațiilor de transport pentru forțele Reynolds, împreună cu o ecuație pentru gradul de disipare [174].

În instalațiile de tratare a apei, CFD mai poate fi folosit pentru proiectarea și optimizarea caracteristicilor geometrice (tipul rotorului, poziția fluxurilor de intrare) și operaționale (frecvența de rotație a rotorului, cantitatea de floculant, gradul de recirculare) ale unui proces [175].

2.3.1. Regim de curgere turbulent

Majoritatea curgerilor fluide din natură și din diferite aplicații ale ingineriei sunt turbulente. Turbulența este proprietatea fluidului de a curge, dar nu a

fluidelor [176]. Curgerea turbulentă se mai numește și *regim hidraulic* și se definește ca fiind un flux în care variază aleatoriu diferiți parametri precum viteza, presiunea și densitatea [177]. În curgerea turbulentă apare o puternică amestecare laterală a fluidului, ca urmare a existenței unor vectori de viteză cu direcții și sensuri diferite față de direcția și sensul de deplasare a fluidului. Regimul de curgere turbulent apare la viteze respectiv debite mari ale fluidului și atunci când numărul Reynolds depășește o valoare critică peste care curgerea laminară este instabilă [178, 179].

În urma experimentelor, Reynolds a constatat că parametrii independenți care caracterizează orice regim de mișcare a fluidului real sunt:

- viteza medie de curgere (U);
- dimensiunea caracteristică a tubului prin care are loc curgerea (D);
- vâscozitatea cinematică a fluidului (ν).

Cu ajutorul acestor parametri independenți se definește criteriul lui Reynolds:

$$Re = \frac{UD}{\nu} \quad (2.6)$$

Valoarea critică a criteriului Reynolds, de la care mișcarea devine turbulentă, este [180]:

$$Re_{cr} = 2320$$

Între regimul de curgere turbulent și cel laminar există următoarele deosebiri:

- în mișcarea turbulentă, particulele de fluid au caracter dezordonat iar liniile de curent nu mai sunt paralele cu direcția de curgere; acestea se intersectează, se împletesc iar în masa de fluid apare o distribuție de vârtejuri dispuse aleatoriu în raport cu direcția de curgere;
- viteza într-un punct, în spațiul ocupat de fluidul în mișcare turbulentă permanentă nu are niciodată o valoare constantă, direcția vitezei se schimbă în orice moment iar componentele scalare ale vitezei locale au caracterul unor mărimi care oscilează rapid în jurul unei valori medii, fenomen numit *pulsația vitezelor*;
- datorită pulsațiilor de viteză, în masa de fluid apar eforturi suplimentare care modifică repartitia vitezelor în secțiune; ca urmare, pierderile de energie (energie disipată) vor fi mult mai mari decât în mișcarea laminară;
- în mișcarea turbulentă apar deplasări de particule pe direcție transversală față de direcția generală a mișcării, realizând astfel un amestec turbulent. Acest schimb de particule atrage după sine un transfer de impuls și de energie [180].

Ecuțiile de mișcare pentru curgerea turbulentă se consideră a fi ecuațiile Navier-Stokes. Rezolvarea numerică a ecuațiilor Navier-Stokes pentru cazul turbulent este extrem de dificilă datorită diferențelor semnificative dintre scările de lucru implicate într-o astfel de mișcare. Astfel, o soluție numeric stabilă cere o rețea atât de fină încât calculul devine imposibil de realizat. Încercarea de a rezolva curgerea turbulentă prin intermediul curgerii laminare rezultă într-o soluție nestaționară în timp și neconvergentă. De aceea, în practică, pentru astfel de calcule se folosește ecuația Navier-Stokes-Reynolds (RANS–Reynolds Averaged Navier-Stokes) de mediere a timpului suplimentată cu un model de turbulență precum modelul $k-\varepsilon$. O altă tehnică de a rezolva numeric ecuațiile Navier-Stokes este simularea cu vârtejuri (LES–Large Eddy Simulation), care este mai costisitoare (ca timp de calcul) decât metoda RANS dar produce rezultate mai bune deoarece scările turbulente mari sunt rezolvate explicit [181].

Într-o curgere turbulentă reală, energia cinetică este transferată de la scări mari la scări mai mici. La cea mai mică scară, energia cinetică este transformată în energie internă și acest proces este numit *disipare*. Procesul de transfer al energiei între scări se numește "*proces în cascadă*". Cea mai mică scară de lungime turbulentă este definită de vâscozitatea moleculară și de gradul de disipare. O astfel de scară de lungime este adesea menționată ca scara de lungime Kolmogorov, η , și este dată de ecuația:

$$\eta = \left(\frac{v^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (2.7)$$

În care, v este vâscozitatea cinematică a fluidului și ε este gradul de disipare turbulent. Similar, scările de viteză și de timp Kolmogorov sunt definite de ecuațiile:

$$v = (v\varepsilon)^{1/4} \quad (2.8)$$

$$\tau = \left(\frac{v}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (2.9)$$

Gradul de disipare turbulent ce apare la scări mici poate fi legat de energia vârtejurilor mari astfel:

$$\varepsilon = \frac{U^3}{l} \quad (2.10)$$

În care, U este scara de viteză a vârtejurilor mari și l este scara de lungime a vârtejurilor mari [177]. Pentru a caracteriza dinamica fluidelor, pe lângă micro-scara lui Kolmogorov mai sunt două tipuri de scări importante și anume:

- Macro-scara lui Taylor (Λ) este definită ca fiind dimensiunea medie dintre structurile cele mai energetice prezente în flux (ecuația 2.11). Această scară poate fi spațială sau temporală. În primul caz, se definește distanța la care viteza este corelată cu ea însăși. Macro-scara temporală corespunde timpului la care într-un punct de măsurare viteza este din nou corelată cu ea însăși. Macro-scara spațială poate fi determinată direct prin tehnica P.I.V. (Particle Image Velocimetry - tehnică folosită pentru a obține măsurători instantanee ale vitezei și proprietăți conexe ale fluidelor), care oferă informații spațiale.

$$\Lambda = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \quad (2.11)$$

În ecuația 2.11, k este energia cinetică turbulentă [182].

- Micro-scara lui Taylor (ξ) caracterizează energia celor mai mici vârtejuri. În turbulență izotropă omogenă, aceasta se definește prin următoarea ecuație:

$$\xi = \sqrt{\frac{15v\overline{u'^2}}{\varepsilon}} \quad (2.12)$$

În care, $\overline{u'^2}$ este valoarea medie a fluctuațiilor vitezei turbulente, ε este gradul mediu de disipare vâscoasă a energiei cinetice turbulente și v este vâscozitatea cinematică a solventului [182]. Curgerea turbulentă prezintă următoarele trăsături caracteristice:

- haotică, neregulată, aleatorie;
- difuzivitate ridicată. Creșterea difuzivității duce la creșterea rezistenței și transferului de căldură în fluxurile interne cum ar fi în canale și țevi;
- prezintă numere Reynolds mari ($Re \geq Re_{cr}$);
- întotdeauna este tridimensională și instabilă;
- disipativă, ceea ce înseamnă că energia cinetică din vârtejurile mici este transformată în energie termică (proces în cascadă);
- chiar dacă avem scări turbulente mici în flux, ele sunt mult mai mari decât scara moleculară și deci se poate trata fluxul ca fiind un mediu continuu [183].

Câteva exemple uzuale de curgere turbulentă ar fi curgerea sângelui în artere, transportul de ulei în conducte, curgerea lavei, curenții din oceane, curgerea prin pompe și turbine, etc. [184].

2.3.2. Model de turbulență $k-\varepsilon$

Unul dintre cele mai utile modele de turbulență și cel mai potrivit pentru soluții numerice este modelul $k-\varepsilon$ [139]. Acesta este frecvent utilizat în cercetare și în aplicații practice, fiind capabil să modeleze o gamă largă de scări de lungime găsite, în general, în reactoarele cu amestecare [185, 186].

Modelul $k-\varepsilon$ modelează turbulența cu două ecuații de transport ceea ce permite determinarea independentă a vitezei turbulente și a scării lungimilor. Modelele $k-\varepsilon$ se clasifică în:

- modelul $k-\varepsilon$ standard;
- modelul $k-\varepsilon$ realizabil;
- modelul $k-\varepsilon$ renormalizat (RNG) [187].

Modelul $k-\varepsilon$ standard este un model semiempiric în care efectele vâscozității moleculare sunt neglijabile [89]. Energia cinetică turbulentă k și gradul de disipare ε se obțin din următorul sistem de ecuații de transport:

$$\rho \frac{Dk}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M \quad (2.13)$$

$$\text{și} \quad \rho \frac{D\varepsilon}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.14)$$

În care, G_k este termenul de generare a energiei cinetice turbulente; G_b este termenul ce ia în considerare efectul flotabilității; Y_M este termenul ce ia în considerare efectul compresibilității; Pr_k și Pr_ε sunt numere Prandtl turbulente pentru k , respectiv ε ; ρ este densitatea fluidului; $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ sunt constante și μ este vâscozitatea dinamică a fluidului [187].

Termenul de generare a energiei cinetice turbulente are expresia:

$$G_k = -\overline{\rho u_i u_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (2.15)$$

Termenul ce ia în considerare efectul flotabilității este:

$$G_b = \beta g_j \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (2.16)$$

În care β este coeficientul de dilatare termică și μ_t este vâscozitatea turbulentă. Termenul ce ia în considerare efectul compresibilității are expresia:

$$Y_M = \rho \varepsilon 2M_t^2 \quad (2.17)$$

În care M_t este numărul Mach turbulent [187].

Modelul k-ε realizabil este modelul care satisface în plus față de celelalte modele câteva restricții matematice asupra tensiunilor Reynolds în concordanță cu fizica curgerii turbulente [188]. În acest model, forma ecuației de transport pentru ε este diferită de cea pentru modelele k-ε standard și RNG. Modelul k-ε realizabil propune următoarele îmbunătățiri:

- o ecuație diferită pentru modelarea disipației, ε , bazată pe ecuația dinamică a rădăcinii pătratelor fluctuațiilor vorticității;
- o formulă pentru calculul vâscozității turbulente.

Ecuațiile de transport pentru k și ε ale acestui model sunt:

$$\rho \frac{Dk}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M \quad (2.18)$$

$$\text{și } \rho \frac{D\varepsilon}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_{1\varepsilon} S \varepsilon - \rho C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} G_b \quad (2.19)$$

În care, G_k , G_b și Y_M sunt termeni care se calculează la fel ca la modelul k-ε standard [187]. $C_{2\varepsilon}$, $C_{1\varepsilon}$ și $C_{3\varepsilon}$ sunt constante, iar C_1 este un coeficient care se calculează cu relația:

$$C_1 = \max \left(0,43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right) \quad (2.20)$$

În care, η are expresia:

$$\eta = S \frac{k}{\varepsilon} \quad (2.21)$$

Iar S este [176]:

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (2.22)$$

Modelul k-ε renormalizat (RNG) este asemănător cu modelul k-ε standard, dar folosește o deducere teoretică îmbunătățită bazată pe tehnici statistice riguroase numită *teoria renormalizării grupului*. În ecuațiile de transport ale lui k și ε , unii termeni sunt modificați iar constantele empirice din modelul k-ε standard aici au valori justificate teoretic. Îmbunătățirile aduse de acest model sunt:

- folosește o expresie analitică pentru calculul numerelor Prandtl turbulente;
- folosește în ecuația de transport a vitezei disipate turbulente, ε , o expresie în loc de o constantă;
- calculează vâscozitatea cu o formulă analitică, valabilă și pentru numere Reynolds mici ceea ce permite o modelare mai bună a straturilor limită [187].

Ecuțiile de transport pentru k și ε sunt:

$$\rho \frac{Dk}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(Pr_k \lambda_{ef} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M \quad (2.23)$$

$$\text{și} \quad \rho \frac{D\varepsilon}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(Pr_\varepsilon \lambda_{ef} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon}^* \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.24)$$

În care, G_k , G_b și Y_M sunt termeni care se calculează la fel ca la modelul k - ε standard [187].

În ecuația lui ε , apare un termen nou care îmbunătățește semnificativ precizia pentru fluxurile rapide. Efectul de spin pentru turbulență este inclus în modelul RNG, sporindu-se astfel precizia pentru fluxurile cu vârtejuri [176].

În cadrul acestei lucrări, pentru analiza DDS cu ajutorul mediului de programare ANSYS Fluent (CFD), care presupune rezolvarea numerică a ecuațiilor RANS, s-a utilizat metoda volumului finit și modelul k - ε standard.

Capitol 3. Modelarea hidrodinamicii unei stații pilot de tratare a apei de suprafață cu mediul de programare Matlab

3.1. Introducere

Apa de suprafață este utilizată ca resursă de apă potabilă în întreaga lume. Apa furnizată de sistemele de alimentare cu apă în diferite scopuri trebuie să îndeplinească anumite cerințe. Aceste cerințe pot fi realizate prin tratarea apei. În funcție de calitatea sursei, există diferite metode de tratare a apei brute: procese fizice (filtrare și sedimentare), procese biologice (filtre lente de nisip), procese chimice (coagulare, floclare, clorinare), etc. Prin intermediul diverselor facilități și echipamente care formează un lanț de procese (un flux tehnologic continuu), instalațiile de tratare asigură și pun la dispoziția consumatorilor apă potabilă ca produs final [119, 189].

În tratarea apei, calitatea apei produse, costurile operaționale, impactul asupra mediului (scurgeri de apă în tratare și distribuție, utilizarea de produse chimice, producția de nămol și deșuri) sunt unele dintre criteriile aplicate pentru evaluarea eficacității procesului. Prin folosirea simulării în combinație cu monitorizarea on-line și cu controlul procesului în timp real, eficacitatea tratamentului poate fi îmbunătățită, optimizarea și controlul parametrilor de proces ducând la o apă mai bună și mai stabilă din punct de vedere calitativ. Acest lucru asigură, de asemenea, o utilizare mai bună a infrastructurii instalate, costuri mai mici în tratare și reducerea emisiilor în mediu [119]. Funcționarea optimă a unei instalații de tratare a apei necesită, ca prim pas, înțelegerea comportamentului unui flux de-a lungul instalației de tratare. O metodă eficientă de diagnosticare a caracteristicilor fluxului într-o gamă largă de sisteme de curgere este determinarea distribuției duratelor de staționare (DDS). Un astfel de studiu presupune introducerea unei cantități cunoscute de traser la intrarea în sistem, iar la ieșirea din sistem este înregistrată și analizată concentrația de traser în scopul identificării modelelor de curgere pentru fiecare echipament în parte [190]. Analiza DDS poate dezvălui caracteristici ale curgerii precum: timpi de tranziție, zone de by-pass, zone de recirculare, zone moarte etc.

În general, orice instalație de cercetare trebuie să prezinte patru tipuri de caracteristici și anume:

1. Caracteristici statice
 - domeniul de măsură;
 - domeniul de supraîncărcare a instalației;
 - limita de siguranță [8].
2. Caracteristici metrologice
 - *Precizia* reflectă gradul de exactitate al rezultatului tuturor măsurătorilor în raport cu valorile reale a parametrilor;
 - *Justețea* se referă la faptul că în orice moment instalația de cercetare trebuie să dea rezultate cât mai apropiate de valoarea parametrilor măsurați în interiorul ei;

- *Fidelitatea* se referă la faptul de a prezenta variații cât mai mici a rezultatelor cercetării la măsurarea repetată a mărimilor ce interesează în condiții identice de măsurare;
- *Sensibilitatea* redă modul în care instalația de cercetare răspunde la influența mărimilor perturbatoare;
- *Reproductibilitatea*, proprietatea instalației de cercetare de a oferi în condiții identice, rezultate identice [8].

3. Caracteristici tehnice

- *Stabilitatea* constă în menținerea caracteristicilor metrologice constante în timp;
- *Inerția* reflectă modul în care instalația de cercetare răspunde la influența factorilor perturbatori;
- *Generalitatea* se referă la faptul că pe baza determinărilor experimentale pentru o anumită problemă de cercetare rezultatul cercetării se poate extrapola și pentru cazuri generale;
- *Fiabilitatea*, caracteristica instalației de cercetare care se exprimă prin probabilitatea ca aceasta să-și îndeplinească funcția impusă în anumite condiții dinaintea stabilite pe întreaga perioadă de cercetare.

4. Caracteristica dinamică [8].

În Timișoara, la compania de apă și canalizare este pusă în funcțiune o stație pilot care urmărește etapele procesului tehnologic de obținere a apei potabile din apă de suprafață (râul Bega). Până în prezent, stația pilot îndeplinește primele trei caracteristici ale unei instalații de cercetare (statică, metrologică și tehnică). Pentru a realiza a patra caracteristică, cea dinamică, comportamentul dinamic al stației pilot a fost investigat experimental prin utilizarea DDS.

Obiectivul acestui capitol este de a determina hidrodinamica echipamentelor stației pilot pe baza distribuției duratelor de staționare. Calculele numerice și prelucrarea datelor s-a realizat cu ajutorul mediului de programare Matlab. Pentru îndeplinirea acestui obiectiv s-a folosit o procedură experimentală care începe de la punctul de intrare al apei brute până la evacuarea apei tratate și cuprinde următoarele etape:

- identificarea geometriei echipamentelor ce alcătuiesc stația pilot și analiza curgerii prin aceste echipamente la diferite debite de apă;
- studiul comportării dinamice a stației pilot - analiza DDS;
- elaborarea și verificarea modelelor matematice pentru fiecare echipament în parte;
- prelucrarea datelor experimentale și calculul parametrilor modelelor matematice ale echipamentelor stației;
- testarea acurateții modelelor prin noi experimente DDS.

3.2. Descrierea stației pilot

În Timișoara, două treimi din apa potabilă provin din surse de suprafață (râul Bega), iar restul de apă este asigurat din surse subterane. Compania regională care gestionează serviciile publice de apă din Timișoara este Aquatim S.A [8].

Pentru a realiza îmbunătățiri suplimentare ale tehnologiilor de tratare existente (agenți de coagulare-floculare, condiții optime de funcționare, etc.) o stație pilot a fost construită în anii '80. Pe parcursul anilor 2000-2002, stația a fost modernizată pentru a fi în măsură să funcționeze într-o gamă largă de parametri operaționali și să se conformeze pe deplin tehnologiilor de tratare actuale. De fapt, unitatea urmărește cu fidelitate etapele procesului tehnologic de obținere a apei

potabile din râul Bega la o scară de 1:34 față de stația de tratare, având o capacitate medie de tratare de $145 \text{ m}^3/\text{h}$. Diagrama procesului de tratare din stația pilot este prezentată în figura 3.1: apa care vine din râul Bega este în primul rând 'ecranizată' (materialele grosiere sunt reținute cu ajutorul grătarelor), acest proces fiind urmat de pre-clorinare. Reactivii de coagulare sunt injectați sub presiune în conducta de alimentare a camerei de amestec (figura 3.2) după care apa brută amestecată cu reactivii de coagulare ajunge în camera de reacție (figura 3.3) unde are loc procesul de coagulare-floculare. După ce a avut loc acest proces în camera de reacție, apa tratată este decantată într-un decantor longitudinal (figura 3.4), unde flocoanele se depun în partea de jos a decantorului și, în final, sunt eliminate. În continuare, apa este trecută printr-o stație de filtre unde se elimină particulele mici care nu au reușit să se depună în decantor. După filtrare se adaugă clor (post-clorinare) în conducta de ieșire a apei filtrate și apoi, apa tratată este stocată [191].

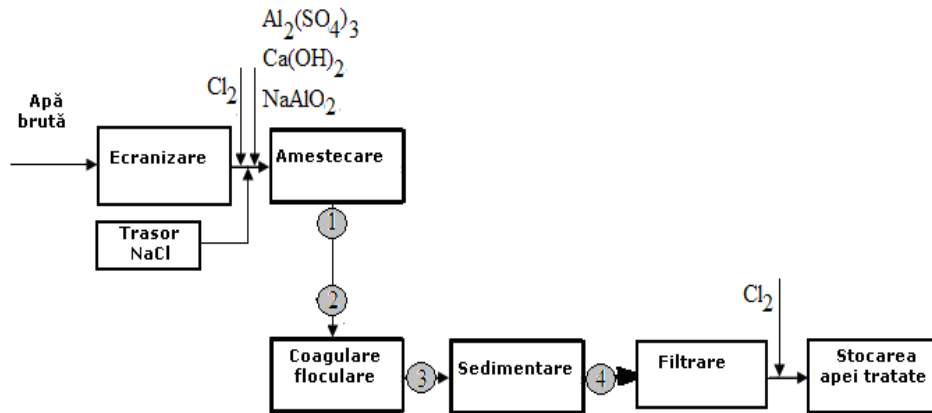


Figura 3.1. Diagrama procesului de tratare a râului Bega din stația pilot



Figura 3.2. Camera de amestec



Figura 3.3. Camera de reacție



Figura 3.4. Decantor longitudinal

Debitul de alimentare al stației pilot este cuprins între 70 și 180 m^3/h . Pentru prepararea reactivilor de coagulare în vederea dozării, stația pilot dispune de două vase din PVC de 230 litri fiecare, vase prevăzute cu sistem de barbotare cu aer pentru amestecare și cu posibilitatea de alimentare cu apă caldă sau rece. Cele două vase pot lucra în paralel sau independent [191].

3.3. Descrierea modelelor hidrodinamice

Modelarea comportamentului unui flux bazată pe măsurarea și interpretarea experimentelor de DDS este un aspect important în ingineria reacțiilor chimice[135]. Distribuția duratelor de staționare pentru o unitate chimică, de exemplu un reactor chimic, este o funcție de distribuție de probabilitate a duratei de timp petrecute de un element fluid în interiorul echipamentului. Aplicațiile DDS variază de la caracterizarea modelelor de curgere la evaluarea naturii fluxului. Comportamentul

unui flux într-o instalație de tratare a apei este unul dintre cei mai importanți parametri în ceea ce privește eficacitatea unității [192].

În dezvoltarea modelelor dinamice pentru echipamentele stației pilot au fost luate în considerare forma naturală a acestora precum și rezultatele preliminare ale experimentelor de DDS. În cele din urmă, două modele hidrodinamice sau o combinație a acestor modele au fost folosite pentru caracterizarea tuturor echipamentelor și anume:

- *Modelul de dispersie* (curgere de tip piston cu dispersie axială) a fost utilizat pentru camera de reacție și ca un caz particular, pentru conducta care leagă camera de amestec de camera de reacție (practic, un comportament aproape de curgere de tip piston);

- *Modelul Cholette-Cloutier (CC)* este un model de amestecare reală, utilizat în acest studiu atât pentru camera de amestec (două CC în serie) cât și pentru decantor (cinci CC în serie).

Modelul de dispersie (modelul unidimensional de curgere de tip piston cu dispersie axială) este unul dintre modelele utilizate pentru a descrie curgerea ne-ideală în echipamentele tubulare (reactoare, coloane, etc.). Pentru acest model, ecuația care descrie evoluția concentrației unui component "A" în lungul axei z și în timp are forma:

$$\frac{H}{w} \frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} - \frac{\partial C_A}{\partial z} + \frac{H}{w} r_A \quad (3.1)$$

În care: t este timpul, în s ; C_A este concentrația componentului "A", în $kmol/m^3$; H este înălțimea sau lungimea totală a echipamentului, în m ; w este viteza fluidului, în m/s ($w = F_V / S$); S este secțiunea transversală a unității, în m^2 ; F_V este debitul volumetric, în m^3/s ; r_A este producția sau consumul din "A" în unitatea de volum și pe unitatea de timp, în $kmol/(m^3 \cdot s)$; Pe este raportul adimensional Peclet; z este o coordonată axială adimensională ($z = h/H$) și h este o coordonată axială, în m [118].

În ecuația 3.1 Pe este așa numitul raport adimensional Peclet (număr Peclet), raport a cărui valoare este o măsură a amestecării axiale și se definește ca fiind raportul dintre fluxul transportat prin convecție și fluxul cauzat de dispersia axială:

$$Pe = \frac{wL}{D_{AX}} \quad (3.2)$$

În care, D_{AX} este coeficientul de dispersie axială, în m^2/s , iar L este dimensiunea caracteristică ($L=H$), în m [118].

În cazul camerei de reacție, condițiile la limită asociate ecuației 3.1 sunt condițiile la limită ale lui Danckwerts pentru cazul unui reactor închis la dispersie (presupunând pentru conducta care intră în camera de reacție un comportament de tip piston) [118]:

- condiția la intrare în reactor este:

$$C_{Ain} = C_A(0^+, t) - \left[\left(\frac{1}{Pe} \right) \left(\frac{\partial C_A}{\partial z} \right) \right]_{z=0^+} \quad (3.3)$$

- condiția la ieșire din reactor este:

$$\left(\frac{\partial C_A}{\partial z} \right)_{z=1} = 0 \quad (3.4)$$

În ecuația 3.3, C_{Ain} este concentrația lui "A" la intrare în reactor, în $kmol/m^3$. Dacă "A" este un traser, reacția chimică nu are loc și deci, în ecuația 3.1, ultimul termen din partea dreaptă este zero:

$$\frac{H}{w} \frac{\partial C_A(t)}{\partial t} = \frac{1}{Pe} \cdot \frac{\partial^2 C_A(t)}{\partial z^2} - \frac{\partial C_A(t)}{\partial z} \quad (3.5)$$

Ecuția diferențială cu derivate parțiale 3.5 este soluționată pe baza metodei diferențelor finite, utilizându-se discretizarea prin diferențe centrale pe axa "z" și diferențe progresive pe axa "timp". La fiecare dintre cele două limite, o celulă ipotetică și în afara zonei a fost adăugată în scopul îndeplinirii condițiilor la limită pentru situația unui sistem "închis la dispersie" [118].

Modelul Cholette-Cloutier – este un model de flux recomandabil pentru sistemele cu amestecare reală susceptibile de zone stagnante și de by-passarea zonei de reacție de către o fracție din fluxul de intrare. Situația în care modelul ia în considerare o zonă staționară care are un schimb de substanță cu fluxul principal pe baza diferenței de concentrație este prezentată în figura 3.5.

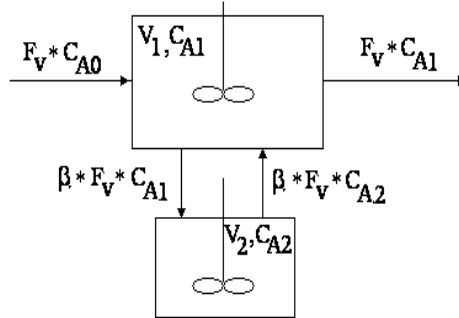


Figura 3.5. Model Cholette-Cloutier: model de amestecare reală care conține zone stagnante[118]

Modelul Cholette-Cloutier conține doi parametri importanți și anume:

- fracția de by-pass "β", care exprimă fluxul spre și dinspre zona stagnantă;
- fracția "φ", care reprezintă fracția volumului staționară în raport cu volumul sistemului.

Ambele volume, V_1 și V_2 , din figura 3.5 sunt tratate ca reactoare cu amestecare perfectă iar fluxul care se schimbă între ele este o fracțiune "β" din debitul de alimentare. Ecuațiile care descriu modelul Cholette-Cloutier sunt prezentate mai jos (în cazul unui traser, $r_A=0$):

$$V_1 \frac{dC_{A1}}{dt} = F_V(C_{A0} - C_{A1}) + \beta F_V(C_{A1} - C_{A2}) + r_{A1}V_1 \quad (3.6)$$

$$V_2 \left(\frac{dC_{A2}}{dt} \right) = \beta F_V(C_{A1} - C_{A2}) + r_{A2}V_2 \quad (3.7)$$

$$V_1 = (1 - \varphi)V \quad (3.8)$$

$$V_2 = \varphi V \quad (3.9)$$

În care, V este volumul unității, în m^3 , iar V_1 și V_2 sunt volumele fiecărei zone din modelul CC [118].

Cele două modele matematice descrise au fost implementate în Matlab pentru modelarea hidrodinamicii echipamentelor stației pilot din Timișoara. În cazul camerei de amestec s-au utilizat două modele Cholette-Cloutier în serie (un CC pentru fiecare compartiment), un model de dispersie axială pentru conductă și respectiv, unul pentru camera de reacție, iar pentru decantor cinci modele Cholette-Cloutier în serie.

3.4. Metode experimentale

Inițial s-au efectuat teste preliminare cu scopul de a evalua modificarea parametrilor din echipamente (cum ar fi nivelul de lichid) față de debitul de apă brută care trece prin stația pilot. Distribuția duratelor de staționare (DDS) a fost măsurată folosind ca metode de injecție a traserului semnalul impuls (treaptă-contra-treaptă) sau semnalul treaptă iar detecția acestuia a fost obținută cu ajutorul metodei conductimetrice. Comportamentul dinamic al stației pilot a fost monitorizat pentru diferite debite de apă brută. Ca trasor s-a folosit o soluție concentrată de clorură de sodiu (NaCl), concentrația acesteia fiind măsurată indirect prin conductivitatea electrică a apei. Soluția a fost injectată în conducta de alimentare a camerei de amestec în același punct în care reactivii de coagulare sunt, de obicei, adăugați. Răspunsul traserului a fost monitorizat în funcție de timp prin măsurarea conductivității electrice în următoarele puncte:

- 1 - Ieșire din camera de amestec;
- 2 - Intrare în camera de reacție;
- 3 - Ieșire din camera de reacție;
- 4 - Ieșire din decantor.

Două tipuri de experimente au fost efectuate:

- *Semnal impuls* (de fapt, semnal treaptă-contra-treaptă) – traserul a fost injectat aproximativ 40 de secunde în același punct în care reactivii de coagulare sunt adăugați;

- *Semnal treaptă* – în acest caz, traserul a fost injectat atâta timp cât a fost necesar pentru a obține o nouă stare de echilibru în decantor (până la 10 ore).

Primul set de experimente a fost valorificat prin evaluarea comportamentului hidrodinamic al camerei de amestec, iar semnalul treaptă a fost utilizat pentru camera de reacție și decantor. Trebuie menționat faptul că datorită dimensiunilor geometrice ale echipamentelor (volum medii de lichid: $1,6 m^3$ pentru camera de amestec, $55 m^3$ pentru camera de reacție și $290 m^3$ pentru decantor), în cazul semnalului impuls profilul "concentrație trasor" în funcție de timp în ultimele două echipamente ale stației pilot este foarte plat, determinând astfel ca evaluarea parametrilor modelului să fie dificilă de realizat. Cu toate acestea, au fost efectuate experimente speciale în care injectarea traserului a avut loc la intrare în camera de reacție realizându-se astfel o mai bună estimare a parametrilor modelelor pentru camera de reacție și decantor. O problemă pentru toate experimentele lungi (ca și perioadă de timp) a fost modificarea în timp a conductivității apei brute.

Pentru toate echipamentele stației pilot, parametrii hidrodinamici au fost determinați cu ajutorul mediului de programare Matlab prin minimizarea sumelor abaterilor pătratică (metoda celor mai mici pătrate) ale valorilor prezise de model față de cele experimentale. În final, valorile optime ale parametrilor modelelor obținute pentru diferite debite de apă au fost exprimate în formă liniară în funcție de debitul apei brute.

Toate experimentele au fost efectuate la presiune atmosferică și la temperatura mediului ambiant.

3.5. Rezultate experimentale

3.5.1. Comportarea hidrodinamică a unei stații pilot de tratare a apei de suprafață folosind experimente DDS bazate pe semnal impuls la diferite debite de apă brută

3.5.1.1. Evaluarea parametrilor hidrodinamici pentru camera de amestec și conductă

Camera de amestec este o cameră statică împărțită în două compartimente (figura 3.2): camera de liniștire și camera cu șicane. Așa cum s-a menționat mai sus, modelarea camerei de amestec s-a realizat prin două modele Cholette-Cloutier în serie. Conductivitatea electrică s-a măsurat în timp la ieșire (din 5 în 5 secunde) cu ajutorul unui conductometru portabil WTW Multi 340i. Soluția concentrată de NaCl a fost injectată în conducta de alimentare a camerei în același punct în care reactivii de coagulare sunt, de obicei, adăugați. Parametrii hidrodinamici φ (raportul volumelor) și β (fracția care exprimă fluxul spre și dinspre zona stagnantă) au fost determinați prin minimizarea sumelor abaterilor pătratice. Pentru simplitate, valorile parametrilor au fost considerate identice în ambele compartimente ale camerei (valori finale: $\varphi = 0,13$ și $\beta = 0,058$ pentru $125 \text{ m}^3/\text{h}$; $\varphi = 0,12$ și $\beta = 0,041$ pentru $145 \text{ m}^3/\text{h}$ și $\varphi = 0,075$ și $\beta = 0,0081$ pentru $180 \text{ m}^3/\text{h}$).

Debitul soluției saturate de NaCl injectate a fost menținut constant pentru 40 de secunde ($42,6 \text{ L/h}$), iar conductivitatea soluției saturate a fost de 202 mS/cm pentru debitele de 125 și $145 \text{ m}^3/\text{h}$ iar pentru debitul de $180 \text{ m}^3/\text{h}$ a fost de 158 mS/cm . Experimentele pentru acest ultim debit au fost realizate într-o altă zi, soluția fiind preparată proaspăt în ziua efectuării experimentelor.

Cele mai relevante date experimentale obținute în urma măsurătorilor pentru un debit de apă brută de $125 \text{ m}^3/\text{h}$ sunt prezentate în figurile 3.6 – 3.9. S-a reprezentat grafic conductivitatea electrică măsurată în funcție de timp în comparație cu rezultatele obținute prin simulare.

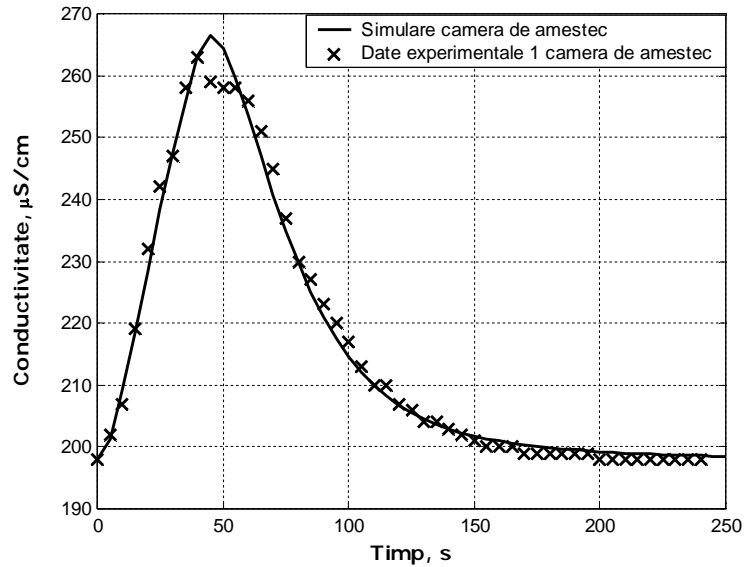


Figura 3.6. Rezultate experimentale 1 versus simulare pentru camera de amestec la $125 \text{ m}^3/\text{h}$. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,13$ și $\beta = 0,058$

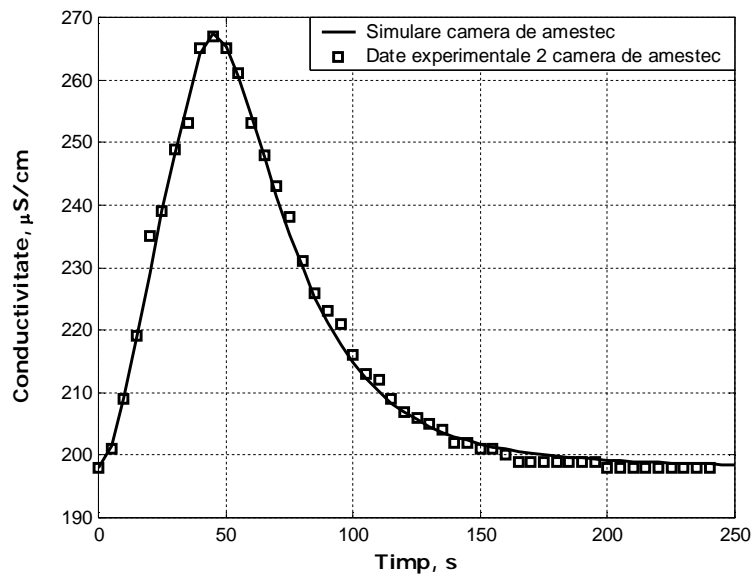


Figura 3.7. Rezultate experimentale 2 versus simulare pentru camera de amestec la $125 \text{ m}^3/\text{h}$. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,13$ și $\beta = 0,058$

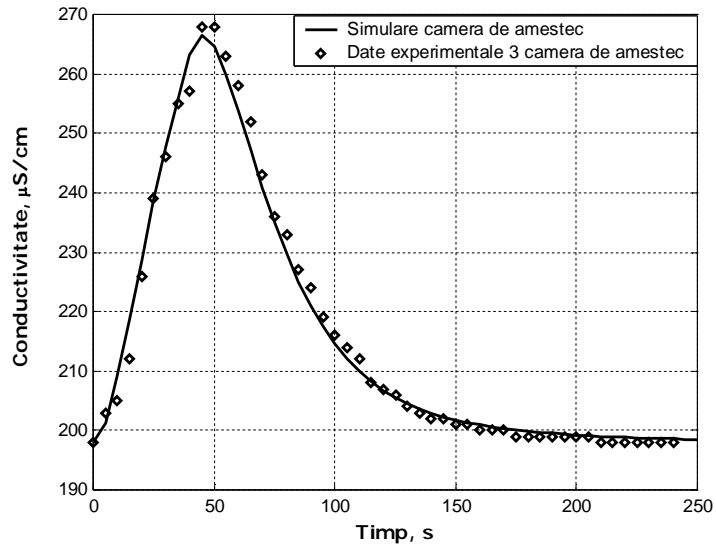


Figura 3.8. Rezultate experimentale 3 versus simulare pentru camera de amestec la $125 \text{ m}^3/\text{h}$. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,13$ și $\beta = 0,058$

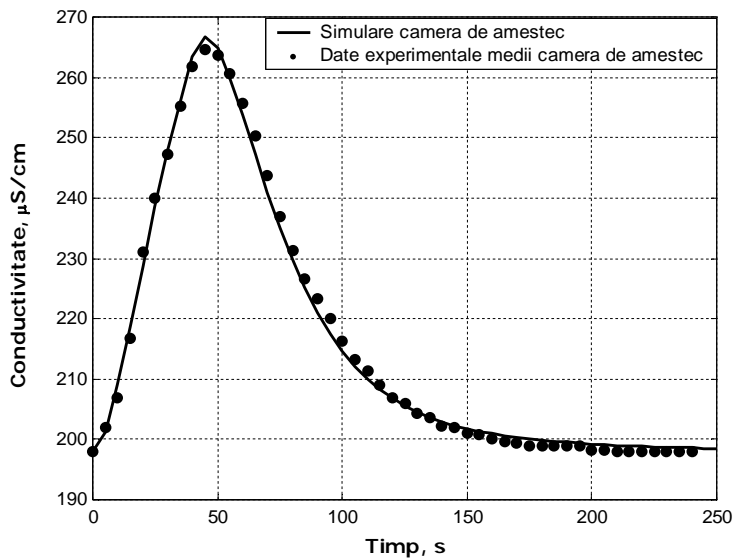


Figura 3.9. Rezultate experimentale medii versus simulare pentru camera de amestec la $125 \text{ m}^3/\text{h}$. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,13$ și $\beta = 0,058$

Rezultate comparative experiment-simulare pentru debitul de apă brută de $145 \text{ m}^3/\text{h}$ sunt prezentate în figurile 3.10 – 3.13.

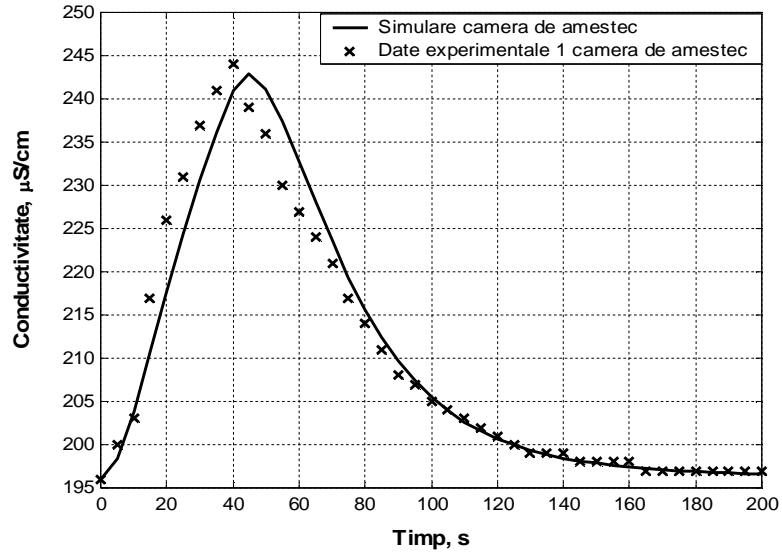


Figura 3.10. Rezultate experimentale 1 versus simulare pentru camera de amestec la $145 \text{ m}^3/\text{h}$. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,12$ și $\beta = 0,041$

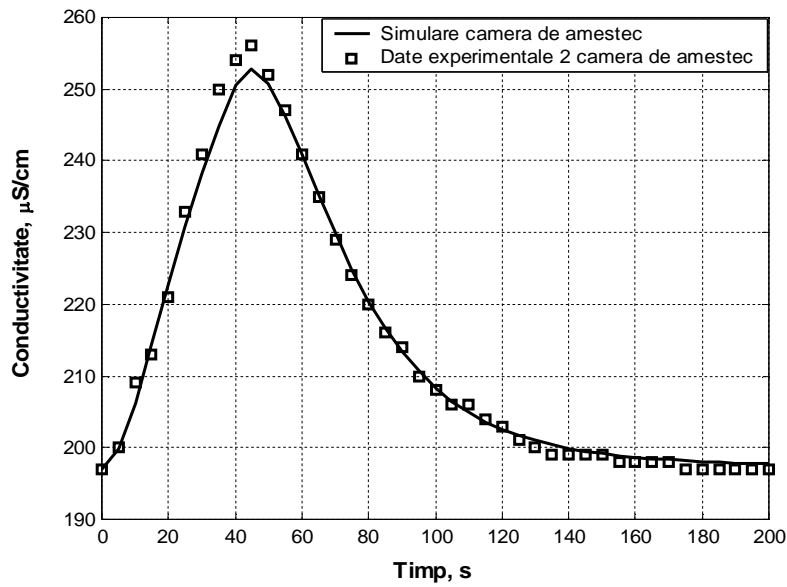


Figura 3.11. Rezultate experimentale 2 versus simulare pentru camera de amestec la $145 \text{ m}^3/\text{h}$. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,12$ și $\beta = 0,041$.

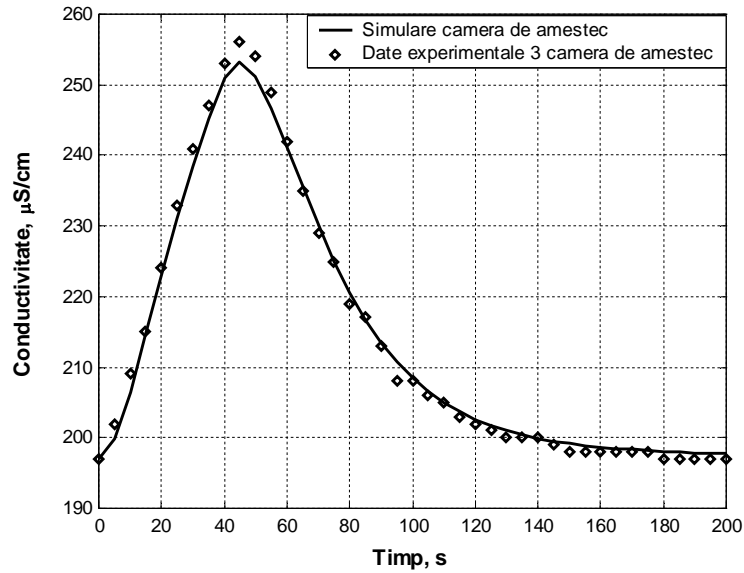


Figura 3.12. Rezultate experimentale 3 versus simulare pentru camera de amestec la 145 m³/h. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi= 0,12$ și $\beta= 0,041$

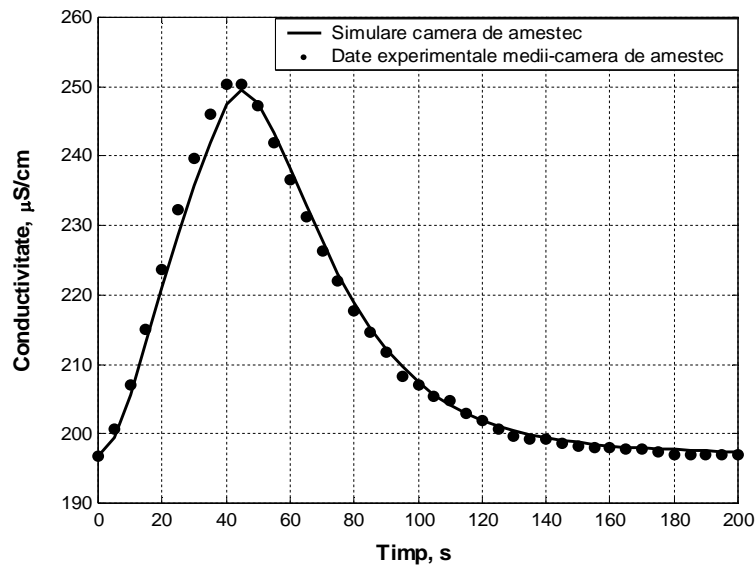


Figura 3.13. Rezultate experimentale medii versus simulare pentru camera de amestec la 145m³/h. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi= 0,12$ și $\beta= 0,041$.

În figura 3.14 sunt prezentate comparativ rezultatele experimentale versus cele de simulare pentru un debit de apă brută de $180 \text{ m}^3/\text{h}$. Valorile optime ale parametrilor φ și β sunt 0,075 și 0,0081.

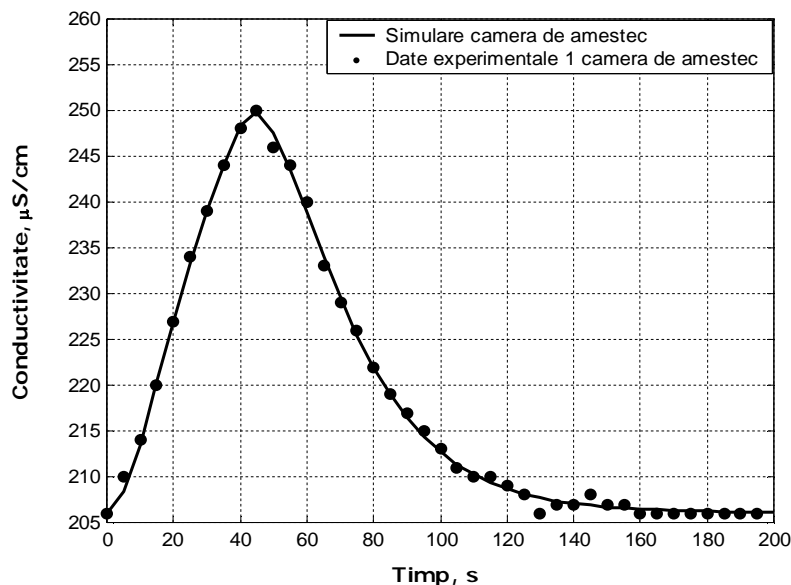


Figura 3.14. Rezultate experimentale 1 versus simulare pentru camera de amestec la $180 \text{ m}^3/\text{h}$. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,075$ și $\beta = 0,0081$

Din figurile prezentate anterior se poate constata faptul că modelul camerei de amestec (două modele CC în serie) reprezintă corect comportarea reală a acesteia pentru fiecare din experimentele realizate. În vederea extrapolării parametrilor modelelor Cholette-Cloutier pentru alte debite decât cele la care s-au realizat experimentele, parametrii φ și β au fost exprimați în funcție de debit (Fvls, m^3/s):

$$\varphi = -0,0033 \cdot \text{Fvls} + 0,2502$$

$$\beta = -0,0036 \cdot \text{Fvls} + 0,1842$$

Conducta: conducta de legătură care leagă camera de amestec de camera de reacție are o lungime de 46 m și un diametru de $0,245 \text{ m}$. Modelarea conductei s-a realizat prin utilizarea unui model de dispersie axială (model definit în secțiunea 3.3) implementat în Matlab. Parametrul hidrodinamic, numărul Peclet, a fost determinat prin minimizarea sumelor abaterilor pătratice ale valorilor prezise de model față de cele experimentale. Conductivitatea electrică s-a măsurat la intrarea în camera de reacție cu același conductometru portabil ca și în cazul camerei de amestec.

Rezultatele experimentale obținute în urma măsurătorilor pentru un debit de apă brută de $125 \text{ m}^3/\text{h}$ sunt prezentate în figurile 3.15–3.18. S-au reprezentat grafic rezultatele de simulare obținute pentru camera de amestec și conducta de legătură și datele experimentale privind concentrația traserului la ieșirea din conductă. Așa cum s-a menționat mai sus, traserul a fost injectat pentru o perioadă de 40 de secunde în conducta de intrare în camera de amestec. Pentru conducta de legătură, semnalul de intrare îl constituie semnalul de ieșire (obținut prin simulare) al camerei de amestec.

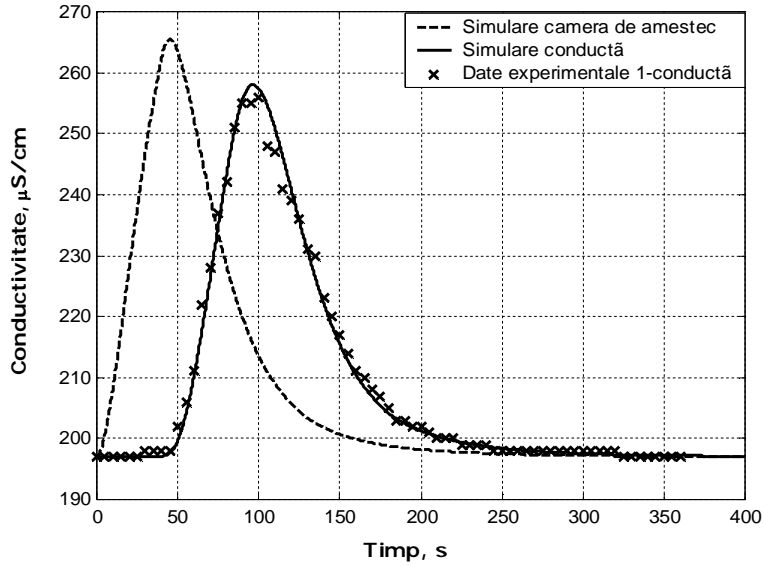


Figura 3.15. Rezultate experimentale 1 pentru conductă la $125 \text{ m}^3/\text{h}$. Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 9193$

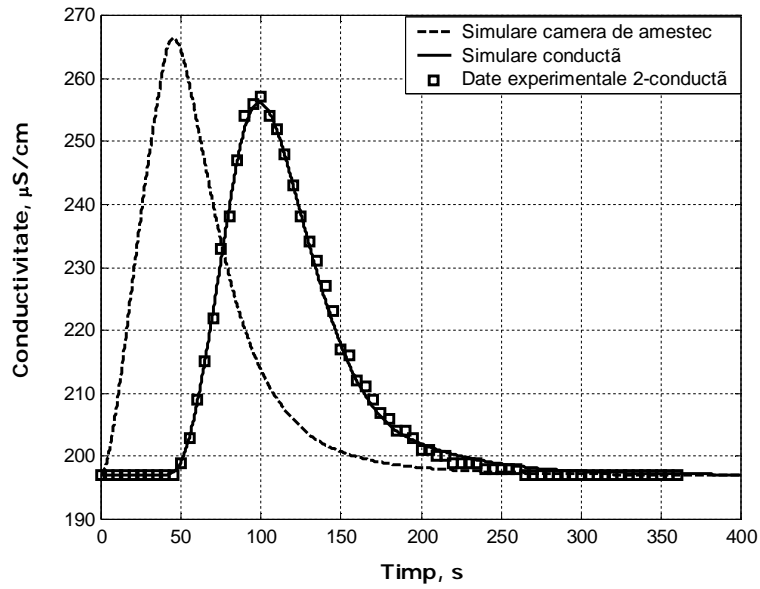


Figura 3.16. Rezultate experimentale 2 pentru conductă la $125 \text{ m}^3/\text{h}$. Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 11952$

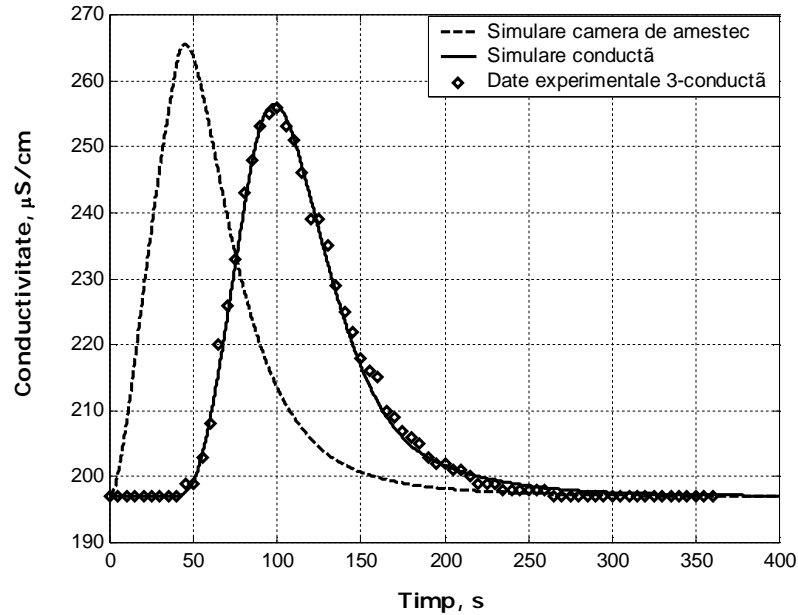


Figura 3.17. Rezultate experimentale 3 pentru conductă la $125 \text{ m}^3/\text{h}$. Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 10943$

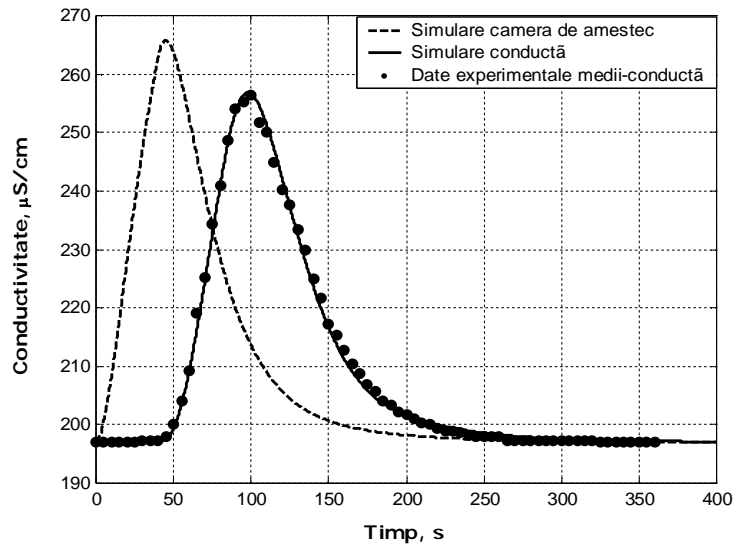


Figura 3.18. Rezultate experimentale medii pentru conductă la $125 \text{ m}^3/\text{h}$. Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 10772$

Cele mai relevante rezultate experimentale obținute în urma măsurătorilor la un debit de apă brută de $145 \text{ m}^3/\text{h}$ sunt prezentate în figurile 3.19 și 3.20.

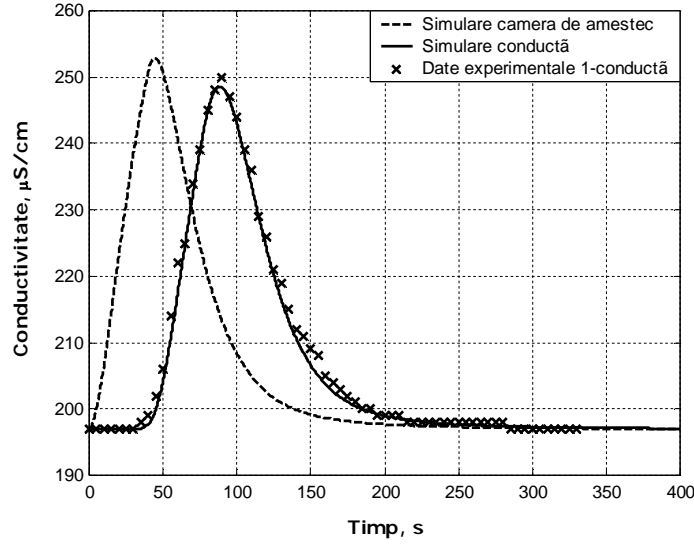


Figura 3.19. Rezultate experimentale 1 pentru conductă la $145 \text{ m}^3/\text{h}$. Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 7803$

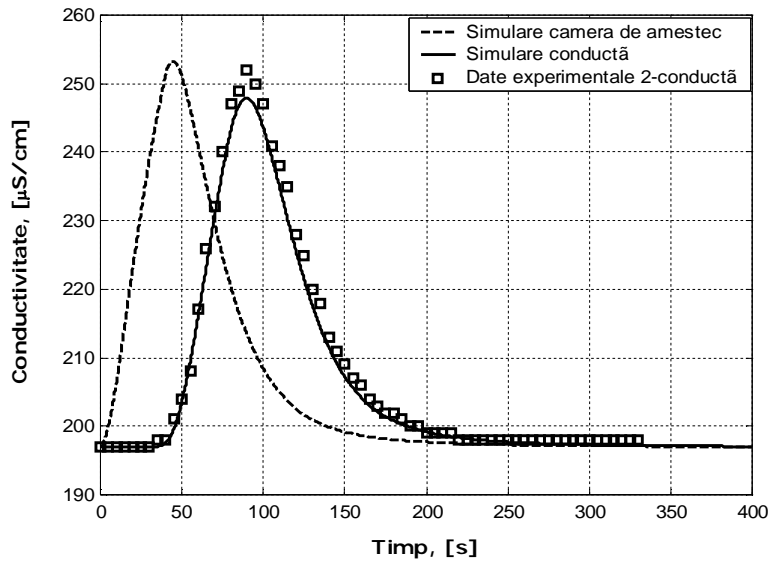


Figura 3.20. Rezultate experimentale 2 pentru conductă la $145 \text{ m}^3/\text{h}$. Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 9300$

Rezultate pentru unul din seturile de date experimentale obținute la un debit de apă brută de $180 \text{ m}^3/\text{h}$ este prezentat în figura 3.21.

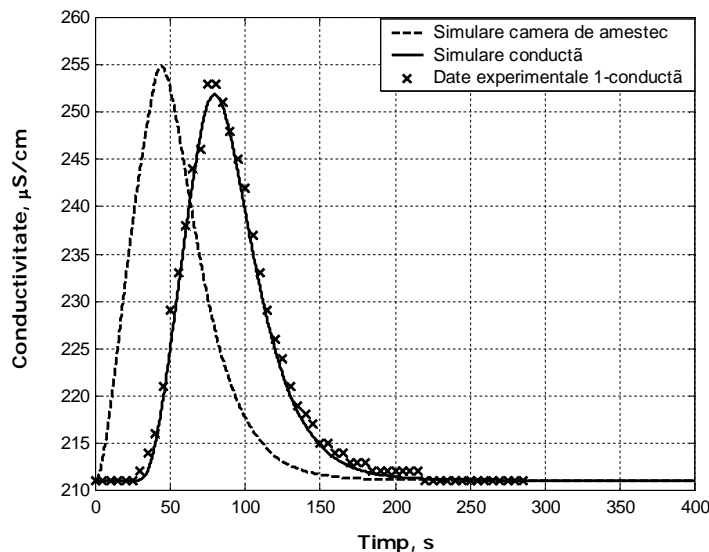


Figura 3.21. Rezultate experimentale 1 pentru conductă la 180 m³/h. Valoare optimă a numărului Peclet: Pe= 8570

Tabelul 3.1 reunește valorile numărului Peclet obținut pentru conducta de legătură la diverse debite de apă brută.

Tabel 3.1. Valori număr Peclet pentru conductă la diferite debite de apă brută

Debit apă brută, m ³ /h	Date experimentale – conductă	Număr Pe
125	1	9193
	2	11952
	3	10943
	mediu	10772
145	1	7803
	2	9300
180	1	8570

Se observă din tabel că numărul Pe obținut pentru toate debitele studiate este foarte mare, fapt ce denotă existența unei curgeri apropiate de curgerea de tip piston.

Toate figurile prezentate anterior pentru conducta de legătură la diferite debite de apă brută au conținut și semnalul de ieșire al camerei de amestec, semnal rezultat în urma utilizării valorilor optime ale parametrilor modelului pentru camera de amestec (exprimate în funcție de debitul de apă brută). Pentru comportamentul conductei s-au luat în considerare toate rezultatele obținute pentru numărul Peclet și o valoare medie de aproximativ 8700 a fost utilizată în generarea semnalului de intrare pentru camera de reacție. În cazul proiectării, comportamentul "curgere de tip piston" poate fi asumat la astfel de valori ale numărului Peclet.

3.5.2. Comportarea hidrodinamică a unei stații pilot de tratare a apei de suprafață folosind experimente DDS bazate pe semnal treaptă la diferite debite de apă brută

3.5.2.1. Evaluarea parametrilor hidrodinamici pentru camera de reacție și decantor

Camera de reacție este de tip longitudinal, cu salt hidraulic și prevăzută cu 9+1 șicane (figura 3.3). Modelarea acestui echipament a fost realizată cu ajutorul unui model de dispersie axială implementat în Matlab, iar parametrul hidrodinamic (numărul Pe) a fost determinat prin minimizarea sumelor abaterilor pătratice ale valorilor prezise de model față de datele experimentale. Conductivitatea electrică s-a măsurat în timp la ieșire din camera de reacție cu ajutorul unui conductometru portabil WTW Multi 340i. Soluția de NaCl a fost injectată în conducta de alimentare a camerei de amestec, în același punct în care reactivii de coagulare sunt, de obicei, adăugați. Metoda de injecție a traserului pentru acest echipament a fost de tip semnal treaptă.

S-a reprezentat grafic: conductivitatea electrică în funcție de timp în comparație cu rezultatele obținute în urma simulării atât pentru intrarea cât și pentru ieșirea din camera de reacție (figura 3.22 pentru $125 \text{ m}^3/\text{h}$; figura 3.23 pentru $145 \text{ m}^3/\text{h}$ și figura 3.24 pentru $180 \text{ m}^3/\text{h}$).

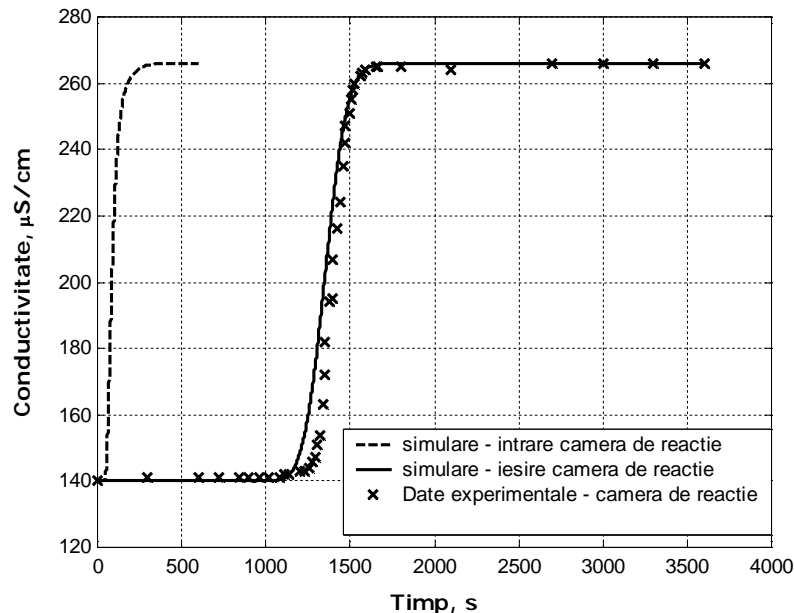


Figura 3.22. Rezultate experimentale versus simulare pentru camera de reacție la $125 \text{ m}^3/\text{h}$. Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 156$

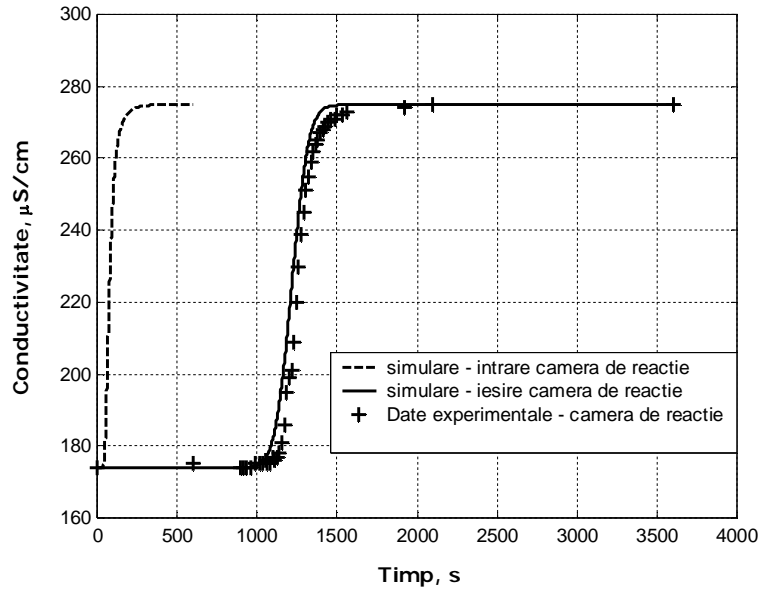


Figura 3.23. Rezultate experimentale versus simulare pentru camera de reacție la $145 \text{ m}^3/\text{h}$.
Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 674$

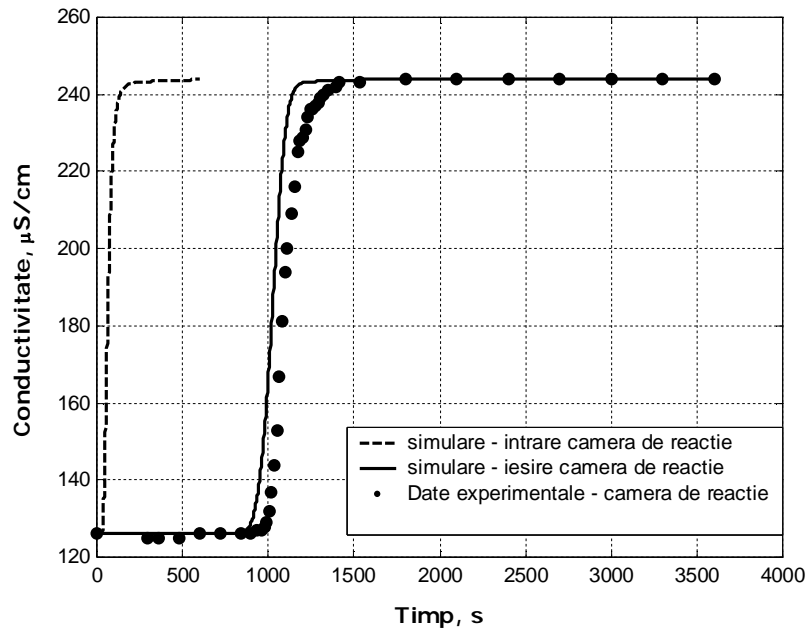


Figura 3.24. Rezultate experimentale versus simulare pentru camera de reacție la $180 \text{ m}^3/\text{h}$.
Valoare optimă a numărului Peclet: $Pe = 1323$

În ceea ce privește parametrii modelelor, în cazul camerei de reacție valorile optime ale numărului Pe rezultate în urma experimentelor DDS au fost din nou exprimate (în formă liniară) ca funcție de debitul apei brute care trece prin unitate (figura 3.25).

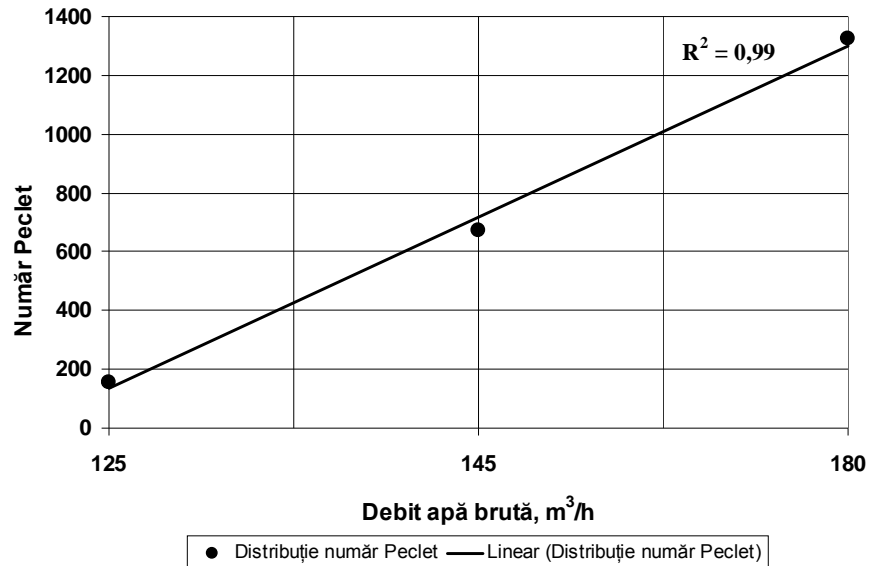


Figura 3.25. Număr Peclet funcție de debitul apei brute pentru camera de reacție

În intervalul de debit studiat (125-180 m^3/h) s-au obținut valori ridicate ale numărului Peclet, fapt ce arată că în camera de reacție regimul de curgere este relativ apropiat de curgerea de tip piston.

Decantorul de tip longitudinal a fost modelat cu ajutorul a cinci modele Cholette-Cloutier (CC) în serie. O abordare similară pentru procesul de sedimentare, dar folosind o combinație diferită de modele simple, a fost realizată de către Lopez în 2008 [193].

Conductivitatea electrică s-a măsurat în timp la ieșire din decantor cu ajutorul unui conductometru portabil. Parametrii hidrodinamici, φ (raportul volumelor) și β (fracția care exprimă fluxul spre și dinspre zona stagnantă) au fost determinați din nou prin minimizarea sumelor abaterilor pătratice ale valorilor prezise de model față de datele experimentale iar valorile optime obținute pentru cei doi parametri sunt $\varphi = 0,2$ și $\beta = 0,15$. Volumul apei în decantor pentru diferite debite de apă brută este prezentat în tabelul 3.2.

Tabel 3.2. Volum apă brută în decantor

Debit apă brută, m^3/h	Volum apă brută, m^3/h
125	289,2
145	290,5
180	300,3

În figurile 3.26 - 3.28 s-a reprezentat grafic conductivitatea electrică în funcție de timp în comparație cu rezultatele obținute în urma simulării atât pentru decantor cât și pentru camera de reacție (figura 3.26 pentru $125 \text{ m}^3/\text{h}$; figura 3.27 pentru $145 \text{ m}^3/\text{h}$ și figura 3.28 pentru $180 \text{ m}^3/\text{h}$).

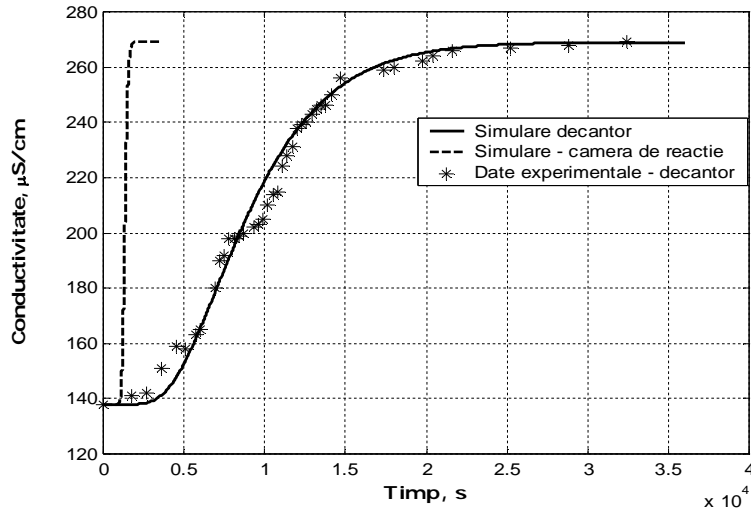


Figura 3.26. Rezultate experimentale versus simulare pentru decantor la $125 \text{ m}^3/\text{h}$. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,2$ și $\beta = 0,15$

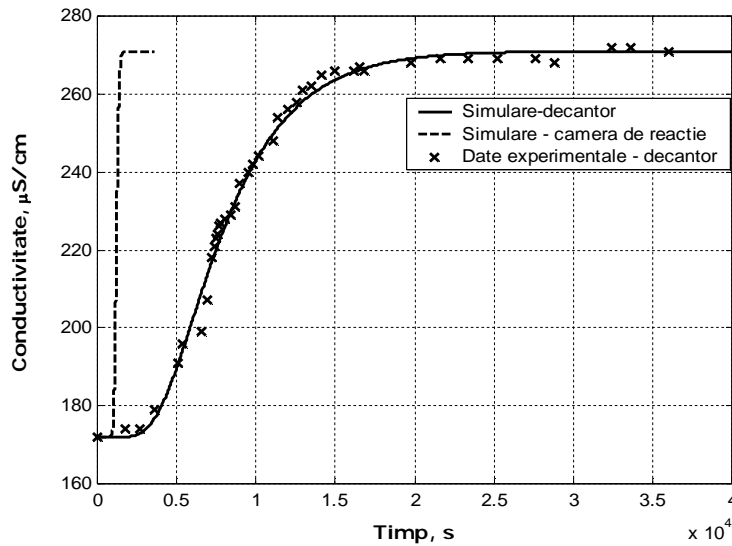


Figura 3.27. Rezultate experimentale versus simulare pentru decantor la $145 \text{ m}^3/\text{h}$. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi = 0,2$ și $\beta = 0,15$

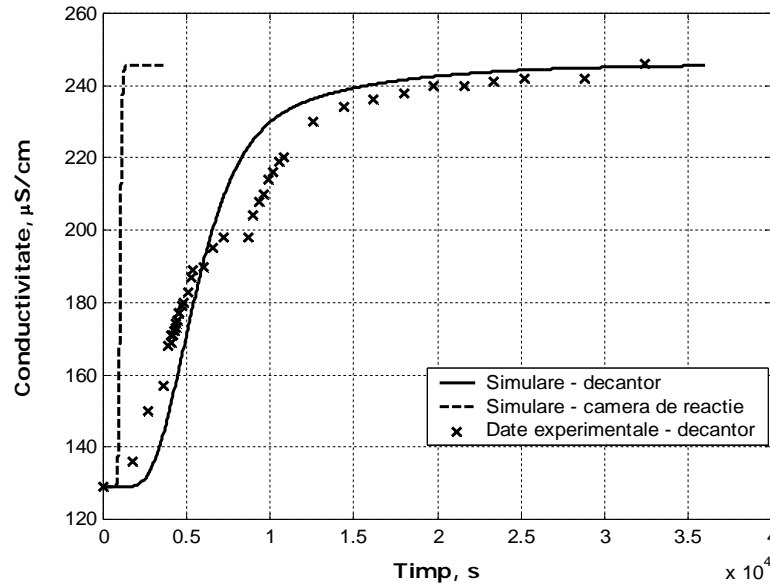


Figura 3.28. Rezultate experimentale versus simulare pentru decantor la $180 \text{ m}^3/\text{h}$. Valori optime ale parametrilor modelului: $\varphi=0,2$ și $\beta=0,15$

Conform figurilor prezentate anterior se poate observa că rezultatele obținute prin simulare sunt relativ apropiate de valorile conductivității măsurate la ieșirea din decantor.

După revizuirea tuturor datelor experimentale în intervalul de debit studiat s-a considerat că pentru decantor valorile constante pentru parametrii modelului sunt cea mai bună opțiune în modelare. Pentru ambele echipamente, pentru fiecare experiment DDS, generarea semnalelor de intrare a fost realizată prin utilizarea valorilor optime ale parametrilor modelului (exprimate în funcție de debitul apei brute) obținute pentru unitatea plasată în fața unității de investigat (de exemplu: conducta pentru camera de reacție, camera de reacție pentru decantor).

3.5.3. Validarea modelelor hidrodinamice

În scopul evaluării preciziei modelelor, a fost efectuat un nou set de experimente. Pentru camera de amestec și conductă, injectarea traserului s-a realizat în conducta de intrare în cameră (timp de 40 de secunde), procedura fiind identică celei de la evaluarea parametrilor modelelor. În cazul camerei de reacție și decantorului, acesta a constat în realizarea unui nou experiment de tip semnal treaptă, concentrația traserului fiind măsurată la ieșire din camera de reacție și ieșirea din decantor.

Pentru un debit de apă brută de $145 \text{ m}^3/\text{h}$, figurile 3.29 și 3.30 prezintă predicțiile modelelor în comparație cu datele experimentale pentru toate cele patru echipamente luate în considerare.

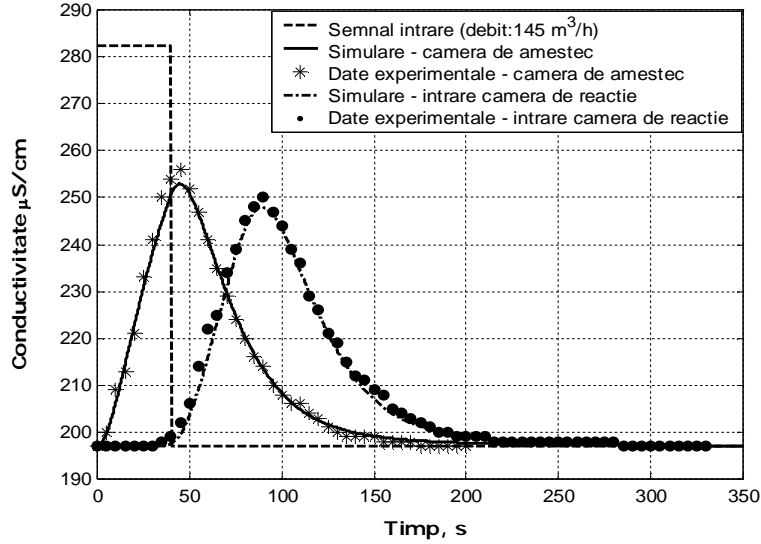


Figura 3.29. Camera de amestec și conductă către camera de reacție: rezultate experimentale versus predicțiile modelelor la 145 m³/h

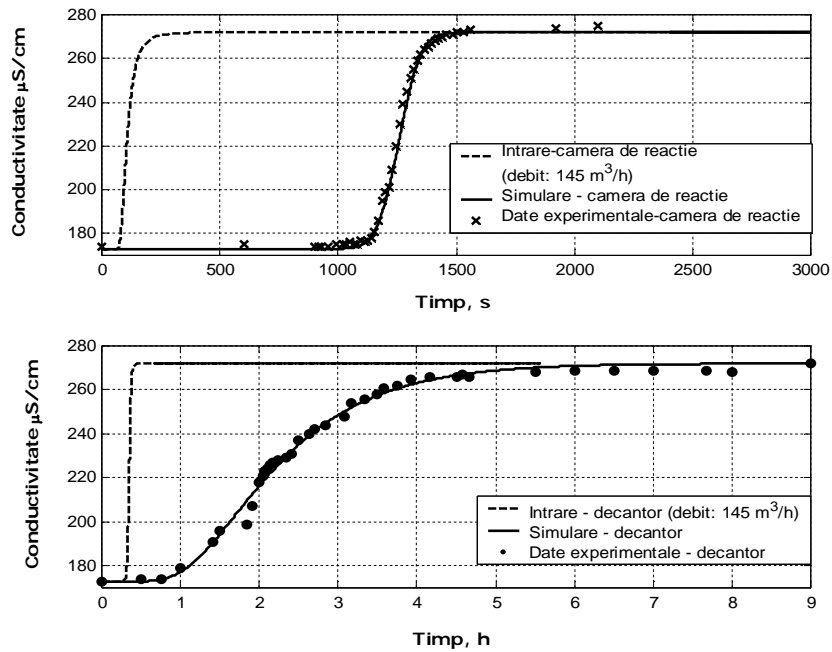


Figura 3.30. Camera de reacție și decantor: rezultate experimentale versus predicțiile modelelor la 145 m³/h

Experimente pentru validarea modelelor s-au realizat pentru toate cele trei debite de apă brută (125, 145 și 180 m^3/h). Acestea au avut loc în zile diferite datorită faptului că răspunsul tratorului la ieșire din decantor a durat aproximativ 10 ore.

După cum rezultă din figurile prezentate anterior, predicțiile modelelor pentru caracterizarea comportamentului stației pilot sunt în acord cu datele experimentale reale. Experimentele efectuate în afara domeniului inițial de estimare a parametrilor modelului au arătat, de asemenea, o bună concordanță între predicțiile modelelor și rezultatele de DDS.

3.6. Concluzii

Pentru dezvoltarea modelelor hidrodinamice ale principalelor echipamente din cadrul unei stații pilot de tratare a apei de suprafață s-au realizat experimente de distribuție a duratelor de staționare (DDS). Cunoscutele modele de amestecare reală (Cholette-Cloutier) și de dispersie axială au fost combinate pentru a identifica structura cea mai potrivită a modelelor pentru fiecare unitate în parte. Rezultatele experimentale de DDS au arătat că hidrodinamica stației pilot poate fi destul de bine aproximată printr-o combinație de modele matematice simple, o astfel de structură fiind utilă pentru aplicații ingineresti.

În cazul camerei de amestec s-au utilizat două modele Cholette-Cloutier în serie iar pentru decantor cinci modele Cholette-Cloutier în serie. Valorile parametrilor hidrodinamici care reflectă îndepărtarea de la curgerea ideală confirmă prezența zonelor stagnante în cele două echipamente. Pentru conductă și camera de reacție s-a utilizat modelul de dispersie axială, numărul Peclet obținut fiind mare. Acest lucru denotă faptul că în aceste echipamente avem o curgere apropiată de cea de tip piston.

Modelele hidrodinamice validate vor fi utilizate în evaluarea și selectarea celor mai adecvați reactivi de coagulare-floculare, a condițiilor optime de adăugare (puncte de injecție, timp de reacție) în scopul îmbunătățirii economiei procesului și calității apei potabile din cadrul stației pilot din Timișoara.

Modelele dezvoltate în lucrarea de față trebuie adaptate pentru a incorpora amprenta apei brute, reactivii utilizați, etc. După validarea acestora pe stația pilot, ele pot fi extrapolate pentru a putea fi integrate pe stația de tratare a apei din canalul Bega în vederea potabilizării.

Capitol 4. Modelarea hidrodinamicii unei stații pilot de tratare a apei de suprafață cu mediul de programare ANSYS FLUENT 14.0 (CFD)

4.1. Introducere

Obiectivul principal al unei tehnologii de tratare a apei este de a produce o apă sigură și potabilă [194-196]. În scopul de a obține o apă potabilă, procesele de tratare a apei încorporează unități de coagulare-floculare, bazine de sedimentare, filtrare lentă și rapidă și unități de dezinfectare [197].

Unitățile de coagulare-floculare sunt cele mai importante echipamente ale ansamblului de procese de tratare a apei [175]. În general, într-o instalație de tratare a apei, procesul de coagulare-floculare poate fi realizat fie prin mijloace mecanice fie hidraulice. În flocularea mecanică, energia de intrare este generată prin intermediul unui agitator care realizează efortul de forfecare necesar (și, prin urmare, gradientii de viteză) iar în flocularea hidraulică energia este generată prin pierdere de sarcină de-a lungul unor șicane sau a unor canale tip serpentină [167]. Floculatoarele hidraulice sunt dispozitive în care regimul laminar sau turbulent provenit din geometria reactorului provoacă coliziuni între particulele floculante [198]. Amestecarea hidraulică se realizează prin așa-numita 'amestecare de șicane', fie de către șicane rotunjite la capete fie de șicane poziționate diferit în echipament [199]. Capacitatea floculatoarelor hidraulice de a funcționa fără alte părți în mișcare sau fără alte surse externe de energie le desemnează mult mai eficiente energetic și mai durabile decât floculatoarele mecanice, fiind însă mai puțin flexibile în operare.

Din punct de vedere hidraulic, o instalație de tratare a apei în scop potabil este formată din elemente care opun rezistență la fluxul de trecere (exemplu: țevi, filtre), pompe care cresc sarcina totală a debitului și rezervoare cu un nivel variabil de apă [192]. Fluxul printr-o unitate a unei instalații de tratare a apei este unul dintre cei mai importanți parametri în ceea ce privește eficacitatea unității [200]. Pentru a rezolva problemele de curgere în ingineria industrială sunt din ce în ce mai mult utilizate metodele CFD (Computational Fluid Dynamics-dinamica computerizată a fluidelor). Primele aplicații au fost dezvoltate acum 40 de ani de ingineri și matematicieni [164]. CFD este o ramură a mecanicii fluidelor (bazată pe aplicația metodelor numerice) care permite predicția domeniilor de curgere ale fluidelor prin soluționarea ecuațiilor fundamentale care descriu dinamica fluidelor referitoare la continuitate, impuls și energie [173]. O tehnică eficientă de a înțelege și diagnostica comportamentul fluxului într-o gamă largă de sisteme de curgere este măsurarea distribuției duratelor de staționare (DDS).

În acest capitol, două echipamente (camera de amestec și camera de reacție) din cadrul unei stații pilot de tratare a apei de suprafață (râul Bega din Timișoara) au fost investigate prin experimente DDS, folosind ca

trasor o soluție saturată de NaCl. Pentru a prezice modele de flux și alte proprietăți ale curgerii fluidelor (profil de viteză, profil de trasor) s-a utilizat software-ul ANSYS Fluent 14.0 (CFD). În simularea CFD, împreună cu ecuațiile Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) s-a utilizat modelul standard de turbulență $k-\varepsilon$ pentru a descrie transportul energiei cinetice turbulente, k , și a gradului de disipare, ε , în unitatea de timp. Precizia simulărilor a fost evaluată prin compararea datelor experimentale de DDS cu rezultatele obținute în urma simulării.

4.2. Descrierea echipamentelor

Obiectul studiului CFD îl constituiesc echipamentele de coagulare-floculare ale stației pilot de tratare a apei de suprafață din cadrul companiei regionale a serviciilor publice de apă din Timișoara (Aquatim S.A.). Descrierea completă a stației pilot a fost prezentată anterior (secțiunea 3.2). O diagramă a acestor echipamente este prezentată în figura 4.1.

Camera de amestec este împărțită de un perete în două compartimente: camera de liniștire și camera cu șicane. Pentru a defini planul schematic al camerei de amestec (figura 4.1), zece variabile geometrice sunt prezentate în tabelul 4.1. Pentru ambele compartimente, variabilele geometrice au fost numite pentru simplitate cu litere în ordine alfabetică. Nivelul lichidului pentru cele două debite studiate este prezentat în tabelul 4.2. Panta părții de jos a camerei de amestec se presupune a fi zero, amestecarea fiind realizată de șicane.

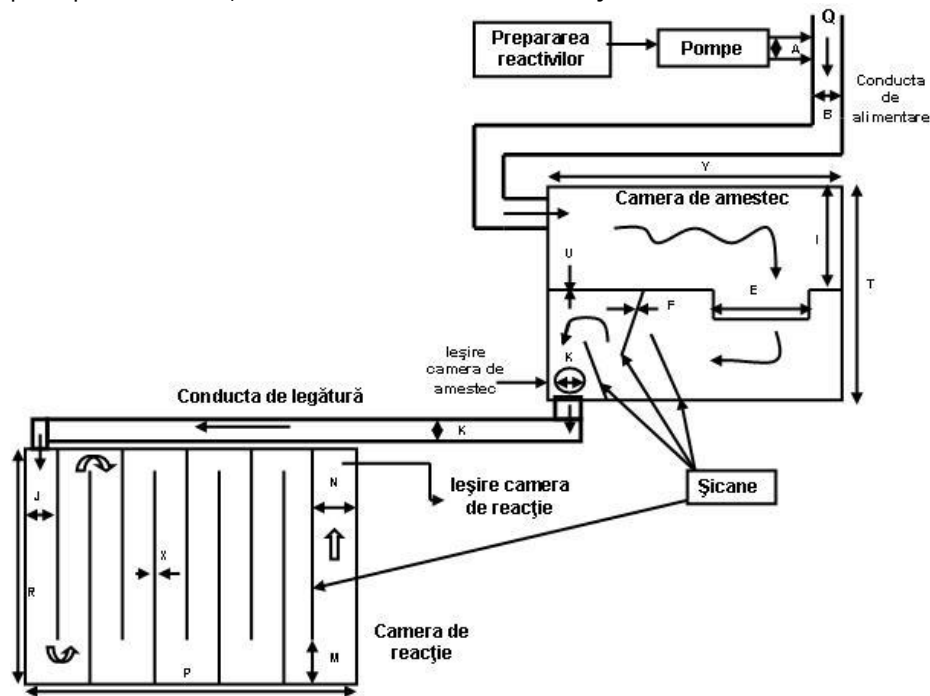


Figura 4.1. Diagrama echipamentelor de coagulare-floculare: camera de amestec și camera de reacție

Tabelul 4.1. Planul schematic al camerei de amestec

Parametrii		Camera de amestec
<i>Q</i>	Debit de apă brută, m^3/h	125 și 180
<i>A</i>	Distanța între conductele de injecție a reactivilor de coagulare, m	0,05
<i>B</i>	Diametrul conductei de alimentare, m	0,2
<i>Y</i>	Lungimea camerei de amestec, m	2,3
<i>T</i>	Lățimea camerei de amestec, m	1,46
<i>E</i>	Lungimea spațiului de trecere a lichidului de la un compartiment la altul, m	0,74
<i>F</i>	Grosimea șicanelor, m	0,003
<i>U</i>	Grosimea peretelui despărțitor, m	0,003
<i>K</i>	Diametrul conductei la ieșire din camera de amestec, m	0,245
<i>I</i>	Lățimea camerei de liniștire, m	0,7

Tabelul 4.2. Nivelul de lichid pentru echipamentele de coagulare-floculare

Camera de amestec	Debit apă brută, m^3/h	Nivel lichid, m
Camera de liniștire	125	0,79
	180	0,83
Camera cu șicane	125	0,7
	180	0,95
Floculator hidraulic	125	0,72

Comunicarea între camera de amestec și camera de reacție este realizată cu ajutorul unei conducte de legătură (diametru 0,245 m). Camera de reacție este o cameră longitudinală împărțită de nouă șicane în zece compartimente. Această cameră este de fapt un floculator hidraulic unde amestecarea este realizată de șicane. Un tip similar de floculator a fost studiat și de alți cercetători [199, 201-203]. În continuare se va folosi pentru camera de reacție termenul de "floculator hidraulic". Similar camerei de amestec, panta părții de jos a floculatorului se presupune a fi zero. Pentru a defini planul schematic (figura 4.1) al acestui echipament, șase variabile geometrice sunt prezentate în tabelul 4.3.

Tabelul 4.3. Planul schematic al floculatorului hidraulic

Parametrii		Floculator hidraulic
<i>J</i>	Lățimea canalelor (fără ultimul canal), m	0,41
<i>X</i>	Grosimea șicanelor, m	0,08
<i>M</i>	Distanța dintre șicană și peretele floculatorului, m	0,38
<i>N</i>	Lățimea ultimului canal, m	0,44
<i>P</i>	Lățimea floculatorului, m	4,85
<i>R</i>	Lungimea floculatorului, m	18

Nivelul de lichid pentru debitul de $125 \text{ m}^3/\text{h}$ este de $0,72 \text{ m}$ (tabelul 4.2). Dimensiunile echipamentelor se bazează pe date geometrice și tehnice reale, care au fost puse la dispoziție de compania regională a serviciilor publice de apă din Timișoara.

4.3. Distribuția duratelor de staționare (DDS)

Pentru aceste două echipamente ale stației pilot s-a investigat DDS prin folosirea unei metode de injecție numită semnal impuls (treaptă-contra-treaptă), comportamentul dinamic fiind monitorizat pentru diferite debite de apă brută ($70\text{-}180 \text{ m}^3/\text{h}$). În acest capitol vor fi prezentate rezultate pentru 125 și $180 \text{ m}^3/\text{h}$ în cazul camerei de amestec și $125 \text{ m}^3/\text{h}$ pentru floculatorul hidraulic. Ca traser s-a folosit o soluție concentrată de NaCl, concentrația acesteia fiind măsurată prin conductivitatea electrică a apei cu ajutorul unui conductometru portabil. Pentru camera de amestec și conducta de legătură, traserul a fost injectat în conducta de alimentare a camerei de amestec, în același punct în care reactivi de coagulare sunt, de obicei, adăugați. Răspunsul traserului a fost monitorizat în funcție de timp prin măsurarea conductivității electrice în următoarele puncte:

- ieșire din camera de amestec;
- ieșire din conducta de legătură (intrare în floculatorul hidraulic).

Din cauza dimensiunilor geometrice ale floculatorului hidraulic, soluția concentrată de NaCl a fost injectată la intrarea în sistem (experimentele în care injecția traserului a fost realizată în conducta de alimentare a camerei de amestec nu au fost foarte concludente datorită diluției traserului în volumul mare al floculatorului). Răspunsul traserului a fost monitorizat în funcție de timp la ieșire din sistem prin măsurarea conductivității electrice a apei. În capitolul anterior, DDS a fost determinat pentru echipamentele principale ale aceleiași stații pilot și rezultatele experimentale obținute au fost utilizate și în acest capitol. Rezultatele DDS au confirmat faptul că, din punct de vedere hidrodinamic, comportamentul conducerii de legătură și a camerei de reacție este apropiat de cel al curgerii de tip piston [204].

4.4. Mediul de programare ANSYS Fluent (CFD)

Informații hidrodinamice pot fi obținute pentru orice sistem prin CFD și DDS [151]. CFD s-a dovedit a fi un instrument puternic în rezolvarea unor probleme complexe și practice din inginerie [205-207]. Relativ recent, CFD a fost folosit cu succes în tratarea apei și la lucrări de canalizare. Tratarea apei se bazează pe o serie de procese unitare care, în general, implică un regim de curgere turbulent. Acest tip de curgere este de multe ori complex (difuzia momentului redusă, convecția momentului ridicată și variații rapide de presiune și viteză în spațiu și timp) și dificil sau foarte scump pentru a fi observat. CFD poate prezice modele de flux și alte proprietăți ale curgerii fluidelor (viteză, presiune, temperatură, concentrația speciilor, etc.), oferind astfel o imagine de ansamblu asupra proceselor care altfel nu ar fi fost posibilă [208].

CFD este un grup de tehnici menite să rezolve ecuațiile Navier-Stokes (ecuațiile Reynolds Averaged Navier-Stokes în cele mai multe cazuri), satisfăcând astfel conservarea masei, impulsului și a energiei pentru a prezice comportamentul sistemelor fluidice [209]. Pentru un fluid Newtonian incompresibil, ecuațiile de mișcare Navier-Stokes sunt:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = f_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \quad (4.2)$$

În care, f_i este un vector care reprezintă forțele externe, u este viteza, x este vectorul de poziție și t este timpul.

Ecuatiile Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) au aceeași formă generală ca și ecuațiile instantanee Navier-Stokes, dar referindu-se la viteze și alte variabile ale soluției care acum reprezintă valori medii de ansamblu (sau valori medii în timp). Ecuatiile RANS sunt în principal folosite pentru a descrie curgerea turbulentă. Pentru un fluid staționar, Newtonian și incompresibil, aceste ecuații pot fi scrise în notația Einstein astfel:

$$\rho \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = \rho \bar{f}_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\bar{\rho} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \rho \overline{u_i u_j} \right] \quad (4.3)$$

Partea stângă a acestei ecuații reprezintă schimbarea impulsului mediu al elementului de fluid din cauza instabilității și convecției fluxului mediu [210]. Împreună cu ecuațiile RANS s-a folosit modelul standard de turbulență $k-\varepsilon$ pentru a descrie transportul energiei cinetice turbulente, k , și a gradului de disipare, ε , în unitatea de timp (ecuații descrise în capitolul 2).

Metodologia CFD constă într-un model matematic discret care înlocuiește ecuațiile RANS cu expresii algebrice discretizate, care la rândul lor pot fi rezolvate prin calcule iterative. O soluție a ecuațiilor RANS se numește câmp de viteză sau câmp de curgere, acest câmp fiind o descriere a vitezei fluidului la un moment dat, în timp și spațiu. Cea mai utilizată abordare în metodologia CFD este metoda volumului finit, caz în care ecuațiile sunt integrate în fiecare volum de control. Pentru a rezolva ecuațiile de mișcare este necesar a se discretiza domeniul spațial în celule mici pentru a forma o rețea de volume și apoi a se aplica un algoritm adecvat [211].

În acest capitol, toate simulările au fost efectuate cu ANSYS Fluent 14.0 instalat pe un calculator de 2,67 GHz și 4 GB RAM. În primul rând a fost analizată o stare staționară, unde s-a înregistrat profilul de viteză pentru cele două echipamente, după care s-a studiat o stare tranzitorie (stare dinamică) prin folosirea unei tehnici cu scalari, UDS (user-defined scalar). Rezultatele au fost reprezentate grafic astfel: concentrația relativă a traserului (% de concentrație traser la intrare în sistem) în funcție de timp, în diferite puncte ale echipamentelor. Precizia simulărilor a fost evaluată prin compararea datelor experimentale DDS cu rezultatele simulării.

Pentru a observa disiparea fluidului prin echipamente au fost înregistrate valorile medii ale gradului de disipare a energiei (ε) în diferite planuri ale acestora. În cazul camerei de amestec au fost create în CFD trei planuri și anume: plan vertical pentru intrarea în camera de amestec, plan orizontal pentru ieșirea din camera de amestec și plan orizontal pentru ieșirea din conducta de legătură (intrare în floculator). Pentru floculator, planurile create în CFD sunt prezentate în figura 4.2.

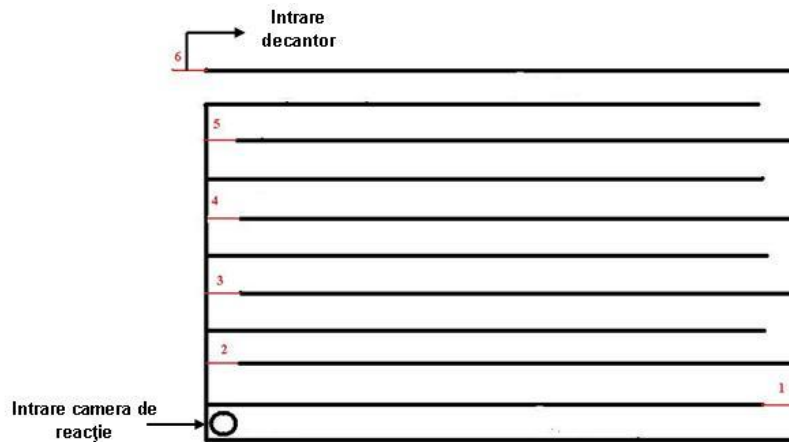


Figura 4.2. Poziția planurilor create în CFD pentru floclatorul hidraulic

4.5. Dezvoltarea modelelor în CFD

În timpul dezvoltării și utilizării oricărui model în CFD, mai multe criterii trebuie să fie luate în considerare și anume: densitatea rețelei, alegerea modelului de turbulență și selecția corespunzătoare a condițiilor limită. Echipamentele investigate în acest studiu au fost proiectate în ANSYS DesignModeler (figura 4.3) și apoi supuse discretizării în ANSYS Meshing.

4.5.1. Camera de amestec și conductele aferente

Discretizarea *camerei de amestec* este tetraedrică, în timp ce pentru conducta de alimentare și conducta de legătură discretizarea este de tip prismă triunghiulară în zonele de inflație și tetraedrică în interiorul conductelor (figura 4.4). În total, aproximativ 784 000 de celule sunt folosite. Echipamentele au fost modelate 3D (soluționarea numerică a utilizat două procesoare în paralel, dublă precizie). În CFD s-a utilizat metoda volumului finit, regiunea de lângă perete fiind modelată prin funcții standard de perete.

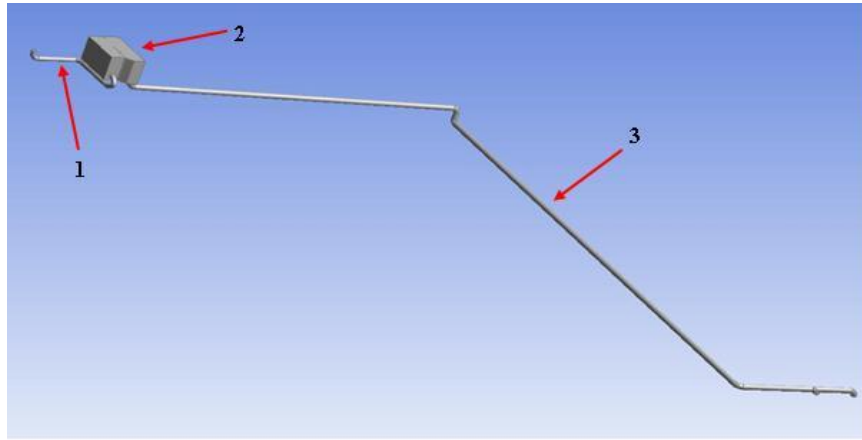


Figura 4.3. Vedere de ansamblu a echipamentelor în DesignModeler: 1- conducta de alimentare; 2- camera de amestec; 3- conducta de legătură

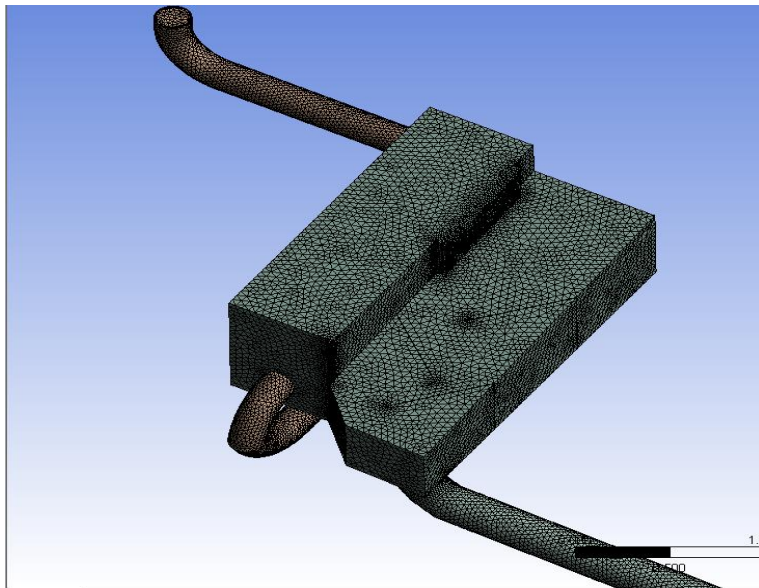


Figura 4.4. Discretizarea camerei de amestec, conductei de alimentare și conductei de legătură

Pentru a inițializa modelul s-au introdus următoarele condiții:

- intensitatea turbulentă a fost stabilită la 5%;
- diametrul hidraulic la 0,2 m;
- presiune standard;
- ecuațiile au fost rezolvate cu ajutorul schemei numită SIMPLE;
- discretizarea spațială și formularea tranzitorie au fost de ordinul doi;
- pentru convergență, rezidualele (continuitate, componentele vitezei, energia cinetică turbulentă și gradul de disipare turbulent) au fost stabilite la 10^{-4} .

Când starea staționară a fost atinsă (profil de viteză), următorul pas a fost definirea unui UDS și a unei funcții numită UDF (user-defined function) care a fost scrisă în limbajul de programare C pentru calculele cu privire la starea tranzitorie (profil de trasor). În general, funcția UDF poate fi folosită pentru calcule particulare, condiții limită sau proprietăți ale materialelor. Valoarea limită de UDS (la intrare în conducta de alimentare) a fost stabilită la 100 timp de 40 de secunde (același timp de injectare ca și în cazul experimentelor DDS) astfel încât concentrația trasorului să poată fi evaluată în timp la ieșire din camera de amestec și la ieșire din conducta de legătură.

4.5.2. Floculatorul hidraulic

În cazul *floculatorului hidraulic*, discretizarea a fost de tip prismă patrulater și compusă din aproximativ 165 000 de celule (figura 4.5).

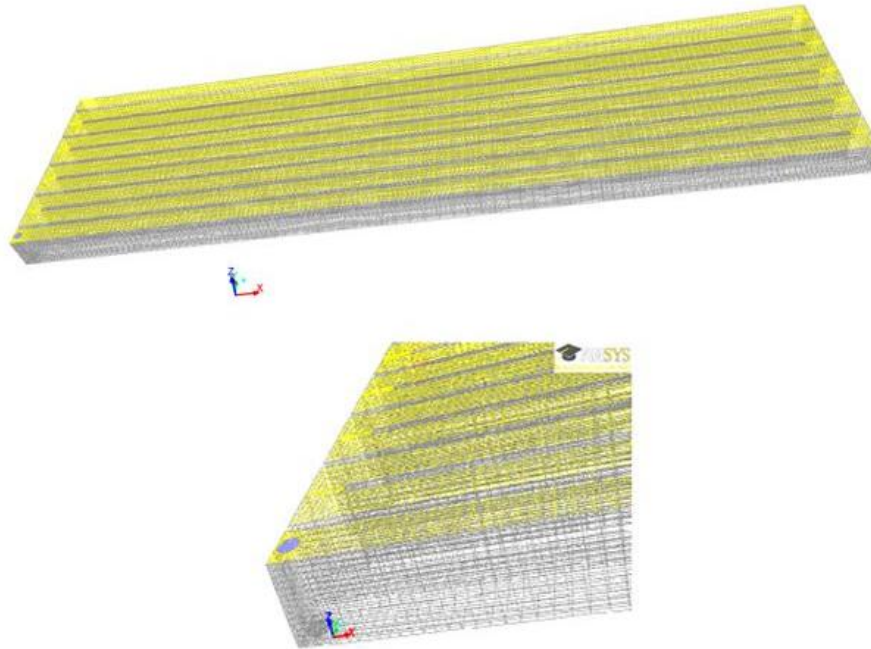


Figura 4.5. Discretizarea floculatorului hidraulic

Pentru a inițializa modelul s-au introdus următoarele condiții:

- intensitatea turbulentă a fost stabilită la 10%;
- diametrul hidraulic la 0,245 m;
- presiune standard;
- ecuațiile au fost rezolvate cu ajutorul schemei numită SIMPLE;
- discretizarea spațială a fost de ordinul unu și formularea tranzitorie a fost de ordinul doi;

- pentru convergență, rezidualele (continuitate, componentele vitezei, energia cinetică turbulentă și gradul de disipare turbulent) au fost stabilite la 10^{-4} .

Ca și în cazul camerei de amestec, starea tranzitorie pentru floculator s-a evaluat după ce starea staționară a fost atinsă. Valoarea limită de UDS a fost

stabilită la 100 timp de 10 secunde (ca și în cazul experimentelor DDS) la intrare în flocluator, concentrația traserului fiind evaluată în timp la ieșire din flocluator.

Pentru ambele echipamente, rezultatele simulării au fost comparate cu datele experimentale de DDS.

4.6. Rezultate experimentale

Camera de amestec și conducta de legătură – comportamentul hidrodinamic al acestor echipamente a fost investigat pentru două debite de apă brută și anume: 125 și 180 m³/h (profil de viteză în figura 4.6 și figura 4.7).

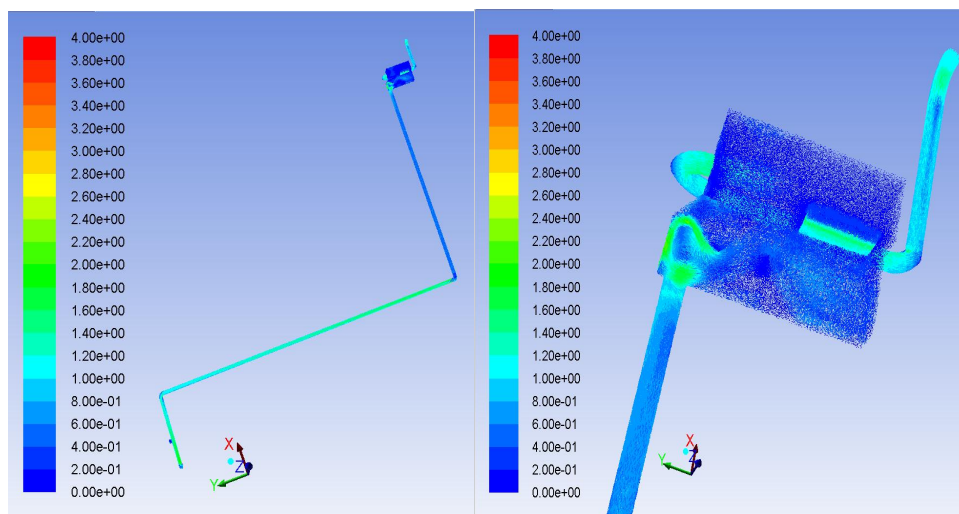


Figura 4.6. Profil de viteză pentru camera de amestec și conducta de legătură la 125 m³/h

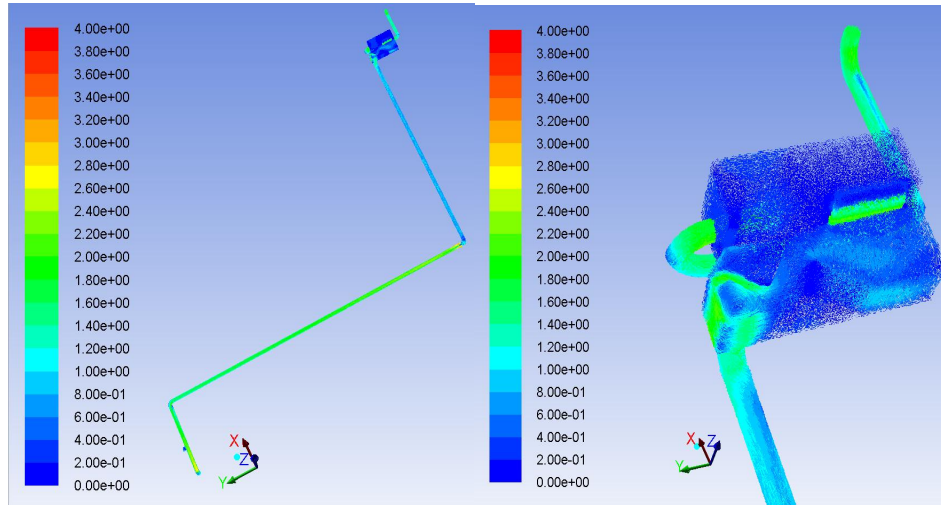


Figura 4.7. Profil de viteză pentru camera de amestec și conducta de legătură la $180 \text{ m}^3/\text{h}$

Figurile 4.6 și 4.7 arată că datorită elementelor care opun rezistență fluxului de trecere, la intrarea în conducta de alimentare, la intrarea în camera de amestec și la ieșirea din camera de amestec profilul de viteză este mai accentuat (zone verzi, viteză în jur de $2,2 \text{ m/s}$). Pentru debitele de apă brută studiate se poate observa că la suprafață, fluxul lovește mai întâi peretele care desparte camera de amestec în două compartimente și apoi pereții șicanelor prezente în camera cu șicane. Un alt lucru care s-a constatat a fost că înainte ca fluxul să ajungă în zona șicanelor o buclă de recirculare s-a instalat (zonă după peretele despărțitor al camerei de amestec). Aceste rezultate obținute în stare staționară servesc drept condiții inițiale pentru următoarea etapă a investigării și anume distribuția concentrației traserului în timpul experimentelor de DDS.

Predicțiile CFD privind profilul traserului la diferite valori ale timpului, după injecție, sunt prezentate în figurile 4.8 și 4.9.

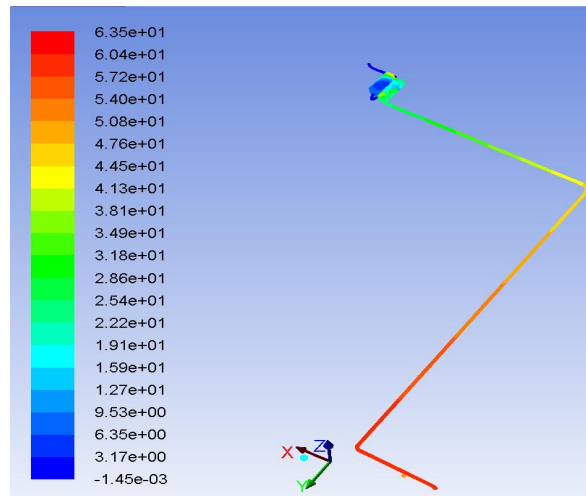


Figura 4.8. Profil de traser pentru camera de amestec și conducta de legătură la 95 de secunde pentru $125 \text{ m}^3/\text{h}$

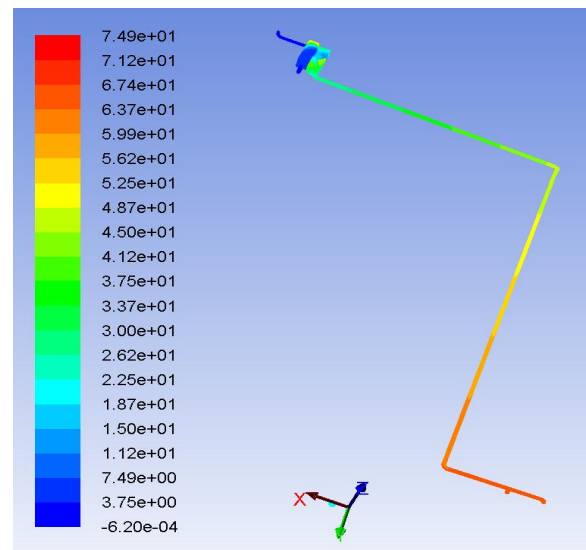


Figura 4.9. Profil de traser pentru camera de amestec și conducta de legătură la 85 de secunde pentru $180 \text{ m}^3/\text{h}$

După cum reiese din aceste figuri, traserul ajunge la ieșirea din conducta de legătură după 95 de secunde pentru $125 \text{ m}^3/\text{h}$ și după 85 de secunde pentru $180 \text{ m}^3/\text{h}$.

În figurile 4.10 și 4.11 sunt prezentate predicțiile CFD privind evoluția traserului în timp versus datele experimentale de DDS (împreună cu abaterea dinamică a concentrației relative a traserului, simulare versus date experimentale)

atât pentru ieșirea din camera de amestec cât și pentru ieșirea din conducta de legătură.

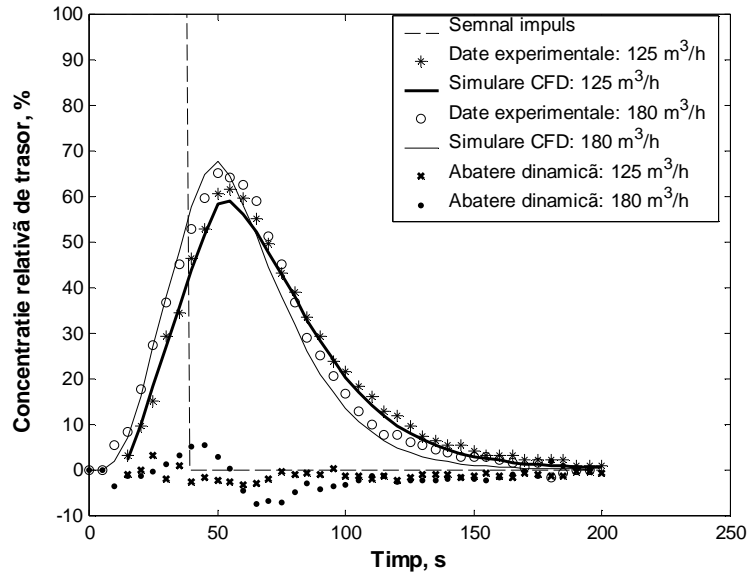


Figura 4.10. Ieșire din camera de amestec: date experimentale versus predicțiile CFD pentru 125 și 180 m³/h

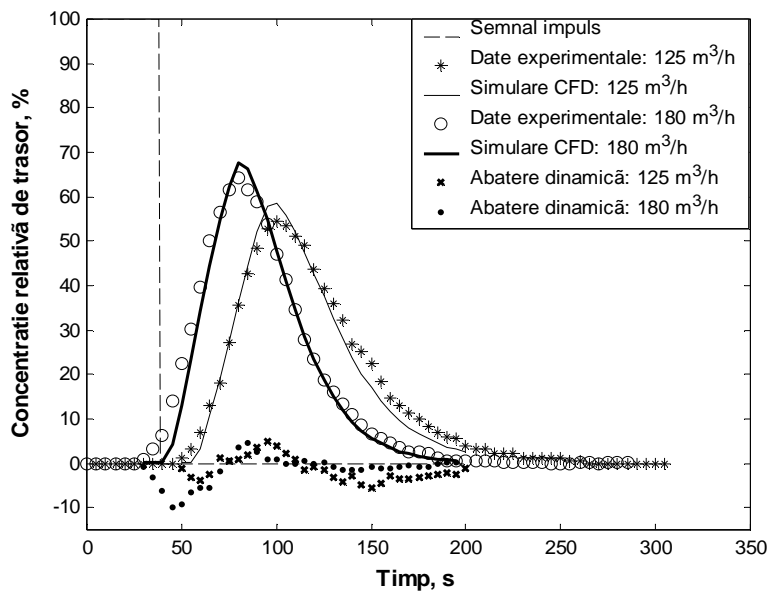


Figura 4.11. Ieșire din conducta de legătură: date experimentale versus predicțiile CFD pentru 125 și 180 m³/h

În ceea ce privește precizia modelării de DDS, principalii parametri investigați sunt prezentați în tabelul 4.4. Coeficientul de corelare și abaterea standard au fost evaluați pe baza datelor de simulare/date experimentale pentru intervalul de timp dintre prima apariție a traserului și dispariția completă a acestuia.

Tabel 4.4. Precizia modelării în CFD (timp de staționare în secunde)

Parametri	Ieșire din camera de amestec		Ieșire din conducta de legătură	
	125 m ³ /h	180 m ³ /h	125 m ³ /h	180 m ³ /h
Timp mediu de staționare - simulare	61	52,5	105	85
Timp mediu de staționare - experimental	63	57	108	83,5
Coeficient de corelare	99,67	99,00	98,79	98,87
Abatere standard	1,616	3,165	3,045	3,45

Pentru ambele echipamente, rezultatele obținute în urma simulării descriu destul de bine datele experimentale. Valorile relativ mari ale abaterilor dinamice se datorează cel mai probabil preciziei debitului de apă măsurat (valori diferite ale timpului mediu de staționare, simulare versus experimental).

Pentru a observa disiparea fluidului prin echipament s-au înregistrat în trei planuri create în CFD, valorile medii ale gradului de disipare a energiei, ε , calculate de ANSYS Fluent (tabel 4.5).

Tabel 4.5. Valori medii ale gradului de disipare a energiei pentru camera de amestec

Planuri create în CFD	125 m ³ /h	180 m ³ /h
	$\varepsilon, m^2 \cdot s^{-3}$	$\varepsilon, m^2 \cdot s^{-3}$
Intrare în camera de amestec	0,07	0,19
Ieșire din camera de amestec	0,83	1,14
Ieșire din conducta de legătură	0,36	0,85

Rezultatele arată că o dată cu creșterea debitului de apă crește și valoarea medie a gradului de disipare a energiei în toate planurile create. La ieșire din camera de amestec, valoarea lui ε este mare ceea ce denotă o disipare mai pronunțată a energiei în această zonă (datorită zonei cu șicane).

Floculatorul hidraulic – profilul de viteză pentru acest echipament este prezentat în figura 4.12. În figura 4.13 este prezentat profilul de trasor la 1230 de secunde de la injectare.

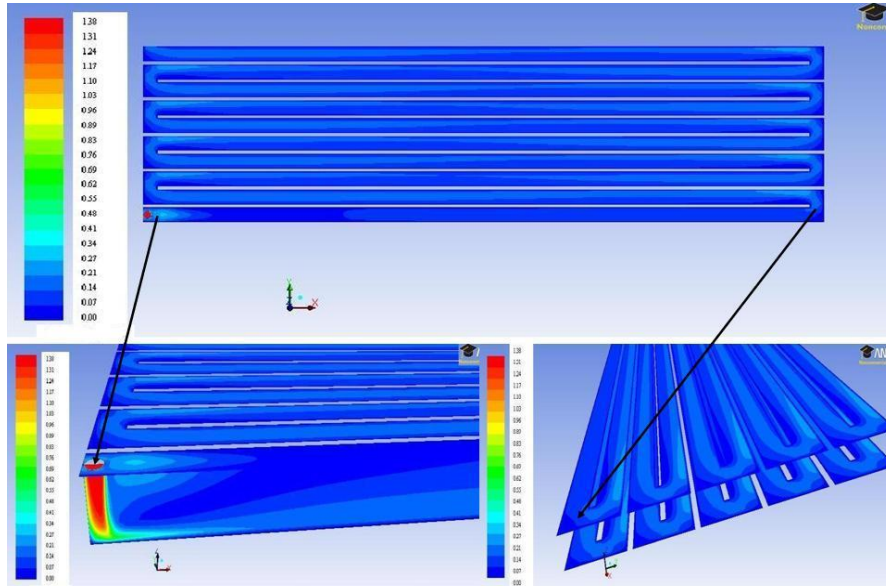


Figura 4.12. Profil de viteză pentru floccatorul hidraulic la $125 \text{ m}^3/\text{h}$

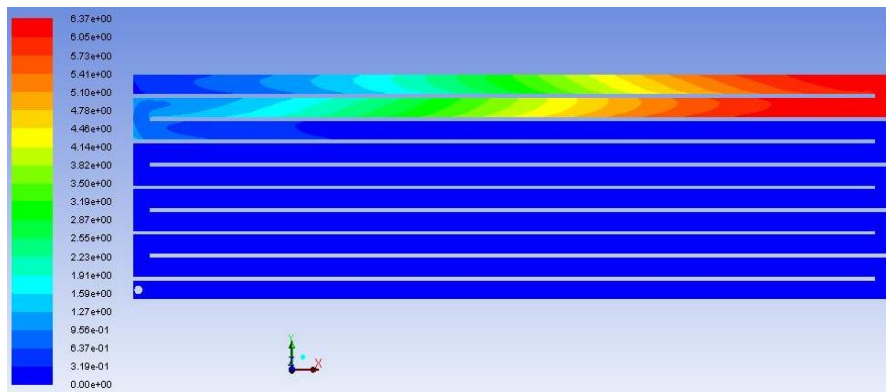


Figura 4.13. Profil de trasor la 1230 de secunde pentru floccatorul hidraulic, la $125 \text{ m}^3/\text{h}$

Se poate observa că profilul de viteză este mai accentuat la intrarea în sistem și mai puțin accentuat de-a lungul compartimentelor din flocculator (fluidul fiind dispersat). De asemenea, figura 4.12 arată prezența unor 'zone moarte' în colțurile superioare și inferioare ale fiecărui compartiment și a unor zone de turbulență ridicată la marginile șicanelor, care pot provoca fragmentarea flocoanelor în timpul procesului de coagulare-floculare.

După cum se vede în figura 4.13, trasorul începe să fie evacuat din flocculator la 1230 de secunde. În comparație cu camera de amestec, trasorul în flocculator are nevoie de mai mult timp pentru a fi evacuat și asta se datorează dimensiunilor geometrice ale echipamentului.

În figura 4.14 sunt prezentate predicțiile CFD privind evoluția traserului în timp la ieșirea din floculator versus datele experimentale de DDS (împreună cu abaterea dinamică).

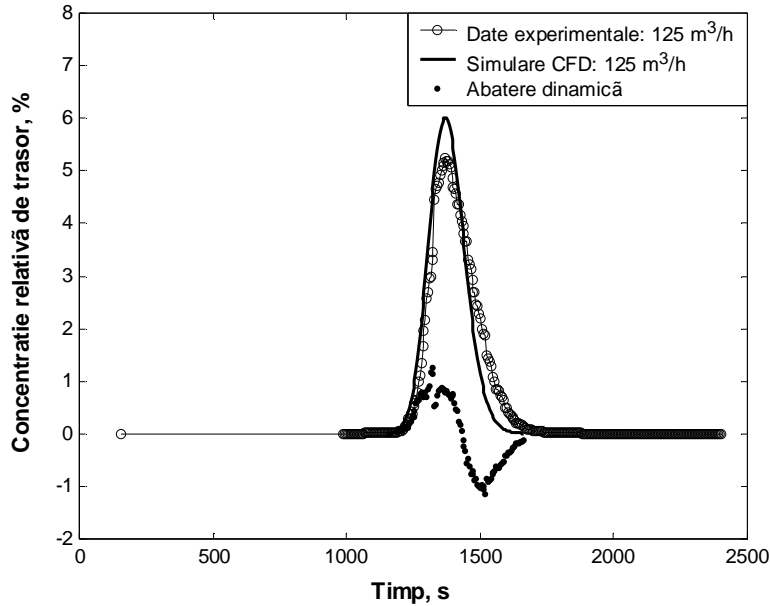


Figura 4.14. Ieșire din floculator: date experimentale versus predicțiile CFD

Din figura 4.14 se observă că diferențele dintre valorile prezise de CFD și datele experimentale (DDS) sunt mai mari decât în cazul camerei de amestec și a conductei de legătură, acest lucru datorându-se cel mai probabil evaluării eronate a timpului de injecție a traserului. Valorile parametrilor care descriu precizia modelării sunt prezentați în tabelul 4.6.

Tabel 4.6. Precizia modelării în CFD pentru floculatorul hidraulic (125 m³/h)

Timp mediu de staționare – simulare (secunde)	Timp mediu de staționare - experimental (secunde)	Coefficient de corelare	Abatere standard
1375	1395	0,952	0,655

Disiparea fluidului (principalul parametru utilizat în proiectarea floculatorilor hidraulice) prin acest echipament a fost evaluată prin calcularea rădăcinii medii a gradului de disipare a energiei în unitatea de volum, G . Acest parametru a fost calculat cu următoarea ecuație [202]:

$$G = \sqrt{\rho \frac{\varepsilon}{\mu}} \quad (4.4)$$

În care, ρ este densitatea fluidului, în kg/m^3 ; ε este gradul de disipare a energiei obținut în CFD și μ este vâscozitatea, în $kg/m \cdot s$ [202]. Rezultatele obținute în urma aplicării ecuației 4.4 sunt prezentate în tabelul 4.7.

Tabel 4.7. Rădăcina medie a gradului de disipare a energiei pentru floculator

Planuri create în CFD	Debit apă brută: 125 m³/h
	G, s⁻¹
1	0,31
2	0,30
3	0,30
4	0,30
5	0,30
6	0,27

Valorile obținute pentru G în cele șase planuri orizontale arată că disiparea fluidului este relativ slabă și constantă în toate compartimentele floculatorului, acest fapt fiind important pentru procesul de coagulare-floculare al unei stații de tratare a apei deoarece grade mici de disipare a energiei produc flocoane mari și ape cu turbiditate mică.

4.7. Concluzii

Investigarea comportamentului hidrodinamic al unor echipamente de coagulare-floculare din cadrul stației pilot de tratare a apei de suprafață din Timișoara a fost realizată cu ajutorul mediului de programare ANSYS Fluent 14.0 (CFD). Precizia modelării echipamentelor a fost evaluată prin compararea datelor experimentale de distribuție a duratelor de staționare cu rezultatele obținute în urma simulării.

Valorile principalilor parametri investigați pentru evaluarea preciziei modelelor (timp de staționare: simulare versus experimental, abatere dinamică, coeficient de corelare și abatere standard) au confirmat faptul că software-ul CFD este un bun instrument în investigarea modelelor de flux și a altor proprietăți ale curgerii fluidelor, oferind astfel o imagine de ansamblu asupra proceselor care au loc în echipamente.

Capitol 5. Evoluția distribuției mărimii particulelor coloidale dintr-o suspensie în timpul procesului de coagulare-floculare

5.1. Introducere

În general, apele de suprafață conțin particule suspendate cu dimensiuni variabile, de natură și proveniență diferite. Majoritatea substanțelor cu care apele curgătoare sau stătătoare vin în contact prezintă riscul de contaminare mai ales prin dizolvare (cazul majorității sărurilor anorganice) dar și prin antrenare, rămânând în suspensie timp îndelungat. Studiul comportamentului acestor particule prezintă importanță atât din punctul de vedere al compoziției, structurii și morfologiei lor cât și datorită faptului că influențează semnificativ anumite fenomene fizice și chimice care au loc în apa care le conține. Particulele solide suspendate, în general mai mari de $1,0 \mu m$, au proprietatea de a se sedimenta ușor. Substanțele dizolvate, prezente ca molecule individuale sau ioni, au diametrul mai mic de $1,0 nm$ în cazul substanțelor anorganice, dar pot avea dimensiuni comparabile cu particulele coloidale când e vorba de macromolecule. Particulele coloidale rămân suspendate în apă o perioadă lungă de timp și au dimensiunea cuprinsă între $1,0 nm$ și $1,0 \mu m$ [31, 212].

Pentru potabilizare, compușii nedorți prezenți în apa de suprafață, printre care și particulele suspendate, coloidale și particulele solide dizolvate trebuie să fie eliminați printr-o metodă adecvată de tratament [31, 212].

Îndepărtarea particulelor solide suspendate poate fi realizată prin sedimentare și filtrare. Pentru a elimina coloizii dintr-o suspensie apoasă, particulele trebuie să fie destabilizate pentru a permite formarea unor agregate mari și grele, care în final pot fi eliminate mult mai ușor (coagulare, floculare, sedimentare) [213].

În prezent, procesul de floculare al stației de potabilizare a apei de Bega se bazează pe măsurarea turbidității reziduale și a gradului de decantare. Acești doi parametri oferă informații limitate privind eficiența procesului.

O imagine mai clară asupra procesului de floculare poate fi obținută prin măsurarea directă a distribuției mărimii agregatelor (flocoanelor). O astfel de analiză este utilă pentru a urmări evoluția dimensională a particulelor în cursul procesului de tratare. Astfel se pot distinge diferențele între dimensiunea inițială a particulelor și dimensiunile atinse în timpul creșterii și apoi în timpul fragmentării flocoanelor. Distribuția mărimii particulelor poate fi exprimată în mai multe moduri, două dintre acestea fiind utile în ceea ce privește scopul studiului prezent și anume: distribuția mărimii flocoanelor (exprimată în procente volumice) în funcție de diametru și distribuția mărimii flocoanelor (exprimată ca număr de particule) în funcție de diametru. Acestea sunt criterii importante pentru măsurarea și anticiparea performanței procesului de floculare (în a înțelege și controla îndepărtarea particulelor suspendate) și utile în alegerea unui proces de tratare a apei, pentru criteriile de proiectare și pentru strategiile de control al procesului.

În acest capitol este prezentat un studiu al influenței distribuției dimensionale a flocoanelor asupra eficienței procesului de eliminare a suspensiilor

coloidale. Datorită fluctuațiilor prezente în caracteristicile apei brute din râul Bega – principala sursă de apă pentru orașul Timișoara, pentru experimente s-a preparat o suspensie de particule de bentonită cu proprietăți corespunzătoare valorilor medii ale râului Bega.

Obiectivul acestui studiu este de a caracteriza procesul de floclurare al suspensiei sintetizate, folosind ca și agent de coagulare alaunul $[Al_2(SO_4)_3]$ prin măsurarea directă a distribuției mărimii particulelor. Acest obiectiv a fost realizat prin:

- măsurarea în timp a distribuției mărimii particulelor (în procente de volum) la diverse intensități de amestecare (45, 90 și 150 *rpm*) într-un jar de 1 L;
- deducerea distribuției mărimii particulelor exprimată ca număr de flocoane;
- estimarea constantelor de floclurare (K_A și K_B) ale modelului Argaman-Kauffman.

Investigații similare, bazate de asemenea pe alaun, dar folosind suspensii preparate doar din apă demineralizată și particule de bentonită sunt prezentate în literatură [214-216]. Recent, Barbot a studiat distribuția mărimii particulelor în timpul procesului de coagulare-floclurare pentru suspensii de bentonită, folosind polielectroliti ca agenți de coagulare [217].

5.2. Compoziția și stabilitatea suspensiei

În scopul simulării comportamentului particulelor coloidale prezente în apele naturale, după cum s-a mai arătat, s-a preparat o suspensie de particule de bentonită, ale cărei caracteristici sunt reproduse fidel conform celor ale apei râului Bega, principala sursă de apă pentru potabilizare din Timișoara. Compoziția suspensiei s-a realizat corespunzător rezultatelor analizelor parametrilor apei brute din râul Bega pe o perioadă de șase luni. S-a preparat o probă de 70 de litri de suspensie. Substanțele și materialele utilizate pentru preparare sunt prezentate în tabelul 5.1, iar dozarea acestor substanțe este prezentată în tabelul 5.2.

Tabel 5.1. Proprietăți ale substanțelor

Substanțe utilizate	Proprietăți
Acid humic	Sarea de sodiu a acidului humic; Particule de dimensiuni mici de culoare neagră; Concentrație ~ 45-70%
Bentonită	Praf gri; Indice de refracție: 1,5; Indice de absorbție: 0
Bicarbonat de sodiu: $NaHCO_3$	Praf alb; $M = 84,01 \text{ g/mol}$; Concentrație $\geq 99\%$
Clorura de calciu: $CaCl_2$	Particule sferice albe; $M = 110,99 \text{ g/mol}$; Concentrație $\geq 94\%$
Sulfat de magneziu: $MgSO_4 \cdot xH_2O$	Praf alb; $M = 120,4 \text{ g/mol}$ fără apă; Concentrație $\geq 99\%$

Tabel 5.2. Compoziția suspensiei

Substanțe	Compoziția medie pentru un reactor standard de amestecare de 70 L
Acid humic	596 ml de acid humic - soluție stoc
Bentonită	0,98 g
Bicarbonat de sodiu: NaHCO ₃	7 g
Clorura de calciu: CaCl ₂	1,57 g
Sulfat de magneziu: MgSO ₄ ·xH ₂ O	4,59 g
Apă demineralizată	70 L

Pentru experimente s-au folosit ca particule primare coloidale particulele de bentonită. Bentonita este în mare parte compusă din montmorilonit (în principal, este un silicat de aluminiu hidratat). Bentonita, în apă își mărește semnificativ volumul [218]. Frecvent, aceste particule în apa naturală prezintă la suprafață sarcini negative, datorită unei deficiențe de sarcină pozitivă, prin înlocuirea cationilor Al³⁺ cu cationi Mg²⁺ [219]. Substanțele humice, componente organice majore în apele nepoluante, sunt de asemenea prezente în apele de suprafață.

După mai multe încercări în care s-au utilizat rezervoare de diferite capacități (25, 50, 70 litri), amestecare manuală sau mecanică, adăugarea în apă a materialelor impurificatoare în stare solidă etc., s-a ajuns la soluția experimentală considerată optimă și anume: suspensia a fost preparată într-un rezervor standard de amestecare de 70 L echipat cu un rotor cu patru lame pentru flux axial (rotor A315 Lightnin), toate substanțele fiind introduse în stare solidă cu excepția acidului humic care a fost adăugat sub formă de soluție pentru a asigura prezența acestuia în probă ca substanță dizolvată. Un rezervor de amestecare asemănător a fost utilizat de către Bouyer și Coufort în studiile de hidrodinamică efectuate [220, 221].

În figura 5.1 este prezentat rezervorul standard de amestecare în care a avut loc prepararea suspensiei împreună cu rotorul axial A315 Lightnin. Rezervorul cilindric (cu diametrul și înălțimea de lichid de 450 mm) este confecționat din sticlă (grosime 6 mm) și este plasat într-un rezervor cubic. De-a lungul suprafeței interne a cilindrului sunt montate patru șicane din sticlă distanțate în mod egal la 45 mm lățime. Diametrul rotorului axial este de 150 mm, iar distanța măsurată între partea de jos a rezervorului de amestecare și planul disc al rotorului este, de asemenea, de 150 mm. Procesul de amestecare al suspensiei a avut loc la o singură valoare a vitezei de rotație a rotorului (N= 250 rpm) și aceasta a fost măsurată cu ajutorul unui indicator optic de turație Testo 460 Hand Held Tachometer. Numărul Reynolds pentru această viteză de rotație a fost de 844 425, ceea ce indică faptul că în rezervor regimul hidraulic este asimilat curgerii turbulente.

Stabilitatea suspensiei a fost studiată în timp prin măsurarea următorilor parametri fizico-chimici:

- pH-ul și temperatura: pH-metru cu microprocesor incorporat;
- turbiditatea inițială și reziduală: turbidimetru tip HACH 2100N IS (având la bază metoda ISO 7027);
- carbonul organic dizolvat (COD): analizor de carbon organic total tip TOCVCSH;
- diametrul volumetric mediu echivalent (d_{50}) al particulelor primare: granulometru tip Malvern Mastersizer 2000 (figura 5.2).

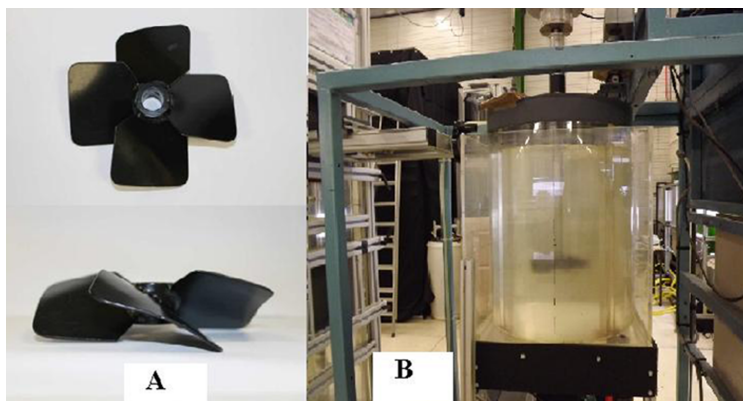


Figura 5.1. A. Rotor axial – A315 Lightning; B. Rezervor standard de amestecare de 70 L



Figura 5.2. Granulometru Malvern Mastersizer 2000

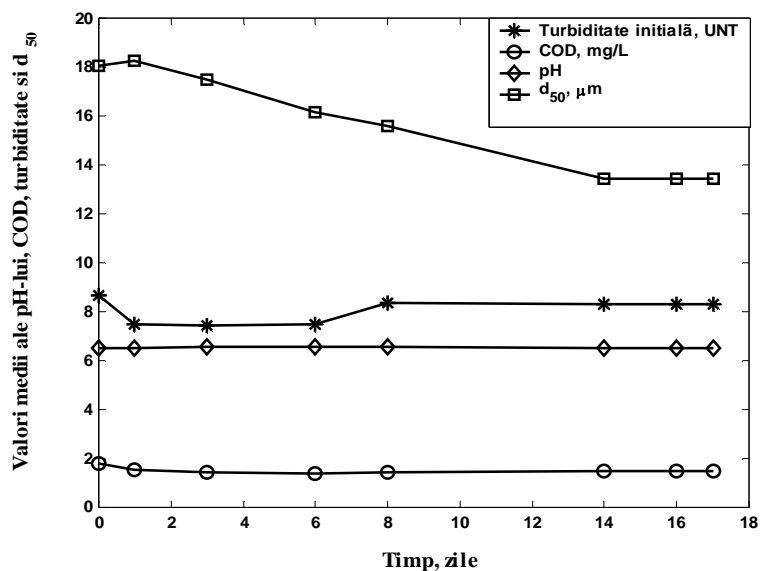
pH-ul inițial al suspensiei s-a modificat în timp, având valori între 8 și 9, acest fapt fiind cauzat de cantitatea de bicarbonat de sodiu adăugată la preparare. Pentru o coagulare eficientă a sulfatului de aluminiu, în literatură este menționat un pH optim de 5-6,5 [54]. Ca urmare, pH-ul suspensiei a fost ajustat la 6,5 cu o soluție de HCl 1N, parametri fizico-chimici fiind măsurați după ajustarea pH-ului.

Stabilitatea suspensiei s-a obținut după un timp îndelungat, de ordinul zilelor, prin amestecare continuă. Valorile finale ale parametrilor fizico-chimici, colectate la timpul la care s-a considerat că stabilitatea suspensiei este corespunzătoare, sunt prezentate în tabelul 5.3. În figura 5.3 este prezentată evoluția în timp a parametrilor fizico-chimici.

Distribuția mărimii particulelor primare (în procente de volum) este prezentată în figura 5.4, de unde se observă că diametrul mediu al particulelor este 13,45 μm (corespunzător la 50% vol.). Distribuția numărului de particule în funcție de diametru este prezentată în figura 5.5.

Tabel 5.3. Valori finale ale parametrilor fizico-chimici

<i>Parametrii</i>	<i>Valori finale</i>
pH	6,5
Temperatura, °C	20,1
Turbiditate, UNT	8,3
COD, mg/L	1,48
d_{50} , μm	13,45

Figura 5.3. Evoluția în timp a pH-ului, COD, turbidității inițiale și d_{50}

Turbiditatea finală a suspensiei, de 8,3 NTU, se încadrează în domeniul obținut în urma monitorizării de șase luni pentru râul Bega.

Diametrul mediu echivalent al particulelor primare s-a măsurat în timpul amestecării suspensiei într-un jar de 1 L la o viteză de 250 rpm (aceeași viteză ca în rezervorul standard de amestecare). Numărul particulelor în funcție de diametru a fost dedus după determinarea distribuției pe bază de volum.

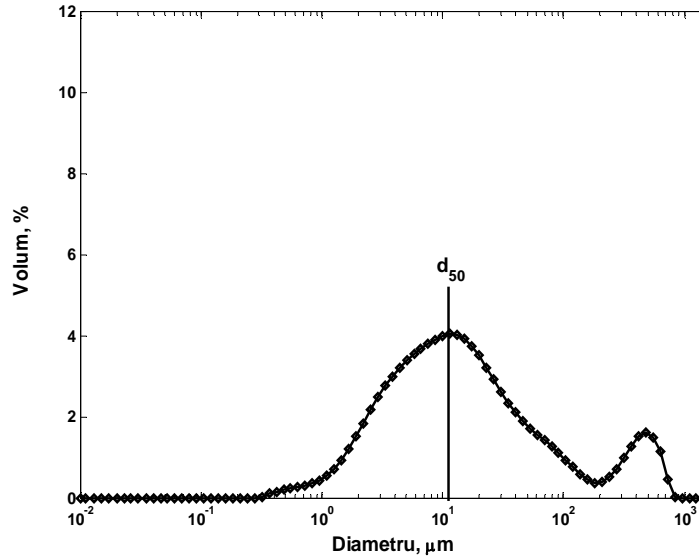


Figura 5.4. Distribuția mărimii particulelor primare (% vol.) (romb gol în figura 5.9; $d_{50} = 13,45 \mu\text{m}$)

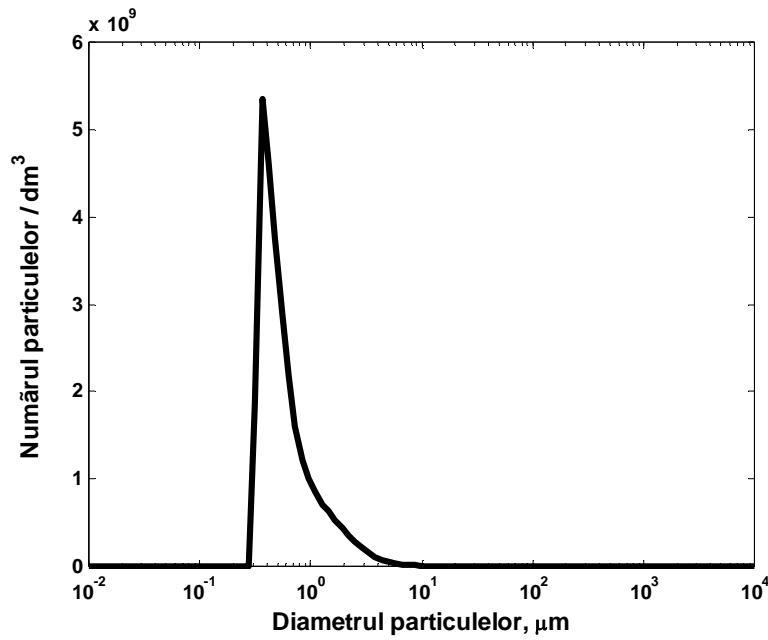


Figura 5.5. Numărul de particule în funcție de diametrul particulelor primare

5.3. Doza optimă de coagulant (Jar-test)

Cea mai potrivită abordare pentru determinarea parametrilor optimi (pH, doză coagulant, timp de floculare etc.), atât din punct de vedere al preciziei și operabilității cât și din motive economice, pentru experimentul prezent, s-a considerat metoda *jar-test*.

Determinarea dozei optime de coagulant se impune deoarece:

- *supradozarea coagulantului* poate duce la costuri ridicate în exploatare și riscuri privind sănătatea publică;
- *subdozarea coagulantului* poate duce la o eficiență scăzută în tratarea apei și la o îndepărtare insuficientă a particulelor solide din instalațiile de tratare a apei [54].

În acest studiu s-a folosit un aparat jar-test, tip "Floculateur 11196", care are în componență 6 pahare Berzelius de 1 L, echipate cu lame plate pentru amestecare (25×75 mm). Pentru fiecare experiment jar-test a fost utilizat următorul mod de lucru: fiecare pahar Berzelius (numit **jar**) a fost umplut cu 800 ml de suspensie din rezervorul standard de amestecare, apoi au fost adăugate diferite doze de coagulant (5-35 mg/L de alaun) în fiecare jar. Viteza rotorului a fost reglată la 150 rpm timp de 2 minute (*coaquare pericinetică*), urmată de schimbarea vitezei la 45 rpm timp de 8 minute (*floculare ortocinetică*). Coagularea pericinetică constă în dispersia cât mai rapidă a coagulantului printr-o amestecare eficientă pentru a destabiliza materia coloidală; flocularea ortocinetică constă în promovarea agregării particulelor primare în flocoane care, la rândul lor, este necesar să fie mobilizate pentru a interacționa și a se agrega. Flocoanele cu dimensiuni mai mari vor putea fi îndepărtate mult mai ușor din apa brută prin sedimentare [54].

După perioada de timp menționată (după flocularea ortocinetică), rotorul a fost oprit și, pentru 30 de minute, suspensia a fost lăsată în repaus pentru a avea loc procesul de sedimentare. Probele au fost prelevate la o adâncime de 2 cm sub nivelul suspensiei pentru măsurarea turbidității reziduale, COD, pH și a temperaturii. Pentru o suspensie cu turbiditatea inițială <10 UNT (pH= 6,5), doza optimă de coagulant determinată a fost de 30 mg/L (figura 5.6). Doza optimă de coagulant a fost considerată acea doză care a avut ca rezultat cea mai mică turbiditate reziduală a suspensiei. S-a observat că suspensia a fost limpede iar flocoanele au fost decantate aproape total. Valorile parametrilor măsurați după jar-test pentru doza optimă de coagulant sunt prezentați în tabelul 5.4.

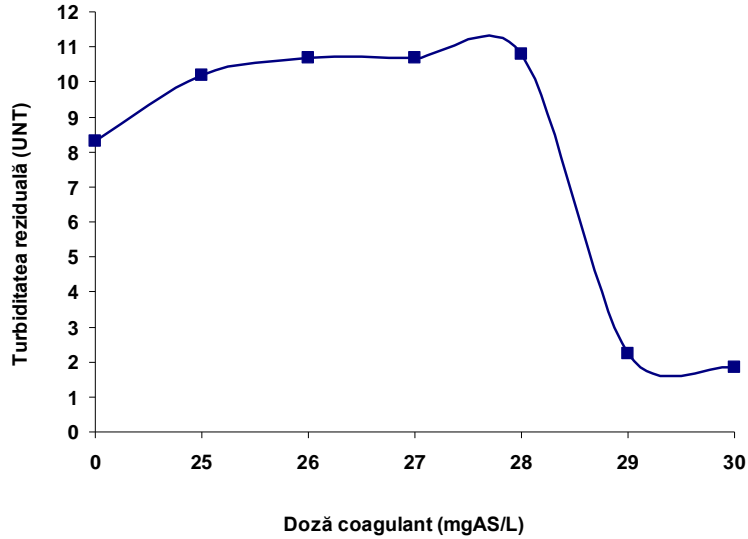


Figura 5.6. Turbiditatea reziduală funcție de doza de coagulant

Tabel 5.4. Valorile parametrilor măsurați după jar-test

Parametrii	După Jar-test
pH	≈ 7
Temperatura, °C	19
Turbiditatea reziduală, UNT	≈ 2
COD, mg/L	0,7

Din tabelul 5.4 se poate observa că pH-ul este singurul parametru care a crescut în comparație cu valorile corespunzătoare suspensiei inițiale și acest lucru poate fi pus pe seama formării diferiților compuși hidrolizați ai sulfatului de aluminiu. Utilizarea dozei de coagulant considerată optimă a avut ca rezultat reducerea concentrației COD cu aproximativ 50% și a turbidității cu 80%.

5.4. Metoda de difuziune a luminii – măsurarea dimensiunii particulelor

Cele mai frecvente instrumente de măsurare a dimensiunii particulelor utilizează metoda de difuziune a luminii. Malvern Mastersizer 2000 este unul dintre instrumentele care măsoară dimensiunea particulelor prin trecerea unui fascicul laser printr-o suspensie de particule. În timp ce radiația traversează stratul de suspensie, o parte interacționează cu mediul (este absorbită sau este difuzată (împrăștiată) de particule) iar restul radiațiilor trec nemodificate prin suspensie. Intensitatea radiației, după traversarea stratului de fluid cu care a interacționat selectiv, este dependentă de mărimea și concentrația particulelor din suspensie [86]. În scopul determinării dimensiunii particulelor, în tehnicile de difuzie a luminii, modelul de difuzie măsurat al unui laser aplicat este comparat cu modelul de difuzie prezis bazat pe un model optic [88]. Principalele modele optice utilizate în instrumentele de difuzie a luminii pentru măsurarea dimensiunii particulelor sunt teoria Lorenz-Mie și teoria de difracție Fraunhofer. Modelul Lorenz-Mie este dezvoltat asumând faptul că particulele sunt sferice și mai mici decât secțiunea transversală a fascicolului de laser. Teoria Fraunhofer a fost dezvoltată pe baza unui model care nu depinde de proprietățile optice ale particulelor în suspensie și ia în considerare numai lumina difractată (împrăștiată) de particulele din suspensie [86].

În acest studiu, modelul de difuzie măsurat a fost comparat cu teoria de difracție Fraunhofer.

Un aspect important înainte de măsurarea dimensiunii particulelor este efectul pompei asupra flocoanelor. Spicer a comparat trei metode de pompare pentru transportul către celula optică și a ajuns la concluzia că o recirculare continuă folosind o pompă peristaltică la partea de retur a instrumentului de măsurare a dimensiunii particulelor, a fost o tehnică blândă, având în vedere fragilitatea flocoanelor și a permis, cu ușurință, monitorizarea continuă a suspensiei [222].

Biggs și Lant au investigat efectul vitezei unei pompe asupra distribuției mărimii flocoanelor de nămol activat pentru un sistem continuu folosind ca instrument de măsurare a dimensiunii particulelor un granulometru Malvern Mastersizer/E. Realizând o comparație între patru debite de curgere (1,7–5,5 ml/s) cu utilizarea unei pompe peristaltice, autorii au descoperit că viteza optimă a pompei a fost la un debit de 3 ml/s. Deasupra acestui debit în cadrul pompei și a tuburilor, dimensiunea flocoanelor a fost redusă semnificativ. Sub acest debit s-a realizat un decalaj de timp semnificativ înainte ca o probă reprezentativă să fie măsurată cu ajutorul unui instrument de măsurare a dimensiunii particulelor [223]. Lartiges a constatat că viteza pompei corespunde unui debit de 1,75 ml/s, debit care nu a permis agregarea sau fragmentarea flocoanelor în sistemul pompei [224].

În acest studiu, pompa peristaltică a fost plasată în aval de granulometru Malvern Mastersizer 2000, permițând astfel ca flocoanele să fie prelevate înainte de a trece prin pompă. Pentru a evalua efectul pompei peristaltice asupra flocoanelor este important să analizăm hidrodinamica jarului/cuvei de 1 L conectată direct la granulometru Malvern Mastersizer 2000. Caracteristicile tehnice ale jarului sunt definite după cum urmează:

- diametru cilindru: 87 mm;
- înălțime lichid: 170 mm;
- diametru rotor: 74 mm;
- înălțime lamă: 20 mm.

Paleta rotorului are două lame iar centrul rotorului este situat la o înălțime de 74 mm față de baza rezervorului. În general, pentru un rezervor de amestecare utilizat în floculare, hidrodinamica se caracterizează prin:

- Numărul Reynolds:

$$Re = \frac{ND^2}{\nu} \quad (5.1)$$

În care, N reprezintă viteza rotorului, s^{-1} ; D este diametrul rotorului, m ; iar ν este vâscozitatea cinematică, m^2/s .

- Numărul putere:

$$N_p = \frac{P}{\rho N^3 D^5} \quad (5.2)$$

În care P reprezintă puterea disipată în rezervor, W , iar ρ este densitatea fluidului, kg/m^3 . Pentru diferite rotoare, în scopul evaluării numărului putere, Nagata a propus funcții tabelate precum: $N_p = f(Re)$ [225].

- Gradul global de disipare vâscoasă:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{P}{\rho V} \quad (5.3)$$

În care V este volumul rezervorului, m^3 .

- Gradientul global de viteză:

$$G = \sqrt{\frac{\langle \varepsilon \rangle}{\nu}} \quad (5.4)$$

Valorile lui Re , N_p , $\langle \varepsilon \rangle$ și G obținute pentru diferite viteze ale rotorului sunt prezentate în tabelul 5.5.

Tabel 5.5. Valorile caracteristicilor hidrodinamice ale jarului

N, rpm	45	90	150
Re	4107	8214	13690
N_p	0,6	0,5	0,45
$\langle \varepsilon \rangle$, m^2/s^3	$5,62 \times 10^{-4}$	0,00374	0,0156
G, s^{-1}	23,71	61,15	125

Pentru a asigura o forfecare minimă a flocoanelor este, de asemenea, necesar să se determine un debit potrivit de curgere al pompei și pentru aceasta s-a pompat apă demineralizată prin granulometru la patru debite de curgere (0,79; 1,26; 1,85 și 2,31 ml/s), care au acoperit gama dispozitivului de control al pompei. Pentru fiecare debit s-a calculat valoarea absolută a vitezei de forfecare (sau gradient de viteză) într-un tub/conductă (tabel 5.6).

Tabel 5.6. Valorile dispozitivului de control al pompei

Număr pompă	Debit, ml/s	G, s^{-1} (sau $\langle \gamma \rangle$)
2	0,79	84,29
3	1,26	133,76
4	1,85	196,39
5	2,31	245,22

Pentru măsurarea dimensiunii flocoanelor s-a ales debitul care corespunde unei viteze de forfecare mici și anume: $0,79 \text{ m/s}$. Acest debit este singurul care ar putea fi inclus în vitezele de forfecare ale jarului de 1 L . Pentru măsurarea dimensiunii flocoanelor, un vas de amestecare cu un volum de 1 L de suspensie a fost conectat la granulometru Malvern Mastersizer 2000 cu ajutorul unor tuburi din plastic. Suspensia a fost continuu recirculată de la jar prin celula probă a granulometrului cu o pompă peristaltică. Recircularea continuă a suspensiei prin dispozitivul de măsurare a dimensiunii particulelor permite analiza on-line a distribuției diametrelor.

5.5. Rezultate experimentale

În scopul caracterizării procesului de floculare s-a investigat distribuția mărimii flocoanelor (% vol.) într-un jar de 1 L la diferite intensități de amestecare (45, 90 și 150 rpm). Experimental, pentru analiza on-line a distribuției mărimii particulelor a fost utilizată următoarea succesiune a operațiilor:

- *Agregarea*: s-a măsurat distribuția inițială (d_{50} inițial) a suspensiei la o viteză de agitare de 250 rpm (figura 5.4); apoi a fost injectată doza optimă de coagulant (30 mg/L de alaun); după care, pentru a destabiliza suspensia, viteza rotorului a fost stabilită la 150 rpm timp de 2 minute și distribuția diametrelor a fost măsurată din nou (figura 5.7). Din rezultatele experimentale obținute s-a dedus numărul de particule în funcție de diametrul particulelor (mai precis s-a determinat fracțiunea de particule situate într-un interval dimensional stabilit) (figura 5.8).

- *Fragmentarea*: viteza de agitare/amestecare a fost redusă la 45 rpm timp de 3 ore, după care a fost ridicată la 90 rpm timp de încă 3 ore, iar în final rotorul a fost menținut la 150 rpm pentru aceeași perioadă de timp. În timpul acestei operații secvențiale, distribuția mărimii particulelor (% vol.) a fost măsurată la diferite intervale de timp.

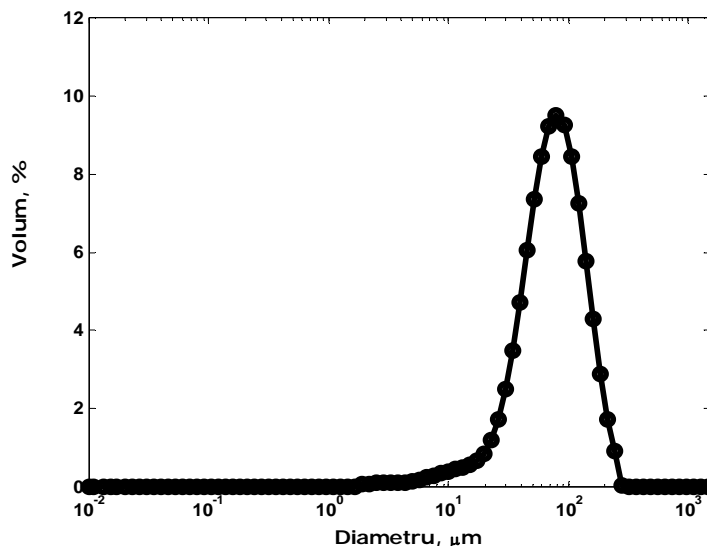


Figura 5.7. Distribuția mărimii particulelor în procente de volum la 150 rpm după 2 minute de amestecare (cerc plin în figura 5.9; $d_{50} = 79,5 \mu\text{m}$)

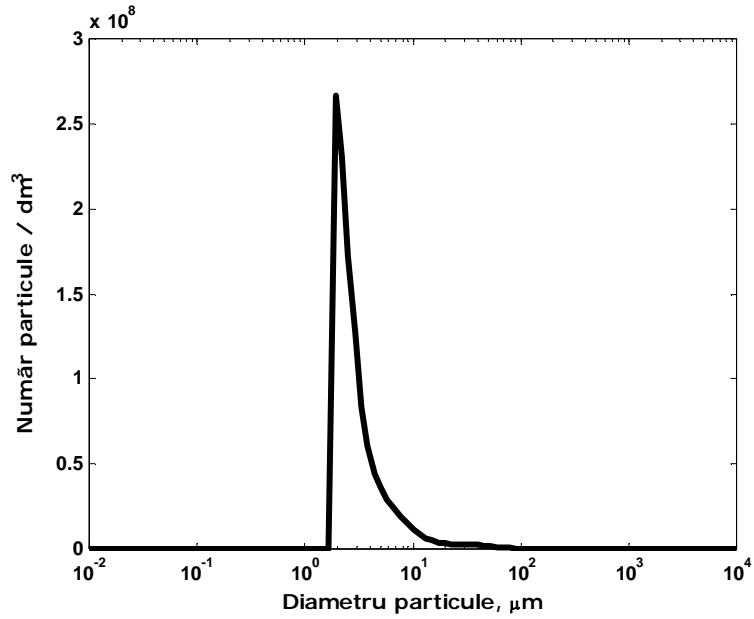


Figura 5.8. Numărul de particule în funcție de diametru la 150 rpm după 2 minute de amestecare

În figura 5.9 este prezentată evoluția în timp a distribuției mărimii particulelor (% vol.), reprezentată de valoarea parametrului d_{50} , la diferite viteze ale rotorului.

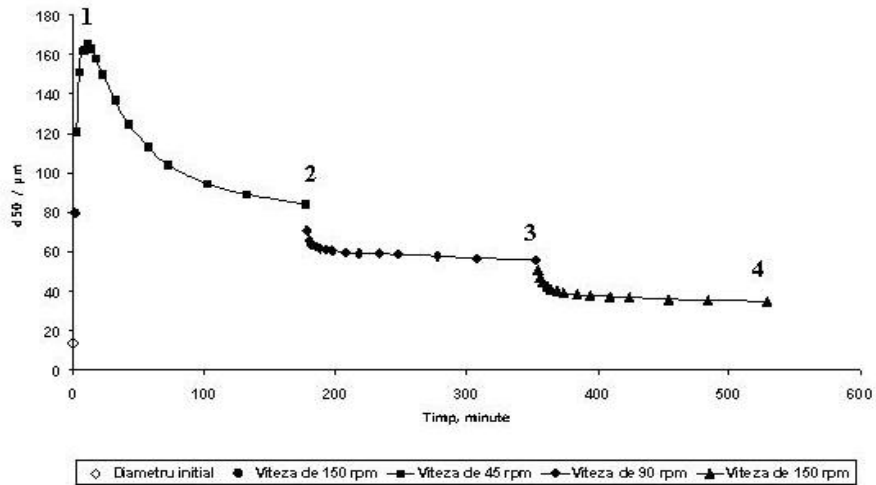


Figura 5.9. Evoluția valorii parametrului d_{50} în timpul procesului de coagulare-floculare

Odată cu creșterea timpului de floclare la 45 rpm, crește și diametrul mediu echivalent al flocoanelor de bentonită-alaun până când se obține o valoare maximă de 165,4 μm (punct 1 în figura 5.9, la 11 minute de amestecare). Distribuția mărimii particulelor (% vol.) la d_{50} maxim este prezentată în figura 5.10 (Numărul de particule în funcție de diametru la d_{50} maxim fiind prezentată în figura 5.11).

În continuare, procesul de fragmentare devine dominant o dată cu creșterea vitezei de amestecare iar după o perioadă de timp starea staționară se instalează (echilibru între agregare și fragmentare) pentru fiecare viteză a rotorului.

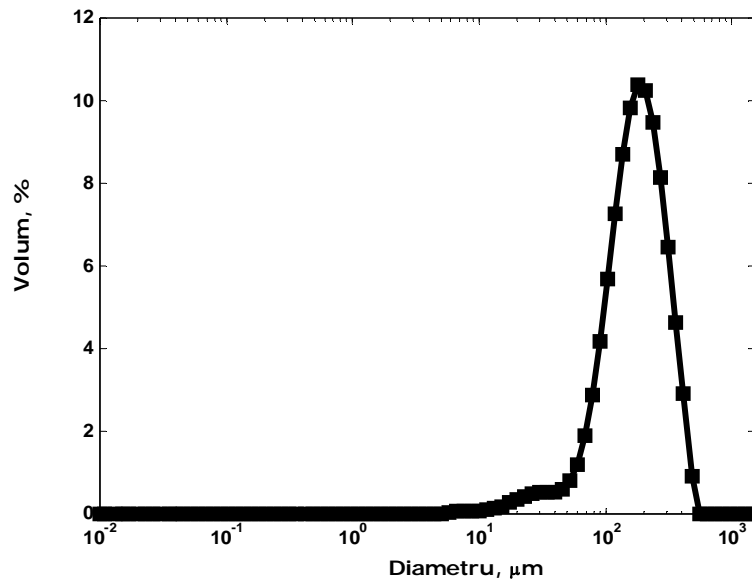


Figura 5.10. Distribuția mărimii particulelor (% vol.) la d_{50} maxim (punct 1 în figura 5.9; $d_{50} = 165,4 \mu\text{m}$)

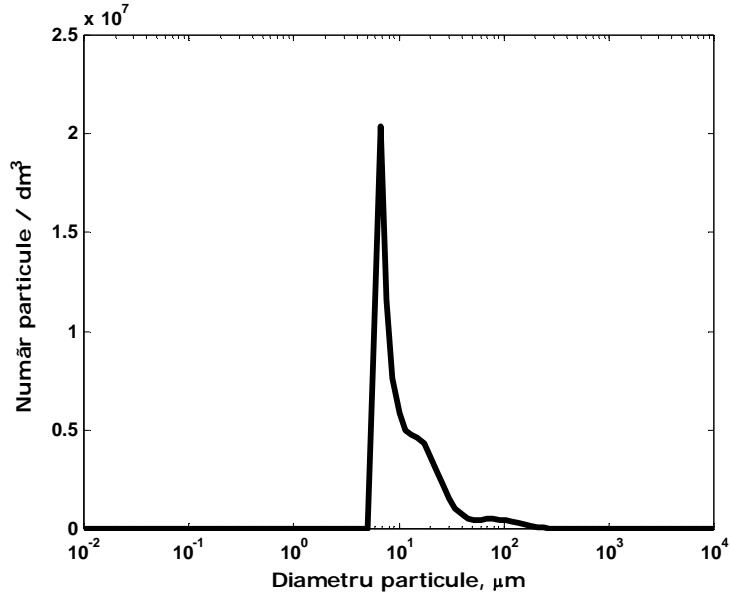


Figura 5.11. Numărul de particule în funcție de diametru la d_{50} maxim

În figurile 5.12, 5.14 și 5.16 sunt prezentate distribuțiile mărimii particulelor (% vol.) la sfârșitul fiecărei etape de amestecare (45, 90 și 150 rpm), în timp ce în figurile 5.13, 5.15 și 5.17 sunt prezentate pentru aceste etape numărul de particule în funcție de diametru.

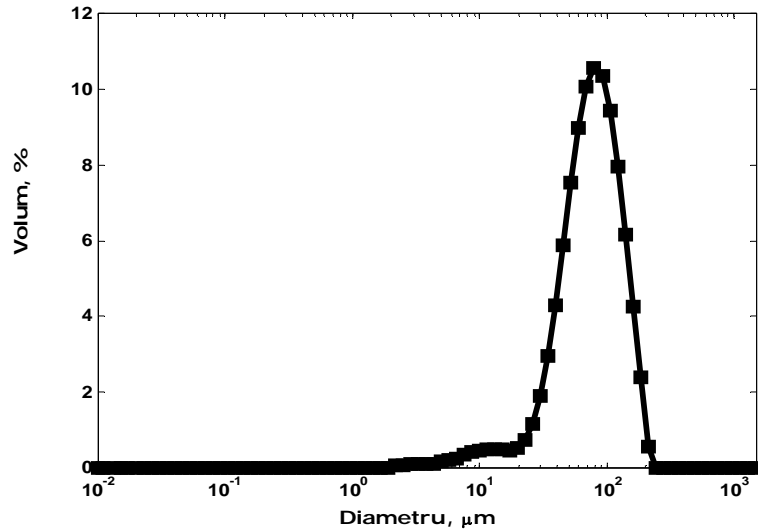


Figura 5.12. Distribuția mărimii particulelor (% vol.) la 45 rpm (punct 2 în figura 5.9; $d_{50} = 70,7 \mu\text{m}$)

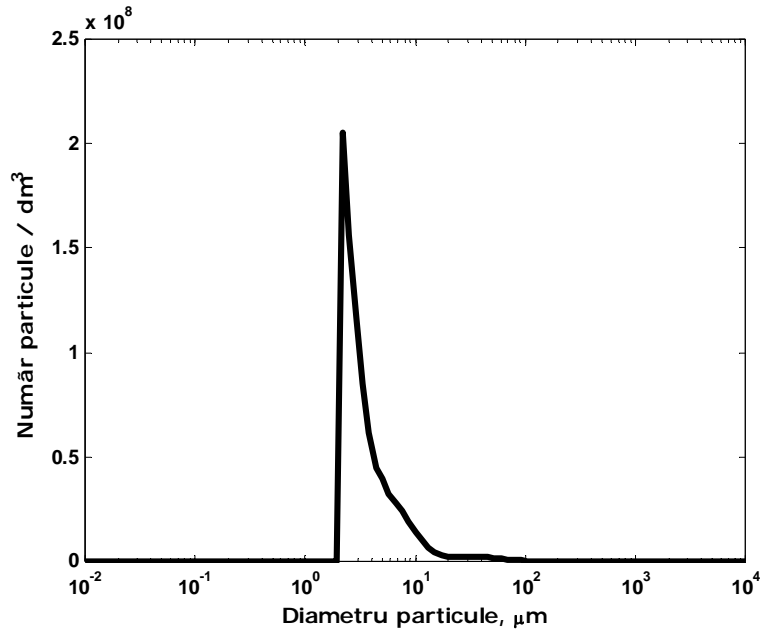
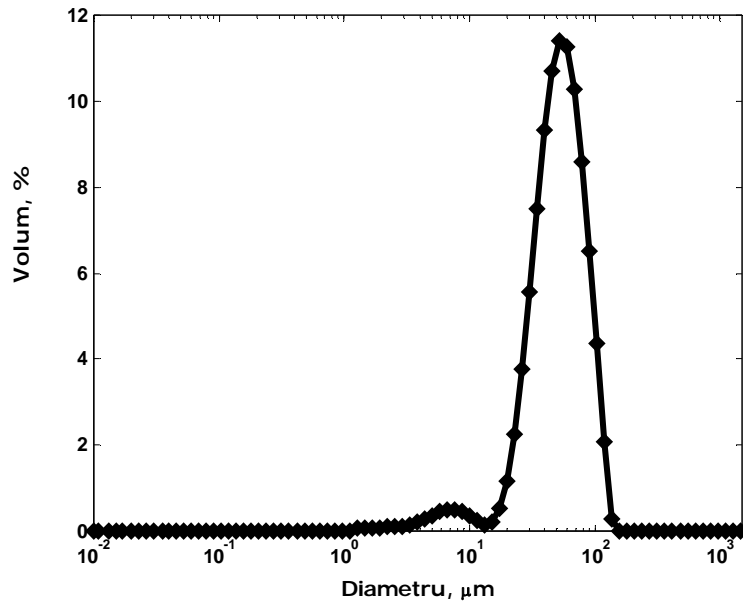


Figura 5.13. Numărul de particule în funcție de diametru la 45 rpm

Figura 5.14. Distribuția mărimii particulelor (% vol.) la 90 rpm (punct 3 în figura 5.9; $d_{50} = 55,6 \mu\text{m}$)

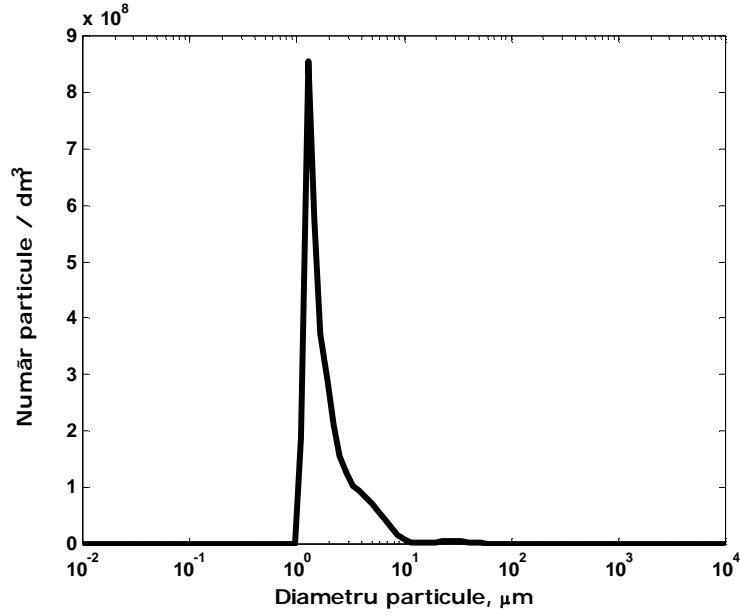


Figura 5.15. Numărul de particule în funcție de diametru la 90 rpm

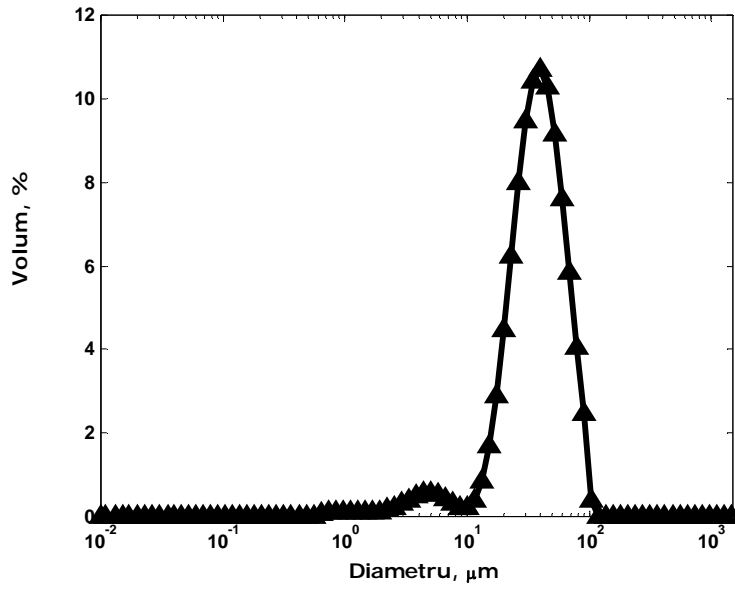


Figura 5.16. Distribuția mărimii particulelor (% vol.) la 150 rpm (punct 4 în figura 5.9; $d_{50} = 34,9 \mu\text{m}$)

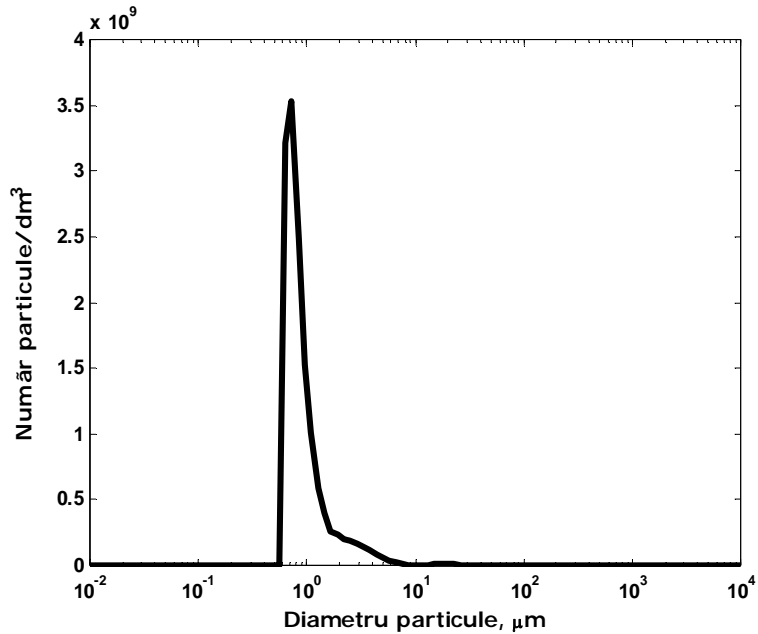


Figura 5.17. Numărul de particule în funcție de diametru la 150 rpm

Analiza rezultatelor a arătat că dimensiunea flocoanelor crește cu creșterea timpului de floculare până la o valoare maximă (punct 1 în figura 5.9) datorită agregării primare (floculare ortocinetică) și apoi scade datorită fragmentării flocoanelor (punct 2, 3 și 4 în figura 5.9).

Dinamici similare ale procesului de floculare pentru sisteme anorganice au fost studiate de către Spicer, Pratsinis, Serra și Casamitjana [222, 226, 227]. Tendință similară privind dezvoltarea dimensiunii particulelor în timp au fost obținute și de Heath, Hopkins, Mutl, Rahmani, Selomulya și Williams [228-233].

Răspunsul mărimii flocoanelor la viteze mari de forfecare și la diametrul corespunzător pentru numărul maxim de particule prezente în suspensie este prezentat în figura 5.18.

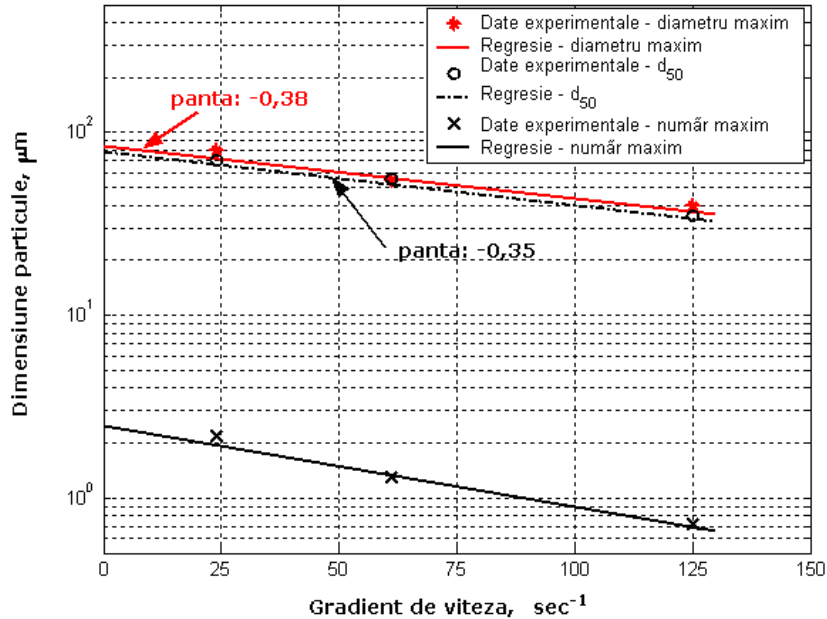


Figura 5.18. Dimensiunea particulelor versus gradient de viteză

Se poate vedea în mod clar că valorile lui d_{50} sunt foarte apropiate de cele mai probabile valori relevate de diametrul maxim, acest fapt demonstrează prezența flocoanelor mari. Descrerea dimensiunii flocoanelor cu creșterea vitezei de forfecare (G) prezintă doar panta ușoară, ceea ce înseamnă că flocoanele prezintă o structură rezistentă confirmând, astfel, rezultatele obținute de Xiao în 2010 [234].

Așa cum este evidențiat în figurile 5.13, 5.15 și 5.17, numărul particulelor mici crește cu viteza de forfecare (G) și acest lucru se datorează fragmentării sau eroziunii flocoanelor.

Rezultatele experimentale privind distribuția mărimii particulelor la diferite viteze de amestecare au fost utilizate pentru estimarea constantelor de floculare ale modelului Argaman-Kauffman. Acest model se bazează pe considerentul că două procese opuse sunt responsabile pentru schimbările distribuției mărimii particulelor în timpul procesului de floculare și anume: agregarea particulelor primare pentru a forma flocoane mari și fragmentarea/ruperea flocoanelor în fragmente mai mici. Pentru o anumită apă și un anumit tip de coagulant, procesul de floculare este caracterizat de constantele de agregare și fragmentare, care trebuie să fie evaluate experimental.

Pentru un rezervor cu amestecare continuă, modelul se exprimă prin următoarea ecuație:

$$\frac{dn_1}{dt} = -K_A n_1 G + K_B n_0 G^2 \quad (5.5)$$

În care, n_1 este concentrația numărului de particule rămase la un anumit timp după perioada de floculare; n_0 este concentrația inițială a numărului de particule primare, înainte de perioada de floculare; K_A este constanta de agregare; K_B este constanta

de fragmentare/ruptură; t este timpul de floculare, s și G este gradientul mediu de viteză, s^{-1} . K_B este, de obicei, legat de G prin următoarea expresie:

$$K_B = k_1 \ln G + k_2 \quad (5.6)$$

În care, k_1 și k_2 sunt constante specifice pentru un anumit tip de apă [235].

Valorile calculate pentru numărul particulelor la sfârșitul fiecărei etape de agitare a rotorului (când practic, s-a obținut o distribuție a mărimii particulelor constantă) împreună cu numărul particulelor inițiale (calculat pe baza distribuției mărimii particulelor inițiale) au fost utilizate în ecuația 5.5 pentru estimarea constantelor de floculare. La o distribuție a mărimii particulelor constantă, derivata timpului în această ecuație este egală cu zero și constantele K_A , k_1 și k_2 pot fi estimate pe baza datelor experimentale la trei gradienti de viteză diferiți. Valorile obținute pentru cele două constante de floculare sunt:

$$K_A = 7,29 \cdot 10^{-4} \text{ și}$$

$K_B = 2,27 \cdot 10^{-7} \cdot \ln G + 1,23 \cdot 10^{-6}$, valori care sunt în acord cu datele experimentale obținute în stare staționară (figura 5.19). Aceste valori sunt în concordanță cu rezultatele obținute de Sekiou și Kellil pentru o suspensie cu nămol [236].

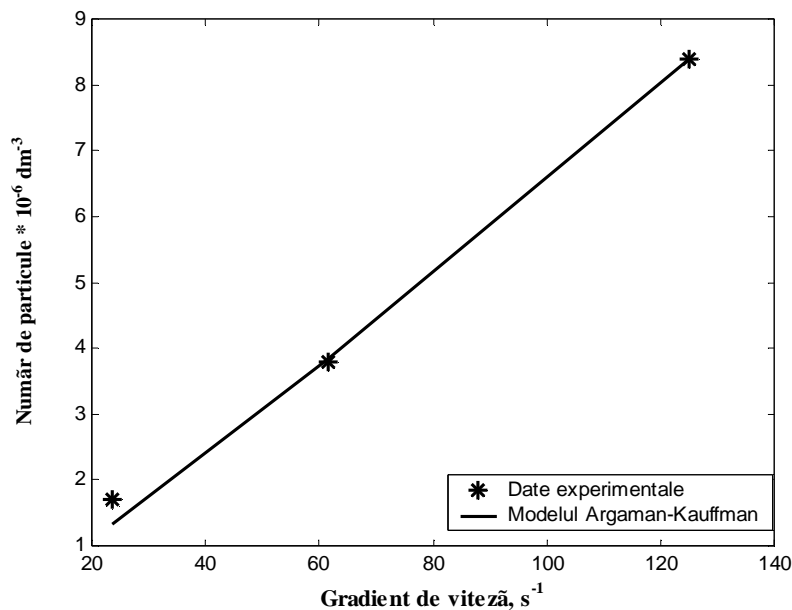


Figura 5.19. Validarea modelului de floculare Argaman-Kauffman

Acordul foarte bun între datele experimentale și predicția modelului confirmă faptul că, pentru cazul suspensiei de particule de bentonită, procesul de floculare este caracterizat cu acuratețe de modelul Argaman-Kauffman.

5.6. Concluzii

Pentru a caracteriza procesul de floculare, în acest capitol s-a preparat o suspensie bazată pe particule de bentonită. Stabilitatea suspensiei a fost confirmată în timp prin măsurarea principalilor parametri fizico-chimici. Într-o etapă următoare, doza optimă de alaun a fost identificată și apoi utilizată în timpul investigării procesului de agregare-fragmentare. Pentru această suspensie a fost studiată în timp evoluția distribuției mărimii particulelor (% vol.), la diferite viteze ale rotorului și apoi a fost dedus numărul de particule în funcție de diametru. Rezultatele experimentale obținute au fost utilizate pentru estimarea constantelor de floculare a modelului Argaman-Kauffman.

În timpul procesului de floculare, evoluția diametrului volumetric mediu echivalent a arătat că dimensiunea flocoanelor crește cu creșterea timpului de floculare ortocinetic până la o valoare maximă, unde s-au identificat flocoane mari și rezistente, datorită agregării primare și apoi scade datorită apariției procesului de fragmentare. Pentru fiecare viteză de amestecare, diametrul volumetric mediu echivalent al flocoanelor scade odată cu creșterea vitezei rotorului până când se ajunge la o stare de echilibru (stare staționară). Măsurarea distribuției mărimii flocoanelor a permis o distincție clară între dimensiunea particulelor inițiale și dimensiunile atinse în timpul creșterii și fragmentării lor.

Modelul Argaman-Kauffman a fost validat de datele experimentale obținute, fapt ce a permis descrierea cu acest model a procesului de floculare pentru o suspensie bazată pe particule de bentonită. Rezultatele obținute în acest studiu demonstrează faptul că distribuția dimensiunii particulelor exprimată ca procente de volum și ca număr de particule sunt criterii utile în înțelegerea și caracterizarea procesului de floculare.

Acest studiu permite ca tratarea procesului de coagulare-floculare din cadrul stației pilot din Timișoara să fie abordată dintr-un nou punct de vedere, care va avea ca rezultat final creșterea eficienței procesului de tratare a apei (cunoașterea dimensiunii flocoanelor determină alegerea unui agent de coagulare adecvat).

CAPITOL 6. CONCLUZII GENERALE ȘI CONTRIBUȚII PERSONALE

Concluzii generale

Subiectul tezei de doctorat are un caracter interdisciplinar, pe parcursul elaborării tezei făcându-se apel la mai multe domenii ale ingineriei: chimie - fizică, matematică, informatică (Matlab, Excel, CFD) și inginerie chimică.

Concluziile rezultate în baza acestui studiu sunt:

1. Investigarea unui număr mare de referințe bibliografice, lucrări apărute în țară și în străinătate, s-a concretizat prin prezentarea noțiunilor generale legate de tehnologiile de tratare a apelor în vederea potabilizării, modelare matematică, simularea numerică a proceselor și de prezentare succintă a două medii de programare, Matlab și ANSYS Fluent (CFD), ambele utilizate în cadrul tezei.
2. Modelarea hidrodinamicii cu mediul de programare Matlab a constatat dezvoltarea unor modele matematice pentru principalele echipamente ale stației pilot de tratare a apei de suprafață din Timișoara (camera de amestec, conducta către camera de reacție, camera de reacție și decantor), folosind experimente de distribuție a duratelor de staționare. Cunoscutele modele de amestecare reală (Cholette-Cloutier) și de dispersie axială au fost combinate pentru a identifica structura cea mai potrivită a modelelor pentru fiecare unitate în parte. Rezultatele experimentale au arătat că hidrodinamica stației pilot poate fi destul de bine aproximată printr-o combinație de modele matematice simple, o astfel de structură fiind potrivită pentru aplicațiile ingineresti.
3. Modelarea hidrodinamicii cu mediul de programare ANSYS Fluent 14.0 (CFD) s-a realizat pentru echipamentele de coagulare-floculare din cadrul stației pilot de tratare a apei de suprafață din Timișoara. Precizia modelării echipamentelor a fost evaluată prin compararea datelor experimentale de distribuție a duratelor de staționare cu rezultatele obținute în urma simulării. Valorile principalilor parametri investigați pentru evaluarea preciziei modelelor (timp de staționare: simulare versus experimental, abatere dinamică, coeficient de corelare și abatere standard) au confirmat faptul că software-ul CFD este un bun instrument în investigarea modelelor de flux și a altor proprietăți ale curgerii fluidelor, oferind astfel o imagine de ansamblu asupra proceselor care au loc în echipamente.
4. Pentru a caracteriza procesul de floculare, s-a preparat o suspensie bazată pe particule de bentonită, suspensie ale cărei caracteristici sunt similare

celor ale apei râului Bega, principala sursă de apă pentru potabilizare din Timișoara. Stabilitatea suspensiei a fost confirmată în timp prin măsurarea principalilor parametri fizico-chimici. Pentru această suspensie a fost studiată în timp evoluția distribuției mărimii particulelor (% vol.), la diferite viteze ale rotorului. Măsurarea distribuției mărimii flocoanelor a permis o distincție clară între dimensiunea particulelor inițiale și dimensiunile atinse în timpul creșterii și fragmentării lor. Pe baza rezultatelor experimentale obținute s-a calculat numărul de particule în funcție de diametrul particulelor. Rezultatele experimentale au arătat faptul că numărul particulelor mici crește cu viteza de forfecare și acest lucru se datorează fragmentării sau eroziunii flocoanelor.

5. Datele experimentale privind distribuția inițială a particulelor coloidale împreună cu distribuția mărimii particulelor la diverse viteze de rotație ale rotorului (floculator mecanic), distribuție măsurată după atingerea echilibrului agregare-fragmentare, au fost utilizate pentru evaluarea constantelor de floclare din modelul Argaman-Kauffman. Rezultatele experimentale au confirmat faptul că acest model descrie corect procesul de agregare-fragmentare pentru suspensia bazată pe bentonită.
6. Rezultatele obținute în acest studiu au pus în evidență faptul că progresele în domeniul tehnicilor de modelare-simulare și în domeniul investigării granulometrice a suspensiilor permit noi abordări în operarea instalațiilor de coagulare-floculare, fapt ce va avea efecte pozitive asupra eficienței procesului de tratare a apei în vederea potabilizării.

Contribuții personale

Principalele contribuții personale aduse în prezenta lucrare sunt următoarele:

- Dezvoltarea și validarea unor modele matematice pentru studiul hidrodinamicii stației pilot de la compania regională Aquatim S.A din Timișoara. Parametrii modelelor matematice ale echipamentelor au fost estimați pe baza experimentelor de distribuția duratelor de staționare cu trasor utilizând ca mediu de programare softul Matlab al MathWorks.
- Evaluarea locală a vitezei, a energiei cinetice de disipare și a concentrației speciilor (trasor) în echipamentele de coagulare-floculare ale stației pilot cu ajutorul mediului de programare ANSYS Fluent 14.0 (CFD).
- Prepararea unei suspensii bazată pe particule de bentonită, suspensie care să prezinte proprietăți apropiate valorilor medii ale canalului Bega, principala sursă de apă pentru municipiul Timișoara.
- Studiul stabilității în timp a suspensiei preparate și identificarea dozei optime de coagulant (alaun) cu ajutorul metodei jar-test.
- Caracterizarea procesului de floculare pentru suspensia bazată pe particule de bentonită prin investigarea distribuției mărimii particulelor (% vol.) într-un jar de 1 L, la diferite intensități de amestecare și deducerea numărului de particule în funcție de distribuția mărimii particulelor pentru același sistem de particule coloidale.
- Estimarea constantelor de floculare ale modelului Argaman-Kauffman, în vederea caracterizării procesului de floculare pentru proba sintetică preparată.

BIBLIOGRAFIE

1. Burtică G., Negrea A., Micu D., Orha C., Poluanții și mediul înconjurător, Editura Politehnica, Timișoara, 2005;
2. <http://www.greenagenda.org/eco-aqua/potabil.htm> - Eco – Aqua - Apa potabilă, București, 2002, consultat în 06.10.2009;
3. Blăgoi O., Pușcaș E.I., Tratatul apelor de suprafață. Metode chimice, Editura Dosofoei, Iași, 1997;
4. Legea nr. 458/2002 – Calitatea apei potabile, 8 Iulie 2002;
5. Legea nr. 311/2004 România, Parlamentul României, publicată în Monitorul Oficial al României, 2004;
6. Directiva 98/83/EC – Calitatea apei potabile dată spre consumul uman, 3 Noiembrie 1998;
7. Pasăre L., Popescu G., Radu M., Rață D., Vezure I., Purificarea apelor prioritate națională în beneficiul sănătății omului, Simpozionul "Implicarea fondului acvatic dobrogean în menținerea echilibrului ecologic al populației umane", Techirghiol, Proceeding, 2005;
8. Bodor K., Contribuții la îmbunătățirea indicatorilor de calitate ai apei potabile cu ajutorul unor reactivi și tehnologii noi, Teză de doctorat, Timișoara, 2005;
9. Teodosiu C., Tehnologia apei potabile și industriale, Editura Martix Rom, București, 2001;
10. Podaru C.D., Contribuții privind îmbunătățirea tehnologiei de potabilizare a apei prin aplicarea unor procese inovative de filtrare, Teză de doctorat, Timișoara, 2008;
11. Strâmbeanu N., Rus V., Ursoiu I., Schimb ionic, principii teoretice și aplicații în alimentările cu apă, Volum 1, Editura Eurostampa, 1999;
12. Degremont, Water Treatment Handbook, Vol. II, Paris, 1980;
13. Baker J.P., Schofield C.L., Aluminum toxicity to fish in acidic waters, Water, Air and Soil Pollution, p.289–309, Volume 18, 1982;
14. Costello J.J., Post precipitation in distribution systems, J. AWWA, p.46-49, Volume 76, Issue 11, 1984;
15. Driscoll C.T., A procedure for the fractionation of aqueous aluminum in dilute acidic waters, Int. J. Environ. Anal. Chem., p.267-284, Volume 16, 1984;
16. Degremont, Memento technique de l'eau, Paris, 1989;
17. TSM (Techniques, Sciences, Methodes) Colecția 1970-1996;
18. Rojanschi V., Cartea operatorului din stații de tratare a apelor, Editura Tehnică, București, 1996;
19. Bârsan E., Alimentări cu apă, Editura Performantica, Iași, 2005;
20. Giannin E.M., Aluminiul rezidual în apa potabilă, Editura Politehnica, Colecția "Chimie", Timișoara, 2004;
21. Ionescu G.C., Instalații de alimentare cu apă, Editura Matrix Rom, București, 2004;
22. AWWA, White paper on use of aluminium salts in drinking water treatment, American Water Works Association, Denver, Colorado, USA, 1997;
23. <http://www.scribube.com/geografie/ecologie/TRATAREA-APELOR-INDUSTRIALE91571.php>, Tratatul apelor industriale, consultat în

- 18.07.2012;
24. Stevenson D.G., Flow and filtration through granular media – the effect of grain and particle size dispersion, *Water Research*, p.310-322, Volume 31, Issue 2, 1997;
 25. Stevenson D.G., *Water treatment unit processes*, Imperial College Press, London, 1997;
 26. <http://www.scribd.com/doc/77574283/Epurarea-fizică>, *Epurarea fizică – Deznisipatoarele*, consultat în 19.07.2012;
 27. Letterman R.D., Amirtharajah D., Melia A.O., *Coagulation and flocculation in water quality and treatment*, Cap.6, 5th edition, McGraw-Hill Inc., New York, 1999;
 28. Vik E.A., Eikebrokk B., *Coagulation process for removal of humic substances from drinking water*, American Chemical Society, Washington, 1989;
 29. Rosario-Ortiz F.L., Snyder S.A., Suffet I.H., Characterization of dissolved organic matter in drinking water sources impacted by multiple tributaries, *Water Research*, p.4115-4128, Volume 41, Issue 18, 2007;
 30. Amirtharajah D., O'Melia C.R., *Coagulation process: destabilization, mixing and flocculation*, *Water Quality and Treatment*, McGraw-Hill, New York, 1990;
 31. Kim S.-H., Moon B.-H., Lee H.-I., Effects of pH and dosage on pollutant removal and floc structure during coagulation, *Microchemical Journal*, p.197-203, Volume 68, 2001;
 32. AWWA (American Water Works Association) and ASCE (American Society of Civil Engineers), *Water Treatment Plant Design*, Second Edition, New York, McGraw-Hill Inc., 1990;
 33. Yan J., Use of a high resolution photographic technique for studying coagulation/flocculation in water treatment, University of Saskatchewan, Saskatoon: Master Degree Thesis, 2005;
 34. AWWA and ASCE, *Water Treatment Plant Design*, Third Edition, New York, McGraw-Hill Inc., 1998;
 35. AWWA, *Water Quality and Treatment*, McGraw-Hill, New York, 1999;
 36. Howe K.J., Clark M.M., Effect of coagulation pretreatment on membrane filtration performance, *Journal American Water Works Association*, p.133-146, Volume 98, Issue 4, 2006;
 37. Lawler D.F., Benjamin M.M., *ENVE 535 Course Pack*, Corvallis, OR, 2006;
 38. Amirtharajah A., Mills K.M., Rapid-mix design for mechanisms of alum coagulation, *Journal of the American Water Works Association*, p.210-216, Volume 74, Issue 4, 1982;
 39. Dempsey B.A., Sheu H., Tanzeer T.M.A., Mentink J., Polyaluminum chloride and alum coagulation of clay-fulvic acid suspensions, *Journal of the American Water Works Association*, p.74-80, Volume 77, Issue 3, 1985;
 40. Hundt T.R., O'Melia C.R., Aluminum-fulvic acid interactions: Mechanisms and applications, *Journal of the American Water Works Association*, p.26, Volume 79, Issue 12, 1988;
 41. Randtke S.J., Organic contaminant removal by coagulation and related process combinations, *Journal of the American Water Works Association*, p.40-56, Volume 80, Issue 5, 1998;
 42. Edzwald J.K., Van Benschoten J.E., *Aluminum coagulation of natural organic matter*, *Chemical Water and Wastewater Treatment*. Hahn and Klute, New York, Springer-Verlag, p.341-359, 1990;
 43. Bagwell T., Henry H.B., Kenneth M.B., *Handbook of public water systems*,

- 2nd Edition, HDR Engineering Inc., New York, 2001;
44. Binnie C., Kimber M., Smethurst. G., Basic water treatment, Thomas Telford Ltd., London, 2002;
 45. Letterman R.D., Quon J.E., Gemmel R.S., Influence of rapid-mix parameters on flocculation, *Journal of the American Water Works Association*, p.716, Volume 65, 1973;
 46. Water Services Association of Australia (WSSA), Assessment of coagulants for water treatment, Report No. 41, 1992;
 47. Maaschelein W.J., Unit processes in drinking water treatment, Marcel Dekker Inc., 1992;
 48. Pernitsky D.J., Coagulation 101, Associated Engineering, Calgary, Alberta, PhD. Thesis, 2003;
 49. Pernitsky D.J., Drinking water coagulation with polyaluminum coagulants – Mechanism and selection guidelines, University of Massachusetts Amherst, PhD. Dissertation, 2001;
 50. Dennett K.E., Amirtharajah A., Moran T.F., Gould J.P., Coagulation: It's effect on organic matter, *Journal American Water Works Association*, p.129-142, Volume 88, Issue 4, 1996;
 51. Chilărescu I.C., Conducerea automată a proceselor tehnologice din cadrul stațiilor de tratare a apei. Un nou concept pentru determinarea automată a dozelor de reactivi de coagulare, Teză de doctorat, UT Construcții, București, 1998;
 52. Aqua, Colecția 1980-1997, Romaqua, Colecție;
 53. Yi Geng, Application of flocs analysis for coagulation optimization at the Split lake water treatment plant, PhD. Thesis, Winnipeg, Manitoba, 2005;
 54. Matilainen A., Mikko V., Mika S., Natural organic matter removal by coagulation during drinking water treatment: A review, *Advances in Colloid and Interface Science*, p.189-197, Volume 159, Issue 2, 2010;
 55. Wu X., Ge X., Wang D., Tang H., Distinct mechanisms of particle aggregation induced by alum and PACl: Floc structure and DLVO evaluation, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, p.56-63, Volume 347, Issue, 1-3, 2009;
 56. Wang Y., Zhou W.-Z., Gao B.-Y., Xu X.-M., Xu G.-Y., The effect of total hardness on the coagulation performance of aluminum salts with different Al species, *Separation and Purification Technology*, p.457-462, Volume 66, Issue 3, 2009;
 57. Mășu S., Brevet de invenție 122630, B1 Oficiul de Stat pentru Invenții și Mărci, București, 30.10.2009, 5;
 58. Xiao F., Huang J.-C.H., Zhang B.-J., Cui C.-W., Effects of low temperature on coagulation kinetics and floc surface morphology using alum, *Desalination*, p.201-213, Volume 237, Issue 1-3, 2009;
 59. Xiao F., Zhang B., Lee C., Effects of low temperature on aluminum (III) hydrolysis: Theoretical and experimental studies, *Journal of Environmental Sciences*, p.907-914, Volume 20, Issue 8, 2008;
 60. Heinanen J., Effect of temperature on water treatment, *J. Aqua Fennica*, p.201-220, Volume 17, Issue 2, 1987;
 61. Braul L., Viraraghavan T., Corkal D., Cold water effects on enhanced coagulation of high DOC, low turbidity water, *Water Qual. Res. J., Canada*, p.701-717, Volume 36, Issue 4, 2001;
 62. AWWA, *Water Quality and Treatment*, 4th Edition, McGraw-Hill Co., New York, 1990;

63. Benefield L.D., Judkins J.F., Weand B.L., Process chemistry for water and wastewater treatment, Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1982;
64. Reynolds T.D., Richards P.A., Unit operations and processes in environmental engineering, 2nd Edition, PWS Publishing Company, 1996;
65. <http://www.hydrop.pub.ro/pu5.pdf>, Capitolul 5. Procese unitare pentru tratarea apelor, consultat în 22.07.2012;
66. Nowbuth M., Rughoobear H., Evaluating the potential use of polyaluminium chloride in the water treatment processes in Mauritius, Science and Technology Research Journal, p.293-306, Volume 11, 2003;
67. Blăgoi O., Manole A., Manole M., The effect of multiple proprieties of aluminium sulphate in surface water treatment, Ovidius University Annals of Construction, p.613-618, Volume 1, 2002;
68. Matilainen A., Lindqvist N., Korhonen S., Tuhkanen T., Removal of NOM in the different stage of water treatment process, Environment International, p.457-465, Volume 28, Issue 6, 2002;
69. Pernitsky D.J., Edywald J.K., Selection of alum and polyaluminium coagulants principles and applications, J. of Water Supply Research and Technology Aqua, p.121-141, Volume 55, Issue 2, 2006;
70. Lerch A., Panglisch S., Buchta P., Yoshita T., Yonekawa T., Hattori K., Gimbel R., Direct river water treatment using coagulation/ceramic membrane microfiltration, Desalination, p.41-50, Volume 17, 2005;
71. Lindbak P., Smocynski L., Potable water treatment by $AlCl_3$ coagulants, Pollutants in Environment, p.76-80, Volume 2, 1992;
72. Gebbie P., Using polialuminium coagulants in water treatment, Proc. 64th AWIEO Conference, Bendigo, 2001;
73. Mășu S., Evaluarea și aplicarea procedului de coagulare avansată la tratarea apelor de suprafață în scop potabil, Teză de doctorat, Editura Politehnica, Timișoara, 2010;
74. Duan J., Gregory J., Coagulation by hydrolysing metal salts, Advances in Colloid and Interface Science, p.475-502, Volume 100-102, 2003;
75. Dorea C.C., Coagulant-based emergency water treatment, Desalination, p.83-90, Volume 251, 2010;
76. Iliuță I., Călinescu I., Apa. Procedee de tratare și standarde de calitate. Reglementări legale, p.98, Editura Printech, București, 2008;
77. Benson Y.A., Effect of raw water quality on coagulant dosage and optimum pH, PhD. Thesis, Malaysia, p.6, 2006;
78. McGhee T.J., Water Resources and Environmental Engineering, Sixth Edition, McGraw-Hill, New York, 1991;
79. Hammer M.J., Hammer Jr. M.J., Water and Wastewater Technology, 5th Edition, Singapore: PEARSON-Prentice Hall, 2005;
80. Pushkin D.O., Emergent Self-Similarity of Cluster Coagulation, University of Illinois, Urbana-Champaign, PhD. Thesis, 2004;
81. Cical E., Burtică G., Mecea M., Influence of the coagulation to the quality of treated water and to the turbidity parameter, Buletinul Științific al Universității "Politehnica" din Timișoara, România, Seria CHIMIE ȘI INGINERIA MEDIULUI, p.119-122, Volum 50 (64), 1-2, 2005;
82. Alexopoulos A.H., Roussos A.I., Kiparissides C., Part I: Dynamic evolution of the particle size distribution in particulate processes undergoing combined particle growth and aggregation, Chemical Engineering Science, p.5751-5769, Volume 59, 2004;
83. Gregory J., Optical monitoring of particle aggregates, Journal of

- Environmental Sciences, p.2-7, Volume 21, 2009;
84. Allen T., Data presentation and interpretation. In: Allen T (Ed) Powder size measurement. Powder sampling and particle size measurement, p.44-111, Chapman and Hall, London, 1997;
 85. Aguilar M.I., Saez J., Llorens M., Soler A., Ortuno J.F., Microscopic observation of particle reduction in slaughter-house wastewater by coagulation-flocculation using ferric sulphate as coagulant and different coagulant aids, *Water Research*, p.2233-2241, Volume 37, 2003;
 86. Jarvis P., Jefferson B., Parsons S.A., Measuring floc structural characteristics, *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology*, p.1-18, Volume 4, 2005;
 87. Farrow J., Warren L., Measurement of the size of aggregates in suspension. In: Dobias B (Ed) *Coagulation and Flocculation – Theory and Applications*, p.391-426, Marcel Dekker, New York, 1993;
 88. Selomulya C., Amal R., Bushell G., Waite T.D., Evidence of shear rate dependence on restructuring and break-up of latex aggregates, *J. Col. Inter. Sci.*, p.67-77, Volume 236, 2001;
 89. Siangsanun V., New hybrid process: Hydrocyclone, coagulation, flocculation and flotation for water treatment process, PhD. Thesis, INSA Toulouse, France, p.15, 2010;
 90. Gregory J., *Particles in water. Properties and processes*, University College London, England, IWA Publishing, p.123, 2005;
 91. Han M., Lawler D.F., The (relative) insignificance of G in flocculation, *JAWWA*, p.56-73, Volume 82, Issue 11, 1992;
 92. *Perry's Chemical Engineer's Handbook*, 8th Edition, Section 18, Liquid-Solid Operations and Equipment, The McGraw-Hill Companies, p.66, 2008;
 93. Gregory J., Monitoring particle aggregation processes, *Advances in Colloid and Interface Science*, p.109-123, Volume 147-148, 2009;
 94. Kiely G., *Environmental Engineering*, McGraw-Hill, 1998;
 95. Goula A.M., Kostoglou M., Karapantsios T.D., Zouboulis A.I., A CFD methodology for the design of sedimentation tanks in potable water treatment case study: the influence of a feed flow control baffle, *Chem. Eng. J.*, p.110-121, Volume 140, 2008;
 96. Sincero A.P., *Environmental Engineering: A design approach*, Prentice-Hall Inc., 1996;
 97. Leung W.W.F., *Industrial centrifugation technology*, McGraw-Hill, New York, 1998;
 98. Gregory R. Zabel T.F., Edzwald J.K., Chapter 7: Sedimentation and flotation, The McGraw-Hill Companies, p.7.1, 1999;
 99. *Handbook of public water systems*, Second Edition, Chapter 11: Sedimentation and other clarification processes, John Wiley and Sons Inc., New York, p.301, 2001;
 100. Burger R., Concha F., Karlisen K.H., Phenomenological model of filtration processes: 1. Cake formation and expression, *Chemical Engineering Science*, p.4537-4553, Volume 56, 2001;
 101. Sutherland K., *Water filtration: Bulk water filtration techniques*, Filtration and Separation, p.17-19, Volume 45, Issue 10, 2008;
 102. Nilson R., Residual aluminum concentration in drinking water after treatment with aluminum or iron salts or apatite – Health aspects, *Water Supply*, p.55-64, Volume 10, Issue 4, 1992;
 103. Reijnen G.K., Kostense A., Verdoow J., Hienstra P., Aluminum in ground

- water, origin, sampling, analysis and removal, Proc. Int. Water Supply Ass., Copenhagen, Denmark, 1992;
104. Shovlin G.M., Yoo R.S., McLachlan C., Cummings E., Dono-Hue J.M., Hallman N.K., Khachaturian Z., Zavaleta J.O., Teefy S.C., Aluminum in drinking water and Alz-heimer's Disease: A resource guide, AWWA Research Foundation Report, AWWA, Denver, CO 80235, 1993;
 105. Handbook of public water systems, Second Edition, Chapter 12: Filtration, John Wiley and Sons Inc., New York, p.351, 2001;
 106. Bartha I., Urban public works, Ed. "Gh. Asachi" Universitatea Tehnică Iași, Iași, România, p.51, 2002;
 107. Bârsan E., Retehnologizarea sistemelor de alimentare cu apă, Editura CERMI, Iași, p.50, 2004;
 108. Betancourt W.Q., Rose J.B., Drinking water treatment processes for removal of Cryptosporidium and Giardia, Veterinary Parasitology, p.219-234, Volume 126, 2004;
 109. Burtică G., Vlaicu I., Negrea A., Tratarea cu clor a apei în scop potabil, Editura Politehnica, Timișoara, p.26, 2002;
 110. Handbook of public water systems, Second Edition, Chapter 19: Disinfection, John Wiley and Sons Inc., New York, p.614, 2001;
 111. Boisdon V., Efficacité de la désinfection par les procédés d'oxidation chimique et de rayonnement ultraviolet, Tech. Sci. Methodes, Genie Urbain Genie Rural, p.228-236, Volume 3, 1995;
 112. Blokker E.J.M., Vreeburg J.H.G., Buchberger S.G., Van Dijk J.C., Importance of demand modelling in network water quality models: a review, Drinking Water Engineering and Science, p.27-38, Volume 1, 2008;
 113. Trussell R.R., Treatment plant of 2050: a designer's view, Journal of American Water Works Association, p.52-53, Volume 92, Issue 2, 2000;
 114. Kuzmin D., A guide to numerical methods for transport equations, p.1-2, 2010;
 115. Robescu D., Robescu Diana, Szabolcs L., Constantinescu A., Fluide polifazice, Editura Tehnică, București, 2000;
 116. Robescu D., Robescu Diana, Szabolcs L., Verestoy I., Fiabilitatea proceselor instalațiilor și echipamentelor de tratare și epurare a apelor, Editura Tehnică, București, 2002;
 117. Robescu D., Robescu Diana, Szabolcs L., Verestoy I., Modelarea și simularea proceselor de epurare, Editura Tehnică, București, 2004;
 118. Todinca T., Geantă M., Modelarea și simularea proceselor chimice. Aplicații în Matlab, Editura Politehnica, Timișoara, 1999;
 119. Rietveld L.C., Improving operation of drinking water treatment through modelling – Water Research Centre Delft, p.98, 2005;
 120. Neagu C., Ioniță C., Rețele neuronale. Teorie și aplicații în modelarea și simularea proceselor și sistemelor de producție, Editura MatrixRom, București, 2004;
 121. Rațiu S.C., Modelarea și simularea proceselor economice, Editura Didactică și Pedagogică, București, 1995;
 122. Dulău M., Olteanu S., Modelare și simulare. Lucrări de laborator, Universitatea Petru Maior, Târgu Mureș, 2003;
 123. Moldovan R.C., Îmbunătățirea performanțelor funcționale ale microdebitmetrelor electrotermice utilizând metode de modelare matematică și simulare numerică, Teză de doctorat, Timișoara, 2008;
 124. Savii G., Luchin M., Modelare și simulare, Editura Eurostampa, Timișoara,

- 2000;
125. Luchin M., Considerații asupra semnificației și conținutului conceptelor de model și modelare, a XXVIII-a Sesiune de comunicări științifice cu participare internațională, Academia Tehnică Militară, București, 1999;
 126. Calisevici M.N., Studii asupra posibilităților de îmbunătățire și optimizare a indicatorilor de calitate pentru apele potabile și de fântână cu ajutorul tehnicilor moderne de măsurare și a modelării matematice, Teză de doctorat, Timișoara, 2010;
 127. Ghinea M., Firișteanu V., Matlab, calcul numeric, grafică și aplicații, Editura Teora, București, 2000;
 128. <http://www.waterworld.com/articles/wwi/print/volume-21/issue-6/editorial-focus/worldwide-report/computational-flow-modeling-applications-expand-into-the-water-industry.html>, Computational flow: modeling applications expand into the water industry, consultat în 20.08.2012;
 129. Căța A.E., Contribuții la studiul proceselor de adsorbție-desorbție însoțite de reacție chimică, Teză de doctorat, Timișoara, 2007;
 130. Leite P.E., Matlab - Modelling, programming and simulations, Published by Sciyo, Croația, 2010;
 131. Curteanu S., Inițiere în Matlab, Editura Polirom, București, 2008;
 132. Soare C., Iliescu S.S., Făgărășan I., Vlad T., Niculescu O.F., Proiectarea asistată de calculator în Matlab și Simulink. Modelarea și simularea proceselor, Editura Agir, București, 2006;
 133. Higham D.J., Higham N.J., Matlab Guide, Published by SIAM, 2000;
 134. <http://www.scribd.com/doc/38657032/Matlab-Theory>, Matlab basics & Programming, consultat în 23.08.2012;
 135. Nauman E.B., Chemical reactor design, optimization and scaleup, Chapter 15: Residence time distributions, The McGraw-Hill Companies Inc., New York, p.539, 2002;
 136. Claudel S., Fonteix C., Leclerc J.P., Lintz H.G., Application of the possibility theory to the compartment modeling of flow pattern in industrial processes, Chemical Engineering Science, Volume 58, p.4005-4016, 2003;
 137. Chemical Engineering Laboratory Manual, UG Lab. Coordinators, p.9, <http://www.che.iitb.ac.in/courses/uglab/uglabs.html>, 2006;
 138. MacMullin R.B., Weber M., The theory of short-circuiting in continuous-flow mixing vessels in series and kinetics of chemical reactions in such systems, Transactions of American Institute of Chemical Engineers, p.409-458, Volume 31, 1935;
 139. Clark M.M., Transport modeling for environmental engineers and scientists, Second Edition, Wiley Publication, p.549, USA, 2009;
 140. <http://www.coanda.ca/docs/5.07%20RTD%20Tech%20Note.pdf>, Residence time distribution measurements, consultat în 24.08.2012;
 141. <http://www.engin.umich.edu/~cre/course/lectures/thirteen/>, Chapter 13: Distribution of residence times for chemical reactors, consultat în 24.08.2012;
 142. Babu A.S., Non-ideal flow. Residence time distribution, ppt., 2008;
 143. Castelain C., Mokrani A., Legentilhomme P., Peerhossaini H., Residence time distribution in twisted pipe flows: helically coiled and chaotic systems, Exp. Fluids, Volume 22, p.359-368, 1997;
 144. Castelain C., Berger D., Legentilhomme P., Mokrani A., Peerhossaini H., Experimental and numerical characterisation of mixing in a spatially chaotic flow by means of residence time distribution measurements, Int. J. Heat

- Mass Transfer, Volume 43, p.3687–3700, 2000;
145. Worner M., Aproximate residence time distribution of fully develop laminar flow in a straight rectangular channel, *Chemical Engineering Science*, Volume 65, p.3499-3507, 2010;
 146. Dankwerts P.V., Continuous flow systems-distribution of residence times, *Chemical Engineering Science*, Volume 2, p.1-13, 1953;
 147. Nauman E.B., Residence time theory, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Volume 47, p.3752-3766, 2008;
 148. Levenspiel O., *Chemical reaction engineering*, Third Edition, Wiley, New York, 1999;
 149. Fogler H.S., *Elements of chemical reaction engineering*, Second Edition, PTR Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992;
 150. Gormely L., An approach to non-ideal reactors and scale-up of pressure leaching systems, *Engineering Theory of Leaching*, amec, ppt., 2003;
 151. Saravanathamizhan R., Balasubramanian N., Srinivasakannan C., Comparison of tanks-in-series and axial dispersion models for an electrochemical reactor, *Journal of Modelling and Simulation of Systems*, Volume 1, p.171-175, 2010;
 152. Lopes J.M., Lemos F., Pinheiro C., Ribeiro F.R., Magalhaes F.D., Mendes A., Costa C., Teaching residence time distributions in the laboratory, *Int. J. Eng. Ed.*, Volume 18, Issue 6, p.674-681, 2002;
 153. Cholette A., Cloutier L., Mixing efficiency determinations for continuous flow systems, *Canadian Journal of Chemical Engineering*, Volume 37, p.105–112, 1959;
 154. Sahle-Demessie E., Bekele S., Pillai U.R., Residence time distribution of fluids in stirred annular photoreactor, *Catalysis Today*, Volume 88, p.61-72, 2003;
 155. Bai H., Stephenson A., Jimenez J., Jewell D., Gillis P., Modeling flow and residence time distribution in an industrial-scale reactor with a plunging jet inlet and optional agitation, *Chemical Engineering Research and Design*, Volume 86, p.1462-1476, 2008;
 156. Ghirelli F., Hermansson S., Thunman H., Leckner B., Reactor residence time analysis with CFD, *Prog. Comput. Fluid Dynam.: Int. J. (PCFD)*, Volume 6, 4/5, 2006;
 157. Vedantam S., Joshi J.B., CFD simulation of RTD and mixing in the annular region of a Taylor-Couette contactor, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Volume 45, Issue 18, p.6360–6367, 2006;
 158. Choi B.S., Wan B., Philyaw S., Dhanasekharan K., Ring T.A., Residence time distributions in a stirred tank: comparison of CFD predictions with experiment, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Volume 43, Issue 20, p.6548–6556, 2004;
 159. Choi B.S., Wan B., Philyaw S., Dhanasekharan K., Ring T.A., Residence time distributions in a stirred tank-comparison of CFD predictions with experiment, In *Proceedings of the AIChE Annual Meeting*, 2007;
 160. Atiemo-Obeng V.A., Paul E.L., Kresta S.M., *Handbook of Industrial Mixing: Science and Practice*, Wiley - IEEE, 2004;
 161. Thyn J., Zitny R., Radiotracer applications for the analysis of complex flow structure in industrial apparatuses, *Nucl. Instr. Meth. B*, Volume 213, p.339–347, 2004;
 162. Worner M., Ghidersa B., Onea A., A model for the residence time distribution of bubble-train flow in a square mini-channel based on direct

- numerical simulation results, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Volume 28, p.83-94, 2007;
163. Boguslawski A., Tyliszczak A., *Introduction to computational fluid dynamics*, Publishing Office of Czestochowa University of Technology, Czestochowa, p.4, 2010;
 164. Blocken B., Gualtieri C., *Ten iterative steps for model development and evaluation applied to Computational Fluid Dynamics for Environmental Fluid Mechanics*, *Environmental Modelling and Software*, Volume 33, p.1-22, 2012;
 165. Brouckaert C.J., Buckley C.A., *Applications of Computational Fluid Dynamics modelling in water treatment*, Report to the Water Research Commission, WRC Report No:1075/1/05, 2005;
 166. <http://www.alentecinc.com/papers/CFD/Statement%20of%20Qualifications-CFD.pdf>, Computational fluid dynamics modeling, consultat in 25.08.2012;
 167. Bridgeman J., Jefferson B., Parsons S.A., *Computational fluid dynamics modelling of flocculation in water treatment: a review*, *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, Volume 3, Issue 2, p.220-241, 2009;
 168. Yeung H., *Modelling of service reservoirs*, *Journal of Hydroinformatics*, Volume 03.3, p.165-172, 2001;
 169. Bakker A., *Lecture 1. Introduction to CFD*, *Applied Computational Fluid Dynamics*, ppt., 2002;
 170. Bridgeman J., Jefferson B., Parsons S.A., *The development and application of CFD models for water treatment flocculators*, *Advances in Engineering Software*, Volume 41, p.99-109, 2010;
 171. Egarr D.A., Faram M.G., O'Doherty T., Phipps D.A., Syred N., *Computational fluid dynamics prediction of the residence time distribution of a prototype hydrodynamic vortex separator operating with a base flow component*, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part E: Journal of Process Mechanical Engineering*, DOI: 10.1243/095440805X7017, Volume 219, p.53, 2005;
 172. <http://www.personal.psu.edu/dob104/papers/rotorcfid.pdf>, *Introduction to Computational Fluid Dynamics with rotorcraft applications*, consultat in 27.08.2012;
 173. Jarman D.S., Faram M.G., Tabor G., Butler D., *A review of the opportunities presented through the application of Computational Fluid Dynamics (CFD) to water management challenges*, *Water Management Challenges in Global Change*, CCWI 2007 and SUWM 2007 Conference, De Montfort University, Leicester, UK, 2007;
 174. Palau G., Weitbrecht V., Thorsten S., Bleninger T., Hofmann B., Maier M., Roth K., *Numerical simulations to predict the hydrodynamics and the related mixing processes in water storage tanks*, *Proceedings of the Congress-International Association for Hydraulic Research*, Volume 1, p.257, 2007;
 175. Samaras K., Zouboulis A., Karapantsios T., Kostoglou M., *A CFD-based simulation study of a large scale flocculation tank for potable water treatment*, *Chemical Engineering Journal*, Volume 162, p.208-216, 2010;
 176. <http://www.intechopen.com/books/computational-fluid-dynamics/modeling-of-turbulent-flows-and-boundary-layer>, *Modeling of turbulent flows and boundary layer*, consultat in 3.09.2012;
 177. Zienkiewicz O.C., Taylor R.L., Nithiarasu P., *The finite element method for*

- fluid dynamics, Sixth Edition, Elsevier Book, UK, p.248, 2005;
178. Pode V., *Procese hidrodinamice*, Editura Politehnica, Timișoara, p.75, 2001;
179. Perry's Chemical Engineer's Handbook, 8th Edition, Section 6, Fluid and Particle Dynamics, The McGraw-Hill Companies, p.46, 2008;
180. Scurtu D., Ciobanu B., *Mecanica fluidelor – Probleme speciale de dinamică*, Editura PIM, Iași, p.155-169, 2008;
181. http://ro.wikipedia.org/wiki/Ecuatiile_Navier-Stokes, Ecuatiile Navier-Stokes, consultat în 04.09.2012;
182. Coufort C., *Analyse experimentale de la floculation en reacteur de Taylor-Couette: Influence de l'hydrodynamique sur les phenomenes d'agglomeration et de rupture*, PhD These, INSA, Toulouse, France, 2004;
183. Davidson L., *Fluid mechanics, turbulent flow and turbulence modeling*, PhD Thesis, Sweden, p.40, 2011;
184. <http://www.britannica.com/EBchecked/topic/609625/turbulent-flow>, Turbulent flow, consultat în 04.09.2012;
185. Al-Sammarraee M., Chan A., Salim S.M., Mahabaleswar U.S., Large-eddy simulations of particle sedimentation in a longitudinal sedimentation basin of a water treatment plant. Part I: Particle settling performance, *Chemical Engineering Journal*, Volume 152, p.307-314, 2009;
186. Ducoste J.J., Clark M.M., Turbulence in flocculators: Comparison of measurements and CFD simulations, *AIChE Journal*, Volume 45, Issue 2, p.432-436, 1999;
187. Opreșă-Stănescu P.D., Oprea C., *Simularea numerică a proceselor de ardere cu Fluent*, Editura Politehnica, Timișoara, p.47, 2001;
188. Shih T.C., Liou W.W., Shabbir A., Zhu J., A new k-ε eddy-viscosity model for high Reynolds number turbulent flows - Model development and validations, *Computer Fluids*, Volume 24, Issue 3, p.227-238, 1995;
189. Bodor K., Păcală A., Vlaicu I., Marșavina D., Anghel M., Anghelina A., Pilot plant treatment of water for drinking purpose by PAC, *Environmental Engineering and Management Journal*, Volume 6, Issue 5, 2007;
190. Proll T., Todinca T., Șuta M., Friedl A., Acid gas absorption in trickle flow columns - Modeling of the residence time distribution of a pilot plant, *Chem. Eng. and Prog.*, Volume 46, p.262-270, 2007;
191. http://www.aquademica.ro/articol_8769/descrierea-stației-pilot-pentru-tratare-apă-de-suprafață.html, Descrierea stației pilot pentru tratare apă de suprafață, consultat în 09.06.2010;
192. Worm G.I.M., Mesman G.A.M., van Schagen K.M., Borger K.J., Rietveld L.C., Hydraulic modeling of drinking water treatment plant operations, *Drink. Water Eng. Sci.*, Volume 2, p.15-20, 2009;
193. Lopez P.R., Lavin A.G., Lopez M.M., Bueno de las Heras J., Flow models for rectangular sedimentation tanks, *Chem. Eng. and Prog.*, Volume 47, p.1705-1716, 2008;
194. Gerard K., *Environmental Engineering, International Edition*, Mcgraw Hill Higher Education, 1998;
195. WHO, *Guidelines for Drinking-water Quality, Third Edition, Volume 1, Recommendations*, IWA Publishing, Geneva, Online at: http://www.who.int/water_sanitation_health/dwq/GDWQ2004web.pdf, p.102, 2004;
196. WHO, *Water Treatment and Pathogen Control. Process Efficiency in Achieving Safe Drinking Water*, LeChevallier M.W., Kwok-Keung A., IWA Publishing, U.K., Online at:

- <http://libdoc.who.int/publications/2004/9241562552.pdf>, p.12, 2004;
197. Ebeling J.E., Sibrell P.L., Ogden S.R., Summerfelt S.T., Evaluation of chemical coagulation/flocculation aids for the removal of suspended solids and phosphorus from intensive recirculating aquaculture effluent discharge, *Aquacultural Engineering*, Volume 29, p.23-42, 2003;
 198. Monroe L.W.S., Lion L.W., Flocculation model and collision potential for reactors with flows characterized by high Peclet numbers, *Water Research*, Volume 44, p.5180-5187, 2010;
 199. Ndirangu W.J., Tuitoek D., Menzwa D., Klaveren P.V., Flow through hydraulic flocculator, *Journal of Civil Engineering*, Volume 7, p.83-91, 2002;
 200. Van Schagen K.M., Model-based control of drinking-water treatment plants, PhD thesis, Technical University, Delft, Netherlands, 2009;
 201. Haarhoff J., Design of around-the-end hydraulic flocculators, *Journal of Water Supply: Research and Technology – Aqua*, Volume 47, p.142-152, 1998;
 202. Haarhoff J., Van der Walt J.J., Towards optimal design parameters for around-the-end hydraulic flocculators, *Journal of Water Supply: Research and Technology – Aqua*, Volume 50.3, p.149-159, 2001;
 203. Liu J., Crapper M., McConnachie G.L., An accurate approach to the design of channel hydraulic flocculators, *Water Research*, Volume 38, p.875-886, 2004;
 204. **Militaru C.M.**, Păcală A., Vlaicu I., Bodor K., Dumitrel G.A., Todinca T., Hydrodynamic modeling of a surface water treatment pilot plant, *World Academy of Science, Engineering and Technology, WASET*, Volume 76, p.120-124, 2011;
 205. Hsu J.P., Yang S.C., Chen J.C., Drag on two co-axial rigid spheres moving normal to a plane: Newtonian and Carreau fluids, *Journal of the Chinese Institute of Chemical Engineers*, Volume 38, p.409-418, 2007;
 206. Videla A.R., Lin C.L., Miller J.D., Simulation of saturated fluid flow in packed particle beds-The Lattice-Boltzmann method for the calculation of permeability from XMT images, *Journal of the Chinese Institute of Chemical Engineers*, Volume 39, p.117-128, 2008;
 207. Lin J. S., Tsai C.J., Tung K.L., Chiang H.C., Thermophoretic particle deposition efficiency in turbulent tube flow, *Journal of the Chinese Institute of Chemical Engineers*, Volume 39, p.281-285, 2008;
 208. Raport Nr. 1075/1/05, Applications of computational fluid dynamics modeling in water treatment, Online at: <http://www.fwr.org/wrcsa/1075105.htm>, 2005;
 209. Jarman D.S., Faram M.G., Butler D., Tabor G., Stovin V.R., Burt D., Throp E., Computational fluid dynamics as a tool for urban drainage system analysis: A review of applications and best practice, 11th International Conference on Urban Drainage, Edinburgh, Scotland, UK, 2008;
 210. CFD – ANSYS Fluent 14.0 Inc., *Fluent 14.0 Users' Guide*, 2012;
 211. Marinho D.A., Barbosa T.M., Kjendlie P.L., Mantripragada N., Vilas-Boas J.P., Machado L., Alves F.B., Rouboa A.I., Silva A.J., Modeling hydrodynamic drag in swimming using Computational Fluid Dynamics, Edited by Hyoung W.O., *Computational fluid dynamics*, Published by Intech, Croatia, p.392, 2010;
 212. Koohestanian A., Hosseini M., Abbasian Z., The separation method for removing of colloidal particles from raw water, *American-Eurasian J. Agric. & Environ. Sci.*, Volume 4, Issue 2, p.266-273, 2008;

213. Xiao-yan L., Xue-dong Z., Chu H.P., Jian-jun Z., Characterization of the flocculation process from the evolution of particle size distributions, *Journal of Environmental Engineering, ASCE*, Volume 134, p.369-375, 2008;
214. Bouyer D., Coufort C., Liné A., Do-Quang Z., Experimental analysis of floc size distributions in a 1-L jar under different hydrodynamics and physicochemical conditions, *Journal of Colloid and Interface Science*, Volume 292, p.413-428, 2005;
215. Bouyer D., Escudié R., Liné A., Experimental analysis of hydrodynamics in a jar-test, *Process Safety and Environmental Protection*, Volume 83, p.22-30, 2005;
216. Coufort C., Bouyer D., Liné A., Flocculation related to local hydrodynamics in a Taylor-Couette reactor and in a jar, *Chemical Engineering Science*, Volume 60, p.2179-2192, 2005;
217. Barbot E., Dussouillez P., Bottero J. Y., Moulin P., Coagulation of bentonite suspension by polyelectrolytes or ferric chloride: Floc breakage and reformation, *Chemical Engineering Journal*, Volume 156, p.83-91, 2010;
218. Xianjia P., Zhaokun L., Futai C., Binghui T., Zhiping J., Adsorption of humic acid onto pillared bentonite, *Desalination*, Volume 174, p.135-143, 2005;
219. Coufort C., Bouyer D., Liné A., Benoit H., Modelling of flocculation using a population balance equation, *Chemical Engineering and Processing*, Volume 46, p.1264-1273, 2007;
220. Bouyer D., Liné A., Do-Quang Z., Experimental analysis of floc size distribution under different hydrodynamics in a mixing tank, *AIChE Journal*, Volume 50, No. 9, p.2064-2081, 2004;
221. Coufort C., Dumas C., Bouyer D., Liné A., Analysis of floc size distributions in a mixing tank, *Chemical Engineering and Processing*, Volume 47, p.287-294, 2008;
222. Spicer P.T., Pratsinis S.E., Raper J., Amal R., Bushell G., Meesters G., Effect of shear schedule on particle size, density and structure during flocculation in stirred tanks, *Powder Technol.*, Volume 97, p.26-34, 1998;
223. Biggs C.A., Lant P.A., Activated sludge flocculation: on-line determination of floc size and the effect of shear, *Water Res.*, Volume 34, p.2542-2550, 2000;
224. Lartiges S.B., Bottero J.Y., Democrate C., Coupel J.F., Optimizing flocculant demand by following floc size distribution, *Journal of Water Supply Research and Technology - AQUA*, Volume 44, Issue 5, p.219-223, 1994;
225. Nagata S., *Mixing: principles and applications*, Kodansha LTD., Tokyo, p.127, 1975;
226. Spicer P.T., Pratsinis S.E., Shear induced flocculation: the evolution of floc structure and the shape of the size distribution at steady state, *Water Research*, Volume 30, Issue 5, p.1048-1056, 1996a;
227. Serra T., Casamitjana X., Effect of the shear and volume fraction on the aggregation and breakup of particles, *AIChE Journal*, Volume 44, Issue 8, p.1724-1730, 1998;
228. Heath A. R., Bahri P. A., Fawell P. D., Farrow J. B., Polymer flocculation of calcite: Experimental results from turbulent pipe flow, *American Institute of Chemical Engineers Journal*, Volume 52, p.1284-1293, 2006;
229. Hopkins D. C., Ducoste J. J., Characterizing flocculation under heterogeneous turbulence, *Journal of Colloid and Interface Science*, Volume

- 264, p.184-194, 2003;
230. Mutl S., Polasek P., Pivokonsky M., Kloucek O., The influence of G and T on the course of aggregation in treatment of medium polluted surface water, *Water Science Technology: Water Supply*, Volume 6, p.39-48, 2006;
231. Rahmani N. H. G., Masliyah J. H., Dabros T., Characterization of asphaltenes aggregation and fragmentation in a shear field, *American Institute of Chemical Engineers Journal*, Volume 49, p.1645-1655, 2003;
232. Selomulya C., Bushell G., Amal R., Waite T. D., Understanding the role of restructuring in flocculation: The application of a population balance model, *Chemical Engineering Science*, Volume 58, p.327-338, 2003;
233. Williams R. A., Peng S. J., Naylor A., In situ measurement of particle aggregation and breakage kinetics in a concentrated suspension, *Powder Technology*, Volume 73, p.75-83, 1992;
234. Xiao Z., Baoyu G., Qinyan Y., Yan W., Qian W., Coagulation efficiency of polyaluminum chloride for natural organic matter removal from low specific UV absorbance surface water and the subsequent effects on chlorine decay, *Chemical Engineering Journal*, Volume 161, Issue 1-2, p.60-67, 2010.
235. Haarhoff J., Joubert H., Determination of aggregation and breakup constants during flocculation, *Water Science and Technology*, Volume 36, p.33-40, 1997;
236. Sekiou F., Kellil A., Effect of organic and mineral matters on kinetic and performance of flocculation, *Desalination*, Volume 249, p.891-894, 2009.

ARTICOLE PUBLICATE

1. **C.-M. Militaru**, K. Bodor, T. Todinca, "Analysis of the hydrodynamics of surface water treatment pilot plant by RTD experiments", Annals of West University of Timișoara, Series of Chemistry, An International Journal, Vol. 19, No.2, p. 1-10, 2010, ISSN 1584-1294 (B+);
2. **C.-M. Militaru**, A. Păcală, I. Vlaicu, K. Bodor, G.-A. Dumitreț, T. Todinca, "Hydrodynamic modeling of a surface water treatment pilot plant", World Academy of Science Engineering and Technology, Venice, Italy, Year 7, Vol. 52, Issue 76, pp. 120-124, 2011, ISSN 2010-3778 (ISI Proceeding);
3. **C.-M. Militaru**, A. Liné, L. Barna, T. Todinca, "Particle size distribution during coagulation – flocculation process of bentonite synthetic water", Environmental Engineering and Management Journal, in press, ISSN 1582-9596, IF= 1,004 (ISI);
4. **C.-M. Militaru**, T. Todinca, A.-D. Filep, A. Liné, A. Păcală, "CFD modeling and simulation of a surface water treatment pilot plant", Environmental Engineering and Management Journal, in press, ISSN 1582-9596, IF= 1,004 (ISI).

Activitatea științifică pe parcursul stagiului de doctorat cuprinde și lucrări prezentate în cadrul conferințelor, precum:

- 2nd International Conference on Chemistry and Chemical Engineering, Timișoara, România, Mai, 2010;
- The XIIth International Symposium "Young People and Multidisciplinary Research", Timișoara, România, Noiembrie, 2010;
- International Conference on Chemical Engineering and Technology, ICCET, 2011, (WASET), Veneția, Italia, Aprilie 2011;
- 12th Edition of Timișoara's Academic Days, Chemistry Symposium, Timișoara, România, Mai, 2011;
- "Interdisciplinaritatea și Managementul Cercetării", Workshop nr. 2, Timișoara, România, Noiembrie, 2011;
- "Interdisciplinaritatea și Managementul Cercetării în studiile doctorale", Workshop nr. 3, Oradea, România, Iunie, 2012;
- International Conference "ECOIMPULS 2012 – Environmental Research and Technology", Timișoara, România, Octombrie, 2012.