

Klantcase Hoe slimme modellen hebben geholpen om de industriële afvalwaterzuivering van Bayer te optimaliseren



v1 2025CC003

Kernpunten van de case:

- Bayer wilde de chemicaliëndosering en de slibafvoer verlagen door het afvalwaterzuiveringsproces in Antwerpen aan te passen
- Voor de virtuele technologiebeoordeling is een slimme combinatie van de dynamische modellen en CFD-modellen van AM-Team gebruikt
- Modellen die op labodata gekalibreerd waren, zijn gebruikt om de prestaties op volle schaal te voorspellen
- Virtual piloting verving duur piloteren op locatie, in een fractie van de tijd en de kosten
- De procesaanpassingen zijn met succes op volle schaal geïmplementeerd
- Er zijn aanzienlijke kosten- en duurzaamheidsvoordelen behaald:
 - -40% NaOH-dosering
 - -35% slibproductie (met een besparing van enkele honderden tonnen chemicaliën per jaar)

Auteurs:



Roberta Muoio, ir.,
Senior Simulation Engineer,
AM-Team



Bart Peeters, Dr. ir.,
Sr Expert Wastewater Treatment,
Bayer



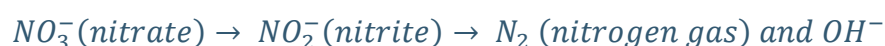
Wim Audenaert, Dr. ir.,
CEO & Co-founder,
AM-Team

Inleiding en probleemstelling

Het lifescience-bedrijf Bayer levert producten en diensten op het vlak van gezondheidszorg en landbouw. Op 31 december 2024 bestond de Bayer-groep uit 291 geconsolideerde ondernemingen in 80 landen.

Op de Bayer-site in Antwerpen (België) wordt jaarlijks 2 miljoen m³ afvalwater gezuiverd. De zuiveringsinstallatie (figuur 1) bestaat hoofdzakelijk uit een biodegradatiebekken met 3 opeenvolgende compartimenten (met anoxische/aerobe/aerobe omstandigheden), nabezinktanks en een flotatie-eenheid. Bayer onderzoekt een procesaanpassing die de chemicaliëndosering en de slibafvoer van het zuiveringsproces aanzienlijk kon verlagen. Zou die slagen, dan leidde dat tot een sterke daling van de operationele kosten en tot duurzaamheidswinst.

Industriële afvalwaterzuivering wordt doorgaans gekenmerkt door een complexe mix van te behandelen inkomende afvalwaterstromen. Een van die stromen op de site in Antwerpen is sterk zuur en werd altijd volledig geneutraliseerd door dosering van natriumhydroxide (natronlut) vóór de biologische zuivering. Bayer onderzoekt of die pH-correctie wel noodzakelijk was, aangezien het biologische zuiveringsproces de neutralisatie mogelijk zelf kon opnemen. Zoals vergelijking 1 laat zien, produceert het biologische stikstofverwijderingsproces inherent hydroxide (OH⁻), waardoor de pH automatisch stijgt.



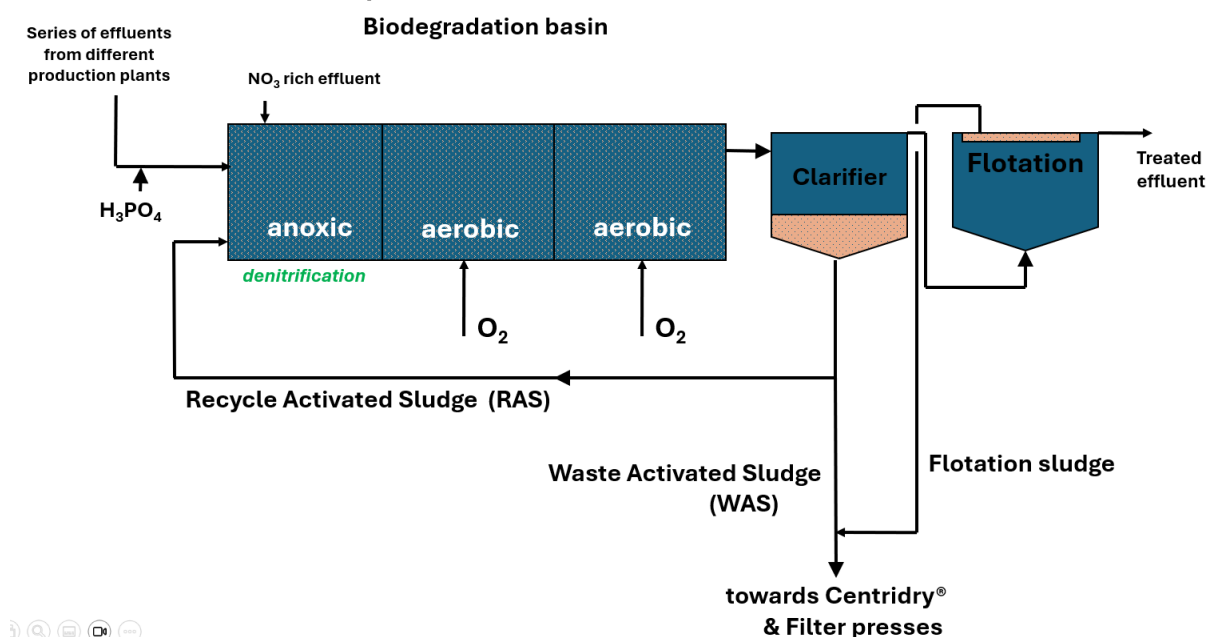
Vergelijking 1: Biologische stikstofverwijdering steunt op denitrificatie, waarbij bacteriën nitraat in het afvalwater (NO₃⁻) omzetten in onschadelijk stikstofgas (N₂) dat via de lucht ontsnapt. Het hydroxide dat daarbij ontstaat, doet de pH automatisch stijgen.

Bovendien zou zelfneutralisatie de globale pH van de hele biologische zuivering verlagen, waardoor aanzienlijke slibvorming en de bijbehorende afvoerkosten door neerslag van calciumcarbonaat (CaCO_3) mogelijk vermeden worden. Bij een lagere pH ($<7,4$) verschuift het evenwicht tussen $\text{CO}_2 \leftrightarrow \text{HCO}_3^- \leftrightarrow \text{CO}_3^{2-}$ namelijk naar HCO_3^- , waardoor de neerslag van Ca^{2+} met CO_3^{2-} uitblijft.

Testen op labschaal in het laboratorium van Bayer bewees die zelfneutralisatiecapaciteit al in 2022, maar de vertaalslag naar dynamische omstandigheden op volle schaal (d.w.z. van batch naar continue afvalwaterzuivering) moest nog gemaakt worden. AM-Team hielp Bayer om de inzichten van labschaal naar de werking op volle schaal te vertalen door virtuele haalbaarheidstesten op volle schaal uit te voeren en de eigenlijke procesaanpassing modelmatig te ontwerpen.

Belangrijkste systeemkenmerken

- Industriële afvalwaterzuiveringsinstallatie (klassiek actiefslibstelsysteem)
- Zuiveringsstraten met anoxische en aerobe compartimenten, gevolgd door nabezinktanks
- Beluchting met zuivere zuurstof
- Zuivering van een nitraatrijke zure stroom (pH 2,0) en 7 andere industriële afvalwaterstromen



Figuur 1: De afvalwaterzuiveringsinstallatie van Bayer in Antwerpen (België)

Oplossing en doelstellingen

Bayer maakte gebruik van het specifieke modellenportfolio van AM-Team voor zuiveringsinstallaties om de plannings- en de ontwerpfase te ondersteunen:

- In de planningsfase, waar de focus ligt op de evaluatie en de selectie van procesconcepten, biedt virtual piloting een vrijwel ongeziene testvrijheid en een aanzienlijke besparing in kosten en tijd in vergelijking met conventioneel piloteren op locatie.
- In de ontwerpfase, waar de focus ligt op de implementatie van het procesconcept, verzekert modelmatig ontwerp maximale procesprestaties en efficiëntie nog vóór de bouw.

De doelstellingen van dit project waren:

1. de haalbaarheid van de procesaanpassing op volle schaal beoordelen: de testen op labschaal van Bayer vertalen naar omstandigheden op volle schaal met behulp van een dynamisch model van de installatie op volle schaal. Belangrijke vragen daarbij waren:
 1. Kan de neutralisatie van de zure stroom vermeden of geminimaliseerd worden, en zouden de resulterende evenwichts-pH en alkaliniteit nog steeds leefbare omstandigheden voor het biologische zuiveringsproces opleveren?
 2. Kan de neerslag van CaCO_3 vermeden worden, waardoor de kosten voor slibafvoer dalen?
2. het optimale procesontwerp bepalen: ervoor zorgen dat de upgrade succesvol geïmplementeerd kan worden met behulp van een gedetailleerd 3D-simulatiemodel dat rekening houdt met de kritieke procesfactoren. Belangrijke vragen daarbij waren:

Hoe moet het mengsysteem ontworpen worden om lokale toxiciteit in het biologische proces door de lage pH van de niet-geneutraliseerde stroom te minimaliseren? (het intensieve testwerk op labschaal van Bayer bracht immers aan het licht dat suboptimale menging van de zure stroom in het biodegradatiebekken een negatieve invloed heeft op de levend/dood-fracties van de micro-organismen)

“Knowing which model to apply when is what we like to call a ‘model-fit-for-purpose’ approach. A smart combination of models can dramatically increase the impact and business case of modelling. In this case, a combination of dynamic modelling with CFD proved to be highly effective.”

“Weten welk model je wanneer moet inzetten, is wat wij een ‘model-fit-for-purpose’-aanpak noemen. Een slimme combinatie van modellen kan de impact en de business case van modellering sterk vergroten. In dit geval bleek een combinatie van dynamische modellering met CFD zeer effectief.”

- Roberta Muoio, ir., Senior Simulation Engineer,
AM-Team



Aanpak

AM-Team maakte gebruik van zijn gereedschapskist met verschillende modellen op maat van zuiveringsprocessen. In dit geval werden een dynamisch installatiemodel en een 3D-CFD-model van het zuiveringsproces gebruikt:

- Het dynamische installatiemodel bevatte chemische en biologische kinetiek en kon daardoor de biologische omzetting, het pH-evenwicht en de neerslag van CaCO_3 voorspellen onder de dynamische omstandigheden van de installatie op volle schaal. Dit model werd gebruikt voor de virtual piloting en de haalbaarheidstesten.
- Het CFD-model van de bioreactor simuleerde het systeem volledig in 3D en hield rekening met de kritieke ontwerpelementen en de menging van de verschillende stromen. De werkelijke geometrie van het systeem en zelfs de rotatie van de roerwerken konden eenvoudig meegenomen worden. Dit model werd gebruikt voor het detailontwerp.

Beide modellen werden dus gebruikt om verschillende vragen over planning en ontwerp te beantwoorden. Met beide modellen werd een veelheid aan 'what-if'-scenario's getest en vergeleken.

“The virtual scale-up of our batch results from the lab to our continuously-operated wastewater treatment plant was extremely important for our project. Once the models exist you have all flexibility to gain new insights. It is fascinating to see how your plant will operate at new conditions before these new conditions

are actually in place! Compared to old-school 'real-live piloting' you can test much more with the 'virtual piloting' - and in a much more convenient way - which makes it an amazing optimization tool!"

"De virtuele opschaling van onze batchresultaten uit het labo naar onze continu werkende afvalwaterzuiveringsinstallatie was uiterst belangrijk voor ons project. Zodra de modellen bestaan, heb je alle vrijheid om nieuwe inzichten te verwerven. Het is fascinerend om te zien hoe je installatie onder nieuwe omstandigheden zal werken nog voordat die omstandigheden er echt zijn! Vergeleken met het klassieke 'real-live piloting' kun je met 'virtual piloting' veel meer testen – en op een veel comfortabelere manier – waardoor het een fantastische optimalisatietool wordt!"

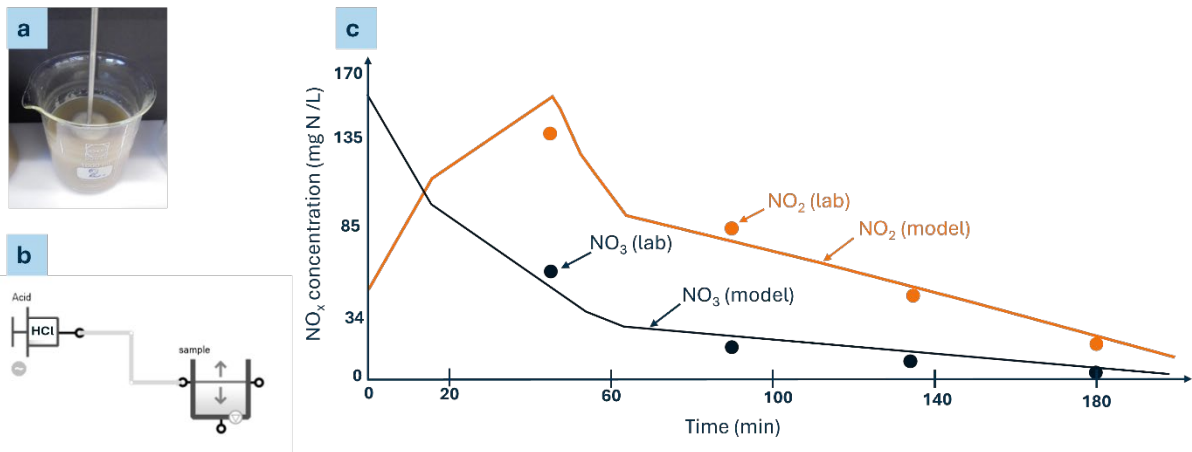
- Bart Peeters, Dr. ir., Senior Expert Wastewater Treatment, Bayer



Resultaten en bevindingen

Model op labschaal: kalibratie op basis van beschikbare testdata

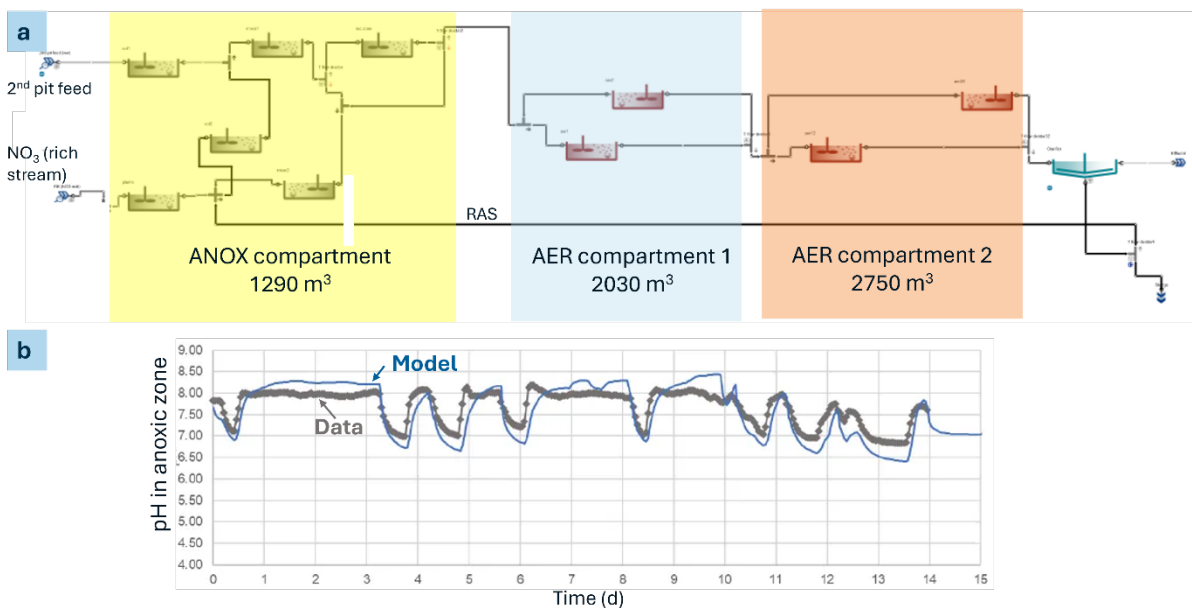
Bayer voerde al denitrificatietesten op labschaal uit voor de procesaanpassing (figuur 2a) en doseerde daarbij zoutzuur om de pH-stijging tijdens de denitrificatie te compenseren, zodat de pH in de bioreactor neutraal bleef. De biologische denitrificatieprestaties, de pH en de neerslag van CaCO_3 werden over de verschillende runs opgevolgd. Om het dynamische model te kalibreren, werden de testen op labschaal met het model gerepliceerd (figuur 2b). Zo kon het model gekalibreerd worden voor het specifieke biologische slib van de afvalwaterzuiveringsinstallatie van Bayer, op basis van de al beschikbare data (figuur 2c). Biologische kinetiek, beluchting, verschillende koolstoffracties, bufferend vermogen en neerslagreacties werden allemaal in het model opgenomen.



Figuur 2: De echte denitrificatietesten op labschaal van Bayer (a) werden gerepliceerd met een virtueel model op labschaal (b) om het model voor te bereiden op de virtuele beoordeling op volle schaal – de dynamische profielen van de stikstofcomponenten (c) en de pH werden vergeleken

Opbouw en validatie van het model op volle schaal

Na de succesvolle kalibratie op labschaal werd het model van de afvalwaterzuiveringsinstallatie op volle schaal geconfigureerd (figuur 3a). Daarbij werden de gekalibreerde biologische parameters uit de modellering op labschaal gebruikt, terwijl de lay-out, de volumes, de debieten en de influentdynamiek van de werkelijke installatie werden toegepast. Zo werd op basis van de data op labschaal een gekalibreerd model van de installatie op volle schaal bekomen. Zoals figuur 3a (rechts) laat zien, werd ook de nabezinktank meegenomen, waardoor de dynamiek van het actief slib in de installatie realistisch voorspeld kon worden.



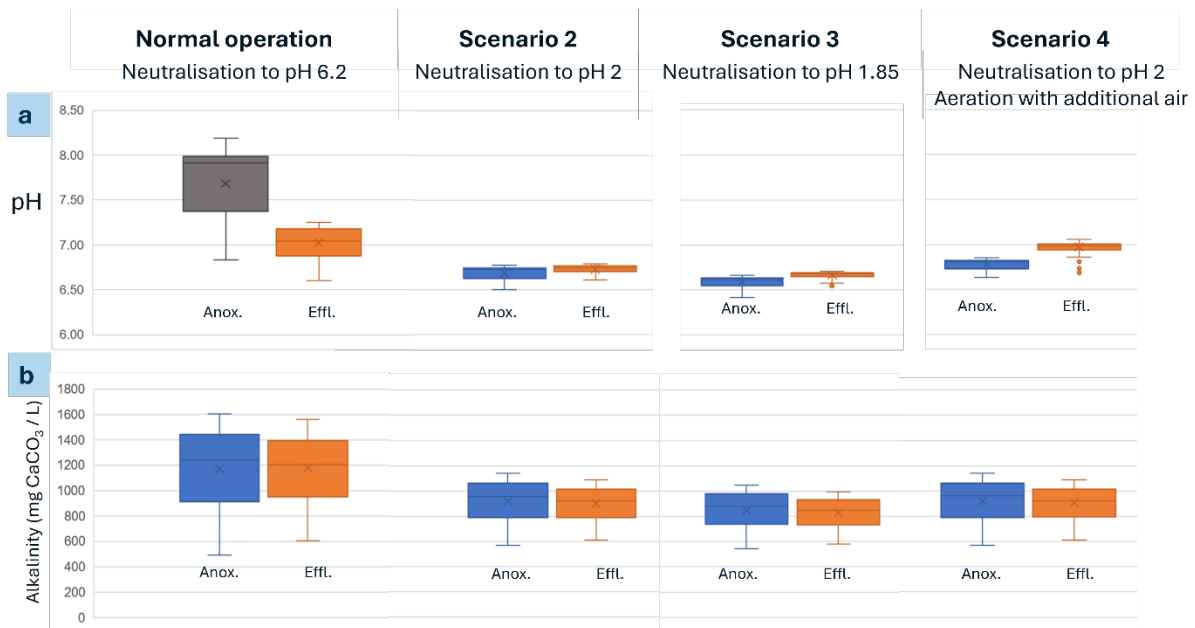
Figuur 3: Het model van de installatie van Bayer op volle schaal (a) omvatte de werkelijke influentstromen, bedrijfsinstellingen, reactorvolumes en de nabezinktank. De validatie van het model op basis van data op volle schaal toonde een bevredigende voorspelling van de pH-dynamiek.

Om het model op volle schaal te valideren, werd eerst de normale bedrijfsvoering (met de gebruikelijke voorneutralisatie van de zure stroom van pH 1,6 naar 6,2) met het model gerepliceerd. Figuur 3b toont de pH-dynamiek in het anoxische compartiment over een periode van 15 dagen. Tijdens de normale bedrijfsvoering schommelde de pH doorgaans rond 7,5. Het model voorspelde de pH-dynamiek adequaat, zowel in de anoxische zone als in het finale effluent (de resultaten daarvan worden hier niet weergegeven).

Virtueel 'what-if'-testen op volle schaal

Het model kon nu gebruikt worden voor 'what-if'-scenariotesten die met de echte installatie op volle schaal onmogelijk uit te voeren waren. Die scenario's zouden de haalbaarheid van de proceswijziging op volle schaal aantonen. Er werden drie verschillende scenario's doorgerekend waarin de zure stroom rechtstreeks in de anoxische zone werd ingebracht, gedeeltelijk geneutraliseerd tot pH 2 en pH 1,85, in vergelijking met de normale bedrijfsvoering (d.w.z. volledige neutralisatie tot pH 6,2). Eén van de scenario's omvatte ook een alternatief beluchtingssysteem, met gewone beluchting naast de bestaande injectie van zuivere zuurstof, en de resulterende invloed op de bedrijfs-pH.

Figuur 4 vat alle scenario's samen en vergelijkt ze op het vlak van de resulterende pH en alkaliniteit in de bioreactor. Zelfs met gedeeltelijk geneutraliseerd afvalwater bij pH 1,85 (scenario 3) bleef de resulterende pH van zowel de anoxische zone als het effluent naar verwachting ruim boven 6,5, wat aanvaardbaar werd geacht voor de biologie. Daarnaast bleef de alkaliniteit boven redelijke niveaus, zodat er nog steeds gunstige omstandigheden waren.



Figuur 4: In vergelijking met de normale bedrijfsvoering doet het rechtstreeks inbrengen van de zure stroom met een aanzienlijk lagere neutralisatiegraad de pH in de bioreactor dalen, in het bijzonder in de anoxische zone (a). Toch stabiliseert de pH in alle scenario's op aanvaardbare niveaus (>6,5), dankzij de zelfneutralisatiecapaciteit van de anoxische zone. Ook de alkaliniteit daalt, maar blijft op aanvaardbare niveaus.

De modelsimulaties toonden een aanzienlijke invloed op de kosten voor slibafvoer: door de werking bij lagere pH en de daaruit volgende hogere oplosbaarheid van CaCO₃ zou de CaCO₃-massa in het spuislib naar verwachting dalen van 3 kg/m³ slib tot verwaarloosbare niveaus.

Op basis van de haalbaarheidstesten op volle schaal besliste Bayer om onmiddellijk over te gaan tot implementatie op volle schaal.

“The use of models to reduce or replace onsite piloting is what we refer to as ‘virtual piloting’. It leads to significant cost and time savings, while virtual testing freedom is nearly unlimited. Virtual piloting is possible as we combine years of modelling experience with high-quality models.”

“Het gebruik van modellen om piloteren op locatie te beperken of te vervangen, is wat wij ‘virtual piloting’ noemen. Het leidt tot aanzienlijke kosten- en tijdsbesparingen, terwijl de virtuele testvrijheid vrijwel onbeperkt is. Virtual piloting is mogelijk doordat we jarenlange modelleringservaring combineren met modellen van hoge kwaliteit.”

- Roberta Muoio, ir., Senior Simulation Engineer, AM-Team



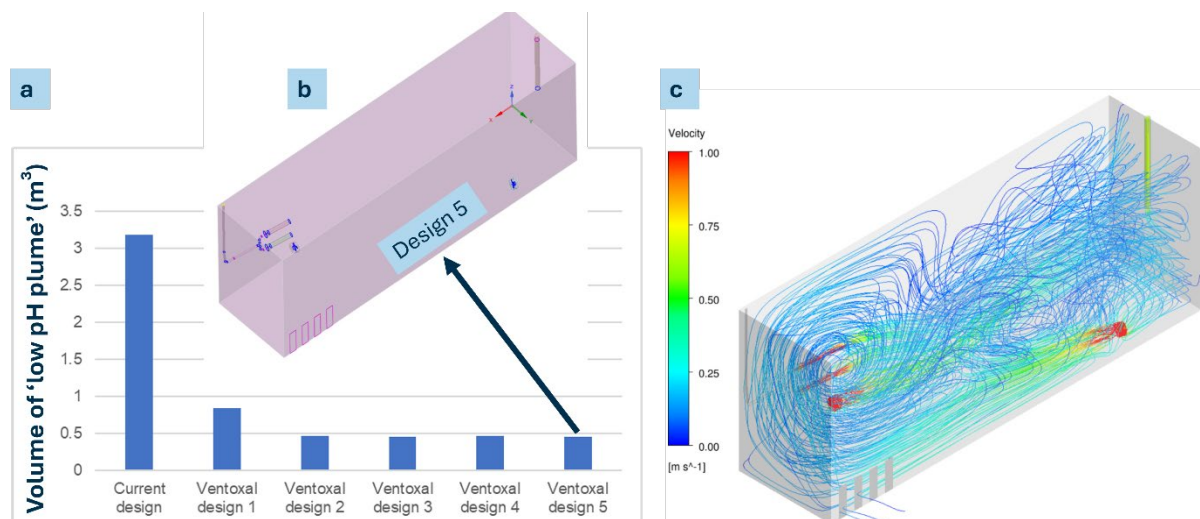
Implementatie en bedrijfsvoering op volle schaal

Ook al was de virtuele haalbaarheidstest procesmatig positief, het eigenlijke mengsysteem op volle schaal moest nog ontworpen worden. In die ontwerpfase paste AM-Team een 3D-CFD-model toe dat een gedetailleerde beoordeling van de plaatsing van de mengtoestellen mogelijk maakte.

De sleutel tot een succesvolle implementatie lag in het snel mengen van de zure stroom (voorgemengd met een ander neutraal afvalwater tot een pH van ongeveer 4,5) met het bulkvolume van de anoxische tank, om zo lokale 'lage-pH-toxiciteit' te minimaliseren (de contacttijd van de micro-organismen met een toxische pH beperken). Het batchtestwerk van Bayer had al potentiële toxiciteit bij suboptimale mengomstandigheden aangetoond. Gezien hun ervaring met Ventoxal-units (Air Liquide) beschouwde Bayer die toestellen als een innovatieve manier om het zure afvalwater in het biologische compartiment te brengen. De Ventoxal-units werden daarom in de CFD-berekeningen opgenomen.

Er werden 5 scenario's met verschillende plaatsingen van de Ventoxal-units gesimuleerd en vergeleken op basis van het voorspelde volume van de 'lage-pH-pluim' die door het inbrengen van de zure stroom ontstaat (figuur 5a). De doelstelling was dat volume te minimaliseren.

Het werd duidelijk dat het Ventoxal-mengtoestel de menging aanzienlijk kon versnellen in vergelijking met het initiële ontwerp met een buisinlaat ('current design'), maar verdere optimalisatie was mogelijk door de unit verticaal aan een van de reactorwanden te monteren en zo onder een hoek in de tegenovergestelde richting van de uitlaat te injecteren (figuur 5b). Dit ontwerp, hierna 'design 5' genoemd, leidde tot een minimaal toxiciteitsrisico en superieure menging (figuur 5c).



Figuur 5: Het inbrengen van de zure stroom in de anoxische tank met een snelmengunit (Ventoxal) bleek cruciaal (a). In vergelijking met een gewone inbreng via een buis ('current design') verkleinde snelle menging het volume van de 'lage-pH-pluim' drastisch. Door de mengunit verticaal aan de zijwand te monteren, onder een lichte hoek (design 5; b), werd de snelste menging bekomen (c).

Bayer ging daarom over tot de implementatie van 'design 5' op locatie (figuur 6) in het anoxische compartiment van zijn biodegradatiebekken.



Figuur 6: De Ventoxal-mengunits werden geplaatst volgens het meest optimale CFD-scenario. Van dit ontwerp, met een specifieke verticale plaatsing van de mengunits, werd verwacht dat het minimale lage-pH-toxiciteit zou veroorzaken.

“Let’s be honest, to finally take the plunge to implement the idea of self-neutralizing nitric acid wastewater was not straightforward at all. It was a bit ‘tricky’ as we say, since dealing with living organisms at risk for the lower pH conditions. Partly thanks to the low-pH plume modelling of AM-Team we were confident that the real-live implementation would be a success”

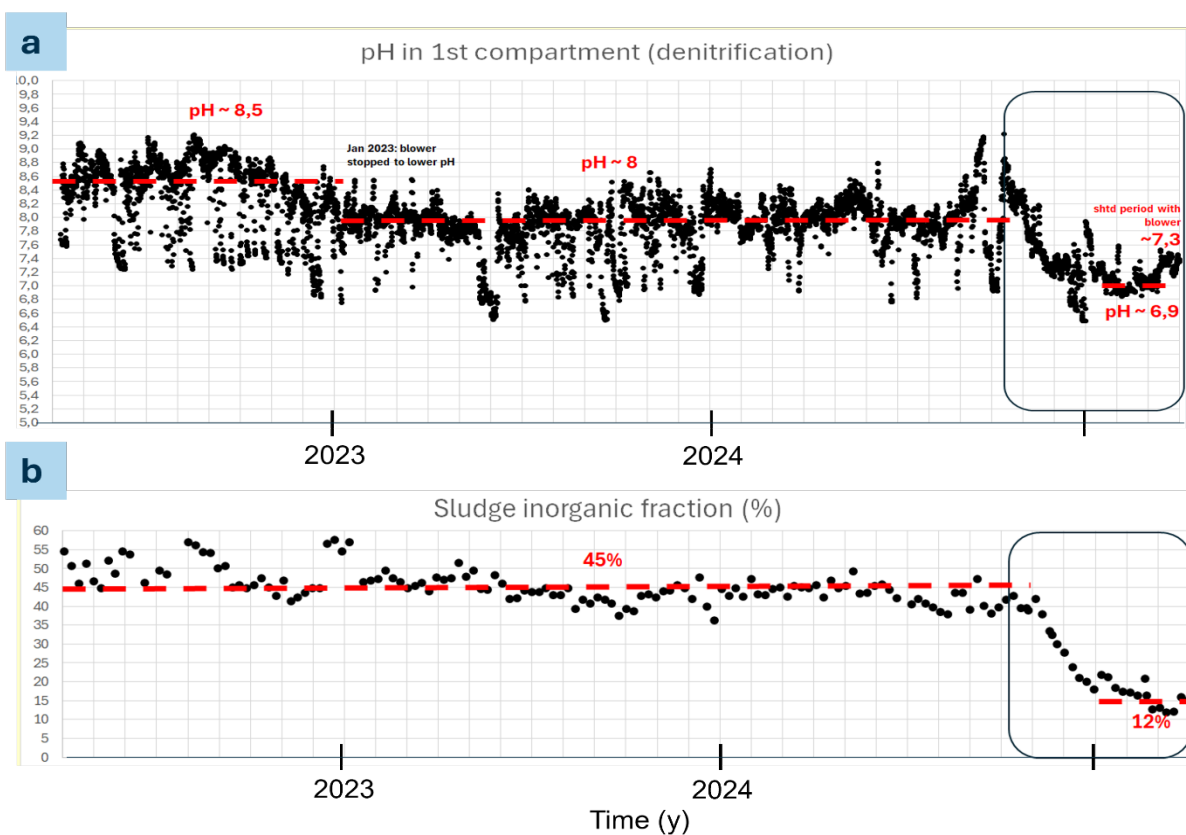
“Laten we eerlijk zijn: de stap zetten om het idee van zelfneutraliserend salpeterzuurhoudend afvalwater ook echt te implementeren, was allesbehalve evident. Het was, zoals wij zeggen, wat ‘tricky’, omdat je werkt met levende organismen die risico lopen bij lagere pH. Mede dankzij de modellering van de lage-pH-pluim door AM-Team waren we ervan overtuigd dat de implementatie in de praktijk een succes zou worden.”

- Bart Peeters, Dr. ir., Senior Expert Wastewater Treatment, Bayer



Bayer nam het nieuw geconfigureerde systeem in oktober 2024 in bedrijf en verlaagde daarbij geleidelijk de neutralisatie van de zure stroom. In april 2025 was de inkomende pH al gedaald tot 2,2, wat resulteerde in een pH in de anoxische zone (figuur 7a) van ongeveer 6,9. Dat lag perfect in lijn met de voorspellingen uit de virtuele haalbaarheidsbeoordeling (zie eerder).

De aanzienlijke daling van de anorganische slibfractie (veroorzaakt door de neerslag van CaCO_3) werd ook zichtbaar (figuur 7b), met een daling van 45% naar 12%. Doordat de neerslag van CaCO_3 met zijn hogere densiteit uitbleef, verslechterde de bezinkbaarheid van het slib, maar die bleef nog steeds binnen aanvaardbare grenzen.



Figuur 7: Het aangepaste proces is sinds oktober 2024 in bedrijf, met een geleidelijke verlaging van de neutralisatie van de zure toevoerstroom. De wijziging is zeer succesvol: de bedrijfs-pH ligt op de niveaus die het model voorspelde, de kosten voor slibafvoer dalen aanzienlijk en er wordt significant bespaard op externe natronlut.

Conclusie en impact

Bayer kon in Antwerpen een procesbeoordeling en -implementatie op volle schaal drastisch versnellen met een slimme combinatie van modellen:

- Virtual piloting in plaats van fysiek piloteren op locatie

- Gekalibreerd op echte data van labschaal kon een dynamisch model van de installatie op volle schaal duur en uitgebreid piloteren op locatie volledig vervangen. Naast de bijbehorende kosten- en tijdsbesparing konden ook een veelheid aan scenario's beoordeeld worden, wat een vrijwel onbeperkte testvrijheid oplevert in vergelijking met fysiek piloteren. Dat laatste zorgde voor aanzienlijk extra vertrouwen.
- Modelmatig procesontwerp
 - Er werd een gedetailleerd CFD-model gebruikt om het mengsysteem dat essentieel is voor de procesaanpassing optimaal te ontwerpen. De mogelijke negatieve invloed van lokale lage-pH-toxiciteit op de biologische zuivering kon tot een absoluut minimum beperkt worden. Het beste ontwerpscenario werd nauwgezet in de praktijk gebracht.

De proceservaring en expertkennis van Bayer, gecombineerd met de modelleringscapaciteiten van AM-Team, leidden tot een innovatieve, succesvolle procesupdate met aanzienlijke kosten- en duurzaamheidsvoordelen op het vlak van slibafvoer en chemicaliëngebruik: (i) de zure afvalwaterstroom wordt nu slechts gedeeltelijk geneutraliseerd, waardoor de NaOH-behoefte voor neutralisatie met 40% daalt, en (ii) de slibproductie bij de afvalwaterzuivering is met 35% verminderd, wat een enorm effect heeft op de kosten voor slibverwerking (inclusief een vermindering van de ontwateringshulpstoffen met enkele honderden tonnen chemicaliën per jaar).

Dankwoord

Waterleau droeg bij aan het onderzoek op labschaal van Bayer en Air Liquide leverde expertadvies over de Ventoxal-technologie. Bayer en AM-Team willen beide partijen bedanken voor hun bijdrage aan het project als geheel.

Uitgegeven door:

AM-Team BV

Sint-Pietersnieuwstraat 11

9000 Gent (BE)

+32 480 64 70 76

info@am-team.com

www.am-team.com

Documentnummer: 2025CC003

Versie: 1

Over AM-Team:

AM-Team levert wereldwijd unieke modellerings- en datadiensten en digital-twinoplossingen om communale en industriële water- en afvalwaterzuiveringsinstallaties slim te ontwerpen, te optimaliseren en te digitaliseren. Het bedrijf heeft gewerkt aan meer dan 150 locaties op 4 continenten. AM-Team werkt direct samen met waterbedrijven en daarnaast met ingenieursbureaus, softwarebedrijven en technologieleveranciers.

Support: Vragen over dit document kunt u richten aan info@am-team.com of aan uw contactpersoon bij AM-Team.

Wijzigingen en fouten voorbehouden. De informatie in dit document kan wijzigen in de loop van de verdere ontwikkeling van de producten/diensten.

© AM-Team 2025 Alle rechten voorbehouden