

NUMERIČKI MODEL PROCESA ELEKTRODEPOZICIJE STRONCIJA IZ VODE

Katarina Licht, mag. ing. oeoing.

Sveučilište u Zagrebu,
Građevinski fakultet
Kačićeva 26, Zagreb, Hrvatska
klicht@grad.hr

**prof. dr. sc. Goran Lončar,
dipl. ing. građ.**

Sveučilište u Zagrebu,
Građevinski fakultet,
Kačićeva 26, Zagreb, Hrvatska

izv. prof. dr. sc. Ivan Halkijević

Sveučilište u Zagrebu,
Građevinski fakultet,
Kačićeva 26, Zagreb, Hrvatska

Hana Posavčić, mag. ing. aedif.

Sveučilište u Zagrebu,
Građevinski fakultet,
Kačićeva 26, Zagreb, Hrvatska

Analiziran je utjecaj prostornog rasporeda elektroda i električnog potencijala na njima te pozicija i intenziteta ponora/izvora u recirkulirajućem elektrokemijskom (EK) uređaju (reaktoru) za pročišćavanje vode opterećene povišenom koncentracijom stroncija. Korištena je metoda numeričkog modeliranja, uz kalibraciju parametara numeričkog modela temeljem mjerjenja na laboratorijskom uređaju istih geometrijskih karakteristika i rubnih uvjeta. U provedbi numeričkih simulacija analizirana su dva rasporeda ukupno korištenih 8 aluminijskih elektroda, 4 katode (K) i 4 anode (A), s rasporedom u dva bloka K-A-A-K i A-K-K-A, te K-A-K-A i K-A-K-A, dvije pozicije ponora te intenziteti ponora/izvora u rasponu od 0,05 l/s do 0,5 l/s. Prisustvo iona stroncija u vodi (Sr^{2+}) je interpretirano s česticama naboja $3,2 \cdot 10^{-19}$ C i promjera $1,2 \cdot 10^{-8}$ m, koje se spregom hidrodinamičkog i elektrostatickog 3D modela pronose kroz modelsku domenu i/ili zadržavaju na pločama elektroda. Kvantifikacija učinka pojedine ispitivane varijante konfiguracije dana je omjerom broja modelskih čestica stroncija koje su trajno zadržane na elektrodama i koje su sumarno upuštene u uređaj tijekom simulacijskog razdoblja. Rezultati provedenog istraživanja na protočnom EK uređaju pokazali su da je učinkovitost pročišćavanja primarno ovisna o intenzitetu izvora/ponora te sekundarno o rasporedu elektroda i poziciji ponora. Prema rezultatima numeričkog modela konfiguracija elektroda K-A-A-K i A-K-K-A je 7 % učinkovitija od K-A-K-A i K-A-K-A. Pri najmanjem ispitivanom protoku izvora i ponora ($Q = 0,05$ l/s) učinak zadržavanja stroncija na elektrodama je 2,5 puta veći od slučaja s primjenom najvećeg protoka izvora i ponora ($Q = 0,5$ l/s). Pozicija ponora smještenog uz sam rub razdjelnog zida rezultira s 8 % manjom akumulacijom stroncija na elektrodama nego u slučaju smještaja ponora na većoj udaljenosti od razdjelnog zida. Primjenom različitog napona na pojedinim parovima elektroda postiže se manji utrošak električne energije (33 %) i jednolika raspodjela akumulacije stroncija na elektrodama, ali je učinak uklanjanja umanjen za 31 %.

Ključne riječi: numerički hidrodinamički model, elektrokemijski reaktor, stroncij, anoda i katoda

1. UVOD

Stroncij (Sr) je zemnoalkalijski metal, koji se u prirodi pojavljuje u obliku četiri stabilna izotopa ^{84}Sr , ^{86}Sr , ^{87}Sr i ^{88}Sr , od kojih ^{87}Sr čini 82,58 % ukupnog prirodnog Sr u okolišu (Lide 2005; Scott i sur. 2020). Nalazi se u mnogim sedimentnim stijenama i nekim kalcitnim mineralima, dok antropogeni izvori uglavnom uključuju industrijske aktivnosti i upotrebu gnojiva (Scott i sur. 2020). Također postoji i sintetski radioaktivni izotop ^{90}Sr koji u okoliš može dospjeti putem radioaktivnog otpada i nuklearnih nesreća (Kamaraj i Vasudevan 2015). Uobičajne koncentracije Sr u slatkim vodama iznose 0,5 – 1,5 mg/l i općenito se smatraju sigurnima (Scott i sur. 2020). Prema izvješću Američke agencije za zaštitu okoliša (USEPA) iz 2014., koncentracije Sr u vodi veće od 1,5 mg/l mogu se povezati s negativnim učincima na ljudsko zdravlje (O'Donnell i sur. 2016, Peng i sur. 2021). S obzirom da se Sr ponaša slično kao kalcij, ukoliko je prisutan u krvotoku u većim koncentracijama može se ugraditi u kosti, čineći ih lomljivima (Scott i sur. 2020). Prevelik unos stroncija može rezultirati pojavom rahitisa, posebno u dječjoj populaciji (O'Donnell i sur. 2006; Peng i sur. 2011; Scott i sur. 2020). Budući da je pitka voda, uz hranu, jedan od glavnih putova unosa stroncija, neophodno je osigurati sigurne razine Sr u vodi za javnu potrošnju.

Metode za uklanjanje sintetskog radioaktivnog izotopa stroncija ^{90}Sr , kao što su sorpcija, nanofiltracija i biološka obrada, daleko su više istražene nego za prirodni stroncij, posebice u pitkoj vodi. Prije ispuštanja obrađene otpadne vode u okoliš, poželjno je smanjiti koncentraciju radioaktivnih izotopa Sr na koncentracije niže od 5.67×10^{-11} mg/l, što je u praksi teško postići (Ho i Wang 2002; Murthy i Parmar 2011). U tu su svrhu primjenjene razne metode kao što su sorpcija (Sivaiah i sur. 2005; Gürboga i Tel 2005; Tel i sur. 2010; Li i sur. 2010; Ghaemi i sur. 2011; Cheng i sur. 2012; Merceille i sur. 2012; Nishiyama i sur. 2015; Vipin i sur. 2016), ionska izmjena (Hwang i sur. 2002; Shubair i sur. 2019) i biološka obrada (Paterson-Beedle i sur. 2006; Thorpe i sur. 2012; Achal i sur. 2012). Istraživanja vezana uz uklanjanje prirodnog stroncija su uglavnom rađena za otpadnu vodu. Ispitivanja su uključivala adsorpciju (Chegrouche i sur., 2009.), ionsku izmjenu (Nikolaev i sur., 1992.; Sayed, 1996.; Zhang i sur., 1999.) i biološku obradu (Chen i Wang, 2008.).

S obzirom na brojne uspješne primjene elektrokemijskih metoda za uklanjanje teških metala iz voda (Heidmani i Calmano 2008; Merzouk i sur. 2009; Zongo i sur. 2009, Tran i sur. 2017), može se zaključiti kako bi bilo vrijedno istražiti njihovu primjenu i na uklanjanje stroncija. Elektrokemijski procesi za obradu voda uglavnom podrazumijevaju elektroksidaciju, elektoredukciju, elektrokoagulaciju, elektroflotaciju i elektrodepoziciju (Alkhadra i sur. 2022). Ovi se procesi odvijaju u elektrokemijskom reaktoru primjenom električnog polja na žrtvene anode koje oslobođaju metalne katione (Hakizimana i sur. 2017; Bajpai i sur.

2022). Paralelno se na katodi voda reducira do vodikovih (H^+) i hidroksidnih iona (OH^-), dok se kisik oslobođa na anodi (Sahu i sur. 2014.; Ibrahim i sur. 2020). Reakcijom metalnih kationa i OH^- iona nastaju metalni hidroksidi koji potiču koagulaciju i flokulaciju onečišćujućih tvari u vodi (Barzegar i Ghanbari 2019, Tchamango i sur. 2020). Tako su Mutny i Parmar (2011.) proučavali uklanjanje stroncija iz sintetičke otopine pomoću elektrokoagulacijskog procesa te su postigli učinkovitost od 93 % odnosno 77 % koristeći elektrode od nehrđajućeg čelika i aluminija. Navedene učinkovitosti su postignute tretiranjem 200 ml otopine u šaržnom reaktoru s 2 pločaste elektrode 50 minuta pri 8 mA/cm^2 . Nigri i suradnici (2020.) su razvili simultani elektrokemijski i adsorpcijski proces te su postigli učinkovitost uklanjanja Sr od 72 %. U navedenoj je studiji korišten šaržni reaktor od 1,5 l s aluminijskim elektrodama. Optimalni uvjeti uključivali su 4 elektrode, gustoću struje od $7,5 \text{ mA/cm}^2$ i vrijeme rada od 120 min. Parga i suradnici (2012.) su postigli smanjenje Sr od 99,5 % od početne koncentracije od 1.14 mg/l. Navedeni je rezultat dobiven primjenom struje od 11.5 A na dvije željezne elektrode u šaržnom reaktoru od 400 mL tijekom 30 minuta. Kamaraj i Vasudevan (2015.) su uklonili 97 % radioaktivnog Sr iz vodene otopine pomoću magnezijeve anode pri gustoći struje od $0,08 \text{ A dm}^{-2}$ i pH 7 u šaržnom reaktoru od 1 litre.

Cilj provedbe ovog istraživanja je procjena efikasnosti i optimizacija rada EK reaktora namijenjenog za pročišćavanje vode primarno opterećene povišenom koncentracijom stroncija.

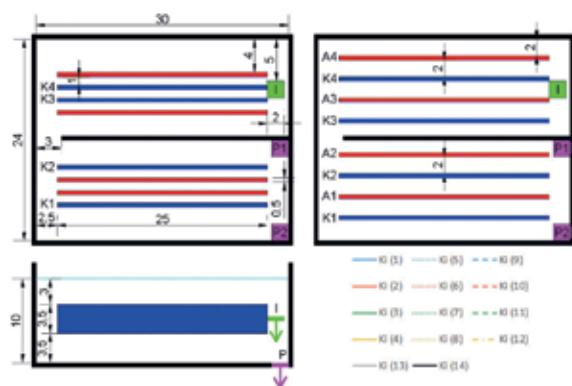
2. MATERIJALI I METODE

2.1. Elektrokemijski reaktor

Metalne elektrode uronjene u vodu stvaraju elektrostatsko polje s intenzitetom primarno ovisnim o razlici potencija na anodi i katodi te međusobnoj udaljenosti anode i katode. U otopini, stroncij se nalazi u ioniziranom obliku (Sr^{2+}), pa pri djelovanju elektrostatskog polja ioni stroncija imaju tendenciju kretanja ka katodi i akumuliranja na njoj. Pri prolasku vode s povećanom koncentracijom stroncija kroz reakcijsku posudu s elektrodama (protočni reaktor) efikasnost uklanjanja stroncija ovisi o konfiguraciji ploča elektroda i pozicijama unašanja (izvora) i iznašanja (ponora) vode iz reaktora (slika 1). Napon između elektroda također ima ulogu, a u provedbi svih analiza korišten je napon od 20 i 60 V. Izbor korištenih vrijednosti za napon nema znanstveno uporište te je samo posljedica mogućnosti korištene opreme (maksimalno mogući izlazni napon laboratorijskog uređaja je 60 V).

Provedeno istraživanje uklanjanja koncentracije stroncija EK procesima je koncentrirano na numeričko modeliranje (simulacije), a mjerjenje na laboratorijskom reaktoru provedeno je s ciljem kalibracije parametara numeričkog modela.

Usvojena prostorna domena reaktora je definirana duljinom 0,3 m i širinom 0,24 m (slika 1). Ploče elektroda



Slika 1: Shematska prikaz EK reaktora s osnovnim dinemzijama (K – katoda, A – anoda, I – Izvor, P–Ponor; dimenzije izražene u cm) s prikazom boja koje se koriste u daljnjoj prezentaciji rezultata (oznaka K1(1) označava katodu 1 u simulaciji 1, oznaka K1(2) označava katodu 1 u simulaciji 2, ..., oznaka K4(13) označava katodu 4 u simulaciji 13)

su od aluminija, imaju duljinu 0,25 m, visinu 0,035 m, i debljinu 0,005 m, a podignute su od dna na visinu 0,035 m (slika 1). Dubina vode je konstantna tokom vremena i iznosi 0,1 m, a što je osigurano jednakim intenzitetom protoka izvora i ponora ($Q_{izvo} = Q_{ponor}$). U okviru provedenog istraživanja analizirana su dva rasporeda elektroda smještenih u dva bloka od po 4 elektrode. U prvoj konfiguraciji korišten je raspored K-A-A-K za doljni blok, te A-K-K-A za gornji blok, dok je u drugoj konfiguraciji korišten raspored K-A-K-A za doljni blok, te K-A-K-A za gornji blok (slika 1). Međusobni razmak elektroda je 0,01 m u prvoj, te 0,02 m u drugoj konfiguraciji. Nadalje, u prvih 8 simulacija na elektrodama je korišten napon od 60 V, a u simulacijama 9-12 napon u gornjem bloku elektroda je smanjen na 20 V. Voda se u protočni reaktor unosi vertikalno prema dolje na 0,05 m od dna s protocima $Q_{izvor} = 0,05 \text{ l/s}, 0,1 \text{ l/s}, 0,2 \text{ l/s i } 0,5 \text{ l/s}$ kroz kvadratni otvor sa stranicama duljine

Tablica 1: Obilježja provedenih simulacija

simulacija	konfiguracija elektroda	Izvor/ Ponor (l/s)	pozicija ponora	napon (V)
1	1	0.2	1	60
2	2	0.2	1	60
3	1	0.1	1	60
4	2	0.1	1	60
5	1	0.2	2	60
6	2	0.2	2	60
7	1	0.1	2	60
8	2	0.1	2	60
9	1	0.2	1	60 i 20
10	2	0.2	1	60 i 20
11	1	0.1	1	60 i 20
12	2	0.1	1	60 i 20
13	1	0.5	1	60
14	1	0.05	1	60

0,02 m (slika 1). Analiziraju se dvije pozicije na kojoj voda izlazi iz reaktora (ponor), a kako je to prikazano na slici 1. Ponor je postavljen horizontalno na samom dnu i ima kvadratni oblik sa stranicama duljine 0,02 m (slika 1). U tablici 1 prikazana je nomenklatura provedenih simulacija s pripadnim obilježjima. Sve numeričke simulacije provedene su za razdoblje od 120 s. Za potrebe kalibracije parametara numeričkog modela provedena su mjerenja na laboratorijskom reaktoru u uvjetima simulacije 1, 13 i 14 (tablica 1).

Simulacije su provedene po organizacijskom planu (tablica 1) sa sljedećim ciljevima:

Usporedba rezultata neparnih (1,3,...,11) i parnih simulacija (2,4,...,12) omogućuje izbor povoljnije konfiguracije elektroda u smislu većeg uklanjanja čestica stroncija;

- Rezultati simulacija 3 (ili 7, ili 11) i 4 (ili 8, ili 12) trebaju dati uvid u promjenu efikasnosti uklanjanja stroncija uslijed promjene intenziteta – protoka na izvoru i ponoru (smanjenje s 0,2 l/s na 0,1 l/s) temeljem usporedbe sa rezultatima simulacija 1 (ili 5 ili 9) i 2 (ili 6 ili 10);

- Rezultati simulacija 5 (ili 7) i 6 (ili 8) trebaju dati uvid u promjenu efikasnosti uklanjanja stroncija uslijed promjene pozicije ponora (s pozicije 1 na poziciju 2) temeljem usporedbe s rezultatima simulacija 1 (ili 3) i 2 (ili 4);

- Rezultati simulacija 9 (ili 11) i 10 (ili 12) trebaju dati uvid u promjenu efikasnosti uklanjanja stroncija uslijed promjene napona na elektrodama (sa 60 V na 20 V s ciljem uštade energije i jednolike raspodjele taloženja stroncija po katodama) temeljem usporedbe s rezultatima simulacija 1 (ili 3) i 2 (ili 4);

- Rezultati simulacija 13 i 14 trebaju dati uvid u promjenu efikasnosti uklanjanja stroncija uslijed daljnje promjene intenziteta – protoka izvora i ponora (smanjenje na 0,05 l/s i povećanje na 0,5 l/s) temeljem usporedbe s rezultatima simulacija 1 i 3.

2.2. Numerički model elektrokemijskog reaktora

Za provedbu numeričkih simulacija korišten je model Flow-3D (www.flow3d.com). Model je razvijen u Los Alamos National Laboratoryju tijekom 70-ih godina te je do današnjih dana kontinuirano razvijan i nadograđivan od strane firme Flow Science, Inc. (Hirt i Nicholas 1998, Prosperetti i Tryggvason 2007; Bombardelli i sur. 2011; Bombardelli 2012). Baziran je na metodi konačnih volumena i Eulerovom pristupu s kojima se rješava sustav jednadžbi očuvanja mase, količine gibanja i energije. Koristi se strukturirana diskretizacijska mreža u Cartesijevom koordinatnom sustavu, a rubni uvjeti definiraju se na 6 oplošnih ploha prostorne domene toka. Proračun slobodne površine se provodi VOF ("Volume of Fluid") tehnikom baziranim na volumnoj frakciji plina i kapljevine u svakoj proračunskoj 3D celiji.

Jednadžba očuvanja mase (jednadžba kontinuiteta,

1) i jednadžba očuvanja količine gibanja (Navier-Stokes jednadžba, 2-4) u Cartesiovom koordinatnom sustavu imaju oblik:

$$V_f \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u A_x) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho v A_z) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho w A_z) = R_{DIF} + R_{SOR}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{V_f} \left(u A_x \frac{\partial u}{\partial x} + v A_z \frac{\partial v}{\partial z} + w A_z \frac{\partial w}{\partial z} \right) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + f_x$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{1}{V_f} \left(u A_x \frac{\partial u}{\partial x} + v A_z \frac{\partial v}{\partial z} + w A_z \frac{\partial w}{\partial z} \right) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + f_z$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{1}{V_f} \left(u A_x \frac{\partial u}{\partial x} + v A_z \frac{\partial v}{\partial z} + w A_z \frac{\partial w}{\partial z} \right) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + G_z + f_z$$

gdje je: u, v, z komponente vektora brzine u smjerovima x, y, z ; R_{DIF} član turbulentne difuzije; p tlak; R_{SOR} član izvora ili ponora; A_x, A_y, A_z proticajni poprečni presjek u proračunskoj ćeliji; ρ gustoća tekućine (usvojeno 1000 kg/m³); G_z gravitacijsko ubrzanje; f_x, f_y, f_z ubrzanje uslijed viskoznog djelovanja u smjerovima x, y, z temeljem divergencije tenzora viskoznog naprezanja $s [(1/\rho)\nabla \cdot \sigma]$; V_f volumna frakcija kapljivine (fluida) u proračunskoj ćeliji proračunata temeljem jednadžbe 5.

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{1}{V_f} \left[\frac{\partial (F A_x u)}{\partial x} + \frac{\partial (F A_z v)}{\partial z} + \frac{\partial (F A_z w)}{\partial z} \right] = 0$$

gdje je: vrijednost volumne frakcije F kojom se prezentira količina kapljivine u svakoj proračunskoj ćeliji (poprima vrijednosti od 0 do 1; 0 – ćelija potpuno ispunjena plinom, 1 – ćelija potpuno ispunjena kapljevinom).

Numeričkim modelom se iznalaze i rješenja Laplaceove jednadžbe za prostornu raspodjelu električnog potencijala (6) i jakosti električnog polja (7), a čime je omogućeno daljnje rješavanje dinamičke jednadžbe (zakona očuvanja količine gibanja) za unesene čestice (8) na poziciji izvora s intenzitetom 100 čestica/s.

$$\nabla \cdot (K \nabla \phi) = 0$$

$$E = -\nabla \phi$$

$$\frac{du_p}{dt} = g - \frac{1}{\rho_p} \nabla p + \alpha(u - u_p) + \beta(u - u_p)|u - u_p| \frac{\rho}{\rho_p} + e_i E$$

gdje je: f je električni potencijal (usvojeno 0 V na katodi i 60 V na anodi); E jakost električnog polja, K

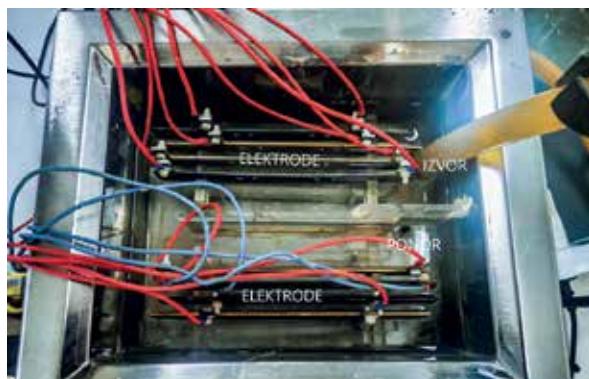
dielektrična konstanta materijala (usvojeno za vodu = 80,5, aluminijeve elektrode = 5, izolacijski polimerski materijal po zidovima reaktora = 5); \mathbf{u} vektor brzine čestice; rP gustoća čestice (usvojeno 1000 kg/m³, prva dva člana s desne strane izraza 8 se poništavaju); \mathbf{u} vektor brzine kapljivine (vode), a i b koeficijenti otpora oblika za čestice promjera dp podijeljeni s masom čestice (kalibrirane vrijednosti $a = 0$ i $b = 0.01$ za čestice promjera $d_p = 1.2 \cdot 10^{-8}$ m; usvojeno kroz usporedbu mjerjenih i modeliranih vrijednosti učinka uklanjanja stroncija u uvjetima simulacije 1); e_i električni naboј čestice (usvojeno $3.6 \cdot 10^{-19}$ C) podijeljen s masom čestice.

Prostorna domena modela diskretizirana je proračunskom mrežom s ćelijama ekvidistantnih duljina u x, y, z i u smjeru $D_x = D_y = D_z = 0,005$ m ($70 \times 48 \times 28 = 94800$ proračunskih ćelija). U provedbi simulacija korišten je RNG $k-\epsilon$ model turbulentacije (Yakhot i Orszag, 1986.; Yakhot i Smith, 1992.). Za razliku od klasičnog $k-e$ modela turbulentacije, RNG $k-e$ model obuhvaća različite prostorne skale gibanja u interpretaciji turbulentne difuzije putem modifikacije člana produkcije turbulentne kinetičke energije u jednadžbi disipacije turbulentne kinetičke energije. Obzirom na relativno složenu geometriju modelske domene, i posljedično različite prostorne skale gibanja, izbor RNG $k-e$ modela (konstante modela $C_m = 0,0845$; $s_k = 0,7194$; $s_e = 0,7194$; $C_{e1} = 1,42$; $C_{e2} = 1,68$; $h_0 = 4,38$; $b = 0,012$) predstavlja pouzdanojiji izbor od klasičnog $k-e$ modela turbulentacije. Utjecaj izmjene topline nije uzet u obzir (prepostavljeni iztermni proces) obzirom na kratko vrijeme analiziranog procesa (120 s). Član tlaka se rješava implicitnom metodom, tzv. GMRES (Improved Generalised Minimal Residual), a viskozna naprezanja eksplicitno.

Rubni uvjeti proračunskog bloka ($X_{min}, X_{maks}, Y_{min}, Y_{maks}, Z_{min}$) definirani su kao "zid", dok je na rubu Z_{maks} zadan atmosferski tlak s isključivo prisutnom samo fazom plina (zraka). Na površinama elektroda zadan je fiksni potencijal, dok se na rubovima (zidovi reaktora) potencijal dinamički proračunava uz uvjet $\tilde{Nf} = 0$. Početni uvjeti su zadani kao stanje mirovanja vode sa slobodnom površinom postavljenom na 0,1 m, te hidrostatskom raspodjelom tlaka. Za osiguravanje konvergencije i stabilnosti proračuna protok na poziciji izvora i ponora linearno je povećavan od početne vrijednosti 0 l/s do konačne vrijednosti (od 0,205 l/s do 0,5 l/s) kroz 5 s.

2.3. Fizikalni model elektrokemijskog reaktora

Fizikalni model EK reaktora napravljen je u hidrotehničkom laboratoriju Građevinskog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu. Fotografija reaktora prikazana je na [slici 2](#). Elektrode su bile spojene na laboratorijsko napajanje snage 3000 W (CSP-3000-120, Mean Well, Taiwan) kontrolirano preko izlaznog napona pomoću generatora funkcija (JT-JDS6600, Joy It, Germany). Recirkulacija vode je ostvarena pomoću centrifugalne pumpa (GC-TP 4622, Einhell, Germany).



Slika 2: Korišteni EK reaktor s naznakom bitnih konfiguracijskih elemenata (elektrode, izvor, poro)

Potrebno je napomenuti kako u numeričkom modelu analiziranog procesa unos stroncija nije jednak unosu u laboratorijskom EK reaktoru. Naime, u laboratorijskom reaktoru je korištena pumpa za cirkulaciju vode, a čime se iznesena koncentracija stroncija na mjestu ponora ponovno vraća na mjesto izvora. Za razliku od toga, u numeričkom modelu koncentracija stroncija na mjestu izvora ima konstantnu vrijednost tijekom simulacijskog razdoblja, neovisno o koncentraciji na mjestu ponora. Obzirom na to da je izmjereno smanjenje koncentracije stroncija kroz trajanje pokusa od 120 s na razini 10 %, ova razlika nije relevantna.

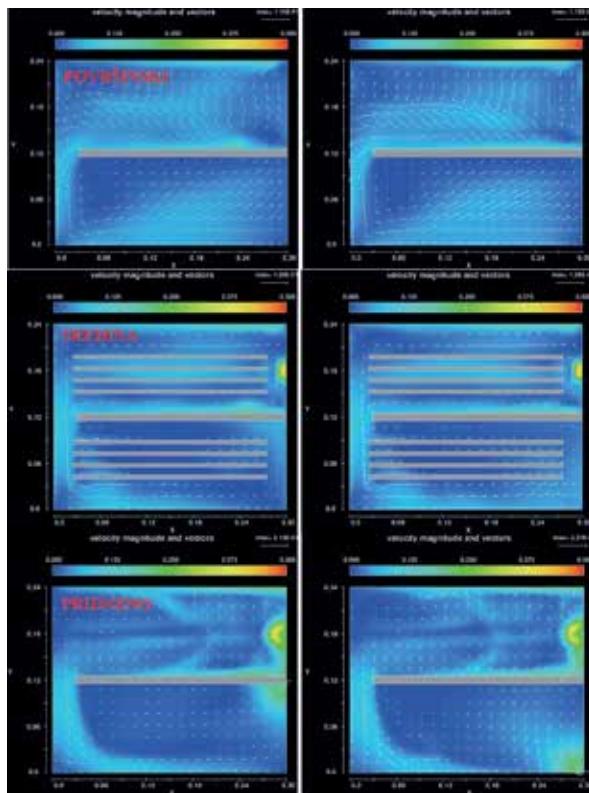
Mjerenje koncentracije stroncija je provedeno na 3 točke jednoliko raspoređeno po horizontalom presjeku, na dubini sredine elektroda (slika 1, 0,0525 m od dna),

prije uključenja pumpe za cirkulaciju i nakon isteka 120 s. Izmjerene inicijalne koncentracije stroncija na 3 mjerne točke iznosile su 2,97 mg/l, 3,04 mg/l i 3,02 mg/l (srednja vrijednost 3,01 mg/l), a što ukazuje na homogeno polje koncentracije u laboratorijskom EK reaktoru.

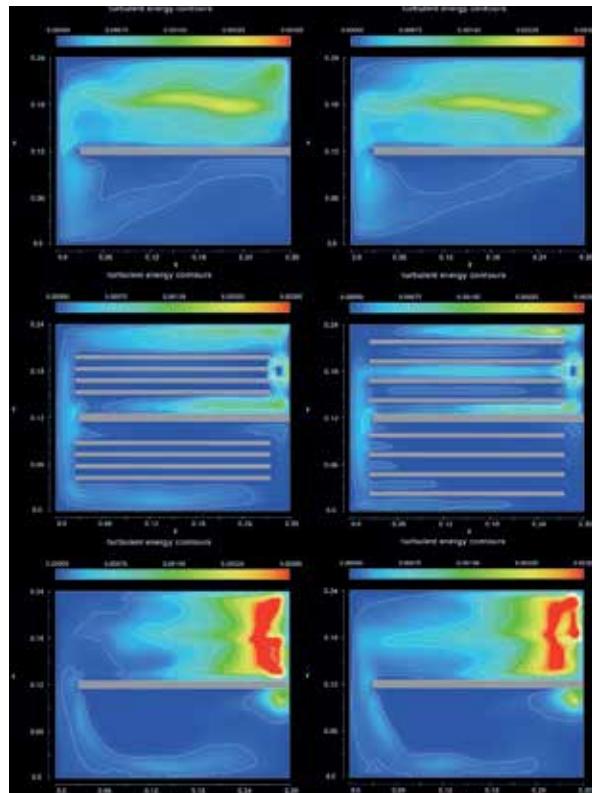
Koncentracije stroncija određene su pomoću optičkog emisijskog spektrometra s induktivno spregnutom plazmom. Mjerenja su provedena na Agilent 5900 SVDV ICP-OES sustavu s instrumentalnim limitom detekcije 0,01 µg/L u radialnom načinu snimanja. Analiza je provedena sukladno EPA 200.7 metodi (Određivanje metala i elemenata u tragovima u vodi i otpadu pomoću atomske emisijske spektrometrije s induktivno spregnutom plazmom). Relativna standardna devijacija (% RSD) za ponovljena mjerenja istih uzoraka iznosila je prosječno 0,4. Standardi za kalibraciju pripremljeni su razrjeđivanjem 10 µg/l standardne elementarne otopine Sr (Inorganic Ventures, SAD). Laboratorijsko posuđe i bočice za uzorke koji su korišteni za potrebe ovih eksperimenata prethodno su očišćeni potapanjem 48 sati u 10 % otopini HNO₃, isprani ultra čistom vodom te osušeni prije upotrebe. Sva korištena otapala i reagensi su analitičke čistoće i proizvedeni su od strane VWR Chemicals BDH (SAD).

3. REZULTATI MJERENJA I MODELIRANJA

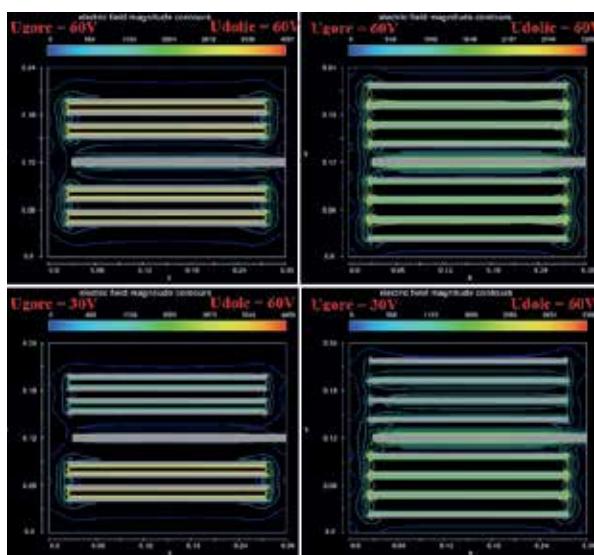
Modelska horizontalna polja brzina strujanja u površinskom, srednjem i pridnenom sloju, u uvjetima



Slika 3: Modelska horizontalna polja brzina strujanja u površinskom (dubina 0,01 m, gore), srednjem (dubina 0,0475 m, sredina) i pridnenom (dubina 0,09 m, dolje) sloju u uvjetima simulacije 1 (lijevo) i 5 (desno)



Slika 4: Modelska horizontalna polja turbulentne kinetičke energije u površinskom (dubina 0,01 m, gore), srednjem (dubina 0,0475 m, sredina) i pridnenom (dubina 0,09 m, dolje) sloju u uvjetima simulacije 1 (lijevo) i 2 (desno)



Slika 5: Modelska polja jakosti električnog polja u horizontalnom presjeku na sredini elektroda (dubina 0,0475 m) za simulacije 1 (gore lijevo), 2 (gore desno), 9 (dolje lijevo) i 10 (dolje desno)

simulacija 1 i 5, prikazana su na [slici 3](#). S prikazanih polja strujanja ([slika 3](#)) može se uočiti da u površinskom sloju praktički nema razlike u polju strujanja. U horizontalnim prsjecima u visine elektroda polja strujanja između elektroda su slična, s blagim povećanjem brzina na mjestima ponora. U pridnenom dijelu razlike u polju strujanja su najizraženije, no samo u "dolnjem" dijelu reaktora na kojem se pojavljuju ponori. Sa [slike 3](#) je razvidno da je strujanje između elektroda istovjetno, bez obzira na poziciju ponora.

Modelska horizontalna polja turbulentne kinetičke energije u površinskom, srednjem i pridrenom sloju, u uvjetima simulacija 1 i 5, prikazana su na [slici 4](#). Modelska polja jakosti električnog polja u horizontalnom presjeku na sredini elektroda prikazana su na [slici 5](#) za simulacije 1, 2, 9 i 10. Jakost električnog polja ([slika 5](#)) ovisi o razlici potencijala i međusobnoj udaljenosti ploča elektroda, što u slučaju udaljenosti elektroda od 0,01 m (prva konfiguracija elektroda; simulacije 1, 3, 5, 7, 9, 11, 13, 14) rezultira s dvostruko jačim električnim poljem od slučaja kada su elektrode na udaljenosti 0,02 m (druga konfiguracija elektroda; simulacije 2, 4, 6, 7, 8, 10, 12, 14,

16).

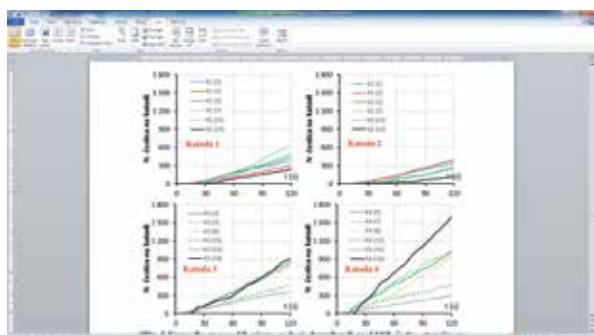
Na [slici 6](#) prikazana je usporedba vremenskih nizova za broj akumuliranih modelskih čestica stroncija na katodama 1-4 u uvjetima simulacija koje upućuju na izraženiju različitost u ostvarenim učincima uklanjanja stroncija. Omjer akumuliranih čestica na katodama 1-4 i ukupno ubačenih čestica nakon 120 s simulacijskog razdoblja (učinak uklanjanja stroncija) prikazan je za sve pokuse na [slici 7](#).

Sa [slike 6](#) se može uočiti da na katodi 1 konfiguracija elektroda 1 daje intenzivnije akumuliranje stroncija od konfiguracije 2 K(1) i K1(2), no izraženje povećanje akumulacije omogućeno je smanjenjem protoka na izvoru i ponoru s $Q = 0,2 \text{ l/s}$ na $Q = 0,1 \text{ l/s}$ (K1(3), K1(7) i K1(11)). Također se može prepoznati da je pri korištenju manjeg napona između elektroda u "gornjem" dijelu reaktora (20 V) ostvareno blago povećanje akumulacije stroncija na prvoj katodi (K1(11)). Najizraženiji efekt povećanja akumulacije stroncija na katodi 1 dobiva se izmještanjem ponora na veću udaljenost od pregradnog zida (K1(7)). Najmanja akumulacija dešava se pri najmanjem ispitivanom protoku kroz izvor/ponor od $0,05 \text{ l/s}$ (K1(14)), a što ukazuje na nedostatak smanjenja protoka izvora/ponora ispod $0,1 \text{ l/s}$ u kontekstu željene jednolike raspodjele akumulirang stroncija po elektrodama.

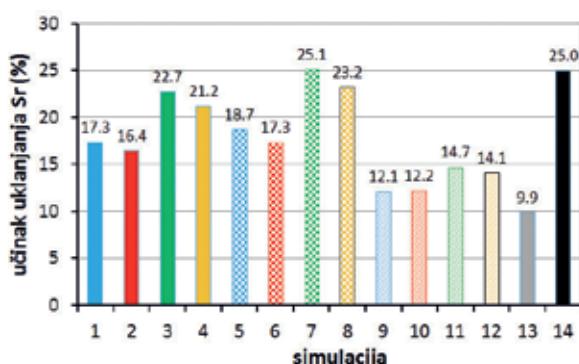
Na katodi 2 smanjenje intenziteta izvora/ponora s $0,2 \text{ l/s}$ na $0,1 \text{ l/s}$ rezultira smanjenjem učinka pročišćavanja (K2(3) i K2(11)), no izmicanje ponora od pregradnog zida (K2(7)) ponovno daje pozitivan učinak povećanja akumulacije na razinu učinka ostvarenog primjenom protoka izvora/ponora od $0,2 \text{ l/s}$ (K2(1) i K2(2)). Kao i na prvoj katodi, najmanja akumulacija registrirana je pri najmanjem ispitivanom protoku kroz izvor/ponor od $0,05 \text{ l/s}$ (K2(14)).

Na katodama 3 i 4 pojavljuju se slični efekti na akumulaciju stroncija pri varijaciji postavki simulacija. Najmanji ispitivani intenzitet izvora/ponora ($Q = 0,05 \text{ l/s}$) daje najveće zadržavanje stroncija na obe katode (K3(14) i K4(14)), a najveći intenzitet izvora/ponora ($Q = 0,5 \text{ l/s}$) daje najmanje zadržavanje stroncija na obe katode (K3(13) i K4(13)). Smanjeni napon na 20 V rezultira očekivanim smanjenjem akumulacije stroncija (K3(11) i K4(11)), no potrebno je skrenuti pažnju da je u ovim uvjetima postignuta željena jednolika raspodjela akumulacije na sve 4 katode (vidi K1(11), K2(11), K3(11) i K4(11)) te manji utrošak električne energije. Izbor konfiguracije elektroda (1 - K3(7) i K4(7) ili 2 - K3(8) i K4(8)), kao i izbor pozicije ponora (uz pregradni zid K3(3) i K4(3) ili uz "donju stijenu reaktora" K3(7) i K4(7)) imaju tek sekundarnu ulogu, uz sličan intenzitet akumuliranja stroncija.

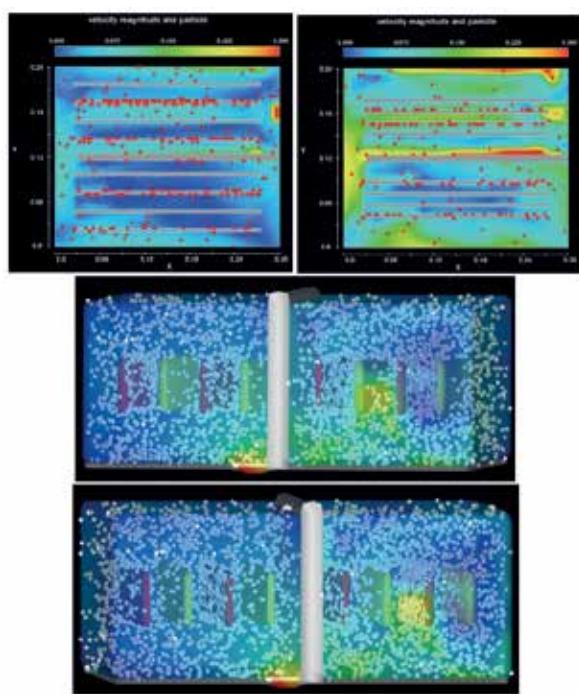
Ukoliko se komentira cjelokupni učinak svih katoda (elektroda), rezultati prikazani na [slici 7](#) pokazuju da je učinkak uklanjanja prve konfiguracije elektroda (K-A-A-K i A-K-K-A) za prosječno 7 % veći od prve konfiguracije (K-A-K-A i K-A-K-A), da ponor smješten uz rub razdjelnog zida daje prosječno 8 % manji učinak uklanjanja te da



Slika 6: Usporedba vremenskih nizova za broj akumuliranih modelskih čestica stroncija na katodama 1-4 u uvjetima pojedinih simulacija (oznaka K1(1) označava katodu 1 u simulaciji 1, oznaka K4(13) označava katodu 4 u simulaciji 13)



Slika 7: Omjer akumuliranih čestica na katodama 1-4 i ukupno ubačenih čestica nakon 120 s simulacijskog razdoblja (učinak uklanjanja za sve provedene simulacije)



Slika 8: 2D prikaz akumuliranih modelskih čestica na dubini 0,0475 m za uvjete simulacija 2 (gore lijevo) i 13 (gore desno), te 3D prikaz akumuliranih modelskih čestica u uvjetima simulacije 2 (sredina i dolje)

je učinak uklanjanja umanjen za prosječno 31 % pri korištenju manjeg napona (20 V) na "gornjem" setu elektroda. Najizraženije promjene učinka uklanjanja dobivaju se kroz varijaciju intenziteta-protoka izvora/ponora, pri čemu su omjeri učinka uklanjanja $Q_{0,1} / Q_{0,5} = 2,29$, $Q_{0,1} / Q_{0,2} = 1,32$, $Q_{0,1} / Q_{0,05} = 0,91$.

Potrebno je napomenuti da je na laboratorijskom reaktoru izmјeren učinak uklanjanja stroncija od 16,7 %, 10,1 % i 25,3 % u uvjetima koji odgovaraju simulacijama 1, 13 i 14 (ista konfiguracija elektroda, isti intenzitet i položaj izvora/ponora, isti primjenjeni napon).

Proračuni za simulacije 1, 5 i 14 provedeni su i s proglašenjem koraka proračunske mreže s 0,005 m na 0,0025 m, a odstupanja rezultata (učinska) bilo je prosječno manje od 2 % (malo veći učinak s primjenom koraka proračunske mreže od 0,0025 m).

Na slici 8 dan je 2D prikaz akumuliranih modelskih

čestica na dubini 0,0475 m za uvjete simulacija 2 i 13, te 3D prikaz akumuliranih modelskih čestica u uvjetima simulacije 2.

4. ZAKLJUČAK

Provđene su numeričke analize uklanjanja stroncija iz vode elektrokemijskim postupkom. U sklopu istraživanja provedeno je i mjerjenje na laboratorijskom reaktoru istih geometrijskih i hidrauličkih obilježja, a rezultati mjerjenja (smanjenja koncentracije stroncija) korišteni su za kalibraciju parametara numeričkog modela.

Temeljem rezultata provedenih numeričkih simulacija dobiveni su sljedeći zaključci:

- elektrode postavljene u konfiguraciju K-A-A-K i A-K-K-A daju 7 % veći učinak od konfiguracije K-A-K-A i K-A-K-A;

- ponor odmaknut od ruba razdjelnog zida (uz "doljnju" stijenkiju reaktora) daje 8 % veći učinak uklanjanja;

- učinak uklanjanja stroncija je primarno ovisan i intenzitetu-protoku izvora/ponora, a maksimalni učinak uklanjanja ostvaren je kroz primjenu $Q = 0,1 \text{ l/s}$;

- primjenom napona od 20 V na elektrodama u "gornjem" dijelu reaktora i 60 V u "dolnjem" dijelu reaktora ostvaruje se prosječno 31 % manji učinak uklanjanja od slučaja u kojem se koristi isti napon ne svim elektrodama od 60 V;

- primjena manjeg napona u dijelu reaktora s izvorom i većeg napona u dijelu reaktora s ponorom postiže se jednolika raspodjela akumulacije stroncija na elektrodama te manji utrošak električne energije.

Zaključno, u uvjetima simulacije 7 ostvaren je najveći učinak uklanjanja (25,1 %), uz jednoliku raspodjelu akumulacije stroncija na elektrodama nego u uvjetima simulacije 14 (učinak uklanjanja 25,0 %).

U planiranom nastavku istraživanjima analizati će se reaktor istih geometrijskih i hidrauličkih karakteristika sa šaržnim načinom rada (punjenje, stagnacija, pražnjenje; uz preljevanje pregradnog zida), te protočni reaktor bez pregradnog zida.

ZAHVALA:

Ovaj rad je sufinancirala Hrvatska zadruga za znanost projektom PRIMEUS (UIP2020-02-1160). ■

LITERATURA:

- Alkhadra, M. A., Su, X., Suss, M. E., Tian, H., Guyes, E. N., Shocron, A. N., Conforti, K. M., De Souza, J. P., Kim, N., Tedesco, M., Khoiruddin, K., Wenten, G., Santiago, J. G., Hatton, T. A., Bazant, M. Z. 2022.: Electrochemical Methods for Water Purification, Ion Separations, and Energy Conversion, *Chem. Rev.*, **122**, str. 13547–13635. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.1c00396>
- Bajpai, M., Katoch, S.S., Kadier, A., Singh, A. 2022.: A Review on Electrocoagulation Process for the Removal of Emerging Contaminants: Theory, Fundamentals, and Applications, *Environ. Sci. Pollut. Res.*, **29**, str. 15252–15281. <https://doi.org/10.1007/S11356-021-18348-8>.
- Barzegar, G., Wu, J., Ghanbari, F. 2019.: Enhanced Treatment of Greywater Using Electrocoagulation/Ozonation: Investigation of Process Parameters, *Process. Saf. Environ. Prot.*, **121**, str. 125–132. <https://doi.org/10.1016/J.PSEP.2018.10.013>
- Bombardelli, F. A., Meireles, I., Matos, J. 2011.: Laboratory measurements and multi-block numerical simulations of the mean flow and turbulence in the non-aerated skimming flow region of steep stepped spillways, *Environ. Fluid Mech.*, **11**, str. 263–288. <https://doi.org/10.1007/s10652-010-9188-6>
- Bombardelli, F. A. 2012.: Computational multi-phase fluid dynamics to address flows past hydraulic structures, *Proceedings of the 4th IAHR International Symposium on Hydraulic Structures*, Porto, Portugal, str. 9–11.
- Chegrouche, S., Mellah, A., Barkat, M. 2009.: Removal of strontium from aqueous solutions by adsorption onto activated carbon: kinetic and thermodynamic studies, *Desalination*, **235**, str. 306–318.
- Chen, C., Wang, J. 2008.: Removal of Pb²⁺, Ag⁺, Cs and Sr²⁺ from aqueous solution by brewery's waste biomass, *J. Hazard. Mater.*, **151** (1), str. 65–70.
- Cheng, Z., Gao, Z., Ma, W., Sun, Q. 2012.: Preparation of magnetic Fe₃O₄ particles modified sawdust as the adsorbent to remove strontium ions, *Chem. Eng. J.*, **209** (0), str. 451–457.
- Ghaemi, A., Torab-Mostaedi, M., Ghannadi-Maragheh, M. 2011.: Characterizations of strontium(II) and barium(II) adsorption from aqueous solutions using dolomite powder, *J. Hazard. Mater.*, **190**, str. 916–921.
- Gürboga, G., Tel, H. 2005.: Preparation of TiO₂-SiO₂ mixed gel spheres for strontium adsorption, *J. Hazard. Mater.*, **120**, str. 135–142.
- Hakizimana, J. N., Gourich, B., Chafi, M., Stiriba, Y., Vial, C., Drogui, P., Naja, J. 2017.: Electrocoagulation Process in Water Treatment: A Review of Electrocoagulation Modeling Approaches, *Desalination*, **404**, str. 1–21. <https://doi.org/10.1016/J.DESAL.2016.10.011>
- Heidmann, I., Calmano, W. 2008.: Removal of Zn(II), Cu(II), Ni(II), Ag(I) and Cr(VI) present in aqueous solutions by aluminium electrocoagulation, *J. Hazard. Mat.*, **152**, str. 934–94.
- Hirt, C.W. and Nicholas, B. 1998: *Flow-3D User's Manual*, Flow Science Inc.
- Ho, W. S. W., Wang, B. 2002.: Strontium removal by new alkyl phenylphosphonic acids in supported liquid membranes with strip dispersion, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **41**, str. 381–388.
- Hwang, E. D., Lee, K. W., Choo, K. H., Choi, S. J., Kim, S. H., Yoon, C. H., Lee, C. H. 2002.: Effect of precipitation and complexation on nanofiltration of strontium-containing nuclear wastewater, *Desalination*, **147**, str. 289–294.
- Ibrahim, M. H., Moussa, D. T., El-Naas, M. H., Nasser, M. S. 2020.: A Perforated Electrode Design for Passivation Reduction during the Electrochemical Treatment of Produced Water, *J. Water. Process. Eng.*, **33**, 101091. <https://doi.org/10.1016/J.JWPE.2019.101091>
- Kamaraj, R., Vasudevan, S. 2015.: Evaluation of Electrocoagulation Process for the Removal of Strontium and Cesium from Aqueous Solution, *Chem. Eng. Res. Design.*, **93**, str. 522–530. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2014.03.021>
- Li, Q., Liu, H., Liu, T., Guo, M., Qing, B., Ye, X., Wu, Z. 2010.: Strontium and calcium ion adsorption by molecularly imprinted hybrid gel, *Chem. Eng. J.*, **157**, str. 401–407.
- Lide, D. R. 2005.: CRC Handbook of Chemistry and Physics, 85 ed. CRC Press, Boca Raton, FL, 2656 str.
- Merceille, A., Weinzaepfel, E., Barre, Y., Grandjean, A. 2012.: The sorption behaviour of synthetic sodium nonatitanate and zeolite A for removing radioactive strontium from aqueous wastes, *Sep. Purif. Technol.*, **96**, str. 81–88.
- Merzouk, B., Gourich, B., Sekki, A., Madani, K., Chibane, M. 2009.: Removal turbidity and separation of heavy metals using electro-coagulation-electroflotation technique A case study, *J. Hazard. Mater.*, **164**, str. 215–222.
- Murthy, Z. V. P., Parmar, S. 2011.: Removal of Strontium by Electrocoagulation Using Stainless Steel and Aluminum Electrodes, *Desalination*, **282**, str. 63–67, <https://doi.org/10.1016/j.desal.2011.08.058>.
- Nigri, E. M., Santos, A. L. A., Rocha, S. D. F. (2020).: Removal of Organic Compounds, Calcium and Strontium from Petroleum Industry Effluent by Simultaneous Electrocoagulation and Adsorption, *J. Water. Process. Eng.*, **37**, 101442. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2020.101442>.
- Nikolaev, N. P., Ivanov, V. A., Gorshkov, V. I., Nikashina, V. A., Ferapontov, N. B., 1992.: Counter-current ion-exchange separation of strontium from brines with acrylic-type cation-exchange resins, *React. Polym.*, **18** (1), str. 25–33.
- Nishiyama, Y., Hanafusa, T., Yamashita, Y., Yamamoto, Y., Ono, T. 2016.: Adsorption and removal of strontium in aqueous solution by synthetic hydroxyapatite, *J. Radioanal. Nucl. Chem.*, **307**, str. 1279–1285.
- O'Donnell, A. J., Lytle, D. A., Harmon, S., Vu, K., Chait, H., Dionysiou, D. D. 2016.: Removal of Strontium from Drinking Water by Conventional Treatment and Lime Softening in Bench-Scale Studies, *Water. Res.*, **103**, str. 319–333. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2016.06.036>
- Parga, J. R., González, G., Moreno, H., Valenzuela, J.L. (2012).: Thermodynamic Studies of the

- Strontium Adsorption on Iron Species Generated by Electrocoagulation, *Desalination. Water. Treat.*, **37**, str. 244–252.
<https://doi.org/10.1080/19443994.2012.661279>
- Paterson-Beedle, M., Macaskie, L.E., Lee, C.H., Kim, W.H. (2006).: Utilisation of a hydrogen uranyl phosphate-based ion exchanger supported on a biofilm for the removal of cobalt, strontium and caesium from aqueous solutions, *Hydrometallurgy*, **83**, str. 141-145.
- Peng, H., Yao, F., Xiong, S., Wu, Z., Niu, G., Lu, T. 2021.: Strontium in Public Drinking Water and Associated Public Health Risks in Chinese Cities, *Environ. Sci. Pollut. Res.*, **28**, str. 23048–23059.
<https://doi.org/10.1007/s11356-021-12378-y>.
- Prosperetti, A., Tryggvason, G. 2007.: Computational Methods for Multiphase Flow, Cambridge University Press, 488 str. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511607486>
- Sahu, O., Mazumdar, B., Chaudhari, P.K. 2014.: Treatment of Wastewater by Electrocoagulation: A Review, *Environ. Sci. Pollut. Res.*, **21**, str. 2397–2413. <https://doi.org/10.1007/S11356-013-2208-6/FIGURES/6>.
- Sayed, S. A. 1996.: Removal of Sr²⁺, Ca²⁺, and Mg²⁺ from aqueous and aqueous-alcoholic saline media, *Zeolites*, **17**, str. 361-364.
- Scott, V., Juran, L., Ling, E.J., Benham, B., Spiller, A. (2020).: Assessing Strontium and Vulnerability to Strontium in Private Drinking Water Systems in Virginia, *Water*, **12**, 1053. <https://doi.org/10.3390/w12041053>.
- Sivaiah, M.V., Venkatesan, K.A., Krishna, R.M., Sasidhar, P., Murthy, G.S. (2005).: Ion exchange properties of strontium on in situ precipitated polyantimonic citrate on amberlite XAD-7, *Sep. Purif. Technol.*, **44** (1), str. 1-9.
- Shubair, T., Eljamal, O., Tahara, A., Sugihara, Y., Matsunaga, N. (2019).: Preparation of new magnetic zeolite nanocomposites for removal of strontium from polluted waters, *J. Mol. Liq.*, **288**, 111026.
<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.111026>
- Tchamango, S. R., Wandji Ngayo, K., Belibi, P. D., Nkouam, F., Ngassoum, M.B. (2020).: Treatment of a Dairy Effluent by Classical Electrocoagulation and Indirect Electrocoagulation with Aluminum Electrodes, *Sep. Sci. Technol.*, **56**, str. 1128–1139, <https://doi.org/10.1080/01496395.2020.1748889>
- Tel, H., Atlas, Y., Eral, M., Sert, S., Cetinkaya, B., Inan, S. 2010.: Preparation of ZrO₂ and ZrO₂eTiO₂ microspheres by the solegel method and an experimental design approach to their strontium adsorption behaviours, *Chem. Eng. J.*, **161**, str. 151-160.
- Thorpe, C. L., Lloyd, J. R., Law, G. T. W., Burke, I.T. 2012.: Strontium sorption and precipitation behaviour during bioreduction in nitrate impacted sediments, *Chem. Geol.*, **306**, str. 114-122.
- Tran, T.-K., Leu, H.-J., Chiu, K.-F., Lin, C.-Y. 2017.: Electrochemical Treatment of Heavy Metal-Containing Wastewater with the Removal of COD and Heavy Metal Ions, *J. Chin. Chem. Soc.*, **64**, str. 493-502.
<https://doi.org/10.1002/jccs.201600266>
- Vipin, A. K., Ling, S., Fugetsu, B. 2016: Removal of Cs⁺ and Sr²⁺ from water using MWCNT reinforced zeolite-A beads, *Microporous. Mesoporous. Mater.*, **224**, str. 84–88. <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2015.11.024>
- Yakhot, V., Orszag, S.A. 1986: Renormalization group analysis of turbulence. I. Basic theory, *J. Sci. Comput.*, **1**, str. 3–51.
<https://doi.org/10.1007/BF01061452>
- Yakhot, V., Smith, L.M. 1992: The renormalization group, the ϵ -expansion and derivation of turbulence models, *J. Sci. Comput.*, **7**, str. 35–61.
<https://doi.org/10.1007/BF01060210>
- Zhang, L., Zhou, J., Zhou, D., Tang, Y. 1999.: Adsorption of cadmium and strontium on cellulose/alginate acid ion-exchange membrane, *J. Membr. Sci.*, **162**, str. 103-109.
- Zongo, I., Leclerc, J.P., Maiga, H. A., Wethe, J., Lapicque, F. 2009.: Removal of hexavalent chromium from industrial wastewater by electrocoagulation: A comprehensive comparison of aluminium and iron electrodes, *Sep. Purif. Technol.*, **66**, str. 159–166.

NUMERICAL MODEL OF THE ELECTRODEPOSITION PROCESS FOR STRONTIUM REMOVAL FROM WATER

Abstract: The impact of the spatial arrangement of electrodes and their electric potential was analysed, as well as the position and intensity of the sink/source in a recirculating electrochemical (EC) device (reactor) for purifying water with increased strontium concentration. The used method was numerical modelling, with a calibration of the parameters of the numerical model based on the measurements on a laboratory device with the same geometric characteristics and boundary conditions. In the implementation of numerical simulations, two layouts using a total of 8 aluminium electrodes were analysed. 4 cathodes (C) and 4 anodes (A) were arranged in two blocks (C-A-A-C and A-C-C-A; C-A-C-A and C-A-C-A), two sink positions, and intensities of sink/source ranging from 0.05 l/s to 0.5 l/s. The presence of strontium ions in water (Sr^{2+}) was interpreted as particles with a charge of $3.2 \cdot 10^{-19}$ C and diameter of $1.2 \cdot 10^{-8}$ m, which, through the coupling of the hydrodynamic and electrostatic 3D model, are transported through the model domain and/or retained on the electrode plates. The quantification of the effect of a particular tested configuration variant is expressed as the ratio of the number of model strontium particles that are permanently retained on the electrodes and that are summarily introduced into the device during the simulation period. The results of the research conducted on the recirculating EC device show that the efficiency of purification primarily depends on the source/sink intensity, and the arrangement of the electrodes and the position of the sink secondarily. According to the results of the numerical model, the electrode configurations C-A-A-C and A-C-C-A are 7% more efficient than C-A-C-A and C-A-C-A. At the lowest measured source and sink flow rate ($Q = 0.05$ l/s), the effect of strontium retention on the electrodes is 2.5 times higher than in the case of the highest source and sink flow rate ($Q = 0.5$ l/s). The position of the sink located right next to the edge of the dividing wall results in 8% less accumulation of strontium on the electrodes than in the case when the sink is placed at a greater distance from the dividing wall. Applying a different voltage to individual pairs of electrodes results in a lower consumption of electricity (33%) and a more uniform distribution of strontium accumulation on the electrodes; however, the removal effect is reduced by 31%.

Keywords: numerical hydrodynamic model, electrochemical reactor, strontium, anode and cathode

NUMERISCHES MODELL DES GALVANISCHEN ABSCHEIDUNGSPROZESSES VON STRONTIUM AUS WASSER

Abstrakt: Der Einfluss der Anordnung der Elektroden und des elektrischen Potentials auf die Elektroden sowie der Position und Intensität der Senke/Quelle im Umwälzkreislauf des elektrochemischen Reaktors zur Reinigung von Wasser, das mit einem hohen Strontiumkonzentration belastet ist. Dabei kam die Methode der numerischen Modellierung zum Einsatz, wobei die Kalibrierung der Parameter des numerischen Modells auf Messungen an einem Laborgerät mit gleichen geometrischen Eigenschaften und Randbedingungen basierte. Bei der Durchführung numerischer Simulationen wurden zwei Anordnungen von insgesamt 8 Aluminiumelektroden analysiert - 4 Kathoden (K) und 4 Anoden (A), angeordnet in zwei Blöcken K-A-A-K und A-K-K-A sowie K-A-K-A und K-A-K-A, zwei Senkenpositionen und Senkenintensitäten/Quellen im Bereich von 0,05 l/s bis 0,5 l/s. Das Vorhandensein von Strontiumionen im Wasser (Sr^{2+}) wird als Teilchen mit einer Ladung von $3,2 \cdot 10^{-19}$ C und einem Durchmesser von $1,2 \cdot 10^{-8}$ m interpretiert, die durch die Kopplung des hydrodynamischen und elektrostatischen 3D-Modells durch die Modelldomäne transportiert und/oder auf den Elektrodenplatten zurückgehalten werden. Die Quantifizierung des Effekts der jeweils getesteten Konfigurationsvariante ergibt sich aus dem Verhältnis der Anzahl der Modellstrontiumpartikel, die dauerhaft auf den Elektroden zurückgehalten werden und während der Simulationszeitraums summarisch in das Gerät eingebracht werden.

Die Ergebnisse der am Durchfluss-EK-Gerät durchgeföhrten Untersuchungen zeigten, dass die Reinigungseffizienz primär von der Intensität der Quelle/Senke und sekundär von der Anordnung der Elektroden und der Position der Senke abhängt. Den Ergebnissen des numerischen Modells zufolge ist die Elektrodenkonfiguration K-A-A-K und A-K-K-A um 7% effizienter als die K-A-K-A und K-A-K-A Konfiguration. Bei der am geringsten gemessenen Durchflussrate der Quelle und der Senke ($Q = 0,05$ l/s) ist der Effekt der Strontiumretention auf den Elektroden 2,5-mal größer als bei der höchsten Durchflussrate der Quelle und Senke ($Q = 0,5$ l/s). Durch die Positionierung der Senke direkt neben dem Rand der Trennwand kommt es zu einer um 8 % geringeren Anreicherung von Strontium an den Elektroden als bei einer Positionierung der Senke in einem größeren Abstand zur Trennwand. Das Anlegen einer unterschiedlichen Spannung an einzelne Elektrodenpaare führt zu einem geringeren Stromverbrauch (33 %) und einer gleichmäßigeren Verteilung der Strontiumansammlung auf den Elektroden, allerdings ist der Abtrageneffekt um 31% geringer.

Schlüsselwörter: numerisches hydrodynamisches Modell, elektrochemischer Reaktor, Strontium, Anode und Kathode