

RWZI MODELLEN, BASISPRINCIPES

Peter A. Vanrolleghem, Bob De Clercq en Henk Vanhooren
BIOMATH Departement, Universiteit Gent, Coupure Links 653, B-9000 Gent, België

Inleiding

Dit onderdeel geeft een overzicht van de meest gangbare modellen voor de beschrijving van actiefslibsystemen. Essentieel zijn hierbij dat de modelbouwer beschikt over

- (i) een model dat de omzettingen beschrijft die het actiefslib catalyseert;
- (ii) een model dat de menging in de installatie karakteriseert;
- (iii) een model voor het sedimentatiegedrag in de nabezinker.

In wat volgt worden de “standaard” aanpakken voor deze drie onderdelen uiteengezet, meer bepaald het IAWQ Activated Sludge Model No.1 voor de bioconversies, het tanks-in-serie model voor de menging en het Takács-Vitasovic lagenmodel voor de nabezinker.

Het IAWQ Activated Sludge Model No. 1

Een state-of-the-art-model

Door zijn grote impact op de wetenschap van modellering en simulatie van waterzuiveringsinstallaties kan het model voor actiefslibsystemen van de International Association on Water Quality (IAWQ), gepubliceerd door Henze *et al.* (1987), nog steeds als state-of-the-art beschouwd worden.

Het model werd ontwikkeld door een Task Group van het IAWQ, die de opdracht had bestaande modellen te onderzoeken en te vergelijken. Daarnaast was het de bedoeling een consensus te bereiken over het eenvoudigste mathematische model dat toch realistische voorspellingen kan doen over de prestaties van actiefslibsystemen voor koolstofverwijdering, nitrificatie en denitrificatie. Sindsdien is het model uitgebreid om meerdere COD-fracties te kunnen beschouwen en om processen van biologische fosfaatverwijdering te kunnen beschrijven (Henze *et al.*, 1995).

Toestandsvariabelen

Voor de beschrijving van de processen in een actiefslib installatie, worden een aantal toestandsvariabelen (*state variables*) gedefinieerd. Dit gebeurt door de in het systeem aanwezige bestanddelen in verschillende fracties te verdelen.

Het koolstofhoudend organisch materiaal wordt in het IAWQ-model verdeeld in de fracties biodegradeerbare COD, niet-biodegradeerbare COD (inert materiaal) en biomassa. De opsplitsing

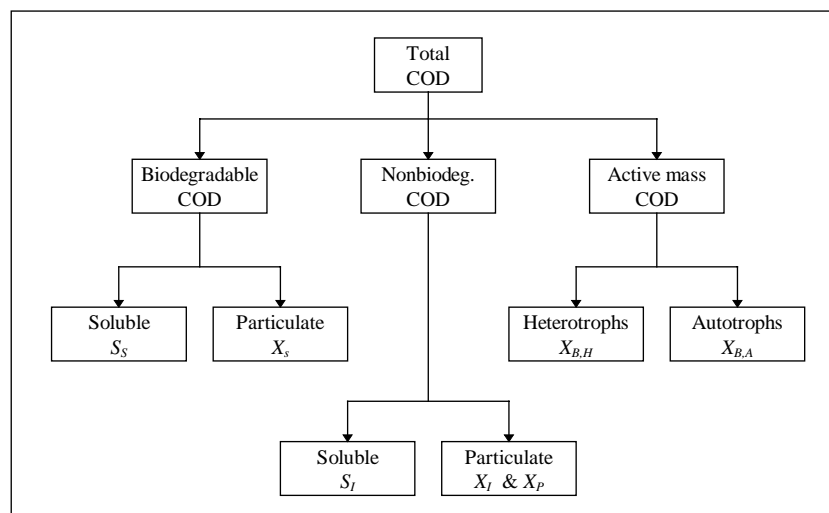


Fig. 1 : Opsplitsing van het koolstofhoudend organisch materiaal in het IAWQ-model

van deze fracties in het model wordt weergegeven in figuur 1. De biodegradeerbare COD wordt zelf verdeeld in vlug (S_S) en traag (X_S) biodegradeerbaar sub-straat. Het vlug

biodegradeerbare materiaal wordt verondersteld enkel te bestaan uit oplosbare moleculen die gemakkelijk door de organismen opgenomen kunnen worden. Het traag biodegradeerbaar materiaal daarentegen wordt verondersteld te bestaan uit particulier en colloïdaal materiaal en uit complexe organische moleculen, die eerst extracellulair en enzymatisch afgebroken moeten worden voor ze opgenomen en verbruikt kunnen worden. Ook het deel van X_S dat in werkelijkheid oplosbaar is, wordt in dit model dus als particulier materiaal behandeld.

De niet-biodegradeerbare fractie wordt verdeeld in een oplosbare (S_i) en een particuliere (X_i) fractie. Deze fracties worden niet afgebroken door de biologische processen in het systeem. De S_f -fractie spoelt van de actiefslibtank door naar de nabezinker en zo in het effluent. De X_f -fractie accumuleert gedeeltelijk in het systeem als de inerte fractie van de VSS (vervluchtigbare stoffen in suspensie). Deze fractie zal grotendeels uit het systeem verwijderd worden via het spuislib en in mindere mate via het effluent van de nabezinker.

Ook de biomassa wordt in verschillende componenten gesplitst. In het model worden immers twee types van organismen beschouwd, namelijk heterotrofe biomassa (X_{BH}) en autotrofe biomassa (X_{BA}). Als laatste wordt ook een extra toestandsvariabele X_P gemodelleerd om rekening te kunnen houden met het inerte materiaal dat geproduceerd wordt bij de afbraak van celmateriaal. Deze fractie wordt echter in veel toepassingen bij de fractie X_f gevoegd.

De stikstofhoudende verbindingen van hun kant worden ook in een aantal fracties verdeeld. De fracties zijn gebaseerd op een meting van de totale Kjeldahl stikstof (TKN). De stikstof-componenten worden verdeeld in vrije ammonia en ammoniumzouten (S_{NH}), organisch gebonden stikstof en stikstof in de actieve biomassa.

Net als bij de fractionatie van de organische koolstofcomponenten, wordt de organische stikstof verdeeld in een oplosbare en een particuliere fractie, en later in biodegradeerbare en niet-biodegradeerbare fracties. Deze opsplitsing wordt in figuur 2 voorgesteld.

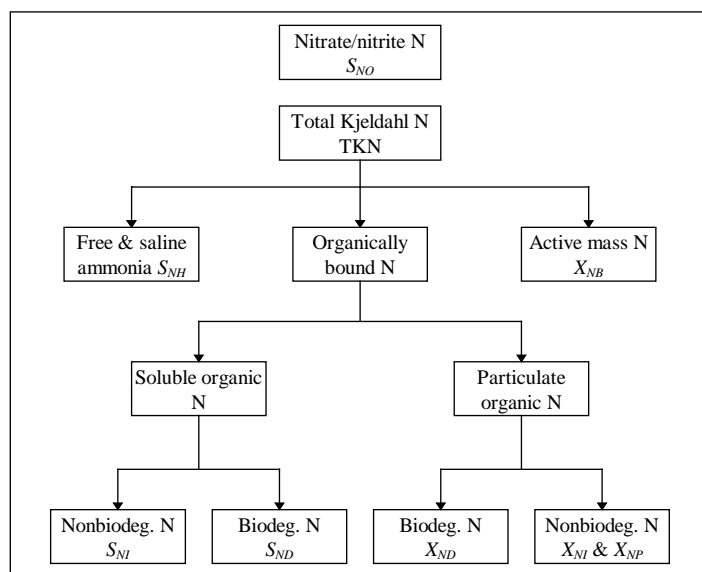


Fig. 2 : Opsplitsing van N-houdend organisch materiaal in het IAWQ-model

Het moet vermeld worden dat alleen particuliere biodegradeerbare organische stikstof (X_{ND}) en opgeloste biodegradeerbare organische stikstof (S_{ND}) expliciet in het model vermeld worden. De stikstof geassocieerd met actieve biomassa (X_{NB}) is alleen aanwezig in de zin dat afsterven van biomassa aanleiding geeft tot de productie van particuliere biodegradeerbare stikstof. Organische stikstof geassocieerd met de fracties X_i en X_P , respectievelijk X_{NI} en X_{NP} kunnen gemakkelijk berekend worden, hoewel ze niet expliciet in de modelmatrix beschreven worden. Opgeloste inerte stikstof (S_{NI}) wordt helemaal niet gemodelleerd. Tot slot worden nitriet en nitraat-stikstof gecombineerd in de variabele S_{NO} .

De twee laatste toestandsvariabelen beschreven in het model zijn enerzijds opgeloste zuurstof (S_O), uitgedrukt als negatieve COD, en de alkaliniteit S_{ALK} .

Gemodelleerde dynamische processen

De verschillende processen in het IAWQ-model worden hieronder kort toegelicht.

- *Aërobe groei van heterotrofen*: Een deel van de S_S -fractie wordt gebruikt voor de aanmaak van nieuwe heterotrofe biomassa. De rest wordt als energiebron gebruikt en geoxideerd, wat aanleiding geeft tot een zuurstofvraag. De groeisnelheid wordt beschreven door een Monodkinetiek. Als bron van stikstof wordt ammonium gebruikt, dat in de celmassa ingebouwd wordt. Zowel de concentraties van S_S als van S_O kunnen snelheidslimiterend zijn voor dit groeiproces.
- *Anoxische groei van heterotrofen*: In afwezigheid van zuurstof kunnen heterotrofen nitraat als finale elektronacceptor gebruiken, met opnieuw S_S als substraat. Dit proces leidt tot de productie van biomassa en stikstofgas (denitrificatie). Voor dit groeiproces wordt dezelfde Monoduitdrukking gebruikt als voor de aërobe groei, met dit verschil dat de kinetische expressie vermenigvuldigd wordt met een correctiefactor $\eta_g (< 1)$. Deze factor kan de verminderde maximale groeisnelheid bij anoxische condities beschrijven, naast het feit dat slechts een deel van de heterotrofe biomassa kan functioneren met nitraat als elektron-acceptor.
- *Aërobe groei van autotrofen*: Bij dit proces wordt ammonium geoxideerd tot nitraat, met enerzijds een aangroei van biomassa en anderzijds een zuurstofvraag tot gevolg. Tegelijk wordt een bijkomende hoeveelheid ammonium gebruikt als stikstofbron voor inbouw in de biomassa. Opnieuw wordt een Monoduitdrukking gebruikt. De celopbrengstcoëfficiënt is echter laag, en de aangroei van autotrofen is dus gering.
- *Afsterven van heterotrofen en autotrofen*: Beide processen worden op dezelfde manier gemodelleerd via het *death-regeneration-concept* (Dold *et al.*, 1980). De organismen sterven af met een bepaalde snelheid. Een deel van de afbraakproducten wordt als niet-biodegradeerbaar beschouwd en wordt dus aan de fractie X_P toegevoegd. De rest wordt bij het traag biodegradeerbaar organisch materiaal (X_S) gevoegd. De stikstofcomponenten geassocieerd met deze laatste fractie komen beschikbaar als particuliere organische stikstof. Met dit proces is dan ook geen zuurstofvraag verbonden, het gaat dus met dezelfde snelheid door onder aërobe, anoxische en anaërobe condities.
- *Ammonificatie van opgeloste organische stikstof*: Deze component wordt omgezet naar S_{NH} door een eersteorde-proces dat door actieve heterotrofen gecatalyseerd wordt.
- *Hydrolyse van "gevangen" organische stof*: Traag biodegradeerbaar substraat geassocieerd met de slibmassa wordt extracellulair afgebroken en produceert een S_S -fractie die voor groei beschikbaar komt. Het proces is gemodelleerd op basis van een oppervlaktereactiekinetiek en vindt alleen plaats in aërobe en anoxische condities. De snelheid wordt in anoxische condities gereduceerd met een factor $\eta_h (< 1)$. De snelheid is proportioneel met de heterotrofe biomassa, maar satureert wanneer de hoeveelheid beschikbaar substraat groot wordt in vergelijking met de biomassa.
- *Hydrolyse van "gevangen" organische stikstof*: Biodegradeerbare particuliere organische stikstof wordt afgebroken tot opgeloste organische stikstof met een snelheid evenredig met de hydrolysesnelheid van 'gevangen' koolstofhoudende organische stof.

De kinetische en stoichiometrische parameters die in dit model benodigd zijn, worden samengevat in Tabel 1.

Modelvoorstelling

Gebaseerd op vorige beschrijvingen, kan nu het volledige stelsel differentiaalvergelijkingen, die het IAWQ AS Model No.1 (Henze *et al.*, 1987) uitmaken, opgesteld worden. Enkele modelvergelijkingen zullen voluit geschreven worden om de complexiteit van het model - die enigszins verborgen blijft in de matrixvorm die door de Task Group gehanteerd is (zie verder) - te verduidelijken.

Tabel 1. Stoichiometrische en kinetische parameters in het IAWQ model n° 1.

STOECHIOMETRIE		KINETIEK	
Y_H	Heterotrofe opbrengstcoëfficiënt	μ_H	Heterotrofe max. spec. Groeisnelheid
Y_A	Autotrofe opbrengstcoëfficiënt	K_S	Heterotrofe affiniteitsconstante
i_{XB}	Stikstofgehalte van de biomassa	b_H	Heterotrofe afstervingscoëfficiënt
f_P	Inerte fractie van de biomassa-COD	μ_A	Autotrofe max. spec. Groeisnelheid
i_{XP}	Stikstofgehalte van inerte biomassa-COD	K_{NH}	Autotrofe affiniteitsconstante
CORRECTIEFACTOREN		b_A	Autotrofe afstervingscoëfficiënt
η_g	Correktiefactor voor anoxische groei	k_h	Hydrolyse-snelheidsconstante
η_h	Correktiefactor voor anoxische hydrolyse	K_X	Hydrolyse-saturatieconstante
		$K_{O,H}$	Heterotrofe zuurstof switching constante
		$K_{O,A}$	Autotrofe zuurstof switching constante
		K_{NO}	Heterotrofe nitraat switching constante
		k_a	Ammonifikatiesnelheidsconstante

De dynamica van de concentratie van heterotrofe biomassa wordt beïnvloed door drie processen - aërobe groei, anoxische groei en afsterving - en wordt voorgesteld door de volgende vergelijking, waarin de advectieve transporttermen (in- en uitvoer van materiaal met de vloeistofstromen) niet weergegeven zijn

$$\frac{dX_{BH}}{dt} = \left[\mu_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left\{ \left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) + \eta_g \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right\} - b_H \right] X_{BH} \quad (1)$$

In de termen van de vorm $(S/(K+S))$ is duidelijk de Monodkinetiek te herkennen. Deze uitdrukking is in het IAWQ-model bedoeld als "switching function", net als de uitdrukkingen van de vorm $(K/(K+S))$. Een zuurstof "switching function" is bijvoorbeeld van de vorm

$$\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \quad (2)$$

met S_O de concentratie aan opgeloste zuurstof. De keuze van een kleine waarde voor K_O ($K_{O,H}$ voor de heterotrofen en $K_{O,A}$ voor de autotrofen) betekent dat de functie ongeveer gelijk wordt aan 1 bij matig hoge zuurstofconcentraties. Als de zuurstofconcentratie echter daalt, benadert de functie de waarde 0. Dit betekent dus dat het proces waarin dergelijke "switching function" voorkomt enkel doorgaat wanneer voldoende zuurstof aanwezig is. Anderzijds kan voor processen die enkel doorgaan in afwezigheid van zuurstof een functie gedefinieerd worden van de vorm

$$\frac{K_O}{K_O + S_O} \quad (3)$$

Deze functie benadert 0 bij matig hoge waarde van S_O en wordt ongeveer gelijk aan 1 bij lage waarden van S_O .

In publicaties waar ingewikkelde modellen ontwikkeld worden, is het dikwijls moeilijk de gedachtengang van de auteur te volgen. Daarom heeft de Task Group voor een specifiek formaat gekozen om het actiefslibmodel in voor te stellen. Een eenvoudig voorbeeld waarmee deze matrixnotatie uitgelegd kan worden, is de aërobe groei van heterotrofe bacteriën, die een oplosbaar substraat gebruiken voor groei en energievoorziening. Het simpele model van deze situatie moet ten minste rekening houden met drie componenten: biomassa, substraat en opgeloste zuurstof. Figuur 3 is de uiteindelijke matrixvoorstelling van het eenvoudig voorbeeldproces. De eerste stap om de matrix op te bouwen is inderdaad te definiëren welke componenten belangrijk zijn bij de ontwikkeling van het model. Deze componenten worden dan bovenaan de matrix als symbool vermeld, en onderaan met hun volledige naam en eenheid. De IAWQ-Task Group heeft de volgende conventie wat

symboolnotaties betreft, aangehouden: het symbool X wordt gebruikt voor onoplosbare componenten, terwijl S gebruikt wordt voor opgeloste componenten. Aan deze symbolen worden subscripts toegekend, met name B voor biomassa, S voor substraat, en O voor zuurstof. Aan elk van de belangrijke componenten wordt een index i toegekend, die in dit geval gaat van 1 tot 3.

De tweede stap is het definiëren van de biologische processen in het systeem die een invloed hebben op de geciteerde componenten. De processen worden in de linkse kolom opgesomd en krijgen een index j toegekend. De kinetische vergelijkingen voor deze processen worden in de rechtse kolom voorgesteld. Ze worden voorgesteld door ρ_j , waarbij j overeenstemt met het proces opgesomd in de linkse kolom van de matrix. In dit geval werd een gewone Monodkinetiek gebruikt voor de aangroei van de microbiële biomassa en een eersteorde-benadering voor de afsterving van biomassa. De kinetische parameters worden verduidelijkt in de rechterbenedenhoek van de modelmatrix.

De elementen binnen de matrix zijn de stoichiometrische coëfficiënten v_{ij} . Zij beschrijven de massarelaties tussen de verschillende componenten die een rol spelen binnen een proces. Door het werken in consistente eenheden, wordt het gebruik van dergelijke coëfficiënten sterk vereenvoudigd. Het is dan immers zeer gemakkelijk de massabalansen in het model te controleren. Wanneer die correct zijn, moet de som van alle coëfficiënten per rij gelijk zijn aan nul. Alle toestandsvariabelen zijn nu gegeven in COD-concentraties, met uitzondering van de opgeloste zuurstof, die gedefinieerd is als een negatieve COD-concentratie. Bij het controleren van de massabalans moet de coëfficiënt behorend bij de zuurstofconcentratie dus van de andere coëfficiënten afgetrokken worden. Voor de groei van biomassa wordt bijvoorbeeld bekomen

$$1 - \frac{1}{Y} + (-1) \left(-\frac{1-Y}{Y} \right) = 0 \quad (4)$$

De stoichiometrische parameters die bij het ontwikkelen van deze coëfficiënten gebruikt worden, worden verduidelijkt in de linkerbenedenhoek van de matrix.

Het volledige IAWQ Activated Sludge Model No. 1, dat zowel koolstofverwijdering, nitrificatie als denitrificatie incorporeert, wordt voorgesteld in figuur 4.

Fig. 3: Kinetiek en stoichiometrie voor heterotrofe microbiële groei in een aërobe omgeving (Henze et al., 1987)

Component i	1	2	3	Processnelheid, ρ_j $\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$
j Proces	S_S	X_B	S_O	
1 Groei	$-\frac{1}{Y}$	1	$1 - \frac{1}{Y}$	$\frac{\mu S_S}{K_S + S_S} \cdot \frac{S_O}{K_O + S_O} \cdot X_B$
2 Afsterving		-1	-1	$b \cdot X_B$
Geobserveerde omzettingssnelheden $\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$	$r_i = \sum_j r_{ij} = \sum_j v_{ij} \rho_j$			
Stoichiometrische parameters: Opbrengstcoëfficiënt: Y	Substraat $\text{M}(\text{COD})\text{L}^{-3}$	Biomassa $\text{M}(\text{COD})\text{L}^{-3}$	Zuurstof $\text{M}(-\text{COD})\text{L}^{-3}$	Kinetische Parameters: Max. Specifieke groeisnelheid: μ Affiniteitsconstante: K_S Zuurstof switching constante: K_O Afstervingscoëfficiënt: b

Fig. 4 : Kinetiek en stoichiometrie voor koolstofoxidatie, nitrificatie en denitrificatie (Henze et al., 1987)

Component i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	Processnelheid, ρ_j $\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$
j Proces	S_I	S_S	X_I	X_S	$X_{B,H}$	$X_{B,A}$	X_P	S_O	S_{NO}	S_{NH}	S_{ND}	X_{ND}	S_{ALK}	
1 Aërobe heterotrofe groei		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$1 - \frac{1}{Y_H}$		$-i_{XB}$			$-\frac{i_{XB}}{14}$	$\mu_H \cdot X_{B,H}$
2 Anoxische heterotrofe groei		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{2.86Y_H}$		$-i_{XB}$			$\frac{1-Y_H}{2.86 \cdot 14 \cdot Y_H} - \frac{i_{XB}}{14}$	$\mu_H^o \cdot X_{B,H}$
3 Aërobe autotrofe groei						1		$1 - \frac{4.57}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A} - i_{XB}$			$-\frac{2}{14 \cdot Y_A} - \frac{i_{XB}}{14}$	$\mu_A \cdot X_{B,A}$
4 Het. afsterving				$1-f_p$	-1		f_p					$i_{XB} \cdot f_p \cdot i_{XP}$		$b_H \cdot X_{B,H}$
5 Aut. afsterving				$1-f_p$		-1	f_p					$i_{XB} \cdot f_p \cdot i_{XP}$		$b_A \cdot X_{B,A}$
6 Ammonificatie										1	-1		1/14	$k_a \cdot S_{ND} \cdot X_{B,H}$
7 Hydrolyse		1		-1										$k_h \cdot X_S$
8 Hydrolyse van N											1	-1		$k_h \cdot X_{ND}$
Geobserveerde omzettingssnelheden $\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$	$r_i = \sum_j r_{ij} = \sum_j v_{ij} \rho_j$													
Stoichiometrische parameters: (zie Tabel 1)	Naamgeving, zie tekst Alle eenheden in ML^{-3} (COD of N, afhankelijk van de variabele)													Kinetische Parameters: (zie Tabel 1)

$$\mu_H = \mu_H^{\max} \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right)$$

$$\mu_H^o = \eta_g \mu_H^{\max} \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right)$$

$$\mu_A = \mu_A^{\max} \left(\frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right)$$

$$k_h = k_h^{\max} \frac{1}{K_X + (X_S/X_{B,H})} \left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) + \eta_h \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right)$$

Mengmodellen

Menging bepaalt de verblijftijdsdistributie van stoffen in een reactor en dus de afbraak-efficiëntie van de actiefslibinstallatie. Menging is een driedimensionaal proces beschreven door partieel differentiaal vergelijkingen die met de rekenintensieve "Computational Fluid Dynamics"-aanpak kunnen opgelost worden. Bij de beschrijving van actiefslibinstallaties wordt echter meestal gekozen voor een eenvoudiger aanpak, het tanks-in-serie model, die de mengeigenschappen voldoende benadert en snelle berekeningen toelaat.

Het tanks-in-serie model

Het tanks-in-serie model is een empirisch model dat bestaat uit het serieel schakelen van volkomen gemengde reactoren. Door het aantal reactoren te verhogen kan het volledig mengtraject doorlopen worden, gaande van volkomen vermenging (één tank) naar propstroming (oneindig aantal tanks-in-serie). De modelleringstaak voor een bepaalde installatie bestaat erin het aantal tanks-in-serie te bepalen dat de mengkarakteristieken van de installatie zo dicht mogelijk benadert.

Bepaling van het aantal tanks-in-serie uit een empirische relatie

Voor rechthoekige actiefslibreactoren met diffuse beluchting, kan dit aantal tanks bepaald worden door gebruik van volgende empirisch bepaalde relatie (Chambers, 1992):

$$i = \frac{7.4}{B \cdot H} \cdot L \cdot Q_{in} \cdot (1 + R) \quad (5)$$

Gezien de empirische grondslag is de vergelijking maar geldig binnen een bepaald bereik, opgelegd aan de respectievelijke variabelen. De voorwaarden tot implementatie zijn:

28 m	< L <	500 m	reactorlengte (L)
2 m	< B <	20 m	reactorbreedte (L)
2.4 m	< H <	6.0 m	reactorhoogte (L)
0.7	< R <	1.5	recirculatieverhouding (-)
1.3 h	$\theta = \frac{V_{tot}}{Q_{in} \cdot (1 + R)}$	< 3.0 h	hydraulische verblijftijd (h)

Bepaling van het aantal tanks-in-serie door een tracerstudie

In de meeste gevallen is het aangewezen experimentele gegevens te verzamelen waaruit de mengkarakteristiek kan afgeleid worden. Verschillende interessante conclusies kunnen getrokken worden uit een studie van de concentratiewijziging van een toegevoegde inerte stof (tracer) in de reactor. De vertaling van dit concentratieverloop naar het aantal tanks-in-serie waarmee het menggedrag van de reactor kan beschreven worden, is gebaseerd op een model-gebaseerde analyse. Dit model wordt hieronder afgeleid.

In wat volgt, wordt het aantal mol tracer afgeleid dat een systeem van i reactoren verlaat, uitgaande van een stationaire toestand. Veronderstel een constant totaal volume V (L) zodat het volume van elke reactor op zich $V \cdot i^{-1}$ bedraagt. Het volumetrisch debiet is Q (L³T⁻¹) en er wordt n mol tracer geïnjecteerd in het systeem waar initieel geen tracer aanwezig is (gepulseerde traceradditie). De concentratie aan tracer in tank m wordt dan gegeven door: $C_m = n_m \cdot i \cdot V^{-1}$. De massabalans opgesteld over tank 1 geeft (ingang - uitgang - reactie = accumulatie):

$$0 - \frac{n_1 \cdot i \cdot Q}{V} - 0 = \frac{dn_1}{dt} \quad (6)$$

wat na integratie leidt tot:

$$n_1 = n \cdot e^{-\frac{Q \cdot i \cdot t}{V}} \quad (7)$$

Voor tank 2 geldt:

$$\frac{n_1 \cdot i \cdot Q}{V} - \frac{n_2 \cdot i \cdot Q}{V} - 0 = \frac{dn_2}{dt} \quad (8)$$

wat na substitutie van n_1 en, opnieuw, integratie levert:

$$n_2 = n \cdot \frac{Q \cdot i \cdot t}{V} \cdot e^{-\frac{Q \cdot i \cdot t}{V}} \quad (9)$$

Idem voor tank 3:

$$n_3 = \frac{n}{2!} \cdot \left(\frac{Q \cdot i \cdot t}{V}\right)^2 \cdot e^{-\frac{Q \cdot i \cdot t}{V}} \quad (10)$$

Algemeen kan gesteld worden voor tank m (Levenspiel, 1972):

$$n_m = \frac{n}{(m-1)!} \cdot \left(\frac{Q \cdot i \cdot t}{V}\right)^{m-1} \cdot e^{-\frac{Q \cdot i \cdot t}{V}} \quad (11)$$

Het gedrag van de tracer wordt duidelijk uit een berekening van de concentratie aan de hand van dit model. In de beschouwde serie van i reactoren neemt de uitgangskoncentratie toe tot een maximum (figuur 5) en vermindert vervolgens gestaag. De piek verhoogt met i en de golf vertoont een kleinere spreiding. Levenspiel (1972) toonde aan dat de spreiding omgekeerd evenredig is met i .

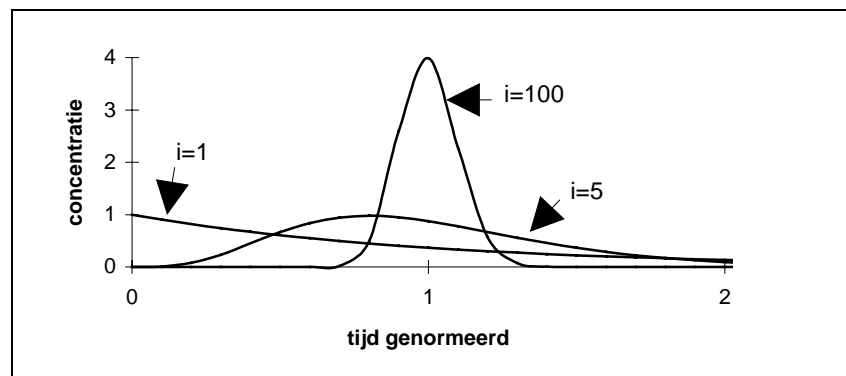


Fig. 5: Respons op een tracerpuls doorheen een serie van i reactoren met een constant totaalvolume V

C- en F-curve

De uitzetting van $C_i \cdot C_0^{-1}$, met $C_0 = n \cdot V^i$, ten opzichte van de gereduceerde tijd τ , levert de 'gereduceerde C-curve' voor elke tank i . Fitten van bovenstaand C-curve model aan het opgemeten tracer-concentratieprofiel, laat toe het aantal tanks te bepalen dat de mengingskarakteristieken goed beschrijft. Als alternatief kan de F-curve opgesteld worden, bekomen door een stapfunctie voor de tracerconcentratie aan de reactoringang aan te leggen in plaats van een pulsadditie van tracer. Voor de analyse wordt uitgegaan van het nog resterend aantal mol tracer n_t in de serie van i tanks:

$$n_t = n_1 + n_2 + n_3 + \dots + n_i \quad (12)$$

Zodoende wordt de F-curve gegeven door:

$$F = \frac{n - n_t}{n} = 1 - \frac{1}{n} \cdot (n_1 + n_2 + n_3 + \dots + n_i) \quad (13)$$

$$F = 1 - e^{-\frac{Q \cdot i \cdot t}{V}} \cdot \left[1 + \frac{Q \cdot i \cdot t}{V} + \frac{1}{2!} \cdot \left(\frac{Q \cdot i \cdot t}{V} \right)^2 + \dots + \frac{1}{(i-1)!} \cdot \left(\frac{Q \cdot i \cdot t}{V} \right)^{i-1} \right] \quad (14)$$

Op te merken valt dat voor één enkele gemengde reactor reeds een grote fractie tracer, nl. 0.632, verwijderd is uit de reactor in een tijdsinterval gelijk aan de verblijftijd θ . Dit duidt op het inherent aanwezige pseudo-kortsluitstroomeffect bij een enkelvoudig gemengde reactor. Deze pseudo-kortsluitstroom wordt gereduceerd door een toename in het aantal tanks, met in de limiet, $i \rightarrow \infty$, een systeemgedrag identisch aan propstroming. Voor verdere informatie wordt gerefereerd naar Levenspiel (1972).

Multi-zone modellen

Dit genre van modellen is in feite een combinatie van de vorige modelleringsprincipes. De reactor wordt opgedeeld in twee of meer zones (figuur 6). Dit kunnen twee vloeistoffasen zijn, een stagnante vloeistof of systemen met gecompliceerde stromingen. Elk op zich kunnen deze fasen principieel beschreven worden door het tanks-in-serie model. Bij deze compartimentering wordt niet enkel het volume maar ook de vloeistofstroom zelf opgesplitst. Zo ressorteert onder het totaal volume een actief volume (dat effectief deelneemt aan vloeistoftransport) en/of een dood volume. Op vlak van debiet daarentegen kan onderscheid gemaakt worden tussen een actief debiet (bij propstroming en volkomen gemengde zones), een kortsluitstroom en een recirculatie-debiet. Een overzicht van de verschillende combinaties wordt voorgesteld door Levenspiel (1972).

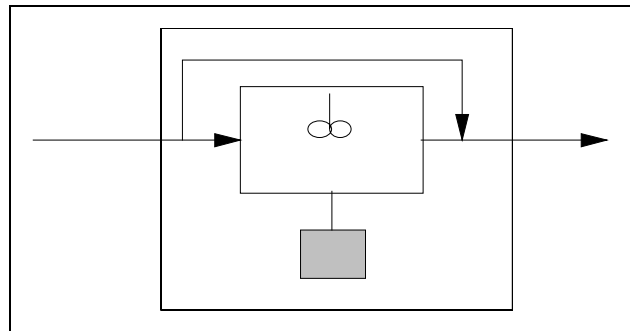


Fig. 6: Model van een geroerde reactor met kortsluitstroom en dode ruimte

Essentieel nadeel van de multi-zone modellen is het grote aantal parameters wat de schatting ervan op basis van bv. tracerstudies niet eenvoudig maakt (Coen *et al.*, 1997). Om daaraan te ontsnappen, hebben Cholette en medewerkers de volumefracties met betrekking tot kortsluitstromen en stagnatie in gemengde reactoren gecorreleerd aan operationele parameters (Froment en Bischoff, 1990). Ook Mayr *et al.* (1994) ondernamen een poging tot correlatie. Dit gebeurde weliswaar niet enkel voor de respectievelijke volumes van de serieel geplaatste reactoren, maar ook voor de mengtijden en het aantal reactoren.

Een ééndimensionaal model voor de werking van de nabezinktank

Een actiefslibmodel waarin geen beschrijving zit voor de dynamica van een nabezinker vertoont ernstige afwijkingen wanneer het onderworpen wordt aan sterke wijzigingen in de hydraulische belasting. Onder die omstandigheden wijzigt de efficiëntie van zowel de scheiding als de indikking. Hoewel sedimentatie, net als menging, een driedimensionale beschrijving vereist (die in heel specifieke studies ook reeds wordt gebruikt), wordt in de huidige "standaard" modellering van actiefslibinstallaties gekozen voor een vereenvoudigde aanpak, waarin enkel de verticale dimensie wordt beschouwd. Verder wordt de aan de basis liggende ééndimensionale partiële differentiaalvergelijking benadert door een lagenmodel wat de berekeningssnelheid ten goede komt.

Basisvergelijking en vereenvoudigingen

Het ééndimensionaal model van Takács *et al.* (1991), dat tegenwoordig frequent gebruikt wordt, is deels gebaseerd op het werk van Stenstrom (1975) en Vitasovic (1986). Hun werk spitst zich vooral toe op het indikkingsproces. De basisvergelijking van dit werk is de volgende.

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{\partial(D\partial X)}{\partial z^2} - \frac{\partial(vX)}{\partial z} - RX \quad (15)$$

met X = concentratie van vaste stof (ML^{-3})
 D = een dispersiecoëfficiënt (L^2T^{-1})
 v = bezinkingssnelheid (LT^{-1})
 R = reactiesnelheid met betrekking tot de concentratie van vaste stof (T^{-1})

Veel vereenvoudigingen zijn ingevoerd om de oplossing van deze vergelijking gemakkelijker te maken. Enkele van deze vereenvoudigingen zijn:

- de concentratie van gesuspendeerd materiaal binnen een horizontaal vlak in de nabezinktank is uniform;
- er is geen verticale dispersie ($D=0$);
- er is geen significante biologische reactie die de concentratie van vast materiaal in de tanks verandert ($R=0$);
- de massaflux in een infinitesimaal volume kan niet groter zijn dan de massaflux die fysisch door dat volume kan bewegen en kan ook niet groter zijn dan de massaflux die door het volume-element er onmiddellijk onder kan bewegen;
- de gravitaire bezinkingssnelheid is enkel een functie van de concentratie van gesuspendeerd materiaal, tenzij wanneer de flux berekend door deze bezinkingssnelheid in strijd is met de vorige aanname.

Stenstrom (1975) verdeelt de indikkingszone van de bezinktank in een aantal horizontale lagen en formuleert een massabalans voor elk van deze lagen. Hierbij veronderstelt hij in elke laag perfecte menging. Hij houdt rekening met de hierboven aangehaalde vereenvoudigingen. Hierdoor bekomt hij de volgende uitdrukking.

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{Q_u (X_{i-1} - X_i) + \min(J_{s,i}, J_{s,i-1}) - \min(J_{s,i}, J_{s,i+1})}{z_i} \quad (16)$$

met J_s = flux door gravitaire bezinking (ML^2T^{-1}), berekend als

$$J_{s,i}(X_i) = v_{s,i}(X_i) \cdot X_i \quad (17)$$

$v_{s,i}$ = bezinkingssnelheid (LT^{-1})
 z_i = hoogte van de laag i (L)
 Q_u = debiet van de onderstroom (L^3T^{-1})
 A = oppervlakte van de nabezinktank (L^2)

Aangezien er geen gravitaire bezinkingsflux uit de onderstaande laag van de nabezinker voorkomt, reduceert de massabalans voor de bodemlaag zich tot:

$$\frac{dX_n}{dt} = \frac{Q_u (X_{n-1} - X_n) + \min(J_{s,n}, J_{s,n-1})}{z_n} \quad (18)$$

Uitbreiding van het basismodel

Om rekening te kunnen houden met het gedrag van de lagen boven het voedingspunt, breidt Vitasovic (1986) het model uit om ook de klaringszone te beschrijven. De tank wordt ingedeeld in n lagen, waarbij de voeding toegevoerd wordt naar laag m (figuur 7). Vitasovic veronderstelt wel dat de toegevoerde vloeistof en de stoffen in suspensie onmiddellijk over het volledige volume van de voedingslaag verspreid worden. In de lagen boven de voedingslaag wordt een grensconcentratie X_t gedefinieerd. Er wordt namelijk verondersteld dat bij deze concentratie de zone met gehinderde bezinking aanvangt. Het slibdeken wordt dan ook gedefinieerd als die zone waar de slibconcentratie hoger is dan de gedefinieerde X_t . Dit geeft in de klaringszone aanleiding tot volgende vergelijkingen.

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{\frac{Q_e}{A}(X_{i+1} - X_i) + J_{clar,i-1} - J_{clar,i}}{z_i} \quad (19)$$

met $Q_e =$ overstortdebiet (l^3t^{-1})

De flux aan vaste stoffen in de klaringszone wordt gedefinieerd als

$$J_{clar,i} = \begin{cases} J_{s,i} & \text{als } X_{i+1} \leq X_t \\ \min(J_{s,i}, J_{s,i+1}) & \text{als } X_{i+1} > X_t \end{cases} \quad (20)$$

In de voedingslaag zelf is er zowel een opwaartse als een neerwaartse vloeistofsnelheid. De hieruit resulterende vergelijking is

$$\frac{dX_m}{dt} = \frac{\frac{Q_f X_f}{A} - \left(\frac{Q_e + Q_u}{A}\right) X_m + J_{clar,m-1} - \min(J_{s,m}, J_{s,m+1})}{z_m} \quad (21)$$

Bezinkingsnelheidsfuncties

De meeste gangbare ééndimensionale modellen voor nabezinkers zijn grotendeels gebaseerd op de hiervoor uiteengezette benadering. Oorspronkelijk werd de aandacht echter vooral getrokken naar de zones met hoge slibconcentratie om realistische slibconcentraties in de onderstroom te voorspellen. Vandaar dat de eerst gebruikte functies voor het beschrijven van de bezinkingsnelheid geen redelijke oplossingen kunnen geven voor de zones met een lage slibconcentratie. Vitasovic (1986) gebruikt de traditionele exponentiële functie voorgesteld door Vesilind (1968) die onredelijk hoge bezinkingsnelheden voorspelt bij lage slibconcentratie.

$$v_s = ke^{-nX} \quad (22)$$

Vele andere exponentiële of machtsfuncties zijn gebruikt voor het voorspellen van de bezinkingsnelheden, waarbij onder andere aandacht is besteed aan de mogelijkheid een dergelijke functie te calibreren aan de hand van de Slib Volume Index (SVI).

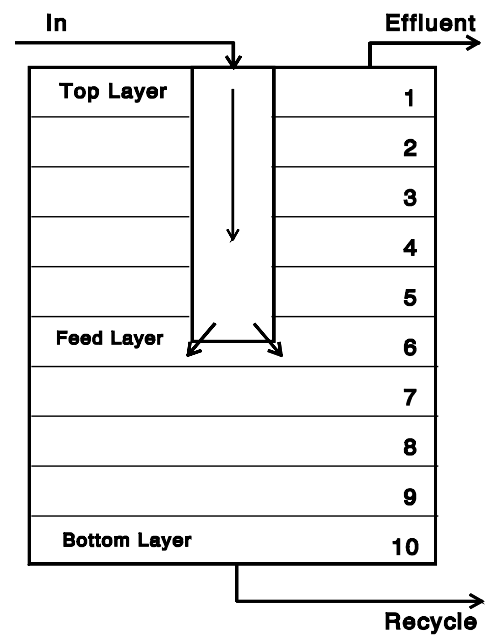


Fig. 7: Schematische voorstelling van de bezinktank

Een recente poging om een realistische bezinkingsnelheid te beschrijven is die van Takács *et al.* (1991) die een dubbele exponentiële snelheidsfunctie voorstellen (figuur 8):

$$v_s = \max \left[0, \min \left(v_{00}, v_0 \left(e^{-r_h(X-X_{\min})} - e^{-r_p(X-X_{\min})} \right) \right) \right] \quad (23)$$

waarbij v_{00} en v_0 respectievelijk de praktische en theoretische maximale bezinkingsnelheid voorstellen, r_h is de parameter typisch voor de bezinking in zones met gehinderde bezinking, r_p daarentegen is typisch voor de bezinking bij lage slibconcentraties. X_{\min} is de minimaal behaalbare concentratie van gesuspendeerde stoffen in het effluent en is op zijn beurt een functie van de concentratie van gesuspendeerde stoffen in het influent van de nabezinker.

$$X_{\min} = f_{ns} X_f \quad (24)$$

waarbij f_{ns} de niet-bezinkbare fractie van X_f aanduidt.

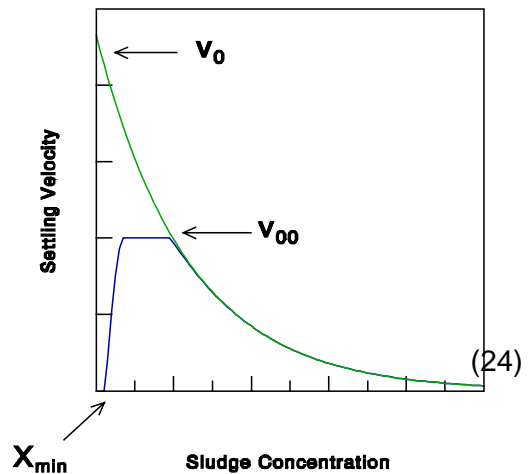


Fig. 8: Schematische voorstelling van de dubbele exponentiële snelheidsfunctie, voorgesteld door Takács *et al.* (1991)

Conclusies

In de uiteenzetting werd een inleiding gegeven tot de modellering van actiefslib installaties. Uiteraard bestaan reeds tal van variaties op dit thema en worden in sommige studies veel complexere modellen aangewend. Toch mag het voorgaande gezien worden als de “state-of-the-art” in de modellering van actiefslibinstallaties. Het gebruik van deze modellen heeft geleid tot een belangrijke verbetering van het ontwerp en de werking van actiefslibinstallaties. Ook de inzichten en communicatie rond het actiefslibproces hebben baat gehad bij deze standaardisatie.

Referenties

- Chambers B. (1992) Design methodology for optimisation of aeration efficiency in activated sludge plants. In: Proceedings 6th Forum Applied Biotechnology. Med. Fac. Landbouww. Univ. Gent, 57, 1631-1642.
- Coen F., Petersen B., Vanrolleghem P.A., Vanderhaegen B. and Henze M. (1997) Model-based characterisation of hydraulic, kinetic and influent properties of an industrial WWTP. In: Proceedings 7th IAWQ Workshop on ICA of Water and Wastewater Treatment and Transportation Systems. Brighton, UK, July 6-9 1997. 319-326.
- Dold P.L., Ekama G.A. and Marais G.v.R. (1980) A general model for the activated sludge process. Prog. Wat. Tech., 12(6), 47-77.
- Froment G.F. and Bischoff K.B. (1990) Chemical Reactor Analysis and Design. Wiley, New York.
- Henze M., Grady C.P.L.Jr., Gujer W., Marais G.v.R. and Matsuo T. (1987) Activated Sludge Model No. 1. IAWQ Scientific and Technical Reports No. 1. London, UK.
- Henze M., Gujer W., Mino T., Matsuo T., Wentzel M.C. and Marais G.v.R. (1995) Activated Sludge Model No. 2. IAWQ Scientific and Technical Reports No. 3. London, UK.
- Levenspiel O. (1972) Chemical Reaction Engineering. Wiley, New York.
- Mayr B., Nagy E., Horvat P. and Moser A. (1994) Scale-up on basis of structured mixing models: A new concept. Biotechnol. Bioeng., 43, 195-206.
- Stenstrom M.K. (1975) A dynamic model and computer compatible control strategies for wastewater treatment plants. PhD. Thesis. Clemson University, South-Carolina, USA.
- Takács I., Patry G.G. and Nolasco D. (1991) A dynamic model of the clarification-thickening process. Wat. Res., 25, 1263-1271.
- Vitasovic Z.Z. (1986) An integrated control strategy for the activated sludge process. PhD. Thesis. Rice University. Houston, Texas, USA.