

# *RWZI Modellen: Basisprincipes*

Peter Vanrolleghem

BIOMATH, Universiteit Gent, België



# *Inleiding*

RWZI-Modelbouwer heeft tenminste nood aan:

1. een model voor de omzettingen door het actiefslib;
2. een model dat transport in de installatie karakteriseert;
3. een model voor het sedimentatiegedrag in de nabezinker.

Voor elk van deze worden de standaardmodellen gegeven:

1. IAWQ Activated Sludge Model Nr 1;
2. Tanks-in-serie mengmodel;
3. Takács-Vitasovic lagenmodel voor de nabezinker.



# *IAWQ Activated Sludge Models: Inleiding*

Koolstof- en Stikstofverwijdering:      ASM1 (Henze *et al.*, 1987)

Fosfaatverwijdering:                      ASM2 (Henze *et al.*, 1995)

## Kenmerken:

1. Massabehoud (COD-gebaseerd)
2. Kinetiek met switching (Monod-type) functies
3. Gerelateerd aan meettechnieken
4. Matrix voorstellingswijze



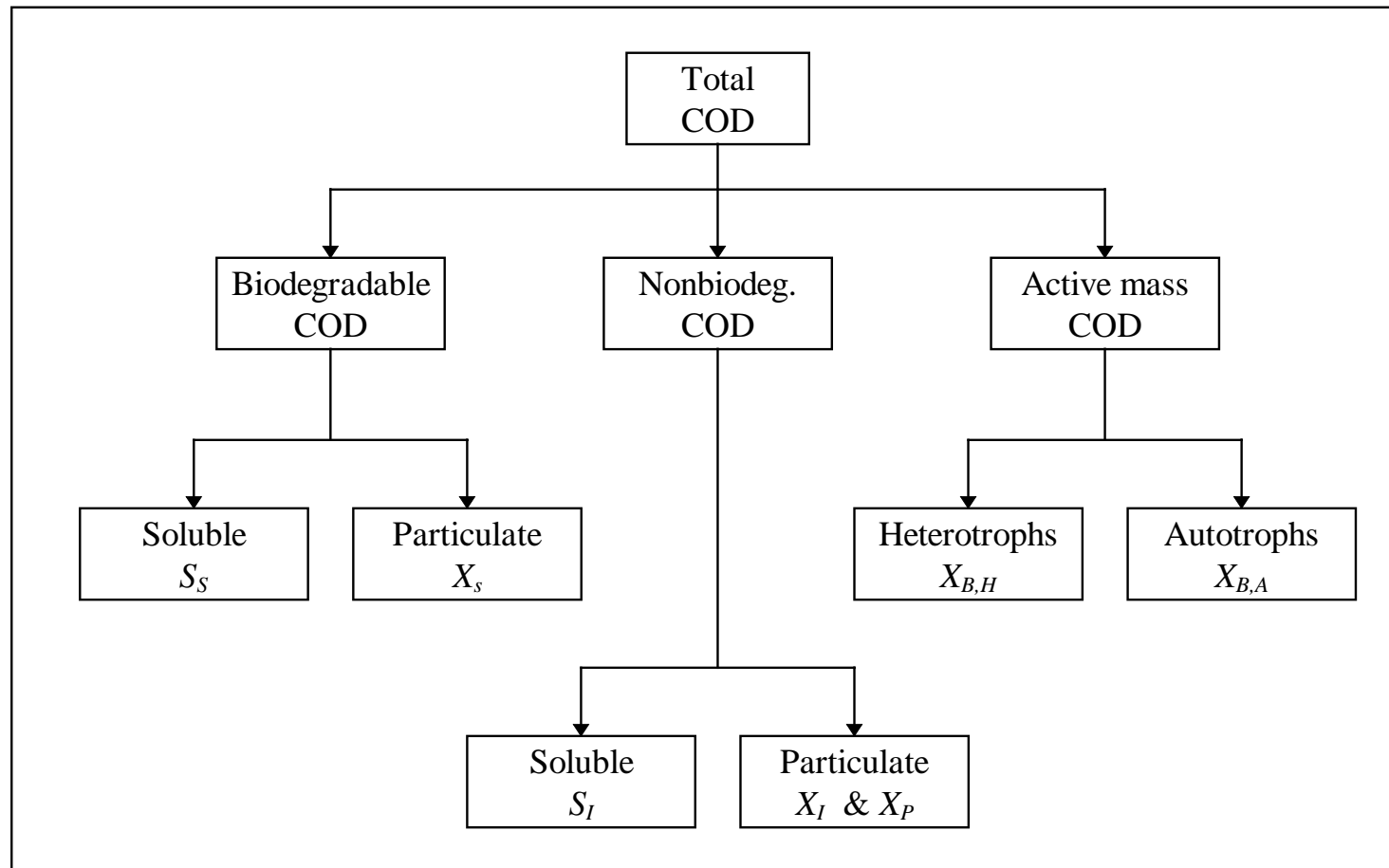
# *IAWQ Activated Sludge Models: Inleiding*

Standaard procedure bij modelbouw van bioreactor:

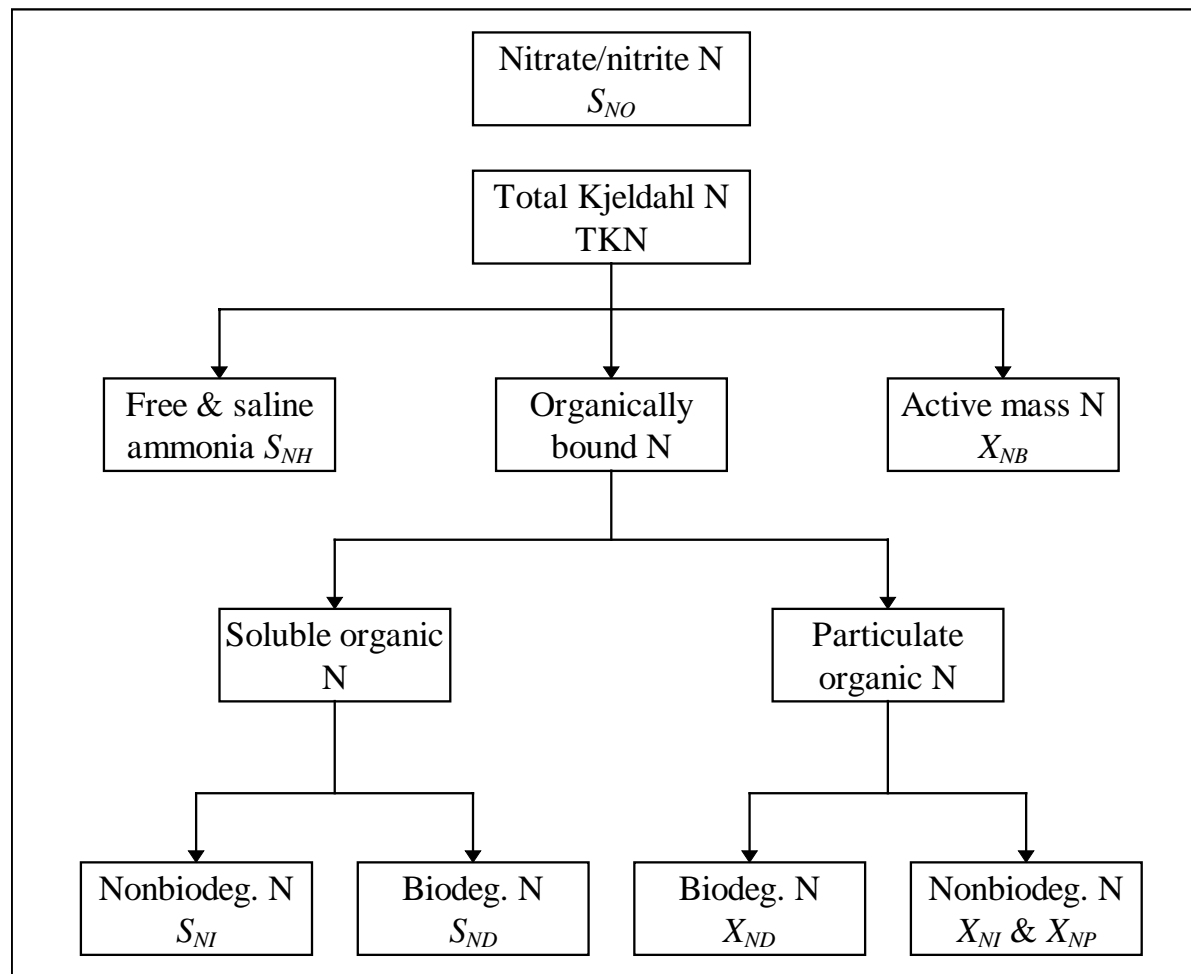
1. Componenten van belang
2. Processen (reacties tussen componenten)
3. Processnelheid
4. Stoëchiometrie



# Componenten van belang: I. COD



## Componenten van belang: II. Stikstof



## Gemodelleerde Processen

- *Aërobe groei heterotrofen:*  $S_S + S_O + S_{NH} \Rightarrow X_{BH}$
- *Anoxische groei heterotrofen:*  $S_S + S_{NO} + S_{NH} \Rightarrow X_{BH}$
- *Aërobe groei van autotrofen:*  $S_{NH} + S_O \Rightarrow S_{NO} + X_{BA}$
- *Afsterven van heterotrofen:*  $X_{BH} \Rightarrow X_S + X_P + X_{ND}$
- *Afsterven van autotrofen:*  $X_{BA} \Rightarrow X_S + X_P + X_{ND}$
- *Ammonificatie:*  $S_{ND} \Rightarrow S_{NH}$
- *Hydrolyse van COD:*  $X_S \Rightarrow S_S$
- *Hydrolyse van N:*  $X_{ND} \Rightarrow S_{ND}$



## *Processnelheid [ $\rho_j$ ]*

wordt uitgedrukt in eenheden biomassa waar mogelijk ( $\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$ )

bestaat uit kinetiektermen in

- ◇ eerste orde
- ◇ Monodfuncties
- ◇ “Switching functions”

## *Stoëchiometrie [ $v_{ij}$ ]*

wordt waar mogelijk uitgedrukt als  
massa van component omgezet per massa biomassa





# Modelvoorstelling

Heterotrofe groei in een batch reactor (geen transporttermen !):

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

noteer “switching function” termen !

Notatieconventie:       $X \rightarrow$  onoplosbare componenten  
                                  $S \rightarrow$  oplosbare componenten

subscripts               $B \rightarrow$  biomassa  
                                  $S \rightarrow$  substraat  
                                  $O \rightarrow$  zuurstof



# Modelvoorstelling in matrixvorm

Een eenvoudig voorbeeld: Heterotrofe groei en afsterving:

Component $i$	1	2	3	Processnelheid, $\rho_j$ $ML^{-3}T^{-1}$
$j$ 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 $ML^{-3}T^{-1}$	$r_i = \sum_j r_{ij} = \sum_j v_{ij} \rho_j$			
Stoichiometrische parameters: Opbrengstcoëfficiënt: $Y$	Substraat M(COD) $L^{-3}$	Biomassa M(COD) $L^{-3}$	Zuurstof M(-COD) $L^{-3}$	Kinetische Parameters: Max. Specifieke groeisnelheid: $\mu$ Affiniteitsconstante: $K_S$ Zuurstof switching constante: $K_O$ Afstervingscoëfficiënt: $b$



# Modelvoorstelling in matrixvorm: ASM1

Component $i$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	Processnelheid $\rho_j \text{ ML}^{-3}\text{T}^{-1}$
$j$ 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			$-\frac{1-Y_H}{2.86Y_H}$		$-i_{XB}$			$\frac{1-Y_H}{2.86 \cdot 14 \cdot Y_H} - \frac{i_{XB}}{14}$	$\mu^{\circ}_H \cdot X_{B,H}$
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 omzettings-snelheden $\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$	$r_i = \sum_j r_{ij} = \sum_j v_{ij} \rho_j$													
Stoichiometrische parameters: (zie Tabel 1)	Naamgeving, zie tekst Alle eenheden in $\text{ML}^{-3}$ (COD of N, afhankelijk van de variabele)													Kinetische Parameters: (zie Tabel 1)

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

$$\mu^{\circ}_H = \eta_s \mu_H^{\max} \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left( \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right)$$

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

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



## *Menging: Inleiding*

Conversiesnelheden  $r_{ij}$  hangen af van de concentraties aan:

- ✓ Substraten ( $S_S, S_{NH}, S_{NO}, X_S, S_{A...}$ )
- ✓ Actieve Biomassa ( $X_{BH}, X_{BA}, X_{PAO}, ...$ )

die zelf worden bepaald door de elementaire massabalansen

$$\frac{d(VC)}{dt} = Q_{in} C_{in} - Q_{uit} C_{uit} + r_A V$$

die gelden voor een klein volume-element ...



## *Menging: Wat theorie*

Het “*tanks-in-serie model*”:

Koppeling van ideaal gemengde tanks wordt verondersteld de hydraulica van een reactorsysteem adequaat te beschrijven

- ✓ sterk ingeburgerd in de waterzuiveringsmodelbouw,
- ✓ beschrijving met gewone differentiaalvergelijkingen,
- ✓ equivalent met de beschrijving door partieel differentiaalvergelijkingen van het advection/dispersie type die in riool- en riviermodellen sterk doorgang hebben gevonden.
- ✓ Veel eenvoudiger dan 3D PDE's op te lossen met CFD



## *Activiteit voor de Modelbouwer:*

Bepaal het aantal tanks nodig voor de beschrijving van de reactor

1. Empirische vergelijking (Chambers and Thomas, 1985) :

$$N = \frac{7.4}{WH} L Q_{in} (1+r)$$

met :

L = lengte aeratietank (m) ;

W = breedte aeratietank (m) ;

H = diepte aeratietank (m) ;

Q<sub>in</sub> = gemiddelde influentdebiet (m<sup>3</sup>/s) ;

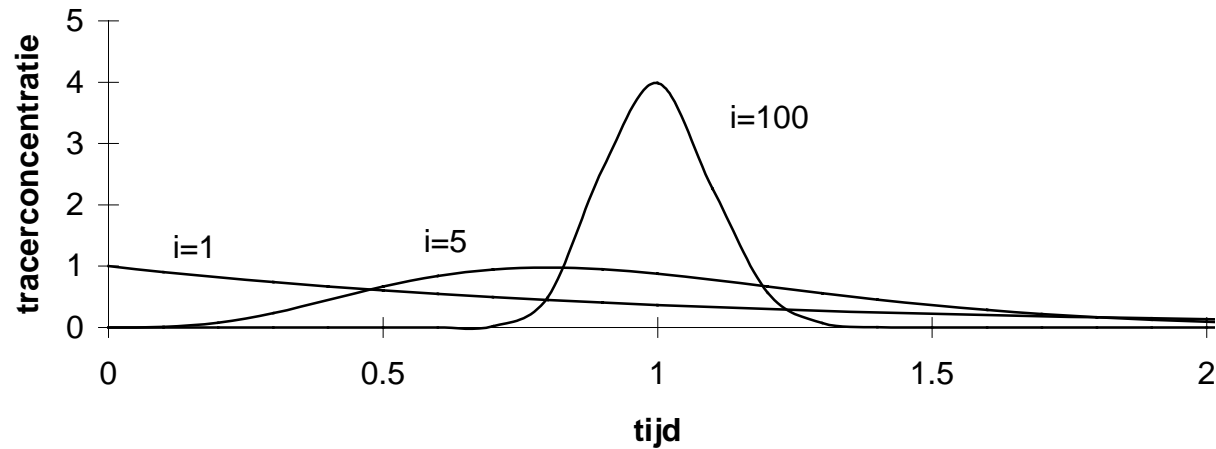
r = recycle ratio (-).

2. Experimentele bepaling: “INERTE TRACER TEST”



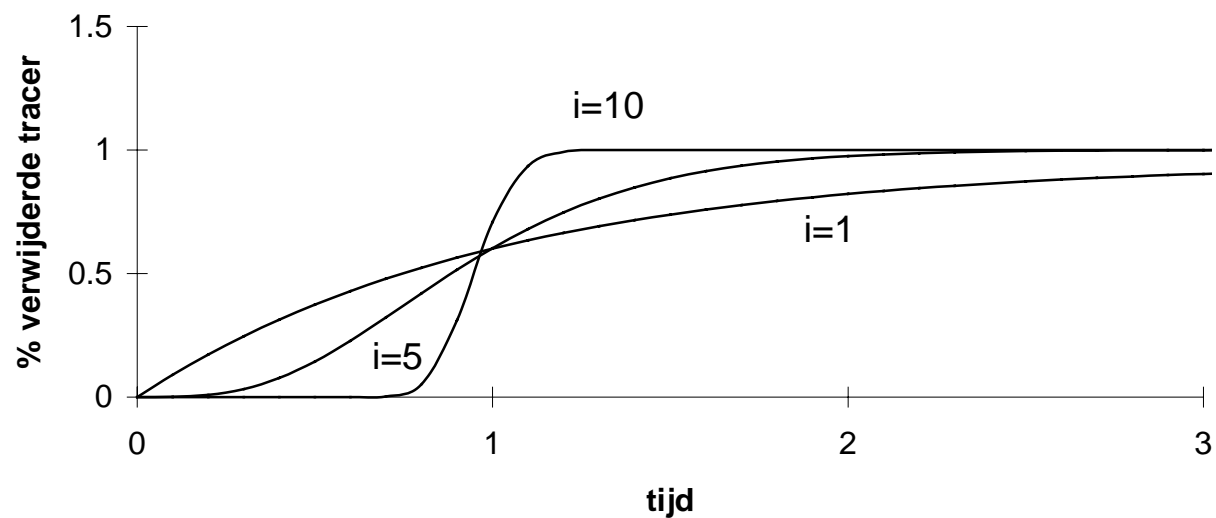
# De klassieke Levenspiel figuurtjes

Systemrespons op pulsinjectie: C-curve



# *De klassieke Levenspiel figuurtjes (cont'd)*

**Systeemrespons op pulsinjectie: F-curve**





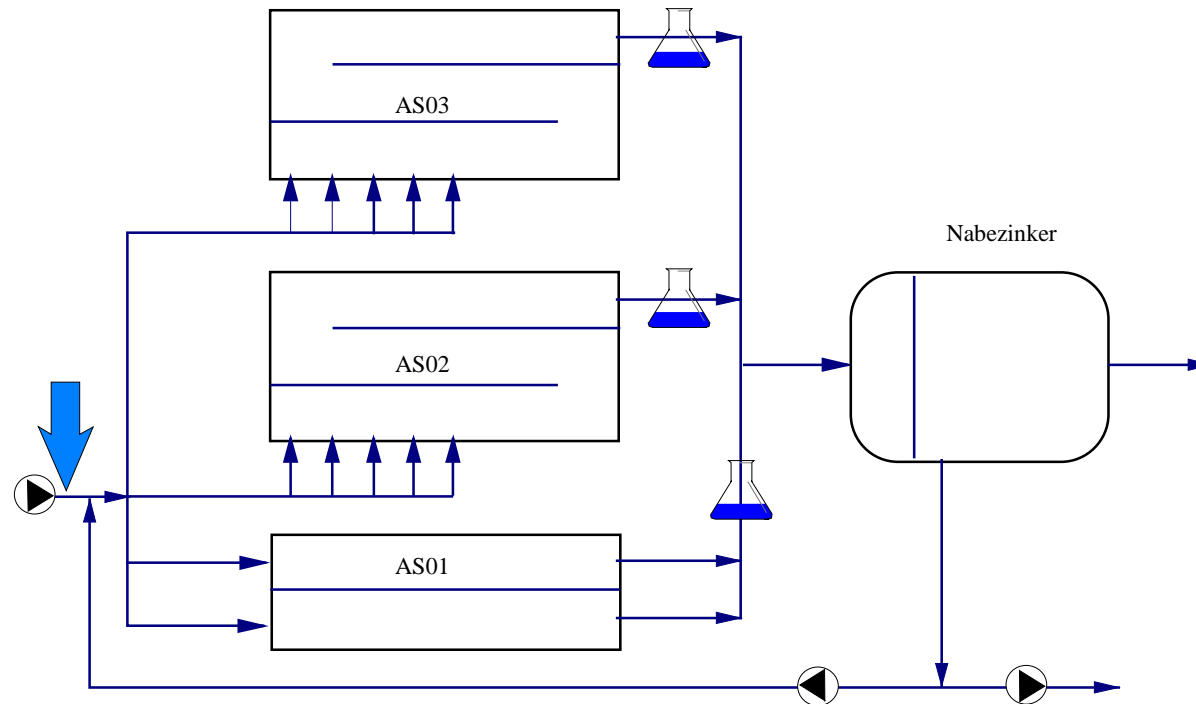
## *Inerte Tracer Tests*

Neem een inerte verbinding die,  
na toevoeging aan de reactor op puls- of stap-wijze,  
nauwkeurig terug te vinden is in de reactor  
zodat de respons van het reactorsysteem kan geïnterpreteerd  
worden in termen van aantal tanks in serie  
Tracers voor vloeistof, gas en slibfase zijn beschikbaar



# Praktisch Voorbeeld

## Industriële Waterzuivering: Lithium

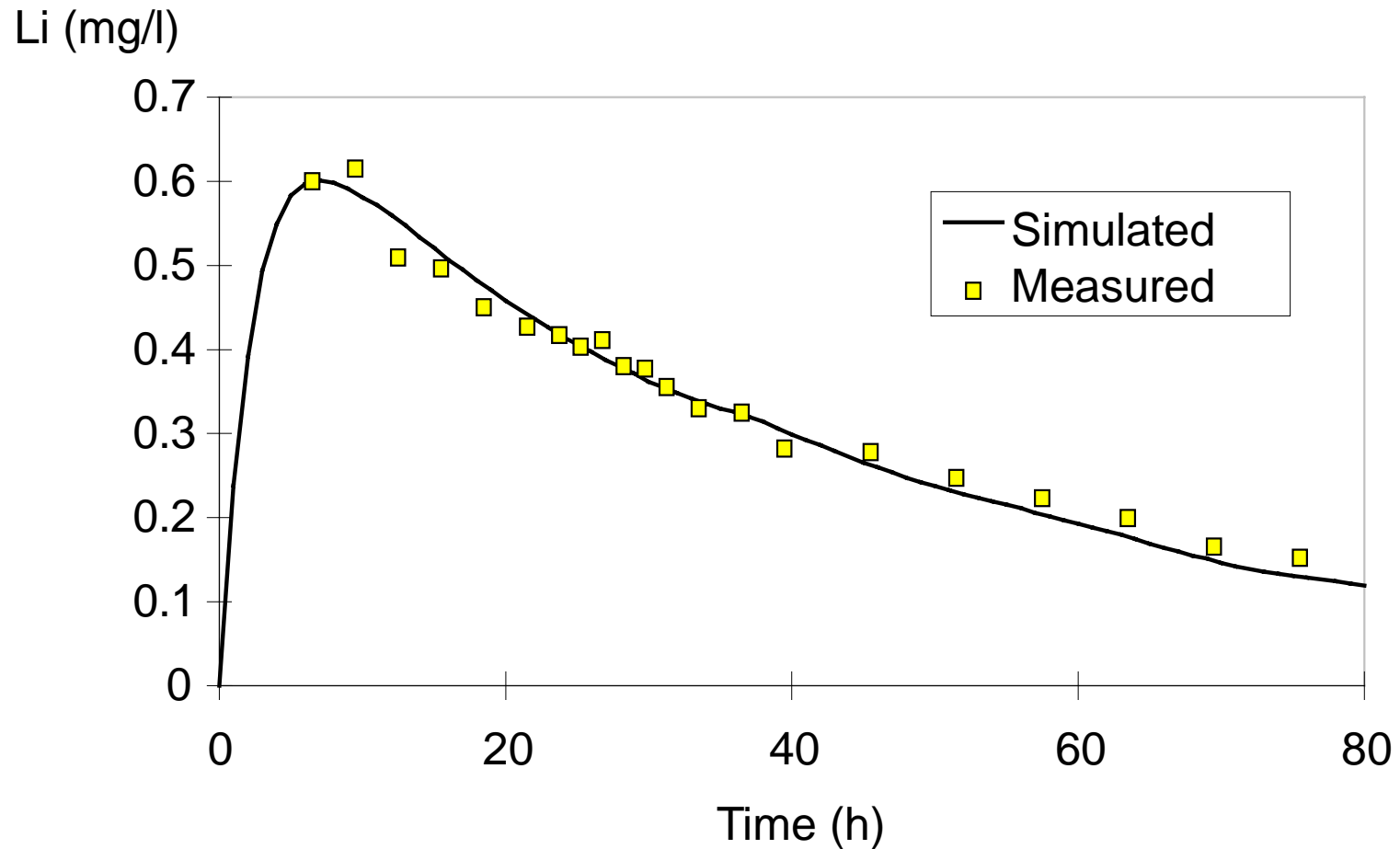


$$V = 2 \times 3050 \text{ m}^3 \text{ en } 2 \times 950 \text{ m}^3; Q_{in} = 110 \text{ m}^3/\text{h}, Q_{rec} = 125 \text{ m}^3/\text{h}$$

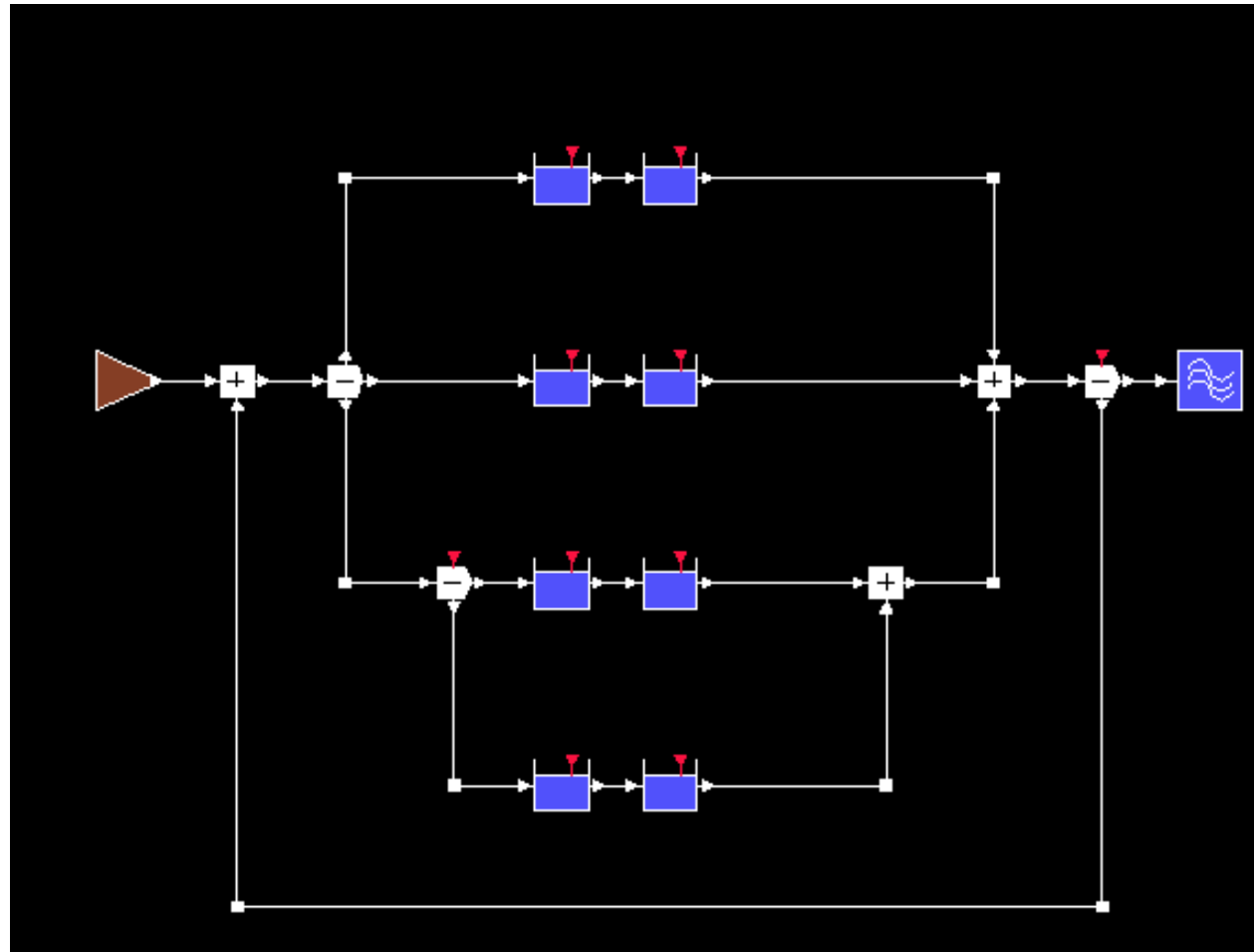


## Best fit $N=2: V_1 \neq V_2$

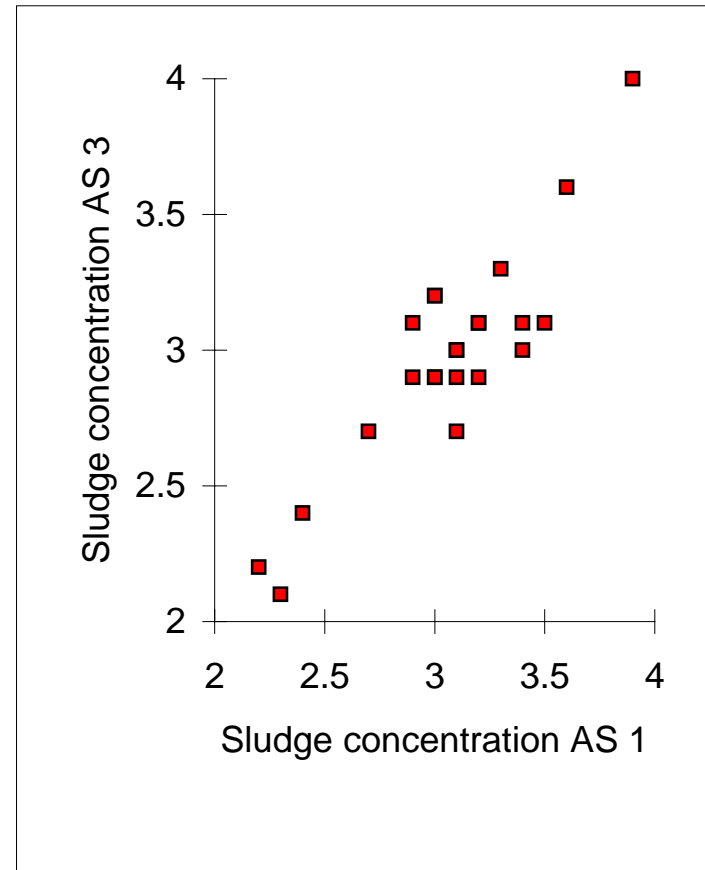
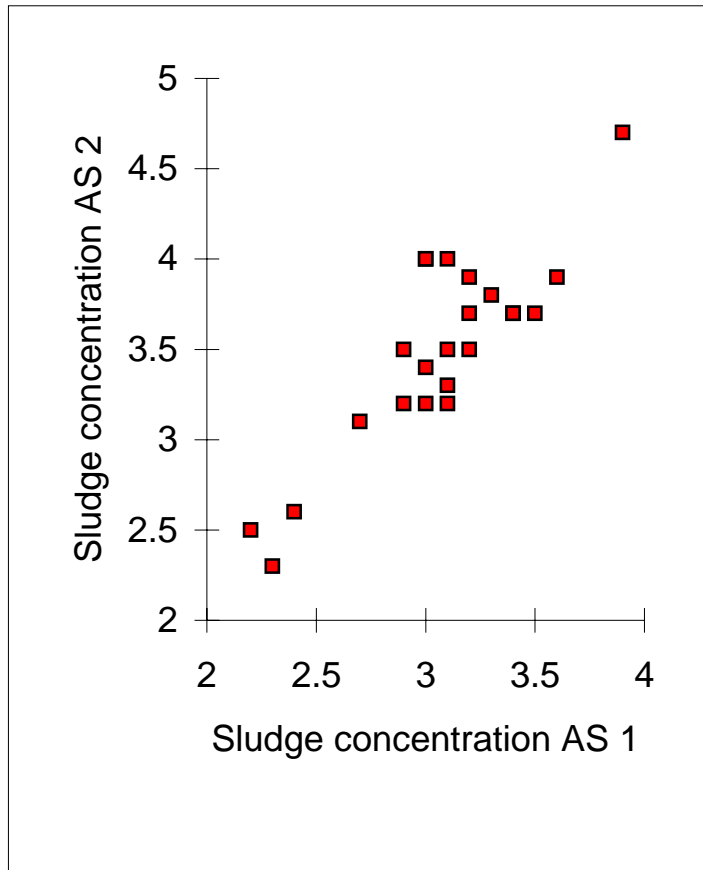
Li concentration in effluent of AS01



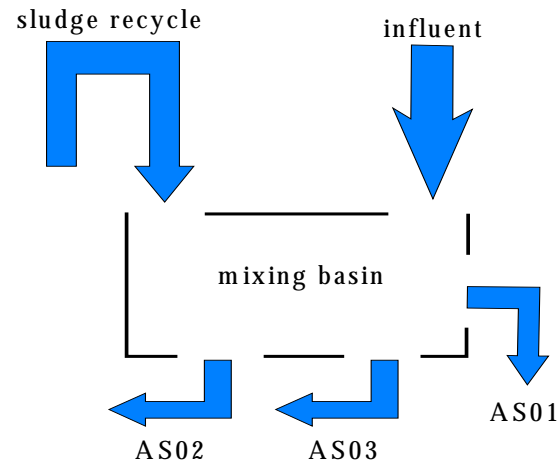
# Implementatie in Simulator



# Metingen van slibconcentraties in de tanks



## *Niet ideale menging retour/influent*

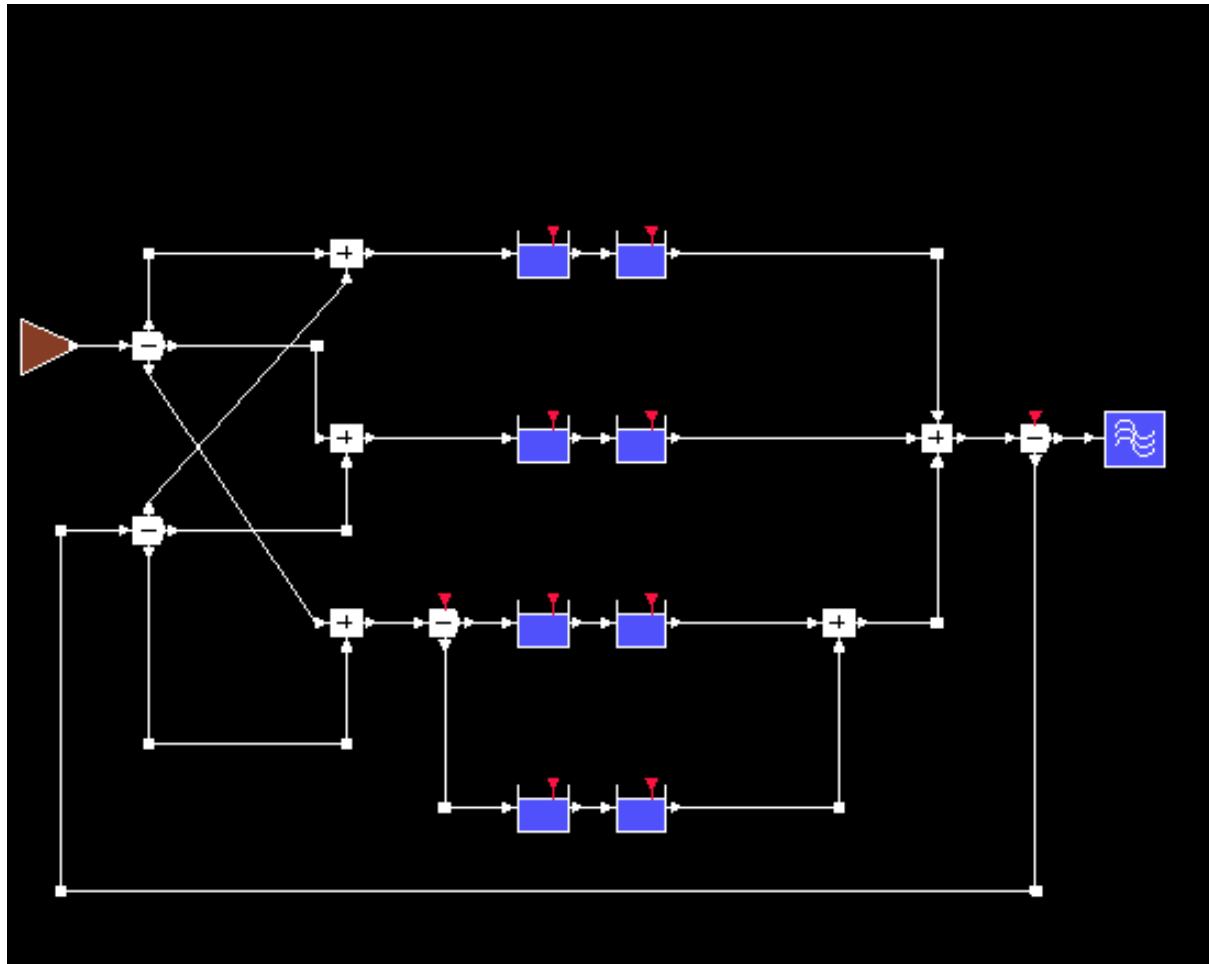


*Uit massabalansen/concentraties volgt:*

	AS01	AS02	AS03
influent fractions $f_{in}$	0.36	0.24	0.4
sludge fractions $f_{sl}$	0.345	0.31	0.345



# Implementatie in Simulator



## *Menging: Conclusies*

Technieken zijn beschikbaar:

Tracer test:

- ✓ 3x hydraulische verblijftijd,
- ✓ 20-50 meettijdstoppen
- ✓ numerieke interpretatie nodig vanwege retourstromen
- ✓ extra metingen (DO, MLSS) kunnen extra info opleveren
- ✓ non-equal volume nodig voor adequate beschrijving

Empirische vergelijking of ervaringsregels ook mogelijke aanpak





## *Nabezinking: Basisvergelijking PDE(z,t)*

Driedimensionaal proces ééndimensionaal benaderd:

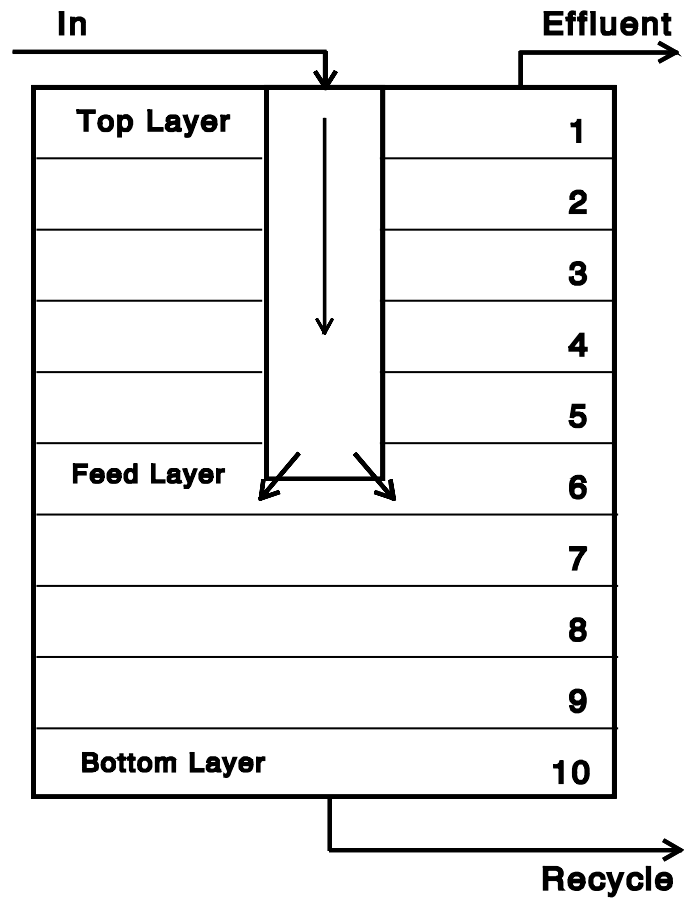
Basisvergelijking: 
$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{\partial(D\partial X)}{\partial z^2} - \frac{\partial(vX)}{\partial z} - RX$$

Vereenvoudigingen:

1.  $X$  in een horizontaal vlak is uniform;
2. Geen verticale dispersie ( $D=0$ );
3. Geen significante biologische reactie ( $R=0$ );
4. de massaflux kan niet groter zijn dan
  - de massaflux die fysisch door dat volume kan bewegen
  - de massaflux die er onmiddellijk onder kan bewegen;
5. de gravitaire bezinkingssnelheid is enkel een functie van  $X$



# *Nabezinking: Discretisatie van PDE (Vitasovic, 1986)*



## Nabezinking: Discretisatie van PDE

Lagen onder Feed Layer (advectieve + gravitaire flux):

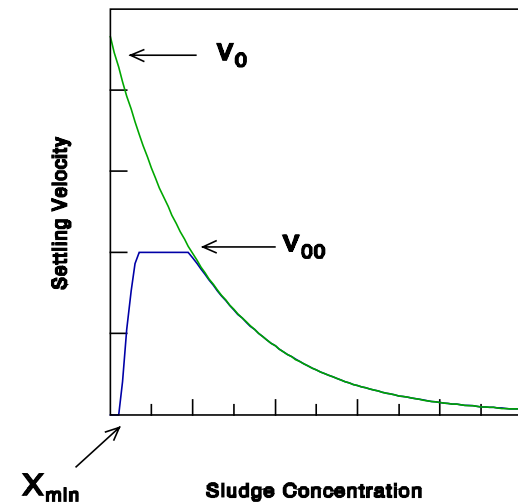
$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{Q_u}{A} \frac{(X_{i-1} - X_i) + \min(J_{s,i}, J_{s,i-1}) - \min(J_{s,i}, J_{s,i+1})}{z_i}$$

waarin de gravitaire flux:  $J_{s,i}(X_i) = v_{s,i}(X_i) \cdot X_i$

met  $v_{s,i}$  gegeven door:

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

met  $X_{\min} = f_{ns} X_f$



## *Nabezinking: Discretisatie van PDE (cont'd)*

Lagen boven Feed Layer:

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

Feed Layer:

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



# *Conclusies*

De doorgenomen modellen voor actief slib:

- ◇ Activated Sludge Model Nr1 aanpak
- ◇ Praktische beschrijving van transportverschijnselen
- ◇ Nabezinker lagenmodel

laten toe om alle processen in actiefslibsystemen redelijk te beschrijven met behulp van *gewone differentiaalvergelijkingen*

en ze dus op te lossen

- (i) binnen redelijke rekentijden
- (ii) met bestaande software

*Modelgebaseerde Optimalisatie is nu echt mogelijk*

