

Imre Takács

EXPERIMENTS
IN
ACTIVATED SLUDGE MODELLING

Thesis submitted in fulfillment of the requirements for the degree of Doctor (Ph.D.) in Applied
Biological Sciences

Dutch translation of the title:
EXPERIMENTEN IN ACTIEFSLIBMODELLERING

Please refer to this work as follows:
Takács I. (2008) Experiments in Activated Sludge Modelling. PhD Thesis, Ghent University, Belgium, pp 267

ISBN-number: 978-90-5989-222-4

The author and the promoter give the authorisation to consult and copy parts of this work for personal use only. Every other use is subject to copyright laws. Permission to reproduce any material contained in this work must be obtained from the author.

SUMMARY

The fundamentals of the activated sludge process are well understood and described in a series of mathematical models that predict oxygen demand, sludge production and many other process parameters. However, for the designer or operator, the whole wastewater treatment plant involves more than the activated sludge process itself. What part of the mixed liquor is in the settler at any given time? Effluent solid particles contribute significantly to effluent quality, why cannot their concentration be calculated from Stokes law? Under what conditions will sludge stored in the clarifier lead to gross clarifier failure? Activated sludge models necessarily treat bioreactors as “ideally” mixed – while, from the viewpoint of a microorganism inhabiting the center of an activated sludge floc, conditions may be quite different from those its neighbour at the surface of the floc experiences. Under what conditions do water chemistry and pH have an effect on biological and chemical processes and how to take that into account on a plant-wide basis? Iron or aluminium salt dosing does result in lowered effluent phosphate concentration – why is the residual concentration so variable and not depending directly on the dosage alone? How to size and operate an activated sludge system with powdered activated carbon dosage? How do adsorption and adaptation in this environment affect effluent quality? Respirograms contain important information about the component concentrations and degradation kinetics that is “obvious” to an expert from the shape of the respirogram– is there a way to evaluate those characteristic shapes and inflection points without detailed simulation and numerical optimization? Does sensitivity analysis give us practical information we would miss without it? What is the exact “age” (SRT) of the solids in the activated sludge reactor four days after the wastage has been stopped? (Cannot divide by zero for four days...). Influent COD/VSS ratios are highly variable – what is the composition of influent substrate in municipal wastewater, how does it relate to its lipid/carbohydrate/protein content? What does elemental balancing tell us about the stoichiometry of the Anammox growth reaction?

This dissertation is an attempt to answer these seemingly very diverse questions, in four main parts: physical, chemical and biological processes, as well as theoretical aspects of wastewater modelling.

In **Part One, Physical processes**, a dynamic model of the clarification-thickening process is presented. The model, the first of its kind, is able to describe the complete solids profile in a one-dimensional representation of the clarifier, including effluent solids, sludge blanket height and return solids concentration. It is shown that the average settling velocity of the discrete particles in the effluent can be related to their concentration. The modified (double-exponential) Vesilind settling function makes use of the relationship that exists between the concentration and the particle size distribution of effluent particles to predict effluent solids. A further extension of the Vesilind function with two logistic correction terms leads to a generalized settling function that includes discrete, zone and compression settling. Such a general function can be implemented in a layered settler model independent of the number of layers. A low number of layers was traditionally used to mimic the effect of compression through numerical “blurring”. The accuracy of the Vesilind settling function depends on proper evaluation of the interface vs. time slopes found from Zone Settling

Velocity tests. A contribution is made in the form of an automatic method to extract the slopes after fitting an empirical function, alleviating the need to manually select the linear portion of the curve.

A major deficiency in activated sludge modelling is the inability of models to predict settling properties of the activated sludge. A floc model that describes substrate and DO gradients inside the microenvironment of activated sludge flocs, and incorporates non-random growth patterns of filamentous organisms is developed. The model can predict circumstances conducive to low DO and low F/M bulking depending on process conditions.

In **Part Two, Chemical processes**, a general pH model for municipal wastewater is developed. pH plays a fundamental role in biological and chemical reactions as well as in gas transfer, and its incorporation as the general underlying environment for activated sludge, digestion or sidestream models is a major step forward in reliable whole-plant modelling. Dissociation and solubility constants, as well as various numerical techniques for the solution of the complex algebraic equations are well-known in the literature. The contribution consists of selecting the required chemical species and most important precipitates occurring in municipal wastewater, verifying selected dissociation and solubility constants, and developing a practical method that uses influent pH and alkalinity, as well as a mixture of equilibrium and kinetic expressions and the Supersaturation Index, to bring the computational effort for pH calculation to a practical level.

In an investigation of an empirical, equilibrium based chemical phosphorus removal model, important kinetic effects are found affecting phosphorus residuals that cannot be described using pure equilibrium chemistry principles. An extensive set of experiments is used to support a new surface complexation model, with a new key parameter (Active Site Factor). Variation of the Active Site Factor, essentially the number of reactive oxygen atoms per iron atom, enables the model to describe the effect of mixing at dosage point, and that of floc structure and age, on residual phosphorus concentration. The equilibrium constants of the new model are not empirically fitted, but are based on literature values that are widely accepted and validated.

In **Part Three, Biological processes**, an extension of an early ASM model with adsorption and microbial adaptation is described. These processes play a key role in the Powdered Activated Carbon Treatment (PACT) system, particularly when applied to industrial wastewaters. The model has been calibrated to a series of batch, bench- and full-scale experiments.

Estimation of model parameters using a respirogram is an accepted method to determine influent state variable concentrations, kinetic and stoichiometric parameter values. An alternative, Direct Respirogram Evaluation (DRE) method is described that relies on the characteristic shape (as determined by first and second derivatives found in multi-component respirograms) and does not depend on numerical optimization techniques. Understanding the effect of all model parameters is sometimes difficult due to the interlinked nature of the ASM structure. A step-by-step procedure of a sensitivity analysis serves as a guideline for practitioners, highlighting key relationships in the model structure.

In **Part Four, Theoretical aspects**, an ordinary differential equation (ODE) is developed that can be numerically integrated to provide the true age of solids in the reactor. This equation based on an age balance forms the theoretical background to the SRT calculation in steady-state, but is also applicable in dynamically changing conditions or when there is no wastage at all. It is shown that instead of wastage, the true age of the biomass depends more on how much fresh solids form daily.

In other theoretical aspects of modelling, it is shown how elemental balancing can be used to extract new information about the composition of influent state variables, based on standard COD and VSS measurements available. It is shown that influent inerts (X_I) likely have lower and less varying COD/VSS ratios than substrate (X_S). An elementally balanced version of ASM1 (including N_2 , CO_2 and H_2O state variables) is presented, with the proposition to include elemental balancing in biokinetic modelling. Elemental balancing is used to investigate the Anammox growth reaction and correct a stoichiometric coefficient in the literature. A simple, generalized method is presented that can be used to develop stoichiometric coefficients of biokinetic models.

These results, although seemingly scattered in very different areas of wastewater plant modelling, all improve our understanding of how the whole plant works, and extend the toolkit that is available for the design engineer or operator to get the most out of his installation.

SAMENVATTING

De grondbeginselen van het actiefslibproces worden goed begrepen en in een reeks van wiskundige modellen beschreven die de zuurstofvraag, slibproductie en veel andere procesparameters voorspellen. Nochtans, voor de ontwerper of de exploitant, impliceert de gehele afvalwaterzuiveringsinstallatie meer dan het actiefslibproces alleen. Welk deel van het slib bevindt zich op een gegeven moment in de nabezinktank? Zwevende stoffen in het effluent dragen beduidend bij tot de effluentkwaliteit bijdragen, waarom kan hun concentratie niet worden berekend met de wet van Stokes? In welke omstandigheden zal het slib opgeslagen in de nabezinker leiden tot een volledige faling van de nabezinker? Actiefslibmodellen beschouwen bioreactoren noodzakelijkerwijs als “ideaal gemengd” - terwijl, vanuit het gezichtspunt van een micro-organisme dat zich in het centrum van een actiefslibvlok bevindt, de voorwaarden vrij verschillend kunnen zijn van die van zijn buur aan het oppervlak van de actiefslibvlok. Onder welke omstandigheden hebben waterchemie en pH een effect op biologische en chemische processen en hoe moeten deze aspecten in overweging genomen worden in een model van een volledige installatie? Dosering van ijzer of aluminiumzouten resulteert in verminderde concentraties van fosfaat in het effluent - waarom is de residuele fosfaatconcentratie zo veranderlijk en niet direct afhankelijk van die dosering? Hoe moet een waterzuiveringsinstallatie met actiefkooldosering ontworpen worden en bedreven worden? Hoe beïnvloeden de adsorptie en aanpassing van het actiefslib in dit milieu de effluentkwaliteit? Respirogrammen bevatten belangrijke informatie over de concentraties aan afvalwatercomponenten en de degradatiekinetiek die door een expert uit de vorm van een respirogram kan afgeleid worden - is er een manier om die kenmerkende vormen en buigpunten zonder gedetailleerde simulatie en numerieke optimalisatie te bekomen? Geeft de gevoeligheidsanalyse ons praktische informatie die wij zonder de analyse zouden missen? Wat is de juiste "leeftijd" (SRT) van het slib in een actiefslibreactor vier dagen nadat de slibspui is onderbroken? (Er kan niet door nul gedeeld worden gedurende vier dagen...). De influent CZV/VZS verhoudingen zijn hoogst veranderlijk - wat is de samenstelling van influent substraat in huishoudelijk afvalwater en hoe verhoudt het zich met de vet/koolhydraat/eiwit-samenstelling? Wat vertellen elementaire balansen ons over de stoichiometrie van de Anammox-groeireactie?

Dit doctoraal proefschrift is een poging om deze schijnbaar zeer diverse vragen, in vier delen te beantwoorden: fysische, chemische en biologische processen, naast theoretische aspecten van de modellering van afvalwaterzuiveringsinstallaties.

In **Deel Een, Fysische processen**, wordt een dynamisch model van het klarings/indikkingsproces voorgesteld. Het model, eerste van zijn soort, kan het volledige slibconcentratieprofiel in een ééndimensionale beschrijving van de nabezinker berekenen, met inbegrip van de effluent zwevende stoffen, de slibdekenhoogte en de concentratie van de zwevende stoffen in de terugvoer. Er is aangetoond dat de gemiddelde bezinkingsnelheid van de individuele partikels in het effluent afhankelijk is van hun concentratie. De gewijzigde (dubbel-exponentiële) bezinkingsfunctie van Vesilind maakt gebruik van het verband dat tussen de concentratie en de grootteverdeling van de

effluentpartikels bestaat om de effluent zwevende stoffen te voorspellen. Een verdere uitbreiding van de Vesilind-functie met twee logistische correctietermen leidt tot een algemene bezinkingsfunctie die de discrete, de zone- en de compressie-bezinking omvat. Een dergelijke algemene functie kan in een gelaagd bezinkermodel onafhankelijk van het aantal lagen geïmplementeerd worden. Een laag aantal lagen werd traditioneel gebruikt om het effect van compressie door numerieke "dispersie" na te bootsen. De nauwkeurigheid van de Vesilind bezinkingsfunctie hangt echter af van een juiste evaluatie van de bezinkingscurven die resulteren uit batch bezinkingsexperimenten. Een bijdrage wordt geleverd in de vorm van een automatische methode om de hellingen af te leiden door het aanpassen van een empirische functie, waardoor de behoefte wegvalt om het lineaire gedeelte van de bezinkingscurve manueel te selecteren.

Een belangrijke beperking in actiefslibmodellering is het onvermogen van modellen om bezinkingseigenschappen van het actiefslib te voorspellen. Een vlokmodel werd ontwikkeld dat substraat- en zuurstofgradiënten binnen het micromilieu van actiefslibvlokken beschrijft, naast niet-willekeurige groeipatronen van filamenteuze organismen. Het model kan de omstandigheden voorspellen die bevorderlijk zijn voor lage zuurstof en lage F/M "bulking", afhankelijk van de procesvoorwaarden.

In **Deel Twee, Chemische processen**, wordt een algemeen pH-model voor huishoudelijk afvalwater ontwikkeld. pH speelt een fundamentele rol in biologische en chemische reacties evenals in gasoverdracht, en zijn integratie als algemeen onderliggende conditie voor actiefslib-, vergistings- of zijstroombehandelingsmodellen is een belangrijke stap voorwaarts in betrouwbare modellering van volledige zuiveringsinstallaties. De dissociatie- en oplosbaarheidsconstanten, evenals diverse numerieke technieken voor de oplossing van de complexe algebraïsche vergelijkingen zijn reeds goed beschreven in de literatuur. De bijdrage bestaat uit het selecteren van de vereiste chemische species en de belangrijkste neerslagen die in huishoudelijk afvalwater voorkomen, de verificatie van de geselecteerde dissociatie- en oplosbaarheidsconstanten, en het ontwikkelen van een praktische methode die gebruik maakt van de influent-pH en -alkaliniteit, evenals een set van evenwicht- en kinetische uitdrukkingen en de Oververzadigingsindex, om de rekentijden nodig voor pH berekening op een praktisch niveau te brengen.

In een studie van een empirisch, op evenwichten gebaseerd model van de chemische fosforverwijdering, worden belangrijke kinetische effecten vastgesteld die de residuele fosforconcentratie beïnvloeden en die niet kunnen worden beschreven op basis van de principes van de evenwichtschemie alleen. Een uitgebreide reeks experimenten werd gebruikt om een nieuw oppervlakte-complexvormingsmodel op te stellen, met een nieuwe zeer belangrijke parameter (de Actieveplaatsfactor). De variatie van de Actieveplaatsfactor, in essentie het aantal reactieve zuurstofatomen per ijzeratoom, laat het model toe om het effect van de menging op het doseringspunt, en de vlokstructuur en -leeftijd, op de residuele fosforconcentratie te beschrijven. De evenwichtsconstanten van het nieuwe model worden niet empirisch gefit, maar zijn gebaseerd op literatuurwaarden die algemeen worden aanvaard en gevalideerd.

In **Deel Drie, Biologische processen**, wordt een uitbreiding van een vroeg actiefslibmodel (ASM) met adsorptie en microbiële aanpassing beschreven. Deze processen spelen een belangrijke rol in poeder actiefkool waterbehandelingssystemen (PACT), in het bijzonder wanneer toegepast op industriële afvalwaters. Het model is gekalibreerd aan een reeks van batch, lab- en volschalige experimenten. De schatting van modelparameters uit een respirogram is een aanvaarde techniek om de influentconcentraties van de toestandsvariabelen, de kinetische en de stoechiometrische parameterwaarden te bepalen. In dit werk wordt een alternatieve, Directe Respirogram Evaluatiemethode (DRE) beschreven die zich op de kenmerkende vorm baseert (zoals bepaald door

de eerste en tweede afgeleiden te nemen van respirogrammen met meerdere componenten) en niet van numerieke optimaliseringstechnieken afhangt. Inzicht in de effecten van alle modelparameters is soms moeilijke te bekomen door de onderlinge afhankelijkheden in de ASM structuur. Een stap-voor-stap procedure voor gevoeligheidsanalyse, die de zeer belangrijke verbanden in de modelstructuur benadrukt, werd opgesteld als richtlijn voor de mensen in de praktijk.

In **Deel Vier, Theoretische aspecten**, wordt een gewone differentiaalvergelijking ontwikkeld die numeriek kan worden geïntegreerd om de echte slibleeftijd van de zwevende stoffen in de reactor te berekenen. Deze vergelijking die op een leeftijdsbalans wordt gebaseerd, vormt ook de theoretische achtergrond voor de berekening van de slibleeftijd in evenwichtstoestand, maar is nu ook toepasselijk onder dynamisch veranderende voorwaarden of wanneer er bijvoorbeeld geen enkele slibspui is. Er is aangetoond dat de echte leeftijd van de biomassa niet zozeer afhangt van de slibspui maar wel van de hoeveelheid nieuwe zwevende stoffen die zich dagelijks vormen. In andere theoretische aspecten van modellering, wordt bewezen hoe elementenbalansen kunnen worden gebruikt om nieuwe informatie over de samenstelling van de influent toestandsvariabelen te halen gebaseerd op standaard beschikbaar CZV- en VZS-metingen. Ook wordt aangetoond hoe inerte stoffen in het influent (X_I) waarschijnlijk lagere en minder variabele CZV/VZS-verhoudingen vertonen dan particulier substraat (X_S). Een elementengebalanceerde versie van ASM1 (met inbegrip van N_2 , CO_2 en H_2O toestandsvariabelen) wordt voorgesteld, met de suggestie om in de toekomst elementenbalansen standaard in te bouwen in toekomstige biokinetische modellen. Element-balancing werd gebruikt om de Anammox groeireactie te onderzoeken en een in de literatuur gerapporteerde stoichiometrisch coëfficiënt te corrigeren. Een eenvoudige, veralgemeende methode werd voorgesteld die kan gebruikt worden voor het berekenen van stoichiometrische coëfficiënten van biokinetische modellen.

Deze resultaten, hoewel schijnbaar sterk verspreid over zeer verschillend gebieden van de modellering van afvalwaterzuiveringsinstallaties, laten ons echter wel toe ons inzicht in de werking van gehele installaties te verhogen, en de toolkit die beschikbaar is voor de procesingenieur of de operator te verbeteren zodat deze het meest uit een installatie kunnen halen.

RESUME

Les principes fondamentaux des procédés à boues activées sont bien compris et décrits dans une suite de modèles mathématiques capables de prédire la demande en oxygène, la production de boues et bien d'autres paramètres du procédé. Cependant, pour l'ingénieur concepteur ou l'exploitant, la station de traitement des eaux usées ne se réduit pas au seul procédé à boues activées. Quelle fraction de la liqueur mixte se trouve dans le clarificateur à un instant donné ? Les matières en suspension ont un impact significatif sur la qualité de l'eau traitée; pourquoi ne peut-on pas prédire leur concentration avec la loi de Stokes ? Dans quelles conditions les boues stockées dans le clarificateur vont-elles provoquer son débordement et des pertes de boues ? Les modèles de boues activées considèrent que les bioréacteurs sont parfaitement mélangés, alors que du point de vue d'un microorganisme, les conditions régnant au centre d'un floc peuvent être très différentes de celles à la surface du floc. Dans quelles conditions la chimie de l'eau et le pH ont-ils un effet sur les processus biologiques et chimiques, et comment représenter ceci au niveau de la station entière ? Les sels de fer ou d'aluminium réduisent la concentration de phosphates dans l'eau traitée, mais pourquoi la concentration résiduelle de phosphates est-elle si variable et pas directement fonction du seul dosage ? Comment dimensionner et exploiter un procédé à boues activées avec addition de charbon actif en poudre ? Comment les phénomènes d'adsorption et d'adaptation affectent-ils la qualité de l'eau traitée ? Les respirogrammes contiennent de l'information importante sur la composition des eaux usées et les cinétiques de dégradation qu'un expert peut extraire de la forme de la courbe, mais y a-t-il moyen d'interpréter les formes caractéristiques et les points d'inflexion sans le recours de simulations approfondies et de l'optimisation mathématique ? Les analyses de sensibilité nous donnent-elles des informations pratiques qu'on ne pourrait obtenir autrement ? Quel est l'âge exact des particules dans un réacteur à boues activées après quatre jours sans extraction (puisque'on ne peut pas diviser par zéro) ? Les ratios DCO/MVS des eaux usées sont très variables : quelle est la composition des substrats des effluents urbains, et quelle est sa relation avec les teneurs en lipides/glucides/protéines ? Que nous apprennent les bilans de masse par élément chimique à propos de la stoechiométrie des réactions de croissance dans le procédé Anammox ?

Ce mémoire tente d'apporter des réponses à ces questions très diverses en apparence, avec quatre parties principales: processus physiques, chimiques, et biologiques, et enfin aspects théoriques de la modélisation du traitement des eaux usées.

Dans la **partie I, Processus physiques**, un modèle dynamique des processus de clarification/épaississement est présenté. Ce modèle, premier en son genre, est capable de décrire le profil complet de concentrations en matières en suspension (MES) dans une représentation unidimensionnelle du clarificateur, y compris la concentration en MES de l'eau traitée, la hauteur du voile de boue, et la concentration de la boue recirculée. Il est démontré que la vitesse moyenne de décantation des particules individuelles de l'eau traitée peut être exprimée en fonction de leur concentration. Cette relation, qui sous-entend l'existence d'une relation entre la concentration et la granulométrie des particules, est incorporée dans l'équation de Vesilind modifiée (double

exponentielle), afin de pouvoir prédire la concentration en MES de l'eau traitée. Une seconde extension de la fonction de Vesilind avec deux termes de correction logistiques mène à une fonction de décantation généralisée qui inclut les phénomènes de décantation discrète, de décantation freinée, et de compression. Une telle fonction peut être utilisée dans un modèle de clarificateur en couches indépendamment du nombre de couches. Traditionnellement, un faible nombre de couches était défini pour pouvoir représenter les effets de la compression par un effet de "flou numérique". La précision de la fonction de Vesilind dépend de la détermination correcte des pentes de la hauteur de l'interface de la boue en fonction du temps mesurée au cours des tests de décantation freinée. Une méthode automatisée est proposée pour extraire les pentes en ajustant une fonction empirique sur les données, évitant ainsi de devoir sélectionner manuellement la portion linéaire des courbes de décantation.

Une limitation importante de la modélisation des boues activées est l'incapacité des modèles à prédire les propriétés de décantation de la boue. Un modèle décrivant les gradients de substrats et d'oxygène à l'intérieur de l'environnement microscopique des floes des boues activées, et incluant des motifs de croissance non-aléatoires d'organismes filamenteux, est développé. Le modèle est capable de prédire les circonstances qui conduisent au foisonnement dû à des carences en oxygène et à des faibles charges massiques.

Dans la **partie II, Processus chimiques**, un modèle général de pH est développé pour les eaux usées urbaines. Le pH joue un rôle fondamental dans les réactions biologiques et chimiques, ainsi que dans le transfert des gaz. Son incorporation pour définir les conditions chimiques du milieu aqueux dans les modèles de boues activées, de digestion et de traitement des retours concentrés en tête représente un pas majeur vers la modélisation fiable des stations de traitement au complet. Les constantes de dissociation et de solubilité sont bien établies dans la littérature, de même que diverses techniques numériques pour résoudre les équations algébriques complexes. La contribution apportée consiste à sélectionner les espèces chimiques requises et les principaux précipités pertinents pour les eaux usées urbaines, à vérifier les constantes de dissociation et de solubilité retenues, et à développer une méthode pratique utilisant les mesures de pH et d'alcalinité des eaux usées, une combinaison d'expressions d'équilibres chimiques et de cinétiques de réactions, et l'index de sursaturation, afin de ramener les demandes de calcul pour la détermination du pH à des niveaux acceptables en pratique.

Lors de l'étude d'un modèle empirique de déphosphatation chimique fondé sur des équilibres, des effets cinétiques importants sont identifiés qui affectent les concentrations résiduelles de phosphore et ne peuvent pas être décrits en utilisant uniquement des principes de chimie des équilibres. Un large ensemble d'expérimentations est utilisé pour développer un nouveau modèle de complexation de surface, avec un nouveau paramètre clé (Facteur de Sites Actifs). Les variations de ce facteur, qui représente essentiellement le nombre d'atomes d'oxygène réactifs par atome de fer, permettent au modèle de décrire l'effet du mélange au point d'injection, et celui de l'âge et de la structure des floes sur la concentration résiduelle de phosphore. Les constantes d'équilibre de ce nouveau modèle ne sont pas ajustées de manière empirique, mais correspondent aux valeurs de la littérature qui sont largement acceptées et validées.

Dans la **partie III, Processus biologiques**, une extension développée afin d'ajouter les processus d'adsorption et d'adaptation microbienne dans un des premiers modèles de boues activées est décrite. Ces processus jouent un rôle clé dans les systèmes à boues activées avec addition de charbon actif en poudre, particulièrement pour les eaux usées industrielles. Le modèle a été calé avec une série d'expériences en réacteur batch, pilote et sur site réel.

L'utilisation de la respirométrie est une méthode reconnue pour déterminer les concentrations des variables d'état de l'eau usée, et des paramètres cinétiques et stœchiométriques des modèles. Une méthode alternative d'évaluation directe d'un respirogramme est proposée, qui est fondée sur la forme caractéristique de la courbe (déterminée par les dérivées premières et secondes trouvées dans les respirogrammes à plusieurs composants) et ne dépend pas des techniques d'optimisation mathématique.

Comprendre les effets de tous les paramètres d'un modèle est parfois difficile à cause de la structure complexe des modèles de boues activées. Une procédure pas-à-pas pour conduire une analyse de sensibilité est décrite, qui peut servir de référence pour les applications pratiques en mettant en évidence les relations clés dans la structure du modèle.

Dans la **partie IV, Aspects théoriques**, une équation différentielle ordinaire pouvant être intégrée numériquement pour déterminer l'âge réel de la boue dans le réacteur est développée. Cette équation, issue d'un bilan pondéré de l'âge des particules, forme la base théorique pour le calcul de l'âge de boue en régime permanent, mais elle s'applique aussi dans des conditions dynamiques et même en l'absence d'extraction de boues. Il est démontré que l'âge réel de la biomasse dépend plus de la quantité de boue fraîche produite chaque jour que de la quantité extraite.

Concernant d'autres aspects théoriques de la modélisation, il est montré comment les bilans de masse par élément chimique (bilans élémentaires) peuvent être appliqués pour extraire de l'information nouvelle sur la composition des variables d'état des eaux usées en utilisant les concentrations disponibles en DCO et MVS. Il est démontré que la matière particulaire inerte des eaux usées (X_I) a probablement un ratio DCO/MVS plus faible et moins variable que le substrat particulaire (X_S). Une version modifiée de l'ASM1 est présentée, dans laquelle les bilans élémentaires sont fermés (en incluant les variables d'état N_2 , CO_2 et H_2O), et il est proposé d'inclure les bilans élémentaires dans la modélisation biocinétique en général. La méthode des bilans élémentaires est utilisée pour étudier la réaction de croissance de la biomasse du procédé Anammox et corriger un coefficient stœchiométrique de la littérature. Une méthode simple et généralisée est présentée pour calculer les coefficients stœchiométriques des modèles biocinétiques.

Tous ces résultats, bien qu'ils apparaissent disséminés dans des domaines très différents de la modélisation du traitement des eaux usées, contribuent à l'amélioration de notre compréhension du fonctionnement global des stations, et s'ajoutent aux outils disponibles pour l'ingénieur et l'exploitant pour pouvoir tirer le meilleur parti de leur installation.

ÖSSZEFOGLALÁS

Az eleveniszapos eljárás alapfolyamatai jól ismertek és az oxigénigény, iszapszaporulat és sok más jellemző leírására több matematikai modell áll rendelkezésre. A tervező és az üzemeltető feladatköre azonban nem csak az eleveniszapos eljárásra, hanem az egész telepre terjed ki. Az eleveniszap hányadrésze tartózkodik az ülepitőben egy adott pillanatban? Az elfolyó lebegőanyag jelentősen befolyásolja a tisztított víz minőségét, miért nem lehet ezt a lebegőanyag koncentrációt a Stokes törvény alapján számítani? Milyen körülmények között lehet iszapfelúszásra számítani? Az eleveniszapos modellek a reaktortér zónáit ideálisan kevertnek tételezik fel. Azonban az eleveniszap hely helyében megtelepedett mikroorganizmusok teljesen más körülmények között szaporodnak, mint szomszédaik a hely felületén. Milyen körülmények között és hogyan befolyásolja a pH és vízkémia a telepen lezajló biológiai és kémiai folyamatokat? Az elfolyó foszforkoncentráció csökkenthető vas- és alumínium-só adagolás segítségével – mi okozza az elfolyó foszforkoncentráció jelentős ingadozását, látszólag függetlenül az alkalmazott vegyszeradagtól? Hogyan tervezzünk és üzemeltessünk egy eleveniszapos rendszert aktív szénpor adagolással kiegészítve? Hogyan befolyásolja az adszorpció és az adaptáció az elfolyó víz minőségét? A respirogramm görbék fontos, szakemberek számára “első látásra” nyilvánvaló információt hordoznak a jelenlevő komponensek koncentrációjáról és lebontási kinetikájáról – lehetséges szimuláció és numerikus optimalizálás nélkül kiértékelni ezeket a tipikus görbeformákat? Van gyakorlati haszna a parameter-érzékenység analízisnek? Mennyi az iszapkor a rendszerben négy nappal a fölősiszapelvétele leállítása után (négy napig nem lehet nullával osztani...). A befolyó szennyvíz KOI/izzítási maradék aránya gyakran változik – lehet ebből a befolyó szubsztrát összetételére következtetni, hogyan viszonyul az a szennyvíz zsír/szénhidrát/fehérje tartalmához? Milyen következtetések vonhatók le különböző elemek alapján végzett anyagmérlegek segítségével az Anammox reakcióról?

Ez a disszertáció ezekre a látszólag véletlenszerűen szétszórt kérdésekre kíván választ adni, négy részre bontva: a szennyvíztisztítás fizikai, kémiai és biológiai alapfolyamatai, valamint egyéb elméleti vonatkozások területén.

Az **1. Részben, Fizikai folyamatok** címmel, egy dinamikus utóülepitő modell leírása található. A modell az ülepitőben lévő lebegőanyag és eleveniszap koncentrációjának teljes vertikális profilját képes előrejelezni, az elfolyó lebegőanyagtól kezdve az iszapfelhő helyzetén át a recirkulált iszap koncentrációjáig. A fejezetben bizonyítást nyer, hogy az elfolyó lebegőanyag részecskék ülepedési sebessége közvetetten függ a koncentrációjuktól. A módosított (dupla-exponenciális) Vesilind függvény képes leírni ezt az összefüggést, ami a koncentráció és részecskeeloszlás egyidejű változásának következménye. A Vesilind függvény további kiterjesztése két logisztikus korrekciós tényezővel olyan általános függvényt eredményez, ami a részecske-, zóna- és kompresszív-ülepedés teljes leírására képes. Ennek az általános függvénynek az alkalmazása egy egydimenziós modellben függetleníti az eredményeket a rétegszámtól. A kompresszió modellezése hagyományosan csak kis

rétegszám alkalmazásával érhető el, numerikus "diffúzióval". A Vesilind ülepedési függvény megbízhatósága az ülepedési kísérletek során nyert iszapfelhő magasság időbeli változásának helyes kiértékelésétől függ. Egy újonnan kifejlesztett automatikus módszer szükségtelessé teszi a lineáris ülepedési szakaszok kézzel való kiválasztását.

Az eleveniszapos szennyvíztisztítás matematikai modellezésének egyik legnagyobb hiányossága az, hogy a modellek nem képesek az iszap ülepedési tulajdonságainak előrejelzésére. Egy szubsztrát és oxigén profilt is figyelembevevő pehelymodell, mely fonalas baktériumok szaporodását is tartalmazza, használható erre a célra. A modell figyelembe veszi a pehely belsejében uralkodó körülményeket és a fonalas baktériumok irányított növekedését. A modellel előrejelezhetők azok az üzemelési viszonyok, amelyek alacsony oxigén koncentráció vagy alacsony F/M arány következtében iszapfelfúvódáshoz vezethetnek.

A **2. Részben, Kémiai folyamatok** címmel, egy lakossági szennyvizek esetében általánosan alkalmazható pH modell kerül bemutatásra. A pH alapvető módon befolyásolja a biológiai és kémiai folyamatokat, valamint a gázcserét is. A pH számítása és figyelembevétele az eleveniszapos, anaerob és egyéb folyamatok háttereként jelentős előrelépés a szennyvíztisztítás modellezésében. A szükséges disszociációs állandók és oldhatósági szorzatok, valamint a komplex algebrai probléma numerikus kezelése ismert a szakirodalomból. Új eredmények számít a leggyakrabban előforduló ionok és legfontosabb csapadékok kiválasztása, és egy gyakorlatban könnyen használható számítási módszer kifejlesztése. A módszer vegyesen használt kinetikus és egyensúlyi számításokon, valamint a Túltelítettség Indexen alapul.

A foszfor eltávolítás kémiai egyensúlyokon alapuló modelljét vizsgálva, fontos kinetikai összefüggések kerülnek napvilágra, melyeket a meglévő modell nem képes leírni. Kiterjedt kísérletek eredményeképpen egy új felületi komplexképződésen alapuló modell posztulálható, egy új kulcsparaméterrel (Aktív Reakcióhely Arány). Az Aktív Reakcióhely Arány változtatásával, ami lényegében a reakcióképes oxigénatomok és a vasatomok arányát jelzi, kinetikai összefüggések, mint pl. bekeverési energia és pehelykor hatásai is leírhatók. Az új modell konstansait nem empirikus becslések, hanem ismert vízkémiai adatbázisok alapján állítottam össze.

A **3. Részben, Biológiai folyamatok** címmel, egy korai eleveniszapos modell kiterjesztése található. A modell szénporadagolás következtében bekövetkező adszorpciós és adaptációs folyamatok leírását is tartalmazza a PACT rendszerben. Ezek a folyamatok fontos szerepet játszanak különösen ipari szennyvizek esetében. A modell több szakaszos és folyamatos, laboratóriumi és ipari méretű kísérletsorozat eredménye alapján lett kalibrálva.

Respirogrammon alapuló paraméterbecslést gyakran használunk befolyó szennyvíz koncentrációk, valamint kinetikai és sztöchiometriai paraméterek meghatározására. Egy alternatív, közvetlen paraméterbecslő módszer (DRE) a respirogramm jellegzetes alakját kihasználva, első és másodfokú deriváltak alapján határozza meg ezeket a fontos paramétereket, matematikai modell alkalmazása és optimalizálása nélkül.

A modellek komplex szerkezete miatt paramétereik gyakran kölcsönösen függenek egymástól. Egy gyakorlatban használható, egyszerű paraméter érzékenység-analízis segít a lényeges paraméterek kiválasztásában és modell összefüggéseinek könnyebb megértésében.

A **4. Részben, Elméleti megfontolások** címmel, egy közönséges differenciálegyenlet (ODE) levezetése kerül bemutatásra, amelynek alapján az eleveniszap tényleges kora számítható. Ez az életkor mérlegen alapuló egyenlet az alapja a közismert egyensúlyi iszapkor számításnak, de azzal

ellentétben, dinamikus viszonyok között is használható, vagy abban az esetben is, ha egyáltalán nincs fölösiszapelvelet a rendszerben. Mindebből az a következtetés vonható le, hogy a tényleges iszapszaporulat sokkal fontosabb szerepet játszik az iszapkor meghatározásában, mint a fölösiszapelvelet.

Más elméleti megfontolások során, elemi anyagmérlegek használata alapján bebizonyítható, hogy kizárólag KOI és izzítási veszteség mérésekből is lehet a befolyó szennyvíz részletes összetételére következtetni. A befolyó szennyvíz bonthatatlan szervesanyag tartalma (X_I) alacsonyabb és állandóbb KOI/izzítási maradék aránnyal rendelkezik, mint a befolyó szubsztrát (X_S). Az ASM1 modell elemi anyagmérlege is bemutatásra kerül, N_2 , CO_2 és H_2O állapotváltozók bevezetésével. Az Anammox szaporodási reakció sztöchiometriáját vizsgálva elemi anyagmérlegek alapján megállapíthatók a helyes sztöchiometriai koefficiensek. Egy általános módszer bemutatására is sor kerül, amely segítségével biokinetikai modellek koefficiensei automatikusan levezethetők.

Ezek a eredmények látszólag a szennyvíztisztítás modellezésének nagyon különböző területeit ölelik fel. Azonban közös vonásuk, hogy a telep működésének megértését segítik elő, és hozzájárulnak a tervezőmérnök vagy üzemeltető által használt számítási módszerek kiterjesztéséhez, és ezzel hatékonyabb szennyvíztelepek létrehozásához.

论文总揽

虽然活性污泥工艺的基础已经很清楚并且已经包括在一系列能够预测氧需求，污泥产量和其它工艺参数的模型中。可是对于污水处理厂设计者或运行者来说，活性污泥本身不代表污水处理厂的全部。在给定的时间内混合液的哪一部分在沉淀池中？出流的固体颗粒是如何显著地影响出流的质量以及为什么不能用 Stokes 定律计算它的浓度？在什么情况下储存在沉淀池中的污泥会导致沉淀池完全失效？活性污泥模型是否有必要把生物反应器看作理想混合- 因为在活性污泥颗粒中心的微生物与其相邻的颗粒表面的微生物所处的条件相当不同。在什么条件下水化学和 pH 会对生物和化学过程产生影响以及如何在全厂模型中考虑？加入铁盐或铝盐能得到很低的出流的磷浓度- 但是为什么残留的浓度变化很大而且不完全依赖加药剂量？如何设计和运行一个添加粉末活性炭的活性污泥工艺？在这样的情况下吸附和适应性是如何影响出流质量的？呼吸测量包含有组分浓度和降解动力学的重要信息- 这对一个专家来说只要从曲线的形状就可知- 是否有一种方法不需要详细的模拟和数值优化就可评估这些曲线的特征形状和拐点？不进行敏感性分析是否会遗漏一些实际的信息？在排泥已经停止以后的四天活性污泥反应器中固体的确切泥龄是多少(不能用零去除四)？污水中的 COD/VSS 比例变化很大 - 什么是市镇污水的基质的组分 - 这些是如何与脂/碳水化合物/蛋白质含量相联系？元素平衡能告诉我们有关缺氧氨氧化细菌(Anammox)反应的化学计量方面的什么信息？

这篇论文尝试用四个部分回答这些表面上看起来非常不同的问题：物理的，化学的，生物的以及污水模拟理论的各方面。

第一部分, 物理过程: 这部分介绍了一个沉淀 - 浓缩过程的动力学模型。这个模型(类似模型中的第一个)能够描述沉淀池一维上的完正的固体浓度分布, 包括出流的固体浓度, 泥层高度和回流固体的浓度。已经表明出流中离散颗粒的平均沉降速度可能与它们的浓度相关。修正的(双指数) **Vesilind** 沉降函数利用了出流颗粒浓度和颗粒大小的分布之间存在的关系预测出流固体浓度。这个具有两个改正项的 **Vesilind** 函数的进一步扩展产生了一个包括离散, 区域和压缩沉降的通用沉降函数。这样的通用函数可以在独立于泥层数的成层模型中实施。在泥层的底部通常是用来模拟通过数值模糊的压缩影响。**Vesilind** 沉降函数的精度取决于从沉降速度试验找到的界面与时间斜坡的合适的估计。这方面的一个进展是在拟合经验函数以后减少手工选择界面线性部分获得斜坡的自动方法。

活性污泥模拟的一个主要缺陷是不能预测活性污泥的沉降特性。这部分开发了一个能够描述活性污泥颗粒内部微观环境中基质和溶解氧梯度并且包括了丝状菌非随机生长的颗粒模型。这个模型能够预测依赖于工艺条件的导致低溶解氧浓度(DO)和低 F/M 污泥膨胀的情况。

第二部分, 化学过程: 这部分开发了一个通用的用于城市污水的 pH 模型。pH 在生物和化学反应以及气体转移中起着非常重要的作用。pH 模型作为活性污泥, 厌氧

消化或者旁流工艺模型的一般的背景模型是可靠的全污水厂模型的开发向前迈出的的一大步。离解和溶解常数以及解复杂的线性方程的各种数值技术已在文献中广为熟悉。这是由所选择的各种化学种类和出现在城市污水中的最主要的沉淀物所组成，并证实了所选择的离解和溶解常数，开发了使用 pH，碱度以及化学平衡动力学表达和超饱和常数混合的实际方法以便把 pH 模型达到实用的水平。

在调查一个经验的基于化学平衡的化学除磷模型时，发现了使用纯化学平衡不能描述的影响磷的残留浓度的重要动力学效应。一组广泛的实验用来支持一个具有新的关键参数(活动表面因素) 的新的表面复合模型。活动表面因素的变化(本质上是每个铁原子的活性氧原子数) 使得模型能够描述加药点的混合效应和颗粒结构，年龄对残留的磷的浓度的影响。

第三部分，生物过程：这部分描述了一个早期的带有吸附和生物适应性的 ASM1 模型的扩展。这些过程在粉末活性碳模型特别是在应用于工业污水时起到着关键的作用。这个模型已经使用一系列批次，实验室和生产规模试验进行了校准。使用了一种已经接受的用来确定污水状态变量浓度，动力学和化学计量参数的利用呼吸测量的模型参数估计方法。

这部分还描述了一种替代的称为“呼吸测量直接评价法(DRE)”。这种方法依赖于呼吸测量曲线的特征形状而不依赖数值优化技术。由于 ASM 模型结构上的相互关联性理解所有模型参数的影响有时有困难。一个强调模型结构中关键关系的敏感性分析的入门方法用来作为实践者的指南。

第四部分，理论方面：这部分开发了一个能够数值上积分的差分方程用来提供反应器中的真实泥龄。基于这个方程的泥龄形成了稳态时的 SRT (泥龄) 计算的理论背景。同时可用于变化的动态条件或完全没有排泥的情况。并表明在没有排泥的情况下生物量的真实泥龄更多依赖于每天形成的新的固体。在其它的模拟方面，表明了元素平衡如何用来获得基于标准的 COD 和 VSS 测量的污水状态变量的组分的信息。

同样表明污水的惰性颗粒组分(X_I)比基质具有较低的和较少变化的 COD/VSS 比例。这部分给出了一个基于元素平衡的 ASM1 模型 (包括 N_2 , CO_2 和 H_2O 的状态变量) 并建议生物动力学模型中包括元素平衡。元素平衡还用来调查缺氧氨氧化细菌 (Anammox) 的生长反应和改正文献中的化学计量参数。这部分还给出了一个简单通用的方法用来开发动力学模型中的化学计量参数。

这些结果虽然表面上分散于污水处理厂模拟中非常不同的领域但是都改善了我们对一个全污水处理厂工作原理的理解，为设计工程师和操作员提供了更多的解决问题的工具和方法。