

Vorwort

Verzeichnis der verwendeten Abkürzungen

<u>1 Zusammenfassung</u>	1
<u>2 Problemstellung</u>	3
<u>3 Theoretische Grundlagen</u>	6
3.1 Modellansätze für die mathematische Beschreibung biologischer Abbauprozesse	6
3.1.1 Monod–Kinetik und Michaelis–Menten–Kinetik	7
3.2 Berechnungsansätze für die C– , N– und P–Elimination in Kläranlagen	11
3.2.1 Statische Ansätze	11
3.2.1.1 Arbeitsblatt ATV – A 131	11
3.2.1.2 Bemessungsansatz der Hochschulen (HSG–Ansatz)	12
3.2.1.3 Vergleich ATV – A 131/HSG-Ansatz	13
3.2.2 Dynamische Ansätze - Modelle der IAWQ	14
3.2.3 Modifikation des ASM 1 im Simulationsprogramm SIMBA 3.0 ⁺ [®]	28
3.2.3.1 Limitierung durch Alkalinität	28
3.2.3.2 Hydrolyse unter anaeroben Bedingungen	29
3.2.3.3 Vollständige Elimination von Ammoniumverbindungen	29
3.3 Einsatzmöglichkeiten der „Künstlichen Intelligenz“ in der Abwassertechnik	31
3.3.1 Expertensysteme	31

3.3.2 Neuronale Netze	32
3.3.3 Fuzzy-Logic	33
<u>4. Forschungskonzept</u>	35
4.1 Relevanz des IAWQ-Modells ASM 1	35
4.1.1 Grenzen der Monod-Kinetik	35
4.1.2 Methoden zur Parameterbestimmung	36
4.1.3 Sensitivitätsanalyse	38
4.2 Entwicklung eines neuen Modellansatzes	39
4.2.1 Kinetischer Ansatz für den Substratabbau	39
4.2.2 Kinetischer Ansatz für die Nitrifikation	41
4.2.2.1 Biologische Grundlagen der Nitrifikation	41
4.2.2.2 Modellansatz für die Nitrifikation	43
4.2.3 Kinetischer Ansatz für die Beschreibung des C- und N-Abbaus in Kläranlagen	44
<u>5 Funktionsbeschreibung der Kläranlage Emden/Larrelt</u>	48
<u>6 Experimenteller Teil und Diskussion der Ergebnisse</u>	53
6.1 Aufnahme der Tagesganglinien	53
6.2 Bestimmung weiterer für die Simulation benötigter Daten	66
6.2.1 Verteilung des Gesamtzulaufs auf die Zonen der Belebung	66
6.2.1.1 Experiment zur Ermittlung der Aufteilung des Gesamtzulaufs	66
6.2.1.2 Berechnung der theoretischen Ablaufmenge	69
6.2.2 Experimentelle Bestimmung des Faktors TS/CSB für die TS-Berechnung in SIMBA [®]	70
6.2.3 Rückbelastung durch das Filtratwasser aus den Klärschlammverer-	71

dungsbeeten	
6.2.4 Denitrifikation in der Nachklärung	72
6.3 Experimentelle Bestimmung der im IAWQ–Modell No. 1 definierten, gelösten Fraktionen S_I und S_S des CSB	77
6.3.1 Experimentelle Bestimmung der gelösten, inerten CSB-Fraktion S_I	77
6.3.1.1 Definition und Relevanz der gelösten, inerten CSB-Fraktion S_I	77
6.3.1.2 Methode der Bestimmung der CSB-Fraktion S_I	78
6.3.1.3 Durchführung	80
6.3.1.4 Ergebnisse und Diskussion	81
6.3.1.4.1 Adsorptionseffekte	81
6.3.1.4.2 Wasserlöslichkeit der Kontrollsubstanz	86
6.3.1.4.3 Auswertung	88
6.3.1.5 Auswertung unter Berücksichtigung der inerten CSB-Fracht des Belebtschlammes	92
6.3.1.6 Zusammenfassung der Ergebnisse zur Bestimmung der gelösten, inerten CSB-Fraktion S_I	96
6.3.2 Experimentelle Bestimmung der gelösten, biologisch rasch abbaubaren CSB-Fraktion S_S	98
6.3.2.1 Methoden für die experimentelle Bestimmung der CSB-Fraktion S_S	98
6.3.2.2 Durchführung	100
6.3.2.3 Ergebnisse der Bestimmung der CSB-Fraktion S_S und Diskussion	101
6.3.3 Vergleich der Ergebnisse für die CSB-Fraktionen S_I und S_S mit Literaturwerten	107
6.4 Bestimmung ausgewählter kinetischer Parameter der autotrophen Mikroorganismen	110
6.4.1 Kenntnisstand zur Bestimmung der Parameter autotropher Mikroorganismen	110
6.4.1.1 Maximale Wachstumsrate	110
6.4.1.2 Halbwertskoeffizient K_{NH}	113
6.4.1.3 Absterberate	115
6.4.1.4 Ertragskoeffizient	115
6.4.2 Experimentelle Bestimmung der maximalen Wachstumsrate und des K_{NH} -Wertes	116

6.4.2.1 Kriterien für die Auswahl der Methoden	116
6.4.3 Vergleich der untersuchten Methoden	117
6.4.4 Parameterbestimmung für den Belebtschlamm der Kläranlage Emden/Larrelt	121
6.4.4.1 Bestimmung der maximalen Wachstumsrate	121
6.4.4.2 Bestimmung des Halbwertskoeffizienten K_{NH}	122
6.4.5 Diskussion der Ergebnisse	122
6.5 Sensitivitätsanalyse	124
6.5.1 Abbildung der Kläranlage Emden/Larrelt im Simulationsprogramm SIMBA [®]	124
6.5.2 Durchführung der Sensitivitätsanalyse	124
6.5.3 Ergebnisse und Diskussion	126
6.5.3.1 Stoffliche Parameter	126
6.5.3.2 Verfahrenstechnische Parameter	131
6.5.4 Schlußfolgerungen	135
6.6 Batch–Versuch zur Kinetik der Nitrifikation	138
6.6.1 Durchführung	138
6.6.2 Modellmäßige Beschreibung der Nitrifikation	140
6.6.2.1 MATLAB [®] -Programm	140
6.6.2.2 Einbindung des kinetischen Modellansatzes für die Nitrifikation in das Simulationsprogramm SIMBA [®]	144
6.6.3 Schlußfolgerungen	148
6.7 Evaluierung des kinetischen Ansatzes für die Vorgänge der C- und N-Elimination am Beispiel der Kläranlage Emden/Larrelt	149
6.7.1 Einbindung des kinetischen Modellansatzes für den C- und N-Abbau in das Simulationsprogramm SIMBA [®]	149
6.7.2 Evaluierung und Sensitivitätsanalyse des Modellansatzes am Beispiel der Kläranlage Emden/Larrelt	151
<u>7 Abschließende Diskussion und Ausblick</u>	168

<u>8 Literatur</u>	171
<u>Anhänge</u>	181
Anhang A	181
Methoden für die experimentelle Bestimmung der maximalen Wachstumsrate	
Anhang A1 Bestimmung von μ_{\max} über einen Batch-Versuch mit hoher Organismenkonzentration (> 100 mg/l)	181
Anhang A2 Bestimmung von μ_{\max} mit der Sequencing-Batch-Methode	183
Anhang A3 Versuche mit der Methode nach Lesouef et al.	186
Anhang A4 Bestimmung von μ_{\max} mit einer kontinuierlichen Methode im Chemostaten	188
Anhang B	193
Batch-Methode mit hoher Organismenkonzentration zur Bestimmung des K_{NH} -Wertes	
Anhang C	195
MATLAB-Programm für die Berechnung der CSB-Fraktion S_S aus den Sauerstoffverbrauchskurven	
Anhang D	197
Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse der Parameter des Simulationsprogramms SIMBA [®] am Beispiel der Kläranlage Emden	

Verzeichnis der verwendeten Symbole und Abkürzungen

Abkürzung bzw. Symbol	Bedeutung	Einheit	Seite
TN _D	Gesamtstickstoff nach Devarda	[(mg N)/l]	1
CSB	Chemischer Sauerstoffbedarf	[(mg O ₂)/l]	1
ASM 1	Activated Sludge Model No.1		1
ATV	Abwassertechnische Vereinigung e. V.		1
HSG	Hochschulgruppenansatz		1
IAWQ	International Association on Water Quality		1
S	Substratkonzentration	[g/l]	7
E	Enzym	[g/l]	7
ES	Enzym–Substrat–Komplex	[g/l]	7
P	Gebildetes Produkt	[g/l]	7
k ₁	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante	[g/(l min)]	7
k ₋₁ , k ₂	Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten	[min ⁻¹]	7
μ	Spezifische Wachstumsgeschwindigkeit	[min ⁻¹]	8
μ _{max}	Maximale spezifische Wachstumsgeschwindigkeit	[min ⁻¹]	8
K _M	Sättigungskonstante	[g/l]	8
Y	Ertragskoeffizient	[-]	8
X	Biomasse	[g/l]	8
BSB ₅	Biochemischer Sauerstoffbedarf in 5 Tagen	[(mg O ₂)/l]	11
t _{TS}	Schlammalter	[d]	12
B _{TS}	BSB ₅ -Schlammbelastung	[kg/(kg d)]	12
B _R	BSB ₅ -Raumbelastung	[kg/(m ³ d)]	12
TKN	Kjeldahl-Stickstoff-Konzentration	[(mg N)/l]	14
N _{anorg}	Anorganisch gebundener Stickstoff	[(mg N)/l]	14
ASM 2	Activated Sludge Model No.2		15
ASM 3	Activated Sludge Model No.3		15
S _I	Biologisch inerte, gelöste organische Stoffe	[(g CSB)/m ³]	17
S _S	Biologisch rasch abbaubare, gelöste organische Stoffe (Substrat)	[(g CSB)/m ³]	17

Abkürzung bzw. Symbol	Bedeutung	Einheit	Seite
X_I	Biologisch inerte, partikuläre organische Stoffe	$[(g\text{ CSB})/m^3]$	17
X_S	Biologisch langsam abbaubare organische Stoffe	$[(g\text{ CSB})/m^3]$	17
X_{BH}	Aktive heterotrophe Biomasse	$[(g\text{ CSB})/m^3]$	17
X_{BA}	Aktive autotrophe Biomasse	$[(g\text{ CSB})/m^3]$	17
X_P	Partikuläre Zerfallsprodukte der Biomasse	$[g\text{ CSB}/m^3]$	17
S_O	Gelöster Sauerstoff	$[-(g\text{ CSB})/m^3]$	17
S_{NO}	Summe aus Nitrat- und Nitrit- Stickstoff	$[(g\text{ N})/m^3]$	17
S_{NH}	Summe aus Ammoniak und Ammonium- Stickstoff	$[(g\text{ N})/m^3]$	17
S_{ND}	Biologisch abbaubarer, gelöster organisch gebundener Stickstoff	$[(g\text{ N})/m^3]$	17
X_{ND}	Biologisch abbaubarer, partikulärer organisch gebundener Stickstoff	$[(g\text{ N})/m^3]$	17
S_{ALK}	Alkalinität (Bikarbonat (HCO_3^-))	$[mol/m^3]$	17
p_j	Prozeßgeschwindigkeit	$[g/(m^3\text{ d})]$	18
r_i	Beobachtete Umwandlungsgeschwindigkeit	$[g/(m^3\text{ d})]$	18
$v_{j,i}$	Stöchiometrischer Faktor		18
$C_{k,i}$	Konzentration des Stoffes i im Reaktor k	$[g/m^3]$	22
$A_{k,i}$	Summe aller Abflüsse des Stoffes i aus dem Reaktor k	$[g/d]$	22
$Z_{k,i}$	Summe aller Zuflüsse des Stoffes i zum Reaktor k	$[g/d]$	22
TOC	Total Organic Carbon (gesamter organisch gebundener Kohlenstoff)	$[(mg\text{ C})/l]$	23
DOC	Dissolved Organic Carbon (gelöster organisch gebundener Kohlenstoff)	$[(mg\text{ C})/l]$	23
K_{NH}	Halbwertskoeffizient der Ammonifikation	$[(g\text{ NH}_4\text{-N})/m^3]$	28
η_g	Korrekturfaktor für μ_H unter anoxischen Bedingungen	$[-]$	28
μ_H	Maximale Wachstumsgeschwindigkeit von X_{BH}	$[d^{-1}]$	28
K_S	Sättigungsbeiwert nach Monod	$[(g\text{ CSB})/m^3]$	28

Abkürzung bzw. Symbol	Bedeutung	Einheit	Seite
$K_{O,H}$	Sauerstoff-Sättigungsbeiwert nach Monod für X_{BH}	$[(g O_2)/m^3]$	28
K_{NO}	Sättigungsbeiwert nach Monod	$[(g NO_3-N)/m^3]$	28
$K_{O,A}$	Sauerstoff-Sättigungsbeiwert nach Monod für X_{BA}	$[(g O_2)/m^3]$	28
$K_{ALK,H}$	Alkalinitäts-Sättigungsbeiwert nach Monod für X_{BH}	$[mol/m^3]$	28
$K_{ALK,A}$	Alkalinitäts-Sättigungsbeiwert nach Monod für X_{BA}	$[mol/m^3]$	28
η_H	Korrekturfaktor für Hydrolyse unter anoxischen Bedingungen	$[-]$	29
K_X	Sättigungsbeiwert nach Monod für die Hydrolyse	$[-]$	29
$K_{O,AN}$	Sättigungsbeiwert nach Monod für die Hydrolyse unter anoxischen Bedingungen	$[(g CSB)/m^3]$	29
$\eta_{H,AN}$	Korrekturfaktor für Hydrolyse unter anaeroben Bedingungen	$[-]$	29
k_h	Maximale Hydrolyserate	$[1/d]$	29
i_{XB}	Stickstoffgehalt der Biomasse	$[(g N)/(g CSB)]$	30
Y_H	Ertragskoeffizient der heterotrophen Biomasse	$[(g TS)/(g CSB)]$	30
K_{NHNO}	NH- und NO-Sättigungsbeiwert nach Monod für X_{BH}	$[(g N)/m^3]$	30
XS	Fiktiver Biomasse-Substrat-Komplex	$[g/l]$	40
m, n	Stöchiometrische Koeffizienten	$[-]$	40
$[X_{ANSO}]$	Fiktiver Biomasse-Substrat-Komplex (mit Sauerstoff gesättigte Biomasse X_{ANS} , Nitrosomonas)	(mit $[g/l]$)	43
$[X_{ANBO}]$	Fiktiver Biomasse-Substrat-Komplex (mit Sauerstoff gesättigte Biomasse X_{ANB} , Nitrobacter)	(mit $[g/l]$)	43

Abkürzung bzw. Symbol	Bedeutung	Einheit	Seite
$[X_{ANS}NH_4O]$	Fiktiver Biomasse-Substrat-Komplex (nach Aufnahme von Ammonium)	[g/l]	43
$[X_{ANB}NO_2O]$	Fiktiver Biomasse-Substrat-Komplex (nach Aufnahme von Nitrit)	[g/l]	43
k_{N1K}, k_{N2K}	Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten des kinetischen Ansatzes für die Nitrifikation	$l/(mg \text{ min})$ bzw. $[m^3/(g \text{ d})]$	43
$k_{RN1K}, k_{NO2},$ k_{RN2K}, k_{NO3}	Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten des kinetischen Ansatzes für die Nitrifikation	$[\text{min}^{-1}]$ bzw. $[\text{d}^{-1}]$	43
F_1, F_2, F_3	Stöchiometrische Koeffizienten	[-]	43
$k_S, k_{N3K}, k_{HK},$ k_{AK}	Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten des kinetischen Ansatzes für den C- und N-Abbau in Kläranlagen	$[m^3/(g \text{ d})]$	45
$k_{RAK}, k_{RN3K}, k_P,$ k_{RHK}, k_{RS}, k_N	Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten des kinetischen Ansatzes für den C- und N-Abbau in Kläranlagen	$[\text{d}^{-1}]$	45
F_4, F_5, F_6, F_7	Stöchiometrische Koeffizienten	[-]	45
TM	Tagesmischprobe		55
MP	2 h – Mischprobe		56
P_{ges}	Gesamt-Phosphat	$[(mg \text{ P})/l]$	65
\dot{V}	Volumenstrom	$[m^3/h]$	69
A_M	Ausflußquerschnitt	$[m^2]$	69
β	Ausflußzahl	[-]	69
α	Kontraktionszahl	[-]	69
φ	Geschwindigkeitszahl	[-]	69
H	Höhendifferenz	[m]	69
TS	Trockensubstanzgehalt	$[kg/m^3]$	70
KSV	Klärschlammvererdungsbeete		72
CSB_{homo}	CSB-Gehalt der mittels Ultra-Turrax homogenisierten Probe (Gesamt-CSB)	$[(mg \text{ O}_2)/l]$	77
CSB_{filtr}	CSB-Gehalt der filtrierten Probe (gelöster CSB)	$[(mg \text{ O}_2)/l]$	77

Abkürzung bzw. Symbol	Bedeutung	Einheit	Seite
$c(\text{CSB}_i^{\text{Substrat}})$	Konzentration an gelöstem, inertem CSB im Ansatz	$[(\text{mg O}_2)/\text{l}]$	78
$c(\text{CSB}_s^{\text{Substrat}})$	Konzentration an gelöstem, biologisch abbaubarem CSB im Ansatz	$[(\text{mg O}_2)/\text{l}]$	78
V	Gesamtvolumen des Ansatzes	[l]	88
V_M	Volumen des Matrixwassers	[l]	88
V_S	Volumen des Substratwassers im Ansatz	[l]	88
C_M	CSB der Matrix	$[(\text{mg O}_2)/\text{l}]$	88
C_{A1}	CSB des Ansatzes A vor der Belebtschlammzugabe	$[(\text{mg O}_2)/\text{l}]$	88
C_{A2}	CSB des Ansatzes A zur Zeit $t = 0$ min	$[(\text{mg O}_2)/\text{l}]$	88
C_{A4}	CSB des Ansatzes A nach $t = 240$ min	$[(\text{mg O}_2)/\text{l}]$	88
C_{B1}	CSB des Ansatzes B vor der Belebtschlammzugabe	$[(\text{mg O}_2)/\text{l}]$	88
C_{B2}	CSB des Ansatzes B zur Zeit $t = 0$ min	$[(\text{mg O}_2)/\text{l}]$	88
C_{B4}	CSB des Ansatzes B nach $t = 240$ min	$[(\text{mg O}_2)/\text{l}]$	88
STP	Qualifizierte Stichprobe		90
A1	Ansatz A vor der Belebtschlammzugabe		92
A2	Ansatz A zur Zeit $t = 0$ min		92
A4	Ansatz A nach $t = 240$ min		92
B1	Ansatz B vor der Belebtschlammzugabe		92
B2	Ansatz B zur Zeit $t = 0$ min		92
B4	Ansatz B nach $t = 240$ min		92
Index ^B	Belebtschlamm		92
Index ^M	Matrix		92
Index ^S	Substrat		92
Index _I	Inerte Stoffe		92
Index _M	Matrix		92
Index _S	Biologisch abbaubare Stoffe (Substrat)		92
Index _W	Restwasser im abfiltrierten Belebtschlamm		92
n	CSB-Gehalt bezogen auf Molzahl	$[(\text{mol O}_2)/\text{l}]$	92
c	CSB-Konzentration	$[(\text{mg O}_2)/\text{l}]$	92

Abkürzung bzw. Symbol	Bedeutung	Einheit	Seite
k	Konstante zur Beschreibung des Adsorptionsgleichgewichtes		92
f_{cv}	Faktor zur Umrechnung	[(g TS)/(g CSB)]	98
V_{ml}	Eingesetztes Volumen des belebten Schlammes	[ml]	98
V_{ww}	Eingesetztes Volumen des Abwassers	[ml]	98
MO	Berechnete Fläche	[(mg O ₂)/l]	98
$\mu_{max,A}$	Maximale Wachstumsrate der autotrophen Biomasse	[d ⁻¹]	110
D	Verdünnungsrate	[h ⁻¹]	110
D_{krit}	Kritische Verdünnungsrate (Konzentration der Organismen wird = 0)	[h ⁻¹]	110
b_A	Absterberate der autotrophen Biomasse	[d ⁻¹]	115
Y_A	Ertragskoeffizient der autotrophen Biomasse	[(g CSB)/(g NH ₄ -N)]	115
RS	Rücklaufschlamm	[m ³ /d]	124
RZ	Rezirkulation innerhalb des Belebungsbeckens	[m ³ /d]	124
U _{ess}	Überschußschlamm	[m ³ /d]	124
TS _{BB}	Trockensubstanzgehalt im Belebungsbecken	[kg/m ³]	124
i_{XP}	Stickstoffgehalt der Fraktion X _P	[(g N)/(g CSB)]	128
f_P	Anteil partikulärer Produkte am Zerfall von Biomasse	[-]	128
b_H	Zerfallskonstante der heterotrophen Biomasse	[d ⁻¹]	128
k_a	Ammonifikationsgeschwindigkeit	[(m ³ CSB)/(g d)]	128
agf	Ausgasungsfaktor	[-]	141
FOX	Formale Matrixbeschreibung		144
R_0	Referenznitrifikationsrate	[mg/(l d)]	187
R_g	Nitrifikationsrate nach bestimmter Wachstumszeit	[mg/(l d)]	187
t_g	Zeitdauer des Wachstums	[d]	187

Summary

For quite a few years it has become common practice to use the dynamic simulation for the design of biological wastewater treatment plants. The commonly used software for the dynamic simulation of wastewater treatment plants in Germany is the program SIMBA[®]. SIMBA[®] includes the Monod kinetics-based IAWQ models No.1 and No.2. The successful use of dynamic simulation for design and operation of a wastewater treatment plant is significantly dependant on the quality of the input parameters the simulation software requires. This suggests that it is necessary to create methods for an accurate, reproducible and simple estimation of these parameter values.

In the first part of the project the municipal wastewater treatment plant in Emden/Larrelt was reproduced within the program SIMBA[®]. First of all the required input parameters were estimated. Profiles of the parameters COD, ammonium, nitrite, nitrate, TN_D and phosphate were measured. A method for the estimation of the soluble inert COD fraction S_i within the IAWQ model was taken from literature and investigated concerning practicability. An optimized procedure is presented and used to estimate the soluble inert COD fraction in samples from the municipal wastewater treatment plant in Emden/Larrelt. Different methods for the estimation of the maximum specific growth rate of the autotrophic biomass were investigated concerning practicability.

The experimental determination of the parameter values in the simulation software related to the substances and to the process often is difficult and requires much effort. Therefore it would be very helpful to know which of these parameters have to be determined experimental for a considered wastewater treatment plant and which parameter is not so important so that a default value can be taken. The carried out sensitivity analysis for the example of the municipal wastewater treatment plant in Emden/Larrelt gives more detailed informations about the effects of specific parameters on the results of the simulation.

In the second part of the project a new kinetic model (Fundamental Kinetic Approach, FUKA) was developed and applied to several examples.

Monod kinetics-based models are commonly used for the biological degradation processes. The Monod equation is based on the Michaelis-Menten kinetics for enzy-

me catalyzed reactions and its assumptions. It is presented that the description of biodegradation by appropriate differential equations without the assumptions of Michaelis-Menten is more suitable for complex reaction mechanisms (e. g. reactions with intermediates). Therefore the kinetic model seems to be more appropriate than the classical Monod model to describe the biological degradation in activated sludge basins.

In the Activated Sludge Model No.1 nitrification is considered to be a single step process. Nitrite nitrogen and nitrate nitrogen are incorporated into the model as one component. The separated consideration of both steps of the nitrification process and the inclusion of nitrite nitrogen as an own component allows a more sophisticated description.

With the new kinetic model the nitrification process can be described as a reaction with the formation of intermediates. It is presented that the experimental results for the nitrogen components ammonium, nitrite and nitrate can be described by the new kinetic model.