

Jürgen Wöckl

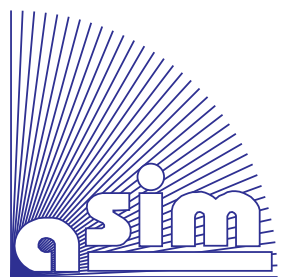
## Hybrider Modellbildungszugang für biologische Abwasserreinigungsprozesse



ISBN Ebook 978-3-903347-14-4

ISBN Print 978-3-901608-64-3









# ***Fortschrittsberichte Simulation***

***FBS Band 14***

Herausgegeben von ASIM

Arbeitsgemeinschaft **Simulation**, Fachausschuß 4.5 der GI

**Jürgen Wöckl**

## **Hybrider Modellbildungszugang für biologische Abwasserreinigungsprozesse**

**ARGESIM / ASIM – Verlag, Wien, 2005**

**ISBN Print 978-3-901608-64-3**

**Ebook Reprint 2020**

**ISBN Ebook 978-3-903347-14-4**

**DOI: 10.11128/fbs.14**

## **ASIM Fortschrittsberichte Simulation / ARGESIM Reports**

Herausgegeben von **ASIM**, Arbeitsgemeinschaft Simulation, Fachausschuß 4.5 der **GI** und der **ARGESIM**

### **Betreuer der Reihe:**

Prof., Dr.-Ing. Th. Pawletta (ASIM)  
Hochschule Wismar  
Phillip-Müller-Str., 23952 Wismar, Germany  
Tel: +49-3841-753-406  
Email: [pawel@mb.hs-wismar.de](mailto:pawel@mb.hs-wismar.de)

Dr.-Ing. habil. D.P.F. Schwarz (ASIM)  
Fraunhofer-Institut für Integrierte Schaltungen  
Zeunerstr. 38, 01069 Dresden, Germany  
Tel: +49-351- 4640 - 730  
Email: [schwarz@eas.iis.fhg.de](mailto:schwarz@eas.iis.fhg.de)

Prof. Dr. F. Breitenecker (ARGESIM / ASIM)  
Abt. Simulationstechnik, Technische Universität Wien  
Wiedner Hauptstraße 8 - 10, A - 1040 Wien  
Tel: +43-1-58801-10115  
Email: [Felix.Breitenecker@tuwien.ac.at](mailto:Felix.Breitenecker@tuwien.ac.at)

### **FBS Band 14**

**Titel:** Hybrider Modellbildungszugang für biologische Abwasserreinigungsprozesse

**Autor:** Jürgen Wöckl  
[Juergen.Woeckl@tuwien.ac.at](mailto:Juergen.Woeckl@tuwien.ac.at)

### **Begutachter des Bandes:**

Prof. Dr. F. Breitenecker, TU Wien; Prof. Dr. W. Estelberger, TU Wien

**ARGESIM / ASIM – Verlag, Wien, 2005**

**ISBN Print 978-3-901608-64-3**

**Ebook Reprint 2020 (Scan)**

**ISBN Ebook 978-3-903347-14-4**

**DOI: 10.11128/fbs.14**

Das Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdrucks, der Entnahme von Abbildungen, der Funksendung, der Wiedergabe auf photomechanischem oder ähnlichem Weg und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten.

© by ARGESIM/ ASIM, Wien, 2005

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zur Annahme, daß solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz - Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

## Kurzfassung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit mathematischer Modellbildung und Simulation im Bereich der Biowissenschaften; im Speziellen mit dem Bereich biologischer Abwasserreinigung. Dabei sollen vorwiegend Stoffwechselprozesse von Bakterienkulturen in Belebungsbecken biologischer Abwasserreinigungsanlagen modelliert werden.

Um einen Überblick über diesen Bereich zu geben, sind im ersten Teil zunächst neben den allgemeinen biologischen und biotechnologischen Grundlagen die Theorie biologischer Abwasserreinigungsanlagen beschrieben.

Der zweite Teil behandelt vorwiegend die mathematische Beschreibung der enzymatischen Prozesse und die Chemostatentheorie. Dabei werden an Hand von mathematischen Modellen der Chemostaten ihre Eigenschaften in Hinblick auf die Beschreibung von Abwasserreinigungsprozessen untersucht. Dieses Verständnis wird in weiterer Folge verwendet, um die unterschiedlichen Möglichkeiten der Beschreibung der Kinetiken, deren Parameterbestimmung und Validierung in einem realen Kontext zu erläutern.

Ausgehend von diesen Erkenntnissen wird im dritten Teil das Kernmodell zur Beschreibung biologischer Abwasserreinigung entwickelt. Es handelt sich dabei um ein Derivat praxiserprobter Modelle, wie dem "Activated Sludge Modell 1+2" der IAWQ, zur Beschreibung der grundlegenden Abbauprozesse im Kontext biologischer Abwasserreinigung. Dieses Kernmodell wurde hier um ein hydraulisches Modell erweitert, das die zu- und abströmenden Stoffkonzentrationen modelliert. Durch diese Erweiterung wird eine hybride Beschreibung beliebiger Anlagenkonfigurationen hinsichtlich Rückführungen von Abwasser und Schlamm innerhalb der Anlage ermöglicht. Das hydraulische Modell beinhaltet auch eine flexibel einsetzbare Sauerstoffbelüftung bzw. Sauerstoffregelung der Becken, wodurch unterschiedliche Milieubedingungen (aerob / anoxisch) in den unterschiedlichen Anlagenabschnitten eingestellt werden können. Dies ermöglicht die Untersuchung und den Vergleich der Performance unterschiedlicher Betriebsarten und Konfigurationen bezüglich ihrer Reinigungseffizienz. Eine wesentliche Erweiterung stellt dabei die hybride Beschreibungsform dar, die sowohl kontinuierliche als auch diskrete Ereignisse in der Betriebsart der Anlage ermöglicht.

Der vierte und letzte Abschnitt beschreibt die durchgeführte Simulationstudie, in der die gängigsten Anlagenkonfigurationen und Verfahrensschritte unter Verwendung des Kernmodells biologischer Abwasserreinigung und des hydraulischen Modells durch Simulation untersucht wurden. Dabei zeigte sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der Literatur und der Abbildung der beschriebenen Effekte durch das Modell.



## Abstract

This thesis handles with mathematical modelling and simulation in life science, especially with the field of biological wastewater treatment. Thereby predominately metabolism processes of bacteria cultures in wastewater treatment plants are modelled.

To give a brief overview on this topic in the first part of this thesis the general biological and biotechnological fundamentals of wastewater treatment and the theory of the plants are described.

The second part handles with the mathematical description of the enzymatical process and the theory of the chemostat. Thereby the mathematical models of the chemostats are used to determine their properties regarding to the description of wastewater treatment processes. This understanding is used in the following to illustrate the possibility of the description of the kinetics, the parameter estimation and the validation of the model in a real context.

Based on this facts in the third part the core-model is introduced to describe the basic processes of wastewater treatment. The core-model is a derivative of field-tested models, as the "activated sludge model 1+2" of the IAWQ, to describe the basic processes of biodegradation in the context of biological wastewater treatment. Additionally the core-model is enhanced by a hydraulical model that models the incoming and outgoing flows of the concentrations. Thus the model offers a hybrid description of any plant configuration regarding to the refeeding of wastewater and sludge within the plant.

The hydraulical model also includes a flexible usable oxygen ventilation respectively an oxygen control. Thereby many different environmental conditions can be adjusted, which allows an analysis and a comparison of the performance of diverse operation modes and configurations regarding to the biodegradation efficiency. An important improvement is the hybrid description form, which allows continuous as well as discrete events in the operation mode of the plant.

The fourth and last part contains a simulation study which describes some well-established plant configurations and operation modes using the core-model of biological wastewater treatment and the hydraulical model. The results of this study show a good accordance of the model to the effects described in literature.

## Vorwort und Danksagung

Die Ökologie und der Umweltschutz nehmen in einer zunehmend technisierten Gesellschaft einen immer größeren Stellenwert ein.

Diese Thematik hält daher auch vermehrt Einzug in unterschiedliche wissenschaftliche Fachrichtungen, die allesamt einen wichtigen Beitrag zu diversen Weiterentwicklungen in diesem Bereich leisten. Diese Dissertation ist vorwiegend als mathematische und methodische Arbeit zu verstehen, sie beschäftigt sich jedoch grundlegend mit den Prinzipien der Abwasserreinigung und daher auch mit der wichtigen Frage des Gewässerschutzes.

Die mathematische Beschreibung von biologischen und ökologischen Vorgängen hilft dabei ein tieferes Verständnis und einen tieferen Einblick in die Gesetzmässigkeiten und die Dynamik dieser Bereiche zu erlangen. Die sich sehr schnell entwickelnde Computertechnologie ermöglicht zusätzlich die Berechnung immer komplexerer Systeme und Zusammenhänge und gewinnt zunehmend an Wichtigkeit bei der methodischen Untersuchung unterschiedlicher Fragestellungen. Dabei kommt als wichtiges Werkzeug die Modellbildung und Simulation zum Einsatz, die es ermöglicht die Zusammenhänge und Gesetzmässigkeiten in Modellen zu formulieren und ihre Dynamik durch Berechnung zu untersuchen. Das fördert das prinzipielle Verständnis für die Prozesse und ermöglicht die Optimierung von technischen Anlagen und Verfahrensschritten. Zusätzlich können Prognosen erstellt werden, die den Menschen bei Entscheidungen hinsichtlich der Änderung von Betriebsarten unterstützen, und die die Automatisierung zustandsabhängiger Entscheidungsprozesse und Interventionen im laufenden Betrieb der Anlagen ermöglichen.

Diese Arbeit setzt den Hauptfokus auf die mathematische Modellbildung und Simulation von Stoffwechselprozessen der Bakterien in biologischen Abwasserreinigungsanlagen. Hierzu werden verschiedene Modellansätze und Kinetiken untersucht, die den Stoffwechselprozess der Bakterien beschreiben. Zusätzlich ermöglicht der gewählte Modellansatz die Modellierung hybrider Verfahrensschritte. Es können also sowohl kontinuierliche als auch diskrete Prozesse und Verfahrensschritte ins Modell integriert und untersucht werden. Es ist daher möglich, Erkenntnisse über die optimale Betriebsart der Anlage zu gewinnen und die Simulation ermöglicht mit Hilfe von gezielten Experimente die Identifikation der den realen Prozessen zugrundeliegenden Dynamik .

---

Diese Arbeit wurde am Institut für Analysis und Technische Mathematik der Technischen Universität Wien ausgeführt und ist in enger Zusammenarbeit mit den ARC (Austria Research Centers) entstanden. Ohne der fachlichen und persönlichen Unterstützung von beiden Seiten wäre es nicht möglich gewesen, diese Arbeit in der hier vorliegenden Form auszuführen.

Mein besonderer Dank gilt dabei Herrn Prof. Dr. Felix Breitenecker und dem gesamten Team der ARGESIM (ARbeitsGEmeinschaft SIMulation) an der TU Wien, so wie auch meinen Ansprechpartnern und Betreuern seitens des ARC, Herrn Dr. Momtchil Peev und Frau Dipl.-Ing. Monika Schönerklee.

Ebenso gilt mein Dank auch Herrn Prof. Dr. Willibald Estelberger an der Karl-Franzens-Universität in Graz, der mich in zahlreichen Diskussionen thematisch auf den rechten Weg geführt und mein Verständnis für die biologischen Grundlagen wesentlich geprägt hat.

Ich möchte es an dieser Stelle nicht versäumen ein großes Dankeschön an meine Familie zu richten, die mich über viele Jahre hinweg auf meinem Weg unterstützt hat. Sie ist mir immer mit Rat und Tat und vor allem mit viel Verständnis zur Seite gestanden ist. Diese Unterstützung hat nicht nur wesentlich zu dieser Arbeit beigetragen, sie hat vor allem mich und meinen Weg geprägt und mir die Kraft und die Möglichkeit gegeben, ihn zu verfolgen.

Danke!

# Inhaltsverzeichnis

<b>I</b>	<b>Biologische Grundlagen</b>	<b>13</b>
<b>1</b>	<b>Mathematische Beschreibung der Stoffwechselkinetik</b>	<b>14</b>
1.1	Diffusion . . . . .	15
1.2	Sorptionsvorgänge . . . . .	16
1.3	Enzymatische Reaktion . . . . .	17
1.3.1	Grundlagen enzymatischer Reaktionen . . . . .	17
1.3.2	Enzymatische Grundreaktion und ihre mathematische Beschreibung . . . . .	18
1.3.3	Bestimmung der Reaktionsparameter . . . . .	21
1.3.4	Einfluss des pH-Wertes . . . . .	23
1.3.5	Einfluss der Temperatur . . . . .	24
1.4	Enzymatische Reaktion mit Inhibitoren . . . . .	26
1.4.1	Kompetitive Inhibition (konkurrierende, isosterische) . . . . .	26
1.4.2	Nicht-kompetitive Inhibition (nichtkonkurrierende, allosterische) . . . . .	27
1.4.3	Unkompetitive Inhibition . . . . .	28
1.4.4	Hemmung durch Substratüberschuss . . . . .	29
1.4.5	Produkthemmung . . . . .	30
1.5	Enzymatische Reaktion mit Aktivatoren . . . . .	30
1.6	Das Flaschenhalsprinzip; Prinzip vom Minimum . . . . .	31
<b>2</b>	<b>Beschreibung biologischer Abwasserreinigungssysteme</b>	<b>34</b>
2.1	Grundlagen der Abwasserreinigung . . . . .	34
2.2	Belebtschlammreaktoren . . . . .	36
2.2.1	Der Standard-Chemostat oder Fermenter (Durchflussfermenter) . . . . .	36
2.2.2	Fermenter mit Biomassenrückführung (Belebungsverfahren) . . . . .	38
2.2.3	Mikrobiologische Umsetzung der Stickstoffverbindungen . . . . .	40
2.2.4	Grundlagen der Nitrifikation . . . . .	41
2.2.5	Der Nitrifikationsprozess im Belebtschlammbecken . . . . .	42
2.2.6	Grundlagen der Denitrifikation . . . . .	43
2.2.7	Der Denitrifikationsprozess im Belebtschlammbecken . . . . .	44
<b>II</b>	<b>Modelle und ihre mathematischen Grundlagen</b>	<b>48</b>
<b>3</b>	<b>Beschreibung unterschiedlicher Enzym-Kinetik</b>	<b>49</b>
3.1	Untersuchung der Grenzen der Monod-Kinetik . . . . .	51
3.2	Vergleich Monod- / Contois- Kinetik . . . . .	55



<b>4</b>	<b>Prinzip der kontinuierlichen Kultivierung / Die Theorie des Chemostaten</b>	<b>57</b>
4.1	Einfache Wachstumsgleichung für die Biomasse . . . . .	57
4.2	Das Altern einer Zellkultur . . . . .	59
4.3	Methode des Chemostaten . . . . .	60
4.4	Das mathematische Modell des Standard - Chemostaten . . .	65
4.5	Das dynamische Gleichgewicht im Standard - Chemostaten .	69
4.5.1	Stationäre Konzentrationen bei Standard - Chemo- staten mit Monod - / Contois - Kinetik . . . . .	70
4.6	Das mathematische Modell des MBR - Chemostaten . . . . .	78
4.7	Das dynamische Gleichgewicht im MBR-Chemostaten . . . .	79
4.7.1	Stationäre Konzentrationen bei MBR-Chemostaten mit Monod - / Contois - Kinetik . . . . .	79
4.8	Weitere mathematische Analysen am Standard-Chemostaten	87
<b>5</b>	<b>Dynamische Simulation von Chemostaten mit unterschiedlicher Enzym - Kinetik</b>	<b>93</b>
5.1	Simulationsstudie eines Standard - Chemostaten . . . . .	93
5.1.1	Experiment 1 mit einem Standard-Chemostaten . . .	94
5.1.2	Experiment 2 mit einem Standard-Chemostaten . . .	95
5.2	Simulationsstudie eines MBR - Chemostaten . . . . .	98
5.2.1	Experiment 1 mit einem MBR-Chemostaten . . . . .	98
5.2.2	Experiment 2 mit einem MBR-Chemostaten . . . . .	98
<b>6</b>	<b>Parameter-Bestimmung</b>	<b>101</b>
6.1	Indirekte Parameterbestimmung durch Messung im dynamischen Gleichgewicht . . . . .	102
6.1.1	Modelle mit Monod-Kinetik . . . . .	103
6.1.2	Modelle mit Contois-Kinetik . . . . .	104
6.2	Bestimmung der maximalen Wachstumsrate im Batch-Betrieb . . . . .	105
6.3	Dynamische Parameterbestimmung unter Verwendung von Optimierungsmethoden . . . . .	106
6.3.1	Erzeugung einer künstlichen Messzeitreihe . . . . .	108
6.3.2	Parameterbestimmung . . . . .	112
6.3.3	Identifizierung der zugrundeliegenden Kinetik . . . .	114
<b>III</b>	<b>Entwicklung des Kernmodells zur Beschreibung biologischer Abwasserreinigung</b>	<b>116</b>
<b>7</b>	<b>Activated Sludge Modell 1 (ASM 1)</b>	<b>117</b>
7.1	Stoffgruppen und biologische Prozesse . . . . .	117
7.2	Mathem. Modellierung der biolog. Prozesse im ASM 1 . . . .	120

<b>8 Kernmodell biologischer Abwasserreinigung</b>	<b>126</b>
8.1 Beschreibung der biologischen Prozesse des Kernmodells . . .	127
8.1.1 Aerobes Wachstum der Heterotrophen . . . . .	133
8.1.2 Anoxisches Wachstum der Heterotrophen . . . . .	135
8.1.3 Aerobes Wachstum der Autotrophen . . . . .	137
8.1.4 Zerfall der Heterotrophen . . . . .	139
8.1.5 Zerfall der Autotrophen . . . . .	140
8.1.6 Hydrolyse . . . . .	141
<b>9 Möglichkeiten systematischer Erweiterung des Kernmodells</b>	<b>143</b>
9.1 Beschreibung der allgemeinen Strukturen zusätzlicher Abbauketten . . . . .	144
9.2 Beschreibung der Integraton allgemeiner Abbauketten ins Kernmodell . . . . .	147
<b>10 Hydraulische Modelle biologischer Abwasserreinigungsanlagen</b>	<b>150</b>
10.1 Abwasserreinigungsanlage mit einem Belebungsbecken . . . .	150
10.1.1 Hydraulik des Belebungsbeckens . . . . .	151
10.1.2 Hydraulik des Nachklärbeckens . . . . .	153
10.1.3 Differentialgleichung der gesamten Hydraulik . . . .	156
10.2 Abwasserreinigungsanlage mit zwei Belebungsbecken . . . .	157
10.2.1 Hydraulik des zusätzlichen Belebungsbeckens . . . .	157
10.2.2 Differentialgleichung der gesamten Hydraulik . . . .	160
10.3 Hydraulischer Sauerstoffeintrag . . . . .	161
<b>IV Simulation von Abwasserreinigungsanlagen</b>	<b>162</b>
<b>11 Design der Simulationsstudie</b>	<b>163</b>
11.1 Fragestellungen . . . . .	163
11.2 Modell-Annahmen; Parameter-Settings . . . . .	164
11.2.1 Anlagentypen . . . . .	164
11.2.2 Biologische Modellparameter . . . . .	164
11.2.3 Verfahrenstechnische Parameter . . . . .	166
<b>12 Simulationsstudie</b>	<b>167</b>
12.1 Untersuchung der Substratelimination (Experiment 1) . . . .	167
12.2 Untersuchung der Stickstoffelimination . . . . .	173
12.2.1 Stickstoffelimination durch alternierende Belüftung (Experiment 2a) . . . . .	173
12.2.2 Stickstoffelimination durch Denitrifikationsbecken . . .	180
<b>13 Schlussbemerkung und Ausblick</b>	<b>183</b>

<b>V</b>	<b>Anhang</b>	<b>184</b>
<b>A</b>	<b>Software-Implementierung der Parameter-Schätzung</b>	<b>184</b>
<b>B</b>	<b>Software-Implementierung der Simulationsstudie</b>	<b>190</b>

## Abbildungsverzeichnis

1	Energiediagramm katalytisch beschleunigter Reaktionen . . .	17
2	Enzym-Substrat-Reaktion . . . . .	18
3	Michaelis-Menten-Mechanismus (Monod-Kinetik) . . . . .	21
4	Zeit-Umsatz-Kurven . . . . .	22
5	Bestimmung der Reaktionsparameter . . . . .	23
6	Einfluss des pH-Wertes auf enzymatische Reaktionen . . . . .	24
7	Einfluss der Temperatur auf enzymatische Reaktionen . . . . .	25
8	Kompetitive Hemmung . . . . .	27
9	Nicht-kompetitive Hemmung . . . . .	28
10	Unkompetitive Hemmung . . . . .	29
11	Produkthemmung . . . . .	30
12	Darstellung unterschiedlicher Fermenter . . . . .	39
13	Biomassenaustrag unterschiedlicher Fermenter . . . . .	40
14	Abhängigkeit des Schlammalters von der Schlammbelastung . . . . .	43
15	Denitrifikationsanlagen . . . . .	46
16	Denitrifikation bei alternierender Belüftung . . . . .	47
17	Funktionaler Verlauf der Enzym-kinetiken . . . . .	50
18	Lösung der Enzym-Kinetik-DGL für $ES$ mit Variation des Parameters $E/S$ . . . . .	53
19	Lösung der Enzym-Kinetik-DGL für $ES$ und konstanter Sub- stratkonzentration mit Variation des Parameters $E/S$ . . . . .	54
20	Enzymkinetiken unter Variation der Konzentrationen . . . . .	56
21	Wachstumskurve der Biomasse (spez. Wachstumsrate $\mu$ ) . . . . .	59
22	Schematische Darstellung des Chemostaten . . . . .	61
23	Abhängigkeit spez. Wachstumsrate / Substratkonzentration . . . . .	62
24	Abhängigkeit der spez. Wachstumsrate von anderen Stoff- wechselprodukten . . . . .	63
25	Dynamisches Gleichgewicht . . . . .	69
26	Abhängigkeit stat. Konzentrationen / Verdünnungsrate . . . . .	90
27	Produktivität des Chemostaten . . . . .	92
28	Standard-Chemostat: stat. Konzentrationen . . . . .	94
29	Standard-Chemostat: stat. Konzentrationen . . . . .	97
30	MBR-Chemostat: stat. Konzentrationen . . . . .	99
31	MBR-Chemostat: stat. Konzentrationen . . . . .	100
32	Messung der max. Wachstumsrate . . . . .	105
33	Algorithmus Parameterbestimmung . . . . .	107
34	Künstliche Messzeitreihen für einen Standard-Chemostaten . . . . .	110
35	Künstliche Messzeitreihen für einen MBR-Chemostaten . . . . .	111
36	Überblick der Reaktionen des ASM1 . . . . .	119
37	Monod - Verlauf . . . . .	121
38	Kernprozesse biologischer Abwasserreinigung . . . . .	127
39	Aerober Wachstumsprozess der Heterotrophen . . . . .	133

40	Anaerober Wachstumsprozess der Heterotrophen . . . . .	135
41	Aerober Wachstumsprozess der Autotrophen . . . . .	137
42	Zerfallsprozess der Heterotrophen . . . . .	139
43	Zerfallsprozess der Autotrophen . . . . .	140
44	Hydrolyse biol. langsam abbaubarer Stoffe . . . . .	141
45	Reduktion einer theoretischen Abbaukette . . . . .	144
46	Darstellung einer Abbaukette . . . . .	145
47	Darstellung des erweiterten Kernmodells . . . . .	146
48	Hydraulik bei einem Belebungsbecken mit Nachklärung . . .	150
49	Hydraulik eines Belebungsbeckens . . . . .	152
50	Hydraulik des Nachklärung . . . . .	154
51	Hydraulik von zwei Belebungsbecken mit Nachklärung . . .	157
52	Hydraulik des zweiten Belebungsbeckens . . . . .	158
53	Konfigurationen der Abwasseranlage . . . . .	164
54	Experiment 1; Setting 1 . . . . .	170
55	Experiment 1; Setting 1 . . . . .	171
56	Experiment 1; Setting 1 . . . . .	172
57	Experiment 2a; Versuch 1 . . . . .	176
58	Experiment 2a; Versuch 2 . . . . .	179
59	Experiment 2b; Setting 3 . . . . .	181
60	Experiment 2b; Setting 3 . . . . .	182
61	Experiment 2b; Setting 3 . . . . .	182

## Tabellenverzeichnis

1	Übersicht über Enzymkinetiken und ihre Literaturreferenzen	50
2	Parameter für heterotrophe Bakterien . . . . .	89
3	Definition der Parameter . . . . .	109
4	Ergebnisse der Parameterbestimmung der Halbwertskonstante $K_{S,m}$ eines Standard-Chemostaten . . . . .	113
5	Ergebnisse der Parameterbestimmung der Halbwertskonstante $K_{S,m}$ eines MBR-Chemostaten . . . . .	113
6	Vergleich Parameterbestimmung eines Standard-Chemostaten	115
7	Vergleich Parameterbestimmung eines MBR-Chemostaten . .	115
8	Stoffgruppen im ASM1 . . . . .	118
9	Kinetische Prozesse im ASM1 . . . . .	118
10	Kinetischen Prozess-Parameter des ASM1 . . . . .	122
11	Prozessraten des ASM1-Modells . . . . .	123
12	Stöchiometrie des ASM1-Modells (Stoffgruppe 1-7) . . . . .	124
13	Stöchiometrie des ASM1-Modells (Stoffgruppe 8-13) . . . .	125
14	Stöchiometrische Parameter des ASM1 . . . . .	125
15	Variable der Kernprozesse . . . . .	128
16	Abwasserkomponenten im Modell . . . . .	129

17	Bezeichnung der Kernprozesse . . . . .	130
18	Übersicht unterschiedlicher Prozesskinetiken . . . . .	131
19	Modellgleichungen . . . . .	132
20	Prozess: Aerobes Wachstum der Heterotrophen . . . . .	134
21	Prozess: Anaerobes Wachstum der Heterotrophen . . . . .	135
22	Prozess: Aerobes Wachstum der Autotrophen . . . . .	137
23	Prozess: Zerfall der Heterotrophen . . . . .	140
24	Prozess: Zerfall der Autotrophen . . . . .	140
25	Prozess: Hydrolyse . . . . .	141
26	Erweiterung der Kernprozesse . . . . .	147
27	erweiterte Modellgleichungen . . . . .	148
28	Prozessraten des erweiterten Kernmodells . . . . .	149
29	Variable des hydraulischen Modells . . . . .	151
30	Parameter des hydraulischen Sauerstoffeintrags . . . . .	161
31	Werte der biologischen Parameter des Kernmodells . . . . .	165
32	Simulationsparameter des hydraulischen Modells . . . . .	166
33	Simulationsparameter des hydraulischen Sauerstoffeintrags . . . . .	166
34	Hydraulische Parameter: Experiment 1 . . . . .	167
35	Hydraulische Parameter: Experiment 2 . . . . .	173
36	Schaltzeitpunkte der Belüftung . . . . .	174
37	Schwellwerte des Nitrats zur Regelung der Belüftung . . . . .	177

Teil I

## Biologische Grundlagen

# 1 Mathematische Beschreibung der Stoffwechselkinetik

Wie in [Hartmann(1983)] beschrieben, stellt für das Funktionieren natürlicher biologischer Systeme neben der qualitativen und quantitativen Regelung der Beziehungen zwischen den einzelnen Organismen, auch eine Ordnung innerhalb der jeweiligen Geschwindigkeitskomponenten eine wichtige Voraussetzung dar. Das resultiert aus der Tatsache, dass jeder Stoffumsatz einer Organismenart in einer Reaktionskette durch den Stoffumsatz der vorausgehenden Organismenart bestimmt ist. Da jedoch alle Organismenarten in einem Netzwerk von Reaktionen zusammengefasst sind, ist jede Art gleichzeitig Anfang und Ende einer Reaktionskette.

Die Stoffwechselaktivität von Bakterien erfordert klar definierte äussere Bedingungen. Zwar sind Bakterien über weite Strecken sehr anpassungsfähig, jedoch setzt ein funktionierender Stoffwechsel einige Reaktionen voraus, die durch geeignete äussere Bedingungen ermöglicht werden müssen. Nur durch Vorhandensein dieser Bedingungen kann es zu einem funktionierenden Stoffwechsel kommen, der neben dem Überleben auch andere wichtige Funktionen sicherstellt. Dazu zählt die Synthese der für das Wachstum wichtigen Ribosomen, so wie die für die enzymkatalitische Reaktion notwendigen Enzyme, die natürlich wiederum Voraussetzung für einen funktionierenden Stoffwechsel sind. Dies weist bereits auf die Kreislaufstruktur des Stoffwechsels hin. Zur vereinfachten Darstellung wird hier eine Bakterienart in einem homogenen durchmischten Nährstoffmedium angenommen. Bakterien und Nährstoffmoleküle sind somit gleichmäßig über den gesamten Reaktionsraum verteilt.

Damit eine Stoffwechselreaktion stattfinden kann, müssen somit Bedingungen vorliegen, die den Ablauf der hier angeführten Vorgänge und Prozesse ermöglichen und unterstützen:

1. Kontakt zwischen Bakterie und Nährstoffmolekül (Diffusion)
2. Bindung des Nährstoffmoleküls an der Oberfläche des Bakteriums (Sorption)
3. Aufnahme des Nährstoffmoleküls und Ablauf (enzymatischer Prozess) der biochemischen Reaktionen

Diese angeführten Prozesse, also

- Diffusion
- Sorption
- enzymatischer Prozess



sind theoretisch geschwindigkeitsbestimmend für den Ablauf der biochemischen Stoffwechselreaktion. Im Folgenden werden diese Prozesse im Detail beschrieben und ihre Eigenschaften näher erläutert.

## 1.1 Diffusion

Die Ausbreitung (Diffusion) und gleichmäßige Verteilung eines Stoffes S in einem anderen Stoff oder Stoffgemisch resultiert aus der kinetischen Energie der einzelnen Moleküle. Die Bewegung ist prinzipiell ungerichtet (siehe auch [Hartmann(1983)]).

Eine gerichtete Diffusion ist das Ergebnis von Konzentrationsunterschieden; sie erfolgt in diesem Fall entlang dem Konzentrationsgefälle. Die Diffusion kommt scheinbar zum Stillstand, wenn der Konzentrationsunterschied ausgeglichen wurde, im physikalischen Sinne ist jedoch in diesem Fall nur die mittlere Bewegung Null, das heißt, die Häufigkeit der Bewegung in jeder Richtung ist gleich groß.

Werden jedoch an einem Punkt des Systems die Moleküle der Substanz S durch eine chemische oder biologische Reaktion verbraucht, stellt sich zu diesem Zeitpunkt ein Konzentrationsgefälle ein und die Diffusion wird bevorzugt in diese Richtung ablaufen. Die Diffusion ist abhängig von

- der Größe des Moleküls (kleine Moleküle diffundieren schneller)
- der Dichte des Mediums (je dichter das Medium, desto kürzer die freie Weglänge bis es zu einem Stoß mit einem anderen Molekül kommt und um so geringer deswegen die Geschwindigkeit)

Für ein biologisches System ergeben sich daraus folgende Konsequenzen: In einem System in dem Bakterien oder Bakterienkolonien frei in Schwebel sind, bildet sich auf Grund der Stoffwechseltätigkeit der Bakterien um die Organismen selbst ein Feld mit geringerer Nährstoffkonzentration aus. Auf Grund dieses entstehenden Gradienten erfolgt die Diffusion von Nährstoffen zu den Zellen hin. Dieser Diffusionsvorgang bestimmt maßgeblich die Geschwindigkeit der gesamten Stoffwechselkinetik. Wenn es sich bei dem System um einen aeroben Abbau handelt, hängt die Geschwindigkeit zusätzlich zur Verfügbarkeit von Nährstoffen auch wesentlich vom Vorhandensein von Sauerstoff in der Zellumgebung ab.

Eine Erhöhung der Temperatur hat eine Erhöhung der Diffusionsgeschwindigkeit zur Folge, die jedoch auch eine Erhöhung der Reaktionen in der Zelle zur Folge hat, und somit verändert eine Temperaturerhöhung nicht den Charakter des Systems. Die Diffusion bleibt damit der geschwindigkeitsbestimmende Mechanismus bis hin zu der Temperatur, bei der biochemische Reaktionen ihre Maximalgeschwindigkeit erreicht haben und eine weitere Erhöhung zur Zerstörung des Zelleiweißes führt.

Zur Verhinderung von verminderter Reaktionsgeschwindigkeit auf Grund

von Nährstoffgradienten in einem System muß die Diffusionsgrenzschicht vermindert werden, das bedeutet, dass die Grenzkonzentration von Substrat an der Bakterienzelle erhöht wird.

Das erfolgt am Besten durch die Erzeugung turbulenter Strömungsverhältnisse. Bei den in unserem Fall später betrachteten Abwasserreinigungsbecken wird von einer optimalen Durchmischung ausgegangen. Diese wird bei realen Anlagen durch Rührwerke sichergestellt, die die Nährstoffe (Substrate) so wie den eingebrachten Sauerstoff homogen im System verteilen. Unter diesen Umständen kann man die Diffusionszeiten im System als extrem kurz ansetzen, so dass die Diffusion nicht die Gesamtgeschwindigkeit des Abbauprozesses limitiert.

## 1.2 Sorptionsvorgänge

Es gibt mehrere Begriffe zur Beschreibung der unterschiedlichen Sorptionsvorgänge:

- "Adsorption": Anlagerung und lose Bindung von Molekülen oder kleinen Partikeln an Oberflächen, verursacht durch Oberflächenladungen
- "Chemosorption": Bindung von angelagerten Moleküle durch chemische Bindungskräfte (z.B. durch Elektronenübergänge)
- "Absorption": Aufnahme von Molekülen in das Innere von anderen Körpern

Adsorption und Chemosorption bedeuten eine lokale Verdichtung einer Substanz an äußeren oder inneren Oberflächen. Sie können eigenstehende Mechanismen oder Teilmechanismen von Reaktionen oder Reaktionsketten sein. Eine Voraussetzung enzymatischer Reaktionen ist die kurzzeitige chemische Verbindung zwischen Substrat und Enzym durch Adsorption. Die Geschwindigkeit des Adsorptionsvorganges ist dabei sehr hoch.

Die Adsorption kann mit Hilfe der Gleichung von "Freundlich" beschrieben werden. Hohe Adsorptionskraft drückt sich dabei durch einen hohen Wert  $A_0$  aus.

$$A = A_0 C^{\frac{1}{n}} \quad (1)$$

mit

$A$	...	absorbierte Menge in mg/g
$A_0, 1/n$	...	Adsorptionskenngrößen
$C$	...	Gleichgewichtskonzentrationen in mg/l

Der Adsorptionsvorgang endet mit einem Gleichgewichtszustand zwischen freiem und gebundenem Adsorbat, der abhängig von der Temperatur und

dem pH-Wert ist. Daher existiert für jedes System ein optimaler pH-Wert. Der Temperatureinfluss ist indirekt proportional, so dass bei einer steigenden Temperatur die Adsorption auf Grund der höheren inneren Energie der Teilchen zurück geht.

### 1.3 Enzymatische Reaktion

#### 1.3.1 Grundlagen enzymatischer Reaktionen

Enzyme sind die Katalysatoren des Stoffwechsels. Sie bestehen aus komplex gebauten Eiweißkörpern, die eine reversible Bindung mit dem Substrat eingehen ( $E + S \rightleftharpoons ES$ ). Wie in [Hartmann(1983)] beschrieben, hat der ES-Komplex einen höheren Energielevel als das Substrat S vor der Verbindung mit dem Enzym. Der ES-Komplex zerfällt dann in das Enzym E und das Produkt P.

Die Bedeutung des Enzyms liegt in der katalytischen Wirkung, da es die Energieschwelle, die für die Umwandlung des Substrates in das Produkt notwendig ist, zu reduzieren hilft. Enzyme können dabei nur exergone Reaktionen beschleunigen. Die Reaktion kann deshalb nur in eine Richtung erfolgen, also vom Zustand höherer Energie der Ausgangssubstanzen zum Zustand mit geringerer Energie des Reaktionsproduktes. Die Gesamtmenge der freiwerdenden Energie (entspricht der Änderung der freien Energie  $= -\Delta G$ ) bleibt durch das Vorhandensein des Katalysators oder des Enzyms unverändert. Die Darstellung (siehe Abb. 1) ist insofern vereinfacht, als in der Realität die Reaktionen über mehrere Zwischenstufen ablaufen. Die Gesamtgeschwindigkeit der enzymatischen Reaktion hängt von der Substratkonzentration, der Enzymmenge, der Temperatur und dem pH-Wert ab.

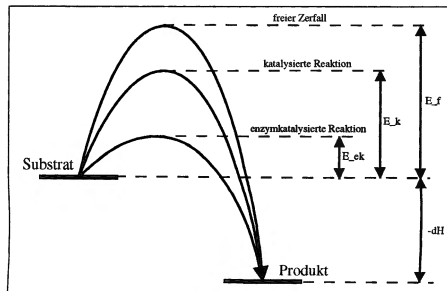


Abbildung 1: Energiediagramm katalytisch beschleunigter Reaktionen; aus [Hartmann(1983)]

### 1.3.2 Enzymatische Grundreaktion und ihre mathematische Beschreibung

Die Enzymkinetik wird durch folgende chemische Reaktion beschrieben. Dabei verbindet sich zuerst das Substratmolekül S mit dem Enzymmolekül E und bildet einen Enzym-Substrat-Komplex [ES]. Am Ende des Prozesses entsteht ein Produktmolekül P und ein freies Enzymmolekül.

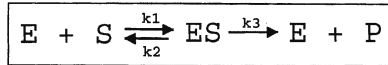


Abbildung 2: Enzym-Substrat-Reaktion

Die Koeffizienten  $k_1$ ,  $k_2$  und  $k_3$  stellen die Geschwindigkeitskonstanten der jeweiligen Reaktion dar, d.h. sie beschreiben wie schnell die chemischen Reaktionen ablaufen. Der Pfeil deutet an, dass eine Reaktion in eine bestimmte Richtung abläuft. Die Bildung des Enzym-Substrat-Komplexes stellt also einen reversiblen Prozess dar, während der Zerfall des ES - Komplexes in das freie Enzym und ein Produkt der Einfachheit halber als irreversibel angenommen wird. Diese Annahme entspricht in den meisten Fällen der Realität und kann bei der hier vorliegenden Problemstellung ohne weiteres angenommen werden.

Aus dem eben beschriebenen Reaktionsschema (Abb. 2) können folgende Differentialgleichungen angeschrieben werden:

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= -k_1SE + k_2[ES] \\ \frac{dE}{dt} &= -k_1SE + k_2[ES] + k_3[ES] \\ \frac{d[ES]}{dt} &= +k_1SE - k_2[ES] - k_3[ES] \\ \frac{dP}{dt} &= k_3[ES] \end{aligned} \tag{2}$$

Durch Addition der zweiten und dritten Gleichung von (2) folgt:

$$\frac{d}{dt}(E + [ES]) = 0 \tag{3}$$

$$E + [ES] = E_0 = \text{const.} \tag{4}$$

Diese resultierende Gleichung beschreibt die Erhaltung des Enzymmoleküls im Reaktionsprozess.  $E_0$  bezeichnet dabei die Anfangskonzentration des Enzyms,  $E$  ist die Konzentration des freien Enzyms und  $[ES]$  die des gebundenen Enzyms im System.

Die dritte Gleichung kann nun unter Verwendung von (4) umgeschrieben werden:

$$\begin{aligned}\frac{d[ES]}{dt} &= +k_1SE - k_2[ES] - k_3[ES] \\ &= +k_1S(E_0 - [ES]) - k_2[ES] - k_3[ES] \\ &= +k_1SE_0 - [ES](k_2 + k_3 + k_1S)\end{aligned}\quad (5)$$

Wird nun im Folgenden die stationäre Konzentration  $\overline{[ES]}$  des Systems betrachtet ( $\frac{d[ES]}{dt} = 0$ ), so erhält man:

$$\begin{aligned}\overline{[ES]} &= \frac{k_1SE_0}{k_2 + k_3 + k_1S} \\ &= \frac{SE_0}{\frac{k_2+k_3}{k_1} + S} \\ &= \frac{SE_0}{K_m + S}\end{aligned}\quad (6)$$

Die Größe  $K_m$  wird Michaelis-Konstante genannt und ist, wie durch obige Ableitung gezeigt, wie folgt definiert:

$$K_m = \frac{k_2 + k_3}{k_1}\quad (7)$$

Im physikalischen Sinn stellt die Michaelis-Konstante die Substratkonzentration dar, bei der sich die Hälfte der Enzymmoleküle im gebundenen Zustand befindet (Halbsättigungskonstante).

Diese Ableitung wurde unter der Bedingung der Stationarität des Prozesses gemacht. Es ist also die Überlegung notwendig, in welchen Fällen diese Einschränkung der Allgemeinheit seine Gültigkeit hat. Diese Einschränkung ist erlaubt, wenn

- die Substratkonzentration beständig durch einen Zufluss von Außen aufrecht erhalten wird
- die Konzentration des Enzyms E klein gegen die Konzentration des Substrates S ist, so dass sich die Substratkonzentration im betrachteten Zeitraum nur unwesentlich ändert.

Das bedeutet das Enzym muss lange "arbeiten", um die anfängliche Substratkonzentration wesentlich zu erniedrigen. Unter diesen Bedingungen können wir annehmen, dass das Enzym stationären Bedingungen unterliegt. Diese Bedingungen sind bei enzymkinetischen Untersuchungen im Reagenzglas meist gegeben, und sie sind auch in der lebenden Zelle vorhanden, wenn ein Substratzufluss aus dem die Zelle umgebenden Milieu vorhanden ist. Im

Fälle von biologischen Abwasserreinigungsbecken muss der externe Zufluss von Substraten in das Becken gesichert sein. In üblichen Belebtschlammbecken ist dies der Fall. Die Konzentration der Biomasse, die Proportional dem vorhandenen Enzym ist, ist dabei im Verhältnis zum Substrat klein.

Genauere Untersuchungen der Dynamik und der Korrektheit stationärer Annahmen sind jedoch bei sogenannten Membran - Bioreaktoren notwendig. Bei diesen Reaktoren sind die Milieubedingungen durch eine erhöhte Konzentration der Biomasse (also auch der Enzyme) im Verhältnis zum Substrat geprägt.

Für den stationären Fall aus der Sicht des Enzyms ergeben sich also ausgehend vom DGL - System (2) die Differentialgleichungen für das Substrat und Produkt wie folgt:

$$\begin{aligned}\frac{dS}{dt} &= -k_1SE + k_2[ES] = -k_3[ES] = -\frac{k_3E_0S}{K_m + S} \\ \frac{dP}{dt} &= k_3[ES] = -\frac{dS}{dt} = \frac{k_3E_0S}{K_m + S}\end{aligned}\quad (8)$$

Aus den erhaltenen Gleichungen resultiert, dass die Geschwindigkeit mit der das Substrat verbraucht wird, gleich sein muss der Geschwindigkeit, mit der die Produktkonzentration zunimmt. Das folgt unmittelbar aus dem Gesetz der Massenerhaltung. Dies gilt natürlich nur dann, wenn von außen kein weiteres Substrat in das System hinzukommt.

Die Gleichung (8) spiegelt den Sättigungscharakter wieder - eine wichtige Eigenschaft von Enzymreaktionen. Es existiert also bei kleinen Substratkonzentrationen eine starke Abhängigkeit der Produktsynthese von der Substratkonzentration, während für  $S \rightarrow \infty$  die Geschwindigkeit konstant bleibt und nicht mehr von  $S$ , sondern nur von  $k_3E_0$  abhängt. Diese Größe nennt man die maximale Geschwindigkeit  $\nu_{max}$  der Enzymreaktion und die Konstante  $k_3$ , die Umsatzzahl des Enzyms. Die Umsatzzahl des Enzyms sagt aus, wieviel katalytische Umwandlungen das Enzym pro Zeiteinheit bei voller Substratsättigung ausführt. Gleichung (8) wird daher auch häufig in der Form

$$\nu = \nu_{max} \frac{S}{K_m + S} \quad (9)$$

geschrieben und als Steady-state-Modell des Michaelis-Menten-Mechanismus bezeichnet (Abb. 37).

Die für die Enzymreaktion charakteristische Zeit  $\tau_e$  hängt von der Umsatzzahl des Enzyms, also von der Zeit  $\tau = 1/k_3$  ab. Die charakteristische Zeit  $\tau_e$  ist jedoch größer als  $\tau$ . Unter  $\tau_e$  muss man die Zeit verstehen, die das Enzym benötigt, um die überwiegende Menge des Substrats umzusetzen.  $\tau_e$  kann

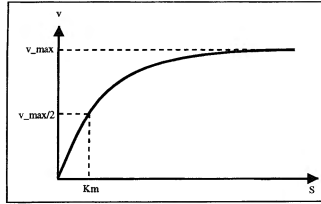


Abbildung 3: Michaelis-Menten-Mechanismus (Monod-Kinetik)

aus der Gleichung (8 mit der Annahme  $S/K_m + S \approx 1$  ermittelt werden:

$$\frac{1}{\tau_e} \approx \frac{\left| \frac{dS}{dt} \right|}{S} \approx \frac{k_3 E_0}{S} \quad (10)$$

Somit ergibt sich

$$\tau_e \approx \frac{1}{k_3} \frac{S}{E_0} \quad (11)$$

### 1.3.3 Bestimmung der Reaktionsparameter

Eine enzymatische Reaktion ist durch die Parameter  $K_m$  und  $\nu_{max}$  charakterisiert.  $K_m$  stellt dabei, wie bereits weiter oben dargestellt, die Halbwertskonstante dar.  $\nu_{max}$  ist jedoch nur soweit eine Konstante, als sich die Enzymkonzentration nicht ändert.

Zur Bestimmung der Parameter ist es notwendig, den zeitlichen Verlauf der Reaktion auszuwerten (Abb. 4). Für die Untersuchung selbst ist es unerheblich, ob der zeitliche Verlauf der Abnahme des Substrats  $S$  oder die Zunahme des Produkts  $P$  gemessen wird.

Bei der Bestimmung der Parameter werden in der Praxis grafische Darstellungen gewählt, aus denen man die Parameter direkt ablesen kann. Dies geschieht durch eine geschickte Umformung der Michaelis-Menten-Gleichung, so dass ihre grafische Repräsentation eine Gerade ergibt, und somit aus dem Diagramm die gesuchten Parameter leicht ermittelt werden können. Es gibt dabei unterschiedliche Methoden der Darstellung (siehe Abb. 5):

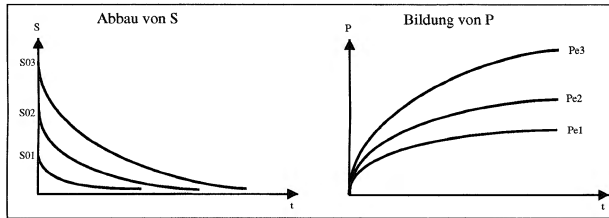


Abbildung 4: Zeit-Umsatz-Kurven; aus [Hartmann(1983)]

### Methode nach Lineweaver und Burk

Bei dieser Methode wird die Anfangsgeschwindigkeit der Reaktion bei unveränderter Enzymkonzentration, aber unterschiedlicher Substratkonzentration ermittelt. Die Michaelis-Menten-Gleichung wird in ihrer reziproken Form verwendet und der Reziprokwert der Geschwindigkeit  $1/\nu$  gegen die Reziprokwerte der Substratkonzentration  $1/S$  aufgetragen.

$$\frac{1}{\nu} = \frac{K_m}{\nu_{max}} \frac{1}{S} + \frac{1}{\nu_{max}}$$

Die resultierende Gerade ergibt durch den Schnittpunkt mit der Ordinate den Reziprokwert für  $\nu_{max}$  und durch den Schnittpunkt mit der negativen Abszisse den Reziprokwert für  $K_m$ .

### Methode nach Eadie

Hier ergibt sich durch Division der Michaelis-Menten-Gleichung durch die Substratkonzentration:

$$\frac{v}{S} = -\frac{1}{K_m} v + \frac{\nu_{max}}{K_m}$$

Durch Auftragen von  $v/S$  gegen  $v$  erhält man als Schnittpunkt mit der Abszisse den Wert  $\nu_{max}$  und aus der Steigung der Geraden den Wert für  $K_m$ .

### Methode nach Walker

Bei dieser Methode geht man vom zeitlichen Ablauf der Gesamtreaktion, also von der Henri-Gleichung (Gl. ??) aus. Multipliziert man die Henri-Gleichung mit dem Faktor  $1/t$ , so erhält man:

$$\frac{S_0 - S}{t} = \nu_{max} - K_m \frac{1}{t} \ln \frac{S_0}{S}$$



Beim Auftragen von  $(S_0 - S)/t$  gegen  $1/t \ln S_0/S$  erhält man eine Gerade, deren Schnittpunkt mit der Ordinate den Wert  $v_{max}$  und deren Steigung den Wert  $K_m$  ergibt.

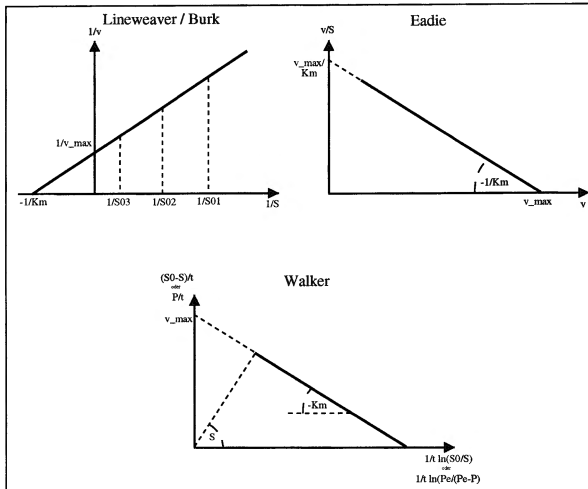


Abbildung 5: Bestimmung der Reaktionsparameter; aus [Hartmann(1983)]

### 1.3.4 Einfluss des pH-Wertes

Der pH-Wert kann die Geschwindigkeiten enzymatischer Reaktionen beeinflussen. Dies ergibt sich zwangsweise aus der Eiweißnatur der Enzyme. Wie in [Hartmann(1983)] dargestellt, verändert sich als Ergebnis einer pH-Wertänderung die Dissoziation der funktionellen Gruppen am Eiweißmolekül. Übertragen auf Enzyme bedeutet das eine Veränderung der wirksamen Enzymkonzentration. Wird darüber hinaus auch noch das Substrat- oder Produktmolekül durch den pH-Wert beeinflusst, so sind noch zusätzliche Einflüsse zu erwarten. Bei leichten pH-Wertänderungen ergeben sich reversible Veränderungen, wird jedoch durch eine zu hohe pH-Wert-Veränderung die Eiweißnatur stark geschädigt, so können daraus auch irreversible Veränderungen resultieren. Die Veränderungen bewirken in der Regel eine Änderung (d.h. Reduzierung) der Maximalgeschwindigkeit der enzymatischen Reaktion. Dies kann durch die oben angesprochene Reduzierung der wirksamen Enzymkonzentration erklärt werden. Neben der Maximalge-

schwindigkeit wird auch der  $K_m$  - Wert beeinflusst, da er wie folgt definiert ist:

$$K_m = \frac{k_2 + k_3}{k_1}$$

und die Bildung und der Zerfall des ES-Komplexes vom jeweiligen Ladungszustand der Moleküle abhängt. In der unten stehenden Abbildung (Abb. 6) ist die Abhängigkeit der Maximalgeschwindigkeit vom pH-Wert schematisch dargestellt.

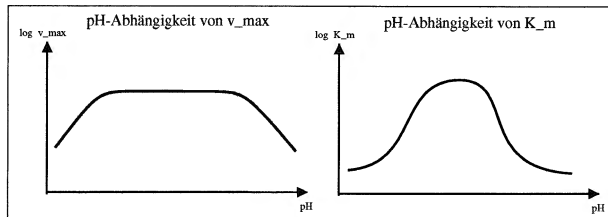


Abbildung 6: Einfluss des pH-Wertes auf enzymatische Reaktionen; aus [Hartmann(1983)]; Jedes Enzym hat ein mehr oder weniger breit ausgeprägtes pH-Optimum: z.B. Katalase pH = 6,5 - 7,5

### 1.3.5 Einfluss der Temperatur

Die Temperatur beeinflusst auf zwei Arten die Kinetik enzymatischer Reaktionen. Einerseits bewirkt eine Temperaturerhöhung eine Erhöhung der inneren Energie der Reaktionspartner und damit eine Beschleunigung der Bildung und des Zerfall des Enzym-Substrat-Komplexes [ES]. Die Reaktionsgeschwindigkeit steigt dabei exponentiell mit der Erhöhung der Temperatur an. Diese Gesetzmäßigkeit ist als "van't Hoffsche Regel" bekannt. In biologischen Systemen ist der Anstieg jedoch nicht unbegrenzt, da ab einer bestimmten Temperatur die Lockerung der Bindungen innerhalb des Enzyms beginnt und daraus eine räumliche Strukturänderung des Enzyms resultiert. Diese Strukturänderung ist zunächst reversibel, bei einer starken Temperaturerhöhung wird das Enzym jedoch irreversibel denaturiert. Das führt dazu, dass seine Leistung im enzymkatalyschen Prozess innerhalb eines engen Intervalls auf Null zurückgeht (siehe den schematischen Verlauf in Abb. 7).

Die Beobachtung von  $v_{max}$  und  $K_m$  über einen größeren Temperaturbereich ermöglicht die Ermittlung der Größe der Aktivierungsenergie sowie der Reaktionsenthalpie. Die Veränderung der freien Energie lässt sich bei Kenntnis von  $K_m$  berechnen. Mit den so gewonnenen Werten kann damit auch die

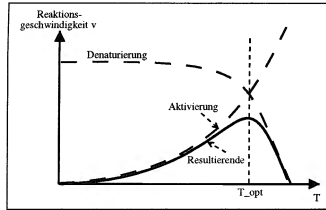


Abbildung 7: Einfluss der Temperatur auf enzymatische Reaktionen; aus [Hartmann(1983)]

Veränderung der Entropie ermittelt werden. Diese errechneten Daten beziehen sich auf das Gesamtsystem und nicht auf einen einzelnen Schritt in der Reaktionskette.

Im Folgenden sind die thermodynamischen Gleichungen zur Berechnung der Kenngrößen enzymatischer Reaktionen dargestellt:

#### Thermodynamische Ausgangsgleichungen:

Aus der Thermodynamik ist bekannt:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta s \quad (12)$$

$$\Delta G = -RT \ln K \quad (13)$$

#### van't Hoffsche Reaktionstherme:

Durch Gleichsetzen von Gl. 12 und Gl. 13 folgt:

$$\Delta H - T\Delta s = -RT \ln K$$

$$\ln K = -\frac{\Delta H}{RT} + \frac{\Delta s}{R} = f(T)$$

daraus folgt die van't Hoffsche Reaktionstherme:

$$\frac{d(\ln K)}{dT} = +\frac{\Delta H}{RT^2}$$

#### Aktivierungsenergie:

$$-\frac{E_a}{R} = \frac{\Delta(\ln \nu_{max})}{\Delta(1/T)}$$

#### Freie Energie $\Delta G$ bei Temperatur T:

$$\Delta G = -RT \ln K = -RT \ln \frac{1}{K_m}$$

**Veränderung der Reaktionsenthalpie im betrachteten Temperaturintervall:**

$$\frac{\Delta H}{R} = \frac{\Delta(\ln K_m)}{\Delta(1/T)}$$

**Veränderung der Entropie:**

$$\Delta s = \frac{\Delta H - \Delta G}{T}$$

mit

- T ... Temperatur in Kelvin
- R ... allgemeine Gaskonstante
- K ... Reaktionskonstante ( $=1/K_m$ )

#### 1.4 Enzymatische Reaktion mit Inhibitoren

Analog zur bisherigen Vorgangsweise können die Differentialgleichungen erweitert werden, so dass sie die Hemmung enzymatischer Reaktionen durch spezifische Substanzen - den sogenannten Inhibitoren - berücksichtigen. Dies ist ein sehr wichtiger Aspekt, da er eng mit der Steuerung und Regulation biologischer Prozesse verbunden ist. Die Regulation wird realisiert durch die Unterdrückung der Tätigkeit der Enzyme. In der Natur sind die Enzyme selten mit ihrer maximalen Kapazität wirksam, sondern die Zelle reguliert die Tätigkeit der Enzyme. Für die Beschleunigung des Prozesses verkleinert die Zelle die Hemmung und für die Verzögerung vergrößert sie diese.

Inhibitoren sind in der Regel kleine Moleküle, die häufig der Struktur der Substrate oder Produkte ähnlich sind. Man unterscheidet folgende Arten von Inhibition:

- kompetitive Hemmung (auch konkurrierende oder isosterische genannt)
- nicht-kompetitive Hemmung (nichtkonkurrierende oder allosterische)
- unkompetitive Hemmung
- Hemmung durch Substratüberschuss
- Produkthemmung

##### 1.4.1 Kompetitive Inhibition (konkurrierende, isosterische)

In diesem Fall ist der Inhibitor dem Substrat sterisch ähnlich und kann daher dessen Platz im aktiven Zentrum des Enzyms einnehmen. Inhibitor und Substrat konkurrieren um die selbe Stelle am Enzymmolekül (siehe Abb. 8).

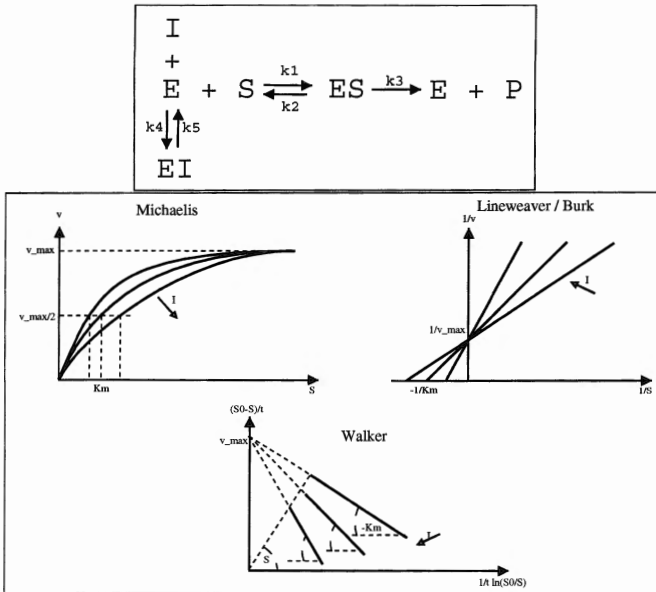


Abbildung 8: Kompetitive Hemmung; aus [Hartmann(1983)]

$$\frac{dP}{dt} = k_3 E_0 \frac{S}{K_m + S + I_0/K_i} \quad (14)$$

oder laut Buch Hartmann:

$$v = v_{\max} \frac{S}{K_m(1 + \frac{I}{K_i}) + S} \quad (15)$$

#### 1.4.2 Nicht-kompetitive Inhibition (nichtkonkurrierende, allosterische)

Hier ist der Inhibitor dem Substratmolekül sterisch unähnlich und verbindet sich mit einer anderen Stelle des Enzymmoleküls. Dabei stört er die Bildung des Enzym-Substrat-Komplexes nicht, sondern er behindert die katalytischen Funktionen des Enzyms, die Bildung des Produktes (siehe Abb. 9).

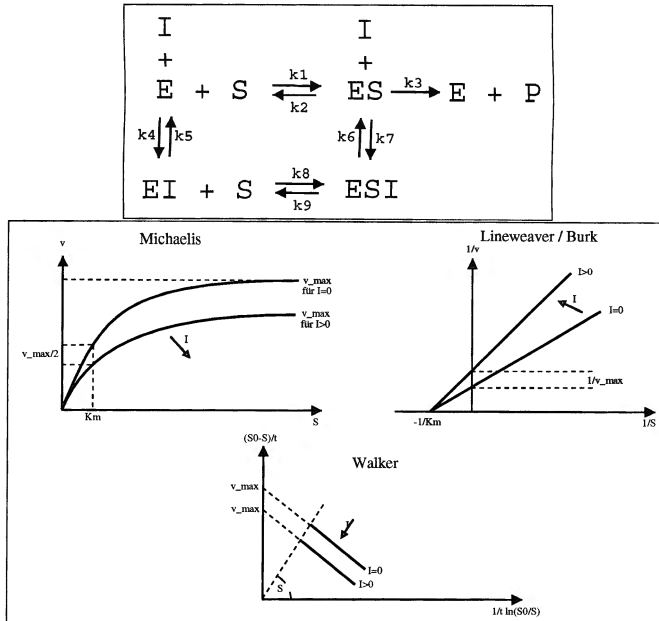


Abbildung 9: Nichtkompetitiven Hemmung; aus [Hartmann(1983)]

$$\frac{dP}{dt} = k_3 E_0 \frac{S}{(K_m + S)(1 + I_0/K_i)} \quad (16)$$

Hier bedeutet  $I_0$  die Konzentration des Inhibitors und  $K_i$  ist die sogenannte Inhibitionskonstante. In Analogie zur Michaelis-Konstante wird sie durch die Geschwindigkeit der Bildung und der Dissoziation des Enzym-Inhibitor-Komplexes festgelegt.

### 1.4.3 Unkompetitive Inhibition

Die unkompetitive Hemmung stellt einen Spezialfall der nichtkompetitiven Hemmung dar und ist dadurch gekennzeichnet, dass der Inhibitor  $I$  nur mit ES-Komplex reagiert. Somit werden in diesem Fall die Werte für  $v_{\max}$  und  $K_m$  verkleinert (siehe Abb. 10).

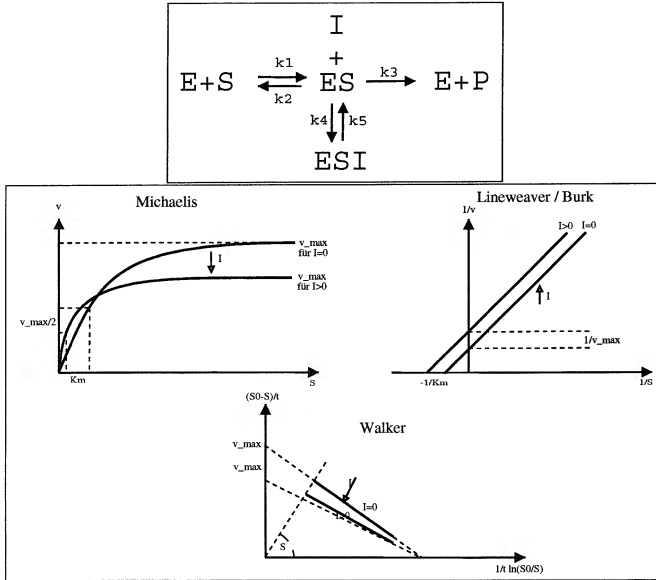


Abbildung 10: Unkompetitive Hemmung; aus [Hartmann(1983)]

$$v = v_{\max} \frac{1}{1 + \frac{I}{K_i} \frac{K_m}{1 + \frac{I}{K_i}}} + S \quad (17)$$

#### 1.4.4 Hemmung durch Substratüberschuss

Der Überschuss von Substratmolekülen kann ebenfalls die Hemmung der enzymatischen Reaktion bewirken, da es zu Fehlbildungen des ES-Komplexes kommen kann. Es verbinden sich dabei zwei Substratmoleküle mit dem Enzym, es entsteht also ein SES-Komplex. Diese Reaktion ist zwar reversibel, der SES-Komplex kann jedoch nicht in Enzym und Produkt zerfallen. Dieser Hemmtyp ist ebenfalls ein Spezialfall der nicht-kompetitiven Hemmung. Die Hemmung kann sich im Verlauf einer Reaktion verringern, wenn sich bei fortlaufender Reaktion die Substratkonzentration verringert. Eine Substrathemmung ist insofern zu erkennen, als bei steigender Anfangskonzentration von Substraten die Reaktionsgeschwindigkeit nicht erhöht, sondern reduziert

wird.

#### 1.4.5 Produkthemmung

Zur Produkthemmung kommt es im Speziellen dann, wenn in Reaktionsketten mehrere Enzyme beteiligt sind. Dabei kann ein Aufstau eines Produktes  $P_n$  resultieren, der auf ein in der Kette weiter vorne liegendes Enzym hemmend wirkt. Das Produkt  $P_n$  tritt dann z.B. mit dem Produkt  $P_1$  der ersten Reaktion, in Wettbewerb um das Enzym  $E_1$  (siehe Abb. 11).

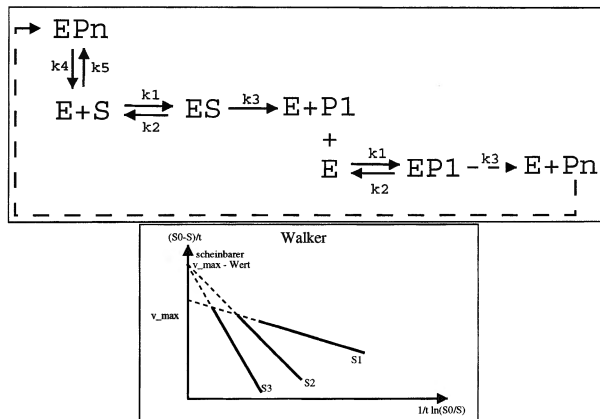


Abbildung 11: Produkthemmung; aus [Hartmann(1983)]

#### 1.5 Enzymatische Reaktion mit Aktivatoren

Es gibt neben den Inhibitoren auch Substanzen, die befähigt sind, die Aktivität eines Enzyms zu erhöhen, also seine Wirkung zu beschleunigen. Diese Substanzen werden Aktivatoren genannt. Das Wesen des Aktivierungsprozesses besteht darin, dass sich ein spezieller Aktivator A mit dem Enzym oder mit dem Enzym-Substrat-Komplex verbindet, so dass in Folge an Stelle der gewöhnlichen Reaktion



der Zerfall des tertiären Komplexes





abläuft. Dabei ist die Zerfallskonstante des aktivierten Komplexes wesentlich größer als die des ursprünglichen Enzym-Substrat-Komplexes. In diesem Fall kann die Differentialgleichung für die Bildungsrate des Produktes folgende Form aufweisen (dabei wird  $k_3$  im Vergleich zu  $k_3^a$  vernachlässigt):

$$\frac{dP}{dt} = k_3^a E_0 \frac{S}{K_m + S} \frac{A}{K_a + A} \quad (20)$$

$K_a$  ist hier die Aktivierungskonstante im selben Sinn wie die Michaelis-Konstante  $K_m$  oder die Inhibitionskonstante  $K_i$ .

## 1.6 Das Flaschenhalsprinzip; Prinzip vom Minimum

Im vorigen Abschnitt wurden die wesentlichen Funktionen von Stoffwechselprozessen in Bakterienkulturen beschrieben. Die in der Realität bei Stoffwechselvorgängen ablaufenden Prozesse bestehen jedoch aus einer Vielzahl biologischer, chemischer und physikalischer Reaktionen. Selbst einfache Ernährungsprozesse bestehen schon alleine aus tausenden enzymatisch katalysierten Reaktionen. Ein Versuch in diesen Systemen den genauen Ablauf aller einzelnen Reaktionen zu modellieren, würde ein System von tausenden nichtlinearen Differentialgleichungen mit tausenden zu bestimmenden Konstanten und Parametern ergeben. Differentialgleichungssysteme solcher Größenordnung sind in der Praxis nicht identifizierbar und selbst rechentechnisch nicht zu bewältigen. Selbst bei einer Beschränkung auf Teilprozesse der Reaktionsketten müsste mit hunderten nichtlinearen Differentialgleichungen gerechnet werden, deren Lösung in der Praxis ebenfalls unmöglich ist.

Es hat sich jedoch herausgestellt, dass in der Natur und im Speziellen bei Reaktionsketten im Organismus geschwindigkeitsbestimmende Prozesse existieren. Im Konkreten spielt in einer Kette von Prozessen der langsamste Teilprozess (Teilschritt) die Rolle des bestimmenden Kettengliedes. Die Modellierung vereinfacht sich dadurch enorm, da der Ablauf der Reaktionskette von diesem langsamsten Schritt abhängt. Diese Eigenschaft ist unter dem Namen "Flaschenhalsprinzip" oder "Prinzip vom Minimum" bekannt.

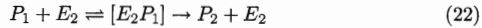
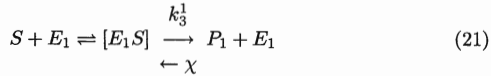
Unter stationären Bedingungen ist die Substanzmenge, die über die einzelnen Stufen fließt, in allen Stufen gleich und daraus resultiert, dass auch die Reaktionsgeschwindigkeit auf allen Stufen gleich ist. Zur Beantwortung der Frage nach dem geschwindigkeitsbestimmenden Schritt muss die langsamste Teilreaktion gefunden werden. Die langsamste Teilreaktion ist jedoch wiederum durch den kleinsten Wert der Geschwindigkeitskonstante charakterisiert. Bei einer Kette enzymatischer Reaktionen wird also die Reaktion mit der kleinsten Maximalgeschwindigkeit ( $\nu_{max} = k_3 E_0$ ) bestimmend sein;

bei der Reihe von Diffusion durch unterschiedliche Trennwände wird derjenige Schritt mit dem kleinsten Diffusionskoeffizienten der geschwindigkeitsbestimmende Schritt sein.

Das Prinzip vom Minimum ist bei biologischen Prozessen dominierend, so dass selbst wenn die Geschwindigkeiten der einzelnen Prozesse annähernd miteinander vergleichbar sind (z.B. wenn sie sich nur ca. um 10–20% unterscheiden), die Geschwindigkeit des Gesamtprozesses nur durch die Veränderung des langsamsten Reaktionsschrittes beeinflusst wird.

Wie in [Romanovsky et al.(1974)Romanovsky, Stepanova, and Chernavsky] dargestellt, kann diese Eigenschaft an folgendem Beispiel verdeutlicht werden:

Es wird eine Reaktionskette aus zwei aufeinander folgenden Enzymreaktionen betrachtet:



Dabei wird angenommen, dass das Endprodukt der ersten Reaktion  $P_1$  als Substrat, d.h. als Anfangsprodukt der zweiten Reaktion fungiert. In der ersten Reaktion (Gl. 21) ist eine schwache, jedoch prinzipiell reversible Reaktion mit Geschwindigkeitskonstante  $\chi$  angenommen. Wir betrachten nun zwei Fälle:

- Wenn die Maximalgeschwindigkeit der zweiten Reaktion (Gl. 22) größer ist als die Maximalgeschwindigkeit der ersten Reaktion (Gl. 21), so wird die Geschwindigkeit der Gesamtreaktion durch die erste Reaktion bestimmt. Alles, was die erste Reaktion an  $P_1$  liefert, wird von der schnelleren zweiten Reaktion sofort als Substrat verbraucht. Eine Änderung der Geschwindigkeit der zweiten Reaktion (z.B. durch die Wirkung von Inhibitoren) hat weder einen Einfluss auf die Geschwindigkeit der ersten Reaktion noch auf die der Gesamtreaktion, solange die Geschwindigkeit der zweiten Reaktion etwas höher ist als die der Ersten. In dieser Situation kann die Gesamtgeschwindigkeit nur durch eine Inhibition der ersten Reaktion gestört werden.
- Im zweiten Fall wird die Umkehrung der Situation angenommen; die erste Reaktion (Gl. 21) läuft also schneller ab als die Zweite (Gl. 22). In diesem Fall würde sich das Zwischenprodukt ansammeln. Wenn nicht eine geringe Reversibilität bestünde oder ein anderer Abfluss für das Zwischenprodukt vorhanden wäre, würde sich die Akkumulation des Zwischenprodukts fortsetzen und ein stationärer Verlauf des Prozesses

wäre im Allgemeinen unmöglich. Daher spielt die schwache Reversibilität eine wichtige Rolle und muss daher in der Abhandlung berücksichtigt werden.

In diesem Fall wird sich das Zwischenprodukt so lange ansammeln, bis sich sein Zufluss ( $k_3^1$ ) aus der ersten Reaktion mit dem Rückfluss ( $\chi$ ) und dem Abfluss durch die zweite Reaktion ausgeglichen haben. Es kommt dadurch zu einem Anstau des Zwischenprodukts und diese stellt eine Art Reserve dar.

So lange nun die Geschwindigkeit der zweiten Reaktion langsamer ist, also bestimmend für den Gesamtprozess, hängt die zweite Reaktion von keiner Größe der ersten Reaktion ab, da sie auf Grund der angesammelten Reserve im Zustand der Sättigung abläuft.

Ein Inhibitor ( $I_1$ ) kann also völlig ohne Einfluss auf die Geschwindigkeit eines Systems bleiben, solange sich die Reaktion ( $R_1$ ) auf die er wirkt, nicht im Minimum befindet. Unterschreitet der Prozess ( $R_1$ ) auf den er wirkt jedoch die Geschwindigkeit des langsamsten Prozesses, dann wird er zum geschwindigkeitsbestimmenden Prozess. Andere Effektoren (Inhibitoren oder Aktivatoren) werden dann unwirksam, und die Gesamtgeschwindigkeit wird dann vom Inhibitor ( $I_1$ ) über den nun neuen geschwindigkeitsbestimmenden Prozess ( $R_1$ ) geregelt.

Das Problem der Regulation und Selbstregulation ist eines der Wichtigsten für die Zelle. Das Prinzip vom Minimum (Flaschenhalsprinzip) erleichtert die Regulation wesentlich und ermöglicht dadurch, dass unter stationären Bedingungen die Aufmerksamkeit nur auf eine Schlüsselreaktion gerichtet werden muss.

Ein weiterer Aspekt des Prinzips vom Minimum ist die Tatsache, dass es vor dem langsamsten Prozess zu einer Akkumulation von Reserveprodukten kommt. Dadurch wird das geschwindigkeitsbestimmende Kettenglied von den anderen Reaktionen autonom und unabhängig. Das ist mitunter eine Erklärung für eine andere wichtige Eigenschaft für die Selbstregulation von Systemen: dem Prinzip der Autonomie von Teilsystemen. Diese Autonomie wird durch eine höhere Trägheit des Systems erkauft, da sich auf Grund des Flaschenhalsprinzips Reservestoffe akkumulieren. Das Umschalten auf ein anderes Regime durch Wirksamwerden eines anderen Kettengliedes, erfolgt dann wegen dem Depot an Reservestoffe verzögert. Diese Verzögerungsphase wird auch "lag-Phase" genannt.

## 2 Beschreibung biologischer Abwasserreinigungssysteme

Im folgenden Abschnitt wird die Grundproblematik der Abwasserreinigung beschrieben. Die biologischen Grundlagen stammen dabei vorwiegend aus [Mudrack and Kunst(1994)] und [Fritsche(2002)].

### 2.1 Grundlagen der Abwasserreinigung

Bei der Einleitung von kommunalem Abwasser in fließende Gewässer, entstehen, speziell in Gebieten mit geringer Fließgeschwindigkeit Faulschlammablagerungen. Dieser Faulschlamm bewirkt eine Abnahme der Sauerstoffkonzentration im Gewässer. Zusätzlich reduzieren gelöste Schmutzstoffe des Abwassers den Sauerstoffgehalt. Der Mangel an Sauerstoff führt zu einer Veränderung des Ökosystems des Gewässers und kann im Extremfall zu einem totalen Fischsterben führen.

Die Abnahme der Sauerstoffkonzentration beruht auf der Tatsache, dass die organischen Stoffe im Abwasser von im Gewässer lebenden Mikroorganismen zur Energiegewinnung verwendet werden. Der Prozess der Energiegewinnung läuft dabei aerob, also unter Verbrauch von Sauerstoff ab. Die Organismen eliminieren also die biologisch abbaubaren Stoffe im Abwasser, entziehen dem Gewässer jedoch den Sauerstoff. Diese  $O_2$ -zehrenden Stoffe im Abwasser, werden in der Abwasseranalytik als  $BSB_5$  bezeichnet.

Der Wert  $BSB_5$  gibt dabei den biologischen Sauerstoffbedarf nach 5 Tagen an. In der Laborpraxis wird dazu der Sauerstoffverbrauch in geschlossenen Flaschen, die Abwassermikroben enthalten, nach 5 Tagen gemessen.

Will man das Gewässer also vor diesen biologisch abbaubaren Stoffen schützen, müssen diese  $O_2$ -zehrenden Stoffe aus dem Abwasser vor der Einleitung in die Gewässer entfernt werden. Die Abwasserreinigungsverfahren wurden daher mit dem Ziel entwickelt, den  $BSB_5$ -Wert im Abwasser zu vermindern oder möglichst weitgehend zu eliminieren. Aus diesem Grund wird der Wirkungsgrad einer Kläranlage an der  $BSB_5$ -Ablaufkonzentration gemessen. Ihre Dimensionierung orientiert sich dabei auch an der  $BSB_5$ -Belastung am Zulauf der Anlage.

Zusätzlich können Abwässer durch Industriebetriebe belastet sein. Sie enthalten dann meist einen großen Anteil von schwer abbaubaren Substanzen. Diese können oft nicht, oder nur nach einer primären Aufspaltung, durch Mikroorganismen abgebaut werden. Diese Stoffe können nur durch chemische Oxidationsmittel (wie Kaliumdichromat oder Kaliumpermanganat) oxidiert werden. Zur Ermittlung des für die vollständige Oxidation aller organischen Stoffe notwendigen Sauerstoffs wird daher der chemische Sauerstoffbedarf ( $CSB$ ) durch Einsatz der genannten Oxidationsmittel bestimmt. Bei Abwässern der chemische Industrie ist daher der  $CSB$  höher als der  $BSB$ .

Es existieren jedoch noch eine Vielzahl anderer Stoffgruppen, die das Abwasser belasten. So entzieht zum Beispiel auch die Umwandlung von Ammonium zu Nitrat, die sogenannte Nitrifikation, dem Gewässer Sauerstoff. Im Wesentlichen geht es also zusätzlich um die Elimination folgender Stoffgruppen:

- Eutrophierende anorganische Salze, d.h. Phosphor- und Stickstoffverbindungen
- Ammoniumverbindungen, die im Vorfluter Sauerstoff verbrauchen und als Fischgift wirken können
- Biologisch schwer oder nicht abbaubare Stoffe, die als ein Teil des CSB analytisch erfasst werden
- Organische und anorganische Schwebstoffe (Suspensa)
- In jüngster Zeit auch um sogenannte "Endocrine Disrupters". Das sind pharmazeutische Wirkstoffe, die vom Körper des Menschen nicht verwertet werden und so ins Abwasser gelangen

Eine verfahrenstechnische Lösung bietet jedoch die Natur mit der Selbstreinigung der Gewässer an. Wird Abwasser, gleich welcher Zusammensetzung und Konzentration, in ein Gewässer eingeleitet, dann bildet sich im Gewässer nach einer gewissen Zeit, genau jene Lebensgemeinschaft von Mikroorganismen (Biozönose) aus, die für den Abbau der im Abwasser enthaltenen Stoffe optimal geeignet ist.

Die Aufgabe eines biologischen Abwasserreinigungsverfahrens besteht also darin, diesen natürlichen Selbstreinigungsprozess in ein technisches Verfahren umzusetzen, um alle Sauerstoff-zehrenden Stoffe aus dem Abwasser zu eliminieren.

Da die Selbstreinigung der Gewässer jedoch relativ langsam abläuft, muss man bei der Umsetzung in ein technisches Verfahren, entweder bei gleich langsamer Reaktionsgeschwindigkeit große Reaktorvolumen (z.B. Teiche) bereitstellen, oder die Reaktionsgeschwindigkeit wesentlich erhöhen.

In der Praxis werden meist Verfahren angewendet, die mit einer hohen Reaktionsgeschwindigkeit arbeiten und mit einem kleinen Volumen auskommen. Diese Verfahren müssen folgende Voraussetzungen erfüllen:

- Die Biomassenkonzentration im Reaktor muss erhöht werden.
- Der erhöhte Sauerstoffbedarf muss gedeckt werden.
- Der optimale Kontakt zwischen Biomasse, Abwasserinhaltsstoffen und gelöstem Sauerstoff muss durch eine optimale Durchmischung gewährleistet sein.

- Inhibitoren und Giftstoffe dürfen im Reaktor schädliche Konzentrationen nicht erreichen.

Prinzipiell gibt es zwei abwassertechnische Lösungen:

- Festbettreaktor (z.B. Tropfkörperverfahren)
- durchmischter Reaktor (z.B. Belebtschlammverfahren)

Im Bereich von großen Kläranlagen wird zumeist das Belebtschlammverfahren verwendet. Es steht auch im Mittelpunkt dieser Arbeit. Es werden in den nachfolgenden Kapiteln einige Modellansätze dieses Verfahrens vorgestellt. Diese Modelle werden durch einige mathematische Ansätze in der Kinetik und durch verfahrenstechnische Erweiterungen verfeinert. Im nächsten Abschnitt sind zunächst die Grundlagen des Belebtschlammverfahrens näher erläutert.

## 2.2 Belebtschlammreaktoren

Belebtschlammreaktoren dienen zur Kultivierung spezieller Mikroorganismen, die für den Abbau der organischen Stoffe im Abwasser verantwortlich sind. Die Betriebsart der Belebtschlammreaktoren ist dabei äquivalent dem Prinzip von Chemostaten, das im Kapitel (4) dieser Arbeit ausführlich dargestellt ist. Ebenfalls ist eine detaillierte analytisch / mathematische Beschreibung der kontinuierlichen Kultivierung von Mikroorganismen in Chemostaten dargestellt. Da der Belebtschlammreaktor eben einem Chemostaten entspricht, sind hier vorerst die prinzipiellen Funktionsabläufe erläutert.

### 2.2.1 Der Standard-Chemostat oder Fermenter (Durchflussfermenter)

Beim sogenannten Fermentationsverfahren wird das Abwasser durch einen Zufluss in ein Becken geleitet. Durch den Zustrom von belastetem Abwasser existiert also ein ständiger Eintrag von organischem Material in das Becken. In dem Becken befinden sich die Bakterienkulturen, die die organischen Komponenten im Abwasser für ihre Stoffwechselprozesse verwenden und somit das Abwasser von dieser Inhaltsstoffe reinigen. Um diese Funktion aufrecht zu erhalten, ist eine möglichst perfekte Durchmischung im Becken und ein Sauerstoffeintrag notwendig. Da das Volumen des Beckens konstant bleibt, wird ein Teil der Bakterienmasse mit dem abfließenden Abwasser aus dem Fermenter ausgespült. Das führt zu einem stationären Zustand im Fermenter, da auf Grund des Nährstoffangebotes im Zustrom zwar ein ständiger Wachstumsprozess der Bakterien stattfindet, durch das Ausspülen von Bakterien durch den Ablauf jedoch die Bakterienkonzentration begrenzt ist.

Es stellt sich ein stationärer Zustand zwischen dem Zuwachs der Bakterienkonzentration auf Grund des Wachstums durch Stoffwechseltätigkeit und einer Reduktion der Bakterienkonzentration durch Ausschwemmung der Bakterien mit dem Ablauf ein.

Eine wichtige Kenngröße dieses Prozesses ist die Verdünnungsrate  $D$ . Sie gibt das Verhältnis der Zufussrate bezogen auf das Volumen des Kulturgefäßes an.

Wird das Belebungsbecken als ein vom Abwasser durchflossener Reaktor angesehen, so können die Gesetzmäßigkeiten einer kontinuierlichen Kultur an Hand des folgenden Beispiels erläutert werden.

Bei steigender Verdünnungsrate  $D$  wird die Bakterienkultur in dreifacher Weise beeinflusst:

- Der Wasserstrom bewirkt durch die Auswaschrate eine exponentielle Abnahme der Bakteriendichte
- Die steigende Nährstofffracht ermöglicht eine Zunahme des Bakterienenertrages
- Die Zunahme der Nährstoffkonzentration im Reaktor ermöglicht eine Steigerung der Wachstumsrate

Eine weitere wichtige Eigenschaft des Fermenters ist die Abhängigkeit der Wachstumsrate von der Verdünnungsrate bei offenbar unveränderter Substratkonzentration. Dieser Zusammenhang erklärt die Ursache für den Zusammenbruch des Fließgleichgewichtes.

Enthält der Zulauf eines Reaktors eine bestimmte Substratkonzentration, so wird dieses Substrat von den Bakterien im Reaktor mit einer konzentrationsabhängigen Stoffwechselgeschwindigkeit abgebaut (Michaelis-Menten-Beziehung). Dies ist die Voraussetzung für die ebenfalls konzentrationsabhängige Wachstumsrate der Bakterien (Monod-Beziehung). Der funktionale Zusammenhang ist in Abbildung (37) dargestellt.

Ausgehend von einer geringen Verdünnungsrate stellt sich im Becken, auf Grund der geringen Zulaufkraft, eine geringe Substratkonzentration ein. Das bewirkt eine geringe Wachstumsgeschwindigkeit der Bakterien. Wird nun die Verdünnungsrate erhöht, erhöht sich die Zulaufkraft und die Substratkonzentration, jedoch steigt auch die Wachstumsgeschwindigkeit der Bakterien. Der Mechanismus funktioniert so, indem die Bakterien mit dem Substratverbrauch etwas dem Substratzufluss nacheilen. So kommt es zu einer geringen Substraterhöhung im Becken und die Bakterien reagieren darauf entsprechend der Monod-Kinetik mit einer höheren Wachstumsrate.

Dieser Mechanismus bricht jedoch zusammen, da bei einer ständigen Erhöhung der Verdünnungsrate die Substratkonzentration im Becken weiter steigt, jedoch die Wachstumsgeschwindigkeit der Bakterien als enzymkatalysierte Reaktion begrenzt ist. Ein höheres Wachstum der Bakterien ist dann also nicht

mehr möglich und auf Grund der hohen Verdünnungsrate wird die Bakterienkultur ausgespült. Das Fließgleichgewicht bricht zusammen. Dieser Punkt wird auch Auswaschpunkt genannt.

Der Zusammenbruch des Fließgleichgewichtes auf Grund der Überschreitung der maximalen Wachstumsrate tritt nur dann ein, wenn die Substratkonzentration im Zulauf das Erreichen der maximalen Wachstumsrate überhaupt zulässt. Ist im Zulauf nur wenig Substrat enthalten, dann wird der Auswaschpunkt schon bei viel geringeren Verdünnungsraten erreicht.

Dies ist bei einem Fermenter meist der Fall, da selbst konzentriertes häusliches Abwasser für die Bakterien meist zu schwach konzentriert ist, um die maximale Wachstumsrate zu ermöglichen. Die reale Konzentrationen im Zulauf ermöglichen meist nur langsames Wachstum, so dass nur geringe Verdünnungsraten möglich sind. Soll jedoch der Reaktor mit hohen Verdünnungsraten betrieben werden, muss man die Biomassenkonzentration im Fermenter durch verfahrenstechnische Massnahmen steigern. Das kann durch eine Biomassenrückführung erfolgen.

### **2.2.2 Fermenter mit Biomassenrückführung (Belebungsverfahren)**

In der Praxis erfolgt die Steigerung der Biomassenkonzentration durch den Einsatz einer Biomassenrückführung. Der schematische Aufbau der Anlage ist in Abbildung (12) dargestellt. Die Anlage besteht dabei aus einem Belebtschlammbecken, in dem der eigentliche Substratabbau erfolgt. Aus dem Belebtschlammbecken wird durch den Ablauf eine erhebliche Menge Bakterien ausgeschwemmt. Diese setzen sich im dahinter geschalteten Nachklärbecken ab. Dieser Überschussschlamm kann je nach gewünschter Betriebsart, aus dem System entfernt oder über die Biomassenrückführung zurück ins Belebtschlammbecken gepumpt werden.

Der Unterschied zwischen einem Durchflußfermenter und dem Belebungsverfahren [siehe Abb. (12)] besteht darin, dass im Fermenter die Biomassenkonzentration geringer ist und die überschüssige Biomasse im Ablauf enthalten ist, während beim Belebungsverfahren der Feststoffgehalt im Belebungsbecken höher ist (auf Grund der Rückführung) und die überschüssige Biomasse als Überschussschlamm - getrennt von der flüssigen Phase - aus dem System abgezogen wird. Der Überschussschlamm wird anschliessend in Faultürmen nachbehandelt und damit weiters reduziert.

In Abbildung (13) ist die Akkumulation der Biomasse im Belebtschlammbecken über die Zeit dargestellt. In dem hier gewählten Beispiel wird der Biomassen- Austrag im Nachklärbecken in den ersten drei Tagen zurück ins Belebtschlammbecken gepumpt. Daraus resultiert eine höhere Biomassenkonzentration und daher ist auch bei geringer Wachstumsrate der Biomasse auf Grund der geringen Substratkonzentration eine hohe Durchflussrate möglich. Ist die gewünschte Biomassenkonzentration im Becken erreicht, wird der Überschussschlamm aus dem System entfernt [siehe Abb. (13)]. Der



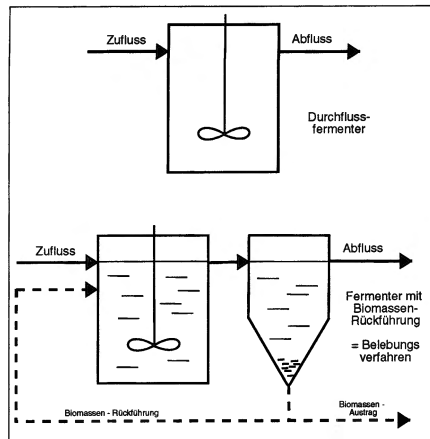


Abbildung 12: Darstellung unterschiedlicher Fermenter

dynamische Ablauf von Biomassenbildung und -abzug ist dann in beiden Systemen gleich, beim Belebungsverfahren ist lediglich das Konzentrationsniveau der Biomasse im Belebungsbecken angehoben.

### Schlammalter

Aus dem Verhältnis der Schlammmenge im Belebungsbecken zur täglich abgezogenen Überschussschlammmenge errechnet sich die mittlere Verweilzeit des Belebtschlammes im System. Diese mittlere Verweilzeit wird "Schlammalter" genannt. Im hier dargestellten Beispiel beträgt das Schlammalter des Systems drei Tage.

Neben der Anhebung der Biomassenkonzentration hat die Rückführung und die resultierende Erhöhung des Schlammalters die wichtige Funktion, dass langsam wachsende Bakterienkulturen die notwendige Zeit haben, sich zu entwickeln. Manche Abbauprozesse benötigen spezielle Bakterienkulturen, die sich im Belebtschlammbecken nur langsam ausbilden können. Würde das Schlammalter wie beim Durchflussfermenter nur einen Tag betragen, könnte sich die Kultur nicht ausbilden und würde die speziellen Stoffe somit nicht abbauen können.

Das bedeutet, dass manche wichtigen Abbauvorgänge erst ab einem bestimmten Schlammalter einsetzen. Im Belebtschlammverfahren können diese Abbauvorgänge über die Regelung des Schlammalters beeinflusst werden.

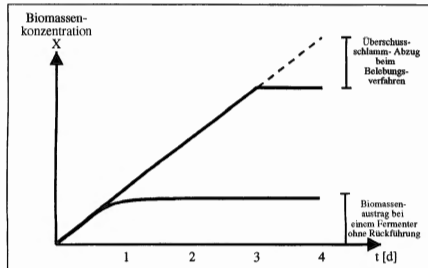


Abbildung 13: Biomassenaustrag unterschiedlicher Fermenter; aus [Mudrack and Kunst(1994)]

### 2.2.3 Mikrobiologische Umsetzung der Stickstoffverbindungen

Die im Abwasser enthaltenen Stickstoffverbindungen und deren mikrobiologischen Umsetzungsprozesse sind sowohl für den Gewässerschutz als auch für den Kläranlagenbetrieb von erheblicher Bedeutung.

Der Stickstoffgehalt im Rohabwasser ist ein notwendiger Nährstoff-Bestandteil zum Aufbau neuer Zellsubstanz (Eiweiß). Somit ist ein Verhältnis des Anteils von Kohlenstoffverbindungen zum Stickstoffanteil im Abwasser von ca.  $BSB_5 : N = 100 : 5$  wichtig für den Wachstumsprozess der Bakterien und somit für die Reinigungsleistung des Belebtschlammreaktors. Da so ein Teil der Stickstofffracht in die Biomasse eingebaut wird und als Überschussschlamm aus dem System entfernt wird, kann bei kommunalem Abwasser mit einer Stickstoffelimination von 25 – 30% gerechnet werden.

Lange Zeit wurde dem Stickstoffgehalt im Ablauf der Kläranlage keine Bedeutung zugemessen, da er den  $BSB_5$ -Gehalt nicht beeinflusst. Im Abwasser ist jedoch ein beachtlicher Anteil Stickstoff (ca. 30–50 mg/l N) in reduzierter Form, d.h. als Ammonium, Harnstoff oder in organischen Verbindungen (z.B. Eiweiß) enthalten.

Im Klärprozess können folgende Probleme auftreten:

- Zusätzlicher  $O_2$ -Bedarf im Belebtschlammbecken durch Nitrifikation
- Auftreiben von Belebtschlamm im Nachklärbecken durch Denitrifikation
- Beeinträchtigung der Reinigungsleistung durch Absinken des pH-Wertes durch Nitrifikation
- Anreicherung von Nitrit

Zusätzlich zu den verfahrenstechnischen Problemen verursacht der Stickstoffgehalt im Abfluss der Anlage in den Gewässern einige Schäden:

- Belastung des  $O_2$ -Haushaltes im Gewässer durch Nitrifikation
- Eutrophierung der Gewässer durch Stickstoff-Düngung
- Fischsterben im Gewässer durch Ammoniak-Vergiftung
- Erhöhte Trinkwasserkonzentration im Trinkwasser

Aus diesen Gründen hat der Stickstoffgehalt des Abwassers erheblich an Bedeutung gewonnen. Im Kernmodell des Belebungsverfahrens, das in dieser Arbeit in einem späteren Kapitel genauer beschrieben wird, sind deshalb die Prozesse der Nitrifikation und der Denitrifikation enthalten, da sie einen wesentlich Teil des Reinigungsverfahrens darstellen.

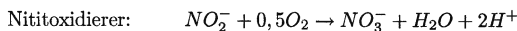
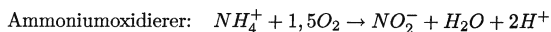
Hier sind im weiteren die biologischen Grundlagen beider Prozesse näher erläutert:

#### 2.2.4 Grundlagen der Nitrifikation

Die für den Prozess der Nitrifikation zuständigen Bakterien, die Nitrifikanten, verwenden im Stoffwechselprozess anstatt von organischen Substanzen Ammonium als Wasserstoff-Donator zur Energiegewinnung. Sie benutzen zusätzlich noch anorganisches  $CO_2$  als Kohlenstoffquelle, und somit werden sie den autotrophen Bakterien zugeordnet, d.h. sie benötigen keine organischen Stoffe zum Leben wie die heterotrophen Organismen.

An der Oxidation von Ammonium zum Nitrat sind zwei Bakteriengruppen beteiligt, die Ammoniumoxidierer (z.B. Nitrosomonas) und die Nitritoxidierer (z.B. Nitrobacter). Die enge physiologische Bindung beider Bakteriengruppen ergibt sich aus der Tatsache, dass zu hohe Konzentrationen von Ammonium auf Nitrobacter toxisch wirken, d.h. Nitrosomonas muss für den Nitrobacter nicht nur das Nitrit bereitstellen, sondern auch die hohen Ammonium-Konzentrationen abbauen.

Prinzipiell laufen folgende Reaktionsschritte ab:



Insgesamt werden also durch die Stoffwechseltätigkeit der Nitrifikanten Ammoniumverbindungen unter  $O_2$ -Verbrauch zu Nitrat oxidiert, wobei  $H^+$ -Ionen entstehen, die eine Absenkung des pH-Wertes bewirken. Der Energiegewinn aus der Oxidation der anorganischen Stoffe ist jedoch sehr gering. Daraus resultiert ein geringer Zellertrag pro umgesetztem Substrat, was gleichbedeutend mit einer langsamen Wachstumsrate ist. Aus diesen Gründen benötigen die Nitrifikanten ein bestimmtes Mindest-Schlammalter.

### 2.2.5 Der Nitrifikationsprozess im Belebtschlammbecken

Die Problematik bei der Nitrifikation im Belebtschlammprozess besteht in der langsamen Wachstumsrate der Nitrifikanten. Die Generationszeit der Nitrifikanten ist daher im Vergleich zu den heterotrophen Bakterien, die den Großteil der Masse des Belebtschlammes bilden, um einiges länger und stark temperaturabhängig. Die Nitrifikanten können sich daher nur in einer Biozönose entwickeln, in ihnen eine ihrer Generationszeit entsprechende Mindest-Verweilzeit garantiert. Beim Belebungsverfahren ist die Verweilzeit identisch mit dem Schlammalter ( $t_{TS}$ ). Das Schlammalter ist jedoch verfahrenstechnisch begrenzt. Wie bereits ausgeführt, kann die Schlammkonzentration im Belebtschlammbecken durch die Rückführung des Überschussschlammes aus dem Nachklärbecken erhöht werden. Dabei steigt gleichzeitig das Schlammalter, was für den Nitrifikationsprozess erwünscht ist. Es darf dabei jedoch eine bestimmte Feststoffkonzentration nicht überschritten werden. Dazu wird beim Erreichen der gewünschten Schlammkonzentration der Überschussschlamm nicht mehr rückgeführt, sondern aus dem System entfernt.

Hier zeigt sich nun das Problem bezüglich des Nitrifikationsprozesses. Bei einer stark belasteten Anlage wachsen die heterotrophen Bakterien schnell, während die Nitrifikanten sich langsam entwickeln. Da die Nitrifikanten in die Biozönose der heterotrophen Bakterien eingebettet sind, wird auch ihre Verweilzeit durch das Schlammalter der Heterotrophen bestimmt. Sie haben dadurch nur eine Überlebenschance, wenn das für die heterotrophen Bakterien vorgegebene Schlammalter länger ist als ihre Generationszeit. Um eine effiziente Nitrifikation zu gewährleisten, sollte die Verweilzeit je nach Temperatur das zwei bis dreifache der Generationszeit (ca. 3,5 Tage bei  $10^\circ C$ ) betragen. Um eine ganzjährige Nitrifikation zu gewährleisten, sollte das Schlammalter also im Bereich von 8-10 Tagen liegen.

Der Prozess der Nitrifikation hängt also mit der  $BSB_5$ -Belastung der Anlage zusammen. Das heisst, die Nitrifikation setzt ein, wenn die Schlammbelastung der Anlage unter einem bestimmten Grenzwert liegt. Bei unseren klimatischen Bedingungen bei einer Schlammbelastung von  $B_{TS} = 0.15 \text{ kg } BSB_5 / \text{kg } TS \cdot d$ .

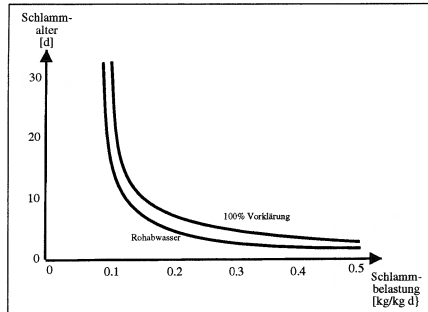


Abbildung 14: Abhängigkeit des Schlammalters von der Schlammbelastung; aus [Mudrack and Kunst(1994)]

Für den Prozess der Nitrifikation im Belebungsverfahren gilt:

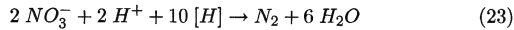
- Das Schlammalter muss dem langsamen Wachstum der Nitrifikanten angepasst werden.
- Ab einem bestimmten Schlammalter tritt zwangsläufig Nitrifikation ein
- Die Nitrifikation kann in einer Belebungsanlage nur zeitweise auftreten. Dies ist durch Belastungs- und Temperatur-Schwankungen erklärbar.

Eine weitere Problematik ist, dass bei manchen Anlagen die Nitrifikation nur bis zum Nitrit erfolgt. Das kann auf einer zu hohen Konzentration von Ammonium ( $NH_4$ ) beruhen, z.B. bei Abwasser einer Tierkörperverwertungsanstalt. Die Nitrosomonas schaffen dann nicht die schnelle Reduktion der Ammonium-Konzentration und wie schon erwähnt, reagieren die Nitrobacter empfindlich auf diese hohe  $NH_4$ -Konzentrationen. Die Nitrobacter werden dann gehemmt und die Nitrifikation bleibt auf der Nitrit-Stufe stehen.

## 2.2.6 Grundlagen der Denitrifikation

Bei der Denitrifikation erfolgt eine Reduktion oxidierter Stickstoffverbindungen (Nitrat, Nitrit) zu elementarem Stickstoff ( $N_2$ ). Verläuft die Reaktion bis zu Ammonium ( $NH_4$ ), so spricht man von Nitrat-Ammonifikation.

Bei der Denitrifikation dient das Nitrat-Ion den Denitrifikanten an Stelle des Sauerstoffs als Wasserstoff-Akzeptor. Die chemische Formel gibt den Ablauf der Denitrifikation an:



Dabei werden von den 10  $[\text{H}]$  10 Elektronen auf die zwei  $\text{N}^{5+}$  übertragen, wodurch die Stickstoffe zu elementarem Stickstoff ( $\text{N}$ ) entladen werden, und sich die 10  $\text{H}^+$ -Ionen mit Nitratsauerstoff-Ionen zu  $\text{H}_2\text{O}$  verbinden. Bei der Denitrifikation wird organisches Substrat zu  $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$  abgebaut, nur kommt der notwendige Sauerstoff vom Nitrat. Der Prozess wird daher auch als "Nitrat-Atmung" bezeichnet.

Da der Energiegewinn bei der Nitrat-Atmung etwas um 10% geringer ist als bei der Sauerstoff-Atmung, wird von den Organismen bei vorhandenem Sauerstoff immer die  $\text{O}_2$ -Atmung bevorzugt. Nur bei einem Mangel von  $\text{O}_2$ , also unter anoxischen Bedingungen, wird auf die Nitrat-Atmung und damit auf die Denitrifikation umgestellt.

Die Denitrifikanten unterscheiden sich nicht von anderen heterotrophen Bakterien, speziell da die Fähigkeit der Nitrat-Atmung bei vielen Bakterien-Arten vorhanden ist. In artenreichen Biozönosen wie dem Belebtschlamm, existieren in der Regel auch Denitrifikanten. Immer dann wenn Nitrat im Abwasser vorhanden ist, also durch Zufluss von Außen (z.B. bei Industrieabwasser) oder durch die vorhergehende Nitrifikation von Ammonium, kann es beim Belebungsverfahren zur Denitrifikation kommen.

### 2.2.7 Der Denitrifikationsprozess im Belebtschlammbecken

Denitrifikationsprozesse können sowohl unbeabsichtigt im Nachklärbecken auftreten als auch gezielt im Abwasserreinigungsverfahren zur Stickstoffelimination eingesetzt werden.

#### Denitrifikation im Nachklärbecken

Denitrifikation im Nachklärbecken hat zur Folge, dass Teile des abgesetzten Belebtschlammes auf Grund der  $\text{N}_2$ -Entwicklung aufschwimmen. Das führt zum Abtreiben des Belebtschlammes aus dem Nachklärbecken, und eine Rückführung ist dann nicht mehr möglich. Diese unerwünschte Reaktion tritt meist bei folgenden Voraussetzungen auf:

- Im Belebtschlamm-Abwasser-Gemisch im Nachklärbecken muss Nitrat vorhanden sein. Dieses Nitrat wird in der Regel im Belebtschlammbecken durch die Nitrifikation gebildet.
- Im abgesetzten Schlamm müssen sich anoxische Verhältnisse einstellen, so dass die Denitrifikation ablaufen kann (meist nach ca. 10 Minuten).

- Im Belebtschlamm müssen H-Donatoren in Form von gelösten Substraten zu Verfügung stehen (als Kohlenstoff-Quelle).
- Die Verweilzeit im Nachklärbecken muss ausreichen, um die zum Aufschwimmen benötigte Gasmenge zu entwickeln.

Aus diesen Voraussetzungen können die verfahrenstechnischen Regeln zur Vermeidung des Aufschwimmens abgeleitet werden. Als wichtigster Faktor ist dabei die Nitrifikation zu nennen, die das notwendige Nitrat erzeugt. Läuft der Prozess der Nitrifikation im Belebungsbecken ab, sollte auch für die gezielte verfahrenstechnische Denitrifikation gesorgt werden. Auf diese Möglichkeit wird im nächsten Abschnitt näher eingegangen.

Weiters kann dem Aufschwimmen vorgebeugt werden, in dem der abgesetzte Belebtschlamm möglichst rasch aus dem Nachklärbecken abgepumpt wird. Bei Stoßbelastungen mit Substraten ( $BSB_5$ ) am Zulauf der Anlage, besteht die Gefahr, dass Substratspitzenbelastungen vermehrt bis ins Nachklärbecken durchschlagen. Dort setzt auf Grund des erhöhten Anteils gelöster Substrate merklich schneller der Denitrifikationsprozess ein und es kommt schneller zum Aufschwimmen.

### Denitrifikation als Verfahren zur Stickstoffelimination

Die beste Möglichkeit den Schlammauftrieb im Nachklärbecken zu verhindern, ist die gezielte Elimination durch Nitrifikation entstandenen Nitrate im Abwasser. Da die zulässige Stickstoffkonzentration im Ablauf der Kläranlage gesetzlich begrenzt ist, wird das Verfahren der Denitrifikation in den Klärprozess integriert. Es wird also die Denitrifikation als gezielter Prozess im Verfahrensablauf eingebettet.

Eine Möglichkeit dabei besteht im Einfügen eines Denitrifikationsbeckens zwischen dem Belebungsbecken und dem Nachklärbecken [siehe Abb. (15); A]. Im Denitrifikationsbecken wird das Abwasser durchmischt aber nicht belüftet. Dadurch kommt es zu anoxischen Bedingungen. Ein Problem besteht jedoch in der geringen Konzentration an organischem Substrat im Denitrifikationsbecken. Als Voraussetzung um im Belebungsbecken den Prozess der Nitrifikation zu ermöglichen, ist eine geringe  $BSB_5$ -Schlammbelastung am Zulauf der Anlage nötig. Aus einer geringen Belastung des Belebungsbeckens und einer damit verbundenen hohen Substratelimination im Belebungsbecken, resultiert ein hoher Reinigungsgrad der Anlage.

Die organischen Substrate werden also im Belebungsbecken weitgehend abgebaut und daher stehen im Denitrifikationsbecken nur wenige organische Substrate zur Verfügung. Daraus resultiert eine geringe Denitrifikationsrate. Um zu einer höheren Rate zu kommen, müssen dem Denitrifikationsbecken zusätzliche Substrate (H-Donatoren), in Form von Methanol oder ungerei-

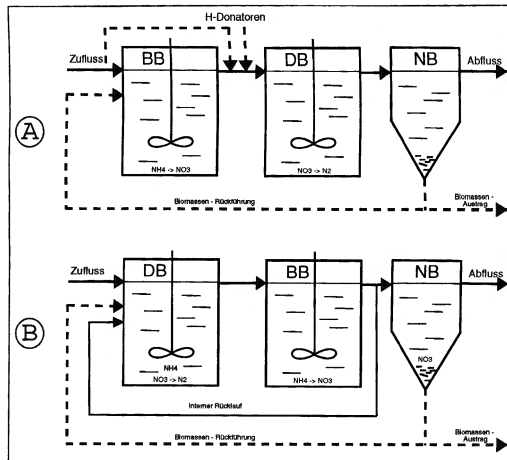


Abbildung 15: Darstellung von Denitrifikationsanlagen; (mit BB .. Belebungsbecken, DB .. Denitrifikationsbecken, NB .. Nachklärbecken)

nigtem Abwasser zugefügt werden. Um den optimalen Substratabbau der Anlage nicht zu gefährden, muss die Substratzugabe der ständigen schwankenden Nitratkonzentration angepasst werden. Diese Vorgangsweise hat also auf Grund der komplexen Steuerung und der hohen Kosten für die Wasserstoffdonatoren (z.B. Methanol) große Nachteile.

Eine weitere Verfahrenslösung (15); B) ermöglicht die Nutzung der gesamten Substratfracht des ungereinigten Abwassers. Dazu wird das Denitrifikationsbecken vor das Belebungsbecken geschaltet. Die im Belebungsbecken durch die Nitrifikation anfallenden Nitrate, werden über die Schlammrückführung ins Denitrifikationsbecken zurückgeführt.

Da das Nitrat so jedoch über den Umweg des Nachklärbeckens zum Denitrifikationsbecken zurückgeführt wird, werden durch den Ablauf im Nachklärbecken ein bestimmter Anteil an Nitrat durch den Ablauf ausgeschwemmt. Dadurch kommt nicht das ganze Nitrat zurück ins Denitrifikationsbecken und der Wirkungsgrad der Denitrifikation sinkt mit der Durchflussrate. Eine Lösung dafür besteht in einer internen Rückführung. Das gesamte Nitrat steht bereits am Ablauf aus dem Belebungsbecken zur Verfügung und so kann durch den internen Kreislauf die Rücklaufquote des Nitrates erhöht werden. Die interne Rückführung wird dabei mit einer Rücklaufquote betrieben,



die ein Vielfaches (typisch: 4 fach) der Biomassen-Rückführung beträgt. Durch diese Verfahrensweise kann der Wirkungsgrad der Denitrifikation so weit verbessert werden, so dass es im Nachklärbecken zu keinem Schlamm-auftrieb kommt und die gesetzlichen Grenzwerte eingehalten werden können. Es können somit ca. 63% des zur Nitrifikation benötigten Sauerstoffs durch eine integrierte Denitrifikation "zurückgewonnen" werden (aus [Mudrack and Kunst(1994)]).

Diese Vorgangsweise bietet weiters den Vorteil, dass durch die Denitrifikation ein Oxidationsäquivalent gewonnen werden kann, das den Sauerstoffbedarf der Nitrifikation und des Substratabbaus verringern kann [siehe die Reaktionsgleichung der Denitrifikation (Gl. (23))].

Neben dieser Abfolge von Nitrifikation und Denitrifikation in zwei Becken, können beide Prozesse auch in einem Becken ablaufen. Wegen ihrer gegensätzlichen Bedingungen (aerob - anoxisch) kann dies nur durch An- und Abschalten der Sauerstoffzufuhr erfolgen. Dadurch wechseln die Milieubedingungen zeitlich ab und somit auch die Verfahrensprozesse des Substratabbaus und der Nitrifikation mit dem Prozess Denitrifikation unter Substratverbrauch. Die Steuerung kann dabei über kontinuierliche Nitrit-, Ammonium- und Sauerstoffmessung erfolgen, so dass sich die Anlage den wechselnden  $BSB_5$ - und Stickstoffkonzentrationen anpassen kann. Ein möglicher Verlauf der Konzentrationen ist in Abbildung (16) dargestellt.

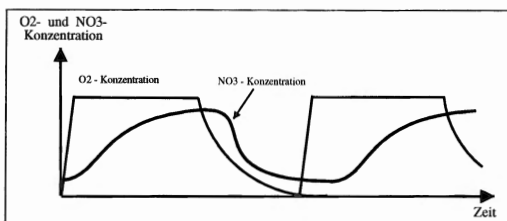


Abbildung 16: Sauerstoff- und Nitratkonzentration bei alternierender Belüftung (aus [Mudrack and Kunst(1994)])

Betrachtet man die Kombination von Nitrifikation und Denitrifikation im Belebungsverfahren, so kann sowohl die Ökonomie als auch die Ökologie Vorteile aus dem Verfahren ziehen. Der Kläranlagenbetreiber vermindert die Betriebsschwierigkeiten wie Schlamm-auftrieb, vermindert den Energiebedarf durch Denitrifikation und erfüllt die gesetzlichen Vorgaben; der Ökologe registriert eine Verminderung der Stickstoffbelastung der Gewässer.

Teil II

## Modelle und ihre mathematischen Grundlagen

### 3 Beschreibung unterschiedlicher Enzym-Kinetik

Bevor in den weiteren Kapiteln das allgemeine mathematische Modell des kommunalen Belebtschlammverfahrens eingeführt wird, beschäftigt sich dieser Abschnitt mit den grundlegenden Ansätzen der Enzym-Dynamik unter unterschiedlichen äußeren Bedingungen. In den einführenden Abschnitten über die üblicherweise verwendeten Modelle zur Beschreibung von biologischen Abwasserreinigungsverfahren wird ausführlich erläutert, dass sowohl das "Activated Sludge Modell 1" als auch seine Nachfolger (ASM2, ASM3) immer von einer Enzym-Kinetik ausgehen, die der Gleichung von Monod entspricht. Das Verwenden des Monod-Ansatzes ist jedoch an einige Näherungen geknüpft [siehe Abschnitt (1.3.2)]. Sind diese Näherungen für eine spezielle Betriebsart nicht mehr erfüllt, ist das Verwenden der Monod-Kinetik mit Gefahren für die Genauigkeit verbunden, die bis hin zur Unbrauchbarkeit der Lösung führen können.

Im Folgenden sind neben der Monod-Kinetik noch zwei andere in der Literatur anzutreffende Enzym-Kinetiken dargestellt. Es ist jedoch ein starkes Ungleichgewicht in der Häufigkeit der Anwendung zu Gunsten der Monod-Kinetik vorhanden. Die Monod-Kinetik stellt einen allgemein anerkannten Standard dar, der nur in speziellen Fällen durch andere Kinetiken ersetzt wird.

Da das hier im Weiteren vorgestellte Modell jedoch für zukünftige Abbauprozesse, Betriebsarten und Reaktortypen (z.B. Membranbioreaktoren) erweitert werden soll, ist die Enzym-Dynamik in der Modellbeschreibung [siehe Abschnitt (8.1), Tabelle (19)] allgemein angeschrieben. Je nach Verwendung und vorliegender Randbedingungen in der Simulation, kann die entsprechende Dynamik ausgewählt und im Modell integriert werden. Das ist möglich, da die prinzipiellen Vorgänge des Belebtschlammverfahrens mit einer allgemeinen Kinetik eben so gut angeschrieben und verstanden werden kann. Eine Spezifizierung der Dynamik ist damit zu einem späteren Zeitpunkt ohne Beschränkung der Aussagekraft des Modells möglich.

In folgender Tabelle (Tab. 1) sind die wichtigsten in der Literatur anzutreffenden Kinetiken mit ihren Referenzen angeführt.

Der funktionale Verlauf der Kinetiken ist zusätzlich in nachfolgender Abbildung [Abb. (17)] dargestellt:

Bezeichnung	math. Form	aus Literatur
Monod	$\phi(\xi) = \frac{\xi}{K_\xi + \xi}$	[Henze et al.(1986)], [Hartmann(1983)], ...
Contoir	$\phi(\xi) = \frac{\xi}{K_\xi P_d + \xi}$	[Contois(1959)]
Haldane	$\phi(\xi) = \frac{\xi}{K_\xi + \xi + \frac{\xi^2}{K_I}}$	[Jungblut and Möller(1998)]

Tabelle 1: Übersicht über Enzymkinetiken und ihre Literaturreferenzen

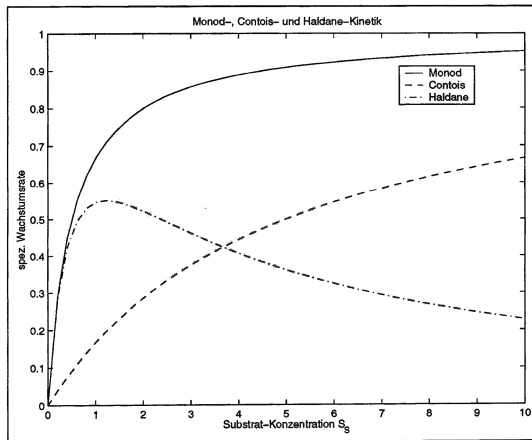
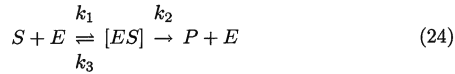


Abbildung 17: Funktionaler Verlauf der Enzym-kinetiken (Monod, Contois und Haldane)

### 3.1 Untersuchung der Grenzen der Monod-Kinetik

Die Monod-Kinetik und ihre Ableitung wurde bereits in Abschnitt (1.3.2) ausführlich behandelt. An dieser Stelle soll sie nun auf ihre Grenzen bei der Anwendung untersucht werden.

Die Ableitung der Monodkinetik in Abschnitt (1.3.2) beruht auf dem Grundprinzip der Enzym-Kinetik [siehe dort Gl.(2)]:



Werden nun die Differentialgleichungen für diesen biochemischen Prozess angeschrieben und gelöst, so ergibt sich für Wachstumskinetik des Produktes  $P$ , eine Kinetik der folgenden Form [siehe auch Abschnitt (1.3.2), Gl. (8)]:

$$\frac{dP}{dt} = k_3 E_0 \frac{S}{K_m + S} \quad (25)$$

Dies entspricht der Monod-Kinetik. Dieses Ergebnis wurde jedoch unter der Bedingung abgeleitet, dass sich der Enzym-Substrat-Komplex ( $[ES]$ ) in einem stationären Zustand befindet ( $\frac{d[ES]}{dt} = 0$ ). Um dieser Vorsetzung gerecht zu werden, muss eine der folgenden Bedingungen erfüllt sein:

- Die Substratkonzentration wird beständig durch einen Zufluss von Außen aufrecht erhalten.
- Die Konzentration des Enzyms  $E$  ist klein gegenüber der Konzentration des Substrates  $S$ , so dass sich die Substratkonzentration im betrachteten Zeitraum nur unwesentlich ändert.

Diese Voraussetzungen und damit die Grenzen der Monod-Kinetik wurden durch eine Simulation mit Hilfe von Matlab überprüft. Es wurden dabei die Differentialgleichungen des enzymatischen Zerfalls, wie sie in Gleichung (2) in Abschnitt: (1.3.2) gegeben sind, für unterschiedliche Parameter numerisch simuliert.

Dabei wurde als Parameter das Verhältniss der Konzentration des Enzyms  $E$  zur Substratkonzentration  $S$  variiert und das Differentialgleichungssystem für jede Variation des Parameters numerisch gelöst. Anschließend wurde das Ergebnis für den Enzym-Substrat-Komplex analysiert. Die Voraussetzungen für die Anwendbarkeit der Monod-Kinetik ist nur im Bereich einer stationären Lösung für den Enzym-Substrat-Komplex über die Zeit erfüllt.

Die Ergebnisse sind in folgenden Abbildungen [Abb. (18) und (19)] dargestellt.

### **Konzentration des Enzyms E klein gegenüber der Konzentration des Substrates S**

Wie in Abbildung (18) dargestellt ist, kann für steigende Werte des Parameters  $E/S$  nicht mehr von einem stationären Zustand des Enzym-Substrat-Komplexes gesprochen werden. Das bedeutet in weiterer Folge für Modelle biologischer Abwasserreinigungsverfahren, dass die Monod-Kinetik im Allgemeinen nur dann verwendet werden darf, wenn das Verhältnis von Enzym zu Substrat ( $E/S$ ) unter einer bestimmten kritischen Schwelle liegt. Dieser Schwellwert stellt keine scharfe Grenze dar, sondern dient als Richtwert bis zu welchen Bedingungen im Becken die Monod-Kinetik ihre Gültigkeit behält.

Durch die oben genannte Simulation der Differentialgleichungen des enzymatischen Substratabbaus zeigte sich, dass die Grenze für einen stationären Zustand bei einem Enzym - Substrat - Verhältnis von ca. 0.1 liegt. Das heisst, es muss ca. 10x soviel Substrat vorhanden sein wie Enzyme. Da das Vorhandensein von Enzymen proportional ist mit dem Vorhandensein von Bakterien im System, hängt der stationäre Zustand des Enzym-Substrat-Komplexes  $[ES]$  proportional von der Anzahl der Bakterien ab.

Da das Verhältnis von Enzymen bezogen auf die vorhandenen Bakterien nicht im Allgemeinen angegeben werden kann, muss in der Praxis eine Meßmethode implementiert werden, die das im System vorhandene Enzym ermittelt.

### **Variation bei konstanter Substratkonzentration (durch Zufluss von Außen)**

Die Simulationsergebnisse für die Variation des Enzym - Substrat - Verhältnisses, jedoch bei konstanter Substratkonzentration  $S$  ist in Abbildung (19) dargestellt. Wie dabei zu sehen ist, weist die Lösung für jede Enzym - Substrat - Konzentration eine Stationarität auf. Dieses Simulationsergebnis bedeutet, dass bei einer gleichbleibenden Substratkonzentration im System, die Monod-Kinetik angewendet werden kann und ihre Gültigkeit behält.

### **Folgerungen aus dem Simulationsexperiment**

Die Entscheidung, ob die Monod-Kinetik verwendet werden darf, hängt im Allgemeinen also vom Verhältnis Enzym zu Substrat  $E/S$  ab und ist nur für kleine  $E/S$  - Werte ( $E/S < 0.1$  bis  $E/S < 0.2$ ) gültig. Ist bei der Betriebsart des biologischen Abwasserbeckens und bei der Beschickung des Beckens mit Abwasser und damit mit Substraten gewährleistet, dass die Substratkonzentration im Becken annähernd konstant gehalten wird, dann kann die Monod-Kinetik zur Beschreibung der Wachstumsraten in Modellen biologischer Abwasserreinigungsverfahren unabhängig vom Enzym-Substrat - Verhältnis verwendet werden.

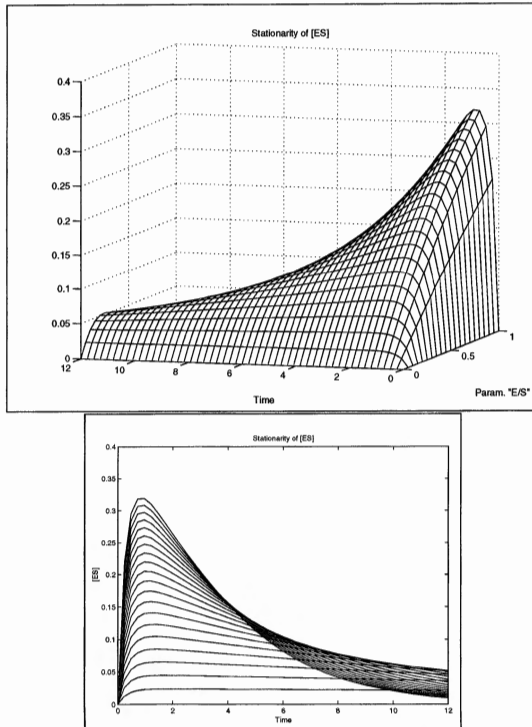


Abbildung 18: Lösung der Enzym-Kinetik-DGL für die Variable [ES] mit Variation des Parameters  $E/S = [0, 1]$  mit einer Diskretisierung von  $\Delta(E/S) = 0.05$  ( $n=20$ ); 2D- und 3D-Ansicht der Lösungen bei Variation des Parameters

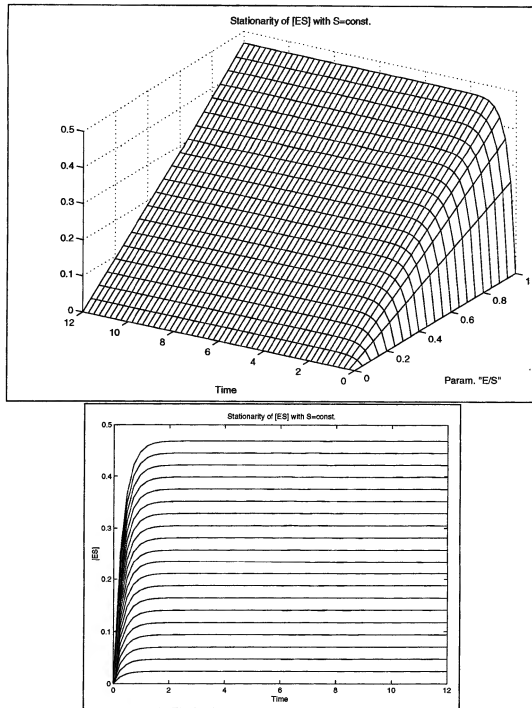


Abbildung 19: Lösung der Enzym-Kinetik-DGL für die Variable  $[ES]$  und konstanter Substratkonzentration mit Variation des Parameters  $E/S = [0, 1]$  mit einer Diskretisierung von  $\Delta(E/S) = 0.05$  ( $n=20$ ); 2D- und 3D-Ansicht der Lösungen bei Variation des Parameters



### 3.2 Vergleich Monod- / Contois- Kinetik

In diesem Abschnitt werden nun die beiden Kinetiken untersucht, die die Wachstumsrate der Bakterien und damit auch die Abbaurrate des Substrates bezogen auf das vorhandene Substrat im Kulturgefäß beschreiben. Dabei sollen ihre Eigenschaften und ihre funktionale Form bei unterschiedlichen Konzentrationen der Bakterien und des Substrates untersucht werden.

Abbildung (20) zeigt das Ergebnis der Variation der Konzentrationen und verdeutlicht die Abhängigkeit der Contois-Kinetik von der Bakteriendichte. Bei höherer Bakteriendichte wird der Kurvenverlauf der Dynamik zunehmend flacher, eine Annäherung an den stationären Wert erfolgt in einer dynamischen Simulation, daher etwas langsamer als bei der Monod-Kinetik, da die Wachstumsrate bei der Contois-Kinetik bei hohen Bakterienkonzentrationen und gleicher Substratkonzentration geringer ist.

Der Unterschied zwischen den beiden Kinetiken (Monod / Contois) fällt jedoch nur bei einer starken Schwankung der Bakterienkonzentration im Kulturgefäß ins Gewicht. Bei einem annähernd stationären Betrieb einer Anlage mit nur kleinen Schwankungen der Bakterienkonzentration, ist der Unterschied zwischen den Kinetiken nicht relevant. Das hat hauptsächlich den Grund, dass die Parameter der unterschiedlichen Kinetiken ( $K_m$ ,  $K_c$ ) an Hand von realen Meßexperimenten ermittelt werden müssen. Ein gemessener Kurvenverlauf bei einer bestimmten Konzentration bestimmt den jeweiligen Parameter der verwendeten Dynamik. Das bedeutet, dass die Halbwertskonstante der Monod-Kinetik ( $K_m$ ) und die der Contois- Kinetik ( $K_c$ ) in ihren Werten verschieden sein müssen, um den gleichen Kurvenverlauf bei gewählter Eich-Bakterienkonzentration korrekt abzubilden.

Aus der mathematischen Form ist leicht ersichtlich, dass für eine gewählte Bakterienkonzentration  $X_{eich}$  der Wert der Halbwertskonstante der Contois-Kinetik wie folgt aus dem Wert für die Monod-Kinetik errechnet werden kann:

$$K_c = \frac{K_m}{X_{eich}} \quad (26)$$

Diese mathematische Beziehung ist leicht aus der Form der Kinetiken ersichtlich.

Eine ausführliche Untersuchung dieser beiden Kinetiken im dynamischen Fall wird später in dieser Arbeit ausführlich erläutert. Dabei wird auch genauer auf komplexere Eichmöglichkeiten der Halbwertskonstanten im dynamischen Fall eingegangen.

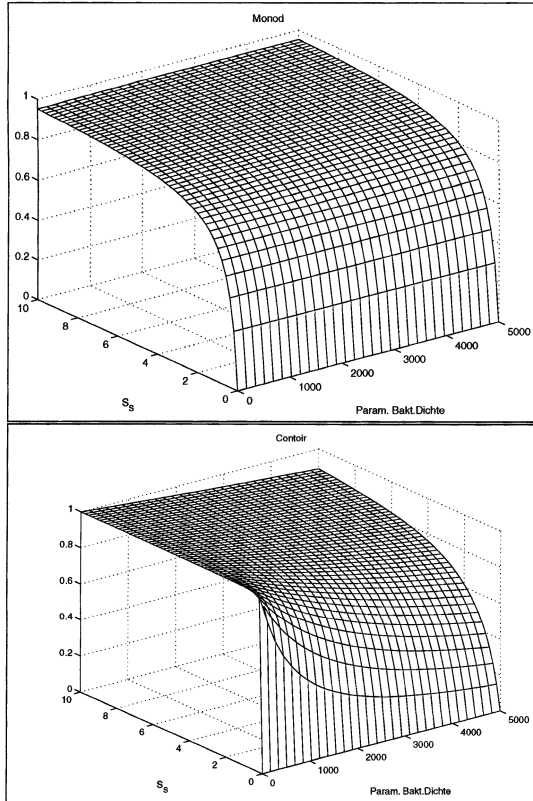


Abbildung 20: Verlauf der Enzymkinetiken für die Monod- und die Contois-Dynamik unter Variation der relevanten Konzentrationen; Variation der Substratkonzentration:  $[0, 10]$  und der Bakteriendichte:  $[0, 5000]$ . Die Eichung der Parameter  $K_m, K_c$  (Monod=Contois) erfolgte bei einer Bakteriendichte von  $X = 2000$ .

## 4 Prinzip der kontinuierlichen Kultivierung / Die Theorie des Chemostaten

Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit der kontinuierlichen Kultivierung von Mikroorganismen in Kulturgefäßen. Diese Methode der kontinuierlichen Beschickung der Kulturgefäße durch einen Zustrom und das Vorhandensein eines Abflusses, kann sogenannte Fließgleichgewichte erzeugen, wodurch Steuermechanismen entstehen, mit deren Hilfe in die Kultivierung eingegriffen werden kann. Man nennt diese System auch Chemostaten. Chemostaten können in manigfachen Bereichen der Biotechnologie und auch der medizinischen Technologie eingesetzt werden. Sie eignen sich zur Erzeugung Antibiotika, Vitaminen und Aminosäuren; finden jedoch auch Anwendung in der Erdölindustrie zur Umwandlung der im Erdöl vorhandenen Parafine. Ebenso werden diese Methoden zur biologischen Abwasserreinigung eingesetzt. Dieses Anwendungsgebiet ist der Hauptfokus dieser Arbeit. Die Methode der kontinuierlichen Kultivierung ist im folgenden Abschnitt ausführlich beschrieben. Dabei wird ausgehend von einfachen Überlegungen und in der Vergangenheit gemachten Experimenten die Funktionsweise des Chemostaten vom Grundprinzip her beschrieben und sukzessive erweitert. Die beschriebenen Experimente und die theoretischen Konzepte stammen aus [Romanovsky et al.(1974)Romanovsky, Stepanova, and Chernavsky].

### 4.1 Einfache Wachstumsgleichung für die Biomasse

Für die mathematische Beschreibung des Wachstumsprozesses einzelner Zellen oder ganzer Zellkolonien sollen zuerst qualitative Betrachtungen über das Wachstumsverhalten angestellt werden. Das Grundprinzip des Wachstums kann dadurch verdeutlicht werden, dass lebende Zellen in einem Nährmedium zu einer gewissen Größe heranwachsen. Wenn die Zelle eine gewisse Größe erreicht hat, teilt sie sich in zwei Tochterzellen, von denen jede wieder zu wachsen beginnt.

Um ein Maß für das Wachstum zu erhalten, wäre es möglich unter dem Mikroskop die Zellenzahl der Kultur auszuzählen und diese Zahl über die Zeit zu beobachten. Das würde jedoch ein diskretes Maß ergeben. Zum Aufstellen von kinetischen Wachstumsgleichungen wird jedoch eine stetige Größe benötigt. Es wird also die Biomasse im Kulturgefäß betrachtet. Die Biomasse, das heisst die Masse aller Zellen, kann durch folgende zwei Meßmethoden ermittelt werden:

- Bestimmung des Trockengewichtes: Da die Zellen nicht einfach von der Nährlösung getrennt werden können und die Zellen zu 80% aus Wasser bestehen, ist es üblich die Zellmasse durch das Trockengewicht (in mg) der Zellen zu charakterisieren, die sich in 1 ml Nährlösung befinden.

- Trübungsmessung: Bei dieser optischen Messmethode wird die Transmission und die Streuung von Licht gemessen, das durch eine Küvette mit reinem Wasser und durch eine Küvette mit Zellsuspension hindurch gegangen ist. Diese beiden Werte werden verglichen und mit Hilfe eine Eichkurve in Einheiten der Trockenmasse umgerechnet.

Im Folgenden wird die Konzentration der Biomasse mit  $X$  bezeichnet. Somit ist der Zuwachs an Biomasse pro Zeiteinheit durch  $dX/dt$  gegeben und wird als Wachstumsgeschwindigkeit bezeichnet.

Bei der Vermehrung einzelner Organismen ist es charakteristisch, dass die Menge der verbrauchten Nährstoffe und damit auch die Wachstumsrate der Biomasse proportional zur vorhandenen Zellmasse ist,

$$\frac{dX}{dt} = \mu X \quad (27)$$

wobei  $\mu$  die spezifische Wachstumsrate darstellt. Unter später aufgeführten Bedingungen kann die spezifische Wachstumsrate als konstant angenommen werden. In diesem Fall ist die Lösung der Gleichung bei gegebenen Anfangsbedingungen ( $X = X_0, t = t_0$ ) gegeben durch:

$$X = X_0 e^{\mu(t-t_0)} \quad (28)$$

Der durch Gleichung (27) ausgedrückte Wachstumsprozess beschreibt ausschließlich das Wachstum der Zellen, nicht jedoch ihre Vermehrung. Da jedoch das Wachstum einer Zelle nicht unbegrenzt anhalten kann, wird mit der Zeit eine kritische Größe erreicht, bei der die Zellteilung einsetzt. Es kann daher angenommen werden, dass im Mittel die Konzentration der Biomasse, der Zahl der Zellen pro Volumeneinheit proportional ist. Der Proportionalitätsfaktor hängt von der mittleren Zellgröße ab.

Die Zeit zwischen zwei aufeinander folgenden Zellteilungen nennt man Generationszeit und sie muss im Mittel der Verdopplungszeit  $T$  der Biomasse entsprechen. Unter der Voraussetzung, dass die mittlere Wachstumsrate  $\mu$  bekannt und über die Zeit konstant ist, kann die Verdopplungszeit der Biomasse leicht durch einsetzen von  $X = 2X_0$  und  $t - t_0 = T$  in obige Gleichung und durch Logarithmieren ermittelt werden. Man erhält

$$T = \frac{\ln 2}{\mu} \approx 0.7 \frac{1}{\mu} \quad (29)$$

Die oben gemachte Annahme, dass die Zahl der Zellen und die Konzentration der Biomasse zu einander proportional ist, ist gerechtfertigt, wenn die Zellteilungen voneinander unabhängig sind. Diese Voraussetzung ist unter normalen Bedingungen erfüllt, da eine Zellkultur in der Regel aus Zellen unterschiedlichen Lebensalters besteht. Die Zellteilungen verteilen sich annähernd gleichmäßig in der Zeit. Somit können die Begriffe "Wachstum der Biomasse" und "Wachstum der Zellzahl" gleichbedeutend verwendet werden.

## 4.2 Das Altern einer Zellkultur

Gleichung (27) beschreibt, wie bereits erwähnt, das Wachstum der Biomasse bei einer konstanten, spezifischen Wachstumsrate  $\mu$ . Die spezifische Wachstumsrate ist nur dann konstant, wenn alle Bedingungen im Kulturgefäß konstant gehalten werden. Im Speziellen ist das der Fall, wenn die Nährstoffe unerschöpflich sind, beziehungsweise für ihre ständige Erneuerung gesorgt wird.

Wird eine Zellkultur jedoch in ein abgeschlossenes Gefäß eingebracht, so nimmt die Wachstumsrate nach einer gewissen Zeit (lag-Phase) stark zu. Dieses anfängliche Wachstum gehorcht annähernd der Gleichung (28). Die Wachstumskonstante  $\mu$  ist in diesem Fall nicht mehr über den zeitlichen Verlauf der Kultivierung konstant. Sie hängt von den äusseren Milieubedingungen ab.

Die anfänglich hohe spezifische Wachstumsrate nimmt mit dem Verbrauch von Nährstoffen und dem Anhäufen von Stoffwechselprodukten im Kulturgefäß immer weiter ab (die Kultur altert). Schließlich hört das Wachstum auf und durch den Prozess des Absterbens und der Sporenbildung kommt es zum Absterben der Zellen (d.h. die Wachstumsrate wird negativ).

Das Alter einer Zellkultur darf nicht mit dem Alter der einzelnen Zelle verwechselt werden.

Die Verringerung der Wachstumsgeschwindigkeit bezeichnet man auch als das Altern der Zellkultur. Dieser Vorgang ist durch Zufuhr von Nährstoffen bis zu einem bestimmten Grad reversibel.

Wie bereits gesagt, besitzt dieser Vorgang keine Gemeinsamkeiten mit den intrazellulären Veränderungen, die das Altern der Zelle selbst darstellen und irreversibel sind.

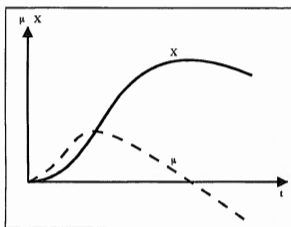


Abbildung 21: Wachstumskurve der Biomasse (spez. Wachstumsrate  $\mu$ ); aus [Romanovsky et al.(1974)Romanovsky, Stepanova, and Chernavsky]

### 4.3 Methode des Chemostaten

Zur Bestimmung der Wachstumscharakteristiken wurden im Jahre 1950 von mehreren Wissenschaftlern (MONOD in Frankreich und NOVICK & SZIL-LARD in den USA) gleichzeitig die Methode der kontinuierlichen Kultur entwickelt. Sie wird auch als Methode des Chemostaten bezeichnet.

Das Prinzip der kontinuierlichen Kultivierung ist in untenstehender Abbildung (Abb. 22) dargestellt. In ein Gefäß mit dem Volumen  $V$  tritt durch die Zuflussöffnung Nährlösung der Menge  $Q$  mit der limitierenden Konzentration  $S_O$  ein. Im Kulturgefäß erfolgt eine intensive Vermischung mit der dort vorhandenen Nährlösung. Das Kulturgefäß erhält also Biomasse der Konzentration  $X$ , das limitierende Substrat der Konzentration  $S$  und eine gewisse Menge an gebildeten Stoffwechselprodukten  $P$ . Die gleiche Menge  $Q$  der Nährlösung verlässt das Kulturgefäß durch den Abfluss. Im Falle einer gleichen Dimensionierung des Zu- und Abflusses, ist die Zuflussgeschwindigkeit  $v$  gleich der Ausflussgeschwindigkeit. Die beschriebene Methode trägt die Bezeichnung homogene kontinuierliche Kultur, da durch das Rührwerk eine vollständige Durchmischung des Mediums erfolgt.

#### Fließgleichgewicht

Die grundlegende Eigenschaft dieser kontinuierlichen Methode ist die Tatsache, dass sich ein stabiles Gleichgewicht einstellt, das sogenannte Fließgleichgewicht. Das bedeutet, dass sich nach Ablauf einer bestimmten Zeit nach dem Einschalten des Zuflusses eine konstante, zeitunabhängige Konzentration an Biomasse, Substrat und Stoffwechselprodukten einstellt. Dies bedeutet, dass der Zuwachs an Biomasse infolge der Zellvermehrung exakt den Verlust an Biomasse infolge des Abflusses aus dem Kulturgefäß ausgleicht. Eine Veränderung der Zuflussgeschwindigkeit führt nach einem Übergangsverhalten ohne Fließgleichgewicht wieder zu einem stationären Zustand, und es stellen sich wiederum konstante Konzentrationen von  $X$ ,  $S$  und  $P$  ein.

Der Zustand des Fließgleichgewichtes ist stabil. Diese Tatsache kann durch folgende Überlegung verdeutlicht werden:

Ist eine zufällige Änderung der Konzentration der Biomasse im Gefäß gegeben, so bewirkt diese Änderung eine indirekt proportionale Änderung der Konzentration des Substrates, was zu einer Veränderung der Wachstumsgeschwindigkeit der Biomasse führt und somit wird die zuerst angenommene Änderung der Konzentration der Biomasse entgegen gewirkt, bis der Gleichgewichtswert wieder erreicht ist.

#### Verdünnungsrate

Um die Abhängigkeit der spezifischen Wachstumsrate von Substratkonzentrationen zu untersuchen, werden folgende Zusammenhänge betrachtet: In einem Kulturgefäß mit dem Volumen  $V$  und der Bakterienkonzentration  $X$  muss die Massenänderung der Bakterien pro Zeiteinheit

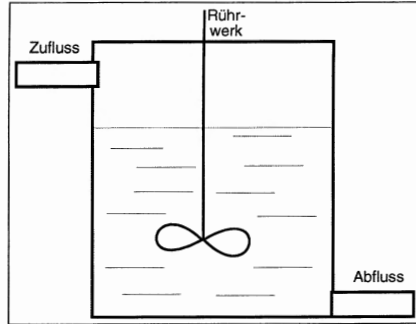


Abbildung 22: Schematische Darstellung des Chemostaten

$$(\Delta m)_+ = \mu XV \quad [g/sec] \quad (30)$$

betragen. Im gleichen Zeitraum wird ein Teil der Biomasse durch den Abfluss mit dem Querschnitt  $Q$  und der Geschwindigkeit  $v$  ausgeschwemmt:

$$(\Delta m)_- = QvX \quad [g/sec] \quad (31)$$

Im Gleichgewicht müssen sich die Zunahme und die Abnahme der Biomasse kompensieren. Durch Gleichsetzen der beiden oben stehenden Beziehungen folgt:

$$\begin{aligned} \mu XV &= QvX \\ \mu &= \frac{vQ}{V} = D \quad [sec^{-1}] \end{aligned} \quad (32)$$

Die rechte Seite von Gleichung (32) beschreibt die Verdünnungsrate des Systems und wird üblicherweise mit  $D$  bezeichnet. Der Reziprokwert von  $D$ , also  $1/D$ , wird als Verweilzeit bezeichnet. Stellt man sich das Kulturgefäß wie ein Rohr mit dem Querschnitt  $Q$  und der Länge  $L$  vor, so ist die Zeit  $\tau$ , die ein Teilchen mit der Geschwindigkeit  $v$  zum Durchlauf des Kulturgefäßes braucht, gleich  $\Theta$ . Findet im Kulturgefäß eine Vermischung statt, wie es in realen Kulturgefäßen der Fall ist, dann ist  $\Theta$  als mittlere Verweilzeit aufzufassen.

$$\tau = \frac{L}{v} = \frac{LQ}{vQ} = \frac{V}{vQ} = \frac{1}{D} = \Theta \quad (33)$$

Aus oben gemachten Überlegungen folgt, dass sich bei einem vorgegebenen Wert der Verdünnungsrate  $D$  ein konstanter Wert der Wachstumsgeschwindigkeit  $\mu$ ,  $\mu = D$  einstellen wird. Aus der Gleichgewichtsbedingung folgt, dass dabei auch die Konzentration der Biomasse und des Substrates konstant sind.

Eine Vergrößerung der Verdünnungsrate bewirkt nach einer Übergangszeit also auch eine Vergrößerung der Wachstumsgeschwindigkeit. Dies ist jedoch nur dann möglich, wenn eine ausreichende Menge an Substrat vorhanden ist. Bleibt bei der Erhöhung der Verdünnungsrate die Konzentration des limitierenden Substrates  $S_0$  unverändert, so kann weniger Substrat in Biomasse umgesetzt werden und die Konzentration von  $X$  muss sich auf ein niedrigeres Niveau einstellen.

Es kann also notwendig sein, mit der Verdünnungsrate  $D$  auch die Konzentration des limitierenden Substrates im Zufluss zu erhöhen.

### Abhängigkeit der spez. Wachstumsrate von der Substratkonzentration

Messungen ergaben, dass die Abhängigkeit der spezifischen Wachstumsrate von der Substratkonzentration wie folgt aussieht (siehe dazu [Romanovsky et al.(1974)Romanovsky, Stepanova, and Chernavsky]):

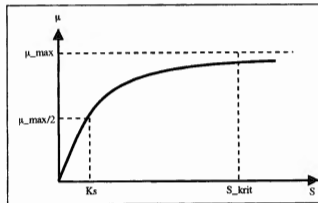


Abbildung 23: Abhängigkeit spez. Wachstumsrate / Substratkonzentration

Dieser Zusammenhang erinnert an die Michaelis-Menten-Beziehung, die im Abschnitt über die Enzym-kinetik beschrieben wurde. Mathematisch kann er als Hyperbel angeschrieben werden:

$$\mu_0(S) = \mu_{max} \frac{S}{K_S + S} \quad (34)$$

Der Parameter  $\mu_{max}$  ist dabei die maximale Wachstumsgeschwindigkeit und der Parameter  $K_S$  stellt die Halbwertskonstante dar. Bei der mit  $S_{krit}$  bezeichneten Substratkonzentration setzt die Substrathemmung (ähnlich der Produkthemmung) ein. In diesem Bereich muss die Abhängigkeit der Wachs-



tumsrate vom Substrat  $[\mu_0(S)]$  durch einen komplizierteren mathematischen Ausdruck beschrieben werden (siehe dazu Haldane-Kinetik in Abschnitt (3)).

### **Einfluss der Konzentration anderer Stoffwechselprodukte**

Der in Gleichung (34) beschriebene Ausdruck, drückt den Zusammenhang  $\mu_S$  nur für einen bestimmten konstanten Wert der Konzentration der Biomasse aus. Im Prinzip sollten die beiden Parameter  $K_S$  und  $\mu_{max}$  nicht von der Konzentration der Biomasse  $X$  abhängen, da die Wachstumsgeschwindigkeit eines Organismus proportional der Nahrungsaufnahme ist und nicht vom Vorhandensein anderer Organismen im Kulturgefäß abhängig ist.

Im Laboratorium von N. D. Jerusalimsky (siehe auch [Romanovsky et al.(1974)Romanovsky, Stepano wurde entdeckt, dass das Wachstum von Propionsäurebakterien durch die eigenen Stoffwechselprodukte (Propionat und Azetat) gehemmt wird. Da in diesem Fall die Menge beider Produkte proportional der Biomasse ist, hängt auch die Wachstumsgeschwindigkeit stark von der Biomasse  $X$  ab. Die quantitative Untersuchung dieses Phänomens ergab eine volle Übereinstimmung mit dem Flaschenhalsprinzip (siehe Kapitel Stoffwechselkinetik), in so fern als beide Produkte alternativ wirken: Entweder hemmt das eine Produkt das Wachstum oder das Andere, aber nicht beide gleichzeitig. Das Versuchsergebnis ist im Folgenden in Abbildung (24) dargestellt. Die Versuchsbedingungen waren dabei wie folgt:

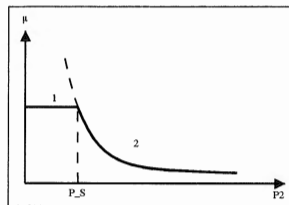


Abbildung 24: Abhängigkeit der spezifischen Wachstumsrate von anderen Stoffwechselprodukten; aus [Romanovsky et al.(1974)Romanovsky, Stepanova, and Chernavsky]

Die Konzentration des Substrates und des Produktes  $P_1$  (Propionat) wurde konstant gehalten und die Abhängigkeit der spezifischen Wachstumsrate von der Konzentration des anderen Produktes  $P_2$  (Azetat) untersucht. So lange die Konzentration von  $P_2$  einen bestimmten Schwellwert  $P_S$  nicht überschreitet, hat das  $P_2$  keinerlei Einfluss auf die Wachstumsrate. Diese ist im Bereich  $P_2 < P_S$  konstant, da  $P_1$  konstant gehalten wurde  $[\mu(P_1) = const = \mu_0]$ . Das

entspricht dem horizontalen Abschnitt 1 der Kurve in Abbildung (24). Bei weiterer Vergrößerung von der Konzentration von  $P_2$  wird die Abhängigkeit der Wachstumsrate  $\mu(P_2)$  nahezu hyperbolisch (Kurvenabschnitt 2):

$$\mu = \frac{\mu_0}{1 + \frac{P_2}{K_{P_2}}} \quad (35)$$

Im Allgemeinen ist die Größe  $\mu_0$  in obiger Gleichung eine Funktion des Substrats [siehe Gleichung (34)] und ist damit von der Substratkonzentration  $S$  abhängig. Ist  $S$  nicht wie im oben beschriebenen Experiment konstant gehalten, so erhält man folgende allgemein gültige Gleichung für die Wachstumsrate:

$$\mu = \mu_{max} \frac{K_P S}{(K_S + S)(K_P + P)} \quad (36)$$

Diese Gleichung ist analog der Gleichung für die nichtkompetitive Hemmung im Kapitel der Stoffwechselkinetik.

### **Einfluss des Sauerstoffs**

Bisher wurde angenommen, dass als einziger limitierende Faktor die Kohlenstoffquelle in Frage kommt. Für anaerobe Bakterien kann das angenommen werden, da sie zum Überleben keinen Sauerstoff aus der Luft benötigen. Aerobe Bakterien benötigen hingegen im Nährmedium gelösten Sauerstoff, und diese Sauerstoffkonzentration hat einen wesentlichen Einfluss auf die Wachstumsgeschwindigkeit. Der Einfluss auf die Wachstumsrate verschwindet, sobald genügend Sauerstoff im System vorhanden ist. Diese Abhängigkeit der spezifischen Wachstumsrate vom gelösten Sauerstoff kann ebenfalls durch eine Sättigungskurve beschrieben werden. D.h. angelehnt an Gleichung (34) wird die Wachstumsrate  $\mu$  wie folgt zu  $\mu_{O_2}$  adaptiert:

$$\mu_{O_2} = \mu \frac{S_O}{K_O + S_O} \quad (37)$$

### **Temperatur und pH-Wert**

Die Temperatur und der pH-Wert haben in so fern einen Einfluss, als eine Vielzahl von Organismen nur in einem eingeschränkten Temperatur- und pH-Wert-Bereich existieren können. Veränderungen dieser Faktoren innerhalb der gegebenen Intervalle haben meist nur wenig Einfluss auf die Stoffwechseltätigkeit, jedoch führt eine Überschreitungen der Grenzwerte häufig zum raschen Tod des Organismus. In diesem Abschnitt wird vorausgesetzt, dass diese Faktoren in erlaubten Bereichen konstant gehalten werden können. Sie finden somit keinen Eingang ins Modell, da sie keinen Einfluss auf die Wachstumsrate haben. Diese Annahme kann später für spezielle Fragestellungen überdacht werden.

#### 4.4 Das mathematische Modell des Standard - Chemostaten

In diesem Abschnitt wird nun das mathematische Modell des Chemostaten sukzessive abgeleitet. Die mathematische Formulierung soll dabei die Möglichkeit bieten, Optimierungen hinsichtlich der Produktivität des Chemostaten und der Durchflussgeschwindigkeit durchzuführen. Zusätzlich können Fragen über die Einflüsse einer Veränderung der Durchflussgeschwindigkeit auf die Konzentrationen von Biomasse und Substrat leicht beantwortet werden.

##### Allgemeine Betrachtung

Wie bereits zu Beginn dargestellt, wird die Wachstumskinetik der Biomasse für die diskontinuierliche Kultivierung durch folgende Gleichung beschrieben:

$$\frac{dX}{dt} = \mu X \quad (38)$$

Diese Gleichung bestimmt jedoch nicht den gesamten Prozess. Wie im vorigen Abschnitt dargestellt, kann die spezifische Wachstumsrate  $\mu$  sowohl eine Funktion der Substratkonzentration sein [siehe Gl. (34)], als auch eine Funktion der Produktkonzentrationen [Gl. (36)]. Das bedeutet, dass für die Bildung eines geschlossenen Modells im ersten Fall unbedingt eine Gleichung für die Substratkonzentration  $S$  und im zweiten Fall zusätzlich für das Produkt  $P$  aufgestellt werden muss.

Die Grundlage dieser Gleichungen ist die Massenbilanz, die in jedem Fall erfüllt sein muss. Da im lebenden Organismus ein ständiger Massenaustausch mit der Umgebung stattfindet, muss die Massenbilanz alle am Austausch beteiligten Substanzen berücksichtigen. Die dabei verwendeten Größen sind alle in der gleichen Einheit angegeben. Die Konzentration der Biomasse wird also im Folgenden nicht in Gramm Kohlenstoff in der Trockenmasse, sondern in Mol C (Mol Kohlenstoff) angegeben.

Im Zeitintervall  $dt$  verringert sich die Konzentration des Substrates infolge des Verbrauchs durch die Zellen um die Größe  $dS$ . Dieser Teil des Substrates führt zu einem Zuwachs an Biomasse:

$$dX = -YdS \quad (39)$$

Die Größe  $Y$  nennt man dabei den Ertragskoeffizienten. Er besagt, wieviel Prozent des Substrates direkt in Biomasse umgewandelt wird. Es wird angenommen, dass am Anfang im Kulturgefäß eine bestimmte Menge von Substrat  $S_0$  und Biomasse  $X_0$  vorhanden ist. Die Bakterienkultur produziert durch den Verbrauch von Substrat auch eine bestimmte Menge an Stoffwechselprodukten, die im Folgenden durch die Variable  $P$  beschrieben werden. Zum Anfangszeitpunkt  $t_0$  sind per definitionem keine Stoffwechselprodukte im Kulturgefäß ( $P_0 = 0$ ).

Das Gesetz der Massenerhaltung kann somit in einer differentiellen Form geschrieben werden:

$$dX + dS + dP = 0 \quad (40)$$

Die einfache Form von Gleichung (40) ist möglich, da alle Einheiten in Mol C angegeben wurden. Werden nun die Gleichungen (39) und (40) mit den genannten Anfangsbedingungen angeschrieben, so folgt:

$$X_0 + S_0 = X + S + P \quad (41)$$

$$\frac{1}{Y}X_0 + S_0 = \frac{1}{Y}X + S \quad (42)$$

Die erste Beziehung [Gl. (41)] ist eine Folge der Massenerhaltung, und die Zweite [Gl. (42)] ergibt sich aus der Konstanz des Ertragskoeffizienten. Diese beiden Beziehungen zusammen mit Gleichung (38) und der Gleichung für die Wachstumsrate [Gl. (34) oder (36)] ergeben das gesuchte geschlossene Gleichungssystem.

### Betrachtung für kontinuierliche Kulturen

Diese Überlegungen gelten im Allgemeinen für jede Art von Kultur. Im kommenden Teil wird im Speziellen die kontinuierliche Kultur beschrieben. In diesem Fall muss zusätzlich zum Wachstumsterm  $\mu X$  noch der Abfluss von Biomasse aus dem Chemostaten berücksichtigt werden. Die Änderung der Konzentration der Biomasse ist also für den hier betrachteten Standard - Chemostaten durch folgende Gleichung gegeben:

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= \left( \frac{dX}{dt} \right)_+ - \left( \frac{dX}{dt} \right)_- \\ &= \mu X - D(X - X_0) \\ &= \text{mit } X_0 = 0| \\ &= \mu X - DX \end{aligned} \quad (43)$$

Dabei wurde angenommen, dass sich im Zufluss zum Kulturgefäß keine Bakterien befinden ( $X_0 = 0$ ). Im Fall von Chemostaten in der Biotechnologie ist jedoch ein Zufluss von Bakterienmasse in der Regel nicht vorhanden. Bei biologischen Abwasserreinigungsanlagen sind im Zufluss meist nur vernachlässigbar wenige relevante Bakterien vorhanden. Bakterien die keinen Beitrag zur Eliminierung der gewünschten Substrate und Abwasserkomponenten beitragen, haben keine relevante Auswirkung auf das Abbauverhalten

und den Wirkungsgrad des biologischen Abwasserreinigungsverfahrens.

Die Verdünnungsrate  $D$  wurde bereits als  $D = \nu Q/V$  definiert, wobei  $\nu$  den Zufluss,  $Q$  den Querschnitt des Zuflusses und  $V$  das Volumen des Kulturgefäßes beschreiben. Da es sich bei dem betrachteten Kulturgefäß um eine abgeschlossene Einheit mit konstantem Volumen handelt, beschreibt die Verdünnungsrate  $D$  ebenso den Abfluss aus dem Gefäß. Daher ist die Konzentrationsänderung der Biomasse durch Ausschwemmen aus dem Kulturbecken proportional zur Verdünnungsrate  $D$ .

Unter Verwendung des oben eingeführten Ertragskoeffizienten  $Y$  kann die Abnahme der Substratkonzentration pro Zeiteinheit durch die Veränderung der Konzentration der Biomasse angegeben werden:

$$\left(\frac{dS}{dt}\right)_- = -\frac{1}{Y} \left(\frac{dX}{dt}\right)_+ = -\frac{1}{Y} \mu X \quad (44)$$

Die Konzentration des Substrates nimmt durch den Abfluss von Substrat im Kulturgefäß mit der Verdünnungsrate ab, jedoch durch den Zufluss von Substrat  $S_0$  in das Kulturgefäß zu. Somit ergibt sich für die Konzentrationsänderung von  $S$  im Kulturgefäß die Gleichung:

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y} \mu X + D(S_0 - S) \quad (45)$$

Aus der Beziehung der Massenerhaltung [Gl. 40] und den Gleichungen für die Konzentrationsänderungen von  $X$  und  $S$  [Gl. (43) und (45)] ergibt sich wie folgt die Beziehung für das Stoffwechselprodukt  $P$ :

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dt} &= -\frac{dS}{dt} - \frac{dX}{dt} \\ &= \left(\frac{1}{Y} - 1\right) \mu X - D \underbrace{(S_0 - S - X - X_0)}_P \\ &= \left(\frac{1}{Y} - 1\right) \mu X - DP \end{aligned} \quad (46)$$

#### **Differentialgleichung für die Gesamtkonzentration an Kohlenstoff**

An dieser Stelle sind nun die drei Differentialgleichungen [Gl. (43), (45) und (46)] für die Konzentrationsänderungen von den Bakterien  $X$ , dem Substrat  $S$  und den Stoffwechselprodukten  $P$  definiert. Sie sind hier noch einmal dargestellt:

$$\begin{aligned}
\frac{dX}{dt} &= \mu X - D(X - X_0) \\
\frac{dS}{dt} &= -\frac{1}{Y}\mu X + D(S_0 - S) \\
\frac{dP}{dt} &= \left(\frac{1}{Y} - 1\right)\mu X - DP
\end{aligned}$$

Es wird nun im Folgenden die Gesamtkonzentration  $u$  an Kohlenstoff durch Addition der drei im Modell vorhandenen Kohlenstoffkonzentrationen gebildet:  $u = X + S + P$

Durch Addition der oben dargestellten drei Gleichungen erhält man dann eine lineare Differentialgleichung für die Gesamtkonzentration an Kohlenstoff.

$$\frac{du}{dt} = D(S_0 - u) \quad (47)$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung mit den gegebenen Anfangsbedingungen für  $u_0 = X_0 + S_0 + P_0$  ist wie folgt gegeben:

$$u = S_0(1 - e^{-Dt}) + u_0 e^{-Dt} \quad (48)$$

Im diesem Fall der kontinuierlichen Kultur handelt es sich um ein offenes System (wegen dem Zu- und Ablauf), und somit ist die Gesamtkonzentration an Kohlenstoff im System nicht zu allen Zeitpunkten konstant. Das steht im Gegensatz zu den Ergebnissen bei einem diskontinuierlichen System (Batch-Betrieb).

Bei unterschiedlichen Anfangsbedingungen konvergiert die Konzentration  $u$  jedoch immer gegen einen konstanten Wert, der gleich der Zufusskonzentration an Substrat  $S_0$  ist. Im System des Chemostaten stellt sich ein dynamisches Gleichgewicht bezüglich der Variable  $u$  ein.

Die Zeit bis zum Einstellen dieses Gleichgewichtes hängt von der Verdünnungsrate  $D$  ab. Die Zeitkonstante beträgt dabei:  $\tau = \frac{1}{D}$ .

Die Summe der stationären Konzentrationen beträgt somit:

$$\bar{X} + \bar{S} + \bar{P} = S_0 \quad (49)$$

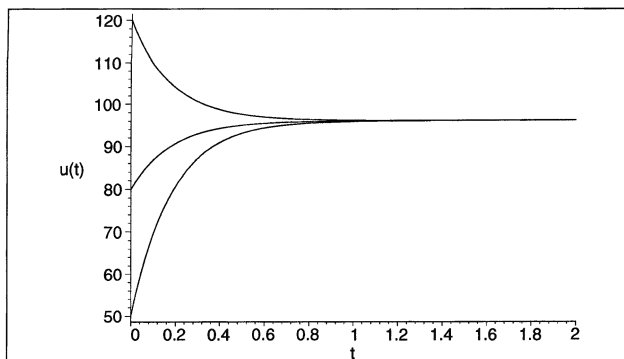


Abbildung 25: Dynamisches Gleichgewicht  $u(t)$  bei unterschiedlichen Startwerten  $u_0 = 50, 80, 80, 120$

#### 4.5 Das dynamische Gleichgewicht im Standard - Chemostaten

In diesem Abschnitt werden gleichgewichtige Zustände des Chemostaten unter verschiedenen Bedingungen untersucht. Die gleichgewichtigen, stationären Zustände des Chemostaten werden auch Fließgleichgewicht genannt. Bei einem Chemostaten handelt es sich um ein offenes System, das bedeutet in diesem speziellen Fall (Standard - Chemostat), dass er einen Zu- und einen Abfluss besitzt. Bei bestimmten Verdünnungsraten stellen sich im Chemostaten jedoch stationäre Zustände der Bakterien-, Substrat- und Produktkonzentration ein.

Im Folgenden werden diese Zustände analytisch abgeleitet und näher untersucht. Dabei werden die beiden Differentialgleichungen für die Bakterien- und die Substratkonzentration aus den Differentialgleichungen, die den Abbauprozess beschreiben, abgeleitet. Über die im vorigen Abschnitt erläuterte Massenerhaltung im System, ergibt sich der stationäre Wert für die dritte Konzentration, die Produktkonzentration aus der in Gleichung (49) definierten Beziehung:

$$\bar{P} = S_0 - \bar{X} - \bar{S} \quad (50)$$

#### 4.5.1 Stationäre Konzentrationen bei Standard - Chemostaten mit Monod - / Contois - Kinetik

Um nun aus den bereits aus dem vorigen Abschnitt bekannten Gleichungen, die stationären Konzentrationen des Chemostaten zu berechnen, werden die Veränderungsrate der Konzentrationen Null gesetzt. Der Zustand in dem die Konzentrationsänderungen beider betrachteter Systemgrößen Null ist, entspricht dem stationären Punkt. Die Konzentrationen, die beim Erreichen dieses Zustandes im System vorherrschen, sind dann stationär und verändern sich über die Zeit nicht mehr. Dies gilt selbstverständlich nur unter der Annahme, dass sich sonst keine Systemparameter, wie die Konzentration im Zufluss oder die Verdünnungsrate ändern.

#### Standard - Chemostat mit Monod - Kinetik

Die beiden, für die Untersuchung der stationären Zustände relevanten Gleichungen sind unter Verwendung von Gleichung (43) und (45) und der Monod-Kinetik [Gl. (34)] für die Wachstumsrate  $\mu$  folgender Massen definiert:

$$\frac{dX}{dt} = \mu_{max} \frac{S}{K_{S,m} + S} X - DX \quad (51)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y} \mu_{max} \frac{S}{K_{S,m} + S} X + D(S_0 - S) \quad (52)$$

Im Folgenden werden nun die stationären Zustände der Konzentration der Systemvariablen im Chemostaten abgeleitet:

ad. Gl. (51):



$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} = \mu_{max} \frac{S}{K_{S,m} + S} X - DX &= 0 \\ \Rightarrow \quad \overline{X} \left( \mu_{max} \frac{\overline{S}}{K_{S,m} + \overline{S}} - D \right) &= 0 \end{aligned} \quad (53)$$

für  $\overline{X} \neq 0$  folgt weiter:

$$\begin{aligned} \mu_{max} \frac{\overline{S}}{K_{S,m} + \overline{S}} - D &= 0 \\ \overline{S}(\mu_{max} - D) - DK_{S,m} &= 0 \\ \overline{S} &= \frac{DK_{S,m}}{\mu_{max} - D} \end{aligned} \quad (54)$$

Die hier berechnete stationäre Konzentration des Substrates  $\overline{S}$  für ein Chemostatenmodell mit Monod-Kinetik hängt also nur vom verfahrenstechnischen Parameter  $D$ , der Verdünnungsrate und von den biologischen Konstanten  $\mu_{max}$  und  $K_S$  ab. Der Parameter  $\mu_{max}$  stellt dabei die maximale Wachstumsrate der Bakterien dar und  $K_S$  ist die Halbwertskonstante der Monod-Kinetik.

Äquivalent zu dieser Ableitung folgt für die stationäre Konzentration der Bakterien:

ad. Gl. (52):

$$\begin{aligned}
\frac{dS}{dt} &= -\frac{1}{Y} \underbrace{\mu_{max} \frac{S}{K_{S,m} + S}}_{\text{aus (53): } D \bar{X}} X + D(S_0 - S) = 0 \\
\Rightarrow \quad -\frac{1}{Y} D \bar{X} + D S_0 - D \bar{S} &= 0 \\
\frac{1}{Y} \bar{X} + \bar{S} &= S_0 \quad (55)
\end{aligned}$$

mit Gl.(54) für  $\bar{S}$  folgt weiters:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{Y} \bar{X} + \frac{DK_{S,m}}{\mu_{max} - D} &= S_0 \\
\bar{X} &= Y \left( S_0 - \frac{DK_{S,m}}{\mu_{max} - D} \right) \\
\bar{X} &= Y \left( \frac{\mu_{max} S_0 - D(S_0 + K_{S,m})}{\mu_{max} - D} \right) \quad (56)
\end{aligned}$$

Die stationäre Konzentration der Bakterien  $\bar{X}$  für ein Chemostatenmodell mit Monod-Kinetik hängt ebenfalls vom verfahrenstechnischen Parameter  $D$  und von  $S_0$ , der Zulaufkonzentration von Substrat und von den biologischen Konstanten  $\mu_{max}$ ,  $K_S$  und  $Y$  ab. Neben den oben erklärten Parametern  $\mu_{max}$  und  $K_S$  stellt  $Y$  den Ertragskoeffizienten beim Substratabbau dar. Er gibt an, welcher Prozentsatz des Substrats beim Abbau zu Bakterienmasse umgewandelt wird.

In untenstehender Box (57) sind nochmals die stationären Konzentrationen der Bakterien ( $X$ ), des Substrates ( $S$ ) und der Stoffwechselprodukte ( $P$ ) für einen Chemostaten mit Monod - Kinetik dargestellt.

$$\begin{aligned}
\bar{X} &= Y \left( \frac{\mu_{max} S_0 - D(S_0 + K_{S,m})}{\mu_{max} - D} \right) \\
\bar{S} &= \frac{DK_{S,m}}{\mu_{max} - D} \\
\bar{P} &= \frac{(1 - Y)(S_0 \mu_{max} - D(S_0 - K_{S,m}))}{\mu_{max} - D}
\end{aligned} \tag{57}$$

### Standard - Chemostat mit Contois - Kinetik

Die beiden, für die Untersuchung der stationären Zustände bei einem Chemostaten mit Contois-Kinetik relevanten Gleichungen sind unter Verwendung von Gleichung (43) und (45) und der Contois - Kinetik [Tab. (1)] für die Wachstumsrate  $\mu$  folgender Massen definiert:

$$\frac{dX}{dt} = \mu_{max} \frac{S}{XK_{S,c} + S} X - DX \tag{58}$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y} \mu_{max} \frac{S}{XK_{S,c} + S} X + D(S_0 - S) \tag{59}$$

Im Folgenden werden nun die stationären Zustände der Konzentration der Systemvariablen im Chemostaten abgeleitet:  
ad. Gl. (58):

$$\begin{aligned}
\frac{dX}{dt} &= \mu_{max} \frac{S}{XK_{S,c} + S} X - DX = 0 \\
\Rightarrow \quad \mu_{max} \bar{S} \bar{X} - D\bar{X}(\bar{X}K_{S,c} - \bar{S}) &= 0 \\
\text{für } \bar{X} \neq 0 \text{ folgt weiter:} \\
DK_{S,c}\bar{X} - (\mu_{max}\bar{S} - \bar{S}D) &= 0 \\
\bar{X} &= \frac{(\mu_{max}\bar{S} - \bar{S}D)}{DK_{S,c}} \tag{60}
\end{aligned}$$

Aus Gleichung (59) und der oben hergeleiteten Beziehung zwischen  $\bar{X}$  und  $\bar{S}$  [Gl. (60)] eingesetzt für  $\bar{X}$  folgt:

$$\begin{aligned}\frac{dS}{dt} &= -\frac{1}{Y}\mu_{max} \frac{\bar{S}}{\frac{\mu_{max}\bar{S}-\bar{S}D}{DK_{S,c}}} \frac{\mu_{max}\bar{S}-\bar{S}D}{DK_{S,c}} + D(S_0 - S) = 0 \\ \Rightarrow \quad &\frac{1}{Y}\mu_{max} \frac{\bar{S}(\mu_{max}\bar{S}-\bar{S}D)}{\mu_{max}\bar{S}K_{S,c}} - D(S_0 - \bar{S}) = 0\end{aligned}$$

für  $\bar{S} \neq 0$  folgt weiters:

$$\begin{aligned}\bar{S} \left[ \frac{1}{Y}\mu_{max}(\mu_{max} - D) + D\mu_{max}K_{S,c} \right] &= DS_0\mu_{max}K_{S,c} \\ \bar{S} &= \frac{YDS_0K_{S,c}}{\mu_{max} - D + DK_{S,c}Y}\end{aligned}\quad (61)$$

Aus der Beziehung in Gleichung (60) und Gleichung (61) für  $\bar{S}$  folgt für den stationären Zustand der Bakterienkonzentration  $\bar{X}$ :

$$\begin{aligned}\bar{X} &= \frac{(\mu_{max} - D)\bar{S}}{DK_{S,c}} \\ \bar{X} &= \frac{(\mu_{max} - D)}{DK_{S,c}} \frac{YDS_0K_{S,c}}{\mu_{max} - D + DK_{S,c}Y} \\ \bar{X} &= \frac{(\mu_{max} - D)YS_0}{\mu_{max} - D + DK_{S,c}Y}\end{aligned}\quad (62)$$

In untenstehender Box (63) sind nochmals die stationären Konzentrationen der Bakterien ( $X$ ), des Substrates ( $S$ ) und der Stoffwechselprodukte ( $P$ ) für einen Chemostaten mit Contois - Kinetik dargestellt.

$$\begin{aligned}\bar{X} &= \frac{(\mu_{max} - D)YS_0}{\mu_{max} - D + DK_{S,c}Y} \\ \bar{S} &= \frac{YDS_0K_{S,c}}{\mu_{max} - D + DK_{S,c}Y} \\ \bar{P} &= \frac{S_0(1 - Y)(\mu_{max} - D)}{\mu_{max} - D + DK_{S,c}Y}\end{aligned}$$

(63)

## Parameteranpassung bei Standard - Chemostaten mit Monod - / Contois - Kinetik

In den beiden vorausgegangenen Ableitungen wurden die stationären Zustände für ein Chemostaten-Modell sowohl mit Monod- als auch mit Contois- Kinetik beschrieben. Bei einem genaueren Vergleich der Gleichungen in den beiden Ergebnistafeln [Gl. (57) und (63)] erkennt man, dass die mathematische Beschreibung der stationären Werte für den Chemostaten mit Monod- und Contois- Kinetik unterschiedliche Formen besitzt.

Für den Fall dass die Bakterienkonzentration  $X$  im Chemostaten größer als 1 ist, streben die Konzentrationen im Falle der Contois- Kinetik langsamer gegen den Sättigungswert als bei der Monod- Kinetik. Das resultiert daraus, dass die Halbwertskonstante bei der Contois- Kinetik mit  $XK_S$  größer ist als bei der Monod- Kinetik mit  $K_S$ . Das gilt, wie bereits gesagt, nur für  $X > 1$ , was jedoch in der Regel der Fall ist. Die Wachstumsrate der Bakterien sind in diesem Fall bei einem Chemostaten- Modell mit Contois- Kinetik kleiner als bei einem Modell mit Monod- Kinetik. In den nachfolgenden Abschnitten werden einige Simulationsexperimente beschrieben, bei denen der Unterschied deutlich zu erkennen ist.

Betrachtet man dieses Ergebnis jedoch von der Perspektive der Modellbildung, dann ist es nicht befriedigend. Das rührt daher, dass in der Regel ein realer Prozess der in einem Chemostaten abläuft, modelliert werden soll. Dabei werden an dem Chemostaten Messungen durchgeführt, wodurch die kinetischen - und die biologischen Parameter bestimmt werden. An Hand von Experimenten können auch die stationären Konzentrationen bei unterschiedlichen Randbedingungen und Parametersettings ermittelt werden. Erst nach einer Vielzahl von Messwerten und nachfolgenden Analysen zur Identifikation wird dann ein Modellansatz gewählt, der die Realität abbilden soll.

Es ist daher Forderung an jede mögliche gewählte Kinetik, dass sie die gemessenen realen Daten in der Simulation nachbilden kann. Das bedeutet im Hinblick auf den festgestellten analytischen Unterschied bei den stationären Zuständen bei der Monod- und der Contois- Kinetik, dass es sich um unterschiedliche Halbwertskonstanten  $K_S$  handeln muss. Sie wurden bereits bei der Ableitung unterschieden. Die Bezeichnung lautet dabei  $K_{S,m}$  für die Halbwertskonstante der Monod- und  $K_{S,c}$  für der Contois- Kinetik.

An dieser Stelle wird nun also eine Beziehung zwischen den beiden unterschiedlichen Halbwertskonstanten gesucht, so dass die resultierenden stationären Zustände des Chemostaten für beide Kinetiken gleich sind. Da die stationären Zustände beider Kinetiken nicht von den im System vorliegenden Konzentrationen  $X$  und  $S$  abhängen, sind die stationären Zustände

also unabhängig von den aktuellen Bedingungen im Chemostaten. Lediglich die äußere Betriebsweise, im Speziellen der Zufluss an Substrat und die Verdünnungsrate, haben neben biologischen Parametern Auswirkungen auf den stationären Zustand des Chemostaten.

Auf Grund dieser Tatsache kann also eine Beziehung zwischen den beiden Halbwertskonstanten der Kinetiken angegeben werden, die nur von den äußeren Betriebsbedingungen, nicht jedoch von den Bedingungen im Chemostaten abhängt.

Diese Beziehung ermöglicht eine Umrechnung der Parameter, auf den jeweils entsprechenden Parameter der anderen Kinetik. Das bedeutet in der Praxis, dass wenn ein Modellansatz mit Monod- Kinetik gewählt wurde und die entsprechenden Parameter bestimmt wurden, dann kann im Nachhinein der Parameter auf einen Modellansatz mit Contois- Kinetik umgerechnet werden. Das erspart eine nochmalige Parameterbestimmung mittels Messung und anschließender Identifizierung.

Wird nun also der stationäre Wert für die Substrat- und die Bakterienkonzentration der Monod- und der Contois- Kinetik gleich gesetzt, so resultiert daraus die gesuchte Beziehung:

1. Fall:  $\bar{S}_{Monod} = \bar{S}_{Contois}$

$$\begin{aligned} -\frac{DK_{S,m}}{\mu_{max} - D} &= \frac{YDS_0K_{S,c}}{D - \mu_{max} + DK_{S,c}Y} \\ \Rightarrow K_{S,c} &= \frac{K_{S,m}(\mu_{max} - D)}{Y[DK_{S,m} - S_0(\mu_{max} - D)]} \quad (64) \end{aligned}$$

2. Fall:  $\bar{X}_{Monod} = \bar{X}_{Contois}$

$$\begin{aligned} Y \left( \frac{\mu_{max}S_0 - D(S_0 + K_{S,m})}{\mu_{max} - D} \right) &= \frac{(\mu_{max} - D)YS_0}{D - \mu_{max} + DK_{S,c}Y} \\ \Rightarrow K_{S,c} &= \frac{K_{S,m}(\mu_{max} - D)}{Y[DK_{S,m} - S_0(\mu_{max} - D)]} \quad (65) \end{aligned}$$

Erwartungsgemäß liefern beide Fälle die gleiche Beziehung zwischen den Halbwertskonstanten beider Kinetiken. Es ist dadurch eine leichte Transformation zwischen den Kinetiken möglich und macht damit eine neuerliche Identifizierung der Parameter der neuen Kinetik aus den experimentellen Daten überflüssig.

In der Simulation ermöglicht dieses Ergebnis einen Vergleich dynamischer Simulationen mit unterschiedlichen Kinetiken. Die Grenzen der Kinetik bezogen auf eine spezielle Betriebsart des Chemostaten kann somit leichter aufgezeigt werden, da die Simulationsergebnisse somit vergleichbar sind.

Es ist jedoch zu beachten, dass dabei die Anpassung der stationären Zustände für eine spezielle Durchflussrate  $D$  durchgeführt wurde. Wird der Chemostat mit unterschiedlichen oder sich ständig ändernden Verdünnungsraten betrieben, dann kann also während des Simulationslaufs keine Anpassung der Halbwertskonstanten der Monod- und Contois- Kinetik des Standard-Chemostaten erfolgen, da im gewählten Modellansatz die Halbwertskonstante der jeweiligen Kinetik über das gesamte Simulationsexperiment als konstant angenommen wird. Daraus resultieren unterschiedliche stationäre Zustände bei einer Änderung der Verdünnungsrate [siehe Abschnitt (5)].

#### 4.6 Das mathematische Modell des MBR - Chemostaten

In diesem Abschnitt wird die bisher angeführte Theorie des Chemostaten auf einen anderen Typ angewandt. Es handelt sich hierbei nicht mehr um einen herkömmlichen Chemostaten, sondern um einen speziellen Reaktortyp, der in jüngster Zeit im Bereich biologischer Abwasserreinigung auf Interesse stößt. Die Grundlagen dieses Reaktortyps, des Membran - Bio - Reaktors (MBR) und sein spezielles Verfahren zur Abwasserreinigung, sind im Teil der biologischen Grundlagen dieser Arbeit ausführlich erläutert.

An dieser Stelle soll das Grundprinzip dieses Reaktortyps durch Anwendung auf einfache Chemostatenmodelle untersucht werden. Dabei sollen speziell die Vor- und Nachteile der Modellierung eines MBR-Chemostaten mit unterschiedlichen Kinetiken erarbeitet werden.

Im realen MBR - Verfahren wird eine spezielle Membran verwendet, die die Bakterien im Becken zurückhält. Die Substrate und Stoffwechselprodukte können ungehindert diese Membran passieren. Dadurch kommt es zu einer Anreicherung von Bakterien im Becken und somit entsteht eine Konkurrenzsituation für die Bakterien. Dies bewirkt biologisch einen Abbau von Substanzen, die nur durch einen höheren Energieaufwand, also mit einer geringeren Energiebilanz abgebaut werden können. Daher ist das Verfahren speziell zum Abbau von schwer-abbaubaren Substanzen geeignet.

In dem an dieser Stelle verwendeten MBR-Chemostatenmodell drückt sich die Eigenschaft der Membran durch einen fehlenden Abfluss der Bakterien aus. Um nicht eine unendlich große Bakterienkultur im Chemostaten zu erhalten, wurde eine Sterberate  $b$  der Bakterien eingeführt. Einige Hinweise auf die verwendete Sterberate  $b$  sind im Anschluss an die Ableitung in Abschnitt (4.7) dargestellt. Die Sterberate  $b$  ist im Allgemeinen wesentlich kleiner als die Verdünnungsrate und somit resultiert die erwartete, erhöhte Bakterienkonzentration im Kulturbecken.

Die Differentialgleichungen für die Bakterien-, die Substrat- und die Produktkonzentration sind auf die gleiche Weise wie beim Standard-Chemostaten hergeleitet.

$$\begin{aligned}\frac{dX}{dt} &= \mu X - b(X - X_0) \\ \frac{dS}{dt} &= -\frac{1}{Y}\mu X + D(S_0 - S) \\ \frac{dP}{dt} &= \left(\frac{1}{Y} - 1\right)\mu X - DP\end{aligned}$$



Der wesentlichste Unterschied bei diesem Chemostaten ist die Tatsache, dass die Bakterien im Kulturgefäß zurückgehalten werden. Dadurch entsteht eine Kummulation von Biomasse nach dem Einschaltvorgang. Dies führt dazu, dass die Massenbilanz nicht im Allgemeinen zu jedem Zeitpunkt erfüllt ist. Nach dem Einschalten reichert sich eine Bakterienkultur in hoher Konzentration im Chemostaten an. Die Masse der Bakterien kommt aus dem, über die Zeit aufkummuliertem Substratzustrom von Außen. Die Massenbilanz über die gesamte Betriebszeit integriert, muss natürlich auch in diesem Fall erfüllt sein.

Wenn der MBR-Chemostat stationäre Werte angenommen hat, ist die Massenbilanz erfüllt und errechnet sich zu:

$$\bar{X} + \bar{S} + \bar{P} = \text{const.} \quad (66)$$

#### 4.7 Das dynamische Gleichgewicht im MBR-Chemostaten

Die stationären Zustände der Konzentrationen im Chemostaten werden im Folgenden analytisch abgeleitet. Dies erfolgt in ähnlicher Weise wie im vorangehenden Kapitel, jedoch mit einer speziell an die MBR-Verfahrensbesonderheiten angepasste Differentialgleichung für die Bakterienkonzentration (Gl. 67).

##### 4.7.1 Stationäre Konzentrationen bei MBR-Chemostaten mit Monod - / Contois - Kinetik

Um nun aus den bereits aus dem vorigen Abschnitt bekannten Gleichungen, die stationären Konzentrationen des Chemostaten zu berechnen, werden die Veränderungsraten der Konzentrationen gleich Null gesetzt. Der Zustand in dem die Konzentrationsänderungen beider betrachteter Systemgrößen Null ist, entspricht dem stationären Punkt. Die Konzentration, die beim Erreichen dieses Zustandes im System vorherrscht, ist dann stationär und verändert sich über die Zeit nicht mehr. Dies gilt selbstverständlich nur unter der Annahme, dass sich sonst keine Systemparameter, wie die Konzentration im Zufluss oder die Verdünnungsrate ändern.

#### MBR-Chemostat mit Monod-Kinetik

Die beiden, für die Untersuchung der stationären Zustände relevanten

Gleichungen sind unter Verwendung von Gleichung (43) und (45), der Monod-Kinetik [Gl. (34)] und unter Berücksichtigung der Adaptionen zur Beschreibung von Membran-Bio-Reaktoren, für die Wachstumsrate  $\mu$  folgender Massen definiert:

$$\frac{dX}{dt} = \mu_{max} \frac{S}{K_{S,m} + S} X - bX \quad (67)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y} \mu_{max} \frac{S}{K_{S,m} + S} X + D(S_0 - S) \quad (68)$$

$$\frac{dP}{dt} = \left(\frac{1}{Y} - 1\right) \mu_{max} \frac{S}{K_{S,m} + S} X - DP \quad (69)$$

Im Folgenden werden nun die stationären Zustände der Konzentration der Systemvariablen im Chemostaten abgeleitet:

ad. Gl. (67):

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} = \mu_{max} \frac{S}{K_{S,m} + S} X - bX &= 0 \\ \Rightarrow \quad \bar{X} \left( \mu_{max} \frac{\bar{S}}{K_{S,m} + \bar{S}} - b \right) &= 0 \end{aligned} \quad (70)$$

für  $\bar{X} \neq 0$  folgt weiter:

$$\begin{aligned} \mu_{max} \frac{\bar{S}}{K_{S,m} + \bar{S}} - b &= 0 \\ \bar{S}(\mu_{max} - b) - bK_{S,m} &= 0 \\ \bar{S} &= \frac{bK_{S,m}}{\mu_{max} - b} \end{aligned} \quad (71)$$

Die hier berechnete stationäre Konzentration des Substrates  $\bar{S}$  für ein MBR-Chemostatenmodell mit Monod-Kinetik hängt also nur vom verfahrenstechnischen Parameter  $D$ , der Verdünnungsrate und von den biologischen Konstanten  $\mu_{max}$  und  $K_S$  ab. Der Parameter  $\mu_{max}$  stellt dabei die maximale Wachstumsrate der Bakterien dar und  $K_S$  ist die Halbwertskonstante der Monod-Kinetik.

Äquivalent zu dieser Ableitung folgt für die stationäre Konzentration der Bakterien:  
ad. Gl. (68):

$$\begin{aligned}\frac{dS}{dt} &= -\frac{1}{Y} \underbrace{\mu_{max} \frac{S}{K_{S,m} + S}}_{\text{aus (53): } b \bar{X}} X + D(S_0 - S) = 0 \\ \Rightarrow \quad & -\frac{1}{Y} b \bar{X} + DS_0 - D\bar{S} = 0 \\ \text{mit Gl.(71) für } \bar{S} \text{ folgt weiters:} \\ & -b\bar{X} + YDS_0 - D\frac{YbK_{S,m}}{\mu_{max} - b} = 0 \\ & \bar{X} = \frac{YDS_0}{b} - \frac{DK_{S,m}Y}{\mu_{max} - b} \\ \bar{X} &= \frac{DY(S_0(\mu_{max} - b) - K_{S,m}b)}{b(\mu_{max} - b)} \quad (72)\end{aligned}$$

Die stationäre Konzentration der Bakterien  $\bar{B}$  für ein Chemostatenmodell mit Monod-Kinetik hängt ebenfalls vom verfahrenstechnischen Parameter  $D$  und von  $S_0$ , der Zulaufkonzentration von Substrat und von den biologischen Konstanten  $\mu_{max}$ ,  $K_S$ ,  $Y$  und  $b$  ab. Neben den oben erklärten Parametern  $\mu_{max}$  und  $K_S$  stellt  $Y$  den Ertragskoeffizienten beim Substratabbau dar. Er gibt an, welcher Prozentsatz des Substrats beim Abbau zu Bakterienmasse umgewandelt wird.

Für die Produktkonzentration [Gl. (69)] folgt damit:

$$\begin{aligned}\frac{dP}{dt} &= \left(\frac{1}{Y} - 1\right) \mu_{max} \frac{S}{K_{S,m} + S} \bar{X} - DP = 0 \\ \text{eingesetzt für } \bar{X} \text{ (Gl.(72)) folgt weiter:} \\ \bar{P} &= \frac{(Y - 1)[S_0(\mu_{max} - b) - bK_{S,m}]}{\mu_{max} - b} \quad (73)\end{aligned}$$

In untenstehender Box (74) sind nochmals die stationären Konzentrationen

der Bakterien ( $X$ ), des Substrates ( $S$ ) und der Stoffwechselprodukte ( $P$ ) für einen MBR-Chemostaten mit Monod-Kinetik dargestellt.

$$\begin{aligned}\bar{X} &= \frac{DY(S_0(\mu_{max} - b) - K_{S,m}b)}{b(\mu_{max} - b)} \\ \bar{S} &= \frac{bK_{S,m}}{\mu_{max} - b} \\ \bar{P} &= \frac{(Y - 1)[S_0(\mu_{max} - b) - bK_{S,m}]}{\mu_{max} - b}\end{aligned}\tag{74}$$

### MBR-Chemostat mit Contois-Kinetik

Die beiden, für die Untersuchung der stationären Zustände bei einem Chemostaten mit Contois-Kinetik relevanten Gleichungen sind unter Verwendung von Gleichung (43) und (45) und der Contois-Kinetik [Tab. (1)] für die Wachstumsrate  $\mu$  folgender Massen definiert:

$$\frac{dX}{dt} = \mu_{max} \frac{S}{XK_{S,c} + S} X - bX \tag{75}$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y} \mu_{max} \frac{S}{XK_{S,c} + S} X + D(S_0 - S) \tag{76}$$

$$\frac{dP}{dt} = \left(\frac{1}{Y} - 1\right) \mu_{max} \frac{S}{XK_{S,m} + S} X - DP \tag{77}$$

Im Folgenden werden nun die stationären Zustände der Konzentration der Systemvariablen im Chemostaten abgeleitet:

ad. Gl. (75):

$$\begin{aligned}
\frac{dX}{dt} &= \mu_{max} \frac{S}{X K_{S,c} + S} X - bX = 0 \\
\Rightarrow \quad \mu_{max} \bar{S} \bar{X} - b \bar{X} (\bar{X} K_{S,c} + \bar{S}) &= 0 \\
\text{für } \bar{X} \neq 0 \text{ folgt weiter:} \\
b K_{S,c} \bar{X} + (\mu_{max} \bar{S} - b \bar{S}) &= 0 \\
\bar{X} &= \frac{\bar{S}(\mu_{max} - b)}{b K_{S,c}} \quad (78)
\end{aligned}$$

Aus Gleichung (76) und der oben hergeleiteten Beziehung zwischen  $\bar{X}$  und  $\bar{S}$  [Gl. (78)] eingesetzt für  $\bar{X}$  folgt:

$$\begin{aligned}
\frac{dS}{dt} &= -\frac{1}{Y} \mu_{max} \frac{\bar{S}}{\frac{\bar{S}(\mu_{max}-b)}{b K_{S,c}} K_{S,c} + \bar{S}} \frac{\bar{S}(\mu_{max}-b)}{b K_{S,c}} + D(S_0 - S) = 0 \\
\text{für } \bar{S} \neq 0 \text{ folgt weiters:} \\
\Rightarrow \quad -\frac{1}{Y} \mu_{max} \frac{\bar{S}(\mu_{max}-b)}{\mu_{max} K_{S,c}} + D(S_0 - \bar{S}) &= 0 \\
\bar{S} [\mu_{max}(\mu_{max} - b) + \mu_{max} D Y K_{S,c}] &= \mu_{max} D Y S_0 K_{S,c} \\
\bar{S} &= \frac{D Y S_0 K_{S,c}}{\mu_{max} - b + D K_{S,c} Y} \quad (79)
\end{aligned}$$

Aus der Beziehung in Gleichung (78) und Gleichung (79) für  $\bar{S}$  folgt für den stationären Zustand der Bakterienkonzentration  $\bar{X}$ :

$$\begin{aligned}
\bar{X} &= \frac{\bar{S}(\mu_{max} - b)}{b K_{S,c}} \\
\bar{X} &= \frac{D Y S_0 K_{S,c}}{\mu_{max} - b + D K_{S,c} Y} \frac{(\mu_{max} - b)}{b K_{S,c}} \\
\bar{X} &= \frac{D Y S_0 (\mu_{max} - b)}{(\mu_{max} - b + D K_{S,c} Y) b} \quad (80)
\end{aligned}$$

Für die Produktkonzentration [Gl. (77)] folgt damit:

$$\frac{dP}{dt} = \left( \frac{1}{Y} - 1 \right) \mu_{max} \frac{S}{X K_{S,m} + S} \bar{X} - DP = 0$$

eingesetzt für  $\bar{X}$  (Gl.(80)) folgt weiter:

$$\bar{P} = \frac{S_0(\mu_{max} - b - \mu_{max}Y + Yb)}{\mu_{max} - b + DK_{S,c}Y} \quad (81)$$

In untenstehender Box (133) sind nochmals die stationären Konzentrationen der Bakterien ( $X$ ), des Substrates ( $S$ ) und der Stoffwechselprodukte ( $P$ ) für den MBR-Chemostaten mit Contois-Kinetik dargestellt.

$$\begin{aligned} \bar{X} &= \frac{DY S_0(\mu_{max} - b)}{(\mu_{max} - b + DK_{S,c}Y)b} \\ \bar{S} &= \frac{DY S_0 K_{S,c}}{\mu_{max} - b + DK_{S,c}Y} \\ \bar{P} &= \frac{S_0(\mu_{max} - b - \mu_{max}Y + Yb)}{\mu_{max} - b + DK_{S,c}Y} \end{aligned} \quad (82)$$

### Parameteranpassung bei MBR-Chemostat mit Monod- / Contois-Kinetik

Wie bereits im Abschnitt über die Parameteranpassung beim Chemostaten beschrieben, wird hier auch für den MBR-Chemostaten der Umrechnungsfaktor zwischen den Halbwertskonstanten der Monod- und der Contois-Kinetik angegeben.

Diese Beziehung ermöglicht eine Umrechnung der Parameter, auf den jeweils entsprechenden Parameter der anderen Kinetik. Das bedeutet in der Praxis, dass wenn ein Modellansatz mit Monod-Kinetik gewählt wurde und die entsprechenden Parameter bestimmt wurden, dann kann im Nachhinein der Parameter auf einen Modellansatz mit Contois-Kinetik umgerechnet werden.

Wird nun also der stationäre Wert für die Substrat- und die Bakterienkonzentration der Monod- und der Contois-Kinetik gleich gesetzt, so resultiert daraus die gesuchte Beziehung:

$$1. \text{ Fall: } \bar{S}_{Monod} = \bar{S}_{Contois}$$

$$\begin{aligned} \frac{bK_{S,m}}{\mu_{max} - b} &= \frac{DY S_0 K_{S,c}}{\mu_{max} - b + DK_{S,c}Y} \\ \Rightarrow K_{S,c} &= \frac{bK_{S,m}(\mu_{max} - b)}{DY[S_0(\mu_{max} - b) - bK_{S,m}]} \end{aligned} \quad (83)$$

$$2. \text{ Fall: } \bar{X}_{Monod} = \bar{X}_{Contois}$$

$$\begin{aligned} \frac{DY(S_0(\mu_{max} - b) - K_{S,m}b)}{b(\mu_{max} - b)} &= \frac{DY S_0(\mu_{max} - b)}{(b - \mu_{max} + DK_{S,c}Y)b} \\ \Rightarrow K_{S,c} &= \frac{bK_{S,m}(\mu_{max} - b)}{DY[S_0(\mu_{max} - b) - bK_{S,m}]} \end{aligned} \quad (84)$$

$$3. \text{ Fall: } \bar{P}_{Monod} = \bar{P}_{Contois}$$

$$\begin{aligned} \frac{(Y - 1)[S_0(\mu_{max} - b) - bK_{S,m}]}{\mu_{max} - b} &= \frac{S_0(\mu_{max} - b - \mu_{max}Y + Yb)}{\mu_{max} - b + DK_{S,c}Y} \\ \Rightarrow K_{S,c} &= \frac{bK_{S,m}(\mu_{max} - b)}{DY[S_0(\mu_{max} - b) - bK_{S,m}]} \end{aligned} \quad (85)$$

Wie auch bereits beim Standard-Chemostaten gezeigt, liefern alle drei Fälle die gleiche Beziehung zwischen den Halbwertskonstanten der Kinetiken. Es ist dadurch eine leichte Transformation zwischen den Kinetiken möglich und macht damit eine neuerliche Identifizierung der Parameter der neuen Kinetik aus den experimentellen Daten überflüssig.

In der Simulation ermöglicht dieses Ergebnis einen einfachen Vergleich dynamischer Simulationen mit unterschiedlichen Kinetiken. Die Grenzen der

Kinetik, bezogen auf eine spezielle Betriebsart des Chemostaten, können somit leicht aufgezeigt werden.

### **Bemerkung zur Sterberate der Bakterien**

Wie in der Einleitung zum MBR - Chemostaten bereits kurz erwähnt, wurde bei der Erweiterung des Chemostatenmodells angenommen, dass keine Bakterien ausgeschwemmt werden können, da sie von einer speziellen Membran zurückgehalten werden. In der Realität würde die Bakterienkonzentration dennoch nicht ins Unendliche ansteigen, da es eine natürliche Sterberate der Bakterien gibt. Diese Sterberate  $b$  wurde ins Modell des MBR-Chemostaten aufgenommen. Die Sterberate  $b$  ist klein gegenüber der Verdünnungsrate  $D$ , so dass sie beim normalen Chemostatenmodell vernachlässigt wurde. Es wäre auch denkbar, dass die Sterberate beim herkömmlichen Chemostatenmodell als implizit in der Verdünnungsrate enthalten, angesehen wird. Da in diesem Fall jedoch hauptsächlich die Existenz und die theoretische Untersuchung der stationären Zustände von Interesse war, spielte die Sterberate eine untergeordnete Rolle.

Beim Chemostaten ist in der Regel eine möglichst hohe Wachstumsrate der Bakterien erwünscht, da damit eine hohe Abbauleistung einhergeht. Das kann nur durch eine hohe Verdünnungsrate  $D$  erreicht werden. Dies erklärt die Größenverhältnisse zwischen der Sterberate und der Verdünnungsrate ( $b \ll D$ ) und erlaubt daher die Vernachlässigung der Sterberate im Fall des herkömmlichen Chemostaten.

Im Falle der Erweiterung des Chemostatenmodells auf MBR-Chemostaten ist die Sterberate der Bakterien zur Begrenzung der Bakterienkonzentration notwendig.

In der Erweiterung im Rahmen des Kernmodells sind die Sterberaten explizit im Gesamtmodell berücksichtigt.



#### 4.8 Weitere mathematische Analysen am Standard-Chemostaten

An dieser Stelle sollen nun die in den vorigen Abschnitten abgeleiteten Ergebnisse der stationären Zustände näher untersucht werden. Die dazu notwendigen Überlegungen werden hier speziell für den Standard-Chemostaten mit einem Monod-Kinetik-Ansatz ausgeführt. Eine eigene Betrachtung für unterschiedliche Kinetiken oder für den Spezialfall eines MBR-Chemostaten kann ohne Einschränkung der Aussagekraft der Ergebnisse aus folgenden Gründen an dieser Stelle entfallen:

- Die stationären Zustände bei der Verwendung der Monod- oder Contois-Kinetik müssen im Falle einer realen Anwendung durch eine geeignete Bestimmung der Parameter angeglichen werden. Dies ist notwendig, damit das Modell des Chemostaten, die real auftretenden Bedingungen mathematisch korrekt beschreibt. Dies erfolgt durch die Bestimmung der Halbwertskonstanten  $K_m$  (für die Monod-Kinetik) und  $K_c$  (für die Contois-Kinetik) im Hinblick auf gleiche stationäre Konzentrationen. Die nun resultierende stationären Werte, die sich auch bei der dynamischen Simulation des Modells einstellen, sind gleich, unabhängig ob ein Modell mit einer Monod- oder Contois-Kinetik verwendet wird.
- Die im Falle des Standard-Chemostaten relevanten Fragen, wie nach der optimalen Durchflussrate um eine möglichst hohe Bakterienkonzentration im Ablauf zu erhalten, ist für den MBR-Chemostaten in dieser Form nicht sinnvoll. Der Standard-Chemostat wird in der Biotechnologie zur Produktion von unterschiedlichen biologischen Substanzen und von Biomasse verwendet. Die hier durchgeführte Untersuchung definiert nun den Wirkungsgrad mittels der erwünschten Eigenschaft der Biomassenproduktion. Dabei wird die Menge an Biomasse betrachtet, die durch den Ablauf aus dem System ausgeschwemmt wird. Im Falle des MBR-Chemostaten wird jedoch keine Biomasse ausgeschwemmt, da sie durch die Membran zurückgehalten wird. Die verwendete Definition des Wirkungsgrades ist daher in diesem Fall nicht sinnvoll und muss für den MBR-Chemostaten eigens definiert werden. MBR-Chemostaten werden in speziellen Bereichen verwendet und haben meist die Aufgabe, spezielle schwer abbaubare Substanzen aufzuspalten und abzubauen. Der Wirkungsgrad muss daher beim MBR-Chemostaten für jeden speziellen Fall, bezogen auf das erwünschte Abbauverhalten, stoffgruppenspezifisch definiert werden.

Im Folgenden werden zwei Fragestellungen untersucht:

### Abhängigkeit der stationären Konzentrationen von der Verdünnungsrate

Bei der mathematischen Beschreibung des Chemostaten in den vorangegangenen Abschnitten sind die Ergebnisse der stationären Konzentrationen der Bakterien und des Substrats immer von der Verdünnungsrate  $D$  abhängig. Die Verdünnungsrate ist in diesem Modell eine exogene Größe, sie muss also von Außen vorgegeben werden. Das wirft die Frage auf, ob die Einstellung der Verdünnungsrate nach bestimmten Gesichtspunkten erfolgen sollte.

Die stationären Konzentrationen des Standard-Chemostaten mit Monod-Kinetik sind an dieser Stelle nochmals angeschrieben. Ihre Ableitung erfolgte in Abschnitt (4.5.1).

$$\bar{X} = Y \left( \frac{\mu_{max} S_0 - D(S_0 + K_{S,m})}{\mu_{max} - D} \right) \quad (86)$$

$$\bar{S} = \frac{DK_{S,m}}{\mu_{max} - D} \quad (87)$$

Betrachtet man nun die Gleichung für den stationären Zustand des Substrates, so erkennt man, dass der stationäre Wert für  $D=0$  Null ist. Der Abbau der Substrate erfolgt in diesem Fall scheinbar optimal, in dem Sinn, dass das Substrat vollständig verbraucht wird. Es handelt sich dabei jedoch nicht um eine kontinuierliche Betriebsart, und somit liegt für die Substratkonzentration kein dynamisch-stationärer Zustand vor. Diese Betriebsart, auch Batch-Betrieb genannt, ist daher für die kontinuierliche Biomassenproduktion in der Biotechnologie sowie für eine kontinuierliche Abbauleistung eines Abwasserreinigungsbeckens nicht geeignet. Diese Überlegung definiert die untere Grenze der Verdünnungsrate.

Analog dazu folgt die obere Grenze aus der Gleichung für den stationären Zustand der Bakterienkonzentration. Der Fall, dass die Bakterienkonzentration Null wird, bedeutet eine Auswaschung der Bakterien aus dem Becken auf Grund einer zu hohen Durchflussrate (Verdünnungsrate). Die Lösung der Gleichung  $\bar{X} = 0$  für die Variable  $D$  ergibt genau die kritische Verdünnungsrate, bei der alle Bakterien aus dem Becken ausgeschwemmt werden. In der praktischen Anwendung des Chemostaten muss die exogene einstellbare Verdünnungsrate also unterhalb dieses Grenzwertes gewählt werden. Die Berechnung des Grenzwertes ist in folgenden Gleichungen dargestellt:

$$\begin{aligned}\bar{X} &= Y \left( \frac{\mu_{max} S_0 - D(S_0 + K_{S,m})}{\mu_{max} - D} \right) = 0 \\ \Rightarrow D_{krit} &= \frac{S_0 \mu_{max}}{S_0 + K_{S,m}}\end{aligned}\quad (88)$$

In Abbildung (26) sind die stationären Konzentrationen der Bakterien ( $\bar{X}$ ) und des Substrates ( $\bar{S}$ ) in Abhängigkeit von der Verdünnungsrate  $D$  dargestellt. Dabei wurden folgende Standardkonstanten (aus IAWQ-Publikationen; siehe auch [Henze et al.(1986)]) verwendet:

Parameter	Wert	Einheit	Beschreibung
$S_0$	96	$g\ COD\ m^{-3}$	Zulaufkonzentration von Substrat
$K_{S,m}$	20	$g\ COD\ m^{-3}$	Halbwertskonstante der Monod-Kinetik
$\mu_{max}$	6	$day^{-1}$	max. Wachstumsrate (von Heterotrophen)
$Y$	0.67	$(g\ COD)^{-1}$	Ertragskoeffizient (engl.: yield)

Tabelle 2: Parameter für heterotrophe Bakterien; entnommen aus [Henze et al.(1986)]

Aus Gleichung (88) folgt also für die kritische Durchflussrate:

$$D_{krit} = \frac{S_0 \mu_{max}}{S_0 + K_{S,m}} = \frac{96 \cdot 6}{96 + 20} = 4.96552 \quad (89)$$

Bei dieser Durchflussrate werden sämtliche Bakterien aus dem Becken ausgeschwemmt. Das bedeutet, dass der Chemostat keinen Abbau des Substrates leistet. Die Substratkonzentration im Zufluss wird nicht vermindert und wird wieder aus dem Chemostaten ausgeschwemmt. Kleine Bakterienkonzentrationen im Zufluss oder im Kulturbecken können sich nicht vermehren, da sie zu schnell ausgeschwemmt werden. Daher stellt sich bei der kritischen Verdünnungsrate zwar ein stationärer Zustand ein, jedoch erfüllt der Chemostat dabei nicht seine Funktion. Der sinnvolle Betriebsbereich für die Verdünnungsrate liegt also im Bereich  $0 < D < D_{krit}$ .

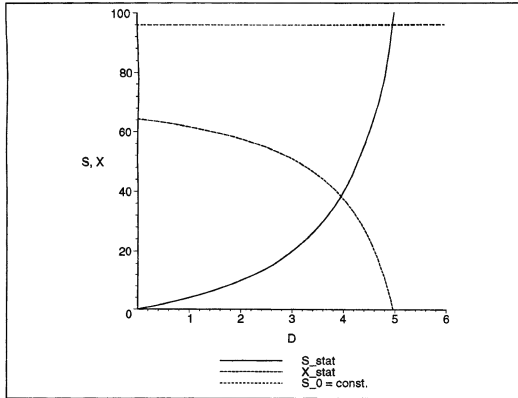


Abbildung 26: Abhängigkeit der stationären Konzentrationen  $\bar{X}$  und  $\bar{S}$  von der Verdünnungsrate  $D$

### Produktivität als Maximierung der Biomassenproduktion

Soll die Frage nach der Produktivität eines Chemostaten beantwortet werden, so bietet im Anwendungsgebiet der Biotechnologie folgendes Maß eine hinreichend gute Bedingung für die Produktivität eines Chemostaten:

$$\omega = \frac{\Delta m}{V} \quad (90)$$

Dabei wird die Produktivität durch die pro Zeit- und Volumeneinheit gewinnbarer Biomasse definiert. Da das Maß für die Biomassengewinnung über die Wachstumsrate mit dem Substratabbau zusammenhängt, ist die so definierte Produktivität auch im Bereich der Abwasserreinigung verwendbar. In der biologischen Abwasserreinigung ist der Substratabbau das gewünschte Maß, das im Betrieb optimiert werden soll. Unter der Annahme, dass je größer das Bakterienwachstum (also auch die Biomassenproduktion), desto größer auch der Substratabbau ist, bedeutet also eine maximale Biomassenproduktion einen optimalen Substratabbau.

Unter Verwendung der bereits eingeführten Gleichung ( $\Delta m = \mu X V$ ) [Gl. (30)] und der Gleichung ( $dX/dt = \mu X - DX$ ) [Gl. (43)] unter der Voraussetzung des stationären Zustandes ( $dX/dt = 0$ ), folgt also für die Produktivität:

$$\omega = \frac{\Delta m}{V} = \mu_{max} \bar{X} = D \bar{X} \quad (91)$$

Für den hier beschriebenen Fall eines Standard-Chemostaten mit Monod-Kinetik und der stationären Bakterienkonzentration gegeben in Gleichung (86) folgt für die Produktivität:

$$\omega = D \bar{X} = D Y \left( \frac{\mu_{max} S_0 - D(S_0 + K_{S,m})}{\mu_{max} - D} \right) \quad (92)$$

Zur Bestimmung der maximalen Produktivität muss die Ableitung dieser Funktion Null gesetzt werden.

$$\frac{d\omega}{dD} = \frac{Y(-S_0\mu_{max}^2 + 2S_0D\mu_{max} - D^2S_0 + 2DK_{S,m}\mu_{max} - D^2K_{S,m})}{(\mu_{max} - D)^2} = 0 \quad (93)$$

Die Lösung dieser Gleichung nach  $D$  ergibt 2 Lösungen:

$$D_{1,2} = \frac{\mu_{max}(S_0 + K_{S,m} \pm \sqrt{S_0K_{S,m} + K_{S,m}^2})}{S_0 + K_{S,m}} \quad (94)$$

Wertet man die beiden Ergebnisse für die in Tabelle (2) gegebenen Parameter aus, so erhält man:  $D_1 = 8.49$  und  $D_2 = 3.51$

Da die Lösung  $D_1$  über der kritischen Durchflussrate liegt, kommt nur  $D_2$  als praktisch verwendbare Lösung in Frage.

Die Lösung ist in Abbildung (27) grafisch verdeutlicht.

Wie in der grafischen Darstellung der Produktivität und der Ableitung der Produktivität ( $d\omega/dD$ ) ersichtlich ist, handelt es sich bei dem errechneten Extremwert um das gesuchte Maximum ( $d^2\omega/dD^2 < 0$ ).

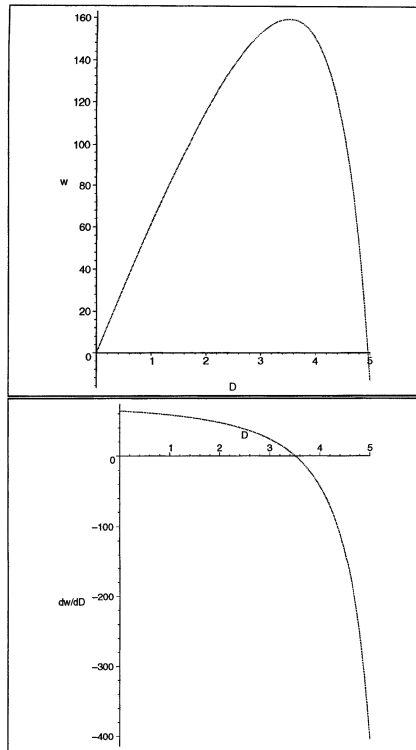


Abbildung 27: Produktivität des Chemostaten und deren Ableitung dargestellt in Abhängigkeit von der Verdünnungsrate  $D$

## 5 Dynamische Simulation von Chemostaten mit unterschiedlicher Enzym - Kinetik

### 5.1 Simulationsstudie eines Standard - Chemostaten

Die in den vorangegangenen Abschnitten hergeleiteten Differentialgleichungen für den Standard- und den MBR- Chemostaten werden hier auf ihre Dynamik hin untersucht. Dabei standen folgende Fragen im Mittelpunkt des Interesses:

- Stationären Werte und Dynamik nach dem Einschaltvorgang
- Dynamik nach dem Einschaltvorgang bei Variation der Anfangskonzentration  $X_0$
- Stationäre Werte und Dynamik der Sprungantwort bei Variation der Durchflussrate
- Dynamik der Sprungantwort (auf eine Änderung der Durchflussrate) bei Variation der Anfangskonzentration

Im Folgenden wurden nun 2 Simulationsexperimente durchgeführt, wobei das Erste die stationären Werte und die Dynamik nach dem Einschalten bei unterschiedlicher Anfangskonzentration der Bakterien, und das Zweite die Dynamik der Sprungantwort auf eine Änderung der Durchflussrate bei Variation der Bakterienkonzentration untersucht. Die Ergebnisse sind jeweils für den Standard- und für den MBR-Chemostaten graphisch dargestellt. Für sämtliche Experimente wurden die in Tabelle (2) dargestellten Parameter verwendet.

Definition der Experimente:

- Experiment 1: Dynamik und stationäre Zustände nach einem Einschaltvorgang mit unterschiedlichen Anfangskonzentrationen der Bakterien  $B_0$
- Experiment 2: Dynamik der Sprungantwort auf eine Änderung der Durchflussrate bei Variation der Anfangskonzentrationen der Bakterien  $B_0$

### 5.1.1 Experiment 1 mit einem Standard-Chemostaten

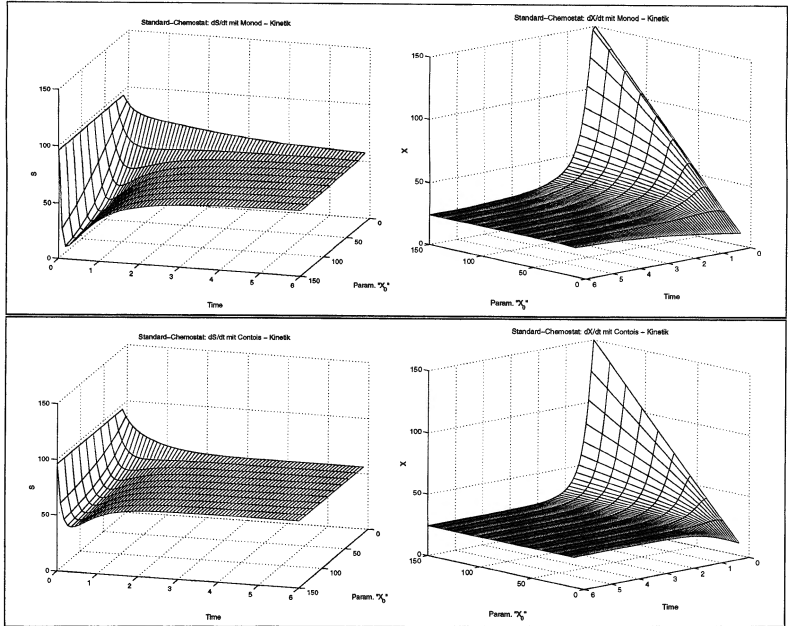


Abbildung 28: Stationären Zustände des Standard-Chemostaten mit Monod- / Contois- Kinetik bei Variation der Anfangskonzentration der Bakterien ( $B_0$ ); mit  $D = 3.5$  und  $B_0 = 10..150$ .

Wie in Abb. (28) leicht zu erkennen ist, strebt die Dynamik des Systems immer gegen den stationären Zustand, unabhängig von der Anfangskonzentration der Bakterien  $B_0$ . Das Einbringen von Bakterien, in der Abwassertechnik "beimpfen" genannt, ist also nur soweit sinnvoll, als dass einer speziellen Bakterienkultur die Chance auf Wachstum und Ausbildung ihrer Spezies geboten wird. Die Konzentration der eingebrachten Bakterien spielt dabei jedoch keine Rolle. Es kann also nicht längerfristig, durch externes Beimpfen, die Performance des Chemostaten oder des Belebtschlammverfahrens erhöht werden. Eine eventuelle Erhöhung der Bakterienkonzentration wirkt nur kurzfristig, da das System nach kurzer Zeit seine gleichgewichtigen Konzentrationen wieder erreicht. Diese stationären Konzentrationen



sind unabhängig vom Anfangszustand der Bakterienkonzentration. Es muss am Anfang lediglich eine kleine Menge an Bakterien im System vorhanden sein, da sonst kein Wachstum stattfinden kann. In der Praxis der biologischen Abwasserreinigung ist das jedoch immer der Fall, da selbst im Zulauf der Anlage Bakterien enthalten sind. Die unter den vorherrschenden Milieubedingungen lebensfähigen Bakterien beginnen also zu wachsen und bilden Bakterienkulturen aus. Der stationäre Wert der Konzentration dieser Kultur ist unabhängig von der Anfangskonzentration, sondern hängt nur von den Milieubedingungen ab. In diesem Experiment wurde eine Verdünnungsrate von  $D = 3.5$  gewählt und die Anfangskonzentration der Bakterien im Bereich  $B_0 = 10..150$  variiert.

### 5.1.2 Experiment 2 mit einem Standard-Chemostaten

Die Dynamik und die stationären Konzentrationen sind auch hier wie im Experiment 1 beschrieben. Anfänglich stellen sich stationäre Konzentrationen ein, die unabhängig von der Anfangskonzentration der Bakterien  $B_0$  sind. Nach der Verringerung der Verdünnungsrate von  $D = 4.5$  auf  $D = 3.5$  zum Zeitpunkt  $t = 3$  strebt das System gegen die neuen stationären Zustände. In Abbildung (29) ist die Systemdynamik für die beiden Konzentrationen mit unterschiedlicher Wachstumskinetik dargestellt. Bei einer Änderung der Verdünnungsrate auf den Wert mit der maximalen Effizienz [Abb. (27)], erhöht sich die stationäre Bakterienkonzentration, und die stationäre Substratkonzentration verringert sich. Dies entspricht den Ergebnissen der Ableitung im vorigen Abschnitt, da die Effizienz bezüglich einem maximalen Wachstum der Bakterien und einem maximalen Substratabbau bei diesem Betriebszustand maximal ist.

Es ist jedoch zu bemerken, dass die stationären Zustände des Modells mit Monod-Kinetik nach der Verringerung der Verdünnungsrate leicht unterschiedlich zu den stationären Zuständen des Modells mit Contois-Kinetik sind. Das rührt daher, dass die Parameteranpassung für einen bestimmten Durchflusswert erfolgt ist (also für  $D_0$ ) und in weiterer Folge konstant bleibt. Das bedeutet, dass nach der Verringerung der Verdünnungsrate keine optimale Anpassung mehr vorliegt. Dies stellt jedoch keine Einschränkung der Gültigkeit oder der Qualität der Ergebnisse dar, sondern zeigt nur, dass die verwendeten Parameter für  $K_{S,m}$  und  $K_{S,c}$  in der Praxis auf die verwendete durchschnittliche Verdünnungsrate angepasst werden müssen. Im Falle einer großen Bandbreite des Wertes der Verdünnungsrate, könnte eine Halbwertskonstante eingeführt werden, die die Abhängigkeit von der Verdünnungsrate  $D$  beschreibt. Mindestens eine Halbwertskonstante wäre dann eine Funktion von  $D$ , also  $K_{S,m}(D)$  oder  $K_{S,c}(D)$ . In diesem Fall wäre eine Anpassung

unabhängig von der Durchflussrate möglich. Diese Abhängigkeit kann biologisch dadurch begründet werden, dass bei einem plötzlichen Anstieg der Verdünnungsrate über den Zulauf kurzzeitig mehr Substrat im System zur Verfügung steht. Die Bakterien reagieren etwas verzögert auf das erhöhte Nährstoffangebot und erhöhen ihre Wachstumsrate. Die Wachstumsrate ist in den Modellen durch die Monod- oder die Contois-Kinetik beschrieben. Diese beiden Kinetiken beschreiben jedoch eine unterschiedliche Änderung der Wachstumsrate beim Übergang von der alten Verdünnungsrate zur Neuen [siehe Abb. (20)]. Diese Tatsache dient als Erklärung für den Unterschied der stationären Werte des Modells mit Monod-Kinetik versus des Modells mit Contois-Kinetik bei einer Änderung der Verdünnungsrate.

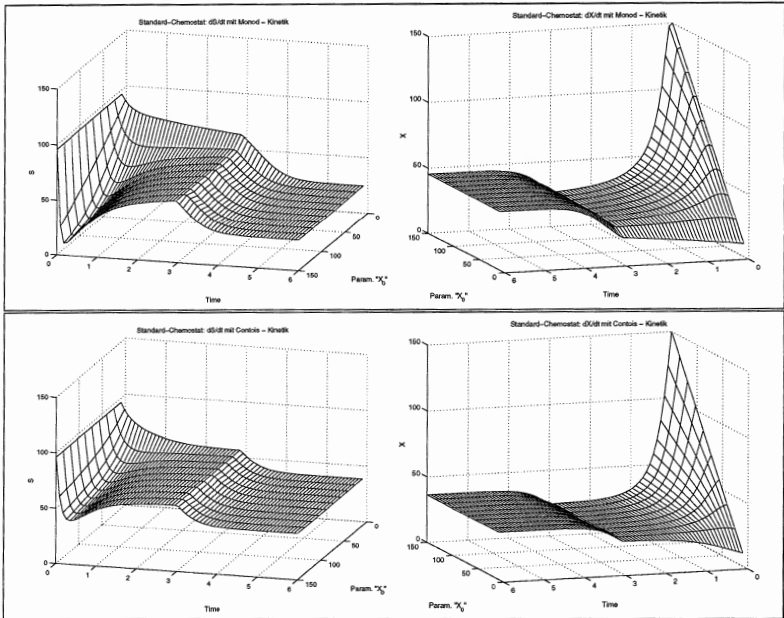


Abbildung 29: Stationäre Zustände des Standard-Chemostaten mit Monod- / Contois- Kinetik bei Variation der Anfangskonzentration der Bakterien ( $B_0 = 10..150$ ) und Änderung der Verdünnungsrate (Änderung von  $D_0 = 4.5$  auf  $D_1 = 3.5$  zum Zeitpunkt  $t = 3$ )

## 5.2 Simulationsstudie eines MBR - Chemostaten

Äquivalent zum Standard-Chemostaten werden nun die Ergebnisse der beiden Experimente für den MBR-Chemostaten dargestellt.

### 5.2.1 Experiment 1 mit einem MBR-Chemostaten

Wie in Abb. (30) leicht zu erkennen ist, strebt die Dynamik des Systems immer gegen den stationären Zustand, unabhängig von der Anfangskonzentration der Bakterien  $B_0$ . Hier ist zu sehen, dass der stationäre Wert für die Bakterien im Vergleich zum Standard-Chemostaten sehr hoch ist. Das bewirkt die Membran, die einen Abfluss der Bakterien verhindert. Die erhöhte Bakterienkonzentration bewirkt einen raschen Abfall der Substratkonzentration und auch ihren geringeren stationären Wert. Das ist in Hinblick auf eine effiziente Abwasserreinigung wünschenswert.

In diesem Fall ist der Unterschied zwischen der Monod- und der Contois-Kinetik kaum vorhanden. Das liegt an der Tatsache, dass auf Grund der schnellen Elimination eines Großteils des Substrates die stationäre Substratkonzentration sehr schnell vorliegt und sich die Substratkonzentration über die Zeit dann nicht mehr ändert. Wie in Abbildung (19) dargestellt, ist die Monod-Kinetik in diesen Fällen unabhängig von der Bakterienkonzentration gültig. Das liefert eine Erklärung für die Gleichheit der Dynamik in diesem Simulationsexperiment.

### 5.2.2 Experiment 2 mit einem MBR-Chemostaten

In Abbildung (31) ist die Systemdynamik für die beiden Konzentrationen mit unterschiedlicher Wachstumskinetik dargestellt. Bei einer Verringerung der Verdünnungsrate wird weniger Substrat durch den Zufluss ins System eingebracht und die Wachstumsrate sinkt. Das führt zu einem niedrigeren stationären Wert der Bakterienkonzentration. Die Bakterien werden auf Grund der Membran im System gehalten und können somit nicht abfließen. Eine Verringerung der Wachstumsrate führt jedoch zu einer geringeren Akkumulation von Bakterien über die Zeit.

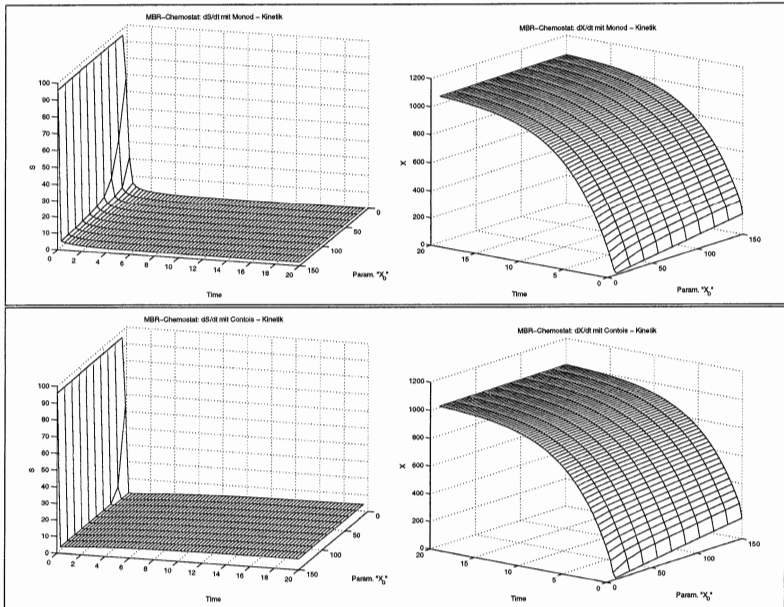


Abbildung 30: Stationäre Zustände des MBR-Chemostaten mit Monod- / Contois- Kinetik bei Variation der Anfangskonzentration der Bakterien ( $B_0$ ); mit  $D = 3.5$  und  $B_0 = 10..150$ .

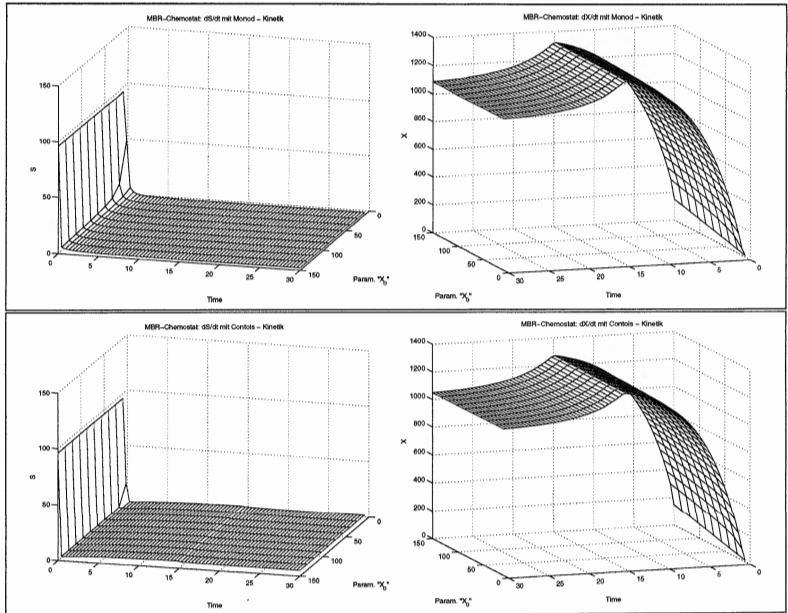


Abbildung 31: Stationäre Zustände des MBR-Chemostaten mit Monod- / Contois- Kinetik bei Variation der Anfangskonzentration der Bakterien ( $B_0 = 10..150$ ) und Änderung der Verdünnungsrate (Änderung von  $D_0 = 4.5$  auf  $D_1 = 3.5$  zum Zeitpunkt  $t = 15$ )

## 6 Parameter-Bestimmung

Die in den vorigen Abschnitten beschriebene Information wird nun verwendet, um Aussagen über Möglichkeiten zur Bestimmung der Parameter biologischer Abwasserreinigungsmodelle zu beschreiben.

Die Bestimmung der Parameter wird im Folgenden exemplarisch an Hand der im Abschnitt (4) angeführten Differentialgleichungen eines Standard-Chemostaten mit Monod-Kinetik dargestellt [Gl.(51) und (52)]. Dabei wird auch auf die Unterschiede zwischen Modellen mit Monod- und Contois-Kinetik eingegangen.

Das Differentialgleichungssystem des Standard-Chemostaten mit Monod-Kinetik ist also wie folgt definiert:

$$\frac{dX}{dt} = \mu_{max} \frac{S}{K_{S,m} + S} X - DX \quad (95)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y} \mu_{max} \frac{S}{K_{S,m} + S} X + D(S_0 - S) \quad (96)$$

In obigem Differentialgleichungssystem sind die Parameter der maximalen Wachstumsrate  $\mu_{max}$  und der Halbwertkonstante  $K_{S,m}$  unbestimmt. Sowohl die Anfangswerte für die Bakterien- und Substratkonzentration ( $X_0, S_0$ ) als auch die Durchflussrate  $D$  und der Ertragskoeffizient  $Y$  sind jedoch bekannt. Somit ist das Modell des Chemostaten nach der Bestimmung der beiden Parameter  $\mu_{max}$  und  $K_{S,m}$  bestimmt.

Die Bestimmung der Parameter  $\mu_{max}$  und  $K_{S,m}$  lässt sich in diesem Kontext wie folgt einteilen:

- Indirekte Parameterbestimmung durch Messung im dynamischen Gleichgewicht
- Analytische Parameterbestimmung unter Verwendung von Optimierungsmethoden
  1. Bestimmung der maximalen Wachstumsrate im Batch-Betrieb
  2. Bestimmung der Halbwertskonstante durch Optimierung unter Verwendung von Simulation

### 6.1 Indirekte Parameterbestimmung durch Messung im dynamischen Gleichgewicht

In diesem Fall wird von mathematischen Ableitungen der stationären Zustände ausgegangen. Diese analytische Beschreibung des dynamischen Gleichgewichtes für die Bakterien- und Substratkonzentration ermöglicht die Berechnung der gesuchten Parameter.

Im Falle einer bekannten Modellkinetik können also die Modellparameter durch zwei Messungen in unterschiedlichen stationären Zuständen des Chemostaten bestimmt werden. Dabei wird der Chemostaten zunächst hintereinander in zwei unterschiedlichen Arbeitspunkten betrieben. In diesen beiden Betriebszuständen erfolgt dann die Messung der stationären Substrat- oder Bakterienkonzentration. Es ist ausreichend, je nach vorhandener Messtechnik und Sensorik, eine der beiden stationären Größen zu bestimmen. Aus den beiden Werten können dann unter Kenntnis der analytischen Gleichung der stationären Zustände, die gewünschten Parameter berechnet werden. Die mathematische Lösung des Gleichungssystems ist im Folgenden für eine Messung des Substratgleichgewichtes bei einem Standard-Chemostaten mit Monod- und Contois-Kinetik angegeben. Die Substratkonzentration kann leicht über Verwendung von Messsystemen zur Messung der Sauerstoffaufnahme des Systems bestimmt werden (siehe [Ellis et al.(1996)Ellis, Barbeau, F., and Grady] und [Ellis et al.(1998)Ellis, F., and Grady]). Das ist der Grund dafür, warum im Folgenden die Messung der Substratkonzentration angenommen und zur Parameterbestimmung verwendet wurden. Zur Einstellung der unterschiedlichen Arbeitspunkten wurde die Variation der Durchflussrate ( $D_{1,2}$ ) gewählt, wodurch sich die gewünschten stationären Substratkonzentrationen ( $S_{mess1,2}$ ) einstellen.

Für den MBR-Chemostaten als Spezialfall des Standard-Chemostaten kann eine Lösung einfach in äquivalenter Form analytisch angeschrieben werden.

Bei dieser Vorgangsweise wird jedoch die Dynamik der verwendeten Kinetik nicht endogen bestimmt. Somit wird die Kenntnis der Dynamik vorausgesetzt, da sie die zu verwendenden Gleichungen bestimmt.



### 6.1.1 Modelle mit Monod-Kinetik

Die Gleichungen für die stationären Zustände eines Standard-Chemostaten mit Monod-Kinetik wurden bereits in Abschnitt (4.5) hergeleitet. Hier ergibt sich unter Verwendung der Messwerte der stationären Zustände ein Gleichungssystem mit zwei Unbekannten.

$$\begin{aligned}\bar{X}_{Mess} &= Y \left( \frac{\mu_{max} S_0 - D(S_0 + K_{S,m})}{\mu_{max} - D} \right) \\ \bar{S}_{Mess} &= \frac{DK_{S,m}}{\mu_{max} - D}\end{aligned}\quad (97)$$

Unter der Annahme der Messung der Substratkonzentration in zwei Arbeitspunkten des Chemostaten, liegt folgende Information vor:

$$\bar{S}_{Mess1,2} = \frac{D_{1,2} K_{S,m}}{\mu_{max} - D_{1,2}} \quad (98)$$

Nach der Lösung des Gleichungssystems folgt für die gesuchten Parameter:

$$\hat{\mu}_{max} = \frac{D_1 D_2 (S_{Mess1} - S_{Mess2})}{D_2 S_{Mess1} - D_1 S_{Mess2}} \quad (99)$$

$$\hat{K}_{S,m} = \frac{S_{Mess1} S_{Mess2} (D_1 - D_2)}{D_2 S_{Mess1} - D_1 S_{Mess2}} \quad (100)$$

Die Gleichungen für die stationären Zustände eines MBR-Chemostaten mit Monod-Kinetik wurden in Abschnitt (4.7) hergeleitet. Hier ergibt sich unter Verwendung der Messwerte in zwei stationären Zuständen ebenfalls ein Gleichungssystem mit zwei Unbekannten, das äquivalent gelöst werden kann und sich somit ebenfalls zur Parameterbestimmung eignet.

### 6.1.2 Modelle mit Contois-Kinetik

Äquivalent kann für einen Standard-Chemostaten mit Contois-Kinetik vorgegangen werden. Aus den Gleichungen der stationären Zustände aus Abschnitt (4.5) und (4.7) können wiederum die gesuchten Parameter bestimmt werden.

$$\begin{aligned}\bar{X}_{Mess} &= \frac{(\mu_{max} - D)Y S_0}{\mu_{max} - D + DK_{S,c}Y} \\ \bar{S}_{Mess} &= \frac{Y D S_0 K_{S,c}}{\mu_{max} - D + DK_{S,c}Y}\end{aligned}\quad (101)$$

Nach der Lösung des Gleichungssystems folgt für die gesuchten Parameter:

$$\hat{\mu}_{max} = \frac{D_1 D_2 S_0 (S_{Mess_1} - S_{Mess_2})}{S_{Mess_1} S_{Mess_2} (D_2 - D_1) + S_0 (S_{Mess_2} D_1 - S_{Mess_1} D_2)} \quad (102)$$

$$\hat{K}_{S,c} = \frac{S_{Mess_1} S_{Mess_2} (D_1 D_2)}{Y [S_{Mess_1} S_{Mess_2} (D_2 - D_1) + S_0 (S_{Mess_2} D_1 - S_{Mess_1} D_2)]} \quad (103)$$

Die Gleichungen der stationären Zustände des MBR-Chemostaten mit Contois-Kinetik eignen sich in gleicher Weise zur Parameterbestimmung.

## 6.2 Bestimmung der maximalen Wachstumsrate im Batch-Betrieb

Der Parameter der maximalen Wachstumsrate  $\mu_{max}$  ist unabhängig von der im Modell verwendeten Kinetik. Er kann daher auch in einem stationären Batch-Experiment unter Laborbedingungen leicht ermittelt werden. Dies kann in der Realität in biotechnologischen Labors einfach erfolgen. Es wird dabei in einem Batch-Betrieb die Wachstumsraten von Bakterienkulturen bei unterschiedlichen Substratkonzentrationen ermittelt. Auf diese Weise kann die maximale Wachstumsrate einfach analytisch ermittelt werden.

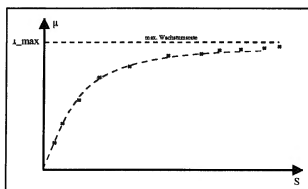


Abbildung 32: Schematische Darstellung einer möglichen Messreihe der maximalen Wachstumsrate in einem Batch-Versuch

Die Milieubedingungen sind dabei an die reale Betriebsart des Chemostaten anzupassen. In Abbildung (32) ist eine schematische Darstellung eines möglichen Ergebnisses des Messexperimentes dargestellt. Die Messpunkte, angedeutet durch die "X" im Diagramm, zeigen den limitierten Charakter der Wachstumsgeschwindigkeit der Bakterien. Nach der Durchführung der Messreihe kann die maximale Wachstumsgeschwindigkeit unter den bei der Messung vorherrschenden Milieubedingungen im Diagramm abgelesen werden.

### 6.3 Dynamische Parameterbestimmung unter Verwendung von Optimierungsmethoden

In diesem Fall kann der Parameter der Halbwertskonstante der Kinetik  $K_{S,m}$  durch Minimierung der Abweichung zwischen einer realen dynamischen Messkurve und einem Simulationsexperiment mit dem zu bestimmenden Modell ermittelt werden. Dazu sind dynamische Messzeitreihen der Substrat- oder der Bakterienkonzentration des Chemostaten notwendig. Der Parameter  $\mu_{max}$  für die maximale Wachstumsrate kann bei dieser Vorgangsweise im Vorfeld in einfachen Batch-Versuchen in einem Labor bestimmt werden (siehe dazu Abschnitt (6.2)). In diesem Abschnitt wird daher angenommen, dass der Parameter der maximalen Wachstumsrate  $\mu_{max}$  bereits im Vorfeld bestimmt wurde und bekannt ist.

Hier wird nun die Möglichkeit der Parameterbestimmung mittels eines dynamischen Vergleichs der Messzeitreihe mit den Simulationsergebnissen aufgezeigt. Als Maß für die Anpassung des Parameters dient die Kleinstquadratabweichung zwischen den Messpunkten und den Simulationsergebnissen. Die Adaption des Parameters erfolgt mit Hilfe eines Optimierungsverfahrens auf Basis eines Gradientenabstiegsverfahrens.

In Abbildung (33) ist der prinzipielle Ablauf der Parameterbestimmung dargestellt.

Da dem Autor keine realen Messreihen vorliegen, wird im Folgenden zur Demonstration der Parameterbestimmung mittels Simulation eine Messzeitreihe erzeugt. Anschließend wird mit einem Optimierungsverfahren die Halbwertskonstante der Kinetik bestimmt. Zur Optimierung wurde die MATLAB-Routine "fminbnd.m" verwendet. Diese Routine beinhaltet eine Implementierung eines Gradientenabstiegsverfahrens ("Golden Section Search") mit parabolischer Interpolation in einem definierten Intervall (Details siehe [Mat(2002b)]).

Mit Hilfe dieses Verfahrens kann auch entschieden werden, ob im Modell eine Monod- oder eine Contois-Kinetik besser zur Abbildung realer Gegebenheiten geeignet ist. Im Bereich geringer Bakterienkonzentration oder bei einer nahezu konstanten Substratkonzentration wird kein Unterschied in der Qualität des Modells je nach verwendeter Kinetik erwartet. Der optimale Wert des Parameters hinsichtlich eines minimalen Zielfunktionswertes beschreibt die Anpassung des Modells an die Messzeitreihe. Diese Anpassung ist prinzipiell sowohl an Modelle mit Monod- sowie Contois-Kinetik möglich, jedoch hängt die Qualität der Anpassung von der realen zugrundeliegenden Kinetik ab. Durch einen Vergleich des Zielfunktionswertes im Optimum kann eine Aussage über die geeignetere Kinetik getroffen werden.

Die Monod- oder Contois-Kinetik kann in diesem Verfahren prinzipiell äquivalent verwendet werden. Durch einen Vergleich der Ergebnisse der Parameterbestimmung, ist eine Aussage darüber möglich, ob im Modell ein Ansatz

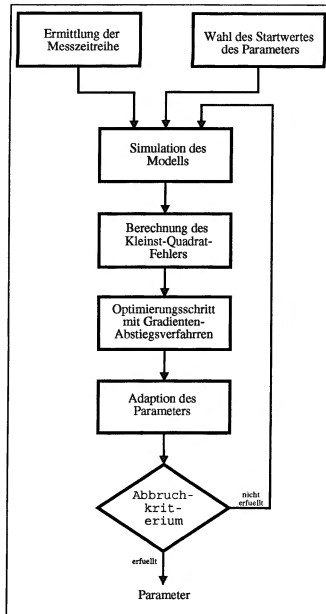


Abbildung 33: Schematische Darstellung des Algorithmus der Parameterbestimmung mittels Optimierung

mit Monod- oder Contois-Kinetik verwendet werden soll, um eine optimale Anpassung an die Messdaten zu erreichen.

Im Folgenden werden künstliche Messdaten mit unterschiedlichen Messfehler erzeugt. Mit diesen künstlichen Daten wird die Performance der Optimierungsmethode hinsichtlich fehlerbehafteter Messungen und Identifizierungsgenauigkeit untersucht. Die Stärke der Simulation ist hierbei die Möglichkeit, die Daten unter bekannten Gegebenheiten bezüglich der verwendeten Kinetik bei bekanntem Parameter zu generieren, um anschließend eine objektive Performance-Messung des Optimierungsverfahrens der Parameterbestimmung durchführen zu können.

### 6.3.1 Erzeugung einer künstlichen Messzeitreihe

Hier sind im Folgenden die künstlichen Messzeitreihen abgebildet [Abb. (34) + (35)], die in weiterer Folge zur Parameterbestimmung der Kinetik verwendet werden. Die Messzeitreihen wurden durch Simulation eines Standard- und eines MBR-Chemostaten mit Monod- und Contois-Kinetik erzeugt. Die Lösung der Chemostaten-Differentialgleichungen wurde durch Überlagerung mit einem normalverteilten Zufallsprozess mit der gewünschtem Rauschpegel verrauscht.

Die verwendeten Differentialgleichungen der Chemostaten mit Monod-Kinetik sind folgendermaßen definiert:

- Standard-Chemostat

$$\frac{dX}{dt} = \mu_{max} \frac{S}{K_{S,m} + S} X - (D + b)X \quad (104)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y} \mu_{max} \frac{S}{K_{S,m} + S} X + D(S_0 - S) + bX \quad (105)$$

- MBR-Chemostat

$$\frac{dX}{dt} = \mu_{max} \frac{S}{K_{S,m} + S} X - bX \quad (106)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y} \mu_{max} \frac{S}{K_{S,m} + S} X + D(S_0 - S) + bX \quad (107)$$

Das Verrauschen der Lösung der Differentialgleichungen der Chemostaten soll bei der Parameterbestimmung die Robustheit der Lösung gegenüber Messfehlern zeigen. Dies ist notwendig, um die Konvergenz des Optimierungsverfahrens zur Parameterbestimmung bei unterschiedlichen Messfehlern zu zeigen. Das ist eine wichtige Voraussetzung zur Anwendung des Verfahrens in der Praxis.

Die künstlichen Messzeitreihen wurden mit in Tabelle (3) angegebenem Parameter-Setting erzeugt.

Parameter	Wert	Beschreibung
$\mu_{max}$	6	max. Wachstumsrate
$X_0$	0.1	Anfangskonzentration der Bakterien
$S_0$	96	Anfangskonzentration des Substrats
$D$	2.5	Verdünnungsrate
$b$	0.62	Sterberate

Tabelle 3: Definition der Parameter der Chemostaten

Diese Parameter bleiben während der gesamten Studie über die Verfahren zur Parameterbestimmung unverändert. Es wird lediglich, wie in den jeweiligen Fällen angegeben, der zu bestimmende Parameter  $K_{S,m}$  und der Rauschpegel variiert. Durch das Hinzufügen eines simulierten Messfehlers in Form von Verrauschen der Lösung wird es notwendig, die Parameterbestimmung öfter durchzuführen. Der Messfehler wurde durch einen stochastischen Prozess erzeugt und so wird in mehreren Simulationsläufen mit unterschiedlichen Messfehlern gezeigt werden, dass das Verfahren der Parameterbestimmung für sämtliche Realisierungen des Zufallsprozesses gegen den korrekten Parameterwert konvergiert.

Im Folgenden ist nun eine Realisierung der künstlichen Messzeitreihen für den Standard- und den MBR-Chemostaten mit Monod-Kinetik mit unterschiedlichen Rauschlevels dargestellt. Die Messzeitreihen für die Chemostaten mit Contoiskinetik werden zur Untersuchung der Identifizierbarkeit analog erzeugt (siehe Abschnitt 6.3.3). Die Halbwertkonstante  $K_{S,m}$  wurde dabei umgerechnet, so dass die Konzentrationen der Chemostaten in beiden Fällen (Monod und Contois) gegen den gleichen stationären Wert streben. Dies ist erforderlich, da in der Praxis die stationäre Konzentration messtechnisch bestimmt werden können und die Parameterbestimmung dazu dient, die zur angenommenen Kinetik des "realen" Prozesses passenden Parameter zu bestimmen. In der Simulation bildet somit die geeignet gewählte Kinetik und der korrekt bestimmte Parameter neben der realen Kinetik auch die realen stationären Konzentrationen nach. Hier ist als zu Grunde liegende, "reale" Dynamik, die Monod-Kinetik angenommen.

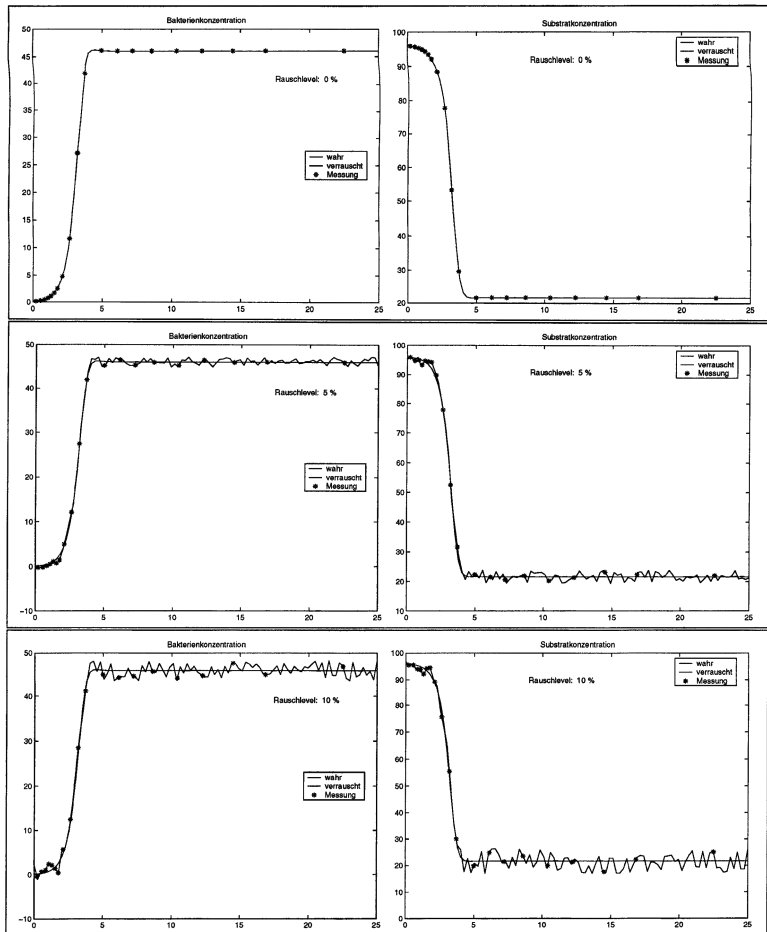


Abbildung 34: Darstellung der künstlich erzeugten Messzeitreihen der Bakterien- und Substratkonzentration eines Standard-Chemostaten (Monod-Kinetik mit einer Halbwertskonstanten von  $K_{S,m} = 20$ ) mit einem simulierten Messfehler von 0%, 5% und 10%



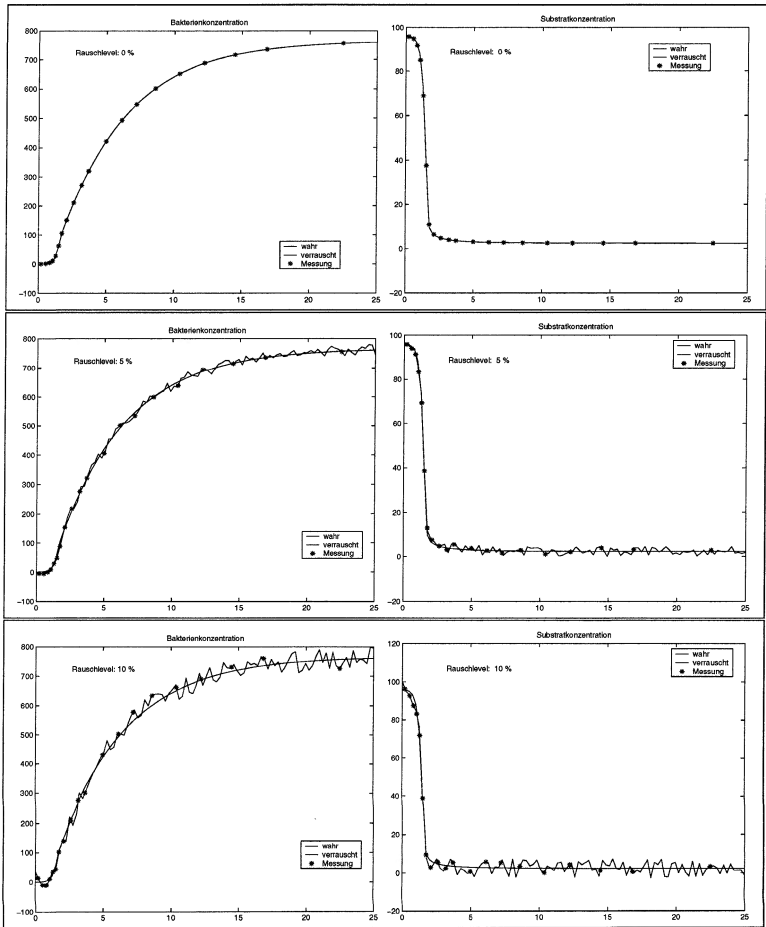


Abbildung 35: Darstellung der künstlich erzeugten Messzeitreihen der Bakterien- und Substratkonzentration eines MBR-Chemostaten (Monod-Kinetik mit einer Halbwertskonstanten von  $K_{S,m} = 20$ ) mit einem simulierten Messfehler von 0%, 5%, 10% und 20%

### 6.3.2 Parameterbestimmung

In diesem Abschnitt werden nun für eine Standard- und einen MBR-Chemostaten mit Monod-Kinetik die Parameter der Halbwertskonstante  $K_{S,m}$  bestimmt, unter der Annahme, dass es sich beim realen, zu Grunde liegenden Prozess um eine Monod-Kinetik handelt. Dies wurde dadurch realisiert, dass die Messzeitreihen hier künstlich generiert werden und die Kinetik und der "wahre" Parameter daher bekannt sind. Dadurch ist die Evaluierung der Performance der Parameterbestimmung möglich.

Es wurden die künstlichen Messzeitreihen mit den Halbwertskonstanten von  $K_{S,m} = 15, 20$ , und  $40$  und den künstlichen Messfehlern von  $0\%, 5\%, 10\%$  und  $20\%$  generiert und anschließend die Parameter bestimmt. In Tabelle (4) und (5) sind nun die Ergebnisse der Parameterbestimmung dargestellt.

Es zeigt sich, dass die Methode zur Parameterbestimmung sowohl beim Standard- als auch beim MBR-Chemostaten bei allen gewählten Rauschamplituden sehr gut gegen den "wahren" Wert der Halbwertskonstante der Kinetik konvergiert. Somit ist das hier gewählte Verfahren in diesem Wertebereich der Parameter und der Rauschlevel sehr gut geeignet, um die zu Grunde liegenden Parameter zu bestimmen.

Zur Bestimmung der Parameter für Chemostaten mit Contois-Kinetik kann die gleiche Vorgangsweise gewählt werden. Die grundsätzliche Fragestellung ist in der Praxis in Hinblick auf den Modellbildungsprozess, welche Kinetik gewählt werden muss, um eine möglichst gute Beschreibung realer Zusammenhänge durch das Modell zu gewährleisten. Die Beantwortung dieser Frage hängt von unterschiedlichen äusseren Bedingungen ab, die bereits in vorangegangenen Abschnitten erläutert wurden. Das Verfahren zur Parameterbestimmung mittels Optimierung eignet sich jedoch auch zur Identifizierung der im realen Prozess zu Grunde liegenden Kinetik.

$K_{S,m}$	angenommener Messfehler			
	0%	5%	10%	20%
15	15.0440 (0)	15.0474 (0.1449)	15.1150 (0.1547)	14.8891 (0.5422)
20	20.0120 (0)	19.9915 (0.1376)	19.8256 (0.2342)	20.3354 (0.4970)
40	39.9956 (0)	39.9864 (0.11173)	39.9799 (0.2996)	40.3715 (0.5580)

Tabelle 4: Ergebnisse der Parameterbestimmung der Halbwertskonstante  $K_{S,m}$  eines Standard-Chemostaten mit Monod-Kinetik; die Zahlenwerte geben dabei den Mittelwert und die Standardabweichung (in Klammer) von 10 durchgeführten Parameterbestimmungen an.

$K_{S,m}$	angenommener Messfehler			
	0%	5%	10%	20%
15	15.0143 (0)	14.9698 (0.8277)	15.1451 (3.3445)	12.6883 (5.7085)
20	20.0164 (0)	19.8697 (0.9779)	19.3582 (3.2763)	20.1203 (5.2659)
40	40.0678 (0)	39.6222 (0.9195)	39.1839 (2.3123)	41.0966 (4.4117)

Tabelle 5: Ergebnisse der Parameterbestimmung der Halbwertskonstante  $K_{S,m}$  eines MBR-Chemostaten mit Monod-Kinetik; die Zahlenwerte geben dabei den Mittelwert und die Standardabweichung (in Klammer) von 10 durchgeführten Parameterbestimmungen an.

### 6.3.3 Identifizierung der zugrundeliegenden Kinetik

Einen nächsten wichtigen Schritt stellt nun die Identifizierung der Kinetik dar, die am Besten die "reale" Wachstumsdynamik beschreibt. Dazu werden hier zur Evaluierung des Verfahrens wiederum künstliche Messzeitreihen für einen Standard- und einen MBR-Chemostaten, sowohl für eine Monod- als auch eine Contois-Kinetik erzeugt. Anschließend wird mit Hilfe des bereits näher erläuterten Optimierungsverfahren der Parameter bestimmt, der die "realen" Zusammenhänge am Besten beschreibt. Bei der Problemstellung der Identifizierung, interessiert hier jedoch nicht so sehr der resultierende Parameter (siehe dazu Abschnitt 6.3.2), sondern die Genauigkeit mit der die simulierte Kurve an die reale Messzeitreihe angepasst werden kann. Dieses Maß der Genauigkeit, ist als Zielfunktionswert im Optimierungsverfahren zur Parameterbestimmung implizit vorhanden. Der Zielfunktionswert ist als Kleinst-Quadrat-Abstand zwischen den simulierten und den gemessenen Konzentrationen definiert. Bei einer optimalen Anpassung muss dieser Zielfunktionswert möglichst minimiert werden, was durch das Optimierungsverfahren auch so realisiert wird.

Es wird nun angenommen, dass es einen signifikanten Unterschied im Zielfunktionswert gibt, je nachdem ob die Messzeitreihe in der Simulation mit der ihr zu Grunde liegenden Kinetik abgebildet wird oder nicht. Dazu werden nun künstliche Messzeitreihen sowohl mit Monod- als auch Contois-Kinetik bei unterschiedlichen Halbwertskonstanten generiert und im Anschluss dazu die Zielfunktionswerte verglichen, die sich bei Nachbildung der künstlichen Messzeitreihen durch beide Kinetiken ergeben. Bei der Generierung der künstlichen Messzeitreihen wurde ein Messfehler von 5% überlagert, um einen realen Messvorgang nachzubilden.

Es wird dabei angenommen, dass die Qualität des Optimierungsverfahrens hinreichend gut ist, so dass es immer den best-möglichen Anpassungsgrad erreicht. Die Anpassung ist daher bei geringerem Zielfunktionswert effizienter erfolgt als bei einem höheren. Daraus kann auf die implizierte Kinetik geschlossen werden.

Die Ergebnisse dieser Untersuchung sind in den folgenden Tabellen [Tab. (6) und (7)] dargestellt. Es zeigt sich, dass die Zielfunktionswerte einen deutlichen Unterschied aufweisen. Auch die Identifizierung der Wachstumskinetik liefert daher eindeutige Ergebnisse und ermöglicht somit eine Aussage über die zu verwendende Kinetik zur Beschreibung des realen Wachstumsprozesses.

$K_{S,m}$	simuliert mit	ZF Monod	ZF Contois	$K_{S,c}$	simuliert mit	ZF Monod	ZF Contois
15	Monod	<b>7.4739</b> (1.2568)	1291.0 (40.38)	0.395	Contois	817.6 (27.92)	<b>6.1137</b> (1.4339)
20	Monod	<b>5.9944</b> (1.3573)	1677.8 (52.06)	0.526	Contois	1185.8 (28.32)	<b>5.1449</b> (1.1543)
40	Monod	<b>2.9287</b> (0.7989)	1943.0 (35.88)	1.052	Contois	1937.1 (43.21)	<b>3.0508</b> (0.7812)

Tabelle 6: Vergleich der Parameterbestimmung mittels Optimierung bei einem Standard-Chemostaten mit Monod- und Contois-Kinetik bei einem angenommenen Messfehler von 5%

$K_{S,m}$	simuliert mit	ZF Monod	ZF Contois	$K_{S,c}$	simuliert mit	ZF Monod	ZF Contois
15	Monod	<b>1424.6</b> (253.09)	$2.48 \cdot 10^4$ ( $2.37 \cdot 10^3$ )	0.395	Contois	$1.27 \cdot 10^5$ ( $5.06 \cdot 10^3$ )	<b>981.93</b> (240.25)
20	Monod	<b>1476.3</b> (440.20)	$2.77 \cdot 10^4$ ( $2.87 \cdot 10^3$ )	0.526	Contois	$1.77 \cdot 10^5$ ( $6.13 \cdot 10^3$ )	<b>1279.5</b> (246.56)
40	Monod	<b>1383.8</b> (196.53)	$5.65 \cdot 10^4$ ( $4.57 \cdot 10^3$ )	1.052	Contois	$3.53 \cdot 10^5$ ( $3.54 \cdot 10^3$ )	<b>444.78</b> (86.52)

Tabelle 7: Vergleich der Parameterbestimmung mittels Optimierung bei einem MBR-Chemostaten mit Monod- und Contois-Kinetik bei einem angenommenen Messfehler von 5%



Teil III

**Entwicklung des Kernmodells zur  
Beschreibung biologischer  
Abwasserreinigung**





## 7 Activated Sludge Modell 1 (ASM 1)

Dieses Kapitel stellt einen Überblick über das "Activated Sludge Modell 1" (ASM1) dar. Das ASM1 findet in vielen Modellen biologischer Abwasserreinigungsverfahren Verwendung und wurde auch bereits in früheren Arbeiten des Autors als Grundlage verwendet [Wöckl(2000)]. Hier soll es jedoch nur als Ausgangspunkt dienen, da in späteren Abschnitten ein geringfügig reduziertes Modell verwendet wird, um die wesentlichen Prozesse in einer klareren Form untersuchen und erweitern zu können. Die Modellierung biologischer Abwasserreinigungsverfahren im ASM1 dient als Grundlage für spätere Modelladaptionen und Untersuchungen.

### 7.1 Stoffgruppen und biologische Prozesse

Die Grundlage des Simulationsmodells ist das von einer Arbeitsgruppe der IAWPRC (Task Group on Mathematical Modelling for Design and Operation of Biological Wastewater Treatment) aufgestellte mathematische Modell ASM1 (Activated Sludge Model No 1) [Henze et al.(1986)]. In diesem werden insgesamt 13 Stoffgruppen berücksichtigt, die im Modell durch Konzentrationen beschrieben sind. Einige Stoffgruppen definieren sich nur durch ihre Rolle bei den im Belebtschlamm ablaufenden biologischen Vorgängen und werden in äquivalentem chemischen Sauerstoffbedarf je Volumeneinheit [ $g\text{ CSB}/m^3$ ] gerechnet. Im folgender Tabelle (8) sind die verwendeten Stoffgruppen aufgeführt. Die Konzentrationen der 13 Stoffgruppen werden durch folgende 8 Reaktionen (Prozesse) beeinflusst, die im Wesentlichen in Belebtschlammbecken ablaufen [Tabelle (9)].

Das folgende Bild (Abb. 36) gibt einen Überblick, welche Stoffgruppen auf die einzelnen Reaktionen Auswirkungen haben. Modelliert werden die wesentlichen Prozesse des Abbaus von Kohlenstoffverbindungen (CSB), der Nitrifikation und der Denitrifikation sowie des Wachstums der beteiligten Mikroorganismen. Wie aber aus den beteiligten Stoffgruppen und Reaktionen ersichtlich, werden in dem verwendeten Belebtschlammmodell die Prozesse der chemischen und biologischen Phosphatelimination nicht modelliert. Diese Prozesse sind jedoch im Belebtschlammmodell ASM 2 enthalten. Aus der Abbildung kann somit die gegenseitige Beeinflussung zwischen Stoffgruppen und Prozessen ersehen werden, jedoch wird vorerst keine Angabe über die Struktur der Prozesse und über die Art der Beeinflussung gemacht. Die mathematische Beschreibung der Prozessraten und Angaben bezüglich der wechselseitigen Beeinflussung der Stoffgruppen und der Prozesse ( $\rho_i$ ), ist auf den folgenden Seiten dieses Abschnitts beschrieben.

Nr.	Variable	Beschreibung	Einheit
1.	$S_I$	Biologisch inerte, gelöste organische Stoffe	[g CSB/ $m^3$ ]
2.	$S_S$	Biologisch rasch abbaubare, gelöste organische Stoffe	[g CSB/ $m^3$ ]
3.	$X_I$	Biologisch inerte, partikuläre organische Stoffe	[g CSB/ $m^3$ ]
4.	$X_S$	Biologisch langsam abbaubare organische Stoffe	[g CSB/ $m^3$ ]
5.	$X_{B,H}$	Aktive heterotrophe Biomasse	[g CSB/ $m^3$ ]
6.	$X_{B,A}$	Aktive autotrophe Biomasse	[g CSB/ $m^3$ ]
7.	$X_P$	Partikuläre Zerfallsprodukte der Biomasse	[g CSB/ $m^3$ ]
8.	$S_O$	Sauerstoff	[-g CSB/ $m^3$ ]
9.	$S_{NO}$	Nitrat- und Nitrit- Stickstoff	[g N/ $m^3$ ]
10.	$S_{NH}$	Ammoniak und Ammonium-Stickstoff	[g N/ $m^3$ ]
11.	$S_{ND}$	Biologisch abbaubarer, gelöster organisch gebundener Stickstoff	[g N/ $m^3$ ]
12.	$X_{ND}$	Biologisch abbaubarer, partikulärer organisch gebundener Stickstoff	[g N/ $m^3$ ]
13.	$S_{ALK}$	Alkalinität	[mol/ $m^3$ ]

Tabelle 8: Stoffgruppen im ASM1

Nr.	Variable	Prozess
1.	$\rho_1$	Aerobes Wachstum heterotropher Biomasse
2.	$\rho_2$	Anoxisches Wachstum heterotropher Biomasse (Denitrifikation)
3.	$\rho_3$	Aerobes Wachstum autotropher Biomasse (Nitrifikation)
4.	$\rho_4$	Ammonifikation
5.	$\rho_5$	Abbau heterotropher Biomasse
6.	$\rho_6$	Abbau autotropher Biomasse
7.	$\rho_7$	Hydrolyse partikulärer organischer Verbindungen
8.	$\rho_8$	Hydrolyse der Stickstoffverbindungen

Tabelle 9: Kinetische Prozesse im ASM1

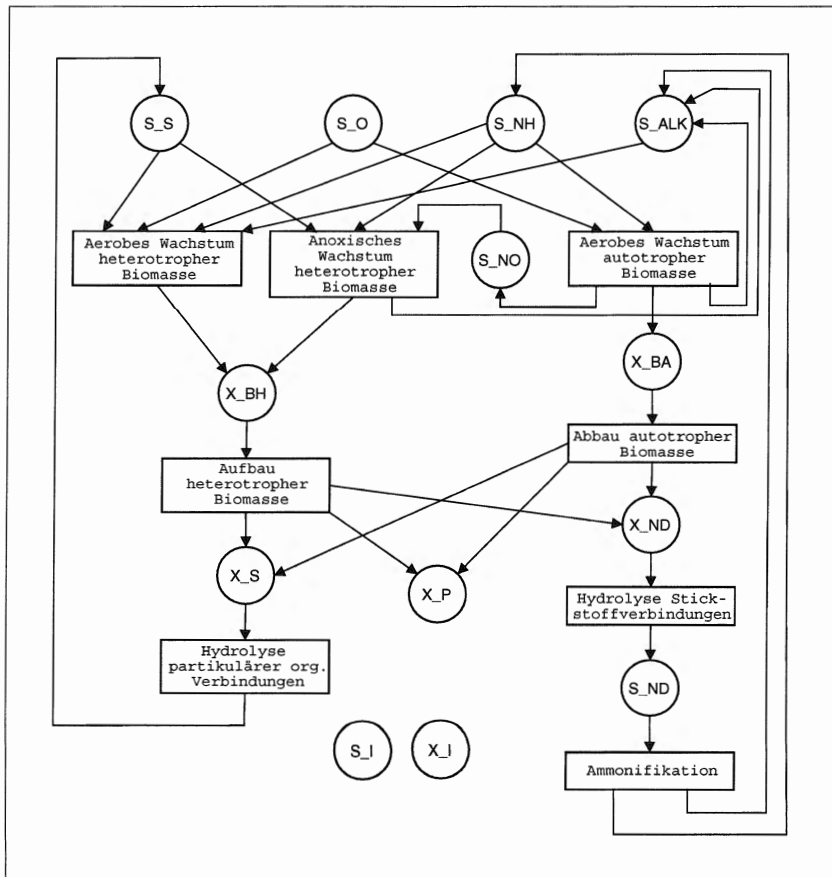


Abbildung 36: Überblick der Reaktionen des ASM1

## 7.2 Mathem. Modellierung der biolog. Prozesse im ASM 1

Die Entwicklung eines mathematischen Modells beinhaltet einige Kompromisse, um oft auch gegensätzliche Anforderungen zu erfüllen. Zum Einen muss ein Modell die wichtigsten Eigenschaften und Abläufe eines Systems beschreiben, und es muss mit den Beobachtungen in der Realität konsistent sein. Zum Anderen müssen die Modellgleichungen mit vertretbarem Aufwand lösbar sein. Schwierigkeiten bezüglich der Lösbarkeit steigen jedoch mit der Anzahl der Modellgleichungen, also mit der Anzahl der ablaufenden Prozesse. Bei der Modellbildung sollen also nur jene Prozesse modelliert werden, die für eine realistische Lösung essentiell sind. Gleichungen für die Raten dieser Prozesse müssen dann möglichst so ausgewählt werden, dass sie einfache Lösungsverfahren zulassen, ohne jedoch die Anwendbarkeit der Lösungen herabzusetzen. Im Falle des ASM1-Modells wurden sogenannte Switching-Functions (Schaltfunktionen) verwendet, die es ermöglichen, Gleichungen für die Prozessraten ein- und auszuschalten, wenn sich Umweltbedingungen verändern. Um ein Beispiel zu nennen, vermehren sich die Bakterien, die für die Nitrifikation zuständig sind, nur unter aeroben Bedingungen und ihre Wachstumsrate fällt auf Null, wenn die Konzentration von gelöstem Sauerstoff auf Null fällt. Diese Tatsache kann durch folgenden Schalter in der Prozessgleichung modelliert werden, der von der Konzentration von gelöstem Sauerstoff "betätigt" wird:

$$\frac{S_O}{K_O + S_O} \quad (108)$$

$S_O$  ist in dieser Gleichung der gelöste Sauerstoff und  $K_O$  ist ein Parameter, der, wenn er klein gewählt wird, ermöglicht er, dass die Schaltfunktion für moderate Werte von gelöstem Sauerstoff einen Wert um 1 hat, wenn jedoch der gelöste Sauerstoffwert gegen Null geht, nimmt auch die Gleichung einen Wert von Null an. Dieser funktionale Zusammenhang wird auch Limitierung genannt. Da es sich dabei um eine kontinuierliche Gleichung handelt, hilft sie, das numerische Problem der Instabilität zu vermeiden, das bei Simulationsmodellen mit diskontinuierlichen Schaltfunktionen häufig auftritt. Ebenso können Prozesse, die nur bei einem Mangel an gelöstem Sauerstoff ablaufen (Inhibierung), durch eine Schaltfunktion folgender Form beschrieben werden:

$$\frac{K_O}{K_O + S_O} \quad (109)$$

Diese Modellierung von Schaltfunktionen nennt sich Monod-Kinetik. In der folgenden Abbildung (Abb. 37) sind die beiden Funktionen und ihr Produkt grafisch dargestellt:

Die oben aufgeführten Prozesse werden also durch eine Kombination von limitierenden ( $Monod_{ON}$ ) und inhibierenden ( $Monod_{OFF}$ ) Termen model-

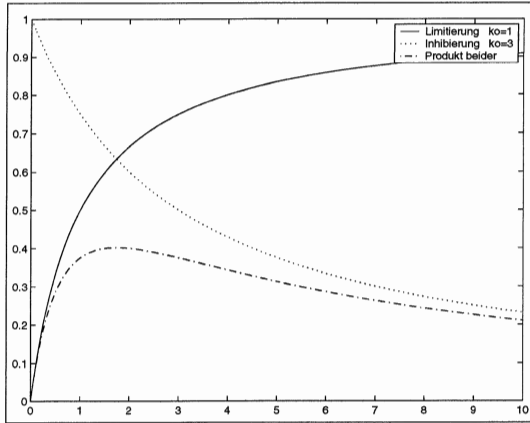


Abbildung 37: Monod - Verlauf

liert. Die Anpassung an die realen Zusammenhänge erfolgt durch eine geeignete Wahl des Schaltparameters (im genannten Beispiel:  $K_O$ ) und durch eine weitere multiplikative Konstante.

In den Gleichungen der Prozessraten (Kinetik) werden die in Tabelle (10) angegebenen Parameter (kinetische Parameter) verwendet.

Um die Einflüsse der Prozesse auf die Stoffgrößen zu modellieren, müssen die oben dargestellten Prozessraten mit stöchiometrischen Koeffizienten kombiniert werden. Die Änderung der Stoffgröße über die Zeit  $\left(\frac{\partial X_i}{\partial t}, \frac{\partial S_i}{\partial t}\right)$  wird im Folgenden als Stoffgrößenrate  $\dot{r}_i$  bezeichnet und sie ergibt sich aus:

$$\dot{r}_i = \sum_j \nu_{ij} \rho_j \quad (110)$$

wobei  $\nu_{ij}$  die stöchiometrischen Parameter und  $\rho_i$  die oben bereits beschriebenen Prozessraten darstellt.

<sup>1</sup> $\{x\}^*$  ... CSB für  $K_S$  /  $N_{O3} - N$  für  $K_{NO}$  /  $N_{H3} - N$  für  $K_{NH}$

Symbol	Bezeichnung	Einheit <sup>1</sup>
$\mu_A/\hat{\mu}_H$	Maximale Wachstumsgeschwindigkeit der auto- /heterotrophen Biomasse	[1/d]
$b_A/b_H$	Zerfallskonstante (auto- /heterotroph)	[1/d]
$K_{O,A}/K_{O,H}$	Sauerstoff-Sättigungsbeiwert für auto- /heterotrophe Biomasse	[g $O_2/m^3$ ]
$K_S/K_{NO}/K_{NH}$	Sättigungsbeiwert	[g $\{x\}^* / m^3$ ]
$\nu_g$	Korrekturfaktor für $\hat{\mu}_H$ unter anoxischen Bedingungen	[-]
$\nu_h$	Korrekturfaktor für Hydrolyse unter anoxischen Bedingungen	[-]
$k_a$	Ammonifikationsgeschwindigkeit	[ $m^3$ CSB/g · d]
$k_h$	Maximale Hydrolyserate	[1/d]
$K_X$	Sättigungsbeiwert Hydrolyse	[-]

Tabelle 10: Kinetischen Prozess-Parameter des ASM1

Die nachfolgende Tabelle stellt diese Einflüsse in Matrixform dar. Um die Stoffgruppenrate  $r_i$  (für die Stoffgruppe i) zu erhalten, wird also in Spalte i jeder Zeileneintrag j (also das Matrixelement  $\nu_{ij}$ ) mit der korrespondierenden Prozessrate  $\rho_j$  multipliziert und anschliessend werden alle Produkte  $\nu_{ij}\rho_j$  addiert. So erhält man 13 Gleichungen der Stoffgruppenraten, die die biologischen Prozesse in Abwasserreinigungsbecken beschreiben.

In der folgenden Tabelle sind die stöchiometrischen Parameter beschrieben:

ASM1 - Activated Sludge Model 1			
Nr.	Process		Process Rate $\rho_i$
1	Aerobic growth of heterotrophs	$\rho_1$	$\hat{\mu}_H \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left( \frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) X_{B,H}$
2	Anoxic growth of heterotrophs	$\rho_2$	$\hat{\mu}_H \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left( \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \times \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \eta_g X_{B,H}$
3	Aerobic growth of autotrophs	$\rho_3$	$\hat{\mu}_A \left( \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left( \frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) X_{B,A}$
4	'Decay' of heterotrophs	$\rho_4$	$b_H X_{B,H}$
5	'Decay' of autotrophs	$\rho_5$	$b_A X_{B,A}$
6	Ammonification of soluble organic nitrogen	$\rho_6$	$k_a S_{ND} X_{B,H}$
7	'Hydrolysis' of entrapped organics	$\rho_7$	$k_h \frac{X_S / X_{B,H}}{K_X + (X_S / X_{B,H})} \left[ \left( \frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) + \eta_h \left( \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] X_{B,H}$
8	'Hydrolysis' of entrapped organic nitrogen	$\rho_8$	$\rho_7 \left( \frac{X_{ND}}{X_S} \right)$

Tabelle 11: Prozessraten des ASM1-Modells

ASM1 - Stöchiometrie der Stoffgruppen 1-7									
Nr.	Process	$\rho_i$	$\dot{S}_I$	$\dot{S}_S$	$\dot{X}_I$	$\dot{X}_S$	$\dot{X}_{B,H}$	$\dot{X}_{B,A}$	$\dot{X}_P$
1	Aerobic growth of heterotrophs	$\rho_1$		$-\frac{1}{Y_H}$			1		
2	Anoxic growth of heterotrophs	$\rho_2$			$-\frac{1}{Y_H}$			1	
3	Aerobic growth of autotrophs	$\rho_3$						1	
4	'Decay' of heterotrophs	$\rho_4$				$1 - f_p$	-1		$f_p$
5	'Decay' of autotrophs	$\rho_5$				$1 - f_p$		-1	$f_p$
6	Ammonification of soluble organic nitrogen	$\rho_6$							
7	'Hydrolysis' of entrapped organics	$\rho_7$		1		-1			
8	'Hydrolysis' of entrapped organic nitrogen	$\rho_8$							

Tabelle 12: Stöchiometrie des ASM1-Modells (Stoffgruppe 1-7)



ASM1 - Stöchiometrie der Stoffgruppen 8-13							
Nr.	$\rho_i$	$\dot{S}_O$	$\dot{S}_{NO}$	$\dot{S}_{NH}$	$\dot{S}_{ND}$	$\dot{X}_{ND}$	$\dot{S}_{ALK}$
1	$\rho_1$	$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$		$-i_{XB}$			$-\frac{i_{XB}}{14}$
2	$\rho_2$		$-\frac{1-Y_H}{2.86Y_H}$	$-i_{XB}$			$\frac{1-Y_H}{14 \cdot 2.86Y_H} - \frac{i_{XB}}{14}$
3	$\rho_3$	$-\frac{4.57-Y_A}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$-i_{XB} - \frac{1}{Y_A}$			$-\frac{i_{XB}}{14} - \frac{1}{7Y_A}$
4	$\rho_4$	$f_p$				$i_{XB}$ $-f_p i_{XP}$	
5	$\rho_5$	$f_p$				$i_{XB}$ $-f_p i_{XP}$	
6	$\rho_6$			1	-1		$\frac{1}{14}$
7	$\rho_7$						
8	$\rho_8$				1	-1	

Tabelle 13: Stöchiometrie des ASM1-Modells (Stoffgruppe 8-13)

Symbol	Bezeichnung	Einheit
$Y_A$	Ausnutzungskoeffizient autotroph	[g CSB/g · N]
$Y_H$	Ausnutzungskoeffizient heterotroph	[g CSB/g · N]
$i_{XB}$	Stickstoffgehalt der Biomasse	[g N/g CSB]
$i_{XP}$	Stickstoffgehalt von $X_P$	[g N/g CSB]
$f_P$	Anteil partikulärer Produkte am Zerfall der Biomasse	[-]

Tabelle 14: Stöchiometrische Parameter des ASM1

## 8 Kernmodell biologischer Abwasserreinigung

Das in einem vorigen Abschnitt beschriebene "Activated Sludge Modell 1" (ASM1) [Henze et al.(1986)] ist ein in der Praxis beliebtes Modell zur Simulation biologischer Abwasserreinigungsverfahren. Es eignet sich im Bereich des herkömmlichen kommunalen Belebtschlammverfahrens hinreichend gut zur Simulation von Verfahrensabläufen und zur Prognose der Effizienz des Klärprozesses bei unterschiedlichen Belastungen mit kommunalem Abwasser. Das ASM1 ist daher speziell an die Erfordernisse des kommunalen Abwasserreinigungsverfahrens angepasst.

Diese Arbeit soll zusätzlich zum simulationstechnischen "Framework" eine allgemeine Grundlage zur Erweiterung bzw. Adaption des Modells darstellen, so dass zukünftige spezielle Abbauketten mit Hilfe von mathematischen Modellen einfach beschrieben und in weiterer Folge simuliert werden können. Dabei ändert sich naturgemäß die Anzahl der relevanten Größen und damit die Variablen des Modells, jedoch auch die Abbaukinetik der einzelnen biologischen Teilprozesse kann durch spezielle Betriebsarten beeinflusst werden. Ab diesem Abschnitt wird daher das spezialisierte "Activated Sludge Modell 1" auf die wichtigsten relevanten Teilprozesse reduziert und die im ASM1 gemachten Annahmen bezüglich der Modellkinetik auf ihre Grenzen untersucht. Die Kernprozesse der kommunalen biologischen Abwasserreinigung werden dabei so allgemein wie möglich analysiert und beschrieben.

Die Bekanntheit der Grenzen der Modellkinetik und der relevanten Abbauprozesse soll eine spätere Erweiterung erleichtern, da die relevanten Modellspezifika leichter nachvollzogen werden können. Somit ist auch eine Erweiterung sowohl im Hinblick auf die Kinetik als auch auf die Modellvariablen und Prozesse leichter durchführbar. Wie eine theoretische Erweiterung erfolgen könnte, wird in einem späteren Kapitel näher erläutert. Bei hinreichend genauer Kenntnis der zusätzlichen Prozesse, ihrer Dynamik, ihrer Abbauketten und Wechselwirkungen kann ein mathematisches Modell einer biologischen Abwasserreinigung auch über die Anwendung für kommunale Abwässer hinaus, problemlos entwickelt werden.

## 8.1 Beschreibung der biologischen Prozesse des Kernmodells

Die in der Literatur ([Gujer and Henze(1991)], [Henze(1997)], [Hartmann(1997)], [Kovárová-Kovar and Egli(1998)]) bei unterschiedlichen Fragestellungen betrachteten Modellvariablen und deren Wechselwirkungen im Kontext biologischer Abwasserreinigung sind in folgender Abbildung (Abb. 38) angeführt. Je nach spezieller Anforderung können weitere Variablen und Wechselwirkungsprozesse hinzugenommen werden. Eine weitere Reduktion des angeführten Modells würde jedoch in Hinblick auf eine Beschreibung biologischer Abwasserreinigung nicht sinnvoll erscheinen. In anderen Bereichen der Biotechnologie wäre eine Spezialisierung auf Teilprozesse zwar denkbar, da diese Arbeit ihren Fokus jedoch auf die Abwasserproblematik legt, wird das angeführte Modell als absolut notwendiges Minimum angesehen.

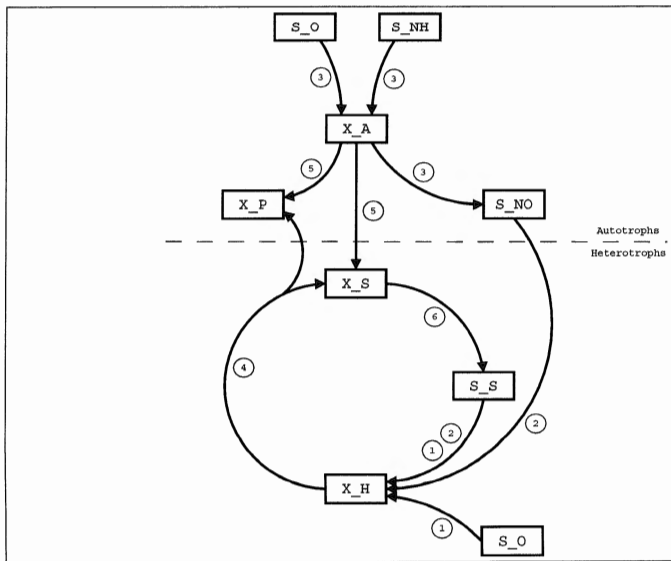


Abbildung 38: Kernprozesse biologischer Abwasserreinigung; aus [Henze(1997)]

Abbildung (38) zeigt dabei die Struktur des Kernmodells, also die im Modell betrachteten Variablen und ihre Wechselwirkungen untereinander. Die Bedeutung der Variablen und die Bezeichnung der in der Abbildung durch Ziffern symbolisierten Prozesse sind in den nachfolgenden Tabellen (Tab. 15 und Tab. 17) aufgeführt.

Variable	Beschreibung	Einheit
$X_A$	Aktive autotrophe Biomasse	$[gCSB/m^3]$
$X_H$	Aktive heterotrophe Biomasse	$[gCSB/m^3]$
$X_S$	Biologisch langsam abbaubare organische Stoffe	$[gCSB/m^3]$
$X_P$	Partikuläre Zerfallsprodukte der Biomasse	$[gCSB/m^3]$
$S_S$	Biologisch rasch abbaubare, gelöste organische Stoffe	$[gCSB/m^3]$
$S_O$	gelöster Sauerstoff	$[-gCSB/m^3]$
$S_{NH}$	Ammoniak und Ammonium - Stickstoff	$[gN/m^3]$
$S_{NO}$	Nitrat- und Nitrit - Stickstoff	$[gN/m^3]$

Tabelle 15: Variable der Kernprozesse

Im Wesentlichen beschreibt das Modell die prinzipiellen Stoffwechselvorgänge zweier unterschiedlicher Bakterientypen (autotrophe und heterotrophe) in Belebtschlammbecken. Diesen beiden Bakterientypen fallen dabei im Rahmen des Abwasserreinigungsprozesses unterschiedliche Aufgaben zu. Die heterotrophen Bakterien zeigen zusätzlich, je nach verfahrenstechnischer Betriebsweise des gesamten Klärprozesses (aerob / anaerob), unterschiedliches Abbauverhalten. Diese spezifisch ablaufenden Prozesse und ihre verfahrenstechnischen Voraussetzungen werden im Weiteren näher erläutert. Die in Abbildung (38) dargestellten Variablen und Prozesse sind in den nachfolgenden Tabellen näher bezeichnet:

In nachfolgender Tabelle sind die verwendeten Variablen den im Abwasser betrachteten Komponenten zugeordnet [Jungblut and Möller(1998)]:

Die verwendeten Differentialgleichungen leiten sich in ihrer Grundstruktur aus Abbildung (38) ab. Einige Details einzelner Prozesse (z.B. der Hydrolyse) sind aus dem "Activated Sludge Modell 1" (ASM1) entnommen, das in einem vorigen Abschnitt bereits beschrieben wurde. Dabei wurden jedoch die Funktionen für die Prozesskinetik durch eine allgemeine Funktion  $\phi(\xi)$  angeschlossen. Die Funktion  $\phi(\xi)$  beschreibt dabei die Abhängigkeit

Abwasser- komponente	Art	Modell- variable	Prozesse im Modell
Bakterien	autotroph	$X_A$	Wachstum / Zerfall
	heterotroph	$X_H$	Wachstum / Zerfall
Organische Stoffe	leicht abbaubar	$X_S$	Abbau / Umwandlung
	schwer abbaubar	$S_S$	Abbau / Umwandlung
Stickstoff Komponenten	Ammonium	$S_{NH}$	Abbau / Umwandlung
	Nitrate	$S_{NO}$	Abbau / Umwandlung
Sauerstoff	gelöst	$S_O$	Abbau

Tabelle 16: Abwasserkomponenten im Modell

des spezifischen Prozesses von der allgemeinen Variable  $\xi$ .  $\xi$  kann dabei im Speziellen durch jede, für die Modellkinetik relevanten Variable ersetzt werden und Werte zwischen 0 und  $\infty$  annehmen. Die Funktion der Kinetik  $\phi(\xi)$  bildet dann den Wertebereich von  $\xi = [0, \infty)$  auf den Bereich  $\phi(\xi) = [0, 1)$  ab. Angenommen es hängt z.B. in den Modell-Differentialgleichungen die Prozesskinetik vom Vorhandensein von gelöstem Sauerstoff ab, so ist die Kinetik durch die Funktion  $\phi(S_O)$  bezeichnet.

Bisher, speziell im ASM1-Modell wurden die Prozesskinetiken als Monod - Terme spezifiziert. Das bedeutet, dass die Funktion  $\phi(\xi)$  folgende mathematische Form besitzt:

$$\phi(\xi) = \frac{\xi}{K_\xi + \xi} \quad (111)$$

Diese Monod-Kinetik ist in vorangehenden Abschnitten bereits ausführlich beschrieben worden. An dieser Stelle soll durch die allgemeine Schreibweise der Kinetik durch die Funktion  $\phi(\xi)$  die Tatsache unterstrichen werden, dass nicht im Allgemeinen die Monod - Kinetik verwendet werden darf. Die speziellen Voraussetzungen der Kinetiken sind im Abschnitt (3) auf ihre Grenzen hin überprüft worden.

Die im Rahmen des ASM1-Modells beschriebenen hemmenden Monod-Terme, sind in diesem Modell durch die verallgemeinerte Schreibweise  $(1 - \phi(\xi))$  dargestellt. Für die Monod-Kinetik kann leicht überprüft werden, dass durch Einsetzen die korrekte Form des hemmenden Kinetik-Terms resultiert:

Nr. aus Abb.(38)	Variable	Prozess	Reduzierte Substanz(en)	Akkumulierte Substanz(en)
1.	$\rho_3$	Aerobes Wachstum der Autotrophen	$[S_O],[S_{NH}]$	$[X_A],[S_{NO}]$
2.	$\rho_1$	Aerobes Wachstum der Heterotrophen	$[S_S],[S_O]$	$[X_H]$
3.	$\rho_2$	Anoxisches Wachstum der Heterotrophen	$[S_S],[S_{NO}]$	$[X_H]$
4.	$\rho_4$	Zerfall der Heterotrophen	$[X_H]$	$[X_S],[X_P]$
5.	$\rho_5$	Zerfall der Autotrophen	$[X_A]$	$[X_S],[X_P]$
6.	$\rho_6$	Hydrolyse	$[X_S]$	$[S_S]$

Tabelle 17: Bezeichnung der Kernprozesse

$$(1 - \phi(\xi)) = (1 - \frac{\xi}{K_\xi + \xi}) = \frac{(K_\xi + \xi) - \xi}{K_\xi + \xi} = \frac{K_\xi}{K_\xi + \xi} \quad (112)$$

Dieser Term entspricht der genannten hemmenden Kinetik im ASM1-Modell. Im hier eingeführten Kernmodell können mittels geeigneter Wahl der Kinetik durch Spezifizierung der Funktion  $\phi(\xi)$  die Differentialgleichungen des Modells an spezielle Erfordernisse angepasst werden. Daher ist es möglich, Simulationsexperimente mit unterschiedlichen Kinetikansätzen zu vergleichen.

Unter Kinetik oder Prozesskinetik ( $\phi(\xi)$ ) bezeichnet man dabei die mathematische Funktion, die den Einfluss einer Größe (z.B. des Anteils von gelöstem Sauerstoff  $S_O$  im Becken) auf die spezifische Prozessrate (z.B. Wachstumsrate) angibt.

In folgender Tabelle (Tab. 18) sind die wesentlichsten, aus der Literatur bekannten Kinetiken dargestellt. Eine genaue mathematische Beschreibung ist bereits im vorangegangenen Abschnitt (3) erfolgt und die zugehörigen Literaturreferenzen wurden in Tabelle (1) aufgeführt.

Die Modellgleichungen sind daher wie in Tabelle (19) dargestellt definiert. Diese Tabelle dient dabei zur Darstellung des gesamten Modells. Die einzelnen Teilprozesse und die verwendeten Parameter für die Prozessraten und für die Stoichiometrie sind in den nachfolgenden Abschnitten im Detail erläutert.

In den nachfolgenden Abschnitten werden nun die oben genannten Kernprozesse näher betrachtet. Dabei wird im Speziellen auf ihren biologischen

Bezeichnung	math. Form
Monod	$\phi(\xi) = \frac{\xi}{K_\xi + \xi}$
Contoir	$\phi(\xi) = \frac{\xi}{K_\xi P_d + \xi}$
Haldane	$\phi(\xi) = \frac{\xi}{K_\xi + \xi + \frac{\xi^2}{K_I}}$

Tabelle 18: Übersicht unterschiedlicher Prozesskinetiken

Hintergrund und auf ihre Funktion für den Gesamtprozess der biologischen Abwasserreinigung eingegangen.

	$\dot{X}_A$	$\dot{X}_H$	$\dot{X}_S$	$\dot{X}_P$	$\dot{S}_O$	$\dot{S}_S$	$\dot{S}_{NH}$	$\dot{S}_{NO}$	Prozess
$\rho_1$		1			$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$	$-\frac{1}{Y_H}$			$\mu_H \phi(S_S) \phi(S_O) X_H$
$\rho_2$		1				$-\frac{1}{Y_H}$		$-\frac{1-Y_H}{2.86 \cdot Y_H}$	$\mu_H \phi(S_S) (1-\phi(S_O)) \phi(S_{NO}) \eta_B X_H$
$\rho_3$	1				$-\frac{4.57-Y_A}{Y_A}$		$-\frac{1}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$\mu_A \phi(S_{NH}) \phi(S_O) X_A$
$\rho_4$		-1	$1-f_P$	$f_P$					$b_H X_H$
$\rho_5$	-1		$1-f_P$	$f_P$					$b_A X_A$
$\rho_6$			-1			1			$k_h \phi(X_S/X_H) [\phi(S_O) + \eta_h (1-\phi(S_O)) \phi(S_{NO})] X_H$

Tabelle 19: Modellgleichungen



### 8.1.1 Aerobes Wachstum der Heterotrophen

Heterotrophe Bakterien beziehen ihren Zellkohlenstoff aus organischen Verbindungen. Im Gegensatz dazu ernähren sich autotrophe Bakterien von anorganischen Substanzen. Nähere Details dazu, werden im Abschnitt über das aerobe Wachstum der Autotrophen beschrieben.

Beim aeroben Abbau von organischen Substanzen durch heterotrophe Bakterien werden energiereiche, hochmolekulare Produkte umgesetzt. Im aeroben Milieu werden die Stoffe oxidiert, d.h. unter Mitwirkung von Sauerstoff bis zu sehr energiearmen Endprodukten wie  $CO_2$  und  $H_2O$  umgewandelt. In der Abwassertechnik sind vor allem die Ernährungs- / Wachstumsvorgänge der Bakterien interessant. Diese Stoffwechselvorgänge der heterotrophen Bakterien bewirken den Abbau von Kohlenhydraten, Fetten und Eiweiß. Diese organischen Stoffe werden im Modell durch die Variable  $S_S$  beschrieben [siehe auch Abb.(39)]. Die heterotrophen Bakterien wachsen und ernähren sich durch Abbau dieser organischen Substanzen in einem aeroben Milieu, d.h. unter Vorhandensein von gelöstem Sauerstoff. Dieser Sauerstoff wird bei den Stoffwechselvorgängen veratmet.

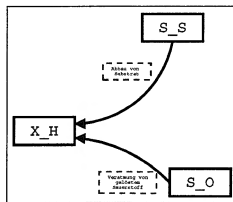


Abbildung 39: Aerober Wachstumsprozess der Heterotrophen

In Tabelle (20) ist der Prozess des aeroben Wachstums der Heterotrophen und die zugehörige Stoichiometrie dargestellt. Die Wachstumsrate hängt dabei proportional von der Anzahl heterotropher Bakterien ab und ist durch den, im System zur Verfügung stehenden, gelösten Sauerstoff  $S_O$  und vom Vorhandensein von leicht abbaubarem, organischen Substrat  $S_S$  abhängig. Ein Mangel an gelöstem Sauerstoff oder an Substrat bedeutet in dieser Prozessgleichung, dass die Wachstumsrate auf Null reduziert wird. Eine Erhöhung dieser beiden Systemvariablen führt jedoch auf Grund der Limitierung der Wachstumsrate durch die Kinetikfunktionen  $[\phi(S_O)$  und  $\phi(S_S)]$  nur zu einer maximalen Wachstumsrate von  $\mu_H X_H$ , die Wachstumsrate ist also begrenzt. Selbst ein Überangebot von Nährstoffen führt nicht zu einem unbegrenzten Wachstum.

Die stoichiometrischen Koeffizienten geben an, wie groß der Zuwachs der

Änderung einer Variable bei einem Zuwachs der Prozessrate um eine Einheit beträgt.

Das bedeutet im konkreten Fall, dass bei einer Vervielfachung der Wachstumsrate um den Faktor  $n$ , die Rate für die Abnahme von Substrat  $\dot{S}_S = n \cdot (-\frac{1}{Y_H})$  beträgt. Anders gesprochen, wenn sich der Wert der Prozessrate um 1 erhöht, beträgt der Zuwachs an der Rate des Substratabbaus  $\dot{S}_S$  genau den Wert, der in der Stoichiometriematrix angegeben ist, und zwar für  $S_S$  im konkreten Prozess:  $-\frac{1}{Y_H}$ .

Der Zuwachs an  $S_O$  beträgt dann  $-\frac{1-Y_H}{Y_H}$  und der Zuwachs der heterotrophen Bakterien selbst natürlich 1, da er bereits durch die Wachstumsrate mathematisch beschrieben ist.

Der hier vorkommende Parameter  $Y_H$  wird auch Ertrag (engl.: yield) genannt und drückt den Ertrag von Bakterienmasse durch Verbrauch von Substrat und Sauerstoff aus.

An dieser Stelle sei anzumerken, dass die Summe aller stoichiometrischen Koeffizienten eines Prozesses in der Regel Null sein muss. Diese Tatsache rührt von der Massenerhaltung der jeder Prozess unterworfen ist. Ein Zuwachs an Bakterienmasse kann nur so hoch sein, wie die Summe der Massenverluste anderer Prozessvariablen, in diesem Fall Sauerstoff und Substrat. Bei manchen Prozessen kann es vorkommen, dass Masse in eine Stoffmenge umgewandelt wird, die im Modell nicht vorkommt. Dies sind in der Regel gasförmige Stoffe (z.B.:  $N_2$ ), die aus dem Klärprozess entweichen und dadurch in der Massenbilanz nicht vorkommen. Bei den betroffenen Prozessen werden diese Korrekturfaktoren näher betrachtet.

Zu beachten ist an dieser Stelle, dass die Prozessvariablen in unterschiedlichen Einheiten angegeben sind. So ist speziell die Einheit des gelösten Sauerstoffs  $S_O$  negativ definiert (siehe Tab. 15). Dieses Vorzeichen ist bei der Aufsummierung der stoichiometrischen Parameter zu beachten.

Diese Aussagen über die Stoichiometrie ist äquivalent auf alle anderen Systemvariablen und deren zugehörigen Einträgen in der Stoichiometriematrix (siehe auch Tab. 19) anzuwenden.

	$\dot{X}_H$	$\dot{S}_O$	$\dot{S}_S$	Prozess
$\rho_1$	1	$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$	$-\frac{1}{Y_H}$	$\mu_H \phi(S_S) \phi(S_O) X_H$

Tabelle 20: Prozess: Aerobes Wachstum der Heterotrophen

### 8.1.2 Anoxisches Wachstum der Heterotrophen

Die im Bereich der Abwasserreinigung mittels Belebtschlammverfahren eingesetzten heterotrophen Bakterien haben die Eigenschaft, sich sowohl unter aeroben als auch unter anaeroben Milieubedingungen ernähren zu können. Der aerobe Ernährungsprozess wurde im vorigen Abschnitt beschrieben. Bei einem Mangel an im Abwasser gelöstem Sauerstoff ( $S_O$ ), also in anaeroben Milieu, erfolgt die für den Stoffwechsel notwendige Atmung durch eine Reduktion oxidierter N-Verbindungen (Nitrat, Nitrit) zu elementarem Stickstoff ( $N_2$ ). Verfahrenstechnisch ist es daher wichtig, im Gesamtprozess der biologischen Abwasserreinigung einen Wechsel von aeroben zu anaeroben Phasen sicherzustellen. Dies kann durch unterschiedliche Kombination von Verfahrensschritten und spezieller Beckenanordnung realisiert werden. Auf diese Frage wird im Rahmen der Simulation noch eingegangen. Der Stoffwechselvorgang der Heterotrophen unter anoxischen Bedingungen ist schematisch in folgender Abbildung (Abb. 40) dargestellt.

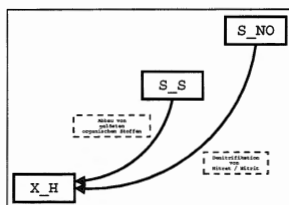


Abbildung 40: Anaerober Wachstumsprozess der Heterotrophen

	$\dot{X}_H$	$\dot{S}_S$	$\dot{S}_{NO}$	Prozess
$\rho_2$	1	$-\frac{1}{Y_H}$	$-\frac{1-Y_H}{2.86 \cdot Y_H}$	$\mu_H \phi(S_S)(1 - \phi(S_O))\phi(S_{NO})\eta_g X_H$

Tabelle 21: Prozess: Anaerobes Wachstum der Heterotrophen

Wie oben beschrieben, haben die im Bereich der Abwasserreinigung eingesetzten heterotrophen Bakterien unter anoxischen Milieubedingungen die Eigenschaft, den zur Atmung notwendigen Sauerstoff von Stickstoffverbindungen wie Nitrat und Nitrit zu beziehen. Sie reduzieren also diese anorganischen Verbindungen. In den Prozessgleichungen für die Wachstumsrate ist diese Eigenschaft durch einen Inhibitionsterm  $(1 - \phi(S_O))$  beschrieben. Dieser Term ermöglicht erst bei einem Mangel von gelöstem Sauerstoff die

Reduktion der oxidierten Stickstoffverbindungen ( $S_{NO}$ ). Diese Eigenschaft der Modellgleichung ist notwendig, da bei vorhandenem Sauerstoff, also unter aeroben Bedingungen, die Reduktion der Stickstoffverbindungen nicht stattfindet, sondern ein aerobes Wachstum der Bakterien vorliegt (vgl. Abschnitt 8.1.1). Das Ablaufen von anoxischem Wachstum heterotropher Bakterien hängt proportional von der Anzahl heterotropher Bakterien  $X_H$  ab, ist limitiert durch das Vorhandensein von oxidierten Stickstoffverbindungen ( $S_{NO}$ ) und von leicht abbaubarem, gelöstem Substrat ( $S_S$ ) und wird durch Vorhandensein von gelöstem Sauerstoff ( $S_O$ ) gehemmt.

Die stoichiometrischen Parameter sind hier ebenso zu deuten wie im Abschnitt über das aerobe Wachstum der Heterotrophen. Der Faktor 2.86 im stoichiometrischen Koeffizienten für die Prozessvariable von gelösten oxidierten Stickstoffverbindungen (Nitrat, Nitrit) beschreibt das Massenäquivalent von Sauerstoff für den entweichenden, gasförmigen Stickstoff ( $N_2$ ). Diese Korrektur ist notwendig, um konsistente Einheiten zu erhalten.

### 8.1.3 Aerobes Wachstum der Autotrophen

Wie oben bereits ausgeführt, ernähren sich autotrophe Bakterien von anorganischen Substanzen, so beziehen sie den Kohlenstoff meist aus anorganischem  $CO_2$  und verwenden Ammonium als H-Donator. Sie benötigen für ihre Stoffwechselvorgänge gelösten Sauerstoff und nitrifizieren die im Abwasser vorhandenen Stickstoffverbindungen wie Ammoniak und Ammonium zu Nitrat und Nitrit. Diese werden, wie bereits beschrieben, von heterotrophen Bakterien unter anoxischen Bedingungen durch den Prozess der Denitrifikation verwertet. Dadurch hat der Prozess der Nitrifikation durch die autotrophen Bakterien und die anschließende Denitrifikation durch die Heterotrophen eine wichtige Bedeutung für die Stickstoffelimination aus dem Abwasser. Dies ist für den Gewässerschutz und daher für die Effizienz des Klärprozesses von erheblicher Bedeutung. In nachfolgender Abbildung ist das im Modell implementierte Schema des aeroben Wachstums der autotrophen Bakterien dargestellt (Abb. 41).

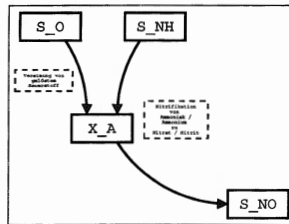


Abbildung 41: Aerober Wachstumsprozess der Autotrophen

	$\dot{X}_A$	$\dot{S}_O$	$\dot{S}_{NH}$	$\dot{S}_{NO}$	Prozess
$\rho_3$	1	$-\frac{4.57-Y_A}{Y_A}$	$-\frac{1}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$\mu_A \phi(S_{NH}) \phi(S_O) X_A$

Tabelle 22: Prozess: Aerobes Wachstum der Autotrophen

Das Ablaufen des Prozesses des aeroben Wachstums autotropher Bakterien hängt proportional von der Anzahl der Bakterien  $X_A$  ab, ist limitiert durch das Vorhandensein von reduzierten Stickstoffverbindungen wie Ammonium ( $NH_4$ ) (im Modell durch die Variable  $S_{NH}$  bezeichnet) und von gelöstem Sauerstoff ( $S_O$ ).

In Tabelle (22) ist der Prozess des aeroben Wachstums der Autotophen und die zugehörige Stoichiometrie dargestellt. Der Parameter  $Y_A$  wird, wie bereits in den vorher beschriebenen Prozessen, Ertrag (engl.: yield) genannt und drückt den Ertrag von Bakterienmasse durch Verbrauch von reduzierten Stickstoffverbindungen ( $S_{NH}$ ) und Sauerstoff ( $S_O$ ) aus. Der Faktor 4.57 im stoichiometrischen Koeffizienten für die Prozessvariable von gelöstem Sauerstoff rührt vom theoretischen Sauerstoffbedarf her, der mit der Oxidation von Ammonium zu Nitrat zusammenhängt.

Im Abwasser sind in der Regel immer Stickstoffverbindungen in ihrer reduzierten Form vorhanden. Im Bereich des kommunalen Abwassers ist das meist Harnstoff, der sich im Kanalnetz und im Bereich des Vorfluters und der Vorklärung der Kläranlage in Ammoniumverbindungen umsetzt. Dieses hohe Angebot an Stickstoff sichert die Möglichkeit der Entwicklung von Nitrifikanten, so dass eine Oxidation der reduzierten Stickstoffverbindungen im Klärprozess in der Regel möglich ist und somit erfolgt eine Stickstoffelimination aus dem Abwasser durch den Klärprozess.

#### 8.1.4 Zerfall der Heterotrophen

Die im Belebtschlammbecken vorhandenen heterotrophen Bakterien ( $X_H$ ) sterben mit einer bestimmten Rate auch wieder ab. Diese Sterberate ist proportional zu der Anzahl der Bakterien im Becken. Diese abgestorbenen Bakterien stehen prinzipiell im Reinigungsprozess wieder zu Verfügung. Es kann jedoch nur ein Teil der abgestorbenen Bakterienmasse wieder von Bakterien genutzt werden. Der nicht nutzbare Teil wird aus dem Klärprozess als nicht weiter nutzbarer, partikulärer Biomassenrest ausgespült. Ein Teil dieser partikulären Zerfallsprodukte wird im realen Klärprozess im Bereich des Nachklärbeckens abgesetzt und in anaeroben Faultürmen weiterverarbeitet. Dieser Teil des Klärprozesses ist jedoch nicht Gegenstand dieses Modells.

Bei dem nutzbaren Teil handelt es sich um langkettige und / oder komplexere Moleküle. Diese organischen Stoffe werden im Modell als schwer abbaubare Stoffe ( $X_S$ ) bezeichnet. Bevor sie von den lebenden Bakterien verwertet werden können, müssen sie durch die Hydrolyse verändert werden. Durch den Prozess der Hydrolyse [siehe Prozessbeschreibung der Hydrolyse: Abschnitt (8.1.6)], wird aus dem schwer abbaubaren organischen Substrat wiederum leicht abbaubares organisches Substrat, das dann von den Bakterien wieder für Stoffwechselvorgänge genutzt werden kann. Der schematische Prozess ist in Abbildung (42) dargestellt und die zugehörige Prozessrate und die Stöchiometrie sind in Tabelle (23) angegeben.

Der stöchiometrische Parameter  $f_P$  gibt dabei den Anteil der Bakterienmasse an, der nicht weiter verwertet werden kann und als Zerfallsprodukt der Biomasse ( $X_P$ ) aus dem Belebtschlammbecken ausgeschwemmt wird. Der restliche Anteil, also  $(1 - f_P)$  ist prinzipiell abbaubar, muss jedoch durch die Hydrolyse in leicht abbaubares Substrat übergeführt werden.

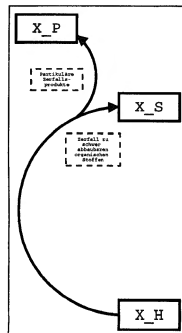


Abbildung 42: Zerfallsprozess der Heterotrophen

	$\dot{X}_H$	$\dot{X}_S$	$\dot{X}_P$	Prozess
$\rho_4$	-1	$1 - f_p$	$f_p$	$b_H X_H$

Tabelle 23: Prozess: Zerfall der Heterotrophen

### 8.1.5 Zerfall der Autotrophen

Das im vorigen Abschnitt über das Absterben oder den Zerfall der heterotrophen Bakterien Gesagte, gilt ebenso für die Autotrophen. Proportional zu ihrer Anzahl sterben sie mit einer bestimmten Sterberate ab und stehen zu einem Teil wieder als Substrat zur Verfügung. Bevor eine Verwertung durch den Stoffwechselprozess anderer Bakterien möglich ist, muss das abgestorbene Bakterium wiederum durch Hydrolyse in ein leicht abbaubares Substrat übergeführt werden.

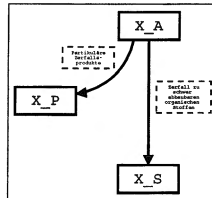


Abbildung 43: Zerfallsprozess der Autotrophen

	$\dot{X}_A$	$\dot{X}_S$	$\dot{X}_P$	Prozess
$\rho_5$	-1	$1 - f_p$	$f_p$	$b_A X_A$

Tabelle 24: Prozess: Zerfall der Autotrophen

Die schematische Darstellung ist in Abbildung (43) und die zugehörige Prozessrate und die Stoichiometrie in Tabelle (23) angegeben.

Der stoichiometrische Parameter  $f_p$  gibt dabei, wie im Fall der heterotrophen Bakterien den Anteil der Bakterienmasse an, der nicht weiter verwer-



tet werden kann und als Zerfallsprodukt der Biomasse ( $X_P$ ) aus dem Belebtschlammbecken ausgeschwemmt wird. Der restliche Anteil, also  $(1 - f_P)$  ist prinzipiell abbaubar, muss jedoch durch die Hydrolyse in leicht abbaubares Substrat übergeführt werden.

### 8.1.6 Hydrolyse

Der Prozess der Hydrolyse (siehe Abb. 44) führt schwer abbaubares, meist partikulär vorliegendes Substrat in leicht abbaubares, meist gelöstes Substrat über. Wie in den beiden vorangehenden Abschnitten über den Zerfall von Bakterien beschrieben, handelt es sich bei schwer abbaubarem Substrat um abgestorbene Biomasse oder andere komplexe Verbindungen, die nicht direkt von den Bakterien verwertet werden können. Durch den Prozess der Hydrolyse werden diese organischen Bestandteile wieder für andere Bakterien verwertbar. Bei der Hydrolyse werden also hochmolekulare Stoffe durch Enzyme in kleinere, leichter verwertbare Bruchstücke übergeführt. Diese dann leicht abbaubaren organischen Stoffe können durch Stoffwechselvorgänge anderer Bakterien verwertet werden.

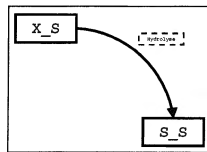


Abbildung 44: Hydrolyse biologisch langsam abbaubarer Stoffe

	$\dot{X}_S$	$\dot{S}_S$	Prozess
$\rho_6$	-1	1	$k_h \phi \left( \frac{X_S}{X_H} \right) [\phi(S_O) + \eta_h (1 - \phi(S_O)) \phi(S_{NO})] X_H$

Tabelle 25: Prozess: Hydrolyse

Die Hydrolyse ist also ein enzymatischer Prozess, der in der Regel an der Oberfläche des Bakteriums abläuft. Für den Ablauf der enzymatischen Reaktion des Aufspaltens von schwer abbaubaren Makromolekülen, ist also ein direkter Kontakt des Makromoleküls mit dem Bakterium notwendig, das das spaltende Enzym aussendet. Es wird angenommen, dass ausschließlich heterotrophe Bakterien zur Hydrolyse komplexer organischer Verbindungen

fähig sind. Zusätzlich wurde festgestellt, dass der Hydrolyseprozess unter anoxischen oder denitrifizierenden Bedingungen langsamer abläuft, als unter aeroben Milieubedingungen der heterotrophen Bakterien [Henze et al. (1994)]. Die in Tabelle (25) angegebene Prozessrate wird im Folgenden näher erläutert.

Im aeroben Fall überwiegt bei der Hydrolyse der Teil:  $k_h \phi(\frac{X_s}{X_H}) \phi(S_O) X_H$ .

In diesem Fall hängt die Prozessrate also limitierend vom vorhandenen Sauerstoff und vom oberflächen-limitierenden Faktor  $\phi(\frac{X_s}{X_H})$  ab. Letzterer Faktor beschreibt dabei, dass die Bakterienoberfläche an die sich die komplexen, organischen Verbindungen anlagern können, begrenzt ist. Das bedeutet, bei einer Zunahme der schwer, abbaubaren organischen Stoffe ( $X_S$ ) ist die Prozessrate des Hydrolyseprozesses durch die vorhandene Bakterienoberfläche (die Proportional zur Bakterienanzahl ist) begrenzt. Der funktionale Verlauf entspricht der Monod-Kinetik, d.h. wenn das Substrat gleich Null ( $X_S = 0$ ) ist, dann ist auch die Prozessrate gleich Null. Ist jedoch ein Überschuss an Substrat vorhanden ( $X_S \gg$ ), dann ist die Prozessrate limitiert, in der Realität durch die verfügbare freie Oberfläche zum Anlagern an Bakterien.

Arbeiten die heterotrophen Bakterien hingegen in einem anaeroben (anoxischen) Milieu, so überwiegt folgender Teil der Prozessrate:  $k_h \phi(\frac{X_s}{X_H}) \eta_h (1 - \phi(S_O)) \phi(S_{NO}) X_H$ .

Hier ist ebenfalls wieder der oberflächen-limitierende Faktor vorhanden, zusätzlich jedoch ein limitierender Faktor für das Nitrat/Nitrit ( $S_{NO}$ ) und ein hemmender Faktor für den Sauerstoff. Der Parameter  $\eta_h$  ist ein Korrekturfaktor für die langsamere Reaktionsgeschwindigkeit unter anoxischen Bedingungen.

## 9 Möglichkeiten systematischer Erweiterung des Kernmodells

In diesem Abschnitt werden nun prinzipielle Möglichkeiten beschrieben, wie das Kernmodell der biologischen Abwasserreinigungsprozesse erweitert werden kann. Die hier ausgeführte Erweiterung ist rein theoretisch gewählt und hat primär keinen konkreten realen Hintergrund. Dieser Abschnitt zeigt nur die methodische Vorgangsweise, wie das Kernmodell, ausgehend von der Aufgabe, den Abbau einer speziellen Substanz zu beschreiben, modifiziert werden kann.

Es wurde dabei angenommen, dass im Bereich der biologischen Abwasserreinigung spezielle Substanzen von Interesse sein können, die zu einem späteren Zeitpunkt ins Modell aufgenommen werden sollen. Die dafür notwendige Änderung des Modells soll hier näher erläutert werden.

Um eine verständliche Beschreibung zu erreichen, wurde eine spezielle Abbaukette angenommen, an Hand derer der Modellbildungsprozess verdeutlicht werden soll. Es wird nochmals darauf hingewiesen, dass ein realer Zusammenhang zu konkreten bestehenden Problemen nicht vorliegt. Die Annahmen sind jedoch prinzipiell realistisch gewählt, so dass für eine spezielle Substanz die hier verwendete Abbaukette durchaus real sein kann.

Zur Erweiterung des Modells müssen prinzipiell folgende Schritte durchlaufen werden:

- Bestimmung der Abbaukette inklusiver aller Derivate
- Bestimmung aller Prozessraten und der limitierenden Faktoren (Stoffgruppen) der Abbaukette
- Ermittlung des geschwindigkeitsbestimmenden Prozesses
- Mathematische Beschreibung des reduzierten Prozesses
- Bestimmung der Wechselwirkungen des reduzierten Prozesses mit anderen Stoffgruppen im Modell
- Bestimmung der Kinetik und der Parameter der Prozessrate und der stochiometrischen Koeffizienten der Wechselwirkungen
- Erweiterung des Differentialgleichungssystems um die neuen Prozesse und Stoffgrößen

## 9.1 Beschreibung der allgemeinen Strukturen zusätzlicher Abbauketten

Im Folgenden wird angenommen, dass im zufließenden Abwasser eine spezielle Substanz enthalten ist, deren Abbau durch das Modell beschrieben werden soll.

Die erste wichtige Information ist die für das Modell relevante Abbaukette dieser Substanz. Das bedeutet, die genauen biochemischen Verfahrensschritte der Umwandlung von der im Abwasser enthaltenen Substanz bis zu einem vom biologischen System nutzbaren Derivat, müssen bekannt sein.

In folgender Abbildung [Abb. (45)] ist eine allgemeine Abbaukette und ihre Reduktion auf den für das Modell relevanten Schritt schematisiert.

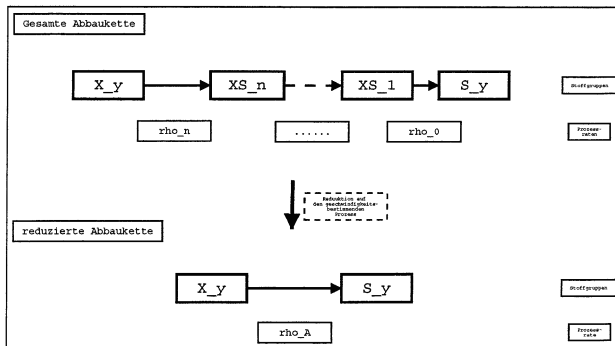


Abbildung 45: Reduktion einer theoretischen Abbaukette

Der Stoff  $X_y$  ist dabei der interessierende Stoff im Abwasser und wird über die dargestellten Zwischenschritte ( $[XS]_n, [XS]_{n-1}, \dots [XS]_1$ ) zum Stoff  $S_y$  umgewandelt, der dann von einer speziellen Bakterienkultur verwertet werden kann. Die genauen ablaufenden Prozesse der Umwandlung, die sie beeinflussenden Stoffgrößen und Milieubedingungen, und die zu jedem Teilschritt gehörende Prozessrate ( $\rho_i$  mit  $i = 0..n$ ) müssen im Vorfeld bekannt sein. Diese Informationen können in der Realität für einen bekannten Stoff in einem biochemischen Labor untersucht werden.

Für das Modell ist nun der langsamste, in der Kette ablaufende Prozess relevant. Wie bereits im Kapitel über das Flaschenhalsprinzip (Abschnitt 1.6) beschrieben, kann die Abbaukette auf diesen geschwindigkeitsbestimmenden Prozess reduziert werden [Abb. (45)].

Ist nun der relevante Prozess spezifiziert, dann kann der biologische Abbauprozess des Stoffes  $X_y$  in das Modell integriert werden. Dazu muss bekannt sein, welche Bakterienart für den Abbau verantwortlich ist. Handelt es sich dabei nicht um eine Bakterienart, die bereits als Stoffgröße im Modell vorhanden ist, muss für diese Bakterienkonzentration eine neue Variable aufgenommen werden. Zusätzlich müssen alle benötigten sonstigen Stoffgruppen und die Zerfallsprodukte bestimmt werden. Sie müssen, sofern sie nicht bereits vorhanden sind, ebenfalls als Stoffgrößen (Variablen) ins Modell aufgenommen werden.

In nachfolgender Abbildung [Abb. (46)] ist ein angenommener Prozess für den Abbau eine Substanz durch eine neue Bakterienkultur schematisch dargestellt.

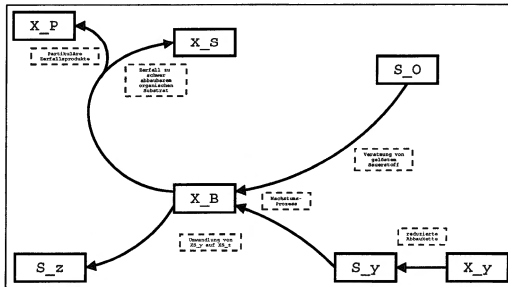


Abbildung 46: Darstellung einer theoretischen Abbaukette

Es wird dabei angenommen, dass es sich um einen aeroben Abbau handelt, bei dem also gelöster Sauerstoff verbraucht wird. Das Endderivat der vorhin definierten Abbaukette ( $S_y$ ) wird im Rahmen der Stoffwechselaktivität der speziellen Bakterienkultur ( $X_B$ ) in das Produkt  $S_z$  umgewandelt. Beim Absterben des Bakteriums  $X_B$  zerfällt es zu einem Teil in das inerte Produkt  $X_P$  und zu einem anderen Teil in schwer abbaubares organisches Substrat  $X_S$ . Dieser Teil kann nach dem Ablaufen des Prozesses der Hydrolyse (Prozess  $\rho_6$  im Kernmodell) wieder in den bereits bestehenden Abbaukreislauf eingeschleust werden.

Eine Integration dieses theoretischen Prozesses in das Kernmodell (siehe Kapitel 8) ist in Abbildung (47) verdeutlicht. Diese Abbildung zeigt nun die schematische Darstellung des neuen, erweiterten Modells.

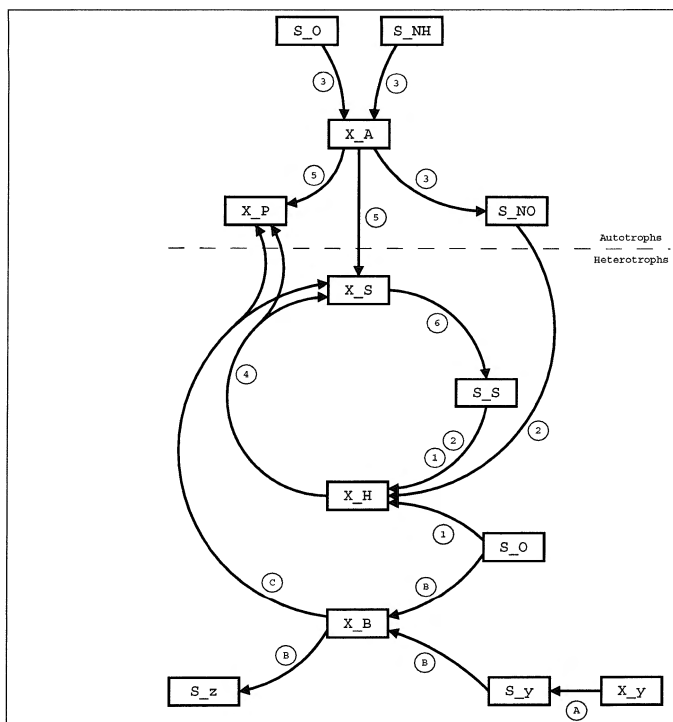


Abbildung 47: Darstellung des erweiterten Kernmodells

## 9.2 Beschreibung der Integration allgemeiner Abbauketten ins Kernmodell

Nachdem nun der reduzierte Prozess der Abbaukette ermittelt wurde und die relevanten Stoffgrößen und Kinetiken spezifiziert wurden, können nun die neuen Prozesse des erweiterten Modells definiert werden.

Die zusätzlichen Prozesse des erweiterten Modells sind dazu in Tabelle (17) beschrieben.

Nr. aus Abb.(47)	Variable	Prozess	Reduzierte Substanz(en)	Akkumulierte Substanz(en)
A	$\rho_A$	"Hydrolyse" (reduzierte Abbaukette)	$[X_y]$	$[S_y]$
B	$\rho_B$	Aerobes Wachstum der Bakterien	$[S_y], [S_o]$	$[X_B], [S_z]$
C	$\rho_C$	Zerfall der Bakterien	$[X_B]$	$[X_S], [X_P]$

Tabelle 26: Erweiterung der Kernprozesse

Die Tabelle (19) der Modellgleichungen muss also um diese drei Prozesse ( $\rho_A$ ,  $\rho_B$ ,  $\rho_C$ ) und um die vier neuen Stoffgrößen ( $X_B$ ,  $X_y$ ,  $S_y$ ,  $S_z$ ) erweitert werden.

Im Folgenden sind die Differentialgleichungen in der üblichen Matrixschreibweise (vergleiche auch [Henze et al.(1986)]) dargestellt. Die Prozessraten sind hier äquivalent zu den bereits bekannten Prozessraten der autotrophen Bakterien angenommen und mit der, aus dem vorigen Abschnitt bekannten, verallgemeinerten Kinetikfunktion  $\phi(\cdot)$  angeschlossen.

Um einige konkrete Spezifikationen zu ermöglichen, wurde angenommen, die reduzierte Abbaukette stellt den Prozess der Hydrolyse dar. Diese Annahme muss selbstverständlich nicht für jeden Prozess gelten, da sie vom speziellen geschwindigkeitsbestimmenden Prozess abhängt.

In der Praxis ist es oft der Prozess der Hydrolyse, da dieser Prozess meist langsam abläuft. Im Allgemeinen muss die Prozessrate jedoch an die spezielle Abbaukette und den speziellen Abbauprozess angepasst werden.

Dieser Abschnitt soll jedoch nur theoretisch die Erweiterung des Modells darstellen und so wurde auf den realen Bezug an dieser Stelle nur geringer Wert gelegt. Der Bezug zur Realität kann nur für ein konkretes Problem

und nach biochemischer Untersuchung der beteiligten Stoffgrößen und Abbaukinetiken formalisiert und somit im Modell implementiert werden.

$\dot{X}_A$	$\dot{X}_H$	$\dot{X}_S$	$\dot{X}_P$	$\dot{S}_O$	$\dot{S}_S$	$\dot{S}_{NH}$	$\dot{S}_{NO}$	$\dot{X}_B$	$\dot{X}_y$	$\dot{S}_y$	$\dot{S}_z$	Prozess
	1			$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$	$-\frac{1}{Y_H}$							$\rho_1$
	1				$-\frac{1}{Y_H}$		$-\frac{1-Y_H}{2.86 \cdot Y_H}$					$\rho_2$
1				$-\frac{4.57-Y_A}{Y_A}$		$-\frac{1}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$					$\rho_3$
	-1	$1-f_p$	$f_p$									$\rho_4$
-1		$1-f_p$	$f_p$									$\rho_5$
		-1			1							$\rho_6$
									-1	1		$\rho_A$
				$-\frac{4.57-Y_B}{Y_B}$				1		$-\frac{1}{Y_B}$	$\frac{1}{Y_B}$	$\rho_B$
		$1-f_p$	$f_p$					-1				$\rho_C$

Tabelle 27: erweiterte Modellgleichungen

Die in den Modellgleichungen verwendeten Prozessraten sind für die bereits bekannten Prozesse ( $\rho_1 \dots \rho_6$ ) in Tabelle (19) dargestellt. Für die Prozesse der Modellerweiterung wird angenommen, dass die prinzipielle Kinetik der neuen Prozesse ähnlich den vergleichbaren Prozessen des Kernmodells ist, wie im Falle der bereits bekannten Bakterien, der Autotrophen und der Heterotrophen. Weiters wird angenommen, dass die reduzierte Abbaukette im Wesentlichen einen Prozess der Hydrolyse beschreibt.

An dieser Stelle soll noch erwähnt werden, dass wenn die Hydrolyse mit Hilfe der gleichen Bakterien erfolgt, die für die Hydrolyse des schwer abbaubaren organischen Substrates  $X_S$  zuständig sind, ein zusätzlicher Faktor ( $X_y/X_S$ ) notwendig ist, der die Konkurrenzsituation beschreibt. Die Pro-



zessrate ändert sich dann also zu  $\rho'_A = (X_y/X_S) \cdot \rho_A$ .

In dem hier angenommen Fall ist jedoch eine andere Bakterienkultur für den Hydrolyseprozess verantwortlich und somit kann dieser Faktor entfallen. Wie bereits gesagt, ist bezüglich der Modellerweiterung eine Anpassung an reale Gegebenheiten unbedingt erforderlich, da in diesem Kapitel nur die formale Vorgangsweise vorgestellt wird.

Die Prozessraten für die neuen Prozesse sind also unter Verwendung der eben beschriebenen Annahmen in Tabelle (28) dargestellt.

Nr. aus Abb.(47)	Variable	Prozess	Prozessraten
A	$\rho_A$	"Hydrolyse"	$k_h \phi(X_S/X_B) [\phi(S_O) + \eta_h (1 - \phi(S_O)) \phi(S_{NO})] X_B$
B	$\rho_B$	Aerobes Wachstum der Bakterien	$\mu_B \phi(S_y) \phi(S_O) X_B$
C	$\rho_C$	Zerfall der Bakterien	$b_B X_B$

Tabelle 28: Prozessraten des erweiterten Kernmodells

Die verwendeten stoichiometrischen Koeffizienten wurden analog zu denen im Kernmodell definiert. Sie sind bei den Beschreibungen der einzelnen Prozesse des Kernmodells genauer erläutert. An dieser Stelle dienen sie auch nur der Vollständigkeit.

Mit der hier dargestellten Information um die Abbauketten, die Abbauprozesse, die Prozessraten und -kinetiken und die stoichiometrischen Koeffizienten sind die Modellgleichungen als Differentialgleichungssystem hinreichend spezifiziert. Die Differentialgleichungen sind in der, in IAWQ-Publikationen üblichen Matrixschreibweise in Tabelle (27) und die zugehörigen Raten der erweiterten Prozesse in Tabelle (28) angeschrieben.

## 10 Hydraulische Modelle biologischer Abwasserreinigungsanlagen

In diesem Abschnitt wird das hydraulische Modell biologischer Abwasserreinigungsverfahren beschrieben. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der mathematischen Beschreibung der unterschiedlichen Stoffströme im Modell. Sämtliche Volumenströme und die vom Strom transportierten Konzentrationen der Stoffgrößen unterliegen der Massenerhaltung und der Konstanz des Volumens.

In diesem Kapitel werden die Differentialgleichungen der Hydraulik von Abwasserreinigungsanlagen hergeleitet. Es handelt sich dabei um folgende zwei Anlagentypen:

- Abwasserreinigungsanlage mit einem Belebungsbecken
- Abwasserreinigungsanlage mit zwei Belebungsbecken

Die daraus resultierenden Modelle für die Volumenströme und die Konzentrationen sind im Folgenden für jeden Anlagentyp dargestellt.

### 10.1 Abwasserreinigungsanlage mit einem Belebungsbecken

Wie im Kapitel über die Grundlagen biologischer Abwasserreinigungsverfahren dargestellt, kann in einem Becken sowohl Nitrifikation als auch Denitrifikation durchgeführt werden. Das hydraulische Modell dieser Anlage mit nur einem Belebungsbecken ist hier im Folgenden dargestellt.

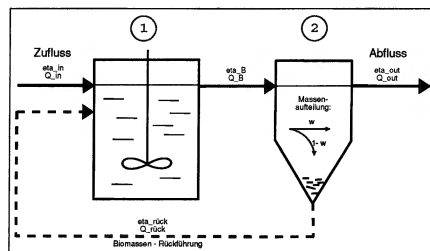


Abbildung 48: Darstellung der Hydraulik eines Belebungsbeckens mit Nachklärung

In Tabelle (29) werden die verwendeten Bezeichnungen definiert.

Variable	Beschreibung	Einheit
$\vec{\eta}_{in}$	Konzentrationen im Zulauf	$[gCSB/m^3]_i$
$\vec{\eta}_B$	Konzentrationen im Becken	$[gCSB/m^3]_i$
$\vec{\eta}_{out}$	Konzentrationen im Ablauf	$[gCSB/m^3]_i$
$\vec{\eta}_{rück}$	Konzentrationen im Rücklauf	$[gCSB/m^3]_i$
$Q_{in}$	Volumenstrom des Zulaufs	$[m^3/d]$
$Q_B$	Volumenstrom des Beckenablaufs	$[m^3/d]$
$Q_{out}$	Volumenstrom des Ablaufs	$[m^3/d]$
$Q_{rück}$	Volumenstrom des Rücklaufs	$[m^3/d]$
$V_i$	Volumen des Beckens $i$	$[m^3]$

Tabelle 29: Variable des hydraulischen Modells

Der Konzentrationsvektor  $\vec{\eta}_x$  besteht dabei aus den Konzentrationen aller im Modell betrachteter Stoffgrößen. Für den Fall des Kernmodells ist  $\vec{\eta}$  wie folgt definiert:

$$\vec{\eta} = (X_A, X_H, X_S, X_P, S_S, S_O, S_{NH}, S_{NO})^T \quad (113)$$

### 10.1.1 Hydraulik des Belebungsbeckens

Das Belebungsbecken ist speziell durch die Tatsache gekennzeichnet, dass durch die biologischen Prozesse im Becken eine Umwandlung der Stoffgrößen erfolgt. Aus diesem Grund gilt für das in Abbildung (49) hydraulische Teilsystem des Belebungsbeckens nicht die komponentenweise Massenerhaltung. Da durch die biologischen Stoffwechselvorgänge im Becken Umwandlungen der Stoffgrößen erfolgt, muss die abfließende Masse einer Stoffgruppe nicht der Summe der Masse der Zuflüsse der betrachteten Stoffgröße entsprechen. Die Massenerhaltung gilt jedoch für die kummulierte Gesamtmasse aller Stoffgrößen.

#### Massenerhaltung

Die Stoffwechselvorgänge im Becken erfüllen die Massenerhaltung für die Summe der Stoffgrößen, jedoch nicht für jede einzelne Substanz. Die Summe der Masse aller zufließenden Stoffgrößen ist also gleich der Masse der Ab-

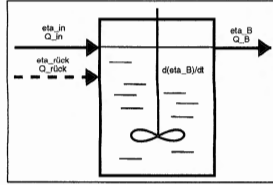


Abbildung 49: Darstellung der Hydraulik eines Belebungsbeckens (Teilsystem 1)

fließenden.

Die Massenbilanz gilt also nur für die kummulierte Gesamtmasse aller Stoffgrößen im gesamten Zeitintervall  $[t_0..t]$ :

$$\int_{t_0}^t \sum_i (\eta_{in})_i(\tau) d\tau + \int_{t_0}^t \sum_i (\eta_{rück})_i(\tau) d\tau - \int_{t_0}^t \sum_i (\eta_B)_i(\tau) d\tau = 0 \quad (114)$$

### Erhaltung des Volumens

Da das Volumen des Belebtschlammbeckens begrenzt ist, können sich im System keine Volumina akkumulieren. Es gilt also, dass in jedem Zeitintervall die Summe der zuströmenden Volumina gleich der Summe der Abfließenden ist. Das ist unabhängig von den Stoffwechselvorgängen im Becken.

$$Q_{in} + Q_{rück} - Q_B = 0 \quad (115)$$

Nach einer Normierung mit dem Beckenvolumen  $V$  folgt auch für die Verdünnungsraten  $D = Q/V$ :

$$D_{in} + D_{rück} - D_B = 0 \quad (116)$$

### Resultierende Hydraulik des Belebungsbeckens

Die Differentialgleichung für die Veränderung der Stoffgrößenkonzentrationen im durchflossenen Belebungsbecken  $B$  kann folglich angeschrieben werden.

In jedem Zeitintervall  $dt$  gilt für die Massenänderung  $dm_B$  im Becken:

$$\begin{aligned}
dm_B &= dm_{in} + dm_{rück} + dm_{(StW)} - dm_{out} \\
d\vec{\eta}_B V &= \vec{\eta}_{in} Q_{in} dt + \vec{\eta}_{rück} Q_{rück} dt + \left( \frac{d\vec{\eta}_B}{dt} \right)_{StW} V dt - \vec{\eta}_B Q_B dt \\
\frac{d\vec{\eta}_B}{dt} &= \vec{\eta}_{in} \frac{Q_{in}}{V} + \vec{\eta}_{rück} \frac{Q_{rück}}{V} + \left( \frac{d\vec{\eta}_B}{dt} \right)_{StW} - \vec{\eta}_B \frac{Q_B}{V} \\
\frac{d\vec{\eta}_B}{dt} &= \vec{\eta}_{in} \frac{Q_{in}}{V} + \vec{\eta}_{rück} \frac{Q_{rück}}{V} + \left( \frac{d\vec{\eta}_B}{dt} \right)_{StW} - \vec{\eta}_B \frac{Q_{in} + Q_{rück}}{V} \quad (117)
\end{aligned}$$

Mit der Definition der Verdünnungsrate  $D = Q/V$  folgt:

$$\begin{aligned}
\frac{d\vec{\eta}_B}{dt} &= \vec{\eta}_{in} D_{in} + \vec{\eta}_{rück} D_{rück} + \left( \frac{d\vec{\eta}_B}{dt} \right)_{StW} - \vec{\eta}_B D_B \\
\frac{d\vec{\eta}_B}{dt} &= \vec{\eta}_{in} D_{in} + \vec{\eta}_{rück} D_{rück} + \left( \frac{d\vec{\eta}_B}{dt} \right)_{StW} - \vec{\eta}_B (D_{in} + D_{rück}) \quad (118)
\end{aligned}$$

### 10.1.2 Hydraulik des Nachklärbeckens

Das Nachklärbecken ist hier als einfacher Massenseparator modelliert. Es wird dabei angenommen, dass die ins Nachklärbecken einströmende Masse in zwei Teilströme aufgespalten wird.

Die Aufspaltung wird für jede Stoffgröße einzeln angegeben, d.h. es wird für jede Komponente des Vektors der Stoffgrößenkonzentrationen  $(\eta)_i$  ein Massenrückkopplungsfaktor  $(w)_i$  definiert. Der Rückkopplungsfaktor  $(w)_i$  gibt also an, welcher Massenanteil dieser Stoffgröße sich im Nachklärbecken absetzt und damit rückgepumpt wird.  $(w)_i$  muss für jede Stoffgröße aus dem Intervall  $[0,1]$  gewählt werden.

Der Massenanteil der nicht rückgepumpt wird und somit aus dem Nachklärbecken ausgespült wird, wird somit durch den Faktor  $1 - (w)_i$  wiederum für jede Stoffgröße angegeben.

Diese Separation jeder einzelnen Komponente des Massenstroms durch den Massenrückkopplungsfaktor  $(w)_i$  bietet für die Flexibilität der Modellhydraulik große Vorteile. So können manche Stoffgrößen das Nachklärbecken unverändert passieren, während andere zur Gänze abgesetzt und ins Belebungsbecken rückgepumpt werden können. Das ermöglicht die Anpassung des Nachklärbeckens an viele unterschiedliche Modellanforderung. So kann durch die vollständige Rückführung einer Stoffgröße in das Belebungsbecken diese Komponente im System zurückgehalten werden. Das entspricht dem

Spezialfall eines Membran-Bio-Reaktors, bei dem durch eine spezielle Membran die Bakterien im System zurückgehalten werden. Das führt zu einer erhöhten Bakterienkonzentration im Becken und zusätzlich zu einer hohen Verweilzeit, die komplexe Abbauprozesse ermöglichen soll.

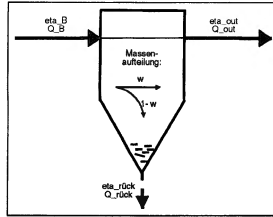


Abbildung 50: Darstellung der Hydraulik eines Nachklärbeckens (Teilsystem 2)

### Massenerhaltung

Im Gegensatz zum Belebungsbecken laufen im idealen Nachklärbecken keine Stoffwechselprozesse ab. Es kommt daher nicht zur Umwandlung von Stoffgrößen. Daher muss die Massenerhaltung im Modell des idealen Nachklärbeckens für jede Stoffgröße erfüllt sein. Die zuströmende Masse jeder Stoffgröße muss also gleich der abströmenden Masse sein.

$$(\Delta m)_+ = (\Delta m)_- \quad \text{mit } \lim_{\Delta t \rightarrow 0} (\Delta m) : \quad (119)$$

$$\vec{\eta}_B Q_B dt = \vec{\eta}_{out} Q_{out} dt + \vec{\eta}_{rück} Q_{rück} dt \quad (120)$$

Unter Verwendung der Definition der Massenseparation folgt<sup>1</sup>:

$$\vec{\eta}_B Q_B dt = \vec{w} * \vec{\eta}_B Q_B dt + (\vec{1} - \vec{w}) * \vec{\eta}_B Q_B dt \quad (121)$$

### Erhaltung des Volumens

Das Volumen des Nachklärbeckens ist ebenfalls begrenzt und somit können sich keine Volumina über die Zeit akkumulieren. Es muss daher in jedem

<sup>1</sup>Der mathematische Operator  $(u * v)$  bedeutet, dass die Vektoren  $u$  und  $v$  komponentenweise multipliziert werden müssen, also  $(u_1 v_1, u_2 v_2, \dots, u_n v_n)$

Zeitintervall die Summe der zuströmenden Volumina gleich der Summe der Abströmenden sein. Unter Verwendung von Gleichung (115) folgt:

$$\begin{aligned}
 Q_B - Q_{out} - Q_{rück} &= 0 \\
 (Q_{in} + Q_{rück}) - Q_{out} - Q_{rück} &= 0 \\
 Q_{out} &= Q_{in}
 \end{aligned} \tag{122}$$

### Resultierende Hydraulik des Nachklärbeckens

Aus den beiden Beziehungen der Massenerhaltung und der Erhaltung des Volumens folgt für die beiden Stoffgrößenkonzentrationen ( $\vec{\eta}_{out}, \vec{\eta}_{rück}$ ) der Ausgangsströme des Nachklärbeckens:

$$\begin{aligned}
 \vec{\eta}_{out} Q_{out} &= (\vec{1} - \vec{w}) \star \vec{\eta}_B Q_B \\
 \vec{\eta}_{out} &= (\vec{1} - \vec{w}) \star \vec{\eta}_B \frac{Q_B}{Q_{out}} \\
 \vec{\eta}_{out} &= (\vec{1} - \vec{w}) \star \vec{\eta}_B \frac{Q_{in} + Q_{rück}}{Q_{in}}
 \end{aligned} \tag{123}$$

$$\begin{aligned}
 \vec{\eta}_{rück} Q_{rück} &= \vec{w} \star \vec{\eta}_B Q_B \\
 \vec{\eta}_{rück} &= \vec{w} \star \vec{\eta}_B \frac{Q_B}{Q_{rück}} \\
 \vec{\eta}_{rück} &= \vec{w} \star \vec{\eta}_B \frac{Q_{in} + Q_{rück}}{Q_{rück}}
 \end{aligned} \tag{124}$$

Die Volumenströme ( $Q_{in}, Q_{rück}$ ) und die Zuflusskonzentration ( $\vec{\eta}_{in}$ ) werden exogen vorgegeben. Der Vektor des Massenseparators ( $\vec{w}$ ) des Nachklärbeckens ist zusätzlich als Modellparameter zu wählen. Durch die Spezifizierung der Ausfluss- und Rücklaufkonzentrationen ( $\vec{\eta}_{out}, \vec{\eta}_{rück}$ ) durch obige Beziehungen ist somit die gesamte Hydraulik des Modells spezifiziert.

### 10.1.3 Differentialgleichung der gesamten Hydraulik

Hier sind nun die Ergebnisse der gesamten Hydraulik für die Abwasserreinigungsanlage mit einem Belebungsbecken und einem Nachklärbecken zusammenfassend dargestellt.

Die Entwicklung der Konzentrationen im Becken wird durch folgende Gleichung beschrieben [siehe auch Gl. (117)]:

$$\frac{d\vec{\eta}_B}{dt} = \vec{\eta}_{in} \frac{Q_{in}}{V} + \vec{\eta}_{rück} \frac{Q_{rück}}{V} + \left( \frac{d\vec{\eta}_B}{dt} \right)_{StW} - \vec{\eta}_B \frac{Q_{in} + Q_{rück}}{V} \quad (125)$$

Aus Gleichung (125) für  $\vec{\eta}_{rück}$ ,

$$\vec{\eta}_{rück} = \vec{w} \star \vec{\eta}_B \frac{Q_{in} + Q_{rück}}{Q_{rück}} \quad (126)$$

resultierend aus der Hydraulik des Nachklärbeckens, folgt für die Beschreibung der Konzentrationen im Belebungsbecken folgende finale Differentialgleichung:

$$\frac{d\vec{\eta}_B}{dt} = \vec{\eta}_{in} \frac{Q_{in}}{V} + \vec{w} \star \vec{\eta}_B \frac{Q_{in} + Q_{rück}}{V} + \left( \frac{d\vec{\eta}_B}{dt} \right)_{StW} - \vec{\eta}_B \frac{Q_{in} + Q_{rück}}{V} \quad (127)$$

Aus der Lösung für  $\vec{\eta}_B$  können mittels folgendem Zusammenhang [siehe Gl. (123)] die Konzentrationen im Ausfluss der Anlage berechnet werden:

$$\vec{\eta}_{out} = (\vec{1} - \vec{w}) \star \vec{\eta}_B \frac{Q_{in} + Q_{rück}}{Q_{in}} \quad (128)$$

Diese Gleichungen wurden zur Durchführung einer Simulationsstudie implementiert. Die Studie und ihre Ergebnisse sind im nachfolgenden Kapitel dargestellt.



## 10.2 Abwasserreinigungsanlage mit zwei Belebungsbecken

Es wird nun das im vorigen Abschnitt beschriebene System mit einem Belebungsbecken um ein weiteres Belebungsbecken erweitert. Das ermöglicht im Betrieb einer Abwasserreinigungsanlage die Nitrifikation und die Denitrifikation in zwei unterschiedlichen Becken zu betreiben [siehe Abb. (51)]. Wie bereits in den Grundlagenkapiteln beschrieben, benötigen diese Prozesse unterschiedliche Milieubedingungen. Somit wird in der Regel aus Gründen der besseren Performance ein anoxisch betriebenes Denitrifikationsbecken dem eigentlichen aeroben Belebungsbecken vorgeschaltet. Das im Belebungsbecken erzeugte Nitrat wird durch die Rückführung ins Denitrifikationsbecken rückgekoppelt. In der Praxis wird dies durch eine eigene Nitrat-Rückführung implementiert; auf Grund des flexiblen Modells des Nachklärbeckens kann diese Funktion durch Anpassung der entsprechenden Komponente des Massenseparators  $\tilde{w}$  abgebildet werden. Eine separate Modellierung der Nitrat-Rückkopplung ist somit im Modell nicht explizit notwendig.

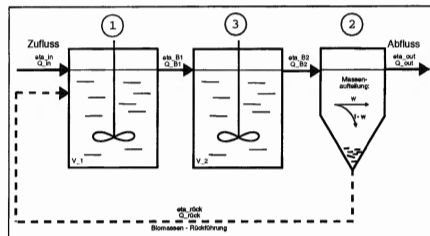


Abbildung 51: Darstellung der Hydraulik eines Systems mit zwei Belebungsbecken mit Nachklärung

Im Folgenden wird die Hydraulik des mittleren Belebungsbeckens näher beschrieben. Die Hydraulik des erst-geschalteten Beckens und des Nachklärbeckens wurden bereits im vorigen Abschnitt beschrieben.

### 10.2.1 Hydraulik des zusätzlichen Belebungsbeckens

Das zusätzliche Belebungsbecken besitzt im hier definierten Modell nur einen Zulauf und einen Ablauf (52). Auf Grund der biologischen Stoffwechselprozesse im Becken gilt auch hier nicht die komponentenweise Massenerhaltung.

#### Massenerhaltung

Die Massenerhaltung gilt jedoch, wie im vorigen Abschnitt für das erste

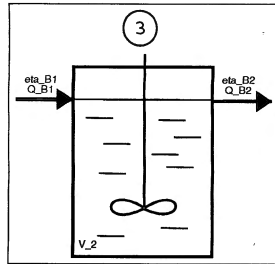


Abbildung 52: Darstellung der Hydraulik des zweiten Belebungsbeckens (Teilsystem 3)

Belebungsbecken dargestellt, für die kummulierte Gesamtmasse aller Stoffgrößen.

#### Erhaltung des Volumens

Da das Volumen des Belebtschlammbeckens begrenzt ist, können sich im System keine Volumina akkumulieren. Es gilt also, dass in jedem Zeitintervall die Summe der zuströmenden Volumina gleich der Summe der Abfließenden ist. Das ist unabhängig den Stoffwechselvorgängen im Becken.

$$Q_{B1} - Q_{B2} = 0 \quad (129)$$

#### Hydraulik des zusätzlichen Belebungsbeckens (Teilsystem 3)

Die Differentialgleichung für die Veränderung der Stoffgrößenkonzentrationen im durchflossenen Belebungsbecken  $B2$  kann folglich unter Verwendung von Gleichung (115) und (129) angeschrieben werden.

In jedem Zeitintervall  $dt$  gilt für die Massenänderung  $dm_B$  im Becken:

$$\begin{aligned}
dm_B &= dm_{B1} + dm_{(StW)} - dm_{B2} \\
d\vec{\eta}_{B2} V_2 &= \vec{\eta}_{B1} Q_{B1} dt + \left( \frac{d\vec{\eta}_{B2}}{dt} \right)_{StW} V_2 dt - \vec{\eta}_{B2} Q_{B2} dt \\
\frac{d\vec{\eta}_{B2}}{dt} &= \vec{\eta}_{B1} \frac{Q_{B1}}{V_2} + \left( \frac{d\vec{\eta}_{B2}}{dt} \right)_{StW} - \vec{\eta}_{B2} \frac{Q_{B2}}{V_2} \\
\frac{d\vec{\eta}_{B2}}{dt} &= \vec{\eta}_{B1} \frac{Q_{B1}}{V_2} + \left( \frac{d\vec{\eta}_{B2}}{dt} \right)_{StW} - \vec{\eta}_{B2} \frac{Q_{B1}}{V_2} \\
\frac{d\vec{\eta}_{B2}}{dt} &= \vec{\eta}_{B1} \frac{Q_{in} + Q_{rück}}{V_2} + \left( \frac{d\vec{\eta}_{B2}}{dt} \right)_{StW} - \vec{\eta}_{B2} \frac{Q_{in} + Q_{rück}}{V_2} \quad (130)
\end{aligned}$$

Der Wert für  $\vec{\eta}_{B1}$  wird durch die Lösung der Differentialgleichung (117) für den jeweiligen Zeitpunkt ermittelt. Es handelt sich somit um ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem.

### 10.2.2 Differentialgleichung der gesamten Hydraulik

Hier sind nun die Ergebnisse der gesamten Hydraulik für die Abwasserreinigungsanlage mit zwei Belebungsbecken und einem Nachklärbecken zusammenfassend dargestellt. Es werden dabei die Ergebnisse des Anlagentyps mit einem Becken verwendet.

Die Entwicklung der Konzentrationen im Becken wird durch folgendes gekoppeltes Differentialgleichungssystem beschrieben:

$$\frac{d\bar{\eta}_{B1}}{dt} = \bar{\eta}_{in} \frac{Q_{in}}{V_1} + \bar{w} \star \bar{\eta}_{B2} \frac{Q_{in} + Q_{rück}}{V_1} + \left( \frac{d\bar{\eta}_{B1}}{dt} \right)_{StW} - \bar{\eta}_{B1} \frac{Q_{in} + Q_{rück}}{V_1} \quad (131)$$

$$\frac{d\bar{\eta}_{B2}}{dt} = \bar{\eta}_{B1} \frac{Q_{in} + Q_{rück}}{V_2} + \left( \frac{d\bar{\eta}_{B2}}{dt} \right)_{StW} - \bar{\eta}_{B2} \frac{Q_{in} + Q_{rück}}{V_2} \quad (132)$$

Aus der Lösung für  $\bar{\eta}_{B2}$  können mittels folgendem Zusammenhang [siehe Gl. (123)] die Konzentrationen im Ausfluss der Anlage berechnet werden:

$$\bar{\eta}_{out} = (\bar{1} - \bar{w}) \star \bar{\eta}_{B2} \frac{Q_{in} + Q_{rück}}{Q_{in}} \quad (133)$$

Diese Gleichungen wurden zur Durchführung einer Simulationsstudie implementiert. Die Studie und ihre Ergebnisse sind im nachfolgenden Kapitel dargestellt.

### 10.3 Hydraulischer Sauerstoffeintrag

Die im Kernmodell implementierten Wachstumsprozesse der autotrophen und heterotrophen Bakterien zehren am gelösten Sauerstoff des Systems. Der im Belebungsbecken vorhandene gelöste Sauerstoff würde somit sehr schnell verbraucht sein und ein weiteres Wachstum würde zum Erliegen kommen. Somit würden die Bakterien keine Substrate abbauen, würden durch den Zustrom aus dem System ausgewaschen werden und die Abbauleistung des Belebungsverfahrens würde gegen Null gehen. Der hydraulische Sauerstoffeintrag in das Belebungsbecken erfolgt in einem realen System durch Drucklufteintrag.

Im Modell ist der Drucklufteintrag durch eine Sauerstoffzufuhr durch den Zufluss ins System implementiert. Dies stellt keine Beschränkung der Allgemeinheit dar, da so zwar der eingeblasene Luftstrom durch die Zufussrate vorgegeben ist, durch die einstellbare Konzentration kann jedoch die Eintragsleistung von Sauerstoff ebenso geregelt werden.

Die Gleichung für den Sauerstoffeintrag ist wie folgt angenommen:

$$\frac{dS_O}{dt} = \alpha_{O_2} \frac{S_{O_{SAT}} - S_O(t)}{S_{O_{SAT}}} Q_{Luft}(t) \cdot R_{Luft} \quad (134)$$

Die dabei verwendeten Parameter sind nachfolgender Tabelle [Tab. (30)] entnommen:

Parameter	Beschreibung	Einheit
$\alpha_{O_2}$	Sauerstoffübertragungsfaktor	[-]
$S_{O_{SAT}}$	Sättigungswert für gelösten Sauerstoff	[gCSB/m <sup>3</sup> ]
$S_O$	Sauerstoffkonzentration im Becken	[gCSB/m <sup>3</sup> ]
$R_{Luft}$	Spez. Sauerstoffzufuhr (Eintragsrate)	[gCSB/m <sup>3</sup> ] <sub>i</sub>
$Q_{Luft}$	Luftvolumenstrom (im Modell = $Q_{in}$ )	[m <sup>3</sup> /d]

Tabelle 30: Parameter des hydraulischen Sauerstoffeintrags

Die typischen Parameter für den Sauerstoffübertragungsfaktor  $\alpha_{O_2}$  liegt im Bereich ( $0.6 < \alpha_{O_2} < 0.8$ ) und für den Sättigungswert  $S_{O_{SAT}}$  je nach Temperatur im Bereich ( $7.6 < S_{O_{SAT}} < 14.6$ ) (für Details siehe auch [Wöckl(2000)]). Im Modell der Simulationsstudie wurde für die eingetragene Sauerstoffmenge bei eingeschalteter Belüftung ein Wert von  $R_{Luft} Q_{Luft} = 1000$  [g COD/d] angenommen.



Teil IV  
**Simulation von  
Abwasserreinigungsanlagen**





## 11 Design der Simulationsstudie

In diesem Abschnitt sollen nun Fragestellungen und Simulationsdesigns erstellt werden, die anschließend mit dem Kernmodell der Stoffwechselprozesse und dem hydraulischen Modell biologischer Abwasserreinigungsanlagen durch Simulation untersucht werden.

Das Modell wird durch diese Simulationsstudie auf seine Aussagekraft hin untersucht. Im Wesentlichen wird überprüft, ob durch das Modell, die in biologischen Abwasserreinigungsanlagen ablaufenden Mechanismen abgebildet werden. Es können dann qualitative Prognosen über die Abbauleistung einzelner Prozesse bei unterschiedlichen Verfahrenskonfigurationen und Betriebsarten durch das Modell abgeleitet werden. Dabei sollen spezielle, in der Literatur beschriebene, qualitative Zusammenhänge an Hand des Modells überprüft werden.

Es sollen jedoch auch einige aus der Chemostatentheorie abgeleitete Eigenschaften an Hand des komplexen Kernmodell für biologische Abwasserreinigungsanlagen aufgezeigt werden.

### 11.1 Fragestellungen

Im Detail interessieren an dieser Stelle folgende Fragestellungen. Diese Punkte fließen in der Simulationsstudie in die gewählten Annahmen, in die Wahl der Parameter und in die Wahl der Verfahrenskonfigurationen ein.

- Untersuchung der Substratelimination (Performance)
  1. Variation der Durchflussrate
  2. Unterschiedliche Substratbelastung
  3. Variation des Schlammalters
- Untersuchung der Nitrifikations- / Denitrifikationsprozesse
  1. Einfluss der Durchflussrate und der Rückführungsrate auf den Stickstoffabbau
  2. Verfahrenstechnische Unterschiede
- Untersuchung der Implikationen der Chemostatentheorie
  1. Untersuchung des stationären Verhaltens des Modells
  2. Grenzrate zur Auswaschung

## 11.2 Modell-Annahmen; Parameter-Settings

Um eine Trennung der exogen vorgegebenen Parameter, Variablen und Modellannahmen von den Simulationsergebnissen sicher zu stellen, sind die exogen vorgegebenen Größen hier separat zusammengefasst.

### 11.2.1 Anlagentypen

Hier werden zwei Konfigurationen der Abwasserreinigungsanlage verwendet. Das ermöglicht eine differenzierte Untersuchung der Stickstoffelimination bei unterschiedlichen Betriebsweisen.

In folgender Abbildung sind beide Konfigurationen dargestellt.

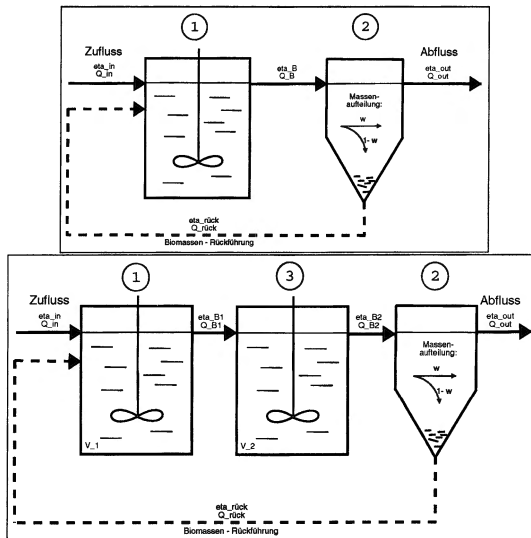


Abbildung 53: Konfigurationen der Abwasseranlage (Konfiguration A: ein Belebungsbecken; Konfiguration B: zwei Belebungsbecken); siehe auch Kapitel (10)

### 11.2.2 Biologische Modellparameter

In der hier durchgeführten Simulationsstudie wird das Kernmodell verwendet, welches ausführlich in Kapitel (8) beschrieben wurde. Die dort angeführ-

ten und erklärten Parameter wurden im Modell wie folgt gewählt:

Parameter <sup>1</sup>	Wert <sup>2</sup>	Einheit	Hinweis <sup>3</sup>
$\mu_H$	6	[1/d]	–
$\mu_A$	0.8	[1/d]	–
$K_{S,m}$	20	[g COD/m <sup>3</sup> ]	$\phi(S_S)$
$K_{O,m}$	0.2	[g O <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> ]	$\phi(S_O)$
$K_{NO,m}$	0.5	[g NO <sub>3</sub> /m <sup>3</sup> ]	$\phi(S_{NO})$
$K_{NH,m}$	1	[g NH <sub>4</sub> /m <sup>3</sup> ]	$\phi(S_{NH})$
$K_{X,m}$	0.03	[g COD/m <sup>3</sup> ]	$\phi(X_S/X_H)$
$b_H$	0.62	[1/d]	–
$b_A$	0.15	[1/d]	–
$k_h$	3	[g COD/m <sup>3</sup> ]	–
$\eta_g$	0.8	[–]	–
$\eta_h$	0.4	[–]	–
$Y_H$	0.67	[(g COD)–1]	–
$Y_A$	0.24	[(g N)–1]	–
$f_p$	0.08	[–]	–

Tabelle 31: Werte der biologischen Parameter des Kernmodells bei 20°C für Kinetik und Stoichiometrie [Beschreibung siehe Kapitel (8)]; Werte aus [Henze et al.(1986)] und [Henze et al.(1994)]

Die Parameter stammen aus Literaturangaben und können in der Realität durchaus variieren. Sie sind jedoch für die Untersuchung des Modellverhaltens hinreichend gut geeignet, um die Dynamik des Abwasserreinigungsverfahrens abzubilden. In der Realität müssen für spezielle Fragestellungen und für spezielle, verwendete Kinetiken die Parameter eigens bestimmt werden.

<sup>1</sup>Der Index  $K_{...,m}$  deutet die Gültigkeit dieses Parameters für die Monod-Kinetik an. Für andere Kinetiken (z.B. Contois) muss der Parameter neu bestimmt oder durch mathematische Überlegungen angepasst werden.

<sup>2</sup>Die hier angegebenen Werte beziehen sich auf eine Betriebstemperatur von 20°C

<sup>3</sup>In der Spalte "Hinweis" ist die Funktion im Kernmodell angegeben, für die der Parameter benötigt wird. Es sei noch einmal darauf hingewiesen, dass es sich in dieser Tabelle um Parameter für die Monod-Kinetik handelt; d.h. der Parameter  $K_{S,m}$  wird für die Funktion  $\phi(S_S) = \frac{S_S}{K_{S,m} + S_S}$  benötigt. Analog ist diese Information bei den anderen Parametern gültig.

### 11.2.3 Verfahrenstechnische Parameter

Die verfahrenstechnischen inklusive der hydraulischen Parameter werden im Laufe der Simulationsexperimente laufend verändert. Ihr Wert kann daher an dieser Stelle nicht angegeben werden. Sie sind tabellarisch in Tabelle (29) angeführt. Weiters werden sie für jedes Experiment im Detail definiert. Die bereits im Abschnitt über die Hydraulik dargestellten Tabellen sind hier nochmals angegeben. Die in der Simulationsstudie verwendeten Parameter der Dynamik sind hier in übersichtlicher Form zusammengefasst.

Variable	Beschreibung	Einheit
$\bar{\eta}_{in}$	Konzentrationen im Zulauf	$[gCSB/m^3]_i$
$\bar{\eta}_B$	Konzentrationen im Becken	$[gCSB/m^3]_i$
$\bar{\eta}_{out}$	Konzentrationen im Ablauf	$[gCSB/m^3]_i$
$\bar{\eta}_{rück}$	Konzentrationen im Rücklauf	$[gCSB/m^3]_i$
$Q_{in}$	Volumenstrom des Zulaufs	$[m^3/d]$
$Q_B$	Volumenstrom des Beckenablaufs	$[m^3/d]$
$Q_{out}$	Volumenstrom des Ablaufs	$[m^3/d]$
$Q_{rück}$	Volumenstrom des Rücklaufs	$[m^3/d]$
$V_i$	Volumen des Beckens $i$	$[m^3]$

Tabelle 32: Simulationsparameter des hydraulischen Modells

Parameter	Beschreibung	Einheit
$\alpha_{O_2}$	Sauerstoffübertragungsfaktor	$[-]$
$S_{O_{SAT}}$	Sättigungswert für gelösten Sauerstoff	$[gCSB/m^3]$
$S_O$	Sauerstoffkonzentration im Becken	$[gCSB/m^3]$
$R_{Luft}$	Spez. Sauerstoffzufuhr (Eintragsrate)	$[gCSB/m^3]_i$
$Q_{Luft}$	Luftvolumenstrom (im Modell = $Q_{in}$ )	$[m^3/d]$

Tabelle 33: Simulationsparameter des hydraulischen Sauerstoffeintrags

## 12 Simulationsstudie

In diesem Kapitel sind die Durchführung und die Ergebnisse der Simulationsstudie beschrieben. Die Vorgangsweise ist an die im vorigen Abschnitt definierte Fragestellung angepasst. Es werden dabei Simulationsläufe unter Variation der wesentlichen Verfahrensparameter durchgeführt und anschließend werden die Ergebnisse bewertet. Dabei wird Bezug zu den aus der Literatur bekannten Verfahreneigenschaften hergestellt.

In der Simulationsstudie werden folgende Experimente durchgeführt:

1. Untersuchung der Substratelimination
2. Untersuchung der Stickstoffelimination
  - (a) Untersuchung der Stickstoffelimination in einem Belebungsbecken
  - (b) Untersuchung der Stickstoffelimination in zwei Belebungsbecken

### 12.1 Untersuchung der Substratelimination (Experiment 1)

Zur Untersuchung der Substratelimination wird die Anlagenkonfiguration (A) (d.h. ein Belebungsbecken mit Nachklärbecken) bei unterschiedlichen Durchfluss- und Rückführungsraten simuliert.

Die hydraulischen Parameter wurden dazu wie folgt definiert:

Setting	Parameter			
	$\bar{\eta}_{in}$	$\bar{w}$	$Q_{in}$	$Q_{rück}$
	$(X_A, X_H, X_S, X_P, S_S, S_O, S_{NH}, S_{NO})$			
1.	(0,0,100,0,8,96,10,1)	(0.8,0.8,0.7,0.7,0,0,0,0)	0.5	0.3
2.	(0,0,100,0,8,96,10,1)	(0.8,0.8,0.7,0.7,0,0,0,0)	1.5	1.3
3.	(0,0,100,0,8,96,10,1)	(1,1,0.7,0.7,0,0,0,0)	1.5	1.3

Tabelle 34: Hydraulische Parameter: Experiment 1

In diesem Experiment läuft der Reinigungsprozess unter aeroben Bedingungen ab. Es kann daher keine Denitrifikation stattfinden, da dazu anoxische Milieubedingungen im System vorliegen müssten. Diese Fragestellung wird

in einem späteren Experiment untersucht.

Die Ergebnisse der Simulation ist in den folgenden Abbildungen [Abb. (54), (55) und (56)] dargestellt. In den Abbildungen sind die Stoffgrößen im Belebungsbecken und im Auslauf des Nachklärbeckens dargestellt. Folgende Erkenntnisse können aus den Simulationsergebnissen abgeleitet werden:

- Der Kurvenverlauf der Konzentrationen im Belebungsbecken und am Ausgang des Nachklärbeckens ist prinzipiell gleich. Das folgt aus der Modellierung des Nachklärbeckens, das nur den Massenstrom aufteilt (Modellierung als Massenseparator). Da jedoch nicht alle Stoffgrößen rückgeführt werden, kommt es zu einer Konzentrationserhöhung mancher Stoffgrößen im Ausfluss. Das resultiert aus der Tatsache, dass die Stoffgrößen am Ausfluss des Belebungsbeckens in einem größeren Flussvolumen enthalten sind als im Ausfluss der Anlage. Setzt sich die betrachtete Stoffgröße nicht, oder nicht zu einem erheblichen Teil am Boden des Nachklärbeckens ab, so muss die Masse der Stoffgröße im reduzierten Ausflussstrom des Nachklärbeckens enthalten sein und führt somit zur Erhöhung der Konzentration dieser Stoffgröße im Abfluss. Diese Forderung wird durch die Massenerhaltung impliziert.
- Eine weitere interessante Beobachtung ist die unterschiedliche stationäre Konzentration der heterotrophen Bakterien in den unterschiedlichen Betriebsarten. Je höher die Zuflussmenge an Substrat, desto mehr Nährstoffe sind für den Wachstumsprozess vorhanden und je höher auch die Konzentration.  
Zusätzlich hängt die Konzentration jedoch auch von der Menge der rückgeführten Bakterien ab. In diesem Fall gilt, je mehr Biomasse sich im Nachklärbecken absetzt und rückgeführt werden kann, desto höher die Bakterienkonzentration im Belebungsbecken und desto höher die Reinigungsleistung bezüglich der Substrate. Ein guter Nachklärprozess mit effizienter Rückführung von Biomasse ist also für die Reinigungsleistung von Bedeutung.
- "Setting (3)" stellt weiters noch einen Spezialfall dar, da in diesem Fall die gesamte Biomasse rückgeführt wird. Das entspricht dem Fall eines Membran-Bio-Reaktors (MBR). Die Membran wurde in diesem Modell nicht separat modelliert, durch eine vollständige Rückführung im Modell beschreibt das Modell jedoch genau die Eigenschaft einer Membran. Es stellt sich daher auch in diesem Fall die höchste Bakterienkonzentration ein, da sie nur durch die Sterberate begrenzt wird.

- Der Substratabbau ist jedoch in jedem der drei betrachteten Fälle effizient. Anders ist das mit dem Prozess der Nitrifikation. Damit die Nitrifikation von Ammonium zu Nitrat stattfinden kann, müssen sich zuerst die Nitrifikanten  $X_A$  ausbilden. Da sie eine sehr langsame Wachstumsrate aufweisen, ist ihre Entwicklung im Belebungsbecken von einer möglichst geringen Durchflussrate und einer effizienten Rückhaltung im System, durch eine Membran oder durch einen effizienten, herkömmlichen Nachklärprozess, abhängig.

Das Simulationsexperiment bestätigt diese theoretischen Überlegungen. Bei einer geringen Durchflussrate und mittlerer Rückführung setzt die Nitrifikation ein [Setting (1)].

Wird im Setting (2) die Durchflussrate erhöht, können sich die Nitrifikanten nicht mehr schnell genug ausbilden und werden aus dem System ausgespült. Die Nitrifikation bricht zusammen und die Ammoniumkonzentration im Ablauf des Nachklärbeckens ist gleich der Konzentration im Zustrom der Kläranlage.

Eine Rückhaltung der Biomasse der Nitrifikanten im System durch eine Membran oder einen effizienten Nachklärprozess führt auch bei dieser erhöhten Durchflussrate zur Nitrifikation [siehe Setting (3)].

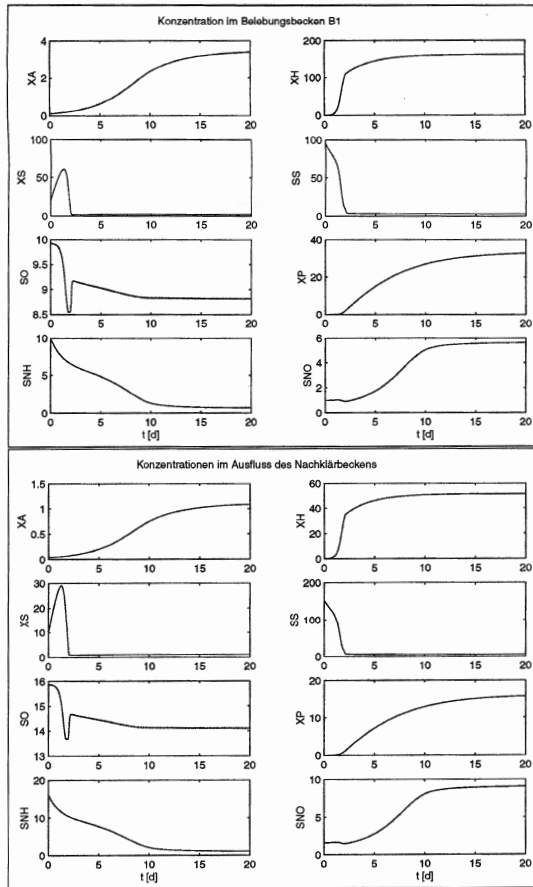


Abbildung 54: Darstellung: Experiment 1; Setting 1



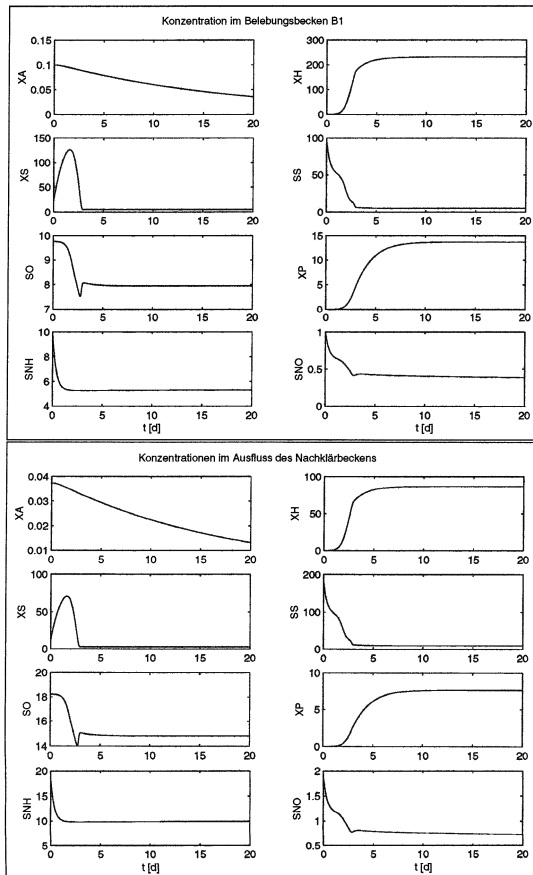


Abbildung 55: Darstellung: Experiment 1; Setting 2

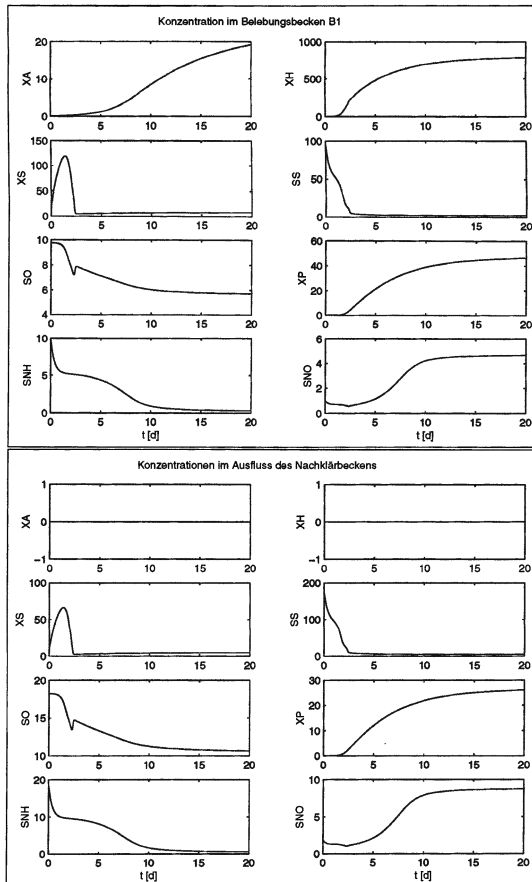


Abbildung 56: Darstellung: Experiment 1; Setting 3

## 12.2 Untersuchung der Stickstoffelimination

Zur Untersuchung der Stickstoffelimination wird die Anlagenkonfiguration (B) (d.h. zwei Belebungsbecken mit Nachklärbecken) [Abb. (53)] simuliert. Dabei wird im Speziellen der Denitrifikationsprozess betrachtet, der durch zwei prinzipiell unterschiedliche Anlagekonfigurationen in biologische Abwasserreinigungsanlagen integriert werden kann.

Die hydraulischen Parameter wurden dazu wie folgt definiert und während des Experimentes für alle Settings konstant gehalten:

	Parameter			
Setting	$\bar{\eta}_{in}$	$\bar{w}$	$Q_{in}$	$Q_{rück}$
	$(X_A, X_H, X_S, X_P, S_S, S_O, S_{NH}, S_{NO})$			
1 – 3	(0,0,100,0,8,96,10,1)	(0.8,0.8,0.7,0.7,0,0,0,0)	0.5	0.3

Tabelle 35: Hydraulische Parameter: Experiment 2

Da die Denitrifikation nur unter anoxischen Bedingungen abläuft, wurden jedoch in diesem Experiment unterschiedliche verfahrenstechnische Konfigurationen zur Einstellung der aeroben Bedingungen für den Substratabbau und die Nitrifikation und der anoxischen Bedingungen zur Denitrifikation untersucht. Die konkreten Einstellungen und Konfigurationen für den Sauerstoffeintrag sind in den folgenden Abschnitten angegeben.

### 12.2.1 Stickstoffelimination durch alternierende Belüftung (Experiment 2a)

Wie im Kapitel über die Grundlagen biologischer Abwasserreinigungsverfahren dargestellt, kann sowohl die Nitrifikation als auch die Denitrifikation in einem Becken durchgeführt werden.

Da diese beiden Prozesse unterschiedliche Milieubedingungen erfordern (aerob / anoxisch), kann diese Betriebsart nur durch zu- und abschalten der Belüftungsanlage erreicht werden. Dadurch entstehen Phasen mit aeroben und Phasen mit anoxischen Bedingungen, so dass beide Prozesse ablaufen können. Die Reinigungsleistung der Anlage wird dann als mittlere Abbaurate der Stoffgrößen angegeben.

### Untersuchung der Sprungantwort und der stationären Zustände (Versuch 1)

Bei diesem Versuch wird die Anlage anfänglich unter aeroben Bedingungen betrieben, bis sich stationäre Zustände eingestellt haben. Zu einem bestimmten Zeitpunkt wird die Belüftung abgeschaltet und nach einiger Zeit wieder angeschaltet. Es kann dabei die Sprungantwort des Systems auf einem plötzlichen Abfall bzw. Anstieg der Sauerstoffkonzentration untersucht werden. Die Beschreibung und die Parameter der Hydraulik des Sauerstoffeintrags sind in Abschnitt (10.3) angegeben.

Die Schaltzeitpunkte sind in folgender Tabelle angegeben:

Periode	Zeit $/[d]$	Sauerstoffeintrag $[g\ COD/d]$
1	$[0\ 14]$	$Q_{O2max}$
2	$[14\ 16]$	0
3	$[16\ 20]$	$Q_{O2max}$

Tabelle 36: Schaltzeitpunkte der Belüftung; Experiment 2a, Versuch 1

Die Ergebnisse dieser Simulation sind in Abbildung (57) dargestellt.

Bei Betrachtung der Simulationsergebnisse können folgende Erkenntnisse abgeleitet werden:

- Nach dem Einschalten der Anlage stellen sich unter aeroben Bedingungen die bereits bekannten stationären Zustände im System ein. Durch die Entwicklung der Nitrifikanten im System läuft der Prozess der Nitrifikation in dieser Phase zunehmend effizient ab. Dadurch steigt die Konzentration von Nitrat im System kontinuierlich an. Dieser Zustand hat den Vorteil, dass das Ammonium aus dem Abwasser entfernt wird, jedoch die Konzentration von Nitrat ansteigt. Der gesetzliche und ökologisch verträgliche Grenzwert könnte so in der Realität nicht eingehalten werden. Zusätzlich wäre die Gefahr von Schlammauftrieb im Nachklärbecken für den Klärprozess kritisch.
- Die notwendige Denitrifikation setzt im Modell nach dem Abschalten der Belüftung sehr rasch ein. Das hängt mit der hohen Bakterienkonzentration und ihrer hohen Sauerstoffzehrung zusammen. Nach dem Abschalten der Belüftung ist der gelöste Sauerstoff im System sehr rasch verbraucht und es stellen sich anoxische Bedingungen ein, die für den Denitrifikationsprozess notwendig sind. In dieser Phase sinken die Bakterienkonzentrationen im System und die Substratelimination

läuft weniger effizient ab. Es schlagen daher Substratkonzentrationspitzen bis ins Nachklärbecken und damit bis in den Ablauf der Anlage durch.

- Nach dem Einschalten der Belüftung stellen sich sehr rasch die stationären Werte vor dem Abschalten wieder ein. Das ist möglich, da bereits eine erhöhte Bakterienkonzentration im System vorhanden ist und sich die Bakterienkulturen nicht neuerlich von Beginn an entwickeln müssen.

Dieses Experiment ist für den realen Betrieb nicht geeignet, da sich die unterschiedlichen Phasen über lange Zeiträume erstrecken und so die Abbauleistung der Anlage nicht effizient wäre. Dieses Experiment diene ausschließlich zur Untersuchung der Sprungantwort des Systems auf eine Abschaltung der Belüftung.

Im Folgenden wird ein Experiment mit einer einfachen Sauerstoffeintragsregelung zur Steuerung der Denitrifikation simuliert.

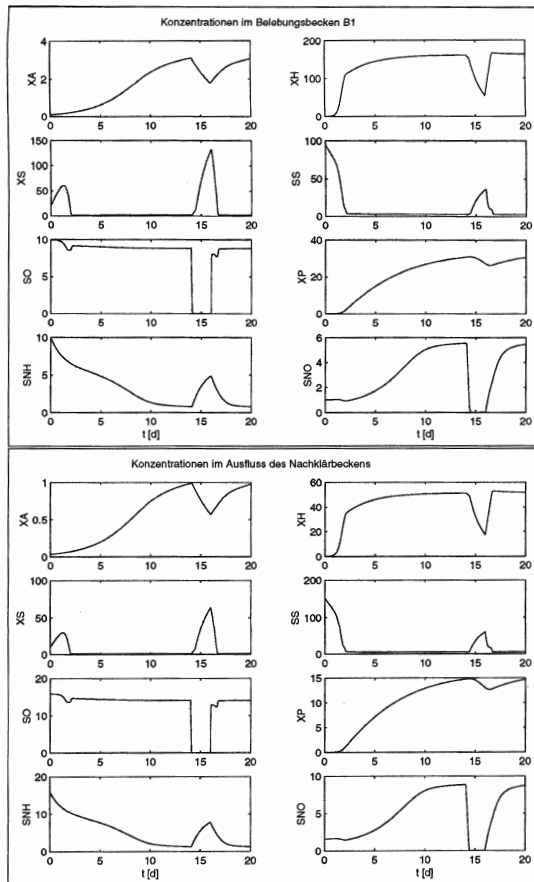


Abbildung 57: Darstellung: Experiment 2a; Versuch 1

### Untersuchung der Denitrifizierung in einem System mit Sauerstoffeintragsregelung (Versuch 2)

In diesem Simulationsversuch wird die Nitrifikation und Denitrifikation in einer Abwasserreinigungsanlage mit einem Belebungsbecken simuliert. Die Umschaltung zwischen aeroben und anoxischen Bedingungen wird hier jedoch durch eine Regelung erreicht. Die Regelung erfolgt dabei durch eine Hysteresisfunktion der Nitratkonzentration, d.h. steigt die Nitratkonzentration über einen bestimmten Wert ( $SNO_{max}$ ), wird der Sauerstoffeintrag abgeschaltet und fällt die Nitratkonzentration unter einen Schwellwert ( $SNO_{min}$ ) wird der Sauerstoffeintrag wieder eingeschaltet. Die im Modell gewählten Schwellwerte für die Schaltvorgänge sind in Tabelle (37) angegeben.

Parameter	Schwellwert [g COD/m <sup>3</sup> ]
$SNO_{max}$	4
$SNO_{min}$	1

Tabelle 37: Schwellwerte des Nitrats zur Regelung der Belüftung; Experiment 2a, Versuch 2

Die Werte für die Regelung können einen noch engeren Regelbereich eingrenzen, für die Simulationsstudie wurden sie so gewählt, dass die Wirkungsweise dieser Betriebsart deutlich wird.

Die Ergebnisse sind in Abbildung (58) dargestellt.

Bei Betrachtung der Simulationsergebnisse können folgende Erkenntnisse gewonnen werden:

- Die hier simulierte Betriebsart zeigt, dass sowohl die Nitrifikation als auch die Denitrifikation im Belebungsbecken ablaufen. Durch die Schaltvorgänge des Sauerstoffeintrags erreicht die Nitratkonzentration keinen stationären Wert, sondern schwankt stark um einen Mittelwert. Dieser Mittelwert ist jedoch wiederum stationär. Die Performance der Denitrifikation wird somit als Mittel über die Zeit bestimmt. Das entspricht auch den gesetzlichen Vorgaben, die nur eine mittlere Ausflusskonzentration vorschreiben. Die mittlere Nitratkonzentration ist bei dieser Betriebsart wesentlich geringer als bei einer Anlage ohne Nitrifikation. Somit ist das Verfahren effizient. Die Schwankung der Nitratkonzentration kann durch einen schmäleren Regelbereich noch weiter reduziert werden und somit können die Nitratspitzenbelastungen und die mittlere Nitratbelastung am Ausgang noch weiter gesenkt werden.
- Dieses Verfahren der alternierenden Belüftung mit einer Sauerstoffeintragsregelung wirkt sich auf die Substratelimination nur wenig aus. Lediglich kleine Schwankungen der Substratkonzentration können am Ausgang festgestellt werden. Durch die kurzen anoxischen Phasen ist das aerobe Wachstum der Bakterien kaum beeinflusst und somit mindert das Verfahren der alternierenden Belüftung nur geringfügig die Leistungsfähigkeit der Substratelimination der Anlage.



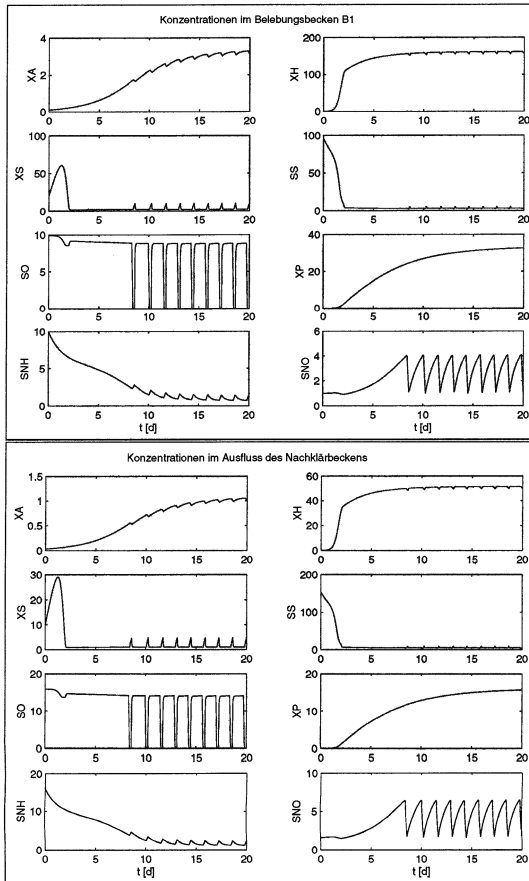


Abbildung 58: Darstellung: Experiment 2a; Versuch 2



### 12.2.2 Stickstoffelimination durch Denitrifikationsbecken

In diesem Experiment (2b) wird die Stickstoffelimination einer biologischen Abwasserreinigungsanlage an Hand des Kernmodells untersucht. Die hier simulierte Anlagenkonfiguration wurde bereits ausführlich beschrieben [siehe Kapitel (10) und Abb. (53)]. Die hydraulischen Parameter der Simulation wurden bereits in Tabelle (35) angegeben.

Das hier beschriebene Simulationsexperiment untersucht die Reinigungsleistung einer Abwasserreinigungsanlage mit zwei Belebungsbecken hinsichtlich der Substrat- und der Stickstoffelimination. Die beiden Belebungsbecken sind dabei hintereinander geschaltet; zuerst ein nicht-belüftetes Denitrifikationsbecken und danach ein aerobes Belebungsbecken. Das zufließende Abwasser gelangt somit zuerst ins Denitrifikationsbecken, in dem anoxische Bedingungen herrschen. Beim Einschalten ist im Abwasser jedoch keine Nitratkonzentration enthalten und somit findet vorerst noch keine Denitrifikation statt. Im zweiten Belebungsbecken findet dann der eigentliche Substratabbau und der Abbau des Ammoniums zu Nitrat statt. Über die Rückführung gelangt dann das Nitrat zurück ins Denitrifikationsbecken, wo das Nitrat zu elementarem Stickstoff übergeführt wird.

Diese Anlagenkonfiguration bietet den Vorteil, dass im Denitrifikation noch genügend Substrate für das Wachstum der Denitrifikanten vorhanden sind und keine externen Wasserstoffdonatoren (wie z.B. Methanol) zugegeben werden müssen.

In den folgenden Abbildungen sind die Simulationsergebnisse dieses Experimentes dargestellt. Die Konzentrationen im Denitrifikationsbecken sind in Abbildung (59), im aeroben Belebungsbecken in Abbildung (60) und im Auslauf der Anlage in Abbildung (61) dargestellt.

Bei Betrachtung der Simulationsergebnisse können folgende Erkenntnisse gewonnen werden:

- Die Nitrifikation findet im aeroben Belebungsbecken statt, wo die Ammoniumkonzentration mit der zunehmenden Kultivierung der Autotrophen im System sinkt, bis sie schließlich einen stationären Wert erreicht. Durch die Rückführung der Ammoniumkonzentration sinkt auch die Konzentration im Denitrifikationsbecken. Dies ist jedoch nicht auf Stoffwechselvorgänge zurückzuführen, sondern rührt nur von der Durchmischung der beiden Stoffströme her.
- Das im Belebungsbecken gebildete Nitrat wird zum Teil ausgeschwemmt und zu einem Teil ins Denitrifikationsbecken rückgeführt. Durch die hohe Konzentration von heterotrophen Bakterien läuft der Prozess sehr effizient ab und so sinkt die Nitratkonzentration nahezu auf Null

ab. Da im aeroben Belebungsbecken jedoch wieder einiges an Nitrat hinzu kommt und nicht das gesamte Nitrat rückgeführt werden kann, ist im Ausfluss der Anlage eine geringe Nitratkonzentration messbar. Die Stickstoffelimination läuft in dieser Anlagenkonfiguration jedoch sehr effizient ab, so dass durch die Nitrifikation des Ammoniums zu Nitrit und die Umwandlung des Nitrits in elementaren Stickstoff  $N_2$ , die Stickstoffbelastung des abfließenden Abwassers wesentlich reduziert wurde.

- Die Substratelimination ist in dieser Anlagenkonfiguration ebenfalls sehr begünstigt, da sowohl durch den Prozess der Denitrifikation im anoxischen Becken, also auch durch die Stoffwechselprozesse im aeroben Becken ein effizienter Substratabbau erfolgt. Im Ausfluss ist die Konzentration sowohl des leicht abbaubaren Substrates  $S_S$  als auch des schwer abbaubaren Substrates  $X_S$  sehr stark reduziert und hat einen stationären Wert nahe Null.

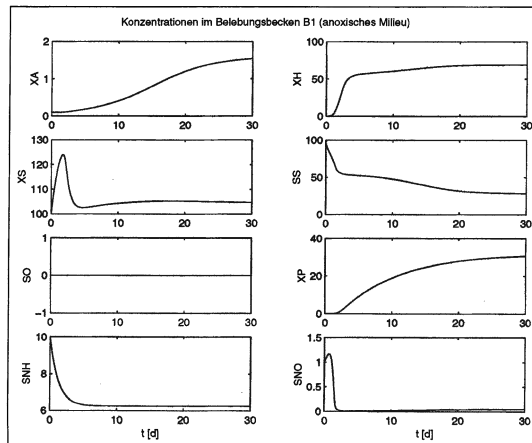


Abbildung 59: Darstellung: Experiment 2b; Setting 1; Konzentrationen in den Belebungsbecken B1

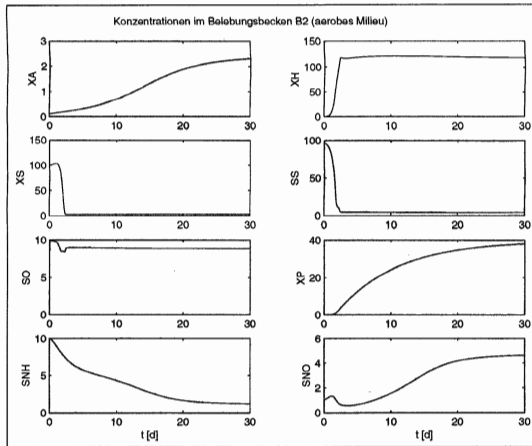


Abbildung 60: Darstellung: Experiment 2b; Setting 1; Konzentrationen in den Belebungsbecken B2

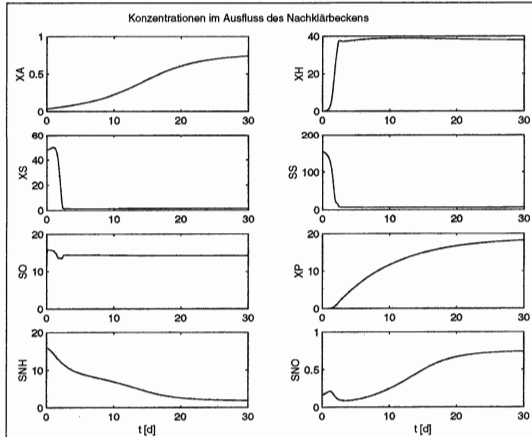


Abbildung 61: Darstellung: Experiment 2b; Setting 1; Konzentrationen im Auslauf des Nachklärbeckens

### 13 Schlussbemerkung und Ausblick

Diese Arbeit zeigte die Möglichkeit der Erweiterung von mathematischen Modellen zur Beschreibung von biologischen Abwasserreinigungsprozessen auf. Ein spezielles Augenmerk wurde dabei auf die zu Grunde liegenden Prozesse im Rahmen des Kernmodells und auf die Systemansätze, die Betriebsarten und die Modelldynamik des Chemostatenmodells gelegt. Mit diesen Grundlagen konnte eine typische Belebungsanlage modelliert werden. Die prinzipiellen, und in der Literatur bekannten Eigenschaften und Betriebsarten biologischer Abwasserreinigungssysteme konnten somit mittels Computersimulation nachgebildet und untersucht werden. Das dazu erstellte hybride Modell ermöglicht die Untersuchung unterschiedlicher Anlagenkonfigurationen und Betriebsarten. Dabei können sowohl kontinuierliche als auch diskrete Prozessvorgänge, Steuerungs- und Regelungsereignisse durch das Modell beschrieben werden.

Dieses Modell kann in Zukunft für Fragestellungen im Hinblick auf spezielle Abbauprozesse im Rahmen der biologischen Abwasserreinigung verwendet werden. Die interessierenden Prozesse können auf die beschriebene Art und Weise leicht ins Kernmodell integriert werden. Zusätzlich besteht durch eine geeignete Parametrisierung des hydraulischen Modells des Nachklärbeckens und des Kernmodells des Belebungsbeckens die Möglichkeit, auch Membran-Bio-Reaktoren in die Anlagekonfiguration einzufügen. Deren Potential beim Abbau von speziellen, schwer abbaubaren Stoffen kann somit mit dem Modell untersucht werden.

Die prinzipielle Möglichkeit, unterschiedliche prozessbedingte und verfahrenstechnische Erweiterungen leicht ins Modell integrieren zu können, erlaubt eine flexible Anwendung bei unterschiedlichen Fragestellungen.



## Teil V

# Anhang

## A Software-Implementierung der Parameter-Schätzung

run_param_eval.m
------------------

---

```
function run_param_eval

global MU KM

dglgen='dgljw_mbr_m';

dgleval='dgljw_mbr_m'; %%dglgen;

ergpar=zeros(1,10);                                10
ergval=zeros(1,10);

for i=1:10

data_gen(6,15,5,20,2,dglgen);

[par,val]=param_eval3(1,dgleval);

ergpar(1,i)=par                                     20
ergval(1,i)=val

end

par_mean=mean(ergpar)
par_std=std(ergpar)

val_mean=mean(ergval)
val_std=std(ergval)

beep;                                                30
```

---



```

function data_gen(mu,km,rl,anzmessspkte,inpkt,dglstr)

%% mu = MU ; km = KM
%% rl = Rauschlevel
%% anzmessspkte = Anzahl Messpunkte
%% inpkt = Verteilung Messpunkte = Messzeitpunkte
%% dglstr = String spezifiziert die zu verwendende DGL; auch [] erlaubt

global MU KM

disp('auto_generate');

simstarttime=0;
simendtime=25;
nrtimesteps=100;

tspan=linspace(simstarttime,simendtime,nrtimesteps);

MU=mu;
KM=km;

if ~isempty(dglstr) dgl=dglstr;
else dgl='dgljw_std_m';
end

disp(['. . . . . using: ',dgl,'with mu: ',num2str(MU)]);

[t,y]=ode45(dgl,tspan,[0.1 ; 96]);

b_sol=y(:,1); %Daten: Loesung fuer Bakterien B
s_sol=y(:,2); %Daten: Loesung fuer Substrat S

rauschlevel=rl;

rauschen_b=max(b_sol)/100 * rauschlevel;
rauschen_s=max(s_sol)/100 * rauschlevel;
b = b_sol + rauschen_b * rand(length(b_sol),1) -(rauschen_b/2); %%Verrauschen des Datensignals
s = s_sol + rauschen_s * rand(length(s_sol),1) -(rauschen_s/2); %%Verrauschen des Datensignals

%% DEFINITION DER MESSZEITPUNKTE
anzMP=anzmessspkte;

inp=inpkt;
show_plot=0;

if (inp==0)
    measure_t = linspace(min(t), max(t), anzMP)'; %%Messzeitpunkte
elseif (inp==1)
    disp(['select ',num2str(anzMP),' Punkte in Figure(1)']);
    figure(1);
    plot(t,b_sol,'k');
    [measure_t,ans]=ginput(anzMP);

```

```

        tmps=input('Wollen sie die Messzeitpunkte speichern (j/n) [n]:');
        if ~isempty(tpms)
            save t_indiv.dat measure_t -ASCII;
            disp('...data saved!');
        end
    elseif (inp==2)
        load t_indiv.dat -ASCII
        measure_t = t_indiv;
        disp('...data loaded!');

    elseif (inp==3) %%== (inp=2), jedoch mit Plot
        load t_indiv.dat -ASCII

        measure_t = t_indiv;
        disp('...data loaded!');
        show_plot=1;

    else
        error('Ungueltige Eingabe!'); return
    end

    measure_b = interp1(t,b,measure_t);    %Messwerte Bakterien
    measure_s = interp1(t,s,measure_t);    %Messwerte Substrat

    if show_plot==1

        fl=figure(1);
        plot(t,b_sol,'k',t,b,'r',measure_t,measure_b,'*');
        title('Bakterienkonzentration');
        legend('wahr','verrauscht','Messung',0);

        figure(2);
        plot(t,s_sol,'k',t,s,'r',measure_t,measure_s,'*');
        title('Substratkonzentration');
        legend('wahr','verrauscht','Messung',0);

    end

    B_DAT=[measure_t,measure_b];
    S_DAT=[measure_t,measure_s];

    save b.dat B_DAT -ASCII;
    save s.dat S_DAT -ASCII;

```

---

param\_eval3.m

---

```
function [x,fval]=param_eval(oniter,dglstr)

global MU KM TT BB SS

if ~nargin==2
    oniter=0;
    dgl='dgljw_mbr_m';
else
    dgl=dglstr;
end

disp(['Param. estimation using : ',dgl]);

load b.dat -ASCII %% b(:,1) ... Zeit      b(:,2) ... Bakterienkonzentration
load s.dat -ASCII %% s(:,1) ... Zeit      s(:,2) ... Substratkonzentration

TT=b(:,1);
BB=b(:,2);
SS=s(:,2);

%% ERMITTLUNG DER PARAMETER
MU=6;          %aus Messung im Batchversuch
par=1;
if oniter~=0 options=optimset('Display','iter','MaxIter',9,'TolX',0.1);
else options=optimset('Display','off');%,'MaxIter',9,'TolX',0.1);
end
[x,fval] = fminbnd(@zielfkt,0.5,100,options,dgl); %fuer Monod
return

%%-----
function LSE = zielfkt(x0,usedgl);

global MU KM TT BB SS

simstarttime=0;
simendtime=max(TT);
tspan=[simstarttime simendtime];
KM=x0;

[tc,yc] = ode45(usedgl,tspan,[0.1 ; 96]);

ycb=yc(:,1);
ycs=yc(:,2);

y_sim = interp1(tc,ycb,TT);

LSE = sum((y_sim-BB).^2); %Fehler der Kleinst-Quadrat-Methode
return
```

---

dgljw\_std\_m.m

---

**function** dydt = dgljw\_std\_m(t,y)

**global** MU KM

YY=0.67;  
SIN=96;  
BB=0.62;  
DD0=2.5;

mu=MU; 10  
Km=KM;  
Y=YY;  
b=BB;  
S0=SIN;  
D=DD0;

*%Standard mit Monod*

dydt = [ mu \* (y(2)/(Km + y(2))) \* y(1) - (D+b) \* (y(1));  
          -(1/Y) \* mu \* (y(2)/(Km + y(2))) \* y(1) + D \* (S0 - y(2)) + b\*(y(1))  
          ]; 20  
**return**

---

dgljw\_std\_c.m

---

**function** dydt = dgljw\_std\_c(t,y)

**global** MU KM

YY=0.67;  
SIN=96;  
BB=0.62;  
DD0=2.5;

mu=MU; 10  
Km=KM;  
Y=YY;  
b=BB;  
S0=SIN;  
D=DD0;

*%Standard mit Contois*

dydt = [ mu \* (y(2)/(Km \* y(1) + y(2))) \* y(1) - (D+b) \* (y(1));  
          -(1/Y) \* mu \* (y(2)/(Km \* y(1) + y(2))) \* y(1) + D \* (S0 - y(2)) + b\*(y(1))  
          ]; 20  
**return**

---

---

dgljw\_mbr.m

---

**function** dydt = dgljw\_mbr\_m(t,y)

**global** MU KM

YY=0.67;  
SIN=96;  
BB=0.62;  
DD0=2.5;

mu=MU; 10  
Km=KM;  
Y=YY;  
b=BB;  
S0=SIN;  
D=DD0;

*%MBR mit Monod*

dydt = [ mu \* (y(2)/(Km + y(2))) \* y(1) - b \* (y(1));  
          -(1/Y) \* mu \* (y(2)/(Km + y(2))) \* y(1) + D \* (S0 - y(2)) + b\*(y(1))  
          ]; 20  
**return**

---

---

dgljw\_mbr.c.m

---

**function** dydt = dgljw\_mbr\_c(t,y)

**global** MU KM

YY=0.67;  
SIN=96;  
BB=0.62;  
DD0=2.5;

mu=MU; 10  
Km=KM;  
Y=YY;  
b=BB;  
S0=SIN;  
D=DD0;

*%MBR mit Contois*

dydt = [ mu \* (y(2)/(Km \* y(1) + y(2))) \* y(1) - b \* (y(1));  
          -(1/Y) \* mu \* (y(2)/(Km \* y(1) + y(2))) \* y(1) + D \* (S0 - y(2)) + b\*(y(1))  
          ]; 20  
**return**

---

## B Software-Implementierung der Simulationsstudie

```
simcore_start.m
```

```
function simcore_start(task)

global W_BECKEN W_IN W_RUECK KONZ_IN QQ QQR VV1 VV2 TRIG

%-----1.) xxx -----
if (task==1)

    %y(1)=XA, y(2)=XH, y(3)=XS, y(4)=XP, y(5)=SO, y(6)=SS, y(7)=SNH, y(8)=SNO ...

    %Verfahrenstechnische Parameter 10
    %Rueckhaltung im Becken (z.B. bei MBR)
    W_BECKEN = [1; 1; 1; 1; 1; 1; 1; 1]; %alle koennen ausgeschwemmt werden
    VV1 = 1; %Volumen Becken B1
    VV2 = 1; %Volumen Becken B2

    %Zufluss
    KONZ_IN = [0; 0; 100; 0; 8; 96; 10; 1]; %siehe ASM1 (Seite 21) ... Abwasser Schweiz
    W_IN = [1; 1; 1; 1; 1; 1; 1; 1]; %Konzentrationen unterliegen keiner Schwankung
    QQ = 0.5; %3.5; %Tagesgang ... spaeter aus Funktion (t)
    % 20

    %Ruecklauf
    %Konzentration ist Beckenkonzentration
    W_RUECK = [0.8; 0.8; 0.7; 0.7; 0; 0.0; 0.0; 0.0]; %vom NK-Becken, % Rueckgefuehrung
    %W_RUECK = [1; 1; 1; 1; 1; 1; 1; 1];
    QQR = 0.3; %2.5; %Rueckflussrate

    TRIG=1; %Default: Behueftung eingeschaltet

    tspan=[0 20]; 30
    %[t,yc]=ode45('dglcore',tspan, [1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1]);
    %[t,yc]=ode45('dglcore',tspan, [1; 1; 1; 1; 1; 1; 1; 1]);
    [t,yc]=ode45('dglcore',tspan, [0.1, 0.1, 20, 0, 10, 96, 10, 1]);

    figure(1);
    subplot(4,2,1), plot(t,yc(:,1)); ylabel('XA');
    subplot(4,2,2), plot(t,yc(:,2)); ylabel('XH');
    subplot(4,2,3), plot(t,yc(:,3)); ylabel('XS');
    subplot(4,2,4), plot(t,yc(:,6)); ylabel('SS');
    subplot(4,2,5), plot(t,yc(:,5)); ylabel('SO'); 40
    subplot(4,2,6), plot(t,yc(:,4)); ylabel('XP');
    subplot(4,2,7), plot(t,yc(:,7)); ylabel('SNH'); xlabel('t [d]');
    subplot(4,2,8), plot(t,yc(:,8)); ylabel('SNO'); xlabel('t [d]');

    %Berechnung der Ausflusskonzentrationen
    [l,b]=size(yc);

    for i=1:l
```

```

        yout(i,:) = ((QQR+QQ)/QQ)*(1-W_RUECK') .* yc(i,:);
    end
    50

    figure(2);
    subplot(4,2,1), plot(t,yout(:,1)); ylabel('XA');
    subplot(4,2,2), plot(t,yout(:,2)); ylabel('XH');
    subplot(4,2,3), plot(t,yout(:,3)); ylabel('XS');
    subplot(4,2,4), plot(t,yout(:,6)); ylabel('SS');
    subplot(4,2,5), plot(t,yout(:,5)); ylabel('SO');
    subplot(4,2,6), plot(t,yout(:,4)); ylabel('XP');
    subplot(4,2,7), plot(t,yout(:,7)); ylabel('SNH'); xlabel('t [d]');
    subplot(4,2,8), plot(t,yout(:,8)); ylabel('SNO'); xlabel('t [d]');
    60

    figure(4);
    plot(t,yc);
    legend('XA','XH','XS','XP','SO','SS','SNH','SNO');

end

%-----2.) xxx -----
if (task==2)
    70

    %y(1)=XA, y(2)=XH, y(3)=XS, y(4)=XP, y(5)=SO, y(6)=SS, y(7)=SNH, y(8)=SNO ...

    %Verfahrenstechnische Parameter
    %Rueckhaltunge im Becken (z.B. bei MBR)
    W_BECKEN = [1; 1; 1; 1; 1; 1; 1; 1]; %alle koennen ausgeschwemmt werden
    VV1      = 1; %Volumen Becken B1
    VV2      = 1; %Volumen Becken B2

    %Zufluss
    KONZ_IN = [0; 0; 100; 0; 0.0; 96; 10; 1]; %siehe ASM1 (Seite 21) ... Abwasser Schweiz
    W_IN     = [1; 1; 1; 1; 1; 1; 1; 1]; %Konzentrationen unterliegen keiner Schwankung
    QQ       = 0.5; %3.5; %Tagesgang ... spaeter als Funktion (t)

    %Ruecklauf
    %Konzentration ist Beckenkonzentration
    W_RUECK = [0.8; 0.8; 0.7; 0.7; 0; 0.0; 0.0; 0.90]; %vom NK-Becken, % Rueckfuehrung
    QQR      = 0.3; %2.5; %Rueckflussrate
    80
    90

    tspan=[0 30];

    init=[0.1, 0.1, 100, 0, 0.0, 96, 10, 1]; %Initialisierung

    [t,yc]=ode45('dg1core2B',tspan, [init,init]);

    figure(1);
    subplot(4,2,1), plot(t,yc(:,1)); ylabel('XA');%title('Becken B1');
    subplot(4,2,2), plot(t,yc(:,2)); ylabel('XH');
    subplot(4,2,3), plot(t,yc(:,3)); ylabel('XS');
    100

```

```

subplot(4,2,4), plot(t,yc(:,6)); ylabel('SS');
subplot(4,2,5), plot(t,yc(:,5)); ylabel('SO');
subplot(4,2,6), plot(t,yc(:,4)); ylabel('XP');
subplot(4,2,7), plot(t,yc(:,7)); ylabel('SNH'); xlabel('t [d]');
subplot(4,2,8), plot(t,yc(:,8)); ylabel('SNO'); xlabel('t [d]');

```

```

figure(3);
subplot(4,2,1), plot(t,yc(:,9)); ylabel('XA'); %title('Becken B2');
subplot(4,2,2), plot(t,yc(:,10)); ylabel('XH');
subplot(4,2,3), plot(t,yc(:,11)); ylabel('XS');
subplot(4,2,4), plot(t,yc(:,14)); ylabel('SS');
subplot(4,2,5), plot(t,yc(:,13)); ylabel('SO');
subplot(4,2,6), plot(t,yc(:,12)); ylabel('XP');
subplot(4,2,7), plot(t,yc(:,15)); ylabel('SNH'); xlabel('t [d]');
subplot(4,2,8), plot(t,yc(:,16)); ylabel('SNO'); xlabel('t [d]');

```

```

%Berechnung der Ausflusskonzentrationen
[l,b]=size(yc);

```

```

for i=1:l
    yout(i,:) = ((QQR+QQ)/QQ)*(1-W_RUECK') .* yc(i,9:16);
end

```

```

figure(2);
subplot(4,2,1), plot(t,yout(:,1)); ylabel('XA'); %title('Ausfluss Nachklaerbecken');
subplot(4,2,2), plot(t,yout(:,2)); ylabel('XH');
subplot(4,2,3), plot(t,yout(:,3)); ylabel('XS');
subplot(4,2,4), plot(t,yout(:,6)); ylabel('SS');
subplot(4,2,5), plot(t,yout(:,5)); ylabel('SO');
subplot(4,2,6), plot(t,yout(:,4)); ylabel('XP');
subplot(4,2,7), plot(t,yout(:,7)); ylabel('SNH'); xlabel('t [d]');
subplot(4,2,8), plot(t,yout(:,8)); ylabel('SNO'); xlabel('t [d]');

```

```

end

```



---

```
function dydt = dglcore(t,y)
```

```
global W_BECKEN W_IN W_RUECK KONZ_IN QQ QQR VV1 VV2 TRIG
```

```
% Zustandsvektor y -----
%y(1)=XA, y(2)=XH, y(3)=XS, y(4)=XP, y(5)=SO, y(6)=SS, y(7)=SNH, y(8)=SNO ...
XA = y(1);
XH = y(2);
XS = y(3);
XP = y(4);
SO = y(5);
SS = y(6);
SNH = y(7);
SNO = y(8);
%-----

%Biologische Parameter-----
%Prozessparameter
muH = 6;
muA = 0.8;
KSm = 20;
KOm = 0.2;
KNOm = 0.5;
KNHm = 1.0;
KXm = 0.03; %fuer phi(XS/XH) ...rho6 core
bH = 0.62;
bA = 0.15; %siehe ASM2 S.13
kh = 3.0;
etag = 0.8;
etah = 0.4;

%Stoichiometrie
YH = 0.67;
YA = 0.24;
fp = 0.08;
%-----

%Prozessraten-----
rho1 = muH * (SS/(SS+KSm)) * (SO/(SO+KOm)) * XH;
rho2 = muH * (SS/(SS+KSm)) * (1-(SO/(SO+KOm))) * (SNO/(SNO+KNOm)) * XH;
rho3 = muA * (SNH/(SNH+KNHm)) * (SO/(SO+KOm)) * XA;
rho4 = bH * XH;
rho5 = bA * XA;
rho6 = kh * (XS/(XS+XH*KXm)) * ( (SO/(SO+KOm)) + etah * (1-(SO/(SO+KOm))) *
    * (SNO/(SNO+KNOm)) ) * XH;
%-----

%Verfahrenstechnische Parameter-----
scale_becken = W_BECKEN;
konz_in = KONZ_IN;
scale_in = W_IN;
```

```

scale_rueck = W_RUECK;
Qin=QQ;
Qr=QQR;
V1=VV1;
%-----

%Rate im Becken-----
%mit Monod
dydt = [ ( rho3 - rho5 ); %dXA
         ( rho1 + rho2 - rho4 ); %dXH
         ( (1-fp) * (rho4 + rho5) - rho6 ); %dXS
         ( fp * (rho4 + rho5) ); %dXP
         ( ((YH-1)/YH)*rho1 - ((4.57-YA)/YA)*rho3 ); %dSO
         ( -(1/YH)*rho1 -(1/YH)*rho2 + rho6 ); %dSS
         ( -(1/YA)*rho3 ); %dSNH
         ( ((YH-1)/(2.86*YH))*rho2 + (1/YA)*rho3 ); %dSNO
         %DGL fuer das Kern-Modell
%-----

%Spezialfall: Sauerstoffeintrag-----
ao2 = 0.7;
SOSAT = 10;
O2rate_calc = ao2 * ((SOSAT - SO)/SOSAT) * 1000; %D * konz_in_O2;
%-----

%Schaltzeitpunkte zur Steuerung des Sauerstoffeintrags
%if (t>14 & t<16) O2rate=0; else O2rate=O2rate_calc; end
%Regelung des Sauerstoffeintrags durch Messung der NO3-Konzentration
if (TRIG==1) O2rate=O2rate_calc; else O2rate=0; end
if (SNO>4 & TRIG==1) O2rate=0; TRIG=0; end
if (SNO<1 & TRIG==0) O2rate=O2rate_calc; TRIG=1; end

dydt(5,1) = dydt(5,1) + O2rate; % * D * scale_in(5,1) * konz_in(5,1); %Aufsaettigung mit Sauerstoff
%-----

%GESAMTRATE !!!-----
dydt = dydt + Qin * scale_in .* konz_in + ((Qin+Qr)/V1) * scale_rueck .* y -
        - ((Qin+Qr)/V1) * scale_becken .* y;
%-----
return

```

dglcore2B.m

**function** dydt = dglcore2B(t,y)

**global** W\_BECKEN W\_IN W\_RUECK KONZ\_IN QQ QQR VV1 VV2

```

%Biologische Parameter-----
%Prozessparameter
muH   = 6;
muA   = 0.8;
KSm   = 20;
KOm   = 0.2;
KNOm  = 0.5;
KNHm  = 1.0;
KXm   = 0.03; %fuer phi(XS/XH) ...rho6 core
bH    = 0.62;
bA    = 0.15; %siehe ASM2 S.13
kh    = 3.0;
etah  = 0.8;
etah  = 0.4;

%Stoichiometrie
YH    = 0.67;
YA    = 0.24;
fp    = 0.08;
%-----

%Verfahrenstechnische Parameter-----
scale_becken = W_BECKEN;
konz_in = KONZ_IN;
scale_in = W_IN;
scale_rueck = W_RUECK;
Qin=QQ;
Qr=QQR;
V1=VV1;
V2=VV2;
% D=DD;
% RD=RDD;
%-----

%Spezialfall: Parameter Sauerstoffeingrag-----
ao2   = 0.7;
SOSAT = 10;
%-----

%=====BECKEN B1=====

% Zustandsvektor y fuer Becken B1-----
%y(1)=XA, y(2)=XH, y(3)=XS, y(4)=XP, y(5)=SO, y(6)=SS, y(7)=SNH, y(8)=SNO ...
XA = y(1);
XH = y(2);
XS = y(3);

```

```

XP = y(4);
SO = y(5);
SS = y(6);
SNH = y(7);
SNO = y(8);
%-----

%Prozessraten-----
rho1 = muH * (SS/(SS+KSm)) * (SO/(SO+KOm)) * XH;
rho2 = muH * (SS/(SS+KSm)) * (1-(SO/(SO+KOm))) * (SNO/(SNO+KNOm)) * XH;
rho3 = muA * (SNH/(SNH+KNHm)) * (SO/(SO+KOm)) * XA;
rho4 = bH * XH;
rho5 = bA * XA;
rho6 = kh * (XS/(XS+XH*KXm)) * ( (SO/(SO+KOm)) + etah * (1-(SO/(SO+KOm))) *
      * (SNO/(SNO+KNOm)) ) * XH;
%-----

%Rate im Becken-----
%mit Monod
dydtB1 = [ ( rho3 - rho5 ); %dXA
           ( rho1 + rho2 - rho4 ); %dXH
           ( (1-fp) * (rho4 + rho5) - rho6 ); %dXS
           ( fp * (rho4 + rho5) ); %dXP
           ( ((YH-1)/YH)*rho1 - ((4.57-YA)/YA)*rho3 ); %dSO
           ( -(1/YH)*rho1 - (1/YH)*rho2 + rho6 ); %dSS
           ( -(1/YA)*rho3 ); %dSNH
           ( ((YH-1)/(2.86*YH))*rho2 + (1/YA)*rho3 ); %dSNO
           %DGL fuer das Kern-Modell
%-----

%Rate Sauerstoffeingang-----
O2rate = 0;%ao2 * ((SOSAT - SO)/SOSAT) * 1000;
%-----
%Schaltzeitpunkte zur Steuerung des Sauerstoffeintrags fuer Becken 1
%if (t>15 & t<35) O2rate=0; end
dydtB1(5,1) = dydtB1(5,1) + O2rate; %Aufsaettigung mit Sauerstoff
%-----

%=====
%=====BECKEN B2=====

% Zustandsvektor y fuer Becken B2-----
%y(9)=XA, y(10)=XH, y(11)=XS, y(12)=XP, y(13)=SO, y(14)=SS, y(15)=SNH, y(16)=SNO ...
XA = y(9);
XH = y(10);
XS = y(11);
XP = y(12);
SO = y(13);
SS = y(14);
SNH = y(15);
SNO = y(16);
%-----

```

```

%Prozessraten-----
rho1 = muH * (SS/(SS+KSm)) * (SO/(SO+KOm)) * XH;
rho2 = muH * (SS/(SS+KSm)) * (1-(SO/(SO+KOm))) * (SNO/(SNO+KNOm)) * XH; 110
rho3 = muA * (SNH/(SNH+KNHm)) * (SO/(SO+KOm)) * XA;
rho4 = bH * XH;
rho5 = bA * XA;
rho6 = kh * (XS/(XS+XH*KXm)) * ( (SO/(SO+KOm)) + etah * (1-(SO/(SO+KOm))) *
      * (SNO/(SNO+KNOm)) ) * XH;
%-----

%Rate im Becken-----
%mit Monod
dydtB2 = [ ( rho3 - rho5 ); %dXA 120
            ( rho1 + rho2 - rho4 ); %dXH
            ( (1-fp) * (rho4 + rho5) - rho6 ); %dXS
            ( fp * (rho4 + rho5) ); %dXP
            ( ((YH-1)/YH)*rho1 - ((4.57-YA)/YA)*rho3 ); %dSO
            ( -(1/YH)*rho1 -(1/YH)*rho2 + rho6 ); %dSS
            ( -(1/YA)*rho3 ); %dSNH
            ( ((YH-1)/(2.86*YH))*rho2 + (1/YA)*rho3 ); %dSNO
            %DGL fuer das Kern-Modell
%-----
%----- 130

%Rate Sauerstoffeingrag-----
O2rate = ao2 * ((SOSAT - SO)/SOSAT) * 1000;
%-----
%Schaltzeitpunkte zur Steuerung des Sauerstoffeintrags fuer Becken 2
%if (t>15 & t<35) O2rate=0; end
dydtB2(5,1) = dydtB2(5,1) + O2rate; %Aufsaettigung mit Sauerstoff
%-----

%===== 140

%GESAMTRATE !!!-----
%Becken B1
dydt(1:8,1) = dydtB1 + (Qin/V1) * scale_in .* konz_in + ((Qin+Qr)/V1) * scale_rueck .* y(9:16,1) -
      - ((Qin+Qr)/V1) * scale_becken .* y(1:8,1);
%Becken B2
dydt(9:16,1) = dydtB2 + ((Qin+Qr)/V2) * scale_becken .* y(1:8,1) -
      - ((Qin+Qr)/V2) * scale_becken .* y(9:16,1);
%-----

return 150

```

---

## Literatur

- [Bayer(1999)] K. Bayer. Vorlesung: "Angewandte Mikrobiologie I / II - Teilgebiet Wachstumskinetik und Prozessleitung. Skriptum; Institut für angewandte Mikrobiologie; Universität für Bodenkultur; Wien, 1999.
- [Bellomo and Pulvirenti(2000)] N. Bellomo and M. Pulvirenti. *Modeling in Applied Sciences - A Kinetic Theory Approach*. Birkhäuser Verlag AG; Basel, Berlin, Boston, 2000.
- [Breitenecker et al.(1993)Breitenecker, Ecker, and Bausch-Gall] Felix Breitenecker, Horst Ecker, and Ingrid Bausch-Gall. *Simulieren mit ACSL - Fortschritte in der Simulationstechnik*, volume 2. Hrsg.: O.Prof. Dr.-Ing. W. Ameling, Braunschweig/Wiesbaden, 1993.
- [Bryant and Wimpenny(1989)] T. N. Bryant and J. W. T. Wimpenny. *Computers In Microbiology: A Practical Approach*. IRL PRESS at Oxford University Press - Oxford; New York; Tokyo, 1989.
- [Cellier(1991)] F. E. Cellier. *Continuous System Modeling*. Springer Verlag; New York, Berlin, Heidelberg, 1991.
- [Chang and Tseng(1999)] Y. J. Chang and S. K. Tseng. A novel double-membrane system for simultaneous nitrification and denitrification in a single tank. *Letters in Applied Microbiology*, 28: 453–456, 1999.
- [Cloete and Muyima(1997)] T. E. Cloete and N. Y. O. Muyima. Microbial community analysis: The key to the design of biological wastewater treatment systems. Scientific and Technical Reports 5, Task Group On Mathematical Modelling For Design And Operation Of Biological Wastewater Treatment Processes (IAWQ), London, 1997.
- [Contois(1959)] D. E. Contois. Kinetics of Bacterial Growth: Relationship between Population Density and Specific Growth Rate of Continuous Cultures. *Journal of General Microbiology*, 21:40–50, 1959.
- [Cypionka(1999)] Heribert Cypionka. *Grundlagen der Mikrobiologie*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1999.
- [De Robertis and De Robertis JR.(1987)] E. D. P. De Robertis and E. M. F. De Robertis JR. *Cell and Molecular Biology*. Lea Febiger, Philadelphia, 8 edition, 1987.
- [Dinçer and Kargi(2000)] Ali R. Dinçer and Fikret Kargi. Kinetics of sequential nitrification and denitrification processes. *Enzyme and Microbial Technology*, 27:37–42, 2000.

- [Dochain and Vanrolleghem(2002)] Denis Dochain and Peter A. Vanrolleghem. *Dynamical Modelling and Estimation in Wastewater Treatment Processes*. IWA Publishing, 12 2002.
- [Ellis et al.(1996)Ellis, Barbeau, F., and Grady] Timothy G. Ellis, Daniel S. Barbeau, Smets Barth F., and C. P. Leslie Jr. Grady. Respirometric technique for determination of extant kinetic parameters describing biodegradation. *Water Environment Research*, 68(5):917–926, 1996.
- [Ellis and Eliosov(2001)] Timothy G. Ellis and Boris Eliosov. A Simpler Approach to Determining Biodegradation of SCOs in Wastewater Treatment. Dept. of Civil and Construction Engineering, Iowa State University, Ames, IA 50011, 2001.
- [Ellis et al.(1998)Ellis, F., and Grady] Timothy G. Ellis, Smets Barth F., and C. P. Leslie Jr. Grady. Effect of simultaneous biodegradation of multiple substrates on the extant biodegradation kinetics of individual substrates. *Water Environment Research*, 70(1):27–38, 1998.
- [Fritsche(2002)] Wolfgang Fritsche. *Mikrobiologie*. Spektrum Akademischer Verlag GmbH : Heidelberg : Berlin, 3. edition, 2002.
- [Gallert and Winter(1997)] Claudia Gallert and Josef Winter. *Biotechnology - Environmental Processes I*, volume 11a, chapter Bacterial Metabolism in Wastewater Treatment Systems. VCH, 2 edition, 10 1997. edited by: H.-J. Rehm and G. Reed.
- [Gujer(1986)] Willi Gujer. Anwendung der mathematischen Simulation von Reinigungsprozessen beim Ausbau von Kläranlagen. *ProAqua-ProVita '86; Basel 7. Okt 1986; Schriftenreihe der EA-WAG*, pages 5.1–5.19, 10 1986.
- [Gujer et al.(1998)] Willi Gujer et al. Activated Sludge Model No.3. Scientific and technical reports, Task Group On Mathematical Modelling For Design And Operation Of Biological Wastewater Treatment Processes (IAWQ), London, 1998.
- [Gujer and Henze(1991)] Willi Gujer and Mogens Henze. Activated Sludge Modelling and Simulation. *Water Sci. Tech.*, 23:1013–1023, 1991.
- [Gujer and Larsen(1995)] Willi Gujer and Tove A. Larsen. The Implementation of Biokinetics and Conservation Principles in ASIM. *Water Sci. Tech.*, 31(2):257–266, 1995.
- [Hannon and Ruth(1997)] Bruce Hannon and Matthias Ruth. *Modeling Dynamic Biological Systems*. Springer-Verlag; New York, Berlin, Heidelberg, 1997.

- [Hartmann(1983)] Ludwig Hartmann. *Biologische Abwasserreinigung*. Springer Verlag - Berlin; Heidelberg; New York, 1983.
- [Hartmann(1997)] Ludwig Hartmann. *Biotechnology - Environmental Processes I*, volume 11a, chapter Historical Development of Wastewater Treatment Processes, pages 6–16. VCH, 2 edition, 10 1997. edited by: H.-J. Rehm and G. Reed.
- [Henze et al.(1986)] M. Henze et al. Activated Sludge Model No.1. Scientific and Technical Reports 1, International Association on Water Pollution Research and Control (IAWPRC), London, 1986.
- [Henze et al.(1994)] M. Henze et al. Activated Sludge Model No.2. Scientific and Technical Reports 3, Task Group On Mathematical Modelling For Design And Operation Of Biological Wastewater Treatment Processes (IAWQ), London, 1994.
- [Henze et al.(1998)] M. Henze et al. Activated Sludge Model No. 2d. Scientific and technical reports, Task Group On Mathematical Modelling For Design And Operation Of Biological Wastewater Treatment Processes (IAWQ), London, 1998.
- [Henze(1997)] Mogens Henze. *Biotechnology - Environmental Processes I*, volume 11a, chapter Modeling of Aerobic Wastewater Treatment Processes, pages 418–427. VCH, 2 edition, 10 1997. edited by: H.-J. Rehm and G. Reed.
- [Jungblut and Möller(1998)] J. Jungblut and D. P. F. Möller. Modelling And Simulation Of New Biological Wastewater Treatment Plants. In R. Zobel and Möller D. P. F., editors, *Simulation - Past, Present, Future; ESM 98, Manchester*, pages 40–45. SCSI Publ., Delft, NL, 1998.
- [Karlson(1994)] Peter Karlson. *Kurzes Lehrbuch der Biochemie für Mediziner und Naturwissenschaftler*. Georg Thieme Verlag Stuttgart - New York, 14. edition, 1994.
- [Kinder(1997)] M. Kinder. *Stochastische Simulation biotechnischer Prozesse*. ARGESIM Verlag, 1997.
- [Kovárová-Kovar and Egli(1998)] Karin Kovárová-Kovar and Thomas Egli. Growth Kinetics of Suspended Microbial Cells: From Single-Substrate-Controlled Growth to Mixed-Substrate Kinetics. *Microbiology and Molecular Biology Reviews*, pages 646–666, Sept. 1998.
- [Mat(2002a)] *MATLAB: Function Reference Volume 1-3*. The Mathworks, Inc., 2002a. Version 6.5 (R13).
- [Mat(2002b)] *Optimization Toolbox User's Guide*. The Mathworks, Inc., 2002b. Version 2.2.



- [Meijer et al.(2000)Meijer, Van Loosdrecht, and Heijnen] S. C. F. Meijer, M. C. M. Van Loosdrecht, and J. J. Heijnen. Metabolic Modelling Of Full-Scale Biological Nitrogen And Phosphorus Removing WWTP'S. *Journal of Water Research*, 35(11):2711–2723, 2000.
- [Mudrack and Kunst(1994)] Klaus Mudrack and Sabine Kunst. *Biologie der Abwasserreinigung*. Gustav Fischer Verlag - Stuttgart; Jena; New York, 1994.
- [Rapp(1986)] P. E. Rapp. Oscillations and chaos in cellular metabolism and physiological systems. In Arun V. Holden, editor, *Chaos*, pages 179–208, Oxford Road, Manchester M13 9PL, UK, 1986. Manchester University Press.
- [Rehm and Reed(1997)] H.-J. Rehm and G. Reed. *Biotechnology - Environmental Processes I*, volume 11a. VCH, 2 edition, 10 1997. in cooperation with A. Pühler and P. Stadler.
- [Romanovsky et al.(1974)Romanovsky, Stepanova, and Chernavsky] Romanovsky, Stepanova, and Chernavsky. *Kinetische Modelle in der Biophysik*. VEB Gustav Fischer Verlag Jena, 1974.
- [Schaffer and Kot(1986)] W. M. Schaffer and M. Kot. Differential systems in ecology and epidemiology. In Arun V. Holden, editor, *Chaos*, pages 179–208, Oxford Road, Manchester M13 9PL, UK, 1986. Manchester University Press.
- [Scheikl(2000)] Joachim Scheikl. Hybrides Verknüpfen von dynamischen Teilmodellen und Datenmodellen. Master's thesis, Technische Universität Wien, 2000.
- [Schlegel(1992)] Hans G. Schlegel. *Allgemeine Mikrobiologie*. Georg Thieme Verlag; Stuttgart, New York, 7 edition, 1992. unter Mitarbeit von Christiane Zaborosch.
- [Schöberl(1989)] Marl Schöberl. Basic Principles of LAS Biodegradation. *Tenside Surfactants Detergents*, 26(2):86–94, 1989.
- [Schwarz(1997)] H. R. Schwarz. *Numerische Mathematik*. B. G. Teubner; Stuttgart, 4. edition, 1997.
- [Spain(1982)] James D. Spain. *BASIC microcomputer models in biology*. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1982.
- [Troch et al.(1995)Troch, Breiteneker, and Rattay] I. Troch, F. Breiteneker, and F. Rattay. Modellbildung und Simulation. Arbeitsunterlage zur Vorlesung; Technische Universität Wien, 1995.
- [Walter and M.(1999)] G. G. Walter and Contreras M. *Compartmental Modeling with Networks*. Birkhäuser Verlag AG; Basel, Berlin, Boston, 1999.

- [Walter(1993)] W. Walter. *Gewöhnliche Differentialgleichungen; Eine Einführung*. Springer Verlag; New York, Berlin, Heidelberg, 1993.
- [Wichern and Rosenwinkel(2002)] Marc Wichern and Karl-Heinz Rosenwinkel. *Bemessung von Sauerstoffbedarf und Überschussschlammanfall für die Membranbelebung auf Basis des ATV-DVWK-A 131 (2000)*, pages 640–647. KA-Wasserwirtschaft, Abwasser, Abfall, 2002.
- [Wöckl and Breitenecker(2000)] J. Wöckl and F. Breitenecker. Modelle für Abwasserreinigung - Modellarten, Implementierungen, Vergleich. Posterband zur Tagung ASIM 2000; Hamburg, 2000.
- [Wöckl(2000)] Jürgen Wöckl. Modellbildung und Simulation biologischer Abwasserreinigungsprozesse - Vergleich, Evaluierung und Erweiterung von Modellen. Master's thesis, Institut für Allgemeine Physik, Technische Universität Wien, 2000.
- [Zimmermann(1999)] Maria Zimmermann. Modellbildung und Simulation einer ATS-Anlage. Master's thesis, Technische Universität Wien, 1999.



### *Über den Autor ...*



Jürgen Wöckl studierte Physik und Wirtschaftswissenschaften an der Technischen Universität Wien. Während seines Diplomstudiums war er bereits an mehreren Forschungsprojekten in Kooperation mit den Austria Research Centers (ARC) beteiligt, diese Forschungsaktivitäten wurden im Rahmen des Doktoratsstudiums fortgeführt. Die Dissertation beschäftigte sich mit Modellbildung und Simulation biologischer Abwasserreinigungsprozesse; die Ergebnisse dieser Arbeit sind in diesem Band publiziert. Er setzte seine wissenschaftliche Arbeit als Universitätsassistent an der Wirtschaftsuniversität Wien, Institut für Produktionsmanagement. Seine Forschungsinteressen reichen von Operations Research, Modellierung und Optimierung von Business Strategien, Spieltheorie bis hin zu selbstlernenden Verfahren, wobei Modellbildung und Simulation noch immer eine große Rolle spielt.

---

### *Über diesen Band ...*

Diese Arbeit beschäftigt sich mit unterschiedlichen mathematischen Modellierungsansätzen biologischer Abwasserreinigungsverfahren. Hierbei liegt der Fokus auf der Modellierung der enzymatischen Abbaukinetik als kontinuierlichen Prozess, kombiniert mit verfahrenstechnischen Betriebsverfahren bzw. Regelungen. Die Arbeit beschreibt die Grundlagen der Modellierung der Stoffwechselkinetik und der biologischen Abwasserreinigung, weiters werden existierende Modellierungsansätze diskutiert und Erweiterungen basierend auf erprobten Annahmen des "Activated Sludge Model 1" (ASM 1) der IAWQ durchgeführt. Zur Adaption der Enzymkinetik wird die Chemostaten-Theorie dargestellt und relevante kinetische Annahmen ins Modell integriert. Die Arbeit wird durch Simulationsstudien von Abwasserreinigungsverfahren bzw. -anlagen abgerundet.

---

### *Über diese Reihe ...*

Die Bände dieser neuen ASIM - Reihe Fortschrittsberichte Simulation konzentrieren sich auf neueste Lösungsansätze, Methoden und Anwendungen der Simulationstechnik (Ingenieurwissenschaften, Naturwissenschaften, Medizin, Ökonomie, Ökologie, Soziologie, etc.).

ASIM, die deutschsprachige Simulationsvereinigung (Fachausschuss 4.5 der GI - Gesellschaft für Informatik) hat diese Reihe ins Leben gerufen, um ein rasches und kostengünstiges Publikationsmedium für derartige neue Entwicklungen in der Simulationstechnik anbieten zu können.

Die Fortschrittsberichte Simulation veröffentlichen daher: \* Monographien mit speziellem Charakter, wie z. B. Dissertationen und Habilitationen \* Berichte zu Workshops (mit referierten Beiträgen) \* Berichte von Forschungsprojekten \* Handbücher zu Simulationswerkzeugen (User Guides, Vergleiche, Benchmarks), und Ähnliches.

Die Kooperation mit den ARGESIM Reports der ARGESIM vermittelt dabei zum europäischen Umfeld und zur internationalen Publikation.