

## Schlussbericht

Zuwendungsempfänger: Fachhochschule Oldenburg/Ostfriesland/Wilhelmshaven - Standort Emden - Fachbereich Technik - Institut für Umwelttechnik - EUTEC	Förderkennzeichen: <b>02WA0578</b>
Vorhabensbezeichnung: (Thema) „Exportorientierte Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Wasserver- und -entsorgung“, Teil II „Abwasserbehandlung und Wasserwiederverwendung“, Kernprojekt C „Simulation und Konzepte der Abwasserbehandlung“, Teilprojekt C 1.2 „Simulation von Belebungsanlagen mit dem kinetischen Ansatz FUKA sowie Simulation von Tropfkörpern- und Tauchkörperanlagen“	
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2005 - 30.06.2008	Berichtszeitraum: 01.05.2005 - 30.06.2008

### Hinweis:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung unter dem Förderkennzeichen 02WA0578 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor.

Bearbeitet durch:  
Dr. Frank Uhlenhut  
Institut für Umwelttechnik -EUTEC- der FH Oldenburg/Ostfriesland/Wilhelmshaven  
(Standort Emden, Fachbereich Technik)

Emden, 03.02.2009

## 0 Inhaltsverzeichnis

	<b>Seite</b>
<b>1</b>	<b>Aufgabenstellung/Ziele im Projekt</b> <b>2</b>
1.1	Zielsetzung im Rahmen des Gesamtprojektes <b>2</b>
1.2	Aufgabenstellung des Teilprojektes <b>4</b>
1.3	Arbeitsvoraussetzungen <b>6</b>
1.4	Planung und Ablauf des Vorhabens <b>6</b>
<b>2</b>	<b>Wissenschaftlicher und technischer Stand</b> <b>8</b>
2.1	Modellansatz FUKA <b>8</b>
2.2	Modellansätze ASM 1 und ASM 3 <b>13</b>
2.3	Modellierung von Biofilmen <b>16</b>
2.4	Biofilmmodell in SIMBA® <b>17</b>
<b>3</b>	<b>Zusammenarbeit mit den Kooperationspartnern</b> <b>18</b>
<b>4</b>	<b>Wissenschaftlich-technische Ergebnisse</b> <b>20</b>
4.1	Simulation des Belebungsverfahrens <b>20</b>
4.1.1	Beschreibung/Konfiguration der Versuchsanlage <b>24</b>
4.1.2	Ergebnisse der Simulationsrechnungen <b>28</b>
4.2	Simulation der Biofilmverfahren <b>38</b>
4.2.1	Simulation des Tropfkörperverfahrens <b>38</b>
4.2.1.1	Beschreibung/Konfiguration der Versuchsanlage <b>38</b>
4.2.1.2	Ergebnisse der Simulationsrechnungen <b>42</b>
4.2.2	Simulation des getauchten Festbettes <b>48</b>
4.2.2.1	Beschreibung/Konfiguration der Versuchsanlage <b>48</b>
4.2.2.2	Ergebnisse der Simulationsrechnungen <b>52</b>
4.2.3	Simulation des Scheibentauchkörpers <b>59</b>
4.2.3.1	Beschreibung/Konfiguration der Versuchsanlage <b>59</b>
4.2.3.2	Ergebnisse der Simulationsrechnungen <b>63</b>
<b>5</b>	<b>Veröffentlichungen und Vorträge</b> <b>71</b>
<b>6</b>	<b>Erfolgskontrollbericht</b> <b>72</b>
6.1	Beitrag des Ergebnisses zu den förderpolitischen Zielen <b>72</b>
6.2	Wissenschaftlich-technisches Ergebnis des Vorhabens <b>72</b>
6.3	Fortschreibung des Verwertungsplanes <b>72</b>
6.4	Präsentationsmöglichkeiten für mögliche Nutzer <b>73</b>
6.5	Einhaltung der Ausgaben- und Zeitplanung <b>74</b>
<b>7</b>	<b>Literatur</b> <b>76</b>
<b>8</b>	<b>Kurzfassung</b> <b>78</b>
	<b>Anhang 1 bis Anhang 8</b> <b>80</b>

# 1 Aufgabenstellung/Ziele im Projekt

## 1.1 Zielsetzung im Rahmen des Gesamtprojektes

Ziel des Verbundprojektes „**Exportorientierte Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Wasserver- und -entsorgung, Teil II: Abwasserbehandlung und Wasserwiederverwendung**“ ist es, auch in diesem Bereich deutsches Wissen und die vielfältigen praktischen Erfahrungen auf diesem Gebiet verstärkt für die internationale Zusammenarbeit, insbesondere für deutsche Ingenieurbüros, die im Ausland akquirieren, verfügbar zu machen. Der Weg hierzu ist die Anpassung deutscher Technologie an die unterschiedlichen Randbedingungen internationaler Märkte.

Die Verfahren der Abwasserreinigung befinden sich in Deutschland auf einem hohen Niveau. Für die Simulation dieser Verfahren stehen unterschiedliche Modelle (Activated Sludge Model No.1 = ASM 1, Activated Sludge Model No.3 = ASM 3, FUKA = Fundamentaler kinetischer Ansatz...) zur Verfügung. Sie sind allerdings auf die regionalen Gegebenheiten angepasst und besitzen für den Export in Entwicklungs- und Transformationsländer (*Staaten, die sich im Übergang (Transformation) von der Zentralverwaltungswirtschaft in eine marktwirtschaftliche Wirtschaftsordnung befinden*) Limitierungen hinsichtlich folgender Einflussfaktoren:

- Klimatische Bedingungen
- Abwasserzusammensetzung
- Prozessführung

Die Struktur des Gesamtprojektes wird in *Abbildung 1* aufgezeigt. Der Forschungsanteil der FH OOW im hier dargestellten Teilprojekt des BMBF-Verbundprojektes umfasste die Anpassung der Simulation des Belebungsverfahrens sowie der Biofilmverfahren an diese Besonderheiten.

Durch die Kooperationspartner der Kernprojekte A (Abwasserbehandlung) und B (Wiederverwendung und Desinfektion) wurde eine breite Datenbasis für die relevanten Parameter

- Temperatur (Bereich von 5 °C bis 35 °C)
- Reaktortyp (Belebungs-, Biofilm → Tropfkörper, getauchtes Festbett, Scheibentauchkörper)
- Salzgehalt (bis 20 g/l)
- Abwasserzusammensetzung

erarbeitet. Diese Versuchsdaten wurden im Projekt der FH OOW für die Anpassung der Simulation genutzt. Für die Simulation des Belebungsverfahrens wurde der an der FH OOW neu entwickelte, kinetische Modellansatz FUKA verwendet. Dieser kann die Monod-Kinetik ersetzen und ermöglicht eine detaillierte Beschreibung der Elimination der Kohlenstoff- und insbesondere der Stickstoffverbindungen. Die Simulation der Biofilmanlagen erfolgte unter Verwendung des im Simulationsprogramm SIMBA<sup>®</sup> implementierten Biofilmmodells. Dabei wurde für die Beschreibung der biologischen Abbauprozesse das vorgegebene modifizierte ASM 1-Modell eingesetzt.

Über Sensitivitätsanalysen wurden Möglichkeiten für die Kalibrierung und Vereinfachung der Ansätze untersucht.

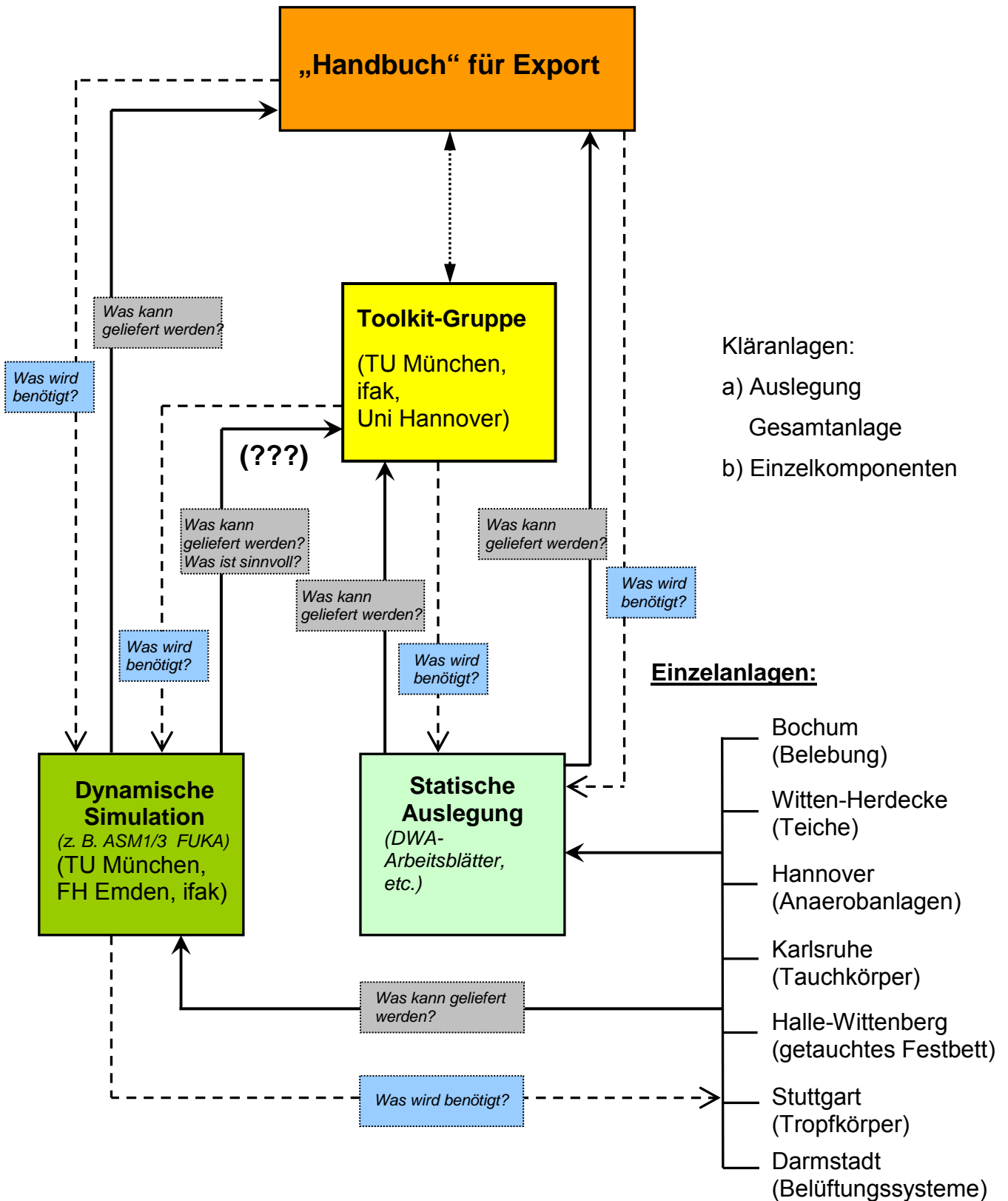


Abbildung 1: Struktur des Gesamtprojektes (Einordnung der Aufgabenbereiche „Simulation“ und „Toolkit“).

## **1.2 Aufgabenstellung des Teilprojektes**

Für den Teilbereich C „Simulation und Konzepte der Abwasserbehandlung“ (Simulation der untersuchten Anlagen und Erstellung des Toolkits; beteiligte Projektpartner: TU München, ifak, FH Emden, Universität Witten/Herdecke, Universität Hannover) wurden innerhalb des Gesamtvorhabens folgende Zielsetzungen formuliert:

- Rechnungen zur Auslegung von Anlagen im Ausland leicht nutzbar machen für deutsche Ingenieurbüros
- Optimale Anpassung der Anlagentechnologien vor Ort ermöglichen
- Darstellung des hohen Standards der Abwassertechnik in Deutschland als Wettbewerbsvorteil in der globalen Konkurrenz für den Verkauf im Ausland

In *Abbildung 2* werden die Verknüpfungen der beiden Projektbereiche Simulation und Toolkit anschaulich dargestellt. Die konkreten Projektziele des im vorliegenden Abschlussbericht der FH Emden (Institut für Umwelttechnik – EUTEC) beschriebenen Teilprojektes lauteten:

- Modellierung von Belebungsanlagen mit dem neuen kinetischen Modellansatz FUKA.
- Vergleich mit den entsprechenden Simulationsergebnissen (Modellansätze ASM 1 & 3) der TU München.
- Modellierung von Biofilmanlagen (Tropfkörper/Tauchkörper/getauchte Festbetten).

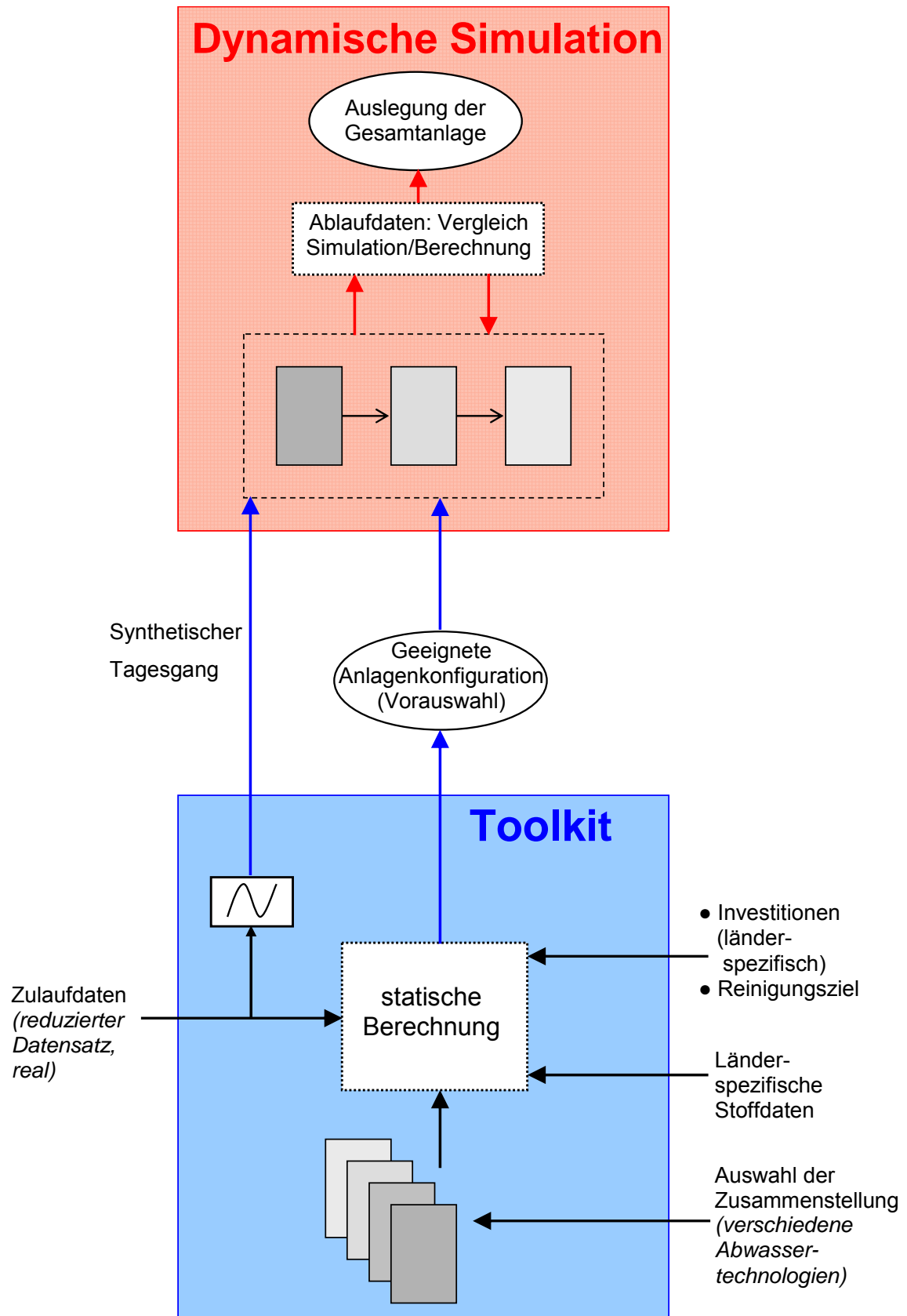


Abbildung 2: Verknüpfung der Projektbereiche Simulation und Toolkit.

### 1.3 Arbeitsvoraussetzungen

Abgesehen von der durch die Fördermittel finanzierten Stelle konnte seitens der FH OOW kaum zusätzliches Personal eingebracht werden. Es waren aber beratende und unterstützende Tätigkeiten durch die Professoren des Instituts für Umwelttechnik – EUTEC und des Fachbereichs Technik sowie die Ingenieure des Fachbereichs Technik in folgendem Umfang möglich:

unterstützender Professor (1 x C3 / 15 %, 18 PM)	= 19.173 EUR
unterstützender Laboringenieur (1 x BAT IVb / 25 %, 18 PM)	= 17.034 EUR

Sachmittel:

Die vorhandene Laborausstattung in der Abteilung „Naturwissenschaftliche Technik“ (Chemietechnik: Technikum, Labore für anorganische, organische und physikalische Chemie; Biotechnologie: Labore für Mikrobiologie, Biochemie und Fermentationstechnik; Instrumentelle Analytik: AAS, ICP-AES, IR, UV/VIS, MS, GC, GC-MS-Kopplung, HPLC, CHN-Analytik, Polarographie, u. a. m.) konnte genutzt werden.

Ein für die Durchführung von Simulationsrechnungen geeigneter PC musste aus den beantragten Fördermitteln beschafft werden, da dieser während der gesamten Projektlaufzeit benötigt wurde und nicht für andere Aufgaben zur Verfügung stand. Die spezielle Software (MATLAB/SIMULINK, SIMBA<sup>®</sup>) war zwar als Grundlizenz vorhanden, aber innerhalb der Projektlaufzeit erfolgten Softwareupdates, um die Simulationsrechnungen mit der aktuellen Softwareversion durchführen zu können. Die dafür anfallenden Kosten waren beantragt und in der Fördersumme für diesen Zweck vorgesehen worden und wurden wie geplant aus der Förderung finanziert.

Seitens der FH OOW wurden zudem folgende Raumnutzungen (Pauschale: 12,79 EUR / Monat und m<sup>2</sup>) und Gerätenutzungen als Eigenmittel in das Projekt eingebracht:

- Büroraum mit besonderer EDV-Ausstattung  
Fläche: 16 m<sup>2</sup>, Nutzungsdauer: 36 Monate 7.367 EUR
- Nutzung der EDV-Ausstattung (Hochschulrechenzentrum;  
Server, Anbindung an das Internet), Nutzungsdauer: 36 Monate 4.000 EUR
- Chemisch-technisches Labor mit besonderen Anforderungen  
Fläche: 20 m<sup>2</sup>, Nutzungsdauer: 15 Monate 3.837 EUR
- Nutzung der Laboreinrichtungen (Geräte für die  
Parameterbestimmung, etc.), Nutzungsdauer: 15 Monate 5.000 EUR

Gesamtwert der Nutzung für den Zeitraum von 3 Jahren: 20.204 EUR

**Gesamtsumme Eigenanteil: 56.411 EUR**

### 1.4 Planung und Ablauf des Vorhabens

Bei dem durchgeführten Forschungsvorhaben handelt es sich um ein Teilprojekt des BMBF-Verbundvorhabens „Exportorientierte Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Abwasserbehandlung“. Das Projekt wurde in Zusammenarbeit mit zahlreichen Partnern aus dem Bereich der Wissenschaft und auch Industrie durchgeführt.

In den Kernprojekten A und B wurden die verschiedenen Abwasserbehandlungsverfahren unter länderspezifischen Bedingungen betrachtet und die für deren Nachbildung in der Simulation (Kernprojekt C) benötigten Eingangsparameter ermittelt.

Im Rahmen des vorliegenden Teilvorhabens der FH Emden erfolgte eine Zusammenarbeit mit folgenden Kooperationspartnern:

- Technische Universität München, Lehrstuhl für Wassergüte und Abfallwirtschaft, Dr.-Ing. M. Wichern, (Prof. Dr.-Ing. P. A. Wilderer/Prof. Dr. H. Horn)
- Institut für Automation und Kommunikation e. V. Magdeburg, Dr. J. Alex
- Ruhr-Universität Bochum (= RU Bochum), Lehrstuhl für Siedlungswasserwirtschaft und Umwelttechnik, Prof. Dr.-Ing. H. Orth
- Universität Witten-Herdecke, Institut für Umwelttechnik und Management, Prof. Dr.-Ing. Dr. rer. pol. K.-U. Rudolph
- Universität Hannover, Institut für Siedlungswasserwirtschaft und Abfalltechnik, Prof. Dr.-Ing. K.-H. Rosenwinkel
- Universität Stuttgart, Institut für Siedlungswasserbau, Wassergüte- und Abfallwirtschaft, Abteilung Abwassertechnik, Prof. Dr.-Ing. J. Pinnekamp
- Universität Karlsruhe, Institut für Siedlungswasserwirtschaft, Prof. Dr.-Ing. E. h. H. H. Hahn, Ph. D.
- Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Prof. Dr.-Ing. H. Köser

Innerhalb des Projektes war insbesondere im Teilbereich Simulation eine enge Zusammenarbeit zwischen der FH Emden, der TU München und dem ifak zwingend erforderlich. Daher wurden regelmäßige Treffen (siehe Zusammenstellung in *Tab. 1*, Abschnitt 3) der an der Durchführung der Forschungsarbeiten beteiligten Mitarbeiter abgehalten, um die aktuellen Ergebnisse zu diskutieren und das weitere Vorgehen zu koordinieren.

Da zudem eine Vernetzung zu zahlreichen Teilprojekten des Verbundes bestand, mussten regelmäßige Zusammenkünfte mit den entsprechenden Kooperationspartnern (Universität Stuttgart, Universität Hannover, Ruhr-Universität Bochum, Universität Karlsruhe, Universität Witten-Herdecke, MLU Halle-Wittenberg) abgehalten werden, um die erzielten Ergebnisse zu diskutieren und zu bewerten und das weitere Vorgehen zu koordinieren.

Nach Beginn der Projektes im Mai 2005 erfolgte zunächst gemeinsam mit den Projektpartnern TU München und ifak die Formulierung eines „Messprogramms“ mit der Vorgabe der für die Simulationsrechnungen der verschiedenen Klärtechniken benötigten Eingangsparameter. Dieses wurde an die Partner der betroffenen Teilprojekte aus den Kernprojekten A und B verteilt und anschließend auf dem Treffen am 21./22. November 2005 in Hannover diskutiert. Auf der Grundlage der von den einzelnen Partnern dargestellten Möglichkeiten innerhalb des jeweiligen Projektes, die für die Simulation benötigten Parameter/Messwerte ermitteln zu können, wurde die Vorgabe für das Messprogramm angepasst und ein von allen Teilnehmern akzeptiertes „Basis-messprogramm“ formuliert („minimaler“ Parametersatz).

⇒ Problem: Damit wurde bereits im Vorfeld die zu erwartende Genauigkeit der Simulation signifikant eingeschränkt, da die „Güte/Genauigkeit“ der Simulationsergebnisse maximal nur der „Güte/Genauigkeit“ der Eingangsdaten entsprechen kann. Diese Problematik wurde noch einmal explizit auf dem Gesamtprojekt-Treffen am 04./05. Mai 2006 in Darmstadt aufgezeigt und ausdiskutiert. Dabei wurde mehrheitlich entschieden, dass durch die Simulation keine zusätzlichen Anforderungen an die übrigen Teilprojekte entstehen dürften und mit den dort ohnehin geplanten/generierten Daten gearbeitet werden müsse.



## 2 Wissenschaftlicher und technischer Stand

Die dynamische Simulation hat sich in den vergangenen Jahren als Werkzeug zur Auslegung von Kläranlagen sowie zur Beschreibung der dort stattfindenden Abbauprozesse immer mehr etabliert. Mit Hilfe geeigneter Modellierungen lässt sich das Verhalten einer Belebungsanlage hinsichtlich des biologischen Abbaus der organischen Kohlenstoff- und Stickstoffverbindungen beschreiben. Die Simulationsprogramme können in der Praxis zur Auslegung und zur Optimierung des Betriebes von Kläranlagen eingesetzt werden. Mit Hilfe geeigneter Modellansätze kann die Wirkung veränderlicher Zulaufbelastungen, Temperaturen und Sauerstoffgehalte, etc. auf die Reinigungsleistung, den Überschussschlammanfall und den Energieverbrauch berechnet werden. Ein wesentlicher Vorteil dieser Modelle liegt darin, dass mit Simulationsrechnungen kostengünstiger als mit Versuchen Aussagen über den optimalen Betrieb und eine sichere Bemessung von Abwasserreinigungsanlagen getroffen werden können. Bei großen Anlagen können zudem kaum Versuche zur Optimierung durchgeführt werden. Zudem können diese mathematischen Ansätze genutzt werden, um Bemessungsrichtwerte abzusichern. Temperaturänderungen, Spitzenbelastungen und verschiedene Sauerstoffgehalte sind typische Lastfälle, bei denen die Simulation schnell und kostengünstig nötige Sicherheiten für die Auslegung aufzeigen kann.

Die speziellen Abwasserverhältnisse gerade in Schwellen- und Entwicklungsländern sind deutlich verschieden von denen in Deutschland. Dies muss bei der Anpassung der Modelle berücksichtigt werden, so dass der Aufwand für deren Kalibrierung und die Anzahl der benötigten Messdaten zur Berechnung reduziert werden können.

Die im Rahmen des Teilprojektes der FH Emden eingesetzten Modelle werden nachfolgend vorgestellt. Die Ansätze ASM 1 und ASM 3 werden dabei nur kurz behandelt, da diese im Teilprojekt der TU München für die Simulation von Belebungsanlagen verwendet wurden und eine ausführliche Darstellung in dem entsprechenden Abschlussbericht gegeben wird.

### 2.1 Modellansatz FUKA

Am Institut für Umwelttechnik – EUTEC der FH OOW wurde ein neuer Modellansatz (FUKA = Fundamentaler kinetischer Ansatz) für die in der biologischen Reinigungsstufe einer nach dem Belebungsverfahren arbeitenden Kläranlage ablaufenden Prozesse der C- und N-Elimination entwickelt, welcher die biologischen Abbauvorgänge mit einem Satz fundamentaler, kinetischer Gleichungen beschreibt. Für dessen Formulierung wird der komplette reaktionskinetische Ansatz ohne Näherungen (Monod Ansatz) zur Lösung gebracht. Folgender Reaktionsmechanismus wird für den Abbau eines Substrates S durch die Biomasse X zugrunde gelegt:



Das in der flüssigen Phase gelöste Substrat S gelangt zunächst durch einen Transportprozess (z. B. Diffusion) an die Zellmembran des Mikroorganismus X und passiert diese durch einen Transportvorgang (aktiver Transport oder Diffusion). Anschließend findet der biochemische Abbau des Substrates statt. Zur Vereinfachung des Modellansatzes wird nur ein „geschwindigkeitsbestimmender Schritt“ ( $k_1$ ) als Gesamtreaktion betrachtet, obwohl daran in der Regel verschiedene Enzyme beteiligt sind. Es wird zunächst die Bildung eines Enzym-Substrat-Komplexes XS postuliert, der dann einerseits zum Substrat und freien Enzym zurückreagieren ( $k_{-1}$ ) und andererseits

unter Bildung des Produktes P sowie neuer Biomasse X weiterreagieren ( $k_2$ ) kann. Das in der Zelle gebildete Produkt P gelangt ebenfalls durch Diffusion oder Transport durch die Zellmembran und verteilt sich anschließend innerhalb der flüssigen Phase. Zur Erhaltung eines möglichst einfachen und übersichtlichen Modells werden die Diffusions- und Transportvorgänge nicht explizit betrachtet, sondern in die Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten der betreffenden Schritte einbezogen.

Die Gleichungen für die Reaktionsgeschwindigkeiten der im Modellansatz betrachteten Komponenten werden nach dem in der chemischen Reaktionskinetik üblichen Verfahren formuliert und lauten z. B. für den unter (1) beschriebenen Prozess:

$$\frac{d[S]}{dt} = -k_1 * [S] * [X] + k_{-1} * [XS] \quad (2)$$

$$\frac{d[X]}{dt} = -k_1 * [S] * [X] + k_{-1} * [XS] + n * k_2 * [XS] \quad (3)$$

$$\frac{d[XS]}{dt} = k_1 * [S] * [X] - k_{-1} * [XS] - k_2 * [XS] \quad (4)$$

$$\frac{d[P]}{dt} = m * k_2 * [XS] \quad (5)$$

Der neue kinetische Modellansatz wurde zunächst mit der Monod-Kinetik verglichen (Uhlenhut et al., 1999). Dabei zeigte sich, dass dieser im Gegensatz zur Monod-Kinetik auch für die Beschreibung von Reaktionen mit Zwischenproduktbildung geeignet ist. Diese Fälle treten in der Praxis relativ häufig auf, so dass ein Bedarf für die möglichst realistische mathematische Beschreibung solcher Systeme gegeben ist. Der Mechanismus dieser Reaktionen kann durch den kinetischen Ansatz genauer erfasst werden als mit der Monod-Kinetik.

Daraufhin erfolgten die Anwendung des neuen kinetischen Ansatzes auf die Vorgänge der Nitrifikation sowie der Vergleich der simulierten Werte mit den experimentellen Ergebnissen aus Batch-Versuchen. Dabei konnten die experimentell erhaltenen Konzentrationsverläufe für die Größen Ammonium, Nitrit und Nitrat mit dem neuen kinetischen Modellansatz für die Nitrifikationsvorgänge mit guter Übereinstimmung nachgebildet werden (Uhlenhut et al., 2000).

Auf der Grundlage dieser Ergebnisse wurde ein neuer kinetischer Modellansatz für die in der biologischen Reinigungsstufe einer nach dem Belebungsverfahren arbeitenden Kläranlage ablaufenden Prozesse der C- und N-Elimination entwickelt (Uhlenhut und van Lessen, 2001; Uhlenhut et al., 2001; Uhlenhut und van Lessen, 2002). Im Gegensatz zum ASM 1 und ASM 3 wird bei dem neuen Modellansatz auch das Nitrit als eigenständige Komponente erfasst. Damit lässt sich im Vergleich zum ASM 1 eine genauere Abbildung der Nitrifikationsvorgänge erreichen und die Konzentration der problematischen Verbindung Nitrit kann ebenfalls in der Simulation betrachtet werden. Zudem ist auf Grund der Tatsache, dass ausschließlich analytisch leicht erfassbare, gelöste Stickstoffverbindungen betrachtet werden, die Stickstofffraktionierung im Zulauf sehr übersichtlich (als weiterer Nachteil des ASM 1 wird von (Nowak, 1997) genannt, dass die Stickstofffraktionierung im Zulauf sowie die Bilanzierung des Stickstoffs durch implizite (gelöster und partikulärer abbaubarer organischer Stickstoff) und explizite Modellkomponenten (an CSB-Fractionen gebundene Stickstoff-Fractionen) unübersichtlich ist).

In *Abbildung 3a* und *Abbildung 3b* werden die wesentlichen Aspekte des neuen Modellansatzes FUKA aufgezeigt. Die Änderungen des pH-Wertes und der Temperatur können bei Bedarf in den Modellansatz implementiert werden.

Der an der FH OOW neu entwickelte kinetische Modellansatz FUKA wurde als benutzerdefiniertes Modell in das Simulationsprogramm SIMBA® eingebunden und erfolgreich für die Simulation verschiedener kommunaler Kläranlagen eingesetzt.

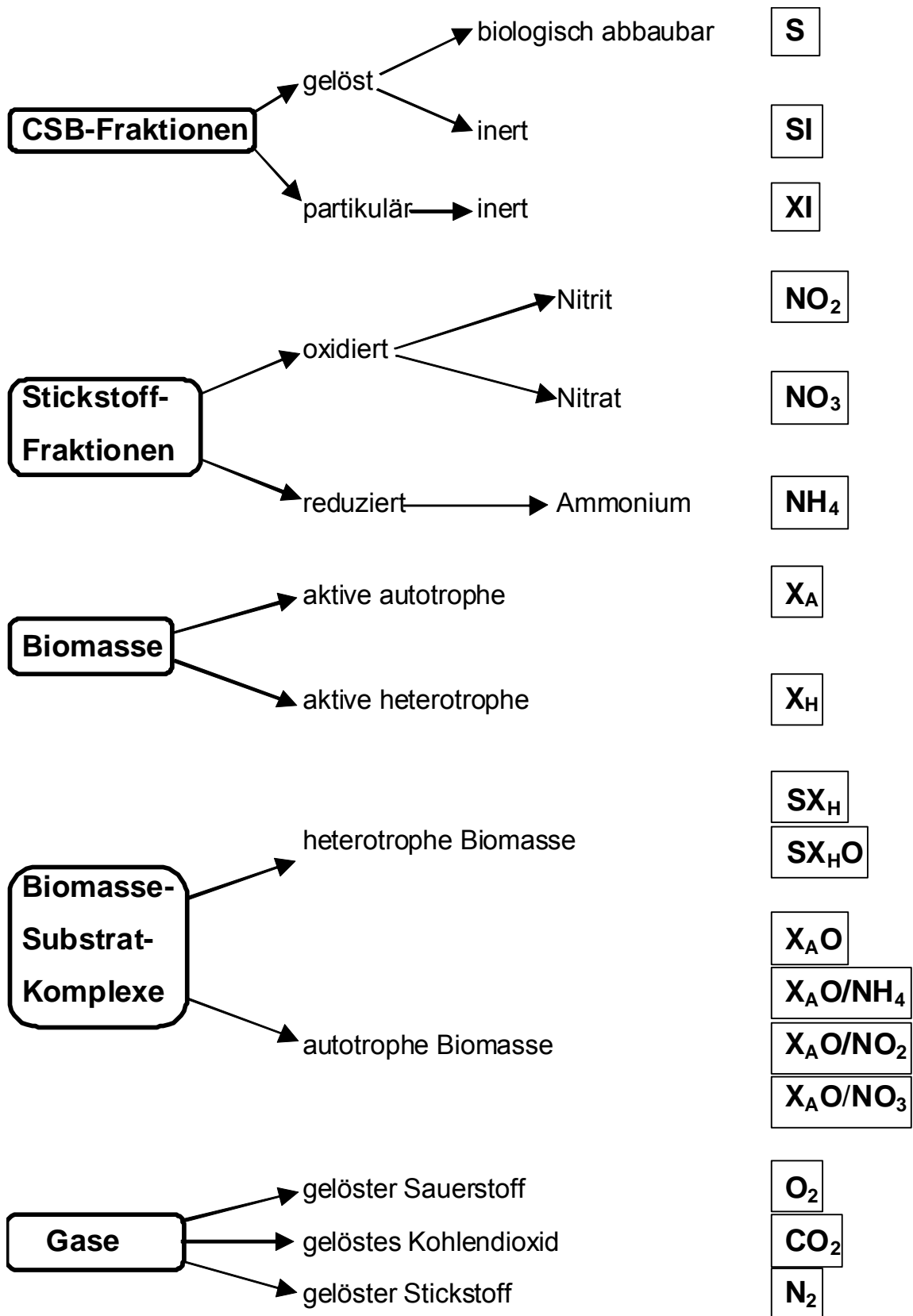


Abbildung 3a: Übersichtsschema der 17 im Modellansatz FUKA definierten Stoffgruppen.

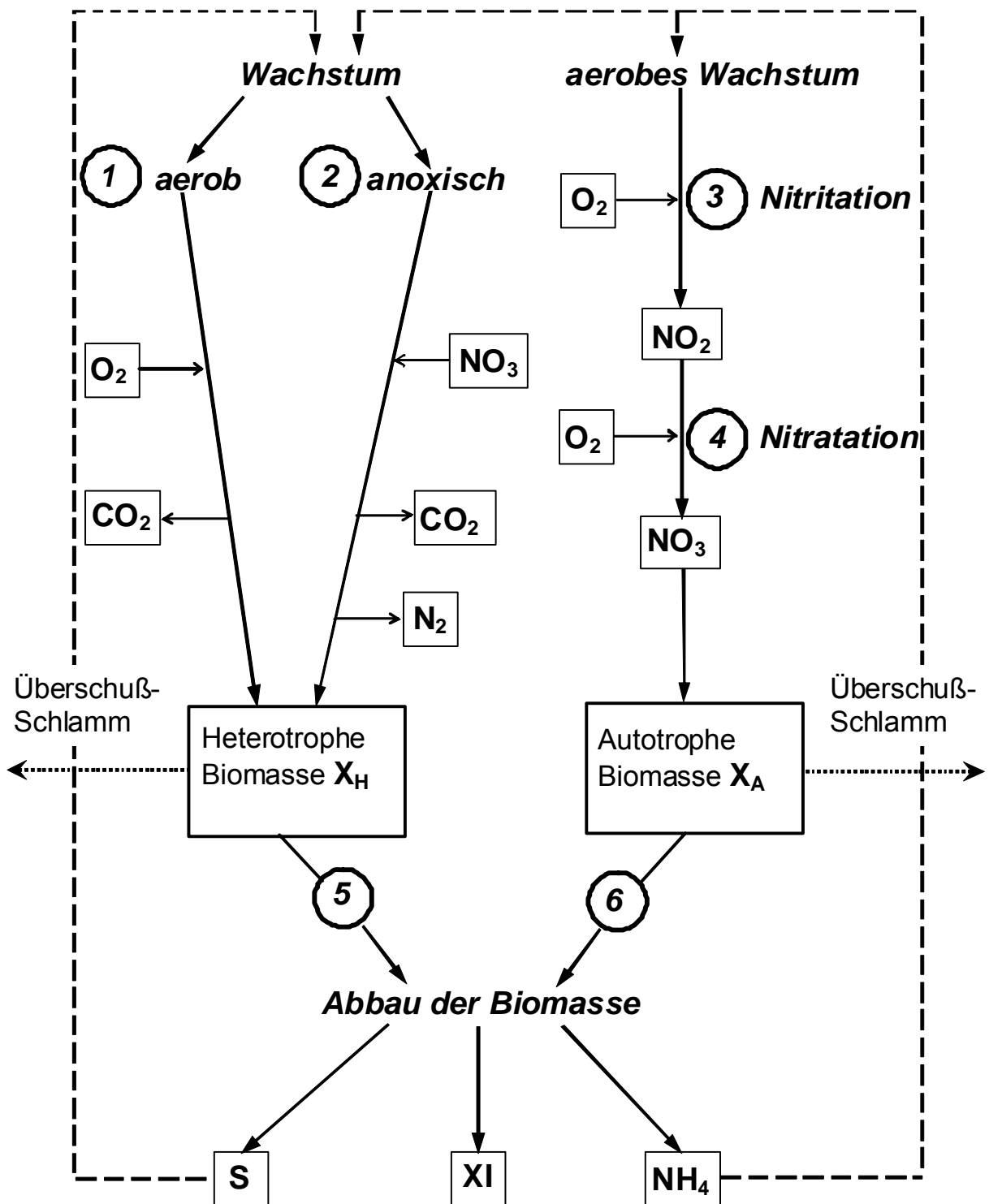


Abbildung 3b: Vereinfachte Darstellung der Zusammenhänge zwischen den Stoffgruppen und Prozessen des Modellansatzes FUKA (sämtliche Biomasse-Substrat-Komplexe wurden nicht berücksichtigt).

## 2.2 Modellansätze ASM 1 und ASM 3

Die IWA (International Water Association, früher: IAWQ - International Association on Water Quality) veröffentlichte mehrere Ansätze (Grady et al., 1987; Gujer et al., 1995; Henze et al., 1998; Gujer et al., 1998) zur modellmäßigen mathematischen Beschreibung der biologischen Prozesse in Belebtschlammssystemen auf der Basis des 1949 von *Monod* veröffentlichten Ansatzes zur Charakterisierung des Wachstums von Mikroorganismen (Monod, 1949).

Den Kern dieser Modelle bildet jeweils ein System gekoppelter Differentialgleichungen (Modellmatrix). In ihm sind sämtliche Informationen zur Kinetik und Stöchiometrie in einer übersichtlichen Form zusammengefasst. Von besonderer Bedeutung sind dabei die auf dem IWA-Modell No.1 (Grady et al., 1987) (auch ASM 1, IAWQ-Modell No.1) basierenden Programmentwicklungen.

Nach zehnjähriger Erfahrung in der Anwendung des ASM 1 veröffentlichte die IWA das ASM 3 (Gujer et al., 1998), welches einige Schwächen des ASM 1 korrigiert, nicht unbedingt notwendige Teile vereinfacht, und neue Effekte berücksichtigt. Auf dem IAWQ-Seminar „Modelling and Microbiology of Activated Sludge Processes“ 1998 in Kollokoll wurde das Activated Sludge Model No.3 der IWA vorgestellt. Das ASM 3 bildet (wie das ASM 1) die biologischen Prozesse des Kohlenstoffabbaus und der Stickstoffelimination ab. Die 13 Stoffgruppen des ASM 3 sind in *Abbildung 4a* zusammengestellt. *Abbildung 4b* zeigt die 12 biologischen Prozesse des ASM 3 und veranschaulicht deren Wirkungen auf die einzelnen Stoffgruppen.

In diesem Modell wurde den mit dem Ansatz ASM 1 gemachten Erfahrungen Rechnung getragen, so dass das ASM 3 als überarbeitete Version des ASM 1 verstanden werden kann. Im Vergleich zum ASM 1 wurde die Speicherung organischer Substrate als zusätzlicher Prozess eingeführt. Außerdem wurde der Zerfallsprozess (Lyse) durch eine endogene Respiration ersetzt. Auch bezüglich der Definition der im Modell enthaltenen Stoffgruppen gibt es einige entscheidende Änderungen.

Die biologische Phosphorelimination wird in den Modellansätzen ASM 2 und 2d (Gujer et al., 1995; Henze et al., 1998) behandelt und ist im ASM 3 nicht berücksichtigt.

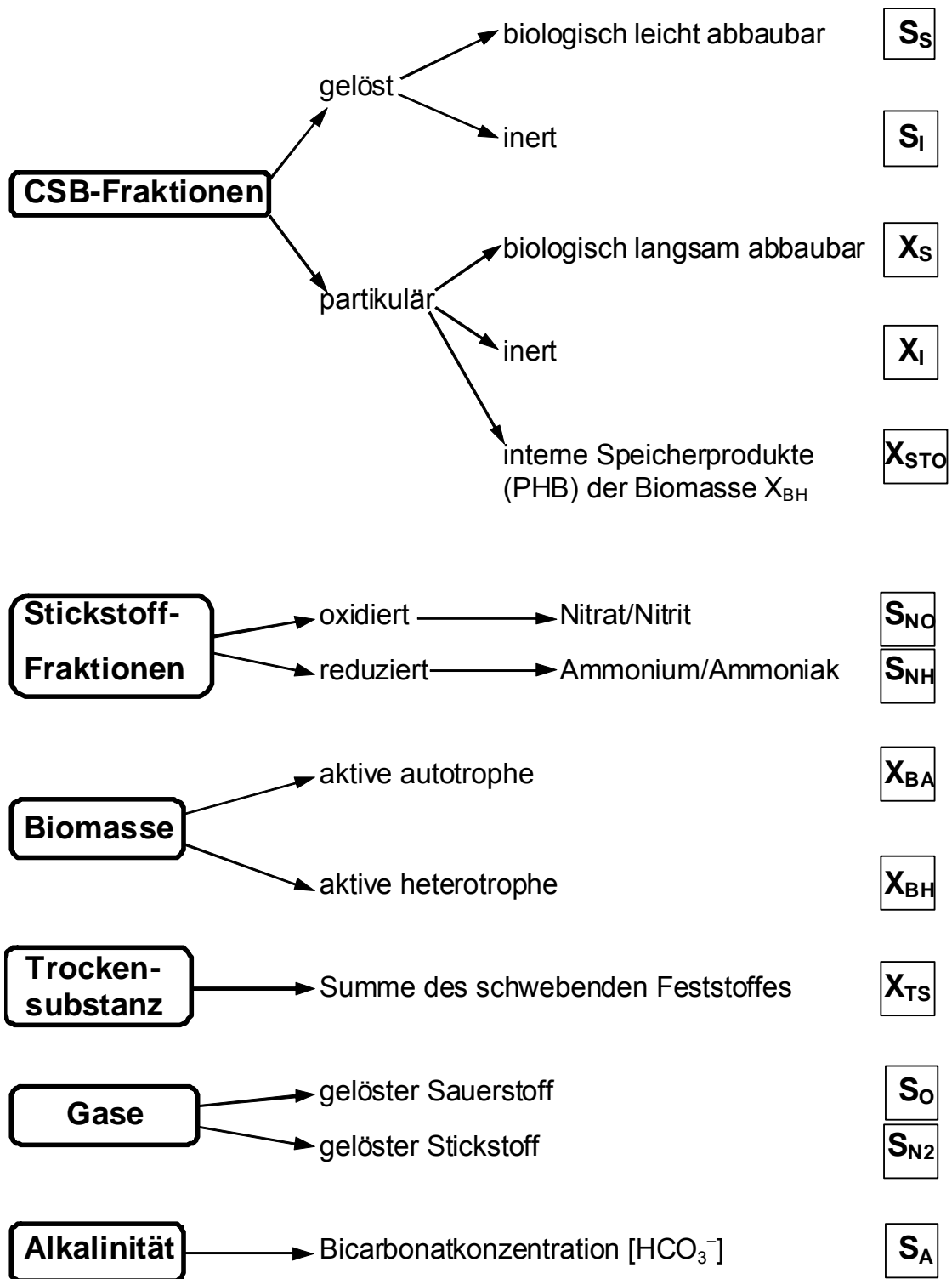


Abbildung 4a: Übersichtsschema der 13 im Modellansatz ASM 3 definierten Stoffgruppen.

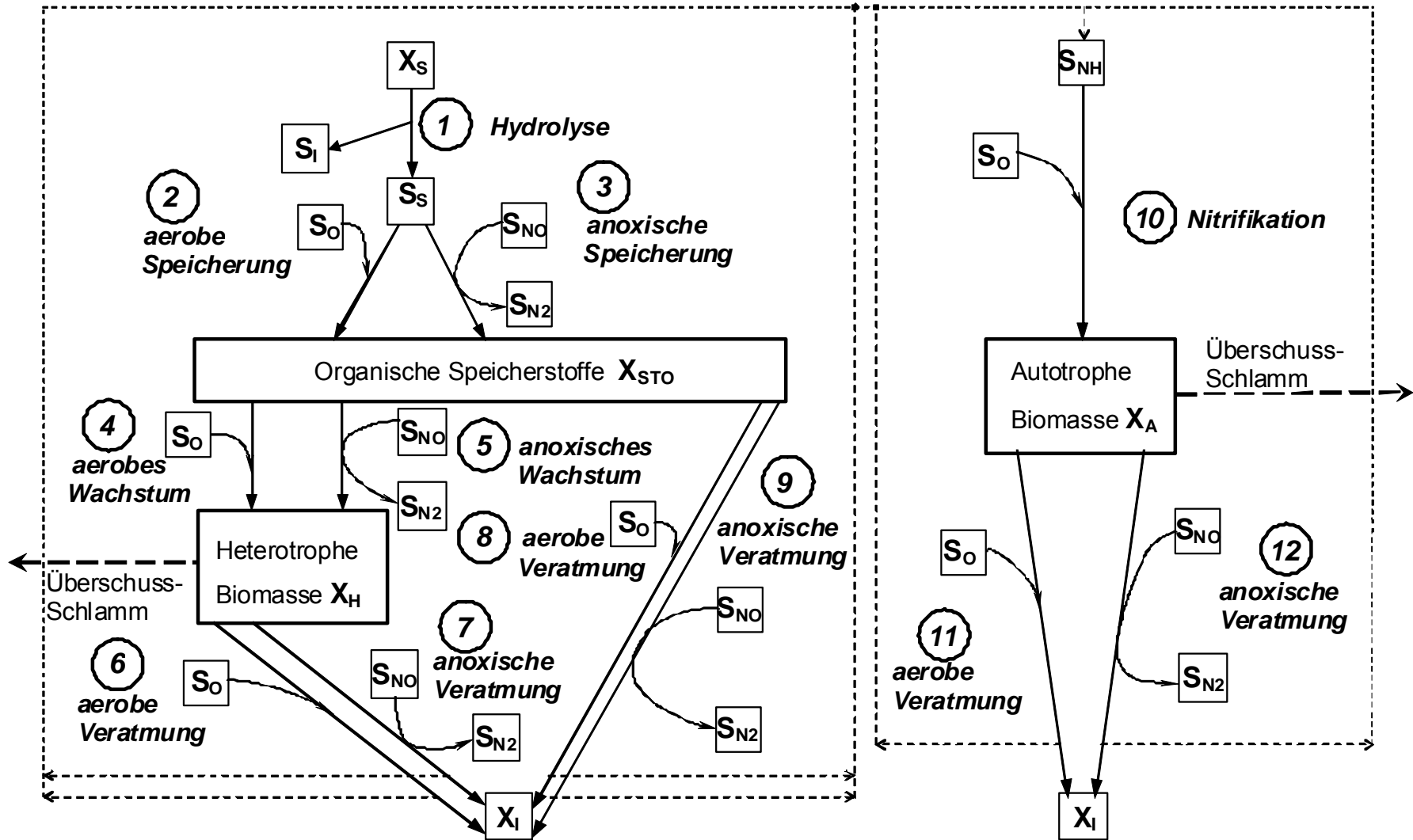


Abbildung 4b: Vereinfachtes Schema der Zusammenhänge zwischen den 12 biologischen Prozessen des ASM 3 und den beteiligten Stoffgruppen.



### **2.3 Modellierung von Biofilmen**

Bereits seit mehr als 30 Jahren werden mathematische Modelle eingesetzt, um den Stoffumsatz und -transport in mikrobiellen Lebensgemeinschaften zu simulieren. Die anfängliche Vorstellung von planaren Biofilmen mit relativ konstanten Dicken spiegelte sich auch in den ersten mathematischen Modellen zur Beschreibung von Biofilmen wider. Zunächst wurde von einer homogenen gleichmäßigen Struktur und einer räumlich und zeitlich konstanten Zusammensetzung des Biofilms ausgegangen (LaMotta, 1976; Williamson und McCarty, 1976; Chen et al., 1989; Rittmann und Manem, 1992).

Im weiteren Verlauf wurde ein dynamisches Modell entwickelt, das den Biofilm in folgende Kompartimente unterteilt (Wanner und Gujer, 1990):

- Aufwuchsfläche
- Biofilm
- Konzentrationsgrenzschicht
- Wasserschicht

In diesem Modell werden u. a. folgende Prozesse berücksichtigt:

- Wachstum von Mikroorganismen
- Konkurrenz verschiedener Mikroorganismenspezies um Raum und Substrat
- Transport und Umwandlung von gelösten Stoffen in den Kompartimenten des Biofilmsystems

Durch neue Untersuchungsmethoden und -techniken wurden detaillierte Betrachtungen von Biofilmen und einzelnen Biofilmbestandteilen möglich. Auf der Grundlage der dadurch gewonnenen Erkenntnisse konnten die Biofilmmodelle weiterentwickelt und neue Biofilmprozesse implementiert werden. Mit Hilfe von Mikroelektroden wurde die Umwandlung von Biomasse durch Inaktivierung, Hydrolyse und Wachstum von Mikroorganismen in autotrophen und heterotrophen Biofilmen untersucht und in ein Biofilmmodell basierend auf dem Modell von Wanner und Gujer integriert (Horn und Hempel, 1997a; Horn und Hempel, 1997b). Neue Erkenntnisse zu Stofftransport- und Stoffumwandlungsprozessen (Picioreanu et al., 2000; Horn und Hempel, 1998; Hermanowicz, 1999; Buffiere et al., 1998), zum Einfluss der Hydrodynamik (Picioreanu, et al., 1999) sowie der Populationsdynamik (Noguera et al., 1999) flossen in die immer komplexer werdenden Modelle ein. Die rasante Entwicklung der Computertechnik ermöglichte eine dreidimensionale Beschreibung der heterogenen Biofilmstruktur, ihrer Entwicklung und deren Einflussgrößen.

In vielen experimentellen Arbeiten wurden der Einfluss und die Funktion der extrazellulären polymeren Substanzen (EPS) im Biofilm deutlich (Kreft und Wimpenny, 2001; Liu et al., 2001; Wolfaardt et al., 1994; Flemming und Wingender, 2001; Wingender et al., 1999). Aufgrund ihrer großen Relevanz für die Biofilmstruktur und die Sorptionseigenschaften des Biofilms wurden die EPS in den neuesten Biofilmmodellen als eigenständige Volumenfraktion aufgenommen und ihr Einfluss berücksichtigt (Horn et al., 2001; Kreft und Wimpenny, 2001).

Diese mathematischen Modelle dienen vor allem einem besseren Verständnis der Entwicklung, Struktur und Zusammensetzung von Biofilmen. Durch Variation einzelner Modellparameter ist es möglich deren Einfluss auf die Biofilmeigenschaften, wie z. B. Umsatzleistung, Sorptionskapazität, Biofilmdichte und Biofilmdicke, abzuschätzen.

## 2.4 Biofilmmodell in SIMBA®

Die Modellierung der Prozesse in Tropfkörpern und Tauchkörpern beinhaltet die Erfassung der biologischen Reinigungsprozesse und insbesondere die Abbildung der Biofilmvorgänge, da sie für das System das zentrale Charakteristikum darstellen.

Das im Simulationsprogramm SIMBA® enthaltene Biofilmmodell (ifak system GmbH, 2005) orientiert sich an den Modellannahmen des Basis-Biofilmmodells der IWA-Arbeitsgruppe zur Modellierung von Biofilmsystemen (Characklis et al., 1989). Für die Beschreibung der Prozesse innerhalb des Biofilms wird eine örtliche Diskretisierung in einzelne voll durchmischte Volumenelemente eingeführt. Dadurch wird eine Berechnung mittels gewöhnlicher Differentialgleichungen ermöglicht. Durch die Anzahl der Volumenelemente können die Konzentrationsgradienten im Biofilm in unterschiedlicher Auflösung abgebildet werden. In den einzelnen Volumenelementen findet der biologische Abbau der Abwasserinhaltsstoffe statt.

Die biologischen Umsetzungsprozesse werden mit einem geeigneten Modell (derzeit ein modifiziertes ASM 1) abgebildet. Im ASM 1 wird vereinfachend der Anteil der schwer abbaubaren Kohlenstoffverbindungen als vollständig partikuläre Stoffgruppe definiert. Bei der Simulation von Biofilmprozessen ist diese Vereinfachung jedoch nicht zulässig, da nur gelöste Stoffe durch Diffusion in den Biofilm eingetragen werden können. Schwer abbaubare Stoffe würden mit den Annahmen des ASM 1 also nicht in den Biofilm gelangen. Daher wurde diese Fraktion in gelöste und partikuläre schwer abbaubare Stoffe aufgeteilt. Zusätzlich wurde die Fraktion der partikulären Zerfallsprodukte der Fraktion der inerten Feststoffe zugeschlagen. Durch die offene Modellstruktur kann das implementierte Modell verändert oder gegen ein alternatives Modell ersetzt werden. Die Einbindung neuer Modellansätze wurde im Rahmen des vom ifak durchgeführten Teilprojektes durch eine Anpassung und Erweiterung des Funktionsblockes für die Simulation von Biofilmreaktoren erleichtert. Neben den biologischen Prozessen sind die Diffusionsprozesse sowie die Prozesse von Erosion, Flockung und Feststoffrückhalt von besonderer Bedeutung. Die im Biofilmmodell berücksichtigten Prozesse sind in *Abbildung 5* dargestellt.

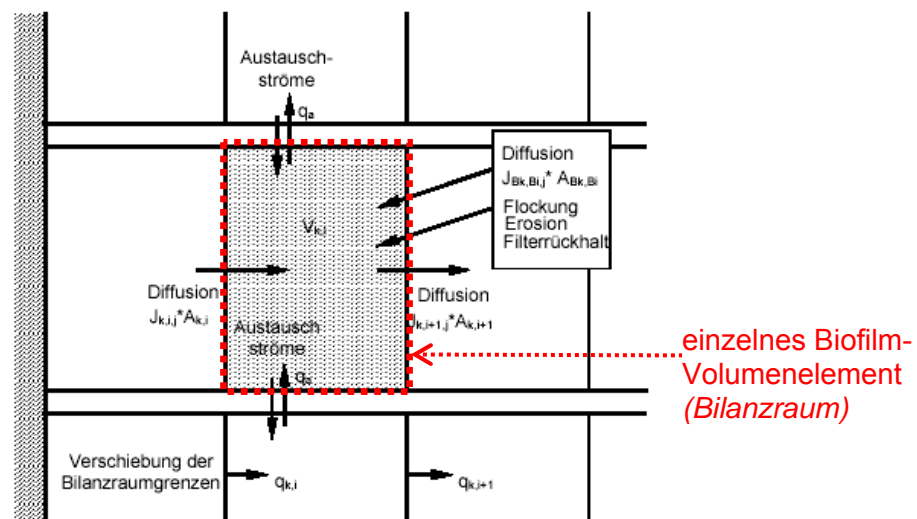


Abbildung 5: Volumenelement und berücksichtigte Prozesse (entnommen aus (ifak system GmbH, 2001)).

### 3 Zusammenarbeit mit den Kooperationspartnern

In *Tabelle 1* wurden die innerhalb der Projektlaufzeit durchgeführten Treffen mit den verschiedenen Kooperationspartnern chronologisch aufgelistet und mit den Angaben zu Datum, Ort und Anlass kurz beschrieben.

*Tabelle 1: Zusammenarbeit mit den Kooperationspartnern im Rahmen des BMBF-Verbundprojektes.*

Datum	Ort	Anlass
21./22. November 2005	Universität Hannover	Workshop zur Festlegung der benötigten Eingangsparameter für die Simulation (Abstimmung mit den entsprechenden Projektbearbeitern aus den Kernprojekten A und B, Diskussion der im Vorlauf verteilten Parameter-listen, Anpassung an die Erfordernisse/ Möglichkeiten der beteiligten Kooperationspartner, Formulierung eines von allen Teilnehmern akzeptierten „Basismessprogramms“)
17. Februar 2006	Ruhr-Universität Bochum (Teilprojekt: „Beleungsverfahren“)	Besichtigung und umfassende Dokumentation der Versuchskläranlage „Bochum/Ölbachtal“
20. April 2006	Universität Halle-Wittenberg (Teilprojekt: „Getauchtes Festbettverfahren“)	Besichtigung der Versuchsanlage, Diskussion der bisherigen Ergebnisse, Abstimmung des weiteren Vorgehens
21. April 2006	ifak (Magdeburg)	Workshop zur Verwendung des Biofilmblockes in SIMBA®
28. April 2006	Universität Stuttgart (Teilprojekt: „Tropfkörperverfahren“)	Besichtigung der Versuchsanlage, Diskussion der bisherigen Ergebnisse, Abstimmung des weiteren Vorgehens
04./05. Mai 2006	TU Darmstadt	Projekt-Workshop des Gesamtprojektes
06. Juni 2006	ifak (Magdeburg)	Projektbesprechung mit dem Kooperationspartner ifak (Magdeburg)
13. Oktober 2006	Universität Karlsruhe (Teilprojekt: „Scheibentauchkörperanlagen“)	Besichtigung der Versuchsanlage, Diskussion der bisherigen Ergebnisse, Abstimmung des weiteren Vorgehens
24. November 2006	ifak (Magdeburg)	Projektbesprechung mit dem Kooperationspartner ifak (Magdeburg)
29. November 2006	ifak (Magdeburg)	Projektbesprechung mit dem Kooperationspartner ifak (Magdeburg)
05. Dezember 2006	ifak (Magdeburg)	Workshop zur Verwendung des Biofilmblockes in SIMBA®
23. Februar 2007	Universität Hannover	Treffen mit dem dortigen Projektpartner sowie den Kooperationspartnern ifak und TU München (Vorstellung und Diskussion des Toolkit-Projektes, Diskussion des aktuellen Projektstandes, Abstimmung des weiteren Vorgehens)

*Fortsetzung Tab. 1: Zusammenarbeit mit den Kooperationspartnern im Rahmen des BMBF-*

Verbundprojektes.

<b>Datum</b>	<b>Ort</b>	<b>Anlass</b>
13. Juli 2007	ifak (Magdeburg)	Workshop zur Verwendung des Biofilmblockes in SIMBA®
26. Juli 2007	Universität Hannover	Vorbereitendes Treffen aller Kooperationspartner des Kernprojektes C für die Projektpräsentation
14. August 2007	ifak (Magdeburg)	Projektbesprechung mit dem Kooperationspartner ifak (Magdeburg)
24. September 2007	Frankfurt am Main	Projektpräsentation des Gesamtprojektes (Workshop mit Gutachtersitzung)
18. Januar 2008	Universität Hannover	Treffen mit den Kooperationspartnern ifak und TU München (Vorstellung und Diskussion des aktuellen Projektstandes, Abstimmung des weiteren Vorgehens)
05. Februar 2008	ifak (Magdeburg)	Workshop zur Verwendung des Biofilmblockes in SIMBA®
20. März 2008	Universität Hannover	Treffen mit den Kooperationspartnern ifak und TU München (Vorstellung und Diskussion des aktuellen Projektstandes, Abstimmung des weiteren Vorgehens)
28. März 2008	Universität Halle-Wittenberg (Teilprojekt: „Getauchtes Festbettverfahren“)	Besichtigung der „größtechnischen“ Versuchsanlage, Diskussion einiger ergänzender Experimente
11. Juli 2008	Universität Hannover	Treffen mit den Kooperationspartnern ifak und TU München (Vorstellung und Diskussion des aktuellen Projektstandes, Abstimmung des weiteren Vorgehens)
16. Oktober 2008	Frankfurt am Main	Projektpräsentation des Gesamtprojektes (Workshop mit Gutachtersitzung)

## 4 Wissenschaftlich-technische Ergebnisse

### 4.1 Simulation des Belebungsverfahrens

Für die Simulation des Belebungsverfahrens wurde der an der FH OOW neu entwickelte, kinetische Modellansatz FUKA (siehe Abschnitt 2.1) verwendet. Im Rahmen des Verbundvorhabens wurden mit Hilfe der Simulation Abwasserreinigungsanlagen in unterschiedlichsten Klimazonen und Kulturkreisen (damit verbunden ist eine große Bandbreite hinsichtlich Abwassertemperatur, pH-Wert, Fraktionierung des Zulaufs, Zusammensetzung der aktiven Biomasse, etc.) nachgebildet, wobei zusätzlich ein breites Spektrum an Technologien zu betrachten war. Durch den Export der Abwassertechnologie werden sich in naher Zukunft neue, bisher nicht simulierte Bedingungen (und damit verbunden auch andere Kinetiken) ergeben. Aus diesem Grunde war es wichtig und sinnvoll, neben den international etablierten ASM-Modellen auch den neuen kinetischen Ansatz FUKA mit zu betrachten und damit die Basis der möglichen Simulationsmodelle und Kinetiken zu erweitern. Im Hinblick auf die Simulation von zu planenden Anlagen im Ausland war es zwingend erforderlich, eine möglichst große Bandbreite an Modellansätzen zum Einsatz zu bringen, damit bei der praktischen Anwendung der Simulation in den Zielländern für den jeweiligen Fall durch Auswahl des geeignetsten Modellansatzes (oder einer Kombination bzw. Variation) eine optimale Nachbildung in der Simulation erreicht werden kann.

Für die Nachbildung der ausgewählten Temperaturen (Versuche im Bereich von 15 °C bis 30 °C) wurde die Temperaturabhängigkeit der betreffenden biologischen Prozesse in den Modellansatz FUKA implementiert. Dazu wurden zunächst die in dem im Simulationsprogramm SIMBA® für Simulationen mit variabler Temperatur enthaltenen modifizierten ASM 1-Modell „asm1tm“ verwendeten Temperaturterme übernommen und in die kinetischen Ausdrücke der entsprechenden biologischen Prozesse (→ Komplexbildung/-zerfall, Produktbildung, ...) des Modellansatzes FUKA eingebracht. Zudem wurden verschiedene Modellvarianten formuliert und auf ihre Eignung hin getestet. Diese werden nachfolgend beschrieben:

Modellvariante „FUKAT“:

Verwendete Temperaturterme (unverändert aus ASM 1-Modell „asm1tm“ übernommen):

fT1	Temperatur Korrekturfaktor für Heterotrophe	= $\exp(-0,069 \cdot (20 - T))$
fT2	Temperatur Korrekturfaktor für Absterben und Hydrolyse	= $\exp(-0,11 \cdot (20 - T))$
fT3	Temperatur Korrekturfaktor für Autotrophe	= $\exp(-0,098 \cdot (20 - T))$

Diese Temperaturterme wurden in die in *Tabelle 2* dargestellten Prozesse (kinetische Ausdrücke für die zugehörigen Prozessgeschwindigkeiten) implementiert.

*Tabelle 2: Variationen im Modellansatz FUKAT zur Nachbildung der Temperaturabhängigkeit.*

Prozess		Korrekturfaktor
Nr.	Beschreibung	
5	Bildung CO <sub>2</sub> /aerobes Wachstum XH	fT1
8	Bildung N <sub>2</sub> /anoxisches Wachstum XH	fT1
13	Bildung NO <sub>2</sub> /Wachstum XA	fT3
16	Bildung NO <sub>3</sub> /Wachstum XA	fT3
17	Absterben XA	fT3
18	Absterben XH	fT2

Modellvariante „FUKAT2“:

Im Modellansatz FUKAT2 wurden sämtliche Prozesse mit einem entsprechenden Korrekturterm für die T-Abhängigkeit versehen, wobei ebenfalls die unveränderten Temperaturterme aus dem ASM 1-Modell „asm1tm“ (s. o.) verwendet wurden.

Diese wurden in die in *Tabelle 3* dargestellten Prozesse (kinetische Ausdrücke für die zugehörigen Prozessgeschwindigkeiten) implementiert.

Tabelle 3: Variationen im Modellansatz FUKAT2 zur Nachbildung der Temperaturabhängigkeit.

Prozess		Korrekturfaktor
Nr.	Beschreibung	
1	Substrat-Aufnahme (C-Quelle); Komplexbildung SXH	ft1
2	Substrat-Aufnahme (C-Quelle); Komplexzerfall SXH	ft1
3	Aerobes Wachstum von XH; O2-Aufnahme (Bildung SXHO)	ft1
4	Aerobes Wachstum von XH; Komplexzerfall SXHO	ft1
5	Aerobes Wachstum von XH; Substratabbau und CO2-Bildung	ft1
6	Anoxisches Wachstum von XH; NO3-Aufnahme	ft1
7	Anoxisches Wachstum von XH; Komplexzerfall	ft1
8	Anoxisches Wachstum von XH; Substratabbau und N2-Bildung	ft1
9	O2-Aufnahme durch autotrophe Biomasse	ft3
10	Komplexzerfall XAO	ft3
11	Wachstum von XA (Nitritation); NH4-Aufnahme	ft3
12	Wachstum von XA (Nitritation); Komplexzerfall	ft3
13	Wachstum von XA (Nitritation); NO2-Bildung	ft3
14	Wachstum von XA (Nitratation); NO2-Aufnahme	ft3
15	Wachstum von XA (Nitratation); Komplexzerfall	ft3
16	Wachstum von XA (Nitratation); NO3-Bildung	ft3
17	Absterben und Abbau der autotrophen Biomasse XA	ft3
18	Absterben und Abbau der heterotrophen Biomasse XH	ft2

Die mit dieser Variante durchgeführten Simulationsrechnungen und Parameteranpassungen zeigten, dass es sinnvoller ist, bei den Prozessen, die mit einem Wachstum der Biomasse verbunden sind, jeweils nur einen Schritt (Bildung/Zerfall des Enzym-Substrat-Komplexes; Produktbildung) mit einem Korrekturterm zu versehen (diese Vorgabe wurde in den Modellansätzen FUKAT/FUKA5T realisiert).

Modellansatz FUKA5T (Temperaturterme und deren Anwendung in der Modellmatrix sind identisch mit FUKAT!):

ft1	Temperatur Korrekturfaktor für Heterotropie	= $\exp(-0,069 \cdot (20 - T))$
ft2	Temperatur Korrekturfaktor für Absterben und Hydrolyse	= $\exp(-0,11 \cdot (20 - T))$
ft3	Temperatur Korrekturfaktor für Autotropie	= $\exp(-0,098 \cdot (20 - T))$

Prozess		Korrekturfaktor
Nr.	Beschreibung	
5	Bildung CO <sub>2</sub> /aerobes Wachstum XH	ft1
8	Bildung N <sub>2</sub> /anoxisches Wachstum XH	ft1
13	Bildung NO <sub>2</sub> /Wachstum XA	ft3
16	Bildung NO <sub>3</sub> /Wachstum XA	ft3
17	Absterben XA	ft3
18	Absterben XH	ft2

Die Unterschiede zwischen den Modellvarianten FUKAT und FUKA5T liegen in den jeweils verwendeten Parametersätzen (siehe Gegenüberstellung in *Tabelle 4*). Außerdem wurden in der Modellvariante FUKA5T die in *Tabelle 5* enthaltenen 3 Parameter zusätzlich eingeführt.

*Tabelle 4: Zusammenstellung der in den Modellvarianten FUKAT, FUKAT2 und FUKA5T geänderten Parameterwerte.*

Parameter	Wert in p_fukat	Wert in p_fukat2	Wert in p_fuka5t
kHK Komplexbildung SXHO	4	4	40
kN3K Komplexbildung XN3	15	15	1,5
kRN3K Komplexzerfall XN3	1,5	1,5	0,0015
kAK Komplexbildung XAO	1,67	1,67	4
kRAK Komplexzerfall XAO	0,0167	0,0167	0,04
kNO <sub>2</sub> Nitritbildung	0,706	0,6652	0,706
kN2K Komplexbildung XAK	3,08	500	3,08
kNO <sub>3</sub> Nitratbildung	8,9155	4,46	8,9155
F1 Ertrag: XA für Reaktion (2)	1,24	2,6319	2,765
F2 Ertrag: XA für Reaktion (3)	1,24	2,5	2,24
F3 Ertrag: XH für Reaktion (5)	1,67	4	2,85
F5 Ertrag: XH für Reaktion (6)	3,50	3,50	2,67



Tabelle 5: Zusammenstellung der in der Modellvariante FUKA5T im Vergleich zu FUKAT zusätzlich eingeführten Parameter.

Symbol	Bedeutung	Defaultwert	Dimension
fl	Anteil der partikulären inerten Abbauprodukte der Biomasse	0,08	[-]
fNI	Stickstoffgehalt des partikulären inerten Anteils fl	0,06	[-]
fOI	Sauerstoffgehalt des partikulären inerten Anteils fl	0,4	[-]

Anschließend wurde für die eingesetzten Modelle bzw. Modellvarianten eine Sensitivitätsanalyse und Parameteranpassung durchgeführt.

#### 4.1.1 Beschreibung/Konfiguration der Versuchsanlage

In *Abbildung 6a* ist das Verfahrensschema der von der RU Bochum betriebenen Versuchsanlage Bochum/Ölbachtal mit den Dimensionierungen der verschiedenen Becken für eine der beiden baugleichen Straßen dargestellt. Der gesamte Aufbau wird aus dem in *Abbildung 6b* gezeigten Foto ersichtlich. In *Tabelle 6* sind weitere für die Simulationsrechnungen relevante Daten der Versuchsanlage zusammengefasst.

Tabelle 6: Zusammenstellung simulationsrelevanter Daten der Versuchsanlage Bochum/Ölbachtal.

Parameter	Kalte Straße (T = 15 °C)	Warme Straße (T = 30 °C)
Belüftung im Nitrifikationsbecken	je nach Zulaufbelastung variabel, im Mittel ca. 1,5 mN <sup>3</sup> /h (min. 1, max. 2,3) = 36 mN <sup>3</sup> /d	
Volumenstrom Interne Rezirkulation	30 l/h = 720 l/d = 0,72 m <sup>3</sup> /d	5 l/h = 360 l/d = 0,36 m <sup>3</sup> /d
Volumenstrom Rücklaufschlamm	45 l/h = 1.080 l/d = 1,08 m <sup>3</sup> /d	60 l/h = 1.440 l/d = 1,44 m <sup>3</sup> /d
Volumenstrom Überschussschlammabzug	variiert, im Mittel bei 20 bis 30 l/d = 0,02 bis 0,03 m <sup>3</sup> /d	

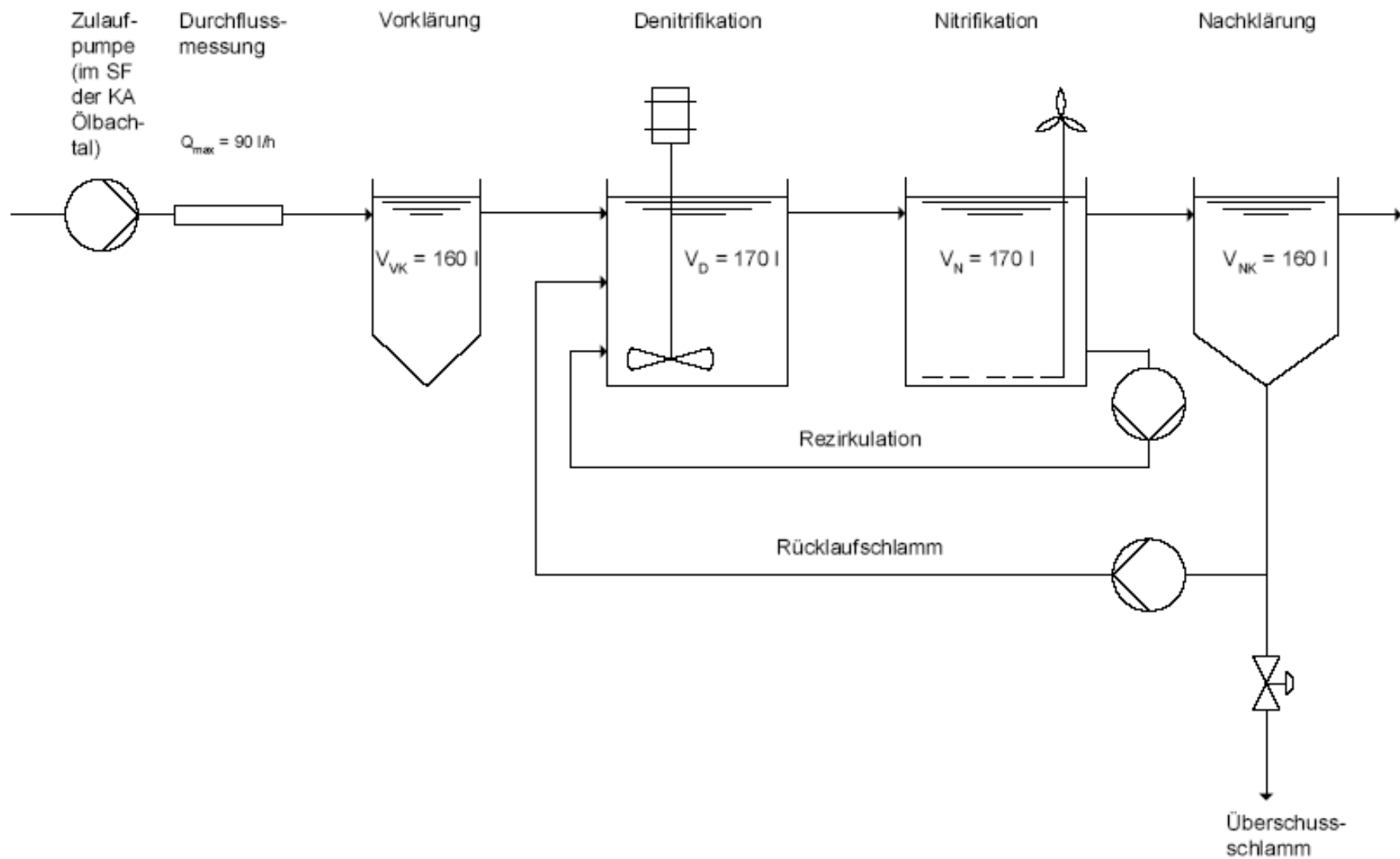


Abbildung 6a: Verfahrensschema – Versuchskläranlage (Belebungsverfahren) der RU Bochum.



Abbildung 6b: Gesamtansicht der Versuchskläranlage (Belebungsverfahren) der RU Bochum.

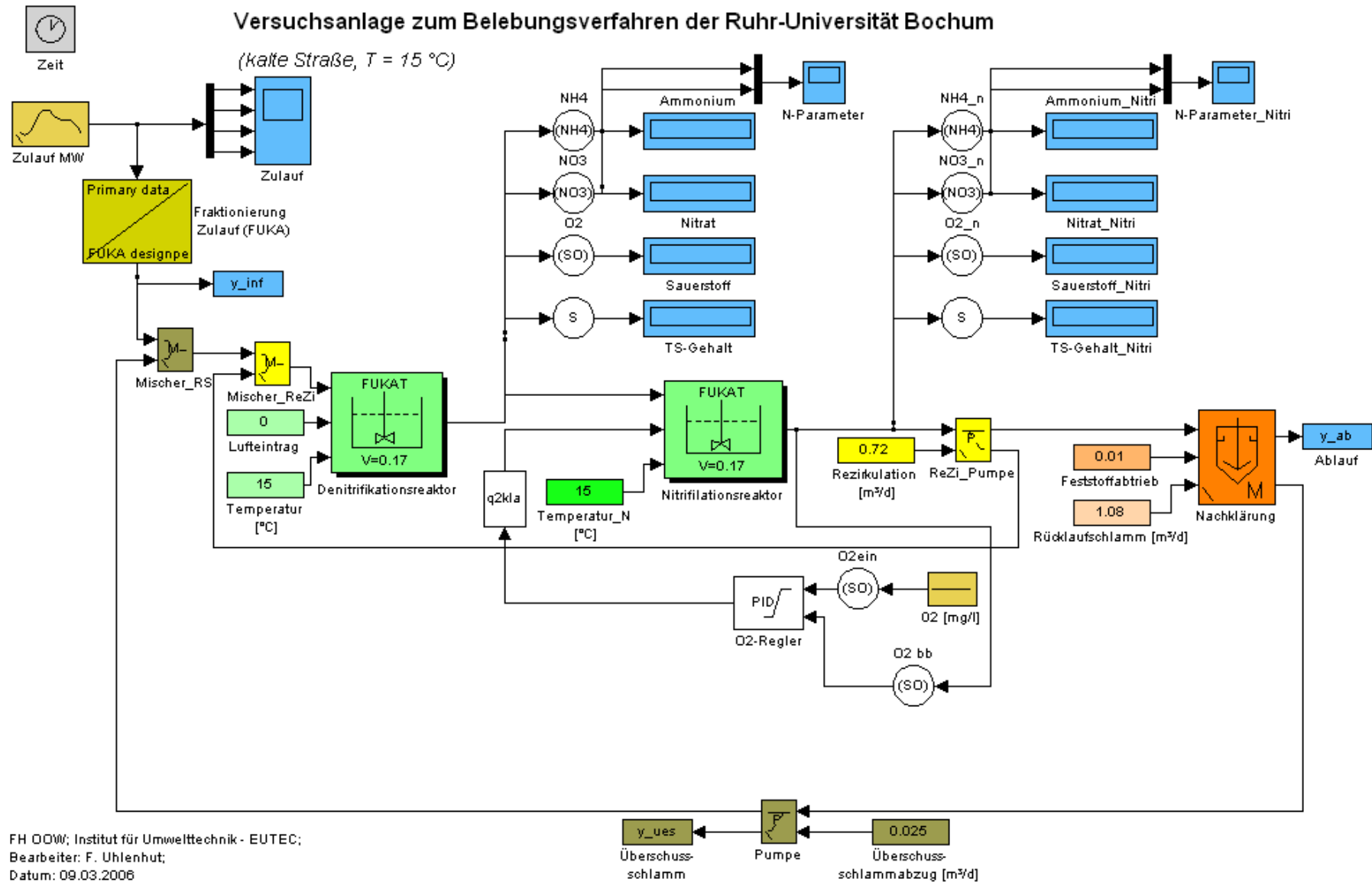


Abbildung 6c: Verfahrensschema der Versuchskläranlage (Belevungsverfahren) der RU Bochum im Simulationsprogramm SIMBA®.

#### 4.1.2 Ergebnisse der Simulationsrechnungen

Das Verfahrensschema im Simulationsprogramm SIMBA® der von der RU Bochum betriebenen Versuchsanlage zum Belebungsverfahren ist in *Abbildung 6c* dargestellt. Für die Vorgabe der Zulaufkonzentrationen wurde ein „Tagesgang“-Block verwendet, über den das in *Anhang 2* beschriebene m-file „zu.m“ aufgerufen wird. Über dieses werden die in einer txt-Datei befindlichen Analysendaten der Intensivmessphase I (23.02.2006 – 03.03.2006; Werte der online-Analytik mit einem Zeitintervall von  $t = 0,0034722 = 5$  Minuten) für die Parameter CSB, Ammonium, ortho-Phosphat (dieser Parameter wird für den Modellansatz FUKA in der verwendeten Variante ohne biologische Phosphatelimination allerdings nicht benötigt) und Zulaufvolumenstrom Q eingelesen und in die Modellfraktionen des Modellansatzes FUKA umgerechnet.

Die Simulationsrechnungen mit den experimentellen Daten zeigen, dass eine prinzipielle Nachbildung des Belebungsverfahrens mit dem Modellansatz FUKA für beide Temperaturen möglich ist und dass sowohl für die Ablaufwerte des CSB als auch der Stickstoffparameter Ammonium und Nitrat eine gute Übereinstimmung zwischen Simulationsergebnissen und Messwerten erreicht werden kann (*siehe Abb. 7a/Abb. 7b und Abb. 8a/Abb. 8b*). Qualitativ entspricht die Übereinstimmung den Ergebnissen der TU München für die Nachbildung mit dem ASM 3-Modell (*siehe Darstellung der entsprechenden Simulationsrechnungen im Abschlussbericht der TU München*).

Beim Übergang von der Referenzstraße ( $T = 15\text{ °C}$ ) auf die parallel betriebene Straße mit hoher Temperatur ( $T = 30\text{ °C}$ ) ist eine Anpassung der Modellparameter erforderlich. In *Tabelle 7* sind die variierten Parameter mit den entsprechenden Werten für beide Temperaturen angegeben.

*Tabelle 7: Zusammenstellung der erforderlichen Parameteränderungen bei der Simulation des Belebungsverfahrens für unterschiedliche Temperaturen (Übergang von  $T = 15\text{ °C}$  auf  $T = 30\text{ °C}$ ).*

Parameter	Bedeutung des Parameters	Wert für $T = 15\text{ °C}$	Wert für $T = 30\text{ °C}$
kN3K	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante für die Bildung des Enzym-Substrat-Komplexes (Denitrifikation)	0,001	0,01
kN	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante für die Stickstoffbildung (Denitrifikation)	0,001	0,04
F2	Koeffizient für die Bildung (Wachstum) der heterotrophen Biomasse durch den aeroben C-Abbau	2,5367	3,0344105
F3	Koeffizient für die Bildung (Wachstum) der autotrophen Biomasse durch die Nitratation	3	7

Die in *Tabelle 7* zusammengefassten Parameterwerte zeigen, dass in allen vier Fällen bei der höheren Temperatur von  $30\text{ °C}$  jeweils ein größerer Zahlenwert für den betreffenden Parameter eingesetzt werden musste. Als Ursache für diese beobachteten Abweichungen kommen folgende zwei Aspekte in Betracht:

- 1) Bei einer höheren Temperatur von  $30\text{ °C}$  könnte sich die Biozönose (Zusammensetzung der Biomasse im Belebtschlamm) signifikant von der bei der Referenztemperatur von  $15\text{ °C}$  vorliegenden Mikroorganismenpopulation unterscheiden. Damit würden sich dann hinsichtlich der autotrophen und heterotrophen Biomasse im Modellansatz auch andere Parameterwerte ergeben, da z. B. die Wachstums- und Absterberate in dem Fall nicht mehr als konstant anzusetzen wäre (in den Modellen werden die autotrophe und heterotrophe Biomasse nicht weiter differenziert und

jeweils eine Wachstums- und Absterberate definiert. Dies stellt eine erhebliche Vereinfachung dar, da sich in der Realität die Mikroorganismenpopulation aus einer Vielzahl verschiedener Gattungen zusammensetzt, die sich hinsichtlich Wachstums-/ Absterberaten unterscheiden, und gilt nur unter der Voraussetzung, dass sich die Zusammensetzung der Mikroorganismenpopulation nicht signifikant ändert. Dies gilt auch für die Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten der von den jeweiligen Mikroorganismen durchgeführten biologischen Prozesse.

- 2) Die bislang für die Beschreibung der Temperaturabhängigkeit in den Modellansätzen verwendeten mathematischen Ausdrücke wurden aus dem im Simulationsprogramm SIMBA<sup>®</sup> für Simulationen mit variabler Temperatur enthaltenen modifizierten ASM 1-Modell „asm1tm“ übernommen. Diese empirischen Temperaturterme wurden für „mitteleuropäische“ Verhältnisse ermittelt und können den Temperaturbereich bis 20 °C abbilden. Aus den in *Abbildung 9* dargestellten Verläufen dieser Temperaturterme wird ersichtlich, dass sie für die Abbildung des Verhaltens bei höheren Temperaturen nicht geeignet sind (da z. B. die Terme für das Wachstum der beiden Biomassen ab 20 °C einen sehr schnellen permanenten Anstieg zeigen, dies entspricht nicht der Realität, da die Mikroorganismen bei Erreichen einer gewissen Temperatur abgetötet werden und sich das Wachstum schon vorher verlangsamt bzw. rückläufig ist). Die beobachtete Abweichung könnte in Zusammenhang mit den ungeeigneten/unpassenden Temperaturtermen stehen.

In *Abbildung 10a* und *Abbildung 10b* werden beispielhaft einige ausgewählte Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse grafisch dargestellt.

Die Ergebnisse der für die beiden genannten Temperaturen durchgeführten Sensitivitätsanalysen und Parameteranpassungen sowie die im Rahmen vorausgegangener Projekte für weitere Belebungsanlagen erhaltenen Parametersätze (Parameteranpassung für die Nachbildung mit FUKA) wurden in *Tabelle 8* zusammengefasst.

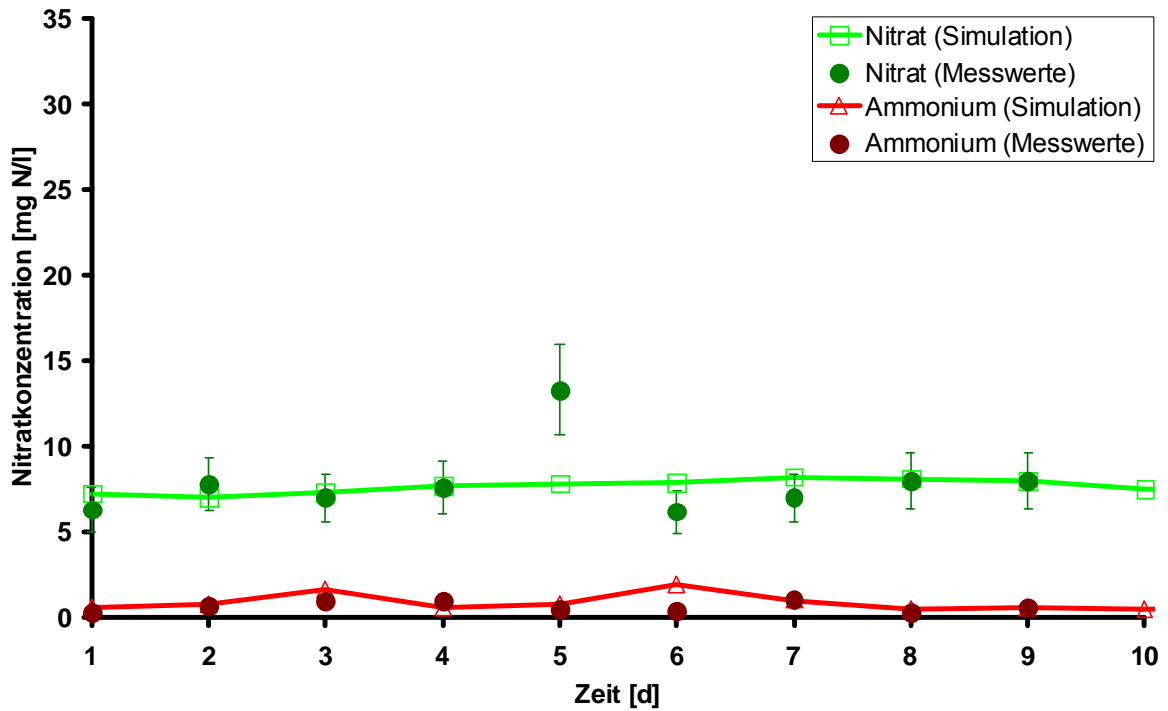


Abbildung 7a: Vergleich der Simulationsergebnisse und Messwerte für die Ablaufwerte der Stickstoffparameter Ammonium und Nitrat für  $T = 15\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

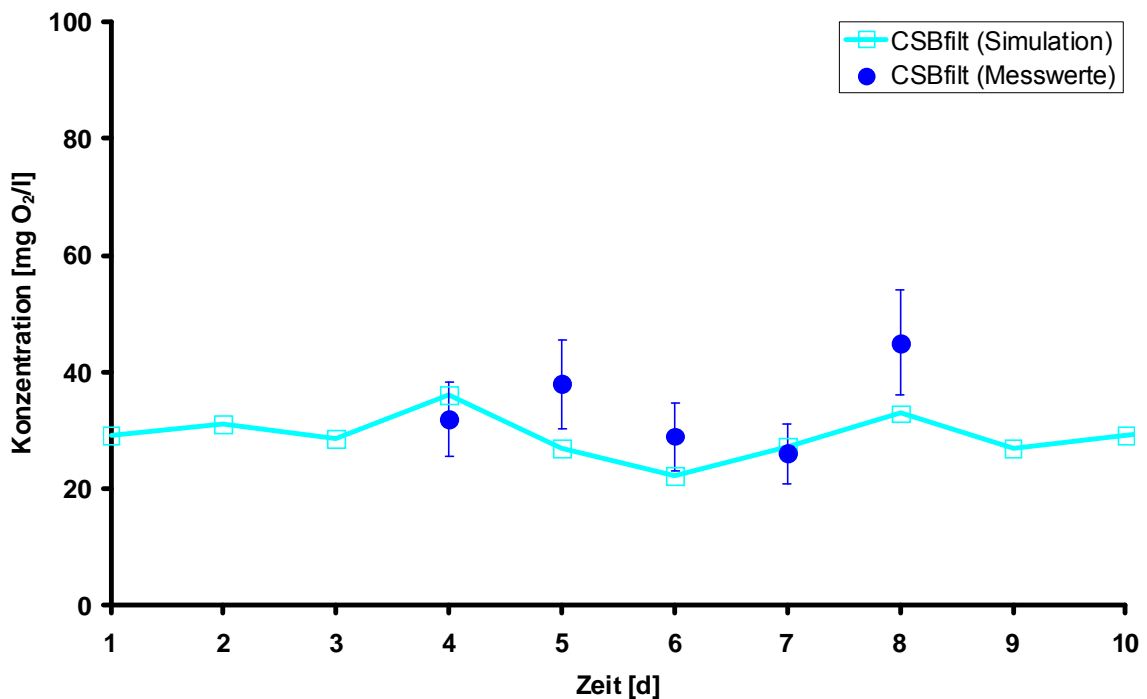


Abbildung 7b: Vergleich der Simulationsergebnisse und Messwerte für die Ablaufwerte des CSB für  $T = 15\text{ }^{\circ}\text{C}$ .



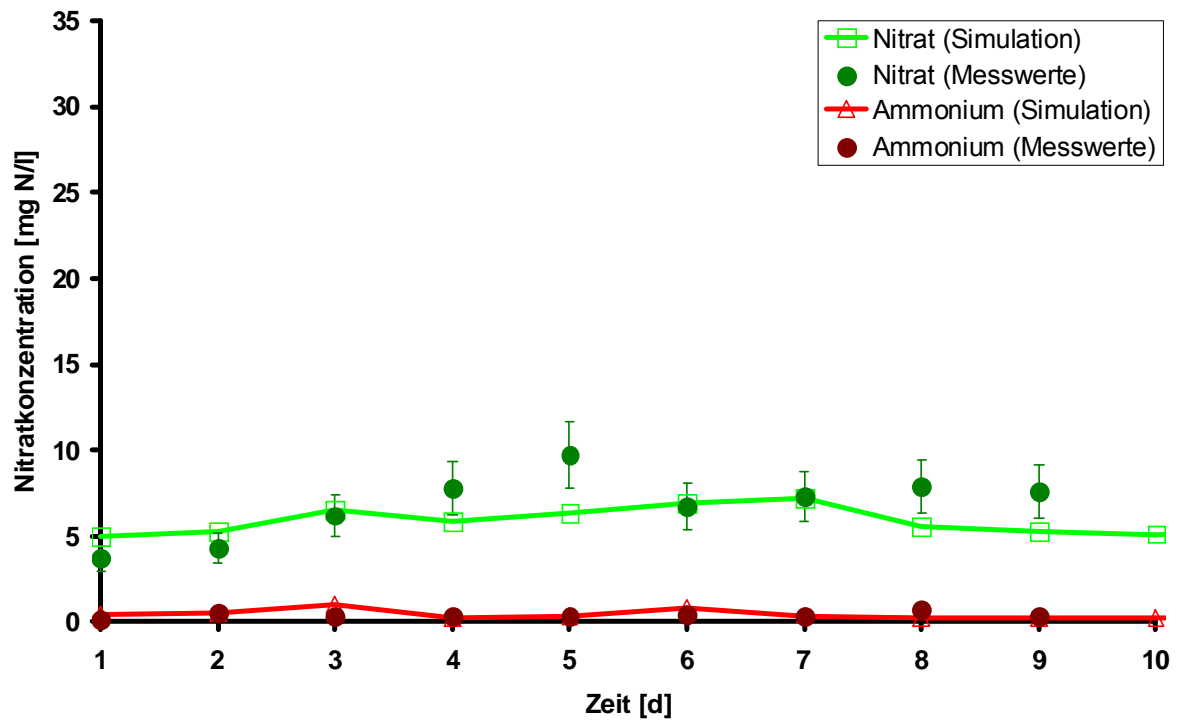


Abbildung 8a: Vergleich der Simulationsergebnisse und Messwerte für die Ablaufwerte der Stickstoffparameter Ammonium und Nitrat für  $T = 30\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

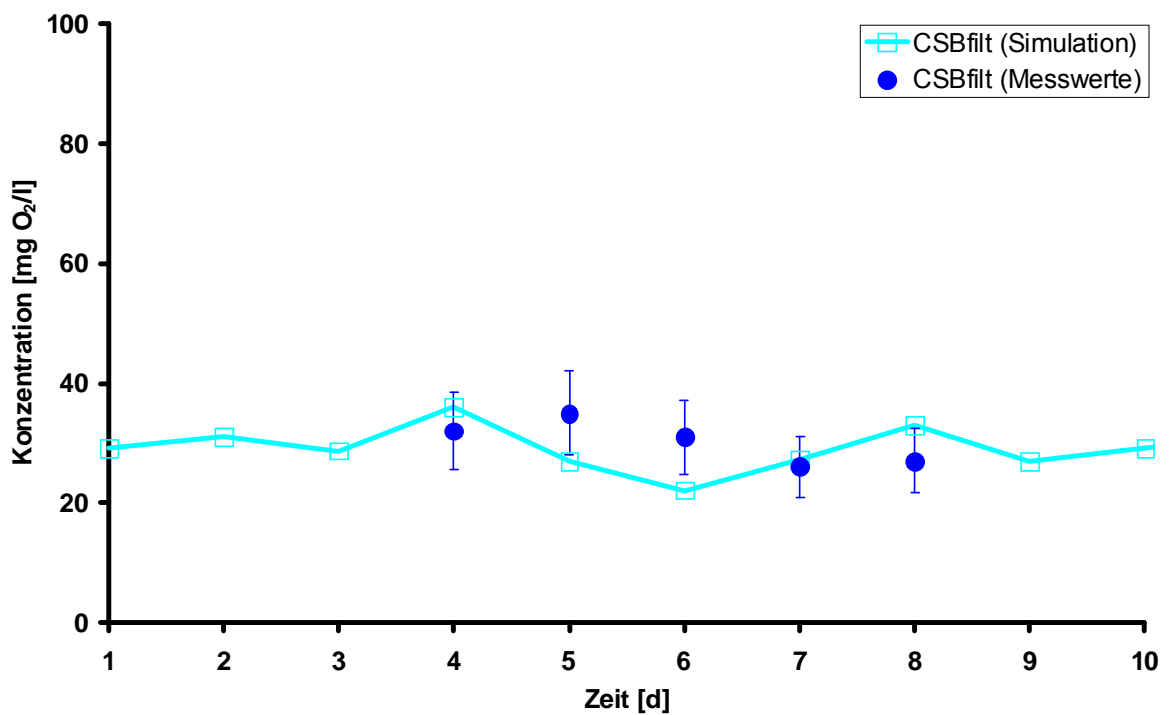


Abbildung 8b: Vergleich der Simulationsergebnisse und Messwerte für die Ablaufwerte des CSB für  $T = 30\text{ }^{\circ}\text{C}$ .



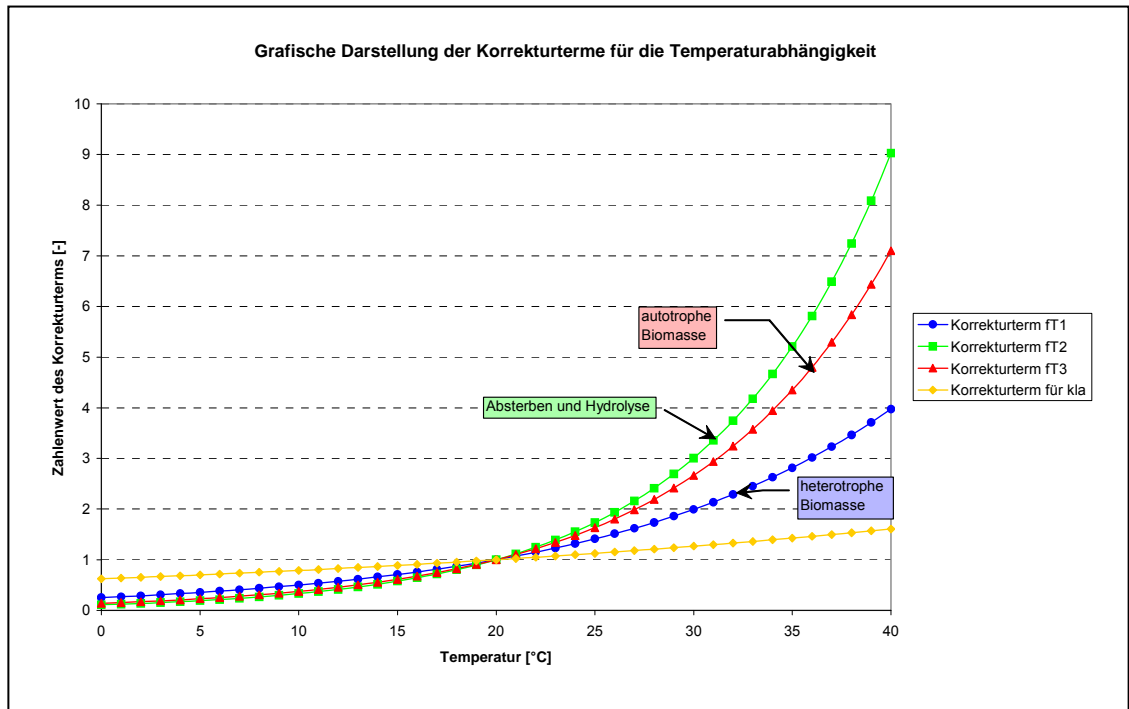


Abbildung 9: Grafische Darstellung der bisher verwendeten Temperaturterme für die Abbildung der Temperaturabhängigkeit der biologischen Prozesse.

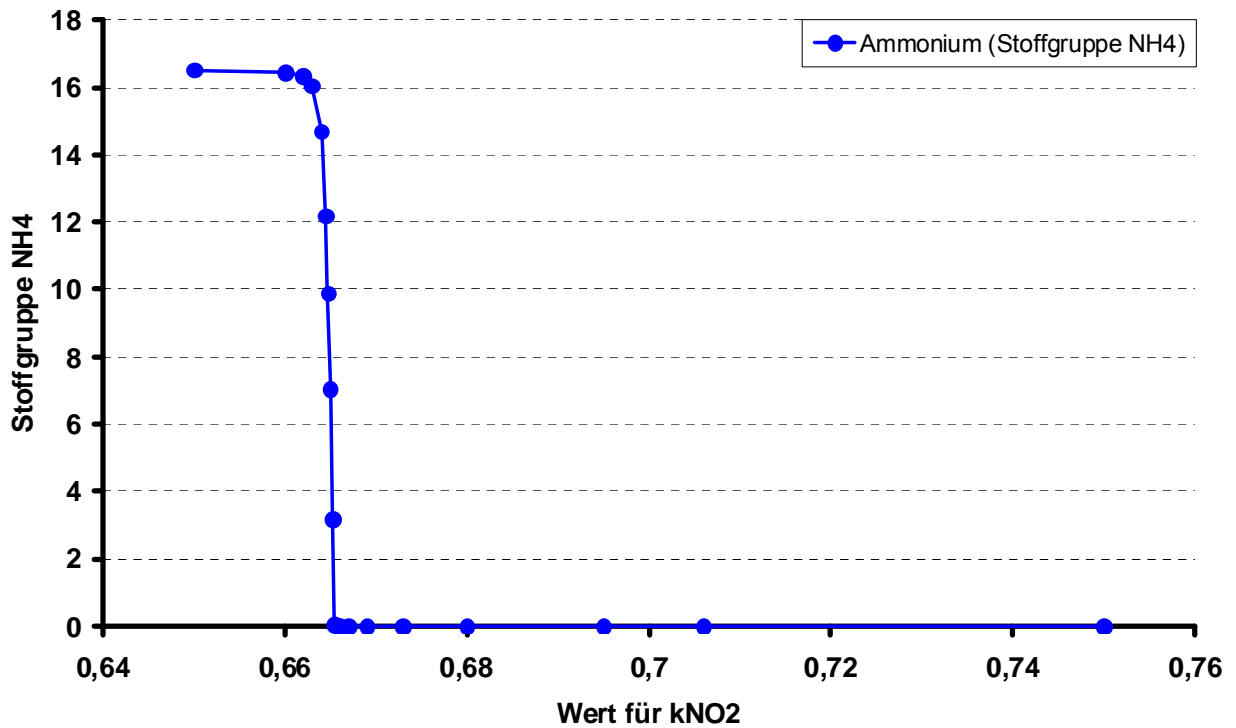


Abbildung 10a: Ausgewählte Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für die Stoffgruppe NH4 (Ammonium) (Simulation des Belebungsverfahrens der RU Bochum).

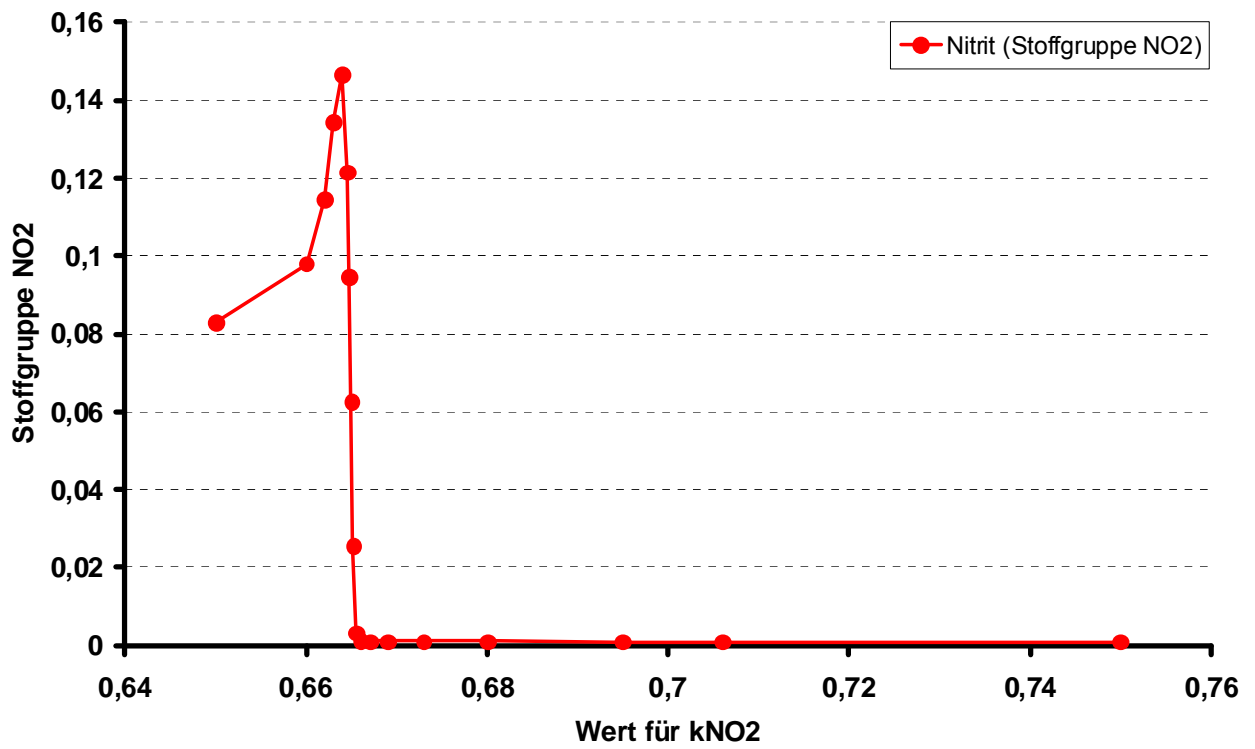


Abbildung 10b: Ausgewählte Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für die Stoffgruppe NO<sub>2</sub> (Nitrit) (Simulation des Belebungsverfahrens der RU Bochum).

**Tabelle 8:** *Verwendete Parametersätze für den Modellansatz FUKA (Zusammenstellung der Ergebnisse aller bisher durchgeführten Modellanpassungen für verschiedene Belebungsanlagen (ARA Emden, 90.000 EW; ARA Spalt, 12.000 EW; ARA Remels, 20.000 EW: jeweils Belebungsstufe als Kaskadensystem nach MEGATEC; ARA Westerstede, 24.650 EW: Belebung mit intermittierender Belüftung; ARA Bochum/Ölbachtal: Versuchsanlage mit vorgeschalteter Denitrifikation). Diejenigen Parameter, deren Zahlenwert bisher bei keiner der Modellanpassungen abgeändert werden musste, wurden in den Zeilen 1 und 2 jeweils mit einer roten Schattierung markiert.*

Parameter		Wert					
		KA Emden	KA Spalt	KA Remels	KA Westerstede	KA Bochum (15)	KA Bochum (30)
<b>1</b>	<b>kS</b>	4,3	4,3	4,3	4,3	4,3	4,3
<b>2</b>	<b>kRS</b>	0,003	0,003	0,003	0,003	0,003	0,003
<b>3</b>	<b>kHK</b>	40	40	40	40	40	40
<b>4</b>	<b>kRHK</b>	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04
<b>5</b>	<b>kP</b>	1,97	1,97	1,97	1,97	1,97	1,97
<b>6</b>	<b>kN3K</b>	1,5	0,8	0,8	0,8	0,001	0,01
<b>7</b>	<b>kRN3K</b>	0,0015	0,0015	0,0015	0,0015	0,0001	0,0001
<b>8</b>	<b>kN</b>	6	6	6	6	0,001	0,04
<b>9</b>	<b>kAK</b>	4	2,415	2,415	1,4	4	4
<b>10</b>	<b>kRAK</b>	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04
<b>11</b>	<b>kN1K</b>	6,706	3,35	3,35	1	0,5	0,5
<b>12</b>	<b>kRN1K</b>	0,00002914	0,00002914	0,00002914	0,00002914	0,00002914	0,00002914
<b>13</b>	<b>kNO2</b>	0,706	1,3	1,3	4,0997	0,9	0,9
<b>14</b>	<b>kN2K</b>	3,08	11	11	15	10	10

Fortsetzung Tabelle 8:

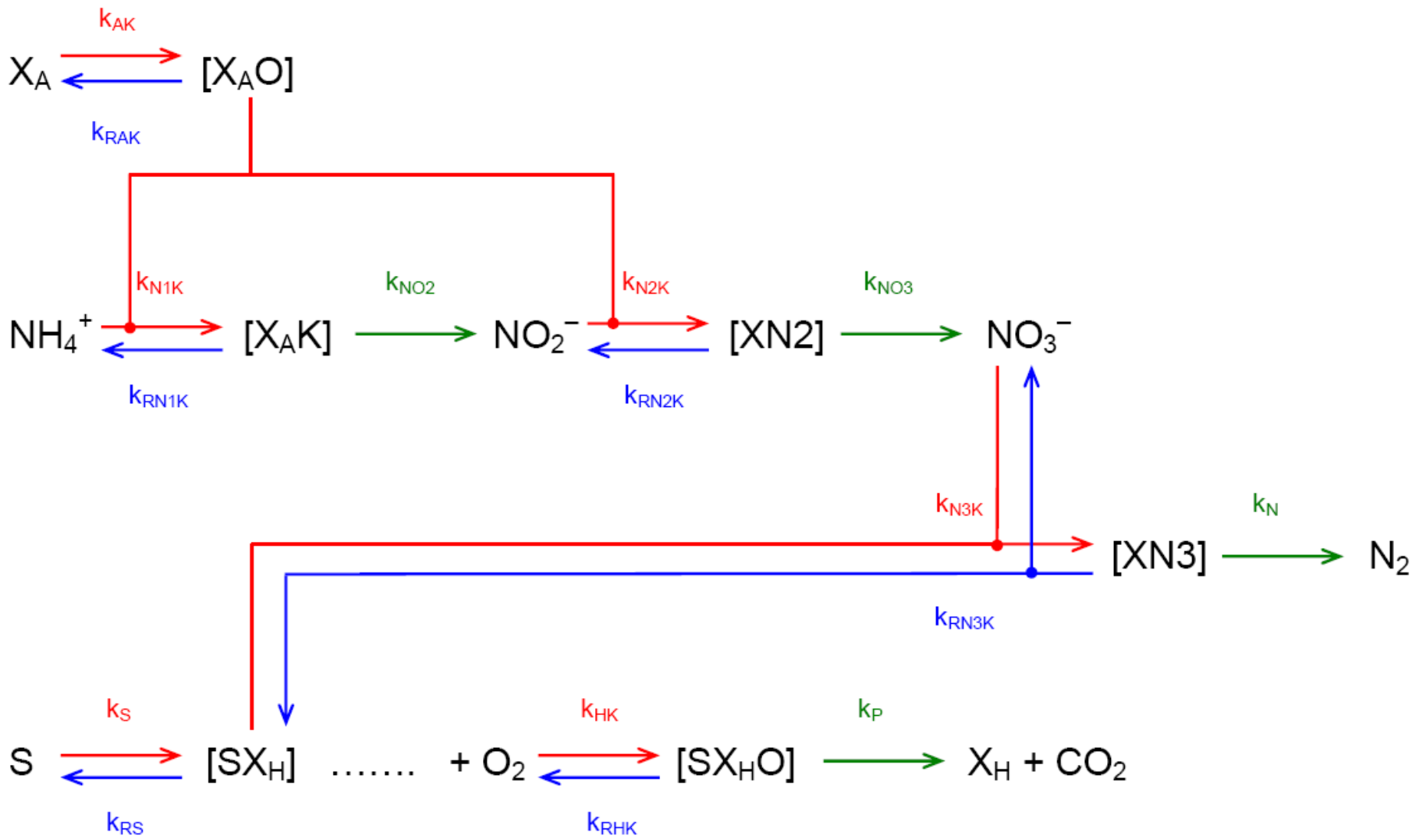
Parameter		Wert					
Nr.		KA Emden	KA Spalt	KA Remels	KA Westerstede	KA Bochum (15)	KA Bochum (30)
15	kRN2K	0,3696	0,3696	0,3696	0,3696	0,3696	0,3696
16	kNO3	8,9155	9,83	9,83	2,3138	4,46	4,46
17	bA	0,15	0,155	0,15	0,155	0,15	0,15
18	bH	0,62	0,62	0,62	0,62	0,62	0,62
19	F1	2,765	3,040	2,69	1,85	2,7	2,7
20	F2	2,24	2,875	2,0	2,875	2,5367	3,0344105
21	F3	2,85	2,35	2,35	2,35	3	7
22	F4	1,67	1,67	1,67	1,67	1,67	1,67
23	F5	2,67	2,67	2,67	2,67	2,67	2,67
24	F6	1,67	1,67	1,67	7,5	1,67	1,67
25	F7	1,67	1,67	1,67	1,67	1,67	1,67
26	F8	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05
27	F9	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05
28	F10	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05
29	fNA	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1
30	fNH	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1
31	fOA	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
32	fOH	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
33	fl	0,08	0,08	0,08	0,08	0,08	0,08
34	fNI	0,06	0,06	0,06	0,06	0,06	0,06
35	fOI	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4

Es zeigt sich, dass von den insgesamt 35 Parametern des Modellansatzes FUKA bei den bisher durchgeführten Anpassungen nur 13 variiert werden mussten (sensitive Einflussgrößen), während die übrigen 22 für alle Anlagen konstant gehalten werden konnten. In *Tabelle 9* wurden zusätzlich die 13 sensitiven Parameter mit den aus den bisherigen Modellanwendungen erhaltenen Schwankungsbereichen angegeben.

*Tabelle 9: Schwankungsbereiche der 13 variierten (sensitiven) Parameter des Modellansatzes FUKA.*

Parameter	Bedeutung	Schwankungsbereich
kN3K	Komplexbildung XN3	0,001 – 1,5
kRN3K	Komplexzerfall XN3	0,0001 – 0,0015
kN	Stickstoffbildung	0,001 – 6
kAK	Komplexbildung XAO	1,4 – 4
kN1K	Komplexbildung XAK	0,5 – 6,706
kNO2	Nitritbildung	0,706 – 4,0997
kN2K	Komplexbildung XN2	3,08 – 15
kNO3	Nitratbildung	2,3138 – 9,83
bA	Absterben von XA	0,15 – 0,155
F1	Ertrag: XA für Reaktion (2)	1,85 – 3,040
F2	Ertrag: XA für Reaktion (3)	2,0 – 3,0344105
F3	Ertrag: XH für Reaktion (5)	2,35 – 7
F6	Ertrag: N2 für Reaktion (6)	1,67 – 7,5

Die in *Tabelle 8* und *Tabelle 9* enthaltenen Informationen können als Grundlage für die praktische Nutzung des kinetischen Modellansatzes FUKA und die für eine Nachbildung weiterer Belebungsanlagen erforderlichen Modellanpassungen dienen. Aus der in *Abbildung 11* enthaltenen Darstellung der funktionalen Zusammenhänge zwischen den Stoffgruppen und Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten des kinetischen Modellansatzes FUKA lassen sich zudem Hinweise (Anhaltspunkte) für die Durchführung einer Sensitivitätsanalyse entnehmen.



37

Abbildung 11: Schematische Darstellung der funktionalen Zusammenhänge zwischen den Stoffgruppen und Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten des kinetischen Modellansatzes FUKA.

## 4.2 Simulation der Biofilmverfahren

Die Simulation der Biofilmanlagen erfolgte unter Verwendung des im Simulationsprogramm SIMBA<sup>®</sup> implementierten Biofilmmodells (siehe Abschnitt 2.3). Dabei wurde für die Beschreibung der biologischen Abbauvorgänge das vorgegebene modifizierte ASM 1-Modell eingesetzt. Um den Modellansatz ASM 1 für die Nachbildung der biologischen Abbauvorgänge innerhalb eines Biofilms anwenden zu können, sind gewisse Änderungen hinsichtlich der Definition der im Modellansatz enthaltenen Stoffgruppen erforderlich. Im Original-ASM 1 wird der Anteil der schwer abbaubaren Kohlenstoffverbindungen vereinfachend als vollständig partikuläre Stoffgruppe  $X_S$  definiert. Bei der Simulation von Biofilmprozessen ist diese Vereinfachung nicht zulässig, da nur gelöste Stoffe durch Diffusion in den Biofilm eingetragen werden können. Schwer abbaubare Stoffe würden mit den Annahmen des ASM 1 also gar nicht in den Biofilm gelangen und nicht umgewandelt werden. Da dies nicht der Realität entspricht, wurden im modifizierten ASM 1 (als Modellansatz im Simulationsprogramm SIMBA<sup>®</sup> enthalten) folgende Änderungen vorgenommen (ifak system GmbH, 2005):

- Aufteilung der im ASM 1 ursprünglich vollständig partikulären Stoffgruppe  $X_S$  (= CSB-Fraktion; biologisch schwer abbaubare organische Stoffe) in gelöste und partikuläre schwer abbaubare Stoffe (Fraktionen  $S_{XS}$  und  $X_S$ ). Die gelöste schwer abbaubare Fraktion  $S_{XS}$  kann durch Diffusion in den Biofilm gelangen und dort abgebaut werden.
- Die Fraktion  $X_P$  (= CSB-Fraktion; partikuläre Zerfallsprodukte der Biomasse) wird der Fraktion  $X_I$  (= CSB-Fraktion; biologisch inerte, partikuläre organische Stoffe) zugeschlagen, da es sich in beiden Fällen um eine vollständig partikuläre Fraktion handelt, die definitionsgemäß nicht durch Diffusion in den Biofilm gelangen und dort nicht biologisch abgebaut werden kann.

### 4.2.1 Simulation des Tropfkörperverfahrens

#### 4.2.1.1 Beschreibung/Konfiguration der Versuchsanlage

Abbildung 12a zeigt eine schematische Darstellung der von der Universität Stuttgart betriebenen Versuchsanlage zum Tropfkörperverfahren. Der Versuchstropfkörper wurde in der Versuchshalle des Lehr- und Forschungsklärwertes (LFKW) der Universität Stuttgart installiert (Abmessungen siehe Tabelle 10a). Der Tropfkörper wurde in der Mitte mittels einer vertikalen PVC-Trennwand geteilt und mit unterschiedlichen Füllmaterialien (Aufwuchskörper aus Kunststoff und Lavaschlacke; weitere Angaben siehe Tabelle 10b) befüllt. Die in Abbildung 12b gezeigten Fotos veranschaulichen die beiden verwendeten Füllmaterialien.

Tabelle 10a: Dimensionierungen der Versuchsanlage zum Tropfkörperverfahren.

Höhe	Durchmesser	Volumen	Querschnittsfläche	Anzahl der Drehsprengerarme
3,9 m	2,45 m	18,4 m <sup>3</sup>	4,72 m <sup>2</sup>	1

Tabelle 10b: Eigenschaften der Füllmaterialien.

Füllmaterial	Herkunft	Struktur	Spezifische Oberfläche	Hohlraumanteil
Kunststoff	2H Kunststoff GmbH (Typ TKP 619)	Crossflow-Material (45°)	152 m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup>	ca. 50 %*
Lavaschlacke	Kläranlage Steinbronn	zufällig Körnung 40 – 80 mm*	90 m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup>	> 95 %

\*Theoretische Werte nach (DWA-A 281, 2001).

Die Beschickung erfolgte mit vorgeklärtem Abwasser des LFKW der Universität Stuttgart. Die Zulaufpumpe wurde proportional zum Zulaufvolumenstrom des Klärwerkes geregelt, dadurch wurden die täglichen Schwankungen berücksichtigt. Die Rezirkulation fand für jedes Füllmaterial mit dem entsprechenden nachgeklärten Wasser statt. Die jeweiligen Rezirkulationspumpen wurden durch Positionssensoren am Drehsprenger angesteuert. Dadurch ließen sich die erforderlichen Rezirkulationsraten und Flächenbeschickungen für jedes Füllmaterial getrennt einstellen. Somit konnten beide Füllmaterialien komplett unabhängig voneinander untersucht werden.

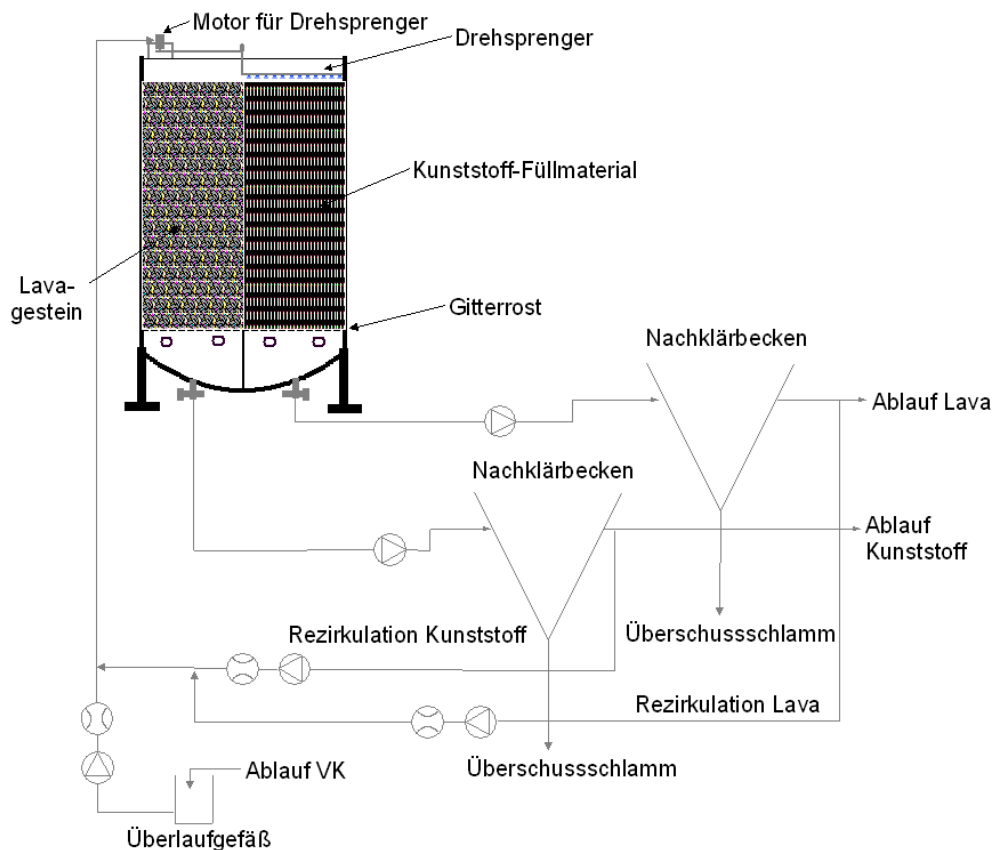


Abbildung 12a: Schema der Versuchsanlage der Universität Stuttgart für das Tropfkörperverfahren.

Der Tropfkörper und die zwei Nachklärbecken wurden in einer Klimakammer installiert, so dass verschiedene Lufttemperaturen eingestellt werden konnten. Durch eine aufwändige Klimatechnik wurde die Zuluft erwärmt und gleichmäßig in die Klimakammer geführt. Zudem



wurde das vorgeklärte Abwasser im Zulauf der Tropfkörperanlage durch Wärmetauscher aufgewärmt.

Auf jeder Seite des Reaktors wurde ein Schacht, der ein bestimmtes Füllmaterialvolumen umfasst, eingebaut. Dadurch konnten von jedem Füllmaterial Biomasseproben entnommen werden.

Um zu vermeiden, dass bei eventuellem Sauerstoffmangel in der Klimakammer durch giftige bzw. explosive Gase eine Gefahr entsteht, wurde ein Sicherheitssystem installiert. Dabei wurden  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{CO}_2$  und  $\text{O}_2$  durch entsprechende Sonden online gemessen. Die Signale wurden von einem stationären Gaswarngerät mit Notabschaltung verarbeitet.



*Abbildung 12b: Ansicht der beiden im Versuchstropfkörper der Universität Stuttgart eingesetzten Füllmaterialien.*

#### 4.2.1.2 Ergebnisse der Simulationsrechnungen

Das Verfahrensschema im Simulationsprogramm SIMBA<sup>®</sup> der von der Universität Stuttgart betriebenen Versuchsanlage zum Tropfkörperverfahren ist in *Abbildung 12c* dargestellt (Anmerkung: Das Verfahrensschema für die Tropfkörperhälfte mit Kunststofffüllung sieht identisch aus; lediglich der Biofilmblock wurde mit den für dieses Füllmaterial relevanten Werten parametrisiert). Für die Vorgabe der Zulaufkonzentrationen wurde ein „Tagesgang“-Block verwendet, über den das in *Anhang 3* beschriebene m-file „zu.m“ aufgerufen wird. Über dieses werden die in einer txt-Datei befindlichen Analysendaten der Intensivmessphase I (06.10.2005 – 05.11.2005) für die Parameter CSB, Ammonium ( $S_{NH}$ ), Nitrat ( $S_{NO}$ ) und Zulaufvolumenstrom ( $Q_{zu}$ ) eingelesen und in die Modellfraktionen des modifizierten ASM 1 umgerechnet.

Die durchgeführten Simulationsrechnungen mit den experimentellen Daten der von der Universität Stuttgart betriebenen Versuchsanlage zeigen, dass eine prinzipielle Nachbildung des Tropfkörperverfahrens mit dem Biofilmblock in Kombination mit dem modifizierten ASM 1 Modell (s. o.) möglich ist und eine gute Übereinstimmung zwischen Simulations-ergebnissen und Messwerten erreicht werden kann. Im Rahmen der Sensitivitätsanalyse wurden die in *Tabelle 11* zusammengestellten Parameter variiert.

*Tabelle 11: Zusammenstellung der im Rahmen der Sensitivitätsanalyse für die Biofilmverfahren variierten Parameter.*

Parameter	Bedeutung des Parameters
$f_{ERO}$	Erosionsfaktor
$f_{FI}$	Filterrückhalt
Sollwert für $O_2$	Belüftung bzw. Sauerstoffeintrag
eps_I	Wasseranteil im Biofilm
Anzahl der Layer	Anzahl der Schichten durch die der Biofilm abgebildet wird
Diffusionskoeffizient	Innerhalb des Biofilms für die Stoffgruppe $S_{NH}$ (Ammonium)
Diffusionskoeffizient	Innerhalb des Biofilms für die Stoffgruppe $S_{NO}$ (Nitrat und Nitrit)
Diffusionskoeffizient	Zum Porenwasser für die Stoffgruppe $S_{NH}$ (Ammonium)
Diffusionskoeffizient	Zum Porenwasser für die Stoffgruppe $S_{NO}$ (Nitrat und Nitrit)
Porenvolumen	Vorgabe des Porenvolumens [ $m^3$ ] für jede Reaktorschicht
Rfactor	„Gleichgewichts“-Filmdicke; Angabe im Biofilmblock
Kf	Sedimentationsgeschwindigkeit/Anlagerungsgeschwindigkeit; Angabe im Biofilmblock
GeoR	Referenzradius; Angabe im Biofilmblock
A0_V	Spezifische Oberfläche, Aufwuchsfläche je $m^3$ Reaktorvolumen; Angabe im Biofilmblock
Austauschstrom	Angabe für den Faktor „Austauschstrom“ (zwischen den Horizonten des Reaktors)
Porenvolumen	Faktor für das Porenvolumen (Angabe im Biofilmblock)

Die in *Tabelle 11* aufgelisteten Parameter wurden nicht experimentell bestimmt und sind ohnehin messtechnisch kaum oder nur mit großem apparativen/experimentellen Aufwand zugänglich (darin liegt auch die besondere Problematik der Modellierung von

Biofilmanlagen). Für einige Parameter (Porenvolumen, spezifische Oberfläche) konnten Angaben der Hersteller bzw. Literaturangaben verwendet werden. Für die meisten Parameter musste jedoch zunächst von den Defaultwerten des Biofilmblocks ausgegangen werden.

Für die Anpassung des Modells an die beiden unterschiedlichen Füllmaterialien (Kunststoff-füllkörper, Lavabruch) wurden folgende Parameter verändert:

a) Nachbildung des Tropfkörpers mit Kunststofffüllung:

Bei einer Änderung des Faktors  $\text{eps}_I$  auf 0.95 ergibt sich (insb. für Ammonium) eine sehr gute Übereinstimmung zwischen simulierten und gemessenen Werten (*siehe Abb. 13*). Für Nitrat war die Übereinstimmung dagegen geringfügig schlechter. Daher wurde untersucht, ob durch die Variation eines zusätzlichen zweiten Parameters eine Verbesserung erreichbar ist: Durch eine zusätzliche Änderung des Faktors  $fI$  war keine Verbesserung zu erreichen. Eine zusätzliche Änderung des Sollwertes für  $O_2$  erbrachte ebenfalls keine Verbesserung. Über eine zusätzliche Erhöhung der Anzahl der Biofilmschichten (auf 3 Schichten) ergab sich zwar eine Verbesserung für Nitrat, aber zugleich eine deutliche Verschlechterung für Ammonium.

b) Nachbildung des Tropfkörpers mit Lavafüllung:

Eine Variation der Angabe für den Faktor „Austauschstrom“ (Defaultwert: 0; Änderung auf 0,1; 0,3 und 0,7) zeigte keinen Einfluss auf das Ergebnis der Simulation.

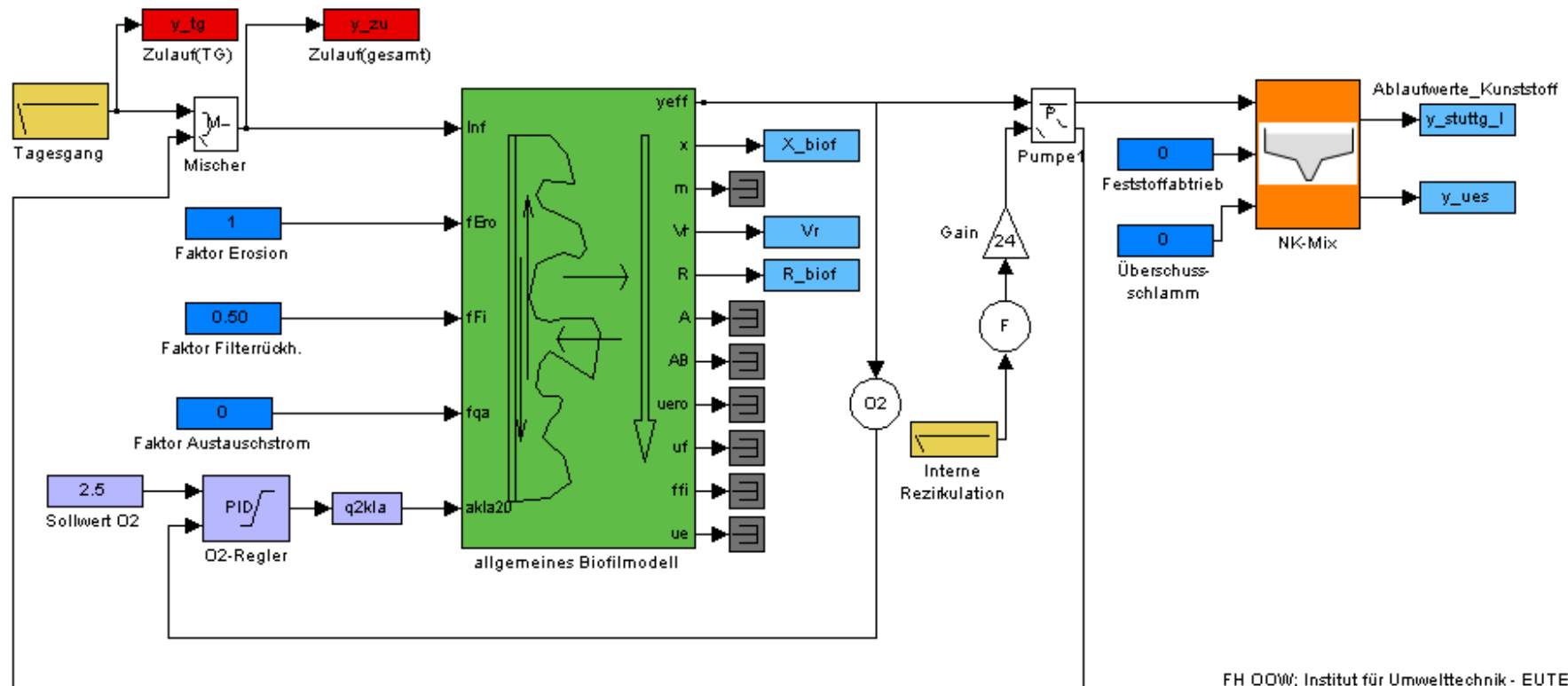
Bei einer Änderung des Faktors für das Porenvolumen (im Biofilmblock / Eingabemaske) ergaben sich dagegen für Ammonium und Nitrat signifikante Änderungen hinsichtlich der simulierten Ablaufwerte. Dabei konnten zwar realistische Größenordnungen erreicht werden, aber der Kurvenverlauf zeigte keine gute Übereinstimmung zwischen simulierten und gemessenen Werten. Eine wesentlich bessere Übereinstimmung konnte sowohl für Nitrat als auch für Ammonium durch eine Variation des Parameters „Rfactor“ erreicht werden (bei Rfactor = 0,17; wobei hier im letzten Abschnitt von ca. 27 – 30 d unrealistische Werte auftraten).

Bei einer Kombination der Einstellungen Rfactor = 0,15 und  $P_v = 9,2 \cdot 0,06 \cdot \text{ones}(2,1)/2$  ergab sich eine weitere Verbesserung hinsichtlich der Übereinstimmung von Messwerten und Simulationsergebnissen für Nitrat und für Ammonium (*siehe Abb. 14*).



Sctrl

### Versuchsanlage der Universität Stuttgart (Tropfkörper/Füllmaterial: Lava)



FH OÖW; Institut für Umwelttechnik - EUTEC;  
 Bearbeiter: F. Uhlentut;  
 Datum: 25.08.2008

Abbildung 12c: Verfahrensschema der Versuchskläranlage (Tropfkörperverfahren) der Universität Stuttgart im Simulationsprogramm SIMBA®.

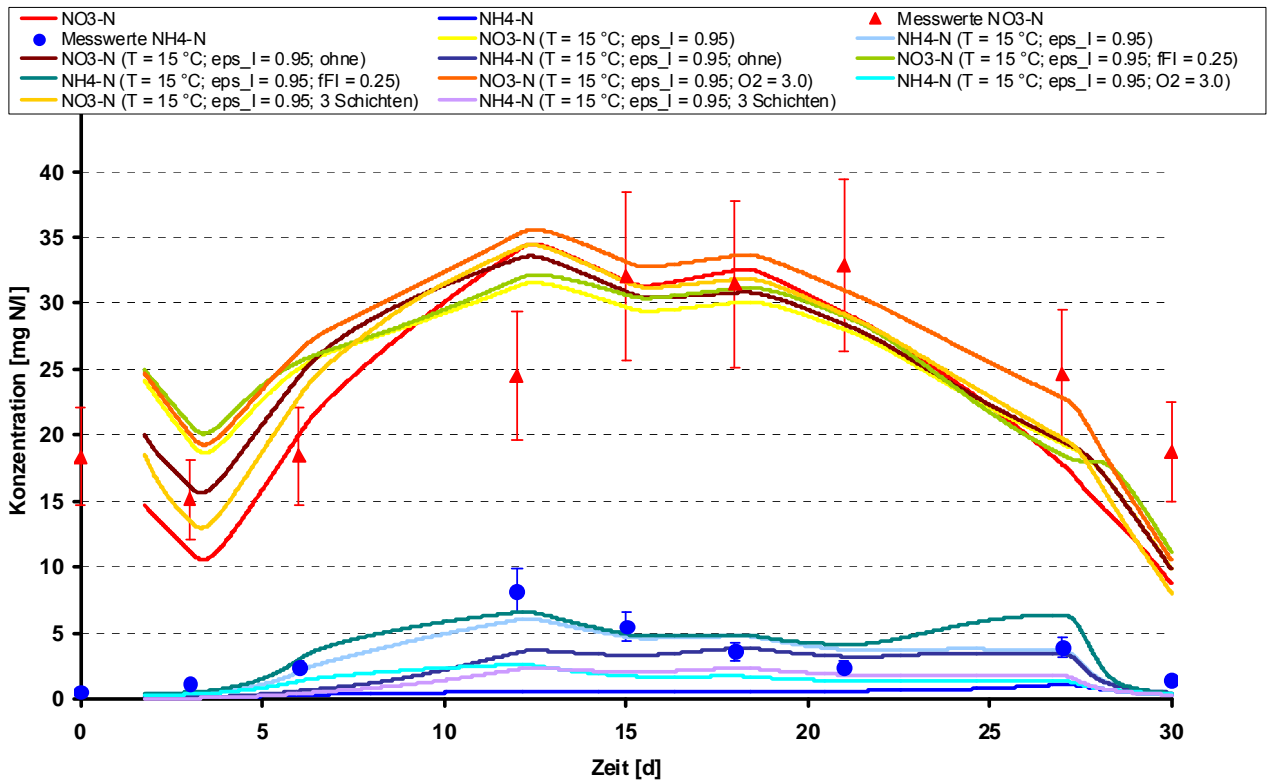


Abbildung 13: Ausgewählte Ergebnisse der Parameteranpassung für die Stickstoffparameter Ammonium und Nitrat (Simulation des Versuchstropfkörpers der Universität Stuttgart, Füllmaterial: Kunststoff).

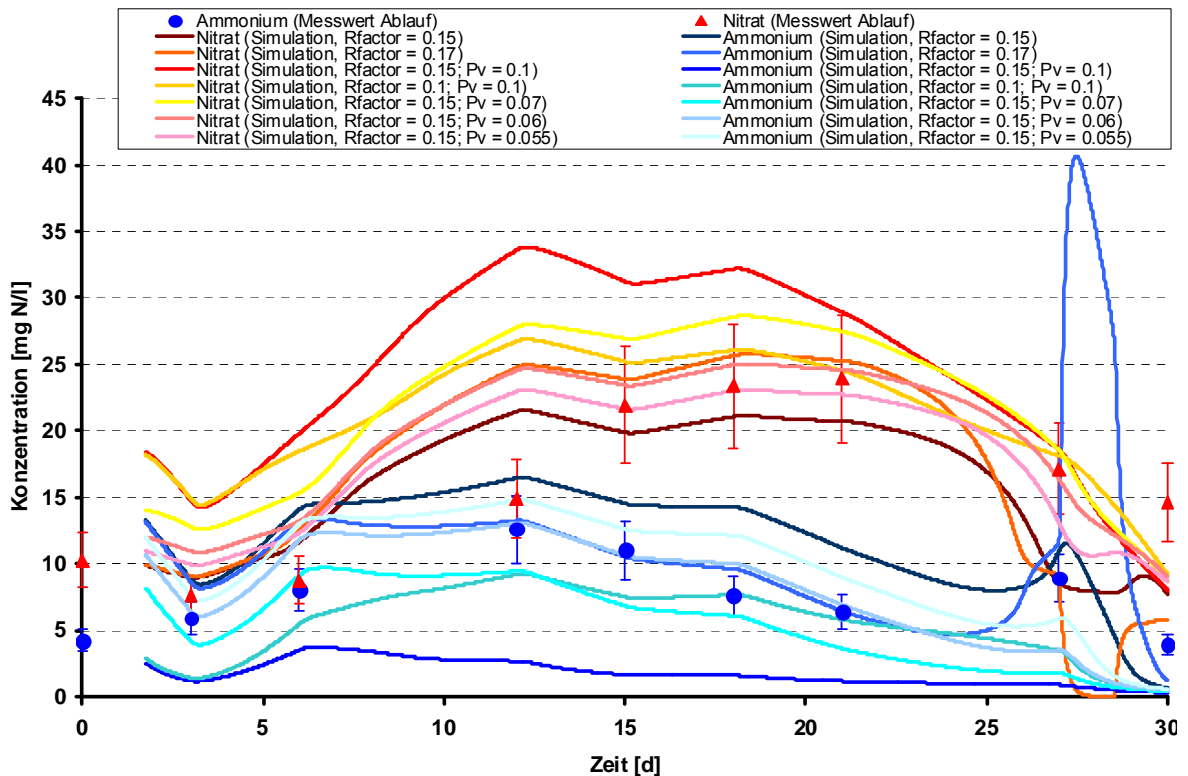


Abbildung 14: Ausgewählte Ergebnisse der Parameteranpassung für die Stickstoffparameter Ammonium und Nitrat (Simulation des Versuchstropfkörpers der Universität Stuttgart, Füllmaterial: Lava).



In *Tabelle 12* sind die bei der Parameteranpassung für die beiden verschiedenen Füllmaterialien erhaltenen Parametersätze zusammengestellt.

*Tabelle 12: Vergleich der Parametersätze für die beiden verschiedenen Füllmaterialien (Lavaschlacke, Crossflow-Material).*

Parameter	Bedeutung	Wert für Lavaschlacke	Wert für Crossflow-Material
f <sub>ERO</sub>	Erosionsfaktor	1,0	1,0
f <sub>FI</sub>	Filtrerrückhalt	0,5	0,5
f <sub>qa</sub>	Austauschstrom	0	0
Eingang PID-Regler	Sollwert für O <sub>2</sub>	2,5	2,5
Porenvolumen	Vorgabe des Porenvolumens [m <sup>3</sup> ] für jede Reaktorschicht	9,2*0,06*ones(2,1)/2	9,2*0,50*ones(2,1)/2
A0_V	spezifische Oberfläche	90/0,4	152/0,4
GeoR	Referenzradius	0,5e-3	0,5e-3
Kf	Sedimentationsgeschwindigkeit/ Anlagerungsgeschwindigkeit	0,01*0,01*24	0,01*0,01*24
Rfactor	„Gleichgewichts“-Filmdicke	0,15	0,01
eps_l	Wasseranteil im Biofilm	0,80	0,95
Anzahl der Layer	Anzahl der Biofilmschichten	2	2
Filtrerrückhalt	(Angabe im Block)	0,4	0,4
Austauschstrom	(Angabe im Block)	0	0
Erosionsfaktor	(Angabe im Block)	0,01*0,01*24	0,01*0,01*24

Ein Vergleich der in *Tabelle 12* aufgeführten Parametersätze zeigt, dass bei 4 Parametern unterschiedliche Vorgaben erforderlich waren. Davon beziehen sich 2 dieser Parameter (Porenvolumen,  $A0\_V$ ; jeweils grün markiert) auf die Art des Füllmaterials und dessen Geometrie und sind z. B. aus den Herstellerangaben (oder Richtwerten der Literatur) erhältlich. Die beiden übrigen Parameter (Rfactor,  $eps\_I$ ; jeweils rot markiert) stehen in direktem Zusammenhang mit der Struktur/dem Aufbau des jeweils vorhandenen Biofilms. Dies erscheint plausibel, da die Struktur des Biofilms, der sich auf den beiden unterschiedlichen Füllmaterialien ausbildet, mit hoher Wahrscheinlichkeit signifikant verschieden ist. Daher ist zu erwarten, dass auch die Angaben für den Wasseranteil des Biofilms und die „Gleichgewichts“-Filmdicke unterschiedliche Werte für die Nachbildung verschiedener Füllungen in der Simulation haben müssen. Für den Parameter „Gleichgewichts“-Filmdicke ist die Abweichung (Faktor 15) sehr deutlich. Dies lässt sich vermutlich darauf zurückführen, dass dieser Wert zusätzlich in hohem Maße durch die hydraulischen Verhältnisse innerhalb der Füllung beeinflusst wird. Innerhalb der Kunststofffüllung findet die Durchströmung im Vergleich zur Lavafüllung deutlich schneller und ungehinderter statt und auf Grund der höheren Strömungsgeschwindigkeiten sind die Filmdicken des Biofilms geringer (verstärkte Erosion durch hydraulische Belastung).

Im Rahmen der Sensitivitätsanalyse wurden auch die Diffusionskoeffizienten für die Stoffgruppen  $S_{NH}$  und  $S_{NO}$  variiert (dies ist möglich über den Modelleditor in SIMBA<sup>®</sup>, nach Öffnen der Eingabemaske (FOX Editor (Fraction) für die entsprechende Stoffgruppe). Durch die Variation der auf das Nitrat bezogenen Diffusionskoeffizienten über einen sehr weiten Bereich ( $1,6e-3$  bis  $1,6e-6$ ) ergibt sich für die Ablaufkonzentration der N-Parameter in der Simulation keine erkennbare Änderung. Dies erscheint plausibel, da das Nitrat -im Gegensatz zum Ammonium- im Wesentlichen erst als Reaktionsprodukt innerhalb des Biofilms gebildet wird (daher besteht hier keine Diffusionsabhängigkeit).



## 4.2.2 Simulation des getauchten Festbettes

### 4.2.2.1 Beschreibung/Konfiguration der Versuchsanlage

In *Abbildung 15a* ist das Verfahrensschema eines Reaktors der von der Universität Halle-Wittenberg betriebenen Versuchsanlage im Labormaßstab zum „Getauchten Festbett“-Verfahren dargestellt. Das in *Abbildung 15b* gezeigte Foto veranschaulicht den Aufbau der gesamten Versuchsanlage im Technikum. Diese besteht aus insgesamt 5 Segmenten mit zunächst jeweils einem Reaktor (und im späteren Verlauf aus einer Kaskade von jeweils zwei hintereinander geschalteten Reaktoren), wobei die einzelnen Segmente separat temperiert wurden (Betriebstemperaturen: 5 °C, 15 °C, 25 °C und 35 °C). Als Aufwuchsmaterial wurden Polyethylen oder ein Biocompound (Eigenentwicklung aus der Forschung der MLU Halle-Wittenberg, enthält zwei organische Substanzen, eine biologisch leicht abbaubare (Polyhydroxybuttersäure) und eine biologisch schwer abbaubare (Polycaprolacton)) eingesetzt. Das Belüftungssystem bestand aus vier perforierten Rohren, die eine gleichmäßige Verteilung der Luft im Festbett ermöglichten. Zusammen mit einer Umlaufpumpe (siehe *Abbildung 15a*;  $V_{\text{Umlauf}} = 150 \text{ l/h}$ ) wurde damit eine nahezu ideale Durchmischung in den Festbettreaktoren gewährleistet. Die weiteren Daten zur Dimensionierung der Reaktoren und zur Zusammensetzung des Zulaufes sind in *Tabelle 13* und *Tabelle 14* zusammengefasst.

*Tabelle 13: Eingangsdaten für die Simulation der Versuchsanlage Halle-Wittenberg (Angaben G. Chapanova, Dissertation, Universität Halle-Wittenberg).*

Parameter	Versuchsreihe 1	Versuchsreihen 2 und 3
H x B x T des Reaktors	35,5 x 19,5 x 19,5 cm	40,5 x 19,5 x 19,5 cm
H x B x D der Platte	26 x 15,5 x 0,3 cm	26 x 15,5 x 0,3 cm
Anzahl der Platten, n	12	12
Querschnitt des Platten-Blocks	0,0247 m <sup>2</sup>	0,0247 m <sup>2</sup>
Volumen des Reaktors	8 l = 0,008 m <sup>3</sup>	9 l = 0,009 m <sup>3</sup>
Oberfläche des Festbettes	1,4 m <sup>2</sup>	1,5 m <sup>2</sup>
spezifische Oberfläche	175 m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup>	167 m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup>
Substratvolumenstrom	0,13 l/h = 0,00013 m <sup>3</sup> /h = 0,00312 m <sup>3</sup> /d	0,22 l/h = 0,00022 m <sup>3</sup> /h = 0,00528 m <sup>3</sup> /d
hydraulische Verweilzeit	62 h	41 h
Sauerstoffkonzentration	3 – 4 mg/l	
Luftvolumenstrom	60 – 200 l/h = 1,44 – 4,8 m <sup>3</sup> /d	

Tabelle 14: Parameter im Zulauf der Anlage.

Parameter		Versuch 1	Versuch 2	Versuch 3
TOC-Zulaufkonzentration	[g/l]	0,4	1,24	1,24
	[mg/l]	400	1.240	1.240
Umrechnung in CSB (* 3,33)	[mg/l]	1.332	4.129,2	4.129,2
TOC-Flächenbelastung	[g/m <sup>2</sup> ·d]	0,9	4,4	4,4
NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> -N-Zulaufkonzentration	[g/l]	0,057	0,15	0,48
	[mg/l]	57	150	480
NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> -N-Flächenbelastung	[g/m <sup>2</sup> ·d]	0,13	0,54	1,7
org-N-Zulaufkonzentration	[g/l]	0,0033	0,01	0,01
	[mg/l]	3,3		
NO <sub>2</sub> <sup>-</sup> -N-Zulaufkonzentration	[g/l]	< 0,05*10 <sup>-3</sup>	< 0,05*10 <sup>-3</sup>	< 0,05*10 <sup>-3</sup>
	[mg/l]	< 0,05	< 0,05	< 0,05
NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> -N-Zulaufkonzentration	[g/l]	< 0,15*10 <sup>-3</sup>	< 0,15*10 <sup>-3</sup>	< 0,15*10 <sup>-3</sup>
	[mg/l]	< 0,15	< 0,15	< 0,15

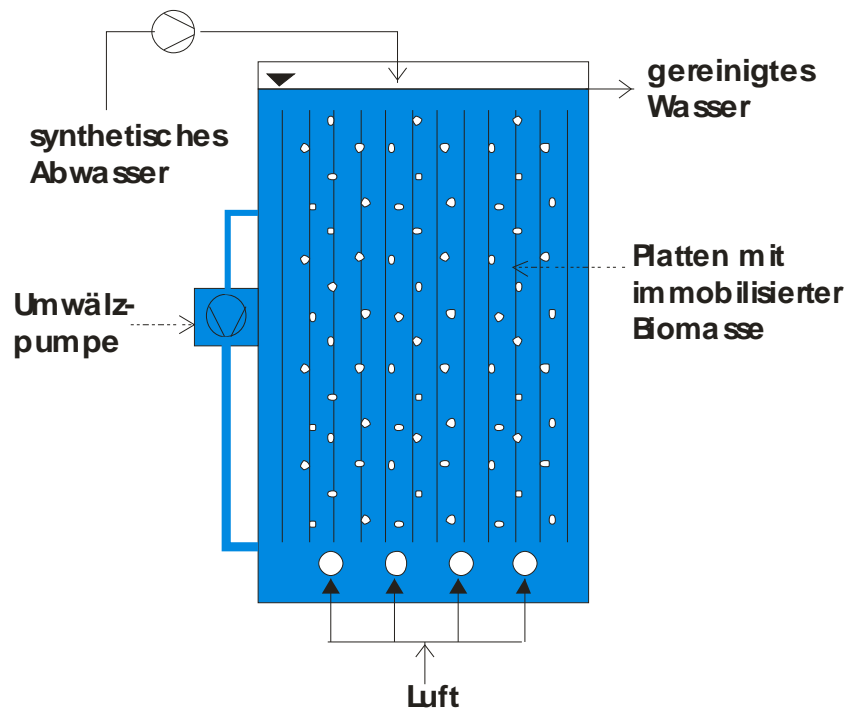


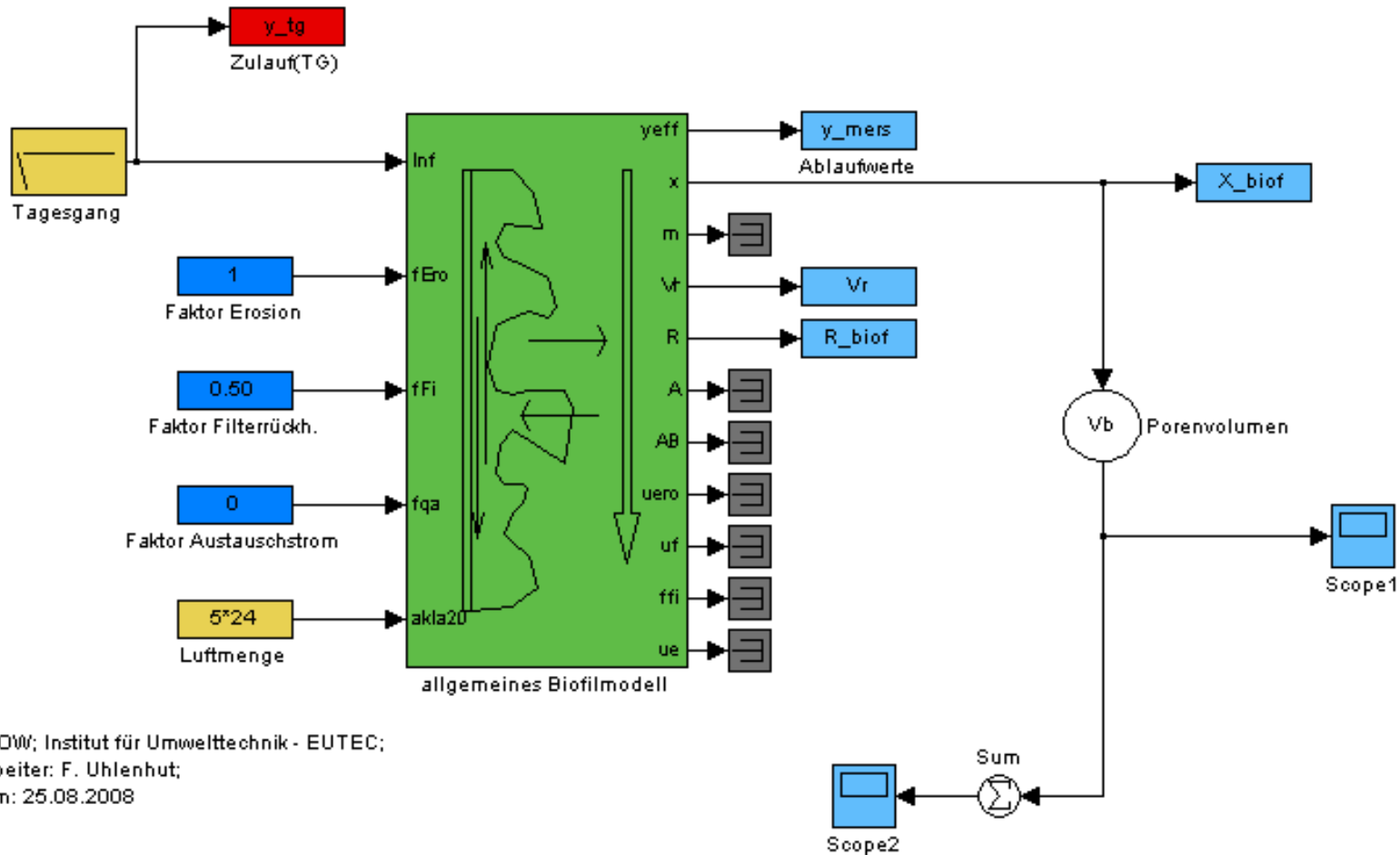
Abbildung 15a: Schema der Versuchsanlage der Universität Halle-Wittenberg für das „Getauchte Festbett“-Verfahren.



Abbildung 15b: Gesamtansicht der Versuchskläranlage (Getauchtes Festbett) der Universität Halle-Wittenberg.



### Versuchsanlage der Universität Halle-Wittenberg (Getauchtes Festbett) (Upscale um Faktor 1e6)



FH OOW; Institut für Umwelttechnik - EUTEC;  
Bearbeiter: F. Uhlenhut;  
Datum: 25.08.2008

Abbildung 15c: Verfahrensschema der Versuchskläranlage (Getauchtes Festbett) der Universität Halle-Wittenberg im Simulationsprogramm SIMBA®.

#### 4.2.2.2 Ergebnisse der Simulationsrechnungen

Das Verfahrensschema im Simulationsprogramm SIMBA® der von der Universität Halle-Wittenberg betriebenen Versuchsanlage zum „Getauchten Festbett“-Verfahren ist in *Abbildung 15c* dargestellt. Für die Vorgabe der Zulaufkonzentrationen wird ein „Tagesgang“-Block verwendet, über den das in *Anhang 4* beschriebene m-file „tgang\_biofm.m“ aufgerufen wird. Darin sind als Eingangswerte die Analysendaten (Angaben G. Chapanova, Versuch 1) für die Parameter CSB, Gesamtstickstoff nach Kjeldahl (TKN), Ammonium ( $S_{NH}$ ), Nitrat ( $S_{NO}$ ) und Zulaufvolumenstrom ( $Q_{zu}$ ) enthalten (jeweils 24 identische Stundenwerte für einen Tag) und werden in die Modellfraktionen des modifizierten ASM 1 umgerechnet.

Für die Vorgabe der Zulaufkonzentrationen wird ein „Tagesgang“-Block verwendet, über den das in *Anhang 5* beschriebene m-file „zumers.m“ aufgerufen wird. Über dieses werden die in einer txt-Datei befindlichen Analysendaten aus dem Versuch Nr. 1 (Promotionschrift G. Chapanova, 15 Wochen, jeweils 1 Messwert pro Woche) für die Parameter DOC (Umrechnung in CSB), Ammonium ( $S_{NH}$ ), Nitrat ( $S_{NO}$ ) und Zulaufvolumenstrom ( $Q_{zu}$ ) eingelesen und in die Modellfraktionen des modifizierten ASM 1 umgerechnet.

Die durchgeführten Simulationsrechnungen mit den experimentellen Daten der von der Universität Halle-Wittenberg betriebenen Versuchsanlage zeigen, dass eine prinzipielle Nachbildung des Verfahrens „Getauchtes Festbett“ mit dem Biofilmblock in Kombination mit dem modifizierten ASM 1 Modell (s. o.) möglich ist. Im Rahmen der Sensitivitätsanalyse wurden ebenfalls die im vorhergehenden Abschnitt (Tropfkörperverfahren) in *Tabelle 11* aufgelisteten Parameter sowie zusätzlich die Diffusionskoeffizienten für die Diffusion des Ammoniums (DiffSNH, 1. Diffusion innerhalb des Biofilms, 2. Diffusion aus dem Biofilm in die wässrige Phase (Bulk); diese Parameter können nach Öffnen des modifizierten ASM 1 Modells im Modelleditor des Simulationsprogramms SIMBA® bei den Eigenschaften der Stoffgruppe  $S_{NH}$  („Fractions“) geändert werden) variiert. Die dabei erhaltenen Ergebnisse werden beispielhaft in *Abbildung 16a* und *Abbildung 16b* dargestellt und die wichtigsten qualitativen Aussagen sind in *Tabelle 15* zusammengefasst.

Durch folgende Einstellungen konnten in der anschließend durchgeführten Parameteranpassung (Simulationsmodell „merseburg4b“, Upscale um Faktor  $1e6$ ) die Mittelwerte der experimentell bestimmten Ablaufwerte (Messwerte für Versuchsreihe 1 und  $T = 15\text{ °C}$ ):

NH<sub>4</sub>-N: 1.6 mg/l (nach ca. 8 Wochen konstant); NO<sub>3</sub>-N: bei 0.15 mg/l innerhalb der ersten 9 Wochen, dann zwischen 2 und 9 mg/l (Mittelwert: 5.4 mg/l)) annähernd in der Simulation nachgebildet werden:

Poren-Volumen für jede Reaktorschicht	$0.008*1e6*0.82*ones(2,1)/2$
A0_V	175
GeoR	$0.5e-3$
Kf	$0.01*0.01*24$
Rfactor	0.01
Verst.internerVRegler	50000
eps_l	0.8
Anzahl der Biofilm-Schichten	3
Filterrückhalt	0.4
Austauschstrom	0
Erosionsfaktor	$0.01*0.01*24$
Verstärkung V-Regler	1000
fEro	1
fFI	0.5
akla20	$5*24$

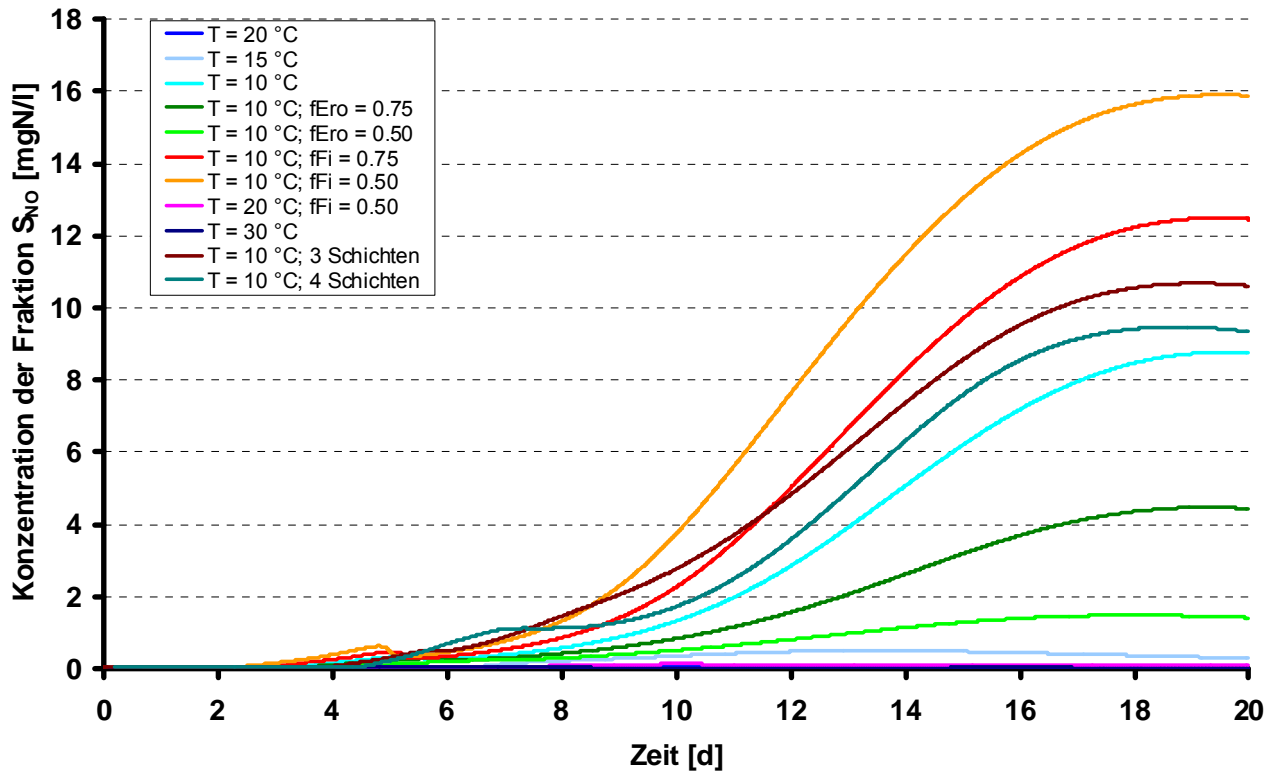


Abbildung 16a: Ausgewählte Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für die Stoffgruppe  $S_{NO}$  (Nitrat) (Simulation des „Getauchten Festbett“-Verfahrens der Universität Halle-Wittenberg).

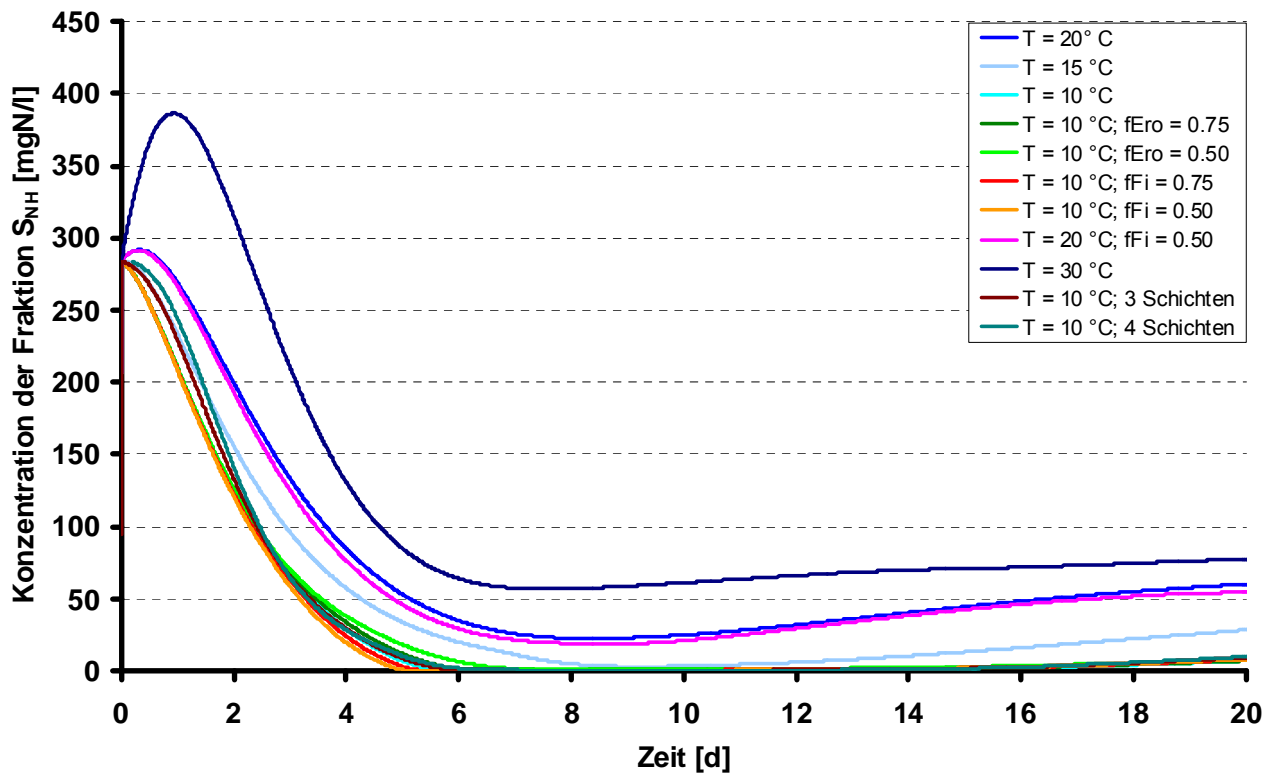


Abbildung 16b: Ausgewählte Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für die Stoffgruppe  $S_{NH}$  (Ammonium) (Simulation des „Getauchten Festbett“-Verfahrens der Universität Halle-Wittenberg).

Tabelle 15: Qualitative Darstellung der Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für das „Getauchte Festbett“-Verfahren.

Variierter Parameter		S <sub>NH</sub> (Ammonium)	S <sub>NO</sub> (Nitrat)
fFI	von 0.5 bis auf 0.25	k. A.	↑
	von 0.5 bis auf 0.99	k. A.	↓
fERO (Minimum bei 0.347!)	von 1.0 bis auf 0.347	k. A.	↓
	von 0.347 bis auf 0.25	k. A.	↑
akla20	von 5*24 bis auf 10*24	k. A.	↑
	von 5*24 bis auf 1*24	↑	↓
DiffSNH	von 1.8e-4 auf 0.5e-5 (beide)	↑	↑
	von 1.8e-4 auf 0.5e-5 („from biofilm to bulk“)	↑	↑
	von 1.8e-4 auf 0.5e-5 („within biofilm“)	↑	↑
	von 1.8e-4 bis auf 1.8e-2 („from biofilm to bulk“)	fast keine Änderung	
	von 1.8e-4 auf 1.8e-3 („within biofilm“)	fast keine Änderung	
eps_I  (Minimum bei 0.94!)	von 0.8 auf 0.6	k. A.	↑
	von 0.8 bis auf 0.94	k. A.	↓
	von 0.94 bis auf 0.95	k. A.	↑
Porenvolumen (Reaktorschicht)	von 0.008*1e6* <b>0.82</b> *ones(2,1)/2 auf 0.008*1e6* <b>0.10</b> *ones(2,1)/2	↑	↓
	von 0.008*1e6* <b>0.82</b> *ones(2,1)/2 auf 0.008*1e6* <b>0.90</b> *ones(2,1)/2	k. A.	↑
Rfactor	von 0.01 auf 0.001	k. A.	↑
	von 0.01 auf 0.1	↑	↓

↑ Geringe Zunahme

↑ Signifikante Zunahme

↑ Starke Zunahme

↓ Geringe Abnahme

↓ Signifikante Abnahme

↓ Starke Abnahme

Hinsichtlich der Temperaturabhängigkeit zeigte sich zunächst eine Abweichung zwischen den im Experiment und in der Simulation erhaltenen Ablaufwerten für Ammonium und Nitrat: Im Experiment ergab sich für Ammonium eine kontinuierliche Abnahme der Endkonzentration mit zunehmender Temperatur (siehe *Abbildung 17a*).

Für Nitrat zeigte sich tendenziell eine Zunahme der Endkonzentration mit zunehmender Temperatur (d. h. die oberste Kurve ist die für T = 35 °C und die unterste Kurve die für T = 5 °C; siehe *Abbildung 17b*). Im dazwischen liegenden Temperaturbereich ist die Reihenfolge oft nicht konsistent und ein strenger Zusammenhang nicht erkennbar.

Diese Reihenfolge entsprach zunächst nicht den Ergebnissen der Simulation. Die Ursache liegt vermutlich ebenfalls in der bereits im Absatz „Belebungsverfahren“ erläuterten Tatsache, dass die bisher verwendeten mathematischen Ausdrücke für die Abbildung der Temperaturabhängigkeit der biologischen Prozesse im Bereich höherer Temperaturen (T > 20 °C) ungeeignet sind. Versuche mit Temperaturtermen, die den zu erwartenden Verlauf besser abbilden, ergaben Simulationsergebnisse, die dem experimentellen Befund entsprachen.

In Zusammenarbeit mit dem ifak (Dr. J. Alex) wurde ein neuer Korrekturterm für die Beschreibung der Temperaturabhängigkeit der Wachstumsrate der heterotrophen Biomasse ( $\mu_H$ ) formuliert, der den zu erwartenden Verlauf nachbildet. Die Funktionsgleichung lautet:

$$\mu_H = 3.0 \cdot \exp(-0.07 \cdot (20 - T)) \cdot (T^2 \cdot n / (T \cdot n + T^2 \cdot n)) \cdot (1 - (\arctan(0.7 \cdot (T - 40)) + \pi/2) / 3.0);$$

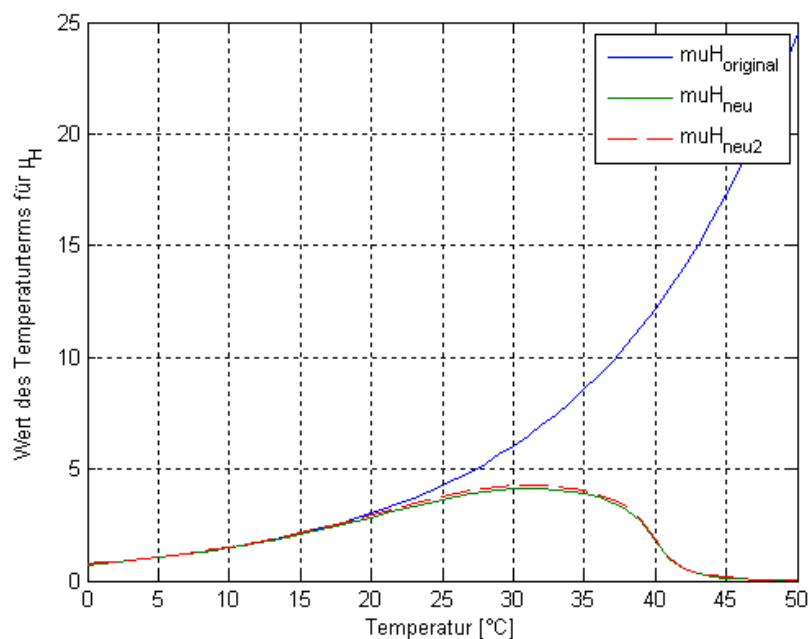
bzw. allgemein:

$$\mu_H = 3.0 \cdot \exp(-0.07 \cdot (20 - T)) \cdot (T^2 \cdot n / (T \cdot n + T^2 \cdot n)) \cdot (1 - (\arctan(X \cdot (T - 40)) + \pi/2) / Y);$$

In der Funktion für den Temperaturterm kann über die beiden Parameter **X** und **Y** das Aussehen/die Form des abfallenden, rechten Astes des Funktionsverlaufes beeinflusst werden (Steigung und Erreichen der Nulllinie). Durch eine Änderung der Temperatur von 20 °C auf 19.5 °C

$$\mu_H = 3.0 \cdot \exp(-0.07 \cdot (19.5 - T)) \cdot (T^2 \cdot n / (T \cdot n + T^2 \cdot n)) \cdot (1 - (\arctan(0.7 \cdot (T - 40)) + \pi/2) / 3.0);$$

folgt der Verlauf der Funktion dem Originalterm im Bereich von T < 20 °C noch weitgehender (siehe *Abbildung 18*).



*Abbildung 18: Vergleich des Originalterms (ASM 1) für die Beschreibung der Temperaturabhängigkeit (Wachstum heterotropher Biomasse) mit den neu formulierten Korrekturtermen.*



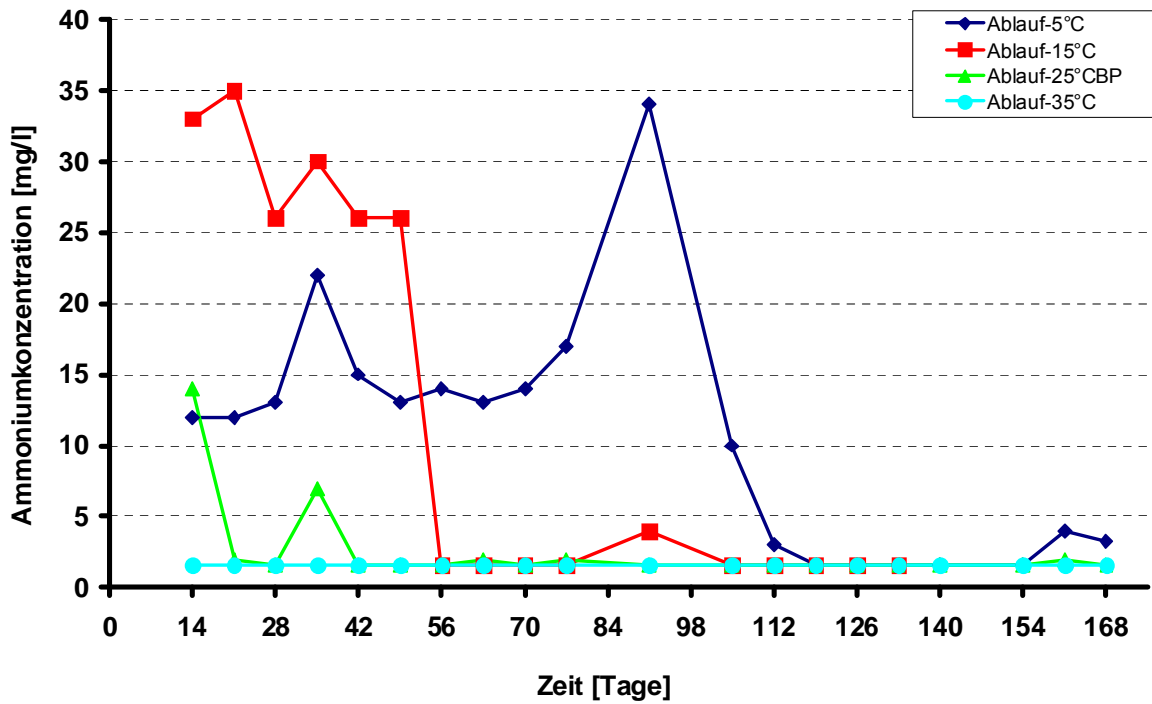


Abbildung 17a: Experimentell ermittelte Ammoniumablaufwerte bei verschiedenen Temperaturen (Versuchskläranlage „Getauchtes Festbett“ der Universität Halle-Wittenberg; G. Chapanova, Versuch 1).

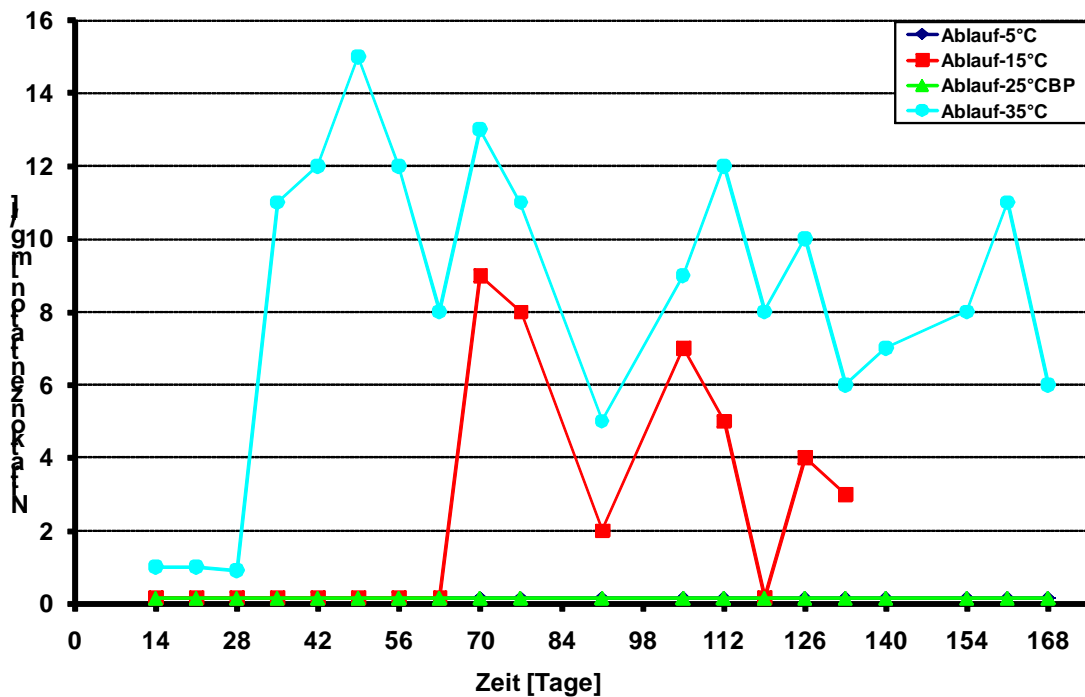
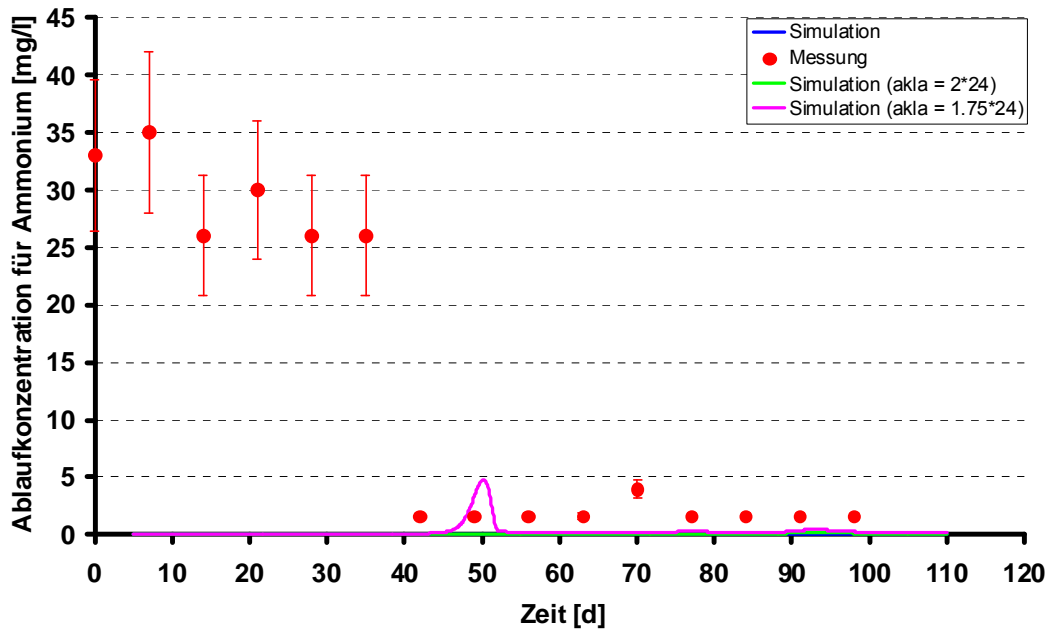
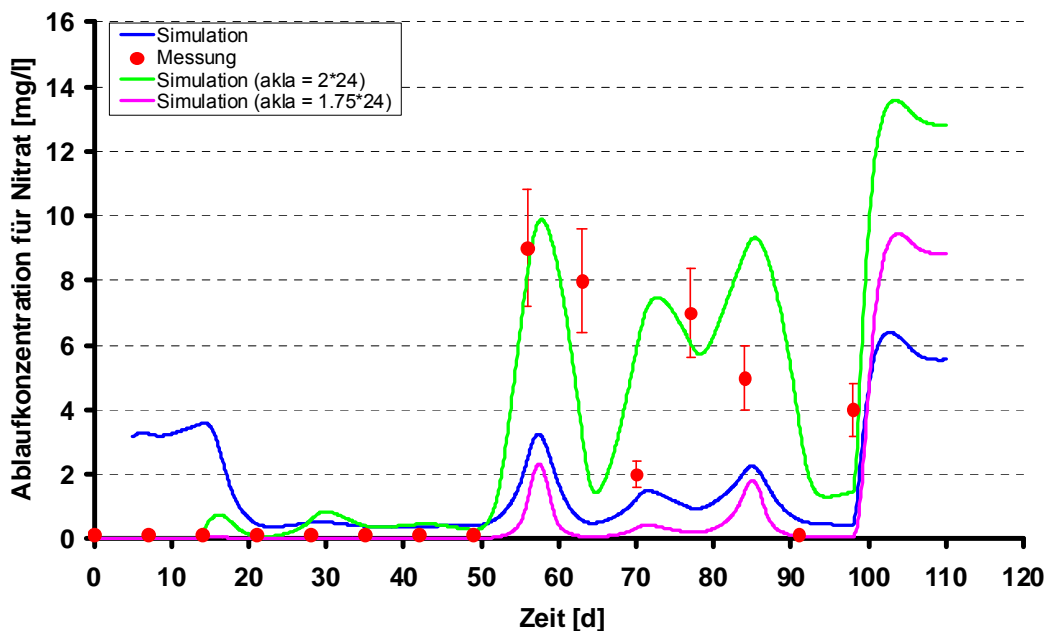


Abbildung 17b: Experimentell ermittelte Nitratablaufwerte bei verschiedenen Temperaturen (Versuchskläranlage „Getauchtes Festbett“ der Universität Halle-Wittenberg; G. Chapanova, Versuch 1).

Zudem wurden die experimentell ermittelten Wochenganglinien (ca. 1 Messwert pro Woche) mit gewissen Schwankungen der beiden Parameter DOC und SNH für einen Vergleich der Ablaufwerte Simulation/Messung über einen längeren Zeitraum verwendet. Dabei wurden die in *Abbildung 19a*, *Abbildung 19b* und *Abbildung 19c* gezeigten Ergebnisse erhalten.



*Abbildung 19a: Vergleich der experimentell ermittelten Ablaufwerte für Ammonium mit der simulierten Ganglinie (Versuchskläranlage „Getauchtes Festbett“ der Universität Halle-Wittenberg; G. Chapanova).*



*Abbildung 19b: Vergleich der experimentell ermittelten Ablaufwerte für Nitrat mit der simulierten Ganglinie (Versuchskläranlage „Getauchtes Festbett“ der Universität Halle-Wittenberg; G. Chapanova).*

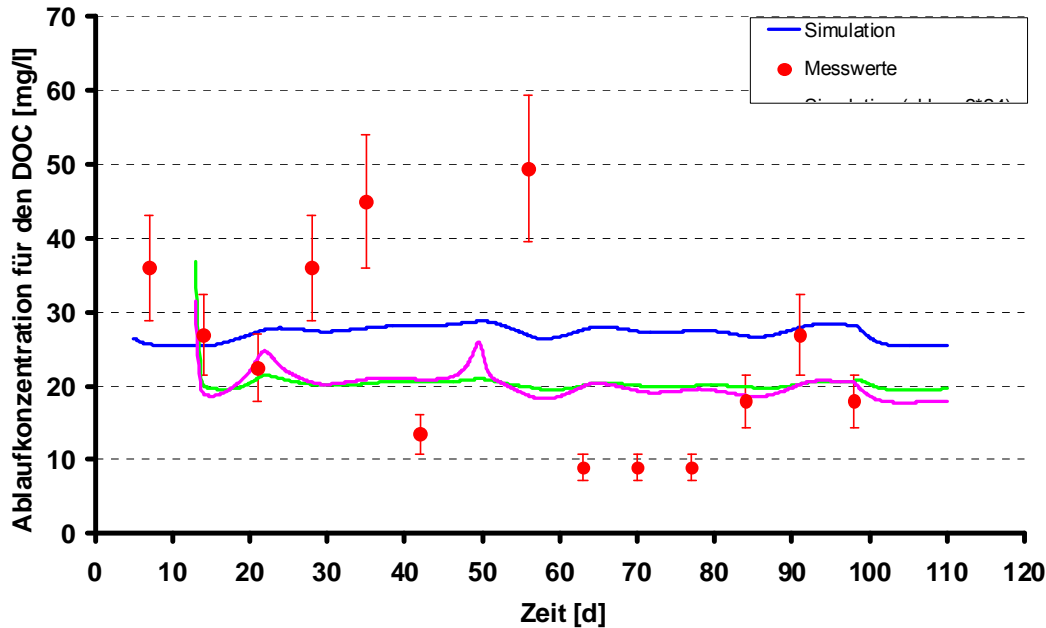


Abbildung 19c: Vergleich der experimentell ermittelten Ablaufwerte für den Parameter DOC mit der simulierten Ganglinie (Versuchskläranlage „Getauchtes Festbett“ der Universität Halle-Wittenberg; G. Chapanova).

Die Abweichungen in der Nachbildung (insb. der N-Parameter) des getauchten Festbettes lassen sich wahrscheinlich darauf zurückführen, dass bei der Modellanpassung (Kalibrierung) nur die biofilmspezifischen Parameter variiert wurden, während der eigentliche Modellansatz (modifiziertes ASM1 und dessen biologische Parameter) aus Zeitgründen nicht verändert wurde. Bei der Ganglinie des Ammoniums zeigt sich im ersten Teil eine sehr deutliche Abweichung, während im weiteren Verlauf eine bessere Übereinstimmung besteht. Dies liegt vermutlich daran, dass in der Simulation die Konzentration an autotropher Biomasse zu schnell ansteigt bzw. am Beginn zu hoch angesetzt ist (Defaultwert). Dadurch kann in diesem Fall die „Einlaufphase“ der Versuchsanlage vom Modell nicht korrekt nachgebildet werden. Die Entwicklung des Biofilms bis zum Erreichen eines Gleichgewichtszustandes benötigt einen gewissen Zeitraum (Ausbildung der anlagen-/abwasser-spezifischen Biozönose). Dagegen erfolgt im Modell eine sofortige Umsetzung des Ammoniums zu Nitrat (im Experiment findet zunächst nur sehr wenig Nitrifikation statt, weil sich die autotrophe Biomasse zunächst bilden/ansiedeln muss). Diese Diskrepanz könnte eventuell durch eine Anpassung der entsprechenden Parameter des Modellansatzes ( $\mu_A$ ,  $b_A$ , Anfangskonzentration  $X_A$ ) beseitigt werden. Einen wichtigen Einfluss hat auch in diesem Fall die Nachbildung der Temperaturabhängigkeit im Modellansatz. Da auf eine Sensitivitätsanalyse der (biologischen) Parameter des Modellansatzes im Bereich der Biofilmanlagen aus Zeitgründen verzichtet wurde, wurde stattdessen -wegen der hohen Relevanz für alle Anlagentechnologien und Modellansätze- an diesem Beispiel der Einfluss der im Modell verwendeten Temperaturterme systematisch unter Verwendung des Biofilmmonitors in SIMBA untersucht. Dabei kamen verschiedene Ansätze für die Beschreibung der Temperaturabhängigkeit zum Einsatz, wobei der neu formulierte Korrekturterm (siehe S. 55) zunächst für alle relevanten Prozesse eingesetzt wurde. (Hinweis: Die Formulierung eines separaten Korrekturterms für die autotrophe Biomasse und dessen Anpassung an den bisher verwendeten Originalterm des ASM 1 war im Rahmen dieses Projektes aus Zeitgründen nicht mehr möglich. Dies sollte aber in weiterführenden Forschungsarbeiten im Hinblick auf die hohe Relevanz dieser Einflussgröße erfolgen). Die dabei erhaltenen Ergebnisse sind in *Anhang 6* zusammengestellt.

### **4.2.3 Simulation des Scheibentauchkörpers**

#### **4.2.3.1 Beschreibung/Konfiguration der Versuchsanlage**

Die in *Abbildung 20a* gezeigten Fotos veranschaulichen den Aufbau der von der Universität Karlsruhe betriebenen beiden Versuchsanlagen zum Scheibentauchkörperverfahren (Abmessungen siehe *Tabelle 16a* und *Tabelle 16b*) und geben einen Eindruck des entstandenen Biofilms.

Allgemeine Angaben zu den beiden Versuchsanlagen:

- Jeweils 3-kaskadig konstruiert
- Scheibendurchmesser 25 cm und 48,5 cm
- In einer Klimakammer aufgebaut (15 °C – 35 °C)
- Beschickung mit synthetischem und realem Abwasser



*Abbildung 20a: Oben: Gesamtansicht der beiden Versuchskläranlagen (Scheibentauchkörper) der Universität Karlsruhe.  
Unten: Detailansicht des Biofilms auf den Scheiben der „großen“ Versuchsanlage.*





Sctrl

### Versuchsanlage der Universität Karlsruhe (Scheibentauchkörper, kleine Laboranlage) Abbildung durch 3 Becken (3-stufige Kaskade) und Belüftung mit konstantem Mittelwert

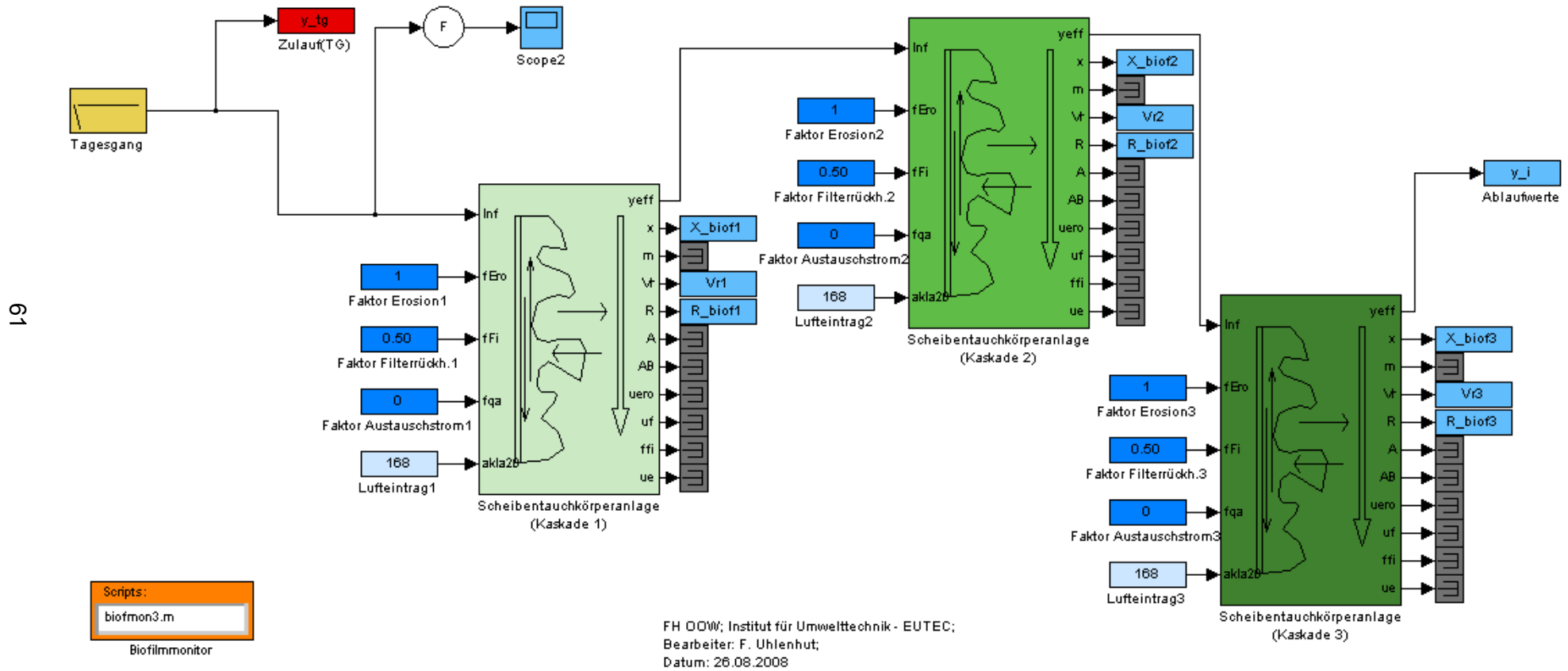


Abbildung 20b: Verfahrensschema der Versuchskläranlage (Scheibentauchkörper) der Universität Karlsruhe im Simulationsprogramm SIMBA®.

Tabelle 16a: Dimensionierungen der kleinen Laboranlage der Universität Karlsruhe zum Scheibentauchkörperverfahren.

		Scheibendurchmesser 25 cm	
$V_{ges}$	0,0151 m <sup>3</sup>	15,13 l	
$V_{kas1}$	0,0061 m <sup>3</sup>	6,11 l	
$V_{kas2}$	0,0046 m <sup>3</sup>	4,58 l	
$V_{kas3}$	0,0044 m <sup>3</sup>	4,44 l	
$V_{Scheibe,kas1}$	0,000389 m <sup>3</sup>	0,389 l	Durch Scheiben ausgefülltes Volumen*
$V_{Scheibe,kas2}$	0,000324 m <sup>3</sup>	0,324 l	
$V_{Scheibe,kas3}$	0,000324 m <sup>3</sup>	0,324 l	
$V_{Scheibe,kas1}/V_{kas1}$	0,0638	6,38 %	Anteil des Scheibenvolumens am Volumen (ges.)
$V_{Scheibe,kas2}/V_{kas2}$	0,0704	7,04 %	
$V_{Scheibe,kas3}/V_{kas3}$	0,0736	7,36 %	
$l_{ges}$	0,664 m	66,40 cm	
$l_{kas1}$	0,268 m	26,80 cm	
$l_{kas2}$	0,201 m	20,10 cm	
$l_{kas3}$	0,195 m	19,50 cm	
Scheiben <sub>ges</sub>	32		
Scheiben <sub>kaskade1</sub>	12		
Scheiben <sub>kaskade2</sub>	10		
Scheiben <sub>kaskade3</sub>	10		
$d_{Tank}$	0,3 m	30,00 cm	
$d_{Scheibe}$	0,25 m	25,00 cm	
$d_{ZWkas1}$	18 mm		
$d_{ZWkas2}$	15 mm		
$d_{ZWkas3}$	15 mm		
$F_{Scheibeges}$	3,142 m <sup>2</sup>	2,820 m <sup>2</sup>	effektive Scheibenfläche (abzüglich Abstandhalter etc.)
$F_{Scheibekas1}$	1,178 m <sup>2</sup>	1,057 m <sup>2</sup>	
$F_{Scheibekas2}$	0,982 m <sup>2</sup>	0,881 m <sup>2</sup>	
$F_{Scheibekas3}$	0,982 m <sup>2</sup>	0,881 m <sup>2</sup>	
$V_{Tank}/F_{Scheibe}$	4,82 l/m <sup>2</sup>		
$WSP_{Tank}$	10,76 cm		
Eintauchtiefe	8,26 cm		
Eintauchtiefe	33,02 %		= Eintauchtiefe * 100 / $d_{Scheibe}$
HRT	5 h		
$Q_{zu}$	0,0032 m <sup>3</sup> /h	3,15 l/h	
$Q_{zu}$	0,076 m <sup>3</sup> /d	75,66 l/d	
Fracht <sub>BSB</sub> /m <sup>2</sup>	6,67 kg BSB/m <sup>2</sup> d		
Fracht <sub>TKN</sub> /m <sup>2</sup>	1,22 kg TKN/m <sup>2</sup> d		
EW	0,35		
$Q_{zu}$	0,2 m <sup>3</sup> /(EW*d)		
Fracht <sub>CSB</sub> /EW	60 g BSB/Ewd		
Fracht <sub>TKN</sub> /EW	11 g TKN/Ewd		

\*(Berechnung siehe Anhang 1)

Berechnung des „freien Reaktorvolumens“ für den Block „Reakt\_oh“ (Abbildung des unbelüfteten Zustands):

$V_{ges}$	15,13 l	Anteil an $V_{ges}$	$V_{Scheibe,kas}/V_{kas}$	* Anteil
$V_{kas1}$	6,11 l	40,38 %	0,0638	0,02576
$V_{kas2}$	4,58 l	30,27 %	0,0704	0,02131
$V_{kas3}$	4,44 l	29,35 %	0,0736	0,02160
			$\Sigma$	0,06867

Tabelle 16b: Dimensionierungen der großen Laboranlage der Universität Karlsruhe zum Scheibentauchkörperverfahren.

		Scheibendurchmesser 48,5 cm	
$V_{ges}$	0,0547 m <sup>3</sup>	54,74 l	
$V_{kas1}$	0,0221 m <sup>3</sup>	22,10 l	
$V_{kas2}$	0,0166 m <sup>3</sup>	16,57 l	
$V_{kas3}$	0,0161 m <sup>3</sup>	16,08 l	
$V_{Scheibe,kas1}$	0,001467 m <sup>3</sup>	1,467 l	Durch Scheiben ausgefülltes Volumen*
$V_{Scheibe,kas2}$	0,001222 m <sup>3</sup>	1,222 l	
$V_{Scheibe,kas3}$	0,001222 m <sup>3</sup>	1,222 l	
$V_{Scheibe,kas1}/V_{kas1}$	0,0664	6,64 %	Anteil des Scheibenvolumens am Volumen (ges.)
$V_{Scheibe,kas2}/V_{kas2}$	0,0738	7,38 %	
$V_{Scheibe,kas3}/V_{kas3}$	0,0760	7,60 %	
$l_{ges}$	0,664 m	66,40 cm	
$l_{kas1}$	0,268 m	26,80 cm	
$l_{kas2}$	0,201 m	20,10 cm	
$l_{kas3}$	0,195 m	19,50 cm	
Scheiben <sub>ges</sub>	32		
Scheiben <sub>kaskade1</sub>	12		
Scheiben <sub>kaskade2</sub>	10		
Scheiben <sub>kaskade3</sub>	10		
$d_{Tank}$	0,58 m	58,00 cm	
$d_{Scheibe}$	0,485 m	48,50 cm	
$d_{ZWkas1}$	18 mm		
$d_{ZWkas2}$	15 mm		
$d_{ZWkas3}$	15 mm		
$F_{Scheibeges}$	11,824 m <sup>2</sup>	11,100 m <sup>2</sup>	effektive Scheibenfläche (abzüglich Abstandhalter etc.)
$F_{Scheibekas1}$	4,434 m <sup>2</sup>	4,162 m <sup>2</sup>	
$F_{Scheibekas2}$	3,695 m <sup>2</sup>	3,469 m <sup>2</sup>	
$F_{Scheibekas3}$	3,695 m <sup>2</sup>	3,469 m <sup>2</sup>	
$V_{Tank}/F_{Scheibe}$	4,63 l/m <sup>2</sup>		
WSP <sub>Tank</sub>	20,79 cm		
Eintauchtiefe	16,04 cm		
Eintauchtiefe	33,08 %	= Eintauchtiefe * 100 / $d_{Scheibe}$	
HRT	5 h		
$Q_{zu}$	0,0114 m <sup>3</sup> /h	11,40 l/h	
$Q_{zu}$	0,274 m <sup>3</sup> /d	273,72 l/d	
Fracht <sub>BSB</sub> /m <sup>2</sup>	6,67 kgBSB/m <sup>2</sup> d		
Fracht <sub>TKN</sub> /m <sup>2</sup>	1,22 kgTKN/m <sup>2</sup> d		
EW	1,31		
$Q_{zu}$	0,2 m <sup>3</sup> /(EW*d)		
Fracht <sub>CSB</sub> /EW	60 g BSB/Ewd		
Fracht <sub>TKN</sub> /EW	11 g TKN/Ewd		

\*(Berechnung siehe Anhang 1)

#### 4.2.3.2 Ergebnisse der Simulationsrechnungen

Das Verfahrensschema im Simulationsprogramm SIMBA® der von der Universität Karlsruhe betriebenen Versuchsanlage zum Scheibentauchkörperverfahren ist in *Abbildung 20b* dargestellt. Für die Vorgabe der Zulaufkonzentrationen wird ein „Tagesgang“-Block verwendet, über den das in *Anhang 7* beschriebene m-file „tgan\_biofm.m“ aufgerufen wird. Darin sind als Eingangswerte die Analysendaten (A. Blank, EXCEL-Datei „kleine Laboranlage\_Sim.xls“; 25 °C, 200 mg/l; Mittelwerte aus 36 Einzelmessungen über einen



Zeitraum von 105 Tagen) für die Parameter BSB<sub>5</sub>, Gesamtstickstoff nach Kjeldahl (TKN), Ammonium (S<sub>NH</sub>), Nitrat (S<sub>NO</sub>) und Zulaufvolumenstrom (Q<sub>zu</sub>) enthalten (jeweils 24 identische Stundenwerte für einen Tag) und werden in die Modellfraktionen des modifizierten ASM 1 umgerechnet.

Um eine realistische Nachbildung des zyklischen Milieuwechsels (Wechsel von belüfteter/unbelüfteter Phase durch Rotation der Scheiben) in der Simulation sicherzustellen, erfolgte zunächst eine systematische Betrachtung der Schaltimpulse (Zeitintervalle) im Funktionsblock „Pulse Generator“:

Die in *Abbildung 21* dargestellte Auftragung der während eines Simulationslaufes durch die Verwendung der Funktionsblöcke „outfile (text)“ in txt-Dateien gespeicherten Werte zeigt, dass die Schaltimpulse für alle 3 Kaskaden identisch sind.

Durch Aufsummieren der Intervallzeiten für jeden Impuls (jeweils Bereich mit dem Wert „0“ bzw. „360“) ergibt sich eine Impulsbreite von 0,000347 Tage (= 0,5 Minuten = 30 Sekunden).

Vorgaben im Block „Pulse Generator“:

Amplitude: 15*24	(= 360; Weitergabewert für Puls)
Periode: 1/(24*60)	(= 0,000694444 = 1 Minute)
Pulse Width (% of Periode): 50	(= 0,000347 = 0,5 Minuten = 30 Sekunden)

Realisierung der Vorgabe 5 U/min:

Pulse Width (% of Periode): 20	(= 0,0001389 = 0,2 Minuten = 12 Sekunden)
--------------------------------	---

Damit ergeben sich Impulsbreiten:

Für 360	0,000139 (= 0,2 Minuten = 12 Sekunden)
Für 0	0,000556 (Faktor 4!)

Änderung der Einstellung „1/(24\*60)“ auf „1/(24\*60\*4)“.

Damit ergeben sich Impulsbreiten:

Für 360	0,0000347 (= 3 Sekunden)
Für 0	0,000139 (= 0,2 Minuten = 12 Sekunden)

Änderung der Einstellung „1/(24\*60)“ auf „1/(24\*60\*2,5)“ und der Einstellung „Pulse Width (% of Periode): 20“ auf „Pulse Width (% of Periode): 50“.

Damit ergeben sich Impulsbreiten:

Für 360	0,000139 (= 0,2 Minuten = 12 Sekunden)
Für 0	0,000139 (= 0,2 Minuten = 12 Sekunden)

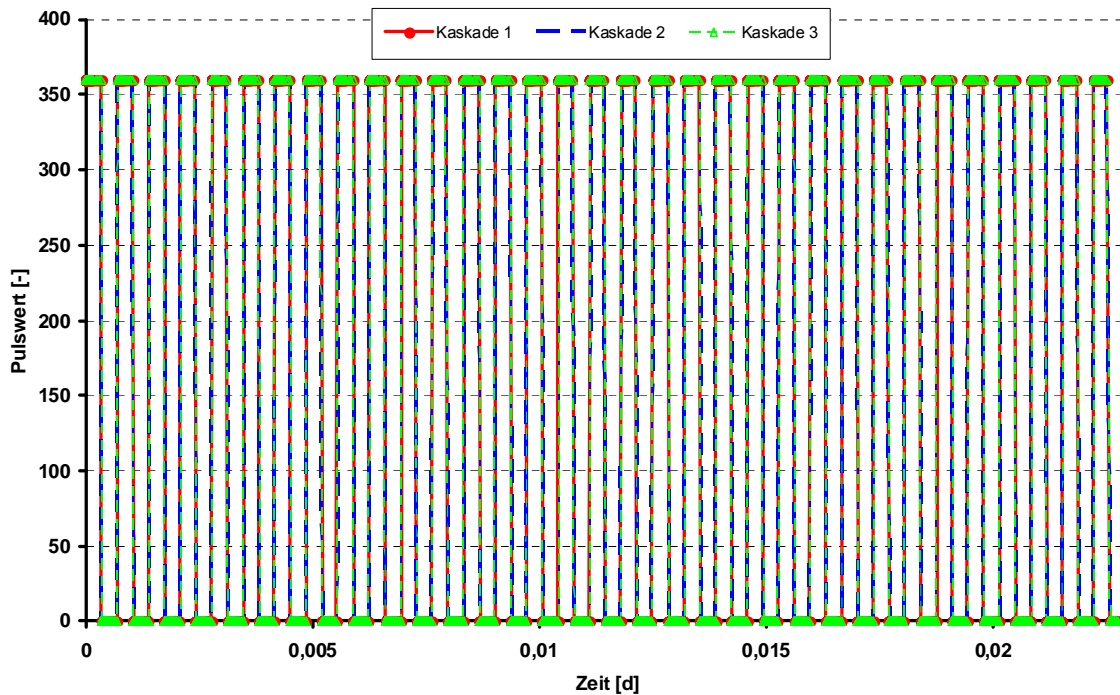


Abbildung 21: Auftragung der Schaltimpulse für alle 3 Kaskaden (Impulsbreite von 0,000347 Tage = 0,5 Minuten = 30 Sekunden).

Die Daten zur Zusammensetzung des Zulaufes (mit den zugehörigen im Experiment gemessenen Ablaufkonzentrationen) sind in *Tabelle 17* zusammengefasst.

*Tabelle 17:* Aufbau der Zulaufdatei (Beispiel 1: 25 °C; 200 mg/l).

Parameter	Zulauf	Ablauf
Volumenstrom	67,9 [l/d] = 0,0679 [m <sup>3</sup> /d]	63,8 [l/d] = 0,0638 [m <sup>3</sup> /d]
BSB [mg/l]	211,8	8,2
TNb [mg/l]	54,7	38,9
NH <sub>4</sub> -N [mg/l]	41,2	4,8
NO <sub>3</sub> -N [mg/l]	1,0	28,9
NO <sub>2</sub> -N [mg/l]		4,8
Σ NO <sub>3</sub> -N + NO <sub>2</sub> -N [mg/l]		33,7
TNb - { NH <sub>4</sub> -N + NO <sub>3</sub> -N + NO <sub>2</sub> -N }	12,5	0,4
O <sub>2</sub> [mg/l]	0,6 Kaskade 1: 2,1 Kaskade 2: 3,2 Kaskade 3: 5,4	3,9

Folgende Anlagenmodelle wurden im Simulationsprogramm SIMBA<sup>®</sup> erstellt und untersucht:  
 STK\_test.mdl: Test für „Zulaufverteilung“ (Abbildung mit 2 Biofilmblocken, wobei ein Reaktor belüftet und der andere unbelüftet ist. Nachbildung der Intervalle durch insgesamt 3 „switch“-Blöcke und einen Block „Zeitschaltuhr“. Dadurch ergeben sich 2 unterschiedliche Abläufe; die Bildung eines „mittleren“ Ablaufwertes für die einzelnen Stoffgruppen wird beispielhaft mit Hilfe von „Script“-Blöcken realisiert).

STK\_test2.mdl: Test für Belüftung mit „Zeitschaltuhr“ („switch“-Block mit Vorgabe eines Festwertes über „q2kla“-Block). In der belüfteten Phase: Vorgabe des Wertes für akla20

= 1,44 über einen Block „Constant“. In der unbelüfteten Phase: Vorgabe des Wertes für  $ak_{la20} = 0$  über einen Block „Constant“.

Konstanter Tagesgang („*tgang\_biofm(0,00312)*“) → Messwerte waren zu diesem Zeitpunkt noch nicht verfügbar!

STK\_test2\_.mdl: Test für Belüftung mit „Pulsgenerator“ (Amplitude:  $15 \cdot 24$ ; Period (secs):  $1/(24 \cdot 60)$ ; Pulse Width (% of Period): 50).

Konstanter Tagesgang („*tgang\_biofm(0,00312 \cdot 1e6)*“) → Messwerte waren zu diesem Zeitpunkt noch nicht verfügbar!

STK\_test3.mdl: Abbildung durch 2 Becken (1 Block „Reakt\_oh“ und 1 Biofilmblock) und wahlweiser (Block „Manual Switch“) Belüftung mit Pulsgenerator (Parametrierung analog *STK\_test2\_.mdl*) oder konstantem Wert.

Konstanter Tagesgang („*tgang\_biofm(0,00312)*“) → Messwerte waren zu diesem Zeitpunkt noch nicht verfügbar!

STK\_test4.mdl: Abbildung durch 2 Becken (1 Block „Reakt\_oh“ und 1 Biofilmblock) und Belüftung mit Pulsgenerator (Parametrierung analog *STK\_test2\_.mdl*).

Konstanter Tagesgang („*tgang\_biofm(0,00312)*“) → Messwerte waren zu diesem Zeitpunkt noch nicht verfügbar!

STK\_test4b.mdl: Abbildung durch 2 Becken (1 Block „Reakt\_oh“ und 1 Biofilmblock) und Belüftung mit Pulsgenerator (Parametrierung analog *STK\_test2\_.mdl*). Der Unterschied im Vergleich zur Anlage *STK\_test4.mdl* besteht darin, dass einige „Scope-“ und „outfile (text)“-Blöcke eingefügt wurden, um ausgewählte Simulationsergebnisse betrachten zu können.

Konstanter Tagesgang („*tgang\_biofm(0,00312)*“) → Messwerte waren zu diesem Zeitpunkt noch nicht verfügbar!

STK\_gross.mdl: Grosse Laboranlage, Abbildung durch 2 Becken (1 Block „Reakt\_oh“ und 1 Biofilmblock) und Belüftung mit Pulsgenerator (Parametrierung analog *STK\_test2\_.mdl*).

Konstanter Tagesgang („*tgang\_biofm(0,00312 \cdot 1e6)*“).

STK\_klein.mdl: Kleine Laboranlage, Abbildung durch 4 Becken (unbelüfteter Reaktor + 3-stufige Kaskade) und Belüftung mit Pulsgenerator (Amplitude:  $15 \cdot 24$ ; Period (secs):  $1/(24 \cdot 60 \cdot 2,5)$ ; Pulse Width (% of Period): 50).

Biofilmblock Nr. 1: Porenvolumen =  $0,0061 \cdot 0,9362 \cdot 1e6 \cdot 0,4$

Biofilmblock Nr. 2: Porenvolumen =  $0,0046 \cdot 0,9296 \cdot 1e6 \cdot 0,4$

Biofilmblock Nr. 3: Porenvolumen =  $0,0044 \cdot 0,9264 \cdot 1e6 \cdot 0,4$

Konstanter Tagesgang („*tgang\_biofm(0,076 \cdot 1e6)*“).

STK\_klein2.mdl: kleine Laboranlage, Abbildung durch 4 Becken (unbelüfteter Reaktor + 3-stufige Kaskade) und Belüftung mit Pulsgenerator (Parametrierung analog *STK\_klein.mdl*).

Biofilmblock Nr. 1: Porenvolumen =  $0,0061 \cdot 0,9362 \cdot 1e6 \cdot 0,6$

Biofilmblock Nr. 2: Porenvolumen =  $0,0046 \cdot 0,9296 \cdot 1e6 \cdot 0,6$

Biofilmblock Nr. 3: Porenvolumen =  $0,0044 \cdot 0,9264 \cdot 1e6 \cdot 0,6$

Konstanter Tagesgang („*tgang\_biofm(0,076 \cdot 1e6)*“).

1) Aufteilung des gesamten Reaktorvolumens auf einen Block „Reakt\_oh“ und drei Biofilmblocke:

Bei dieser Anlagenkonfiguration waren die simulierten Ablaufwerte der Stofffraktion  $S_S$  (entsprechen in etwa dem  $BSB_S$ ) viel zu hoch. Daraufhin wurden unter der Fragestellung, ob dadurch eine Verbesserung der oben beschriebenen Problematik erreichbar ist, folgende Variationen getestet:

- Variation der Aufteilung des gesamten Reaktorvolumens auf den Block „Reakt\_oh“ und die drei Biofilmblocke
- Änderung der Fraktionierung im Zulauf (geringerer CSB-Anteil für die Fraktion  $S_S$ )

- Wert > 0 (z. B. 15) im Block „Reakt\_oh“ für den Sauerstoffeintrag (evtl. realistisch, da in der Versuchsanlage mit Sicherheit ein gewisser Eintrag über die Oberfläche erfolgt und zudem beim „Eintauchen“ der Scheiben Restsauerstoff im Biofilm verbleibt)
- Änderung der Vorgabe für den Sauerstoffeintrag in den Biofilmreaktoren
- Änderung der Vorgabe im Block „Gain“

2) Geänderte Anlagenkonfiguration (STK\_klein3): Der Block „Reaktor\_oh“ wurde aus dem Schema entfernt und der Scheibentauchkörper als Kaskade aus drei Biofilmblocken abgebildet (Einstellungen der drei Blöcke gegenüber 1) unverändert; lediglich der Faktor bei der Volumenangabe wurde entfernt, da die Kaskade das gesamte Reaktorvolumen ausfüllt).

Biofilmblock Nr. 1: Porenvolumen =  $0,0061 \cdot 0,9362 \cdot 1e6$

Biofilmblock Nr. 2: Porenvolumen =  $0,0046 \cdot 0,9296 \cdot 1e6$

Biofilmblock Nr. 3: Porenvolumen =  $0,0044 \cdot 0,9264 \cdot 1e6$

Konstanter Tagesgang („tgang\_biofm( $0,076 \cdot 1e6$ )“).

3) Verringerter Sauerstoffeintrag:

Amplitude =  $14 \cdot 24$  (im Block „Pulse Generator“)

4) Geänderte Anlagenkonfiguration (STK\_klein4): Der Block „Pulse Generator“ wurde aus dem Schema entfernt und stattdessen die drei Biofilmblocke jeweils mit einem Block „Constant“ für die Vorgabe des Wertes für akla20 versehen (mit akla20 = 168). Zusätzlich wurde ein Skript-Block mit dem Biofilm-Monitor („biofmon3.m“) eingefügt, um die Konzentrationsprofile im Biofilm betrachten zu können.

Biofilmblock Nr. 1: Porenvolumen =  $0,0061 \cdot 0,9362 \cdot 1e6$

Biofilmblock Nr. 2: Porenvolumen =  $0,0046 \cdot 0,9296 \cdot 1e6$

Biofilmblock Nr. 3: Porenvolumen =  $0,0044 \cdot 0,9264 \cdot 1e6$

Konstanter Tagesgang („tgang\_biofm( $0,076 \cdot 1e6$ )“).

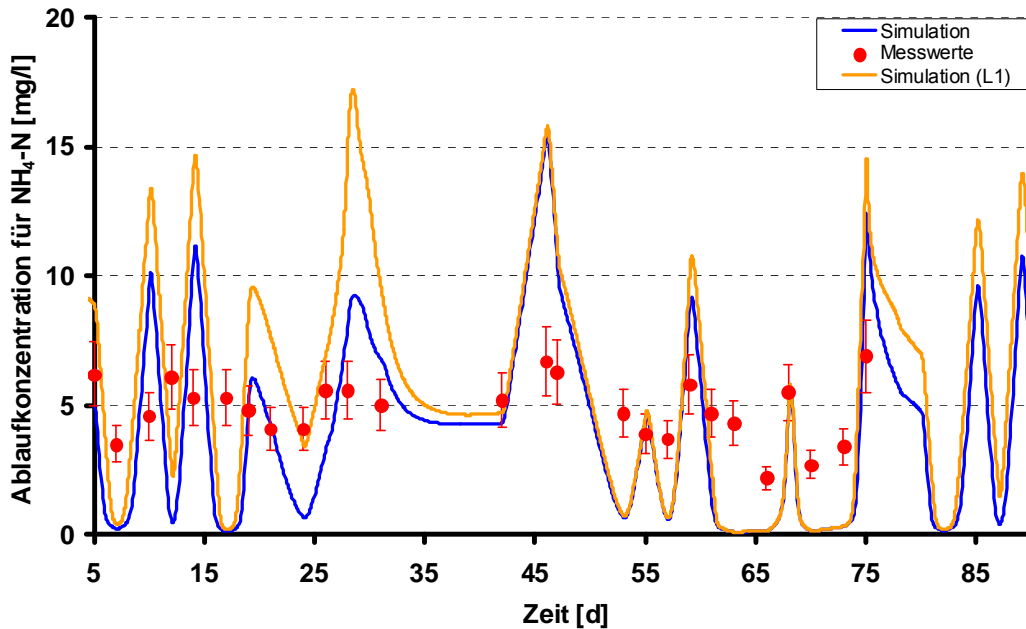
Die Auswirkungen dieser Änderung auf die Dauer der Simulationsrechnung wurden systematisch untersucht und die dabei erhaltenen Ergebnisse in *Tabelle 18* dargestellt.

*Tabelle 18: Vergleich - Simulationsdauer für Anlage mit/ohne Block „Pulse Generator“.*

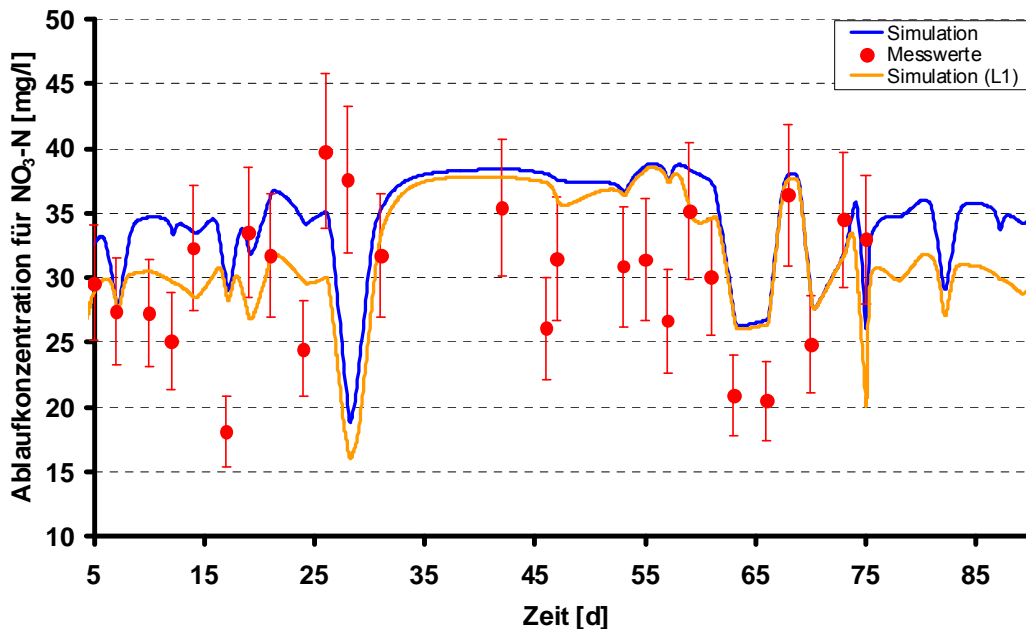
Simulierter Zeitraum [d]	Simulationszeit für Anlage mit „Pulse Generator“ [min]	Simulationszeit für Anlage ohne „Pulse Generator“ [min]	Faktor Simulationszeit mit/ohne [-]
0 d bis 15 d = 15 d	97 min	2,20 min	44,1
	72 min	2,16 min	32,7
	67 min	2,13 min	31,5
15 d bis 35 d = 20 d	92 min	1,90 min	48,4
	89 min	1,92 min	46,4
	88 min	1,90 min	46,3
35 d bis 50 d = 15 d	64 min	1,03 min	61,8
	64 min	1,04 min	61,5
	63 min	1,03 min	61,2
35 d bis 36 d = 1 d	4,2 min = 250,6 sec	3,88 sec	64,6
	4,3 min = 257,4 sec	3,91 sec	65,8
	4,3 min = 257,2 sec	3,91 sec	65,8

Der Vergleich der beiden Anlagenvarianten in *Tabelle 18* zeigt sehr deutlich, dass durch die Verwendung des Funktionsblockes „Pulse Generator“ die Rechenzeit in hohem Maße verlängert wird (um etwa das 32fache bis 66fache!). Da die Simulationsergebnisse mit der Anlagenvariante ohne diesen Funktionsblock und stattdessen der Vorgabe eines „mittleren“ Wertes für den Eingang akla20 über einen Funktionsblock „Constant“ keine signifikanten Unterschiede aufzeigen, stellt sich die Frage, ob diese Vereinfachung zulässig und sinnvoll ist.

Zudem wurden die experimentell ermittelten Wochenganglinien (ca. 2 Messwerte pro Woche) mit signifikanten Schwankungen aller Parameter für einen Vergleich der Ablaufwerte Simulation/Messung über einen längeren Zeitraum verwendet. Dabei wurden die in *Abbildung 22a*, *Abbildung 22b* und *Abbildung 22c* gezeigten Ergebnisse erhalten.



*Abbildung 22a: Vergleich der experimentell ermittelten Ablaufwerte für Ammonium mit der simulierten Ganglinie (Versuchskläranlage „Scheibentauchkörperverfahren“ der Universität Karlsruhe; A. Blank).*



*Abbildung 22b: Vergleich der experimentell ermittelten Ablaufwerte für Nitrat mit der simulierten Ganglinie (Versuchskläranlage „Scheibentauchkörperverfahren“ der Universität Karlsruhe; A. Blank).*

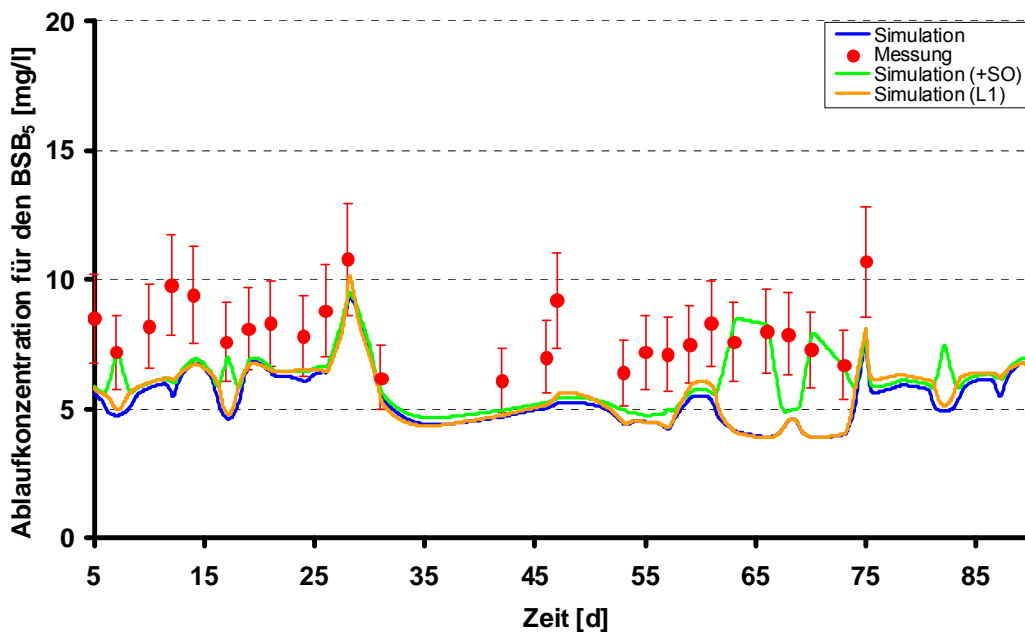


Abbildung 22c: Vergleich der experimentell ermittelten Ablaufwerte für den Parameter CSB mit der simulierten Ganglinie (Versuchskläranlage „Scheibentauchkörperverfahren“ der Universität Karlsruhe; A. Blank).

Weiterhin erfolgte mit der unter 4) beschriebenen Anlagenkonfiguration eine detaillierte Betrachtung der Konzentrationsprofile ausgewählter Parameter mit Hilfe des Biofilmmonitors für die drei Biofilmreaktor-Blöcke. Die Darstellung der Konzentrationsprofile in den verschiedenen Biofilmschichten erfolgte für die Fraktionen  $S_{NH}$ ,  $S_{NO}$  und  $S_O$  mit Hilfe des Biofilmmonitors. In diesem Fall wurde der Biofilm durch 3 Schichten abgebildet. Da die Option „mit Bulk“ eingestellt wurde, wird dieser als zusätzliche vierte Schicht in den Abbildungen angezeigt. Für die Simulation wurde das o. g. Anlagenmodell „STK\_klein4“ (ohne Block „Pulse Generator“) verwendet und die Vorgabe der Konstanten für  $akla_{20}$  (Luft eintrag) variiert (weitere Einstellungen:  $T = 25\text{ °C}$ , Initialisierung jeweils mit der Datei „35d\_w.mat“ und Simulationszeitraum von  $simba\_t = 35$  bis 50 d).

Die Ergebnisse dieser Untersuchung werden nachfolgend kurz zusammengefasst und diskutiert. Alle zugehörigen Konzentrationsprofile sind in *Anhang 8* zusammengestellt.

#### **Zusammenfassung für Luft eintrag mit $akla_{20} = 168$ :**

Die Sauerstoffkonzentrationen sind in allen 3 Reaktoren sehr gering ( $< 0.2$ ). Im Reaktor 1 findet nur eine sehr geringe Nitrifikation statt. Daher ist an dieser Stelle kaum Nitrat vorhanden ( $< 0.02$ ). Im Wesentlichen erfolgt im Reaktor 1 der Kohlenstoffabbau (Elimination von ca. 90 %). In Reaktor 2 wird noch ein geringer C-Anteil abgebaut, während in Reaktor 3 kein signifikanter C-Abbau mehr zu beobachten ist. In Reaktor 2 und insbesondere in Reaktor 3 findet die Nitrifikation statt und dem entsprechend nimmt die Ammoniumkonzentration deutlich ab, während die Nitratkonzentration deutlich ansteigt (dabei wird in Reaktor 3 geringfügig mehr Ammonium zu Nitrat umgewandelt als in Reaktor 2).

#### **Zusammenfassung für Luft eintrag mit $akla_{20} = 194$ :**

Die Sauerstoffkonzentration liegt im Reaktor 1 bei ca. 0.4, im Reaktor 2 bei ca. 0.14 und im Reaktor 3 bei 0.77. Im Reaktor 1 findet nur eine sehr geringe Nitrifikation statt. Daher ist an dieser Stelle kaum Nitrat vorhanden ( $< 0.05$ ). Der Kohlenstoffabbau erfolgt fast vollständig im Reaktor 1 (Elimination von ca. 98 %). In Reaktor 2 wird noch ein sehr geringer C-Anteil abgebaut, während in Reaktor 3 kein signifikanter C-Abbau mehr zu beobachten ist. In Reaktor 2 und in Reaktor 3 findet die Nitrifikation statt und dem entsprechend nimmt die

Ammoniumkonzentration deutlich ab, während die Nitratkonzentration deutlich ansteigt (dabei wird in Reaktor 2 signifikant mehr Ammonium zu Nitrat umgewandelt als in Reaktor 3).

**Zusammenfassung für Lufteintrag mit  $akla_{20} = 250$ :**

Die Sauerstoffkonzentration liegt im Reaktor 1 bei ca. 1.8, im Reaktor 2 bei ca. 0.17 und im Reaktor 3 bei 3.9. Im Reaktor 1 findet nur eine geringe Nitrifikation statt. Daher ist an dieser Stelle nur sehr wenig Nitrat vorhanden ( $< 0.3$ ). Der Kohlenstoffabbau erfolgt fast vollständig im Reaktor 1 (Elimination von ca. 99 %). In Reaktor 2 und Reaktor 3 findet kein signifikanter C-Abbau mehr statt. Insbesondere in Reaktor 2 und in Reaktor 3 findet die Nitrifikation statt und dem entsprechend nimmt die Ammoniumkonzentration deutlich ab, während die Nitratkonzentration deutlich ansteigt (dabei wird in Reaktor 2 erheblich mehr Ammonium zu Nitrat umgewandelt als in Reaktor 3).

## 5 Veröffentlichungen und Vorträge

Innerhalb des Berichtszeitraumes wurden folgende Ergebnisse publiziert und Vorträge getätigt, die mit dem Inhalt des Projektes in Zusammenhang stehen:

- Vortrag „Teilprojekt C 1.2: Simulation von Belebungsanlagen mit dem kinetischen Ansatz FUKA sowie Simulation von Tropfkörper- und Tauchkörperanlagen“ auf dem Projekt-Workshop am 04./05. Mai 2006 an der TU Darmstadt.
- Präsentation des Projektes auf der Fachmesse *ACHEMA 2006* (15. bis 19. Mai in Frankfurt am Main).
- Vortrag „BMBF-Verbundprojekt Exportorientierte Abwasserforschung“ auf dem Forschungsforum „Simulation und Unternehmensplanspiele“ am 24. April 2007 am Studienort Wilhelmshaven der FH OOW.
- Vortrag „Simulation von Biofilmanlagen im Rahmen des BMBF-Verbundprojektes Exportorientierte Abwasserforschung“ auf dem 14. SIMBA-Anwendertreffen am 02./03. Mai 2007 in Halle/Saale.
- Vorstellung der Zwischenergebnisse auf dem Workshop am 24. September 2007 in Frankfurt am Main durch den Kernprojektkoordinator des Teilbereiches C Herrn Prof. Dr.-Ing. Dr. rer. pol. Karl-Ulrich Rudolph.
- Präsentation des Projektes auf der Fachmesse *BIOTECHNICA 2007* (09. bis 11. Oktober) in Hannover.
- Poster „Anpassung der Simulation von Belebungs- und Biofilmanlagen an andere Klimazonen“ auf der DECHEMA/DWA-Tagung „Industrietage Wassertechnik“ am 13./14. November 2007 in Frankfurt am Main.
- Vortrag „Modellierung von Belebungs- und Biofilmanlagen für andere Klimazonen“ auf der GVC/DECHEMA Vortrags- und Diskussionstagung „Modellierung: Von der Zelle zum Prozess“ am 29. April 2008 in Bremen.
- Vortrag „Simulation von Belebungsanlagen mit dem kinetischen Ansatz FUKA sowie Simulation von Tropfkörper- und Tauchkörperanlagen“ auf der Gutachtersitzung am 16. Oktober 2008 in Frankfurt am Main.

Veröffentlichungen in Vorbereitung:

- UHLENHUT, F.; SCHLAAK, M.; WICHERN, M.; KEHL, O.; LÜBKEN, M.; ALEX, J.; HORN, H.; GRUBE, S., ORTH, H. (2008) Modellvergleich ASM 3 / FUKA für das Belebungsverfahren.
- UHLENHUT, F.; SCHLAAK, M.; WICHERN, M.; KEHL, O.; LÜBKEN, M.; ALEX, J.; HORN, H.; N. N. (2008) Simulation von Biofilmverfahren.
- GEHRING, T.; WICHERN, M.; KEHL, O.; LÜBKEN, M.; ALEX, J.; UHLENHUT, F.; SCHLAAK, M.; HORN, H. (2008) Dynamic simulation of a series of anaerobic and facultativ ponds.
- LÜBKEN, M.; URBAN, I.; WICHERN, M.; KEHL, O.; ALEX, J.; UHLENHUT, F.; SCHLAAK, M.; ROSENWINKEL, K.-H.; HORN, H. (2008) Dynamic simulation of a UASB reactor treating municipal wastewater.



## **6 Erfolgskontrollbericht**

### **6.1 Beitrag des Ergebnisses zu den förderpolitischen Zielen**

Das durchgeführte Forschungsprojekt leistete einen Beitrag zu folgenden förderpolitischen Zielen des BMBF:

- Förderung von Forschungsverbänden (Kooperationen mit zehn deutschen Universitäten und dem ifak / Magdeburg)
- Stärkung des wissenschaftlichen Potentials der Fachhochschulen
- Forschungsnahe Qualifizierung von Studierenden und Diplomanden (Innerhalb des Forschungsprojektes werden Diplomanden für die Durchführung von Simulationsrechnungen eingesetzt. Zudem ist geplant, die Erkenntnisse des Vorhabens im Rahmen der Lehre und der Vorbereitung auf internationale Märkte an den beteiligten Hochschulen umzusetzen)
- Verbesserte Beteiligung Dritter an der Fachhochschulforschung

Die Verbundfähigkeit der Fachhochschule wurde durch die Kooperation mit zahlreichen Partnern aus dem Bereich der Hochschulen und der Wirtschaft gefördert. Zudem wurden für die international tätigen deutschen Unternehmen aus dem Bereich der Abwassertechnik umsetzbare Ergebnisse erzielt (Stichworte: Standortsicherung, Erhöhung der Wettbewerbsfähigkeit im internationalen Vergleich, Schaffung und Sicherung von Arbeitsplätzen in Deutschland).

### **6.2 Wissenschaftlich-technisches Ergebnis des Vorhabens**

Die wissenschaftlich-technischen Ergebnisse des Vorhabens wurden bereits in Abschnitt 4 dieses Berichtes sehr ausführlich beschrieben. Daher wird an dieser Stelle nicht weiter darauf eingegangen. Ein Überblick findet sich zudem in Abschnitt 8 (Kurzfassung).

### **6.3 Fortschreibung des Verwertungsplanes**

Die wirtschaftlichen Erfolgsaussichten für die Vermarktung einer Software, die im Ausland eine effiziente, zeitsparende Auslegung bzw. Optimierung von Abwasserreinigungsanlagen ermöglicht, sind als sehr hoch einzuschätzen. Hintergrund hierfür ist die Tatsache, dass damit die Durchführung aufwändiger, kostspieliger Messkampagnen entfällt. Zudem kann die Kalibrierung der bisherigen Simulationsmodelle an die Bedingungen vor Ort nur von Spezialisten durchgeführt werden. Ein Einsatz dynamischer Simulationsmodelle in Schwellen- und Entwicklungsländern ist derzeit durch deutsche Ingenieurbüros nur unter erheblichem Aufwand möglich. Auch der Einsatz von im Ausland verwendeten Bemessungsmodellen ist für deutsche Anwender in der Regel mit erheblichem Aufwand verbunden, da die Modellgrundlagen oft nur unzureichend dokumentiert sind und die Erhebung von Messdaten von hier aus nur schwierig möglich ist. Ein Handlungsbedarf ist in diesem Bereich somit deutlich gegeben.

Die Erkenntnisse des Projektes werden auf vielfache Weise umgesetzt. In Deutschland werden die Erkenntnisse Firmen und Ingenieurbüros über den Leitfaden, der die Erkenntnisse zusammenfasst, nähergebracht. Die wirtschaftliche Verwertung der Simulationsergebnisse erfolgt softwaretechnisch durch das ifak auf zweierlei Weise:

- Durch die Implementierung der wissenschaftlichen Erkenntnisse in die international anerkannte und verbreitete Simulationssoftware SIMBA<sup>®</sup>. Das Simulationsprogramm

wird auch nach Beendigung des Vorhabens laufend vom ifak aktualisiert und kann somit von deutschen Ingenieurbüros als wertvolles Hilfsmittel für die nachhaltige Auslegung sowie Betriebsoptimierung biologischer Abwasserreinigungsanlagen in anderen Klimazonen eingesetzt werden.

- Durch das Einbringen der Erkenntnisse in das Simulationswerkzeug „Toolkit“, das in drei weiteren Teilprojekten zur Visualisierung der Ergebnisse des Forschungsverbundes einwickelt wird. Das Toolkit ermöglicht es, aus den vorhandenen Randbedingungen und Input-Daten (verfügbarer Standort, Flächenkosten, Stromkosten, Personalkosten, Abwasserzulauf nach Menge und Qualität etc.) direkt die geeigneten Abwassertechnologien zu ermitteln und Lösungsalternativen zu generieren, so dass die gegebenen Anforderungen vor Ort (Output-Daten, z. B. Ablaufgrenzwerte und Qualitätsstandards für die Abwasserwiederverwertung) erfüllt werden.

Durch die bereits erfolgte bzw. geplante Veröffentlichung der Ergebnisse auf nationalen und internationalen Tagungen werden die Modelle darüber hinaus anderen Softwareanbietern zeitversetzt zugänglich gemacht, so dass über die Projektlaufzeit hinaus mit einer Integration der Ansätze in andere Produkte zu rechnen ist.

National sollen die Erkenntnisse besonders genutzt werden, um die Arbeit in den DWA-Arbeitsgruppen zu unterstützen und Veröffentlichungen in der hiesigen Presse (z. B. Korrespondenz Abwasser, gwf-Wasser/Abwasser, ...) voranzutreiben.

Darüber hinaus wünschenswert und sinnvoll wäre die Fortsetzung der Zusammenarbeit mit den Kooperationspartnern des Verbundprojektes im Rahmen weiterer Forschungsvorhaben. Von dieser fruchtbaren, intensiven Kooperation profitieren alle in ihren Bemühungen zur Entwicklung und Umsetzung von angepassten, innovativen Abwassertechnologien und geeigneten Simulationswerkzeugen für die Planung, Auslegung und Optimierung dieser Anlagen.

Im Institut für Umwelttechnik – EUTEC wurde durch das Forschungsprojekt das know how auf dem Gebiet der Simulation von Kläranlagen erweitert. Die beteiligten Wissenschaftler erhielten durch das Vorhaben die Möglichkeit, neue Kenntnisse und Fähigkeiten zu erwerben. Eine weitere positive Wirkung des Projektes besteht darin, dass die wissenschaftlichen Ergebnisse als Grundlage weiterer Forschungsvorhaben am Institut für Umwelttechnik – EUTEC der FH OOW dienen können.

Erfindungen und Schutzrechtsanmeldungen haben sich im Rahmen dieses Projektes bisher nicht ergeben.

#### **6.4 Präsentationsmöglichkeiten für mögliche Nutzer**

Präsentationsmöglichkeiten für interessierte Zielgruppen bestehen über die Website des BMBF-Verbundprojektes (<http://dbs-lin.ruhr-uni-bochum.de/wasserverbund/>), die auch über das Ende des Förderungszeitraums hinaus aktiv bleibt.

Darüber hinaus wurden das Projekt und die erreichten Ergebnisse auf verschiedenen einschlägigen nationalen und internationalen Tagungen vorgestellt (siehe Abschnitt 5).

Wesentliche Ergebnisse sollen auch nach Ende der Projektlaufzeit neben den erwähnten schriftlichen Publikationsmöglichkeiten (Veröffentlichungen in Fachzeitschriften, siehe Abschnitt 5 des Berichtes) in Fachvorträgen öffentlich bekannt gemacht und zur Diskussion gestellt werden.

Über die Projektlaufzeit hinaus wird der Fachöffentlichkeit nach Abschluss aller Teilprojekte ein Leitfaden zur Verfügung gestellt. Dieser stellt eine redaktionell aufbereitete Version des Abschlussberichtes des Gesamtprojektes dar, in dem die Ergebnisse der jeweiligen Einzelprojekte in Kurzform zusammengefasst sind. Der Leitfaden vermittelt Auswirkungen der untersuchten Rahmenbedingungen auf konkrete Verfahrensschritte und -techniken und spricht Handlungsempfehlungen und methodische Hinweise für Consultants, Ingenieurbüros,

Anlagenbauer, Betreiber, und Baufirmen oder sonstige im Export arbeitende deutsche Unternehmen aus.  
Zudem werden die erarbeiteten Ergebnisse grundsätzlich bei Bedarf für Präsentationszwecke zur Verfügung gestellt.

### **6.5 Einhaltung der Ausgaben- und Zeitplanung**

Die Projektlaufzeit wurde auf Antrag der FH OOW (Schreiben vom 28.01.2008) kostenneutral bis Ende Juni 2008 verlängert (durch Umbuchung von noch vorhandenen Restmitteln aus den Titeln „Studentische Hilfskräfte“, „Verbrauch“ und „Reisekosten“ in Personalkosten konnte das Projekt in den Monaten Mai und Juni noch mit einer halben Personalstelle weitergeführt werden; siehe Änderungsbescheid vom 01. Februar 2008). Ansonsten erfolgten die Aktivitäten der FH OOW auf Basis der im Arbeitsplan des Projektantrages formulierten Arbeitsschritte. Die Erstellung des Projektberichtes erfolgte nach dessen Abschluss.

Die Einhaltung der Kostenplanung wurde ausführlich in dem bereits vorliegenden finanziellen Abschlussbericht (VNZA) sowie den im Laufe des Projektes erstellten Quartalsabrechnungen und jährlichen Zwischenberichten dargestellt. Daher werden an dieser Stelle nur die wichtigsten Positionen des zahlenmäßigen Nachweises im Vergleich mit den beantragten Summen in *Tabelle 19* zusammengefasst.

Der in *Tabelle 19* ausgewiesene, nicht verausgabte Restbetrag in Höhe von 1245,39 € wurde dem Projektträger bereits rückerstattet.

Tabelle 19: Vergleich - Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises mit den jeweils beantragten Summen.

	Personalausgaben		Sachausgaben		Investitionen	Gesamtsumme
	Pos. 0812	Pos. 0822	Pos. 0843	Pos. 0846	Pos. 0850	
Summe Ausgaben 2005	23.260,44 €	- €	50,00 €	1.277,19 €	- €	24.587,63 €
Summe Ausgaben 2006	58.689,42 €	- €	196,70 €	2.765,60 €	9.663,57 €	71.315,29 €
Summe Ausgaben 2007	58.783,67 €	- €	256,56 €	2.414,30 €	- €	61.454,53 €
Summe Ausgaben 2008	23.282,56 €	- €	64,98 €	1.644,62 €	- €	24.992,16 €
Gesamtsumme	164.016,09 €	- €	568,24 €	8.101,71 €	9.663,57 €	182.349,61 €
Bewilligte Ansätze (vor Umwidmung)*	157.095,00 €	5.000,00 €	2.300,00 €	10.200,00 €	9.000,00 €	183.595,00 €
Bewilligte Ansätze (nach Umwidmung)*	166.395,00 €	- €	500,00 €	7.700,00 €	9.000,00 €	183.595,00 €
<i>Rest-/Minusbeträge nach Abzug der Ausgaben</i>	2.378,91 €	- €	- 68,24 €	- 401,71 €	- 663,57 €	1.245,39 €

\*Die o. g. Umwidmung der Mittel wurde von der FH OOW am 28.01.2008 und gemäß Änderungsbescheid des Projektträgers vom 29.01.2009 bewilligt.

## 7 Literatur

- Uhlenhut, F., Berendes, O., Frauendorfer, E., Siefert, E., Schlaak, M. (1999): Kinetische Beschreibung biologischer Abbauvorgänge, *gwf-Wasser/Abwasser* 140 Nr. 6, S. 424 – 430.
- Uhlenhut, F., Schlaak, M., Siefert, E., Schuller, D. (2000): Kinetischer Modellansatz zur Beschreibung der Nitrifikation, *gwf-Wasser/Abwasser* 141 Nr. 2, S. 103 – 108.
- Uhlenhut, F., van Lessen, W. (2001): FUKA – Neuer Modellansatz für die Beschreibung biologischer Abbauvorgänge in Kläranlagen, *Chemie Ingenieur Technik* 73 Nr. 8, S. 1061 – 1064.
- Uhlenhut, F., Siefert, E., Schlaak, M., Borchert, A. (2001): Neuer Modellansatz (FUKA) zur Beschreibung der biologischen Abbauvorgänge in Kläranlagen, *gwf-Wasser/Abwasser* 142 Nr. 12, S. 832 – 842.
- Uhlenhut, F., van Lessen, W. (2002): FUKA – A New Kinetic Model for Biological Degradation Processes in Wastewater Treatment Plants, *Chemical Engineering & Technology* 25 (2002) Nr. 3, S. 82 – 86.
- Nowak, O. (1997): Ziele, Vorbedingungen und Grenzen der Anwendung der dynamischen Simulation, *Modellanwendung bei Planung und Betrieb von Belebungsanlagen*, Wiener Mitteilungen, Bd. 137, S. 83 ff.
- Grady, Jr., C. P. L.; Gujer, W.; Henze, M.; Marais, G. v. R.; Matsuo, T. (1987): Final Report - Activated Sludge Model No.1/IAWQ task group on mathematical modeling and operation of biological wastewater treatment plants. London: IAWQ Scientific and Technical Reports.
- Gujer, W.; Henze, M.; Marais, G. v. R.; Matsuo, T.; Mino, T.; Wentzel, M. C. (1995): Activated Sludge Model No.2. London: IAWQ Scientific and Technical Reports No.3.
- Henze, M.; Gujer, W.; Mino, T.; Tomonori, M.; Wentzel, M. C.; Marais, G. v. R.; van Loosdrecht, M. C. M. (1998): The activated sludge model No. 2d. IAWQ Task Group on Mathematical for Design and Operation of Biological Wastewater Treatment Processes. *Kollekollo Seminar on activated Sludge Modelling, Modelling and Microbiology of Activated Sludge Process*, Copenhagen.
- Gujer, W.; Henze, M.; Mino, T.; van Loosdrecht, M. C. M. (1998): The activated sludge model No.3. IAWQ Task Group on Mathematical for Design and Operation of Biological Wastewater Treatment Processes. *Kollekollo Seminar on activated Sludge Modelling, Modelling and Microbiology of Activated Sludge Process*, Copenhagen.
- Monod, J. (1949): The growth of bacterial cultures. *Annual Review of Microbiology*; 3: 371.
- LaMotta, E. J. (1976): Internal diffusion and reaction in biological films. *Environmental Science and Technology* 10: 765 – 769.
- Williamson, K., McCarty, P. L. (1976): A model of substrate utilization by bacteria biofilms. *Journal of Water Pollution Control* 48: 9.
- Chen, G. H., Ozaki, H., Terashima, Y. (1989): Modelling of the simultaneous removal of organic substances and nitrogen in a biofilm. *Water Science and Technology* 21: 791 – 804.
- Rittmann, B. E., Manem, J. A. (1992): Development and experimental evaluation of a steady-state, multispecies biofilm model. *Biotechnology and Bioengineering* 39: 914 – 922.
- Gujer, W., Wanner, O. (1990): Modeling mixed population biofilms. In: Characklis, W. G., Marshall, K. C. (eds) *Biofilms*. John Wiley & Sons, New York, pp. 397 – 445.
- Horn, H., Hempel, D. C. (1997a): Growth and decay in an auto-/heterotrophic biofilm. *Water Research* 31: 2243 – 2252.

- Horn, H., Hempel, D. C. (1997b): Substrate utilization and mass transfer in an autotrophic biofilm system: experimental results and numerical simulation. *Biotechnology and Bioengineering* 53: 363 – 371.
- Picioreanu, C., van Loosdrecht, M. C. M., Heijnen, J. J. (2000): Effect of diffusive and convective substrate transport on biofilm structure formation: A two-dimensional modeling study. *Biotechnology and Bioengineering* 69: 504 – 515.
- Horn, H., Hempel, D. C. (1998): Modeling mass transfer and substrate utilization in the boundary layer of biofilm systems. *Water Science and Technology* 37: 139 – 147.
- Hermanowicz, S. W. (1999): Two-dimensional simulations of biofilm development: Effects of external environmental conditions. *Water Science and Technology* 39: 107 – 114.
- Buffiere, P., Steyer, J. P., Fonade, C., Moletta, R. (1998): Modeling and experiments on the influence of biofilm size and mass transfer in a fluidized bed reactor for anaerobic digestion. *Water Research* 32: 657 – 668.
- Picioreanu, C., van Loosdrecht, M. C. M., Heijnen, J. J. (1999): Discrete - differential modelling of biofilm structure. *Water Science and Technology* 39: 115 – 122.
- Noguera, D. R., Pizarro, G., Stahl, D. A., Rittmann, B. E. (1999): Simulation of multispecies biofilm development in three dimensions. *Water Science and Technology* 39: 123 – 130.
- Kreft, J. U., Wimpenny, J. W. T. (2001): Effect of EPS on biofilm structure and function as revealed by an individual-based model of biofilm growth. *Water Science and Technology* 43: 135 – 141.
- Liu, Y., Lam, M. C., Fang, H. H. P. (2001): Absorption of heavy metals by EPS of activated sludge. *Water Science and Technology* 43: 59 – 66.
- Wolfaardt, G. M., Lawrence, J. R., Headley, J. V., Robarts, R. D., Caldwell, D. E. (1994): Microbial exopolymers provide a mechanism for bioaccumulation of contaminants. *Microbial Ecology* 27: 279 – 291.
- Flemming, H. C., Wingender, J. (2001): Relevance of microbial extracellular polymeric substances (EPSs) - Part I: Structural and ecological aspects. *Water Science and Technology* 43: 1 – 8.
- Wingender, J., Neu, T. R., Flemming, H. C. (1999): *Microbial extracellular polymeric substances: Characterization, structure, and function*. Springer-Verlag, Berlin.
- Horn, H., Neu, T. R., Wulkow, M. (2001): Modelling the structure and function of extracellular polymeric substances in biofilms with new numerical techniques. *Water Science and Technology* 43: 121 – 127.
- ifak system GmbH (2005): *Benutzerhandbuch für das Programm SIMBA® 5.1*, Magdeburg.
- Characklis, W. G.; Bouwer, E.; Gujer, W.; Hermanowicz, S.; Wanner, O.; Watanabe, Y.; Wilderer, P. (1989): *Modelling of Biofilm Systems*. Scientific and Technical Report, IAWPRC Task Group.
- DWA-A 281 (2001): *Bemessung von Tropf- und Tauchkörperanlagen*, GFA, Hennef.

## 8 Kurzfassung

### 1. Derzeitiger Stand von Wissenschaft und Technik

Die Verfahren der Abwasserreinigung befinden sich in Deutschland auf einem hohen Niveau und wenden auch Simulationen zur Auslegung und Optimierung an. Für die Simulation dieser Verfahren stehen unterschiedliche Modelle (ASM1/3, FUKA...) zur Verfügung. Sie sind allerdings auf die regionalen Gegebenheiten angepasst und besitzen für den Export in Entwicklungs- und Transformationsländer Limitierungen hinsichtlich der Einflussfaktoren klimatische Bedingungen, Abwasserzusammensetzung und Prozessführung.

### 2. Begründung/Zielsetzung der Untersuchung

Der Forschungsanteil der FH OOW im hier dargestellten Teilprojekt des BMBF-Verbundprojektes *“Exportorientierte F&E auf dem Gebiet der Wasserver- und -entsorgung”* mit dem Förderkennzeichen 02WA0578 umfasste die Anpassung der Simulation des Belebungsverfahrens sowie der Biofilmverfahren an diese Besonderheiten.

### 3. Methode

Durch die Kooperationspartner im BMBF-Verbundprojekt wurde eine breite Datenbasis für die relevanten Parameter: Temperatur (Bereich von 5 °C bis 35 °C), Reaktortyp (Belebungs-, Biofilm → Tropfkörper, getauchtes Festbett, Scheibentauchkörper) und Abwasserzusammensetzung erarbeitet. Diese Versuchsdaten wurden im Projekt der FH OOW für die Anpassung der Simulation genutzt.

Für die Simulation des Belebungsverfahrens wurde der an der FH OOW neu entwickelte kinetische Modellansatz FUKA verwendet. Dieser ersetzt die Monod-Kinetik und ermöglicht eine detaillierte Beschreibung der Elimination der Kohlenstoff- und insbesondere der Stickstoffverbindungen.

Die Simulation der Biofilmanlagen erfolgte unter Verwendung des im Simulationsprogramm SIMBA<sup>®</sup> implementierten Biofilmmodells. Dabei wurde für die Beschreibung der biologischen Abbauprozesse das vorgegebene modifizierte ASM1-Modell eingesetzt.

### 4. Ergebnis

Über Sensitivitätsanalysen wurden Möglichkeiten für die Kalibrierung und Vereinfachung der Ansätze untersucht. Für das Belebungsverfahren konnte eine erfolgreiche Anpassung der Simulation an die beiden untersuchten Temperaturen von 15 °C und 30 °C durchgeführt werden. Unter Berücksichtigung der Ergebnisse aus früheren Simulationsprojekten ergab sich eine Aufteilung der insgesamt 35 Parameter des Modellansatzes FUKA in 13 sensitive Parameter und 22 Parameter, die bei den bisher in der Simulation nachgebildeten Kläranlagen nicht geändert werden mussten. Für die 13 sensitiven Parameter wurde eine Tabelle mit den Schwankungsbereichen aufgestellt.

Im Bereich der Biofilme erfolgte eine erfolgreiche Abbildung der untersuchten Abwassertechniken. Für das Tropfkörperverfahren ergaben sich bei der Nachbildung der unterschiedlichen Füllmaterialien (Lava, Kunststoff) unterschiedliche Parameteranpassungen. Für das „Getauchte Festbett“-Verfahren war allein über die Parameter des Biofilmblockes nur teilweise eine zufriedenstellende Anpassung der simulierten Ablaufganglinien an die experimentellen Ablaufganglinien erreichbar. Hier wurde der Einfluss einer realistischen Nachbildung des Temperatureinflusses auf die biologischen Wachstums- und Abbauprozesse in der Simulation besonders deutlich. Die bisher in den Modellansätzen verwendeten Terme für die Berücksichtigung des Temperatureinflusses erwiesen sich für höhere Temperaturen (> 20 °C) als ungeeignet. Daher wurden verschiedene alternative Temperaturterme formuliert und erprobt. Damit ergab sich eine bessere Nachbildung der Konzentrationsverläufe im höheren Temperaturbereich.

Für das Scheibentauchkörperverfahren wurde zunächst die generelle Nachbildung der Anlagentechnik durch verschiedene Konfigurationen in der Simulation untersucht. An

diesem Beispiel wurden zudem in der Simulation die Prozesse in den einzelnen Segmenten des Reaktors und Schichten des Biofilms sowie deren Beeinflussung durch die eingetragene Luftmenge detailliert betrachtet.

#### 5. Schlussfolgerung/Anwendungsmöglichkeiten

Als Ergebnisse des Projektes wird ein Auslegungshandbuch („Leitfaden“) sowie in anderen Teilprojekten ein offenes Softwaresystem („Toolkit“) erstellt.

Damit werden folgende Ziele erreicht:

- Rechnungen zur Auslegung von Anlagen im Ausland werden für deutsche Ingenieurbüros und Anlagenbauer leicht nutzbar gemacht.
- Optimale Anpassung der Anlagentechnologien vor Ort.
- Darstellung des hohen Standards der Abwassertechnik in Deutschland.

Zudem dienen die Ergebnisse dem Umweltschutz und der Nachhaltigkeit im Umgang mit natürlichen Ressourcen in den Entwicklungs- und Transformationsländern.



Anhang 1 – Berechnung des durch die Aufwuchskörper (Scheiben) ausgefüllten Volumens pro Kaskade:

Das Volumen eines (geraden oder schiefen) Kreiszylinders berechnet sich aus dem Grundflächenradius  $r$  und der Höhe  $h$ :

$$V = r^2 \cdot \pi \cdot h = G \cdot h$$

$G$  - Grundfläche

$$V_{\text{Scheibe,Kas1}} = F_{\text{Scheibekas1}}/2 * d_{\text{Scheibekas1}} * \text{Eintauchtiefe [\%]}$$

Beispiel – Berechnung von  $F_{\text{Scheibekas1}} = 1,178 \text{ m}^2$ :

$$F_{\text{Scheibekas1}} = \pi * r^2 * 2 \text{ (Vorder- und Rückseite)} * 12 \text{ (Anzahl der Scheiben)}$$

$$F_{\text{Scheibekas1}} = \pi * (0,125 \text{ m})^2 * 2 * 12 = 1,1781 \text{ m}^2$$

(Dabei werden die Scheibenränder als Aufwuchsfläche vernachlässigt. d. h. die Dicke der Scheibe wird nicht berücksichtigt.)

Scheibendurchmesser 25 cm (kleine Laboranlage):

$$V_{\text{Scheibe,Kas1}} = F_{\text{Scheibekas1}}/2 * d_{\text{Scheibekas1}} * \text{Eintauchtiefe [\%]}$$

$$V_{\text{Scheibe,Kas1}} = 1,1781 \text{ m}^2/2 * 0,002 \text{ m} * 0,3302 = 0,000389 \text{ m}^3 (= 0,389 \text{ l})$$

Analog:

$$F_{\text{Scheibekas2}} = \pi * (0,125 \text{ m})^2 * 2 * 10 = 0,9817 \text{ m}^2$$

$$V_{\text{Scheibe,Kas2}} = 0,9817 \text{ m}^2/2 * 0,002 \text{ m} * 0,3302 = 0,000324 \text{ m}^3 (= 0,324 \text{ l})$$

$$F_{\text{Scheibekas3}} = \pi * (0,125 \text{ m})^2 * 2 * 10 = 0,9817 \text{ m}^2$$

$$V_{\text{Scheibe,Kas3}} = 0,9817 \text{ m}^2/2 * 0,002 \text{ m} * 0,3302 = 0,000324 \text{ m}^3 (= 0,324 \text{ l})$$

Scheibendurchmesser 48,5 cm (große Laboranlage):

$$F_{\text{Scheibekas1}} = \pi * (0,2425 \text{ m})^2 * 2 * 12 = 4,434 \text{ m}^2$$

$$V_{\text{Scheibe,Kas1}} = 4,434 \text{ m}^2/2 * 0,002 \text{ m} * 0,3308 = 0,001467 \text{ m}^3 (= 1,467 \text{ l})$$

$$F_{\text{Scheibekas2}} = \pi * (0,2425 \text{ m})^2 * 2 * 10 = 3,6949 \text{ m}^2$$

$$V_{\text{Scheibe,Kas2}} = 3,6949 \text{ m}^2/2 * 0,002 \text{ m} * 0,3308 = 0,001222 \text{ m}^3 (= 1,222 \text{ l})$$

$$F_{\text{Scheibekas3}} = \pi * (0,2425 \text{ m})^2 * 2 * 10 = 3,6949 \text{ m}^2$$

$$V_{\text{Scheibe,Kas3}} = 3,6949 \text{ m}^2/2 * 0,002 \text{ m} * 0,3308 = 0,001222 \text{ m}^3 (= 1,222 \text{ l})$$

$$d_{\text{ZWkas1}} = 18 \text{ mm} \quad d_{\text{ZWkas2}} = 15 \text{ mm} \quad d_{\text{ZWkas3}} = 15 \text{ mm}$$

WSP<sub>Tank</sub>

Anhang 2 – Quellcode des für die Vorgabe der Zulaufkonzentrationen (Versuchskläranlage der RU Bochum zum Belebungsverfahren) erstellten m-files „zu.m“

*(Anmerkung: Da im Simulationsprogramm MATLAB/SIMBA<sup>®</sup> statt des Kommas der Punkt als Trennzeichen verwendet werden muss, wird dies in den nachfolgenden Quelltexten - abweichend von der im übrigen Text des Berichtes gewählten Konvention (Komma als Trennzeichen und 1.000er Punkt)- so beibehalten, da die Quelltexte nach einem Vertauschen der Trennzeichen in MATLAB/SIMBA<sup>®</sup> nicht mehr lauffähig wären und zu Fehlermeldungen führen würden.)*

```
function ytg = zulauf(Qm)

%Zulauf-Datei für Laborkläranlage Bochum
%Intensivmeßphase I 23.02.06 - 03.03.06
% Erstellt am 17.01.2007 (Berechnung der Fraktionen für den Modellansatz
mit Temperaturabhängigkeit).
% (Berechnung der Fraktionen SI und XI des CSB, Subtraktion von CSB).
% (Gaslöslichkeiten von N2 und CO2 berücksichtigt).
% (Die Erhaltungssätze für C, N und O werden durch Einführung geeigneter
% stöchiometrischer Faktoren berücksichtigt).

%Autor: Dr. Frank Uhlenhut, Institut für Umwelttechnik - EUTEC der FHOOW,
26723 Emden

fid = fopen('zu.txt','r');
messwerte = fscanf(fid,'%f',[5,inf]);
messwerte=messwerte';
status = fclose(fid);

% Zuweisung der Matrixplatzhalter
ti      = messwerte(:,1);
CSB     = messwerte(:,2);
SNH     = messwerte(:,3);
PO4     = messwerte(:,4);
Q       = messwerte(:,5);

m = length(messwerte);

% Berechnung der Komponenten des Ausgabevektors

% Konzentration für die heterotrophe Biomasse im Zufluß zur Biologie;
XH = 0.15*CSB;      %0.126 (FUKA)

% Konzentration für den Enzym-Substrat-Komplex1 im Zufluß zur Biologie;
SXH = 0.007*CSB;

% Konzentration für den Enzym-Substrat-Komplex2 im Zufluß zur Biologie;
SXHO = 0.007*CSB;

% Konzentration für Kohlendioxid im Zufluß zur Biologie;
CO2 = [0.254*ones(m,1)];

% Konzentration für die autotrophe Biomasse im Zufluß zur Biologie;
XA = [0.01*ones(m,1)]; %0.008*ones(25,1); Vorgabe FUKA

% Konzentration für Sauerstoff im Zufluß zur Biologie;
O2 = [0.01*ones(m,1)];
```

```

% Konzentration für den Enzym-Substrat-Komplex3 im Zufluß zur Biologie;
XAO = [0.001*ones(m,1)];

% Konzentration für Ammonium NH4 (Messwert!);
NH4 = [SNH];

% Konzentration für den Enzym-Substrat-Komplex4 im Zufluß zur Biologie;
XAK = [0.0005*ones(m,1)];

% Konzentration für Nitrit im Zufluß zur Biologie (Mittelwert = 0.012);
NO2 = [0.01*ones(m,1)];

% Konzentration für den Enzym-Substrat-Komplex5 im Zufluß zur Biologie;
XN2 = [zeros(m,1)];

% Konzentration für Nitrat im Zufluß zur Biologie (Mittelwert = 0.599);
NO3 = [0.1*ones(m,1)]; %[0.01*ones(m,1)]; Vorgabe M. Lübken

% Konzentration für den Enzym-Substrat-Komplex6 im Zufluß zur Biologie;
XN3 = [zeros(m,1)];

% Konzentration für Stickstoff im Zufluß;
N2 = [15*ones(m,1)]; %SN2 =[zeros(m,1)]; Vorgabe M. Lübken

% Inerte, gelöste CSB-Fraktion;
fsi = 0.07; %0.16 (FUKA)
SI = fsi*CSB;

% Inerte, partikulaere CSB-Fraktion;
fxi = 0.04; %0.24 (FUKA)
XI = fxi*CSB;

% Konzentration für das Substrat im Zufluß;
S = CSB-SI-XI-XH-SXH-SXHO-XA-XAO-XAK-XN2-XN3; % Summe der biologisch
abbaubaren CSB-Komponenten. % (Fraktionen Ss und Xs des
ASM 1)

ytg=[ti,S,SI,XI,XH,SXH,SXHO,CO2,XA,O2,XAO,NH4,XAK,NO2,XN2,NO3,XN3,N2,Q];

```

Anhang 3 – Quellcode des für die Vorgabe der Zulaufkonzentrationen (Versuchskläranlage der Universität Stuttgart zum Tropfkörperverfahren) erstellten m-files „zu.m“

```

function ytg = zulauf(Qm)

%Zulauf-Datei für Laborkläranlage Stuttgart (Tropfkörper)
%Intensivmeßphase I 06.10.05 - 05.11.05
%Frank Uhlenhut

fid = fopen('zustg.txt','r');
messwerte = fscanf(fid,'%f',[5,inf]);
messwerte=messwerte';
status = fclose(fid);

% CSB-Fraktionierung

aSI_CSB      = 0.07;                %Anteil SI am CSB
aSS_CSB      = 0.20;                %0.20      %Anteil SS am CSB
aXI_CSB      = 0.04;                %0.10      %Anteil XI am CSB
aXbh_CSB     = 0.15;                %Anteil Xbh am CSB
aXS_CSB      = 1-aSI_CSB-aSS_CSB-aXI_CSB-aXbh_CSB; %Anteil XS am CSB

%Total Suspended Solids
iTSSBM=0.9;          %Anteil der Biomassenfraktion am Summenparameter XTSS
iTSSXi=0.75;        %Anteil der partikulären Fraktion Xi am XTSS
iTSSXs=0.75;        %Anteil der partikulären Fraktion Xs am XTSS

% Zuweisung der Matrixplatzhalter
ti      = messwerte(:,1);
CSB     = messwerte(:,2);
SNH     = messwerte(:,3);
SNO     = messwerte(:,4);
Qzu     = messwerte(:,5);

m = length(messwerte);

% Berechnung der Komponenten des Ausgabevektors
SI      =aSI_CSB*CSB;
SS      =aSS_CSB*CSB;
SXS     =[zeros(m,1)];
XS      =aXS_CSB*CSB;
XBH     =aXbh_CSB*CSB;
XBA     =[0.01*ones(m,1)];
XI      =aXI_CSB*CSB;
SO      =[0.01*ones(m,1)];
SND     =[zeros(m,1)];
XND     =[zeros(m,1)];
SALK    =[8.0*ones(m,1)];

% XTSS modellintern
XTSS = [iTSSXi*XI+iTSSXs*XS+iTSSBM*(XBH+XBA)];

ytg=[ti,SI,SS,SXS,XS,XBH,XBA,XI,SO,SNO,SNH,SND,XND,SALK,Qzu];

```

Anhang 4 – Quellcode des für die Vorgabe der Zulaufkonzentrationen (Versuchskläranlage der Universität Halle-Wittenberg zum „Getauchten Festbett“-Verfahren) erstellten m-files „tngang\_biofm.m“

```
function [ytg] = tngang_biofm(Q)
% tngang [ytg] = tngang(Q)
%
%       Berechnet den Tagesgang für die Versuchsanlage Merseburg
%       (BMBF-Verbundprojekt)
%
%       evaluate the daily hydrograph of an example plant
%
% i f a k Institut fuer Automation und Kommunikation e.V. Magdeburg
%       Steinfeldstr. (IGZ), 39179 Barleben
% EUTEC  Institut fuer Umwelttechnik
%       Constantiaplatz 4, 26723 Emden
%
%
% Aenderungen Autor, Datum, Version, Anlass
%
%       J. Alex; R. Tschepeztki, 17.3.1994, Simba 2.0, Erstellung der
Datei
%       J. Alex          24.6.1994, Simba 2.0, Erweiterung um
Volumenstrom
%       F. Uhlenhut,    30.9.2006, Erstellung des Tagesgangs
%       F. Uhlenhut,    9.10.2006, Korrektur
%       F. Uhlenhut,    09.5.2008, geänderte CSB-
Fraktionierung (weitere Änderung) und erhöhte Zulaufkonz.
%
% Zufluß in m^3/d (Mittelwert = 0.00312)
Qzu = 24*Q/0.00312*[0.00013 0.00013 0.00013 0.00013 0.00013 0.00013 0.00013 0.00013
0.00013 0.00013 0.00013 0.00013 0.00013 0.00013 0.00013 0.00013 0.00013 0.00013
0.00013 0.00013 0.00013 0.00013 0.00013 0.00013 0.00013 0.00013 0.00013 0.00013]';
%
% Konzentration für den gesamten CSB im Zufluß zur Biologie (Mittelwert =
1332);
CSB = [1800 1800 1800 1800 1800 1800 1800 1800 1800 1800 1800 1800 1800 1800
1800 1800 1800 1800 1800 1800 1800 1800 1800 1800 1800 1800]';
%
% Konzentration für den BSB5 im Zulauf zur Biologie (Mittelwert= )
%BSB5 = [ ]';
%
% Konzentration für ges. Kijeldahl Stickstoff im Zufluß (Mittelwert =
60.5);
TKN = [60.5 60.5 60.5 60.5 60.5 60.5 60.5 60.5 60.5 60.5 60.5 60.5 60.5 60.5
60.5 60.5 60.5 60.5 60.5 60.5 60.5 60.5 60.5 60.5 60.5]';
%
% Konzentration für Ammonium NH4 (Mittelwert=57)
NH4 = [57 57 57 57 57 57 57 57 57 57 57 57 57 57 57 57 57 57 57 57 57 57 57 57
57 57]';
%
% Konzentration Nitrat/Nitrit (Mittelwert=0.15)
NO3 =[0.15 0.15 0.15 0.15 0.15 0.15 0.15 0.15 0.15 0.15 0.15 0.15 0.15 0.15
0.15 0.15 0.15 0.15 0.15 0.15 0.15 0.15 0.15 0.15 0.15]';
%
% Konzentration für Bikarbonat im Zufluß ;
Salk = [7.4 7.3 7.4 8.2 7.7 7.8 8.0 7.8 7.6 7.3 7.7 8.0 7.9 7.6 7.7 7.7 7.7
7.6 7.6 7.3 7.3 7.4 7.5 7.5 7.4]';
%
ti = [ 0:(1/24):1]';
m = size(ti,1);
```

```

cSi = 0.01;      %Anteil biologisch inerter, gelöster Stoffe
cSs = 0.95;      %Anteil biologisch schnell abbaubarer, gelöster Stoffe
cXi = 0.01;      %Anteil biologisch inerter, partikulärer Stoffe
cXs = 0.01;      %Anteil biologisch schwer abbaubarer, partikulärer Stoffe
cSxs = 0.02;     %Anteil biologisch schwer abbaubarer, gelöster Stoffe
cXbh = 0;        %Anteil aktive heterotrophe Biomasse

nSs = 0.03;      %Anteil biologisch schnell abbaubarer, gelöster Stoffe
nXs = 0.04;      %Anteil biologisch schwer abbaubarer, partikulärer Stoffe

Si = [CSB.*cSi]; %Biologisch inerte, gelöste Substanzen [g CSB/m³]
Ss = [CSB.*cSs]; %Biologisch schnell abbaubare, gelöste Substanzen [g
CSB/m³]
Xi = [CSB.*cXi]; %Biologisch inerte, partikuläre Substanzen [g CSB/m³]
Xs = [CSB.*cXs]; %Biologisch schwer abbaubare, partikuläre Substanzen [g
CSB/m³]
Sxs = [CSB.*cSxs]; %Biologisch schwer abbaubare, gelöste Substanzen [g
CSB/m³]
Xbh = [CSB.*cXbh]; %Aktive heterotrophe Biomasse [g CSB/m³]

Xba = [0.01*ones(m,1)]; %Aktive autotrophe Biomasse [g CSB/m³]
Xp = [0.01*ones(m,1)]; %Partikuläre Substanzen [g CSB/m³]
So = [0.01*ones(m,1)]; %Sauerstoffkonzentration [g/m³]
Sno = [NO3]; %Nitratkonzentration [g/m³]
Snh = [NH4]; %Ammoniumkonzentration [g/m³]

SND = [nSs.*Ss];
XND = [nXs.*(Xs+Sxs)];

Salk= [8.0*ones(m,1)]; %Alkalinität [mol/m³]

%%%%%%%%%%%%%%
%Tagesgangmatrix%
%%%%%%%%%%%%%%
ytg = [ti, Si, Ss, Sxs, Xs, Xbh, Xba, Xi, So, Sno, Snh, SND, XND, Salk, Qzu];

```

Anhang 5 – Quellcode des für die Vorgabe der Zulaufkonzentrationen (Versuchskläranlage der Universität Halle-Wittenberg zum „Getauchten Festbett“-Verfahren) erstellten m-files „zumers.m“

```
function ytg = zulauf(Qm)

%Zulauf-Datei für Laborkläranlage Merseburg (Getauchtes Festbett)
%Versuch 1 (G. Chapanova) 06.10.05 - 05.11.05
%Frank Uhlenhut

fid = fopen('zumers.txt','r');
messwerte = fscanf(fid,'%f',[5,inf]);
messwerte=messwerte';
status = fclose(fid);

% CSB-Fraktionierung

aSI_CSB      = 0.01;           %Anteil SI am CSB
aSS_CSB      = 0.95;           %Anteil SS am CSB
aXI_CSB      = 0.01;           %Anteil XI am CSB
aXbh_CSB     = 0;              %Anteil Xbh am CSB
aSXS_CSB     = 0.02;           %Anteil SXS am CSB
aXS_CSB      = 0.01;           %Anteil XS am CSB

nSs = 0.03;                    %Anteil biologisch schnell abbaubarer,
gelöster Stoffe
nXs = 0.04;                    %Anteil biologisch schwer abbaubarer,
partikulärer Stoffe

%Total Suspended Solids
iTSSBM=0.9;                    %Anteil der Biomassenfraktion am Summenparameter XTSS
iTSSXi=0.75;                   %Anteil der partikulären Fraktion Xi am XTSS
iTSSXs=0.75;                   %Anteil der partikulären Fraktion Xs am XTSS

% Zuweisung der Matrixplatzhalter
ti      = messwerte(:,1);
DOC     = messwerte(:,2);
SNH     = messwerte(:,3);
SNO     = messwerte(:,4);
Q       = messwerte(:,5);

m = length(messwerte);

% Berechnung der Komponenten des Ausgabevektors
CSB     =DOC*4.5;                %Umrechnung von DOC (Messwert) auf CSB mit Faktor
4.5 (= 1800/400)
Qzu     =Q*1e6;                 %Upscale um Faktor *1e6

SI       =aSI_CSB*CSB;
SS       =aSS_CSB*CSB;
SXS      =aSXS_CSB*CSB;
XS       =aXS_CSB*CSB;
XBH      =aXbh_CSB*CSB;
XBA      =[0.01*ones(m,1)];
XI       =aXI_CSB*CSB;
SO       =[0.01*ones(m,1)];
SND      =[nSs.*SS];
XND      =[nXs.*(XS+SXS)];
SALK     =[8.0*ones(m,1)];
```

```
% XTSS modellintern
XTSS =[iTSSXi*XI+iTSSXs*XS+iTSSBM*(XBH+XBA)];

ytg=[ti,SI,SS,SXS,XS,XBH,XBA,XI,SO,SNO,SNH,SND,XND,SALK,Qzu];
```



Anhang 6 – Konzentrationsprofile ausgewählter Parameter in den verschiedenen Biofilmschichten für das Anlagenmodell „merseburg4b“ zur Untersuchung verschiedener Temperaturterme (Versuchskläranlage der Universität Halle-Wittenberg zum „Getauchten Festbett“-Verfahren)

Variante 10:

Der neue Temperaturterm (siehe S. 55) wird für alle vorhandenen Einträge eingesetzt.

Variante 15:

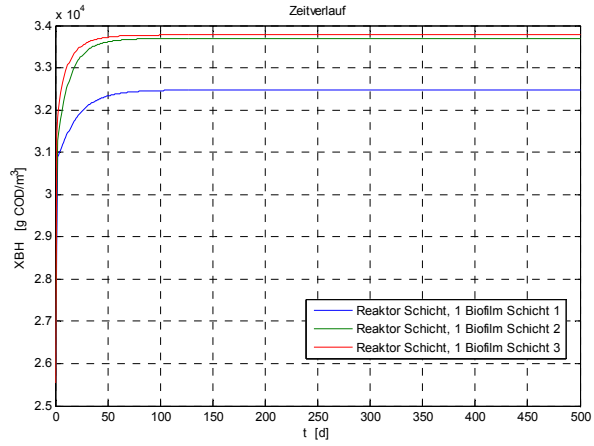
Der neue Temperaturterm (siehe S. 55) wird nur für das Wachstum ( $\mu_H$ ,  $\mu_A$ ) der heterotrophen und autotrophen Biomasse eingesetzt; bei allen anderen Parametern werden die T-Terme deaktiviert → Einfluß des neuen Terms auf die Konzentration der Biomassen soll betrachtet werden ohne andere Wechselwirkungen)

Variante 16:

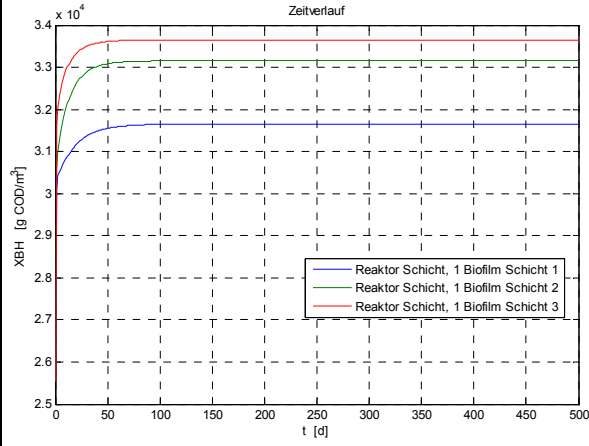
Der neue Temperaturterm (siehe S. 55) wird nur für das Wachstum ( $\mu_H$ ,  $\mu_A$ ) der heterotrophen und autotrophen Biomasse eingesetzt; bei allen anderen Parametern werden die T-Terme deaktiviert und zusätzlich der Term „ $f_T$ “ = 1 gesetzt.

Variante 10 / XBH

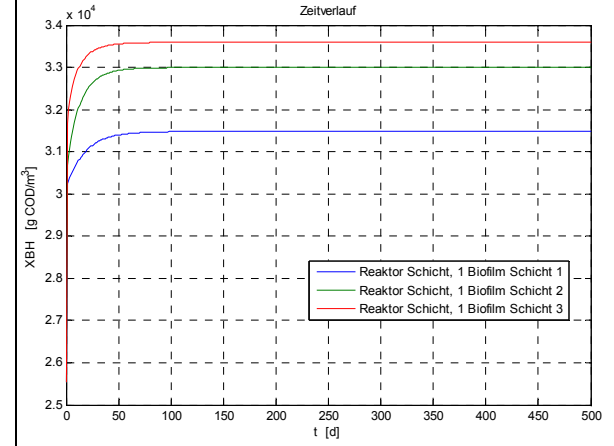
T = 10 °C



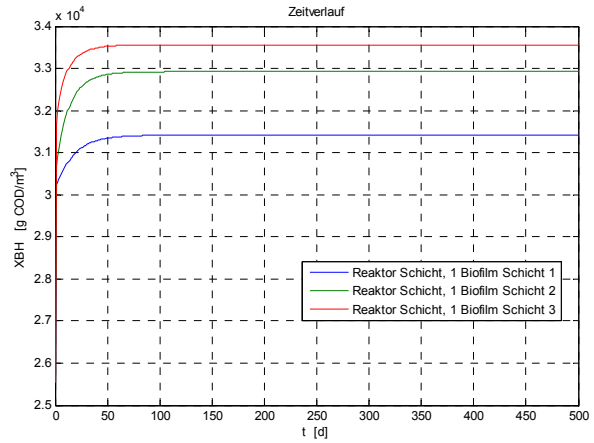
T = 20 °C



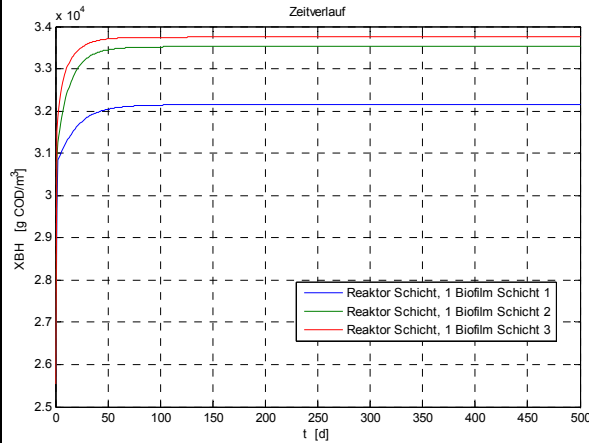
T = 25 °C



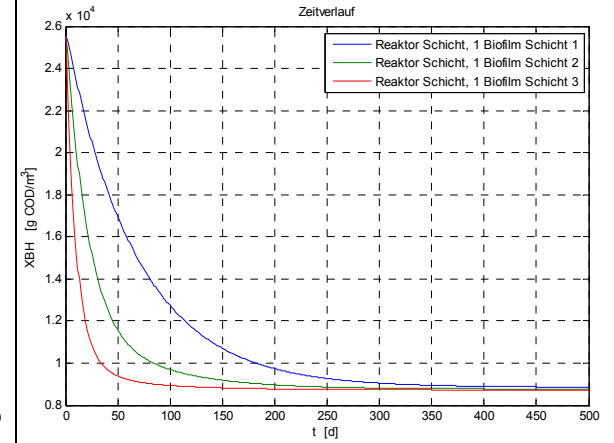
T = 30 °C



T = 40 °C

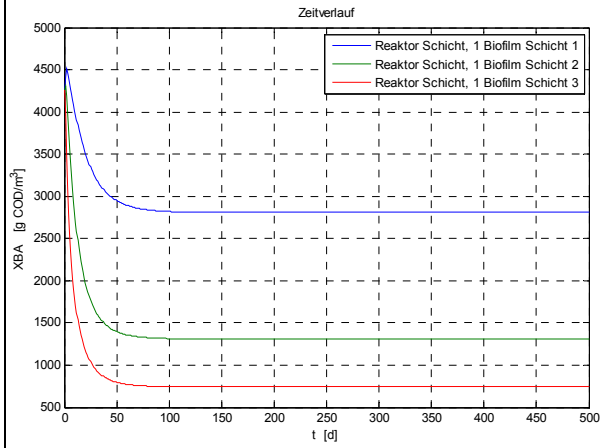


T = 50 °C

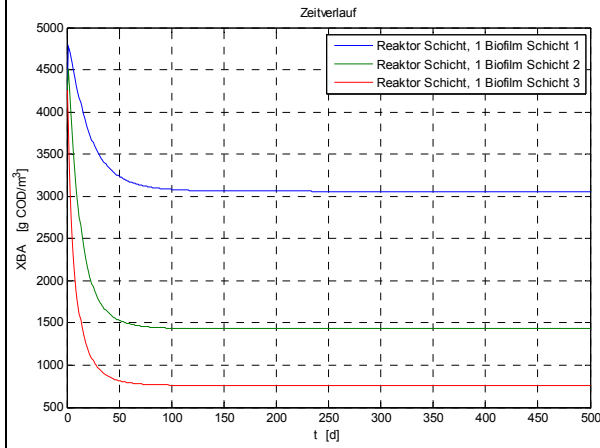


Variante 10 / XBA

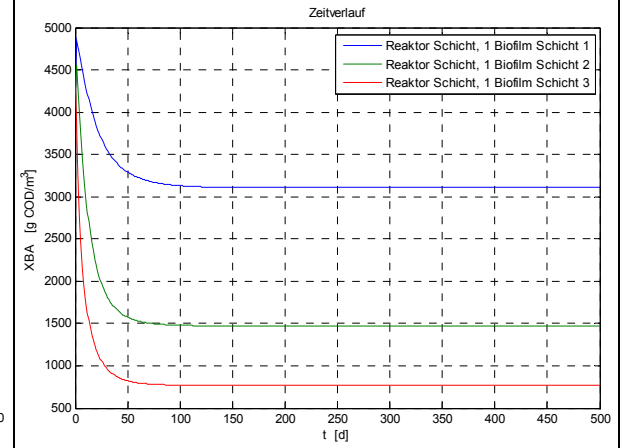
T = 10 °C



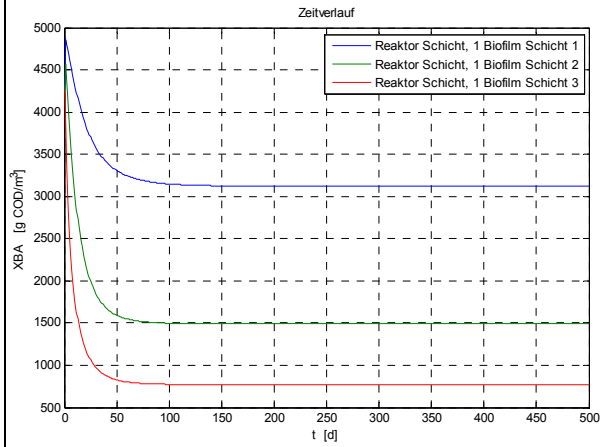
T = 20 °C



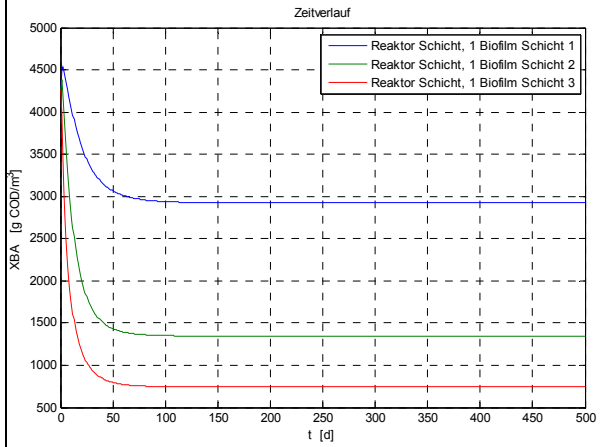
T = 25 °C



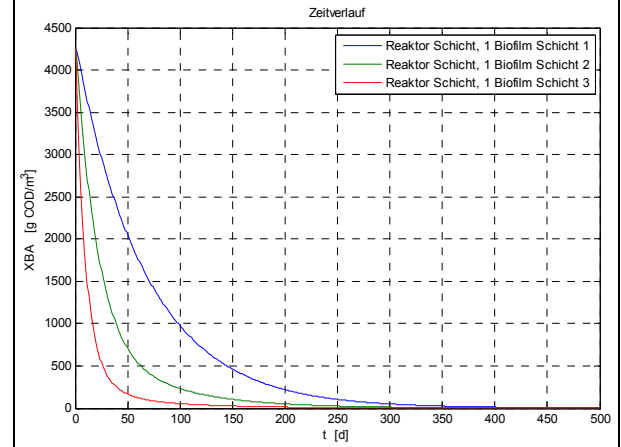
T = 30 °C



T = 40 °C

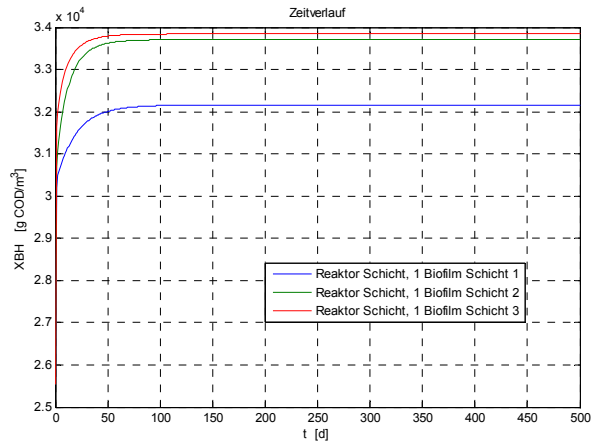


T = 50 °C

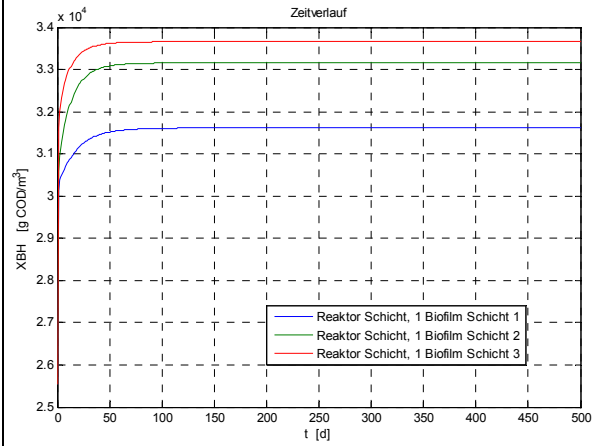


Variante 15 / XBH

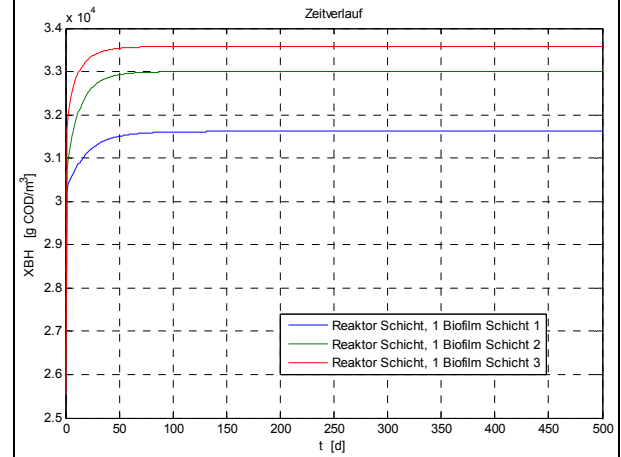
T = 10 °C



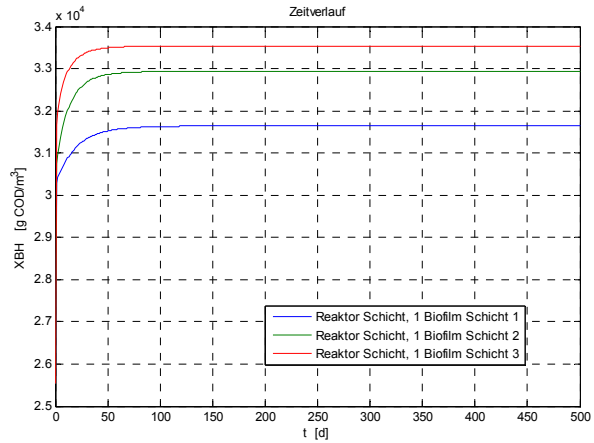
T = 20 °C



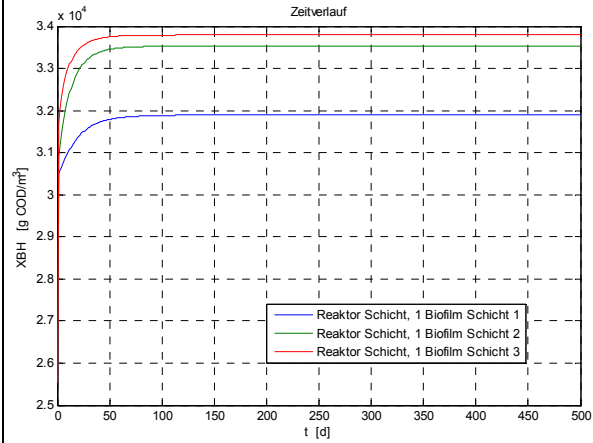
T = 25 °C



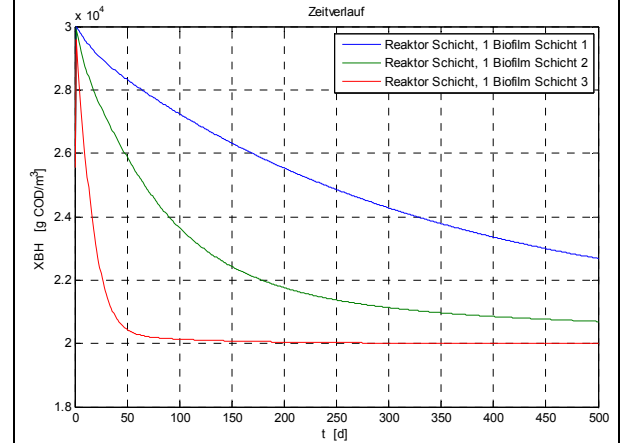
T = 30 °C



T = 40 °C

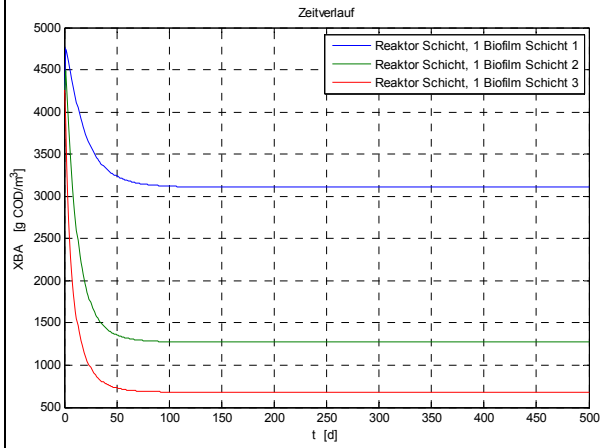


T = 50 °C

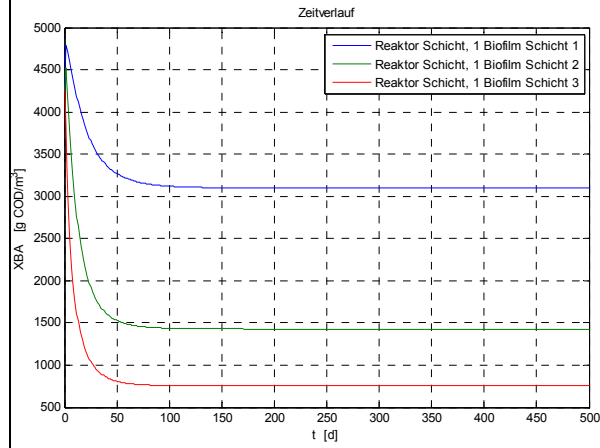


Variante 15 / XBA

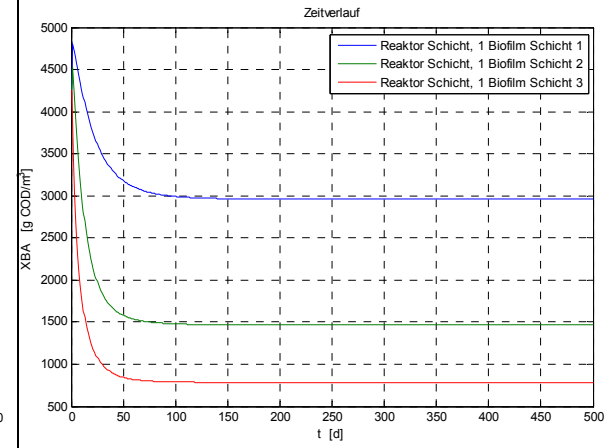
T = 10 °C



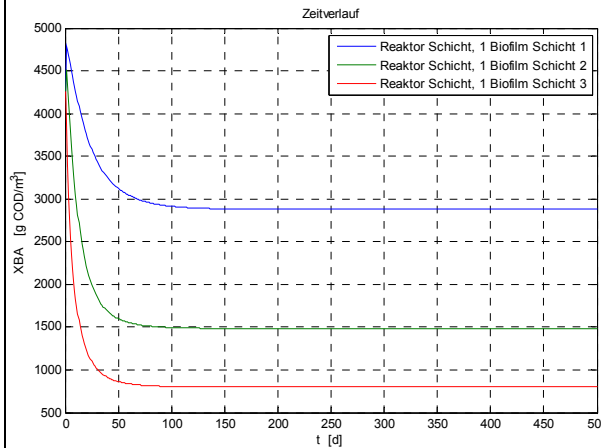
T = 20 °C



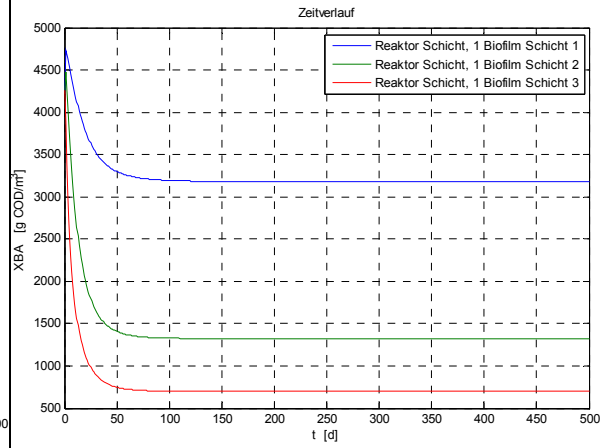
T = 25 °C



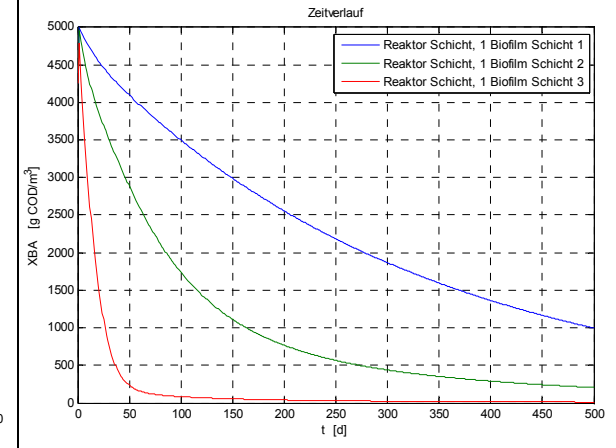
T = 30 °C



T = 40 °C

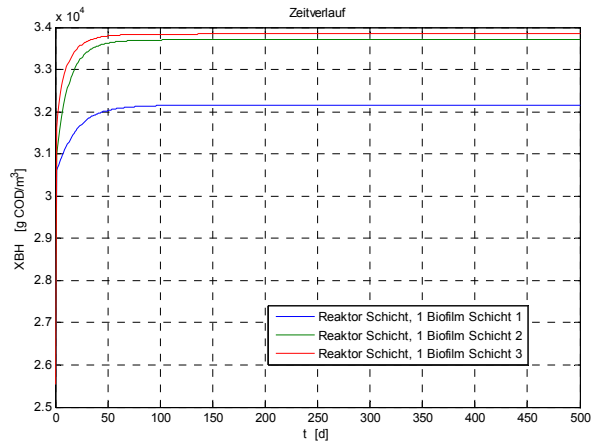


T = 50 °C

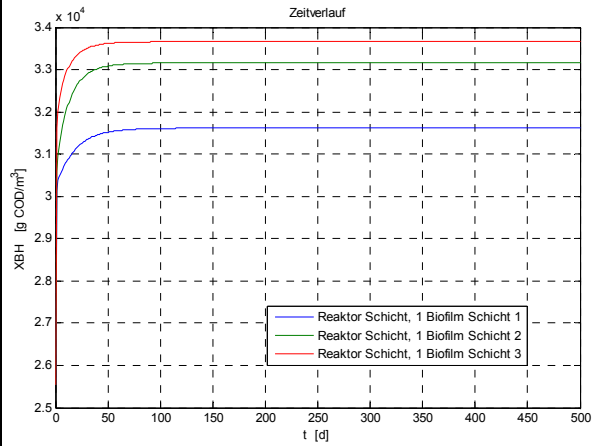


Variante 16 / XBH

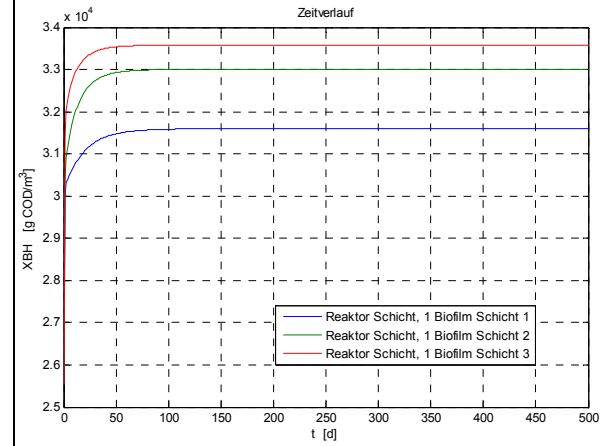
T = 10 °C



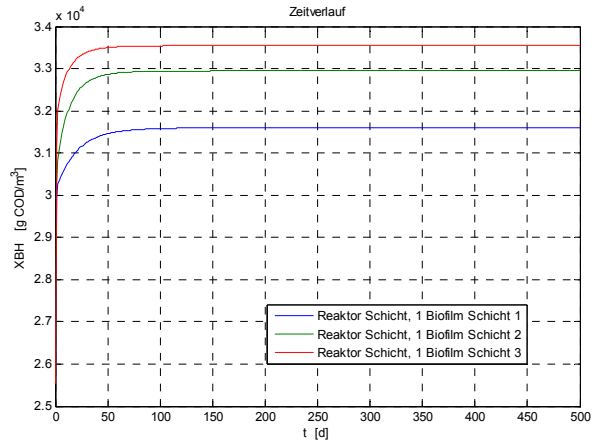
T = 20 °C



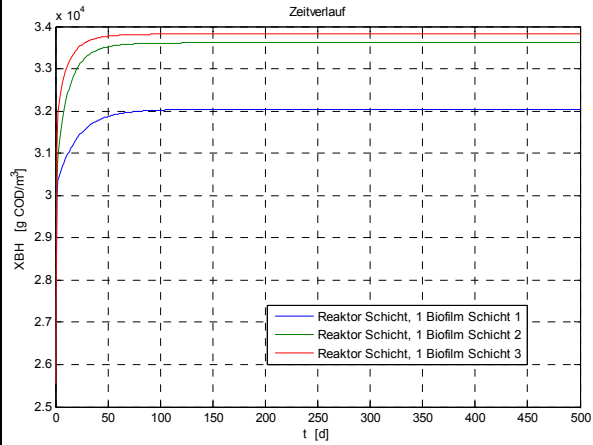
T = 25 °C



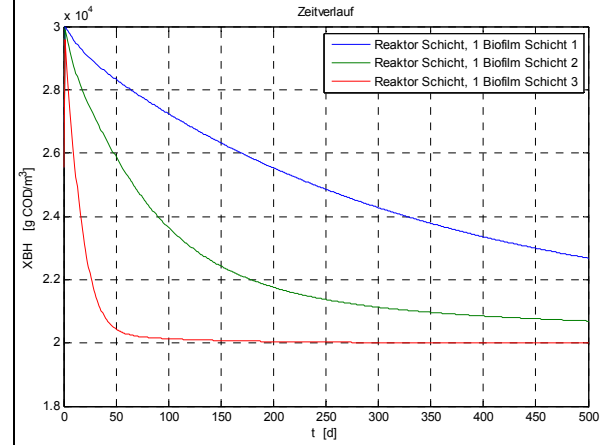
T = 30 °C



T = 40 °C

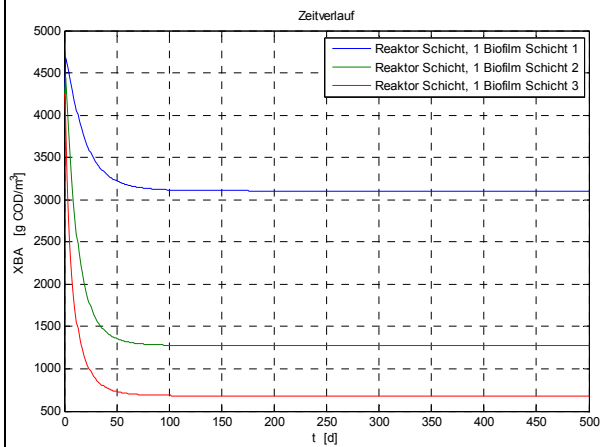


T = 50 °C

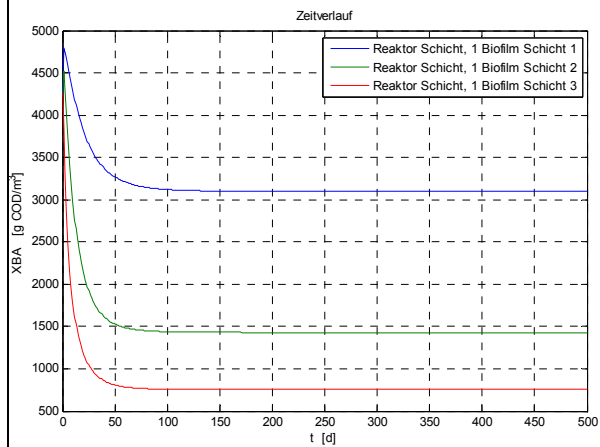


Variante 16 / XBA

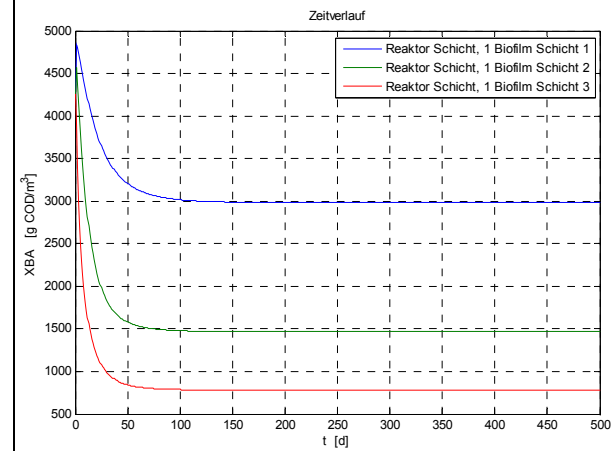
T = 10 °C



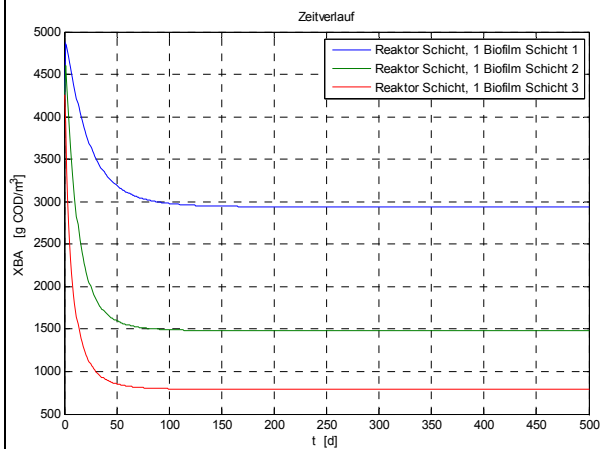
T = 20 °C



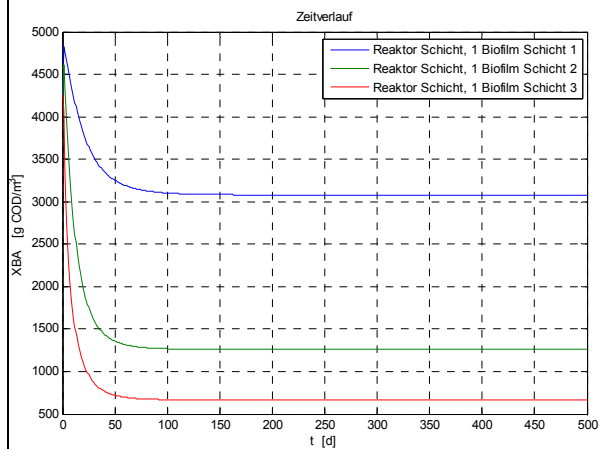
T = 25 °C



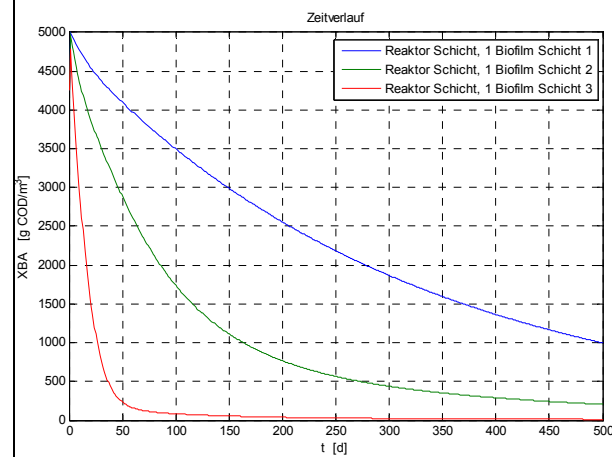
T = 30 °C



T = 40 °C



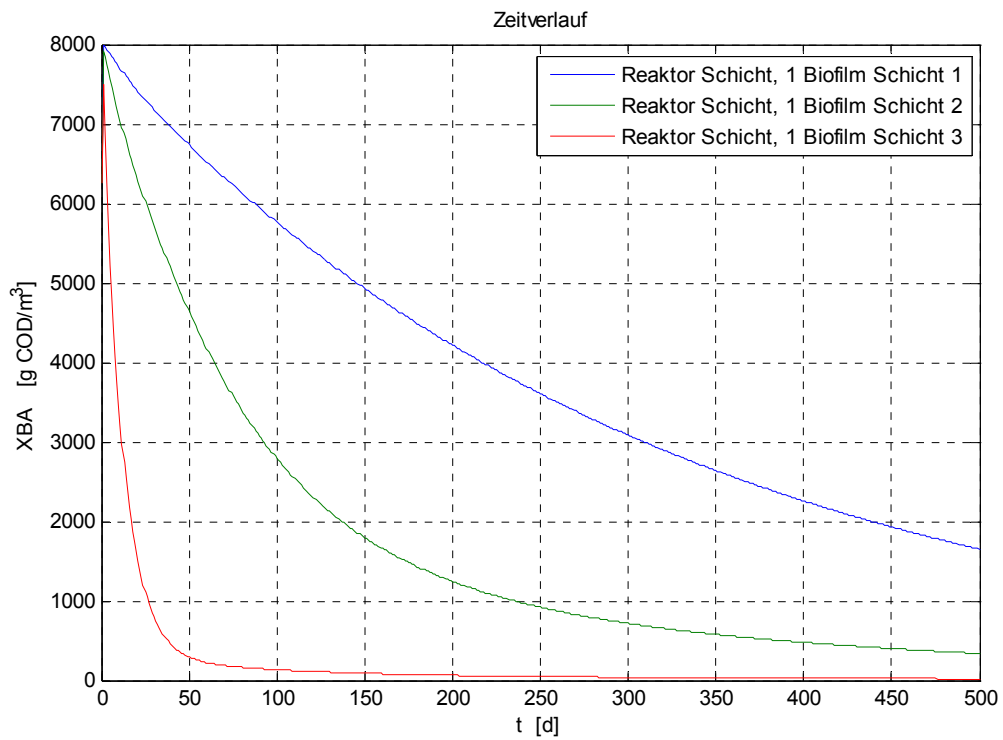
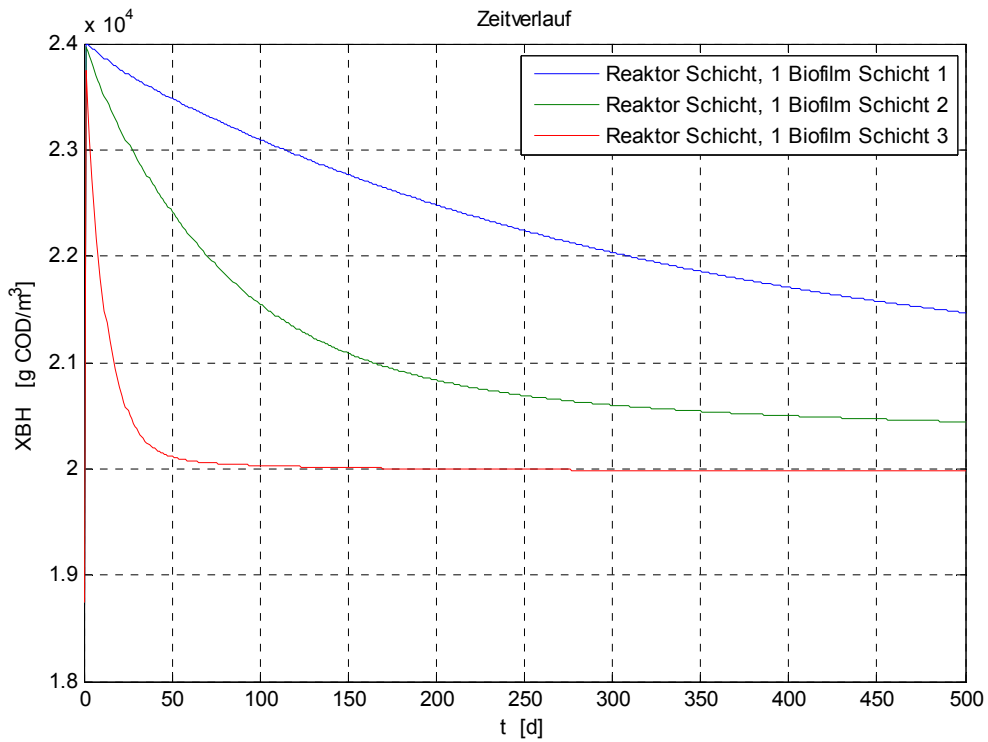
T = 50 °C



Untersuchung der Fragestellung, warum die Konzentration der heterotrophen Biomasse bei  $T = 50\text{ °C}$  nicht bis auf 0 zurückgeht, sondern nur bis auf einen bestimmten Grenzwert.

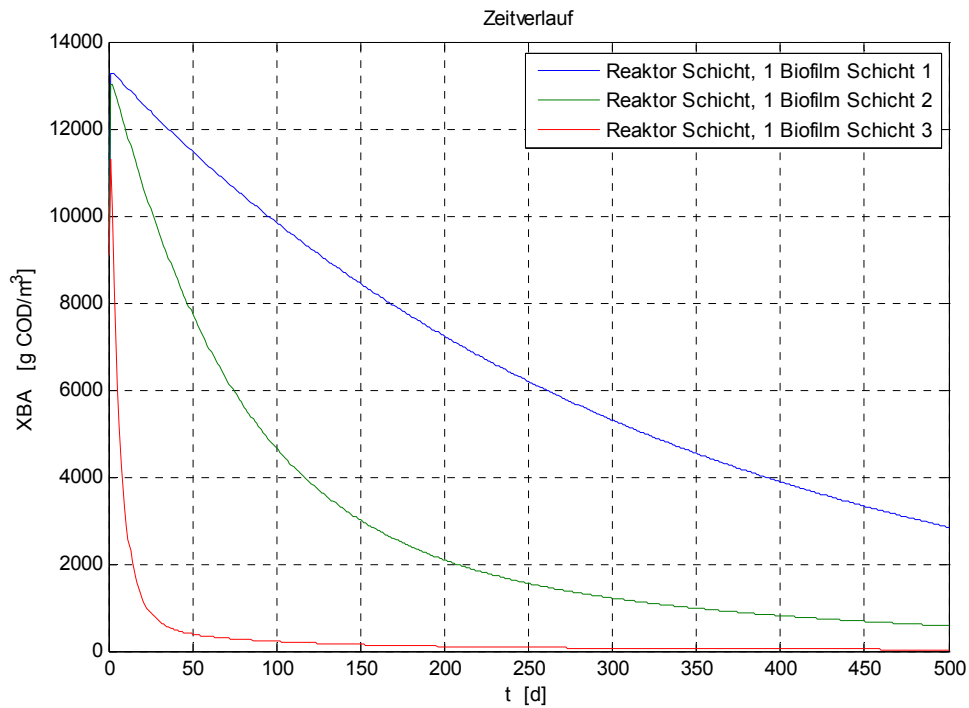
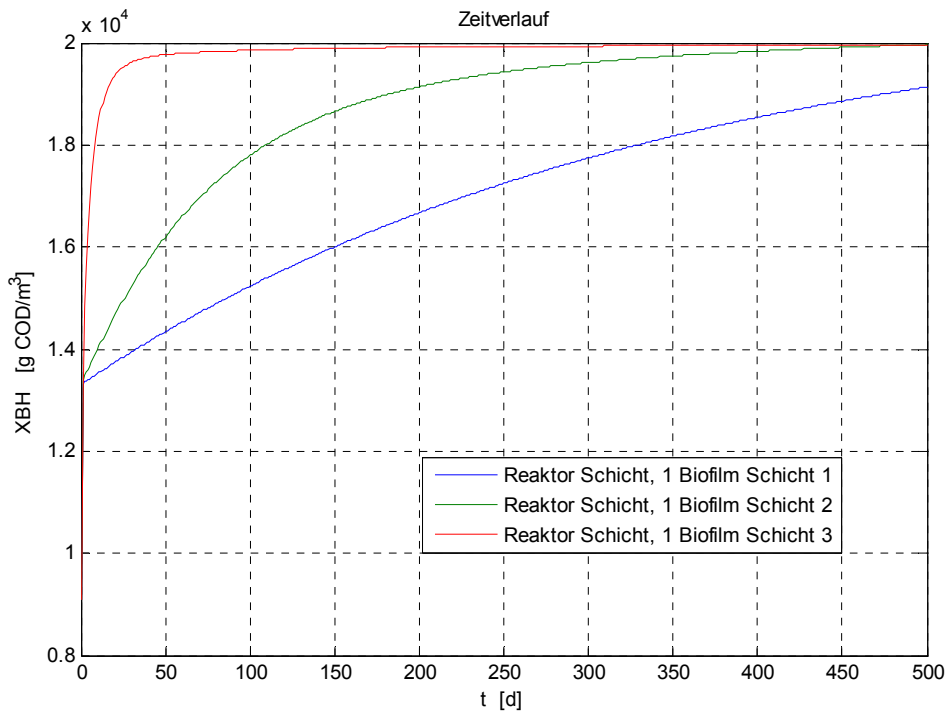
1) Variation der Defaultkonzentration von XBH im Modell:

Defaultwert in der Datei „*asm1biof.pfox3*“ von 6000 auf 3000 verringert:





Defaultwert in der Datei „asm1biof.pfox3“ von 6000 auf 1000 verringert:



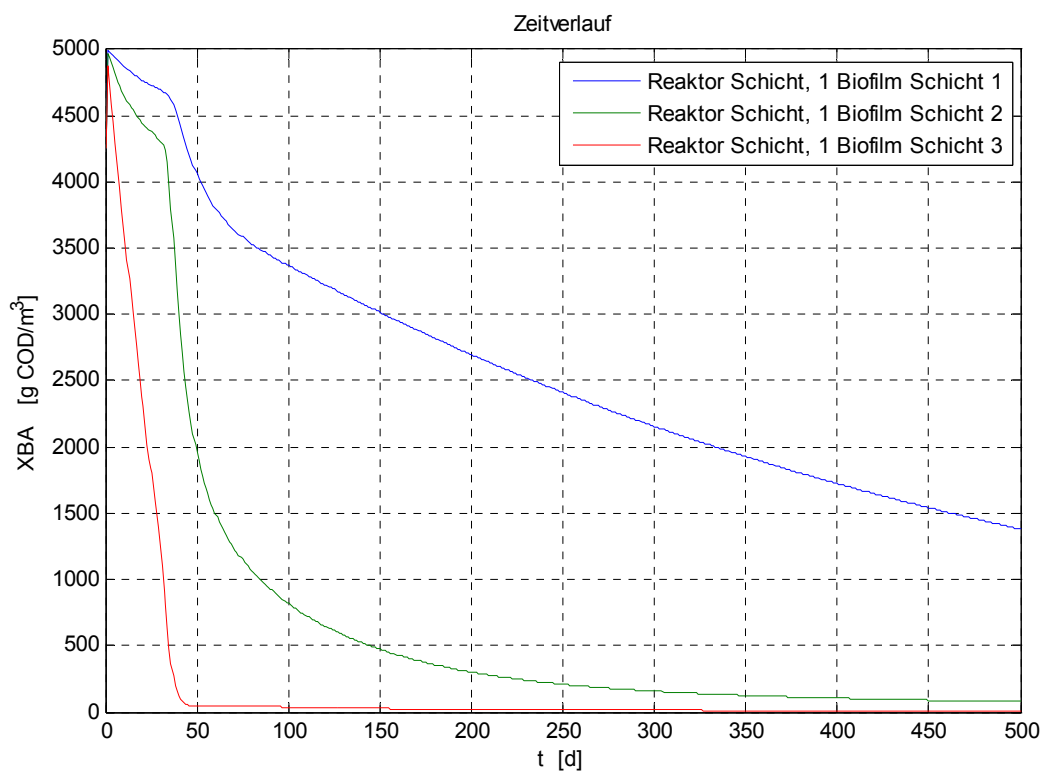
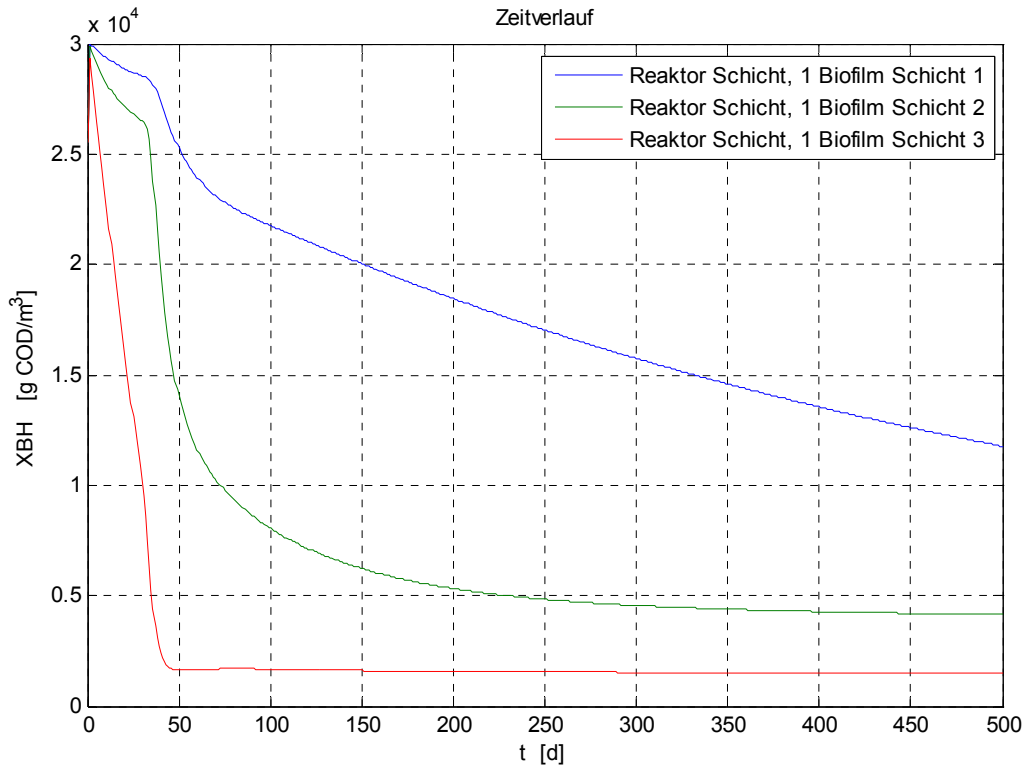
Ergebnis: Es ändert sich nur die Ausgangskonzentration. Danach nähern sich die Konzentrationsverläufe den Endkonzentrationen des unveränderten Modells an.

2) Variation der Defaultkonzentration von XBH im Zulauf (geänderte CSB-Fraktionierung):

Änderung im Tagesgang-file „tgang\_biofm.m“:

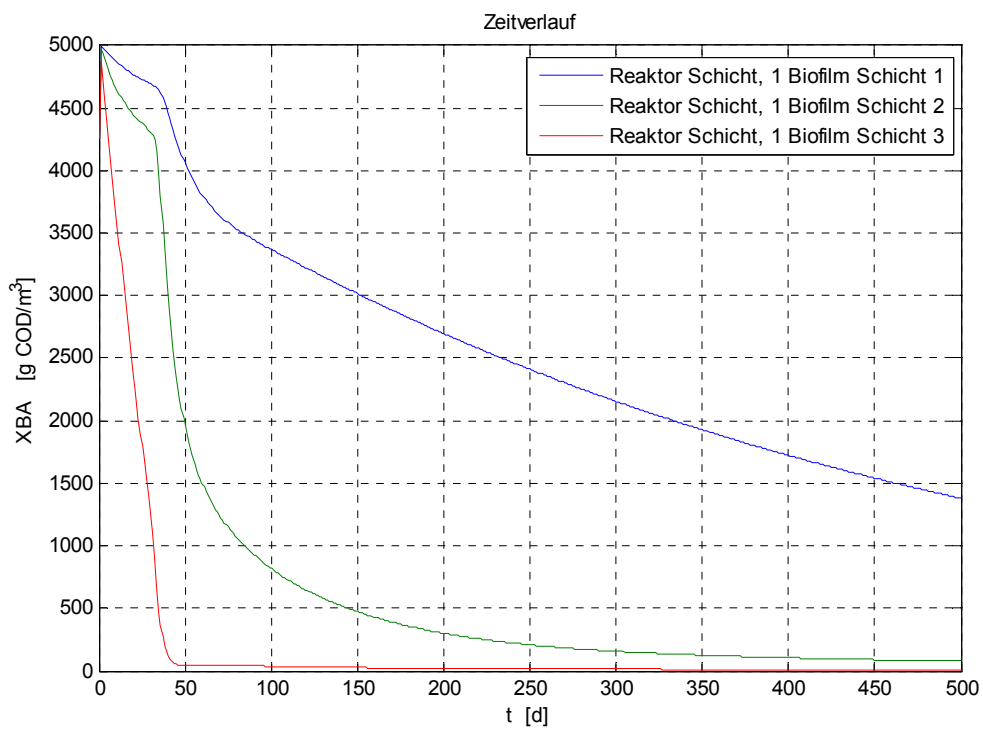
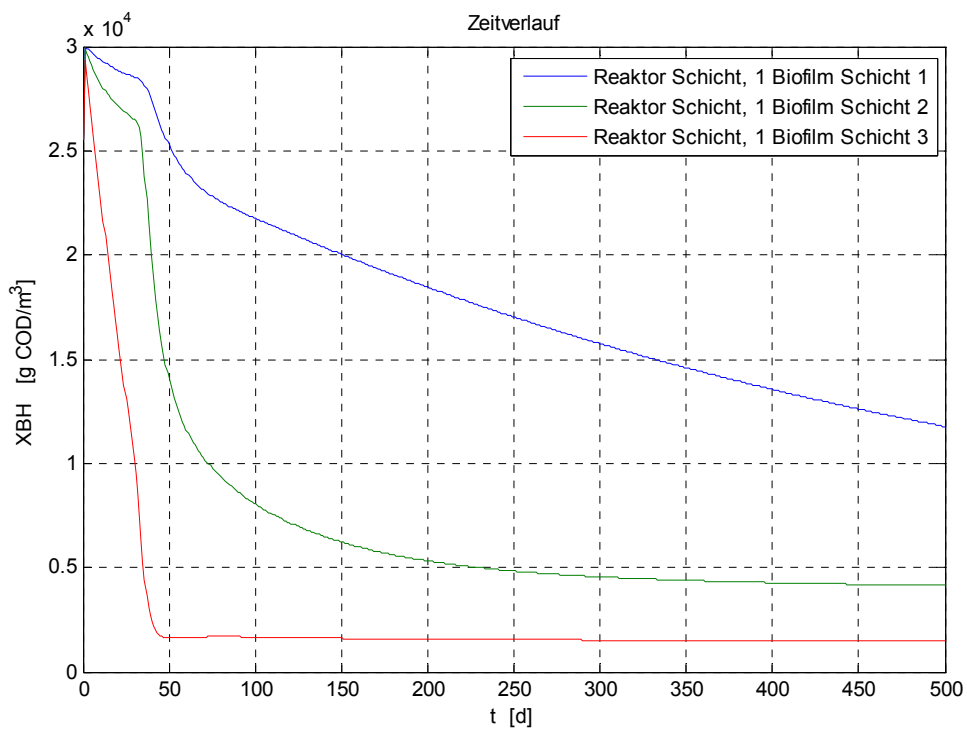
$cSs = 0.20$  auf  **$cSs = 0.29$**

und  $cXbh = 0.10$  auf  **$cXbh = 0.01$**



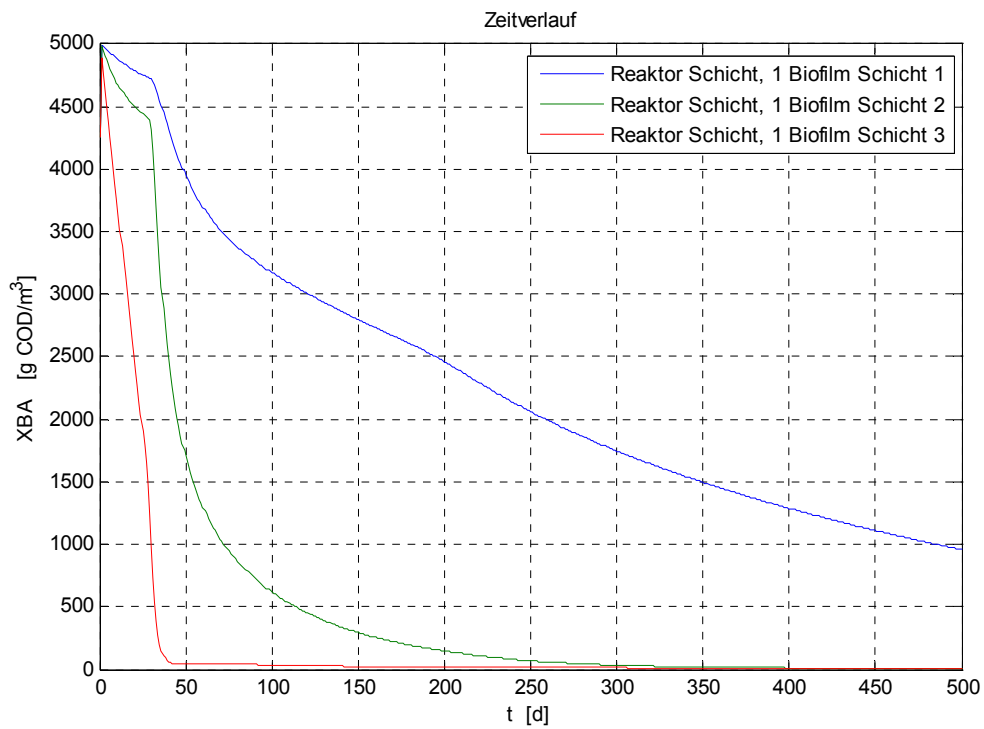
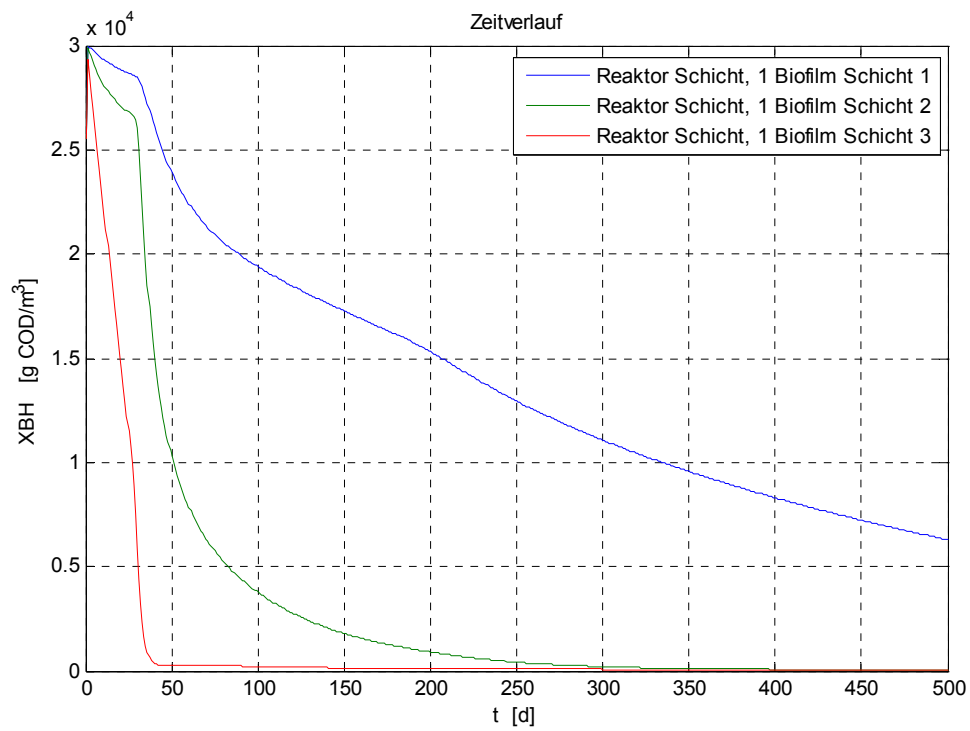
(Anmerkung: Der neue Temperaturterm wird **nur** für das Wachstum ( $\mu_H$ ,  $\mu_A$ ) der heterotrophen und autotrophen Biomasse eingesetzt; bei allen anderen Parametern werden die T-Terme deaktiviert und zusätzlich der Term „fTs“ = 1 sowie die beiden Absterberaten  $b_A$  und  $b_H = 0$  gesetzt)

Änderung im Tagesgang-file „tgang\_biofm.m“:  $c_{Ss} = 0.20$  auf  **$c_{Ss} = 0.30$**   
 und  $c_{Xbh} = 0.10$  auf  **$c_{Xbh} = 0$**

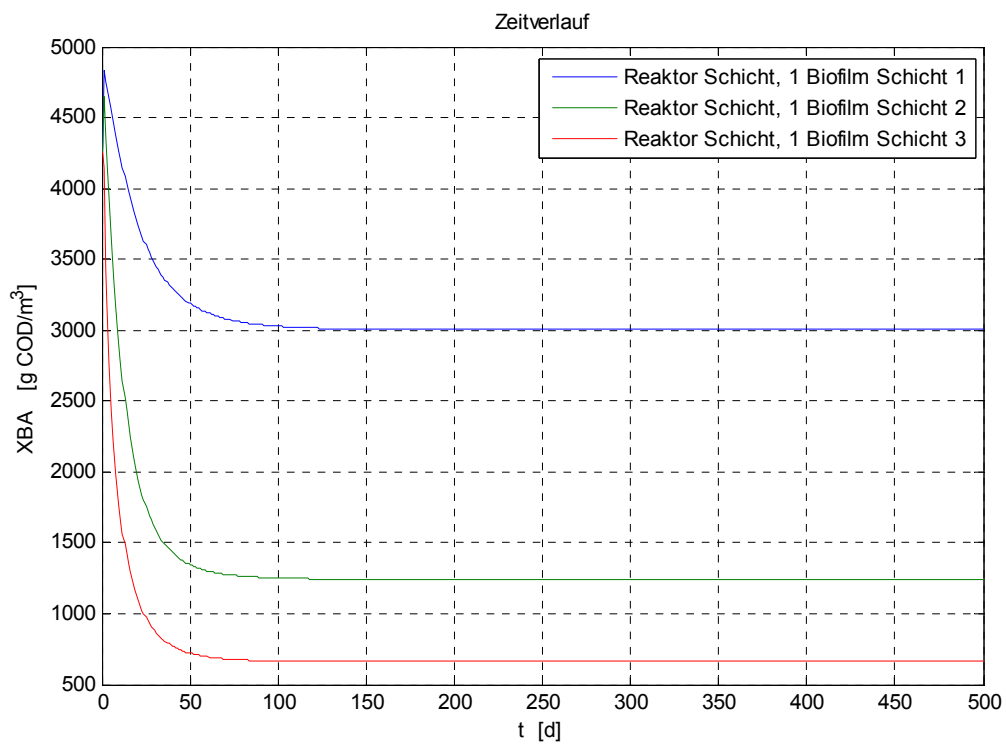
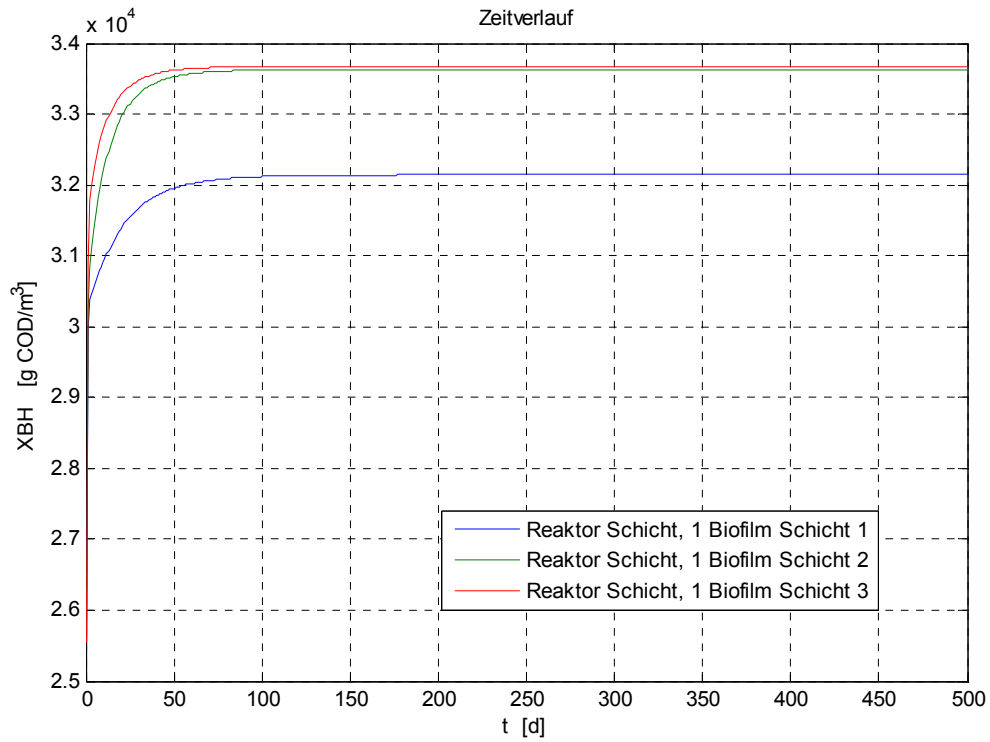


Variation des Modellansatzes:

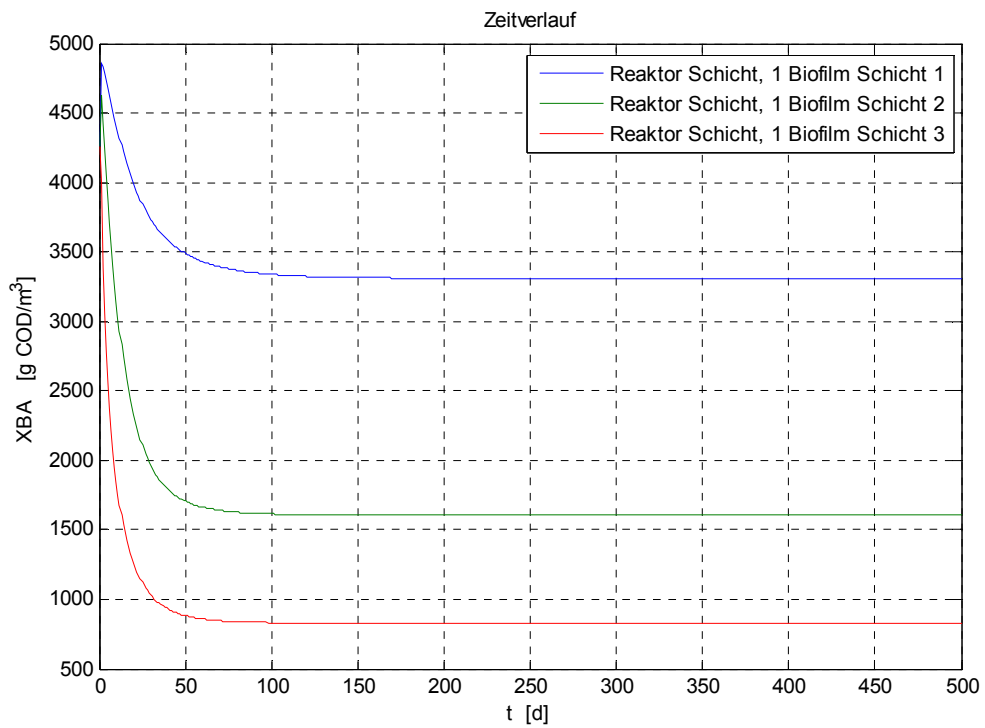
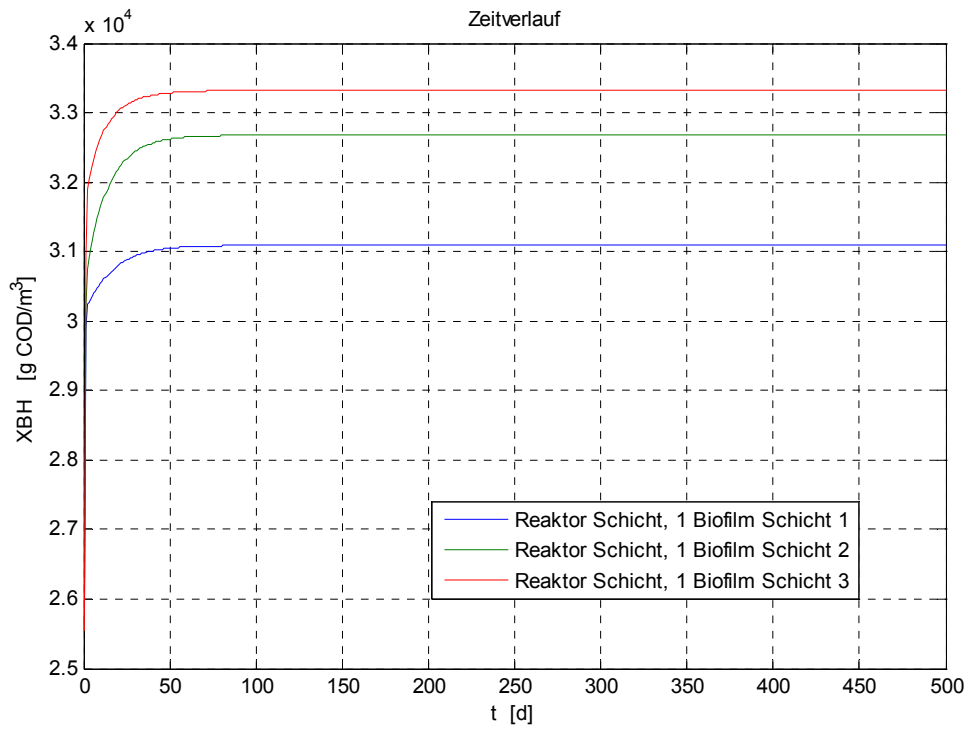
Die beiden Absterbeprozesse wurden vollständig aus der Modellmatrix entfernt und entsprechend auch die Absterberaten  $b_A$  und  $b_H$  aus dem Parameterfile.



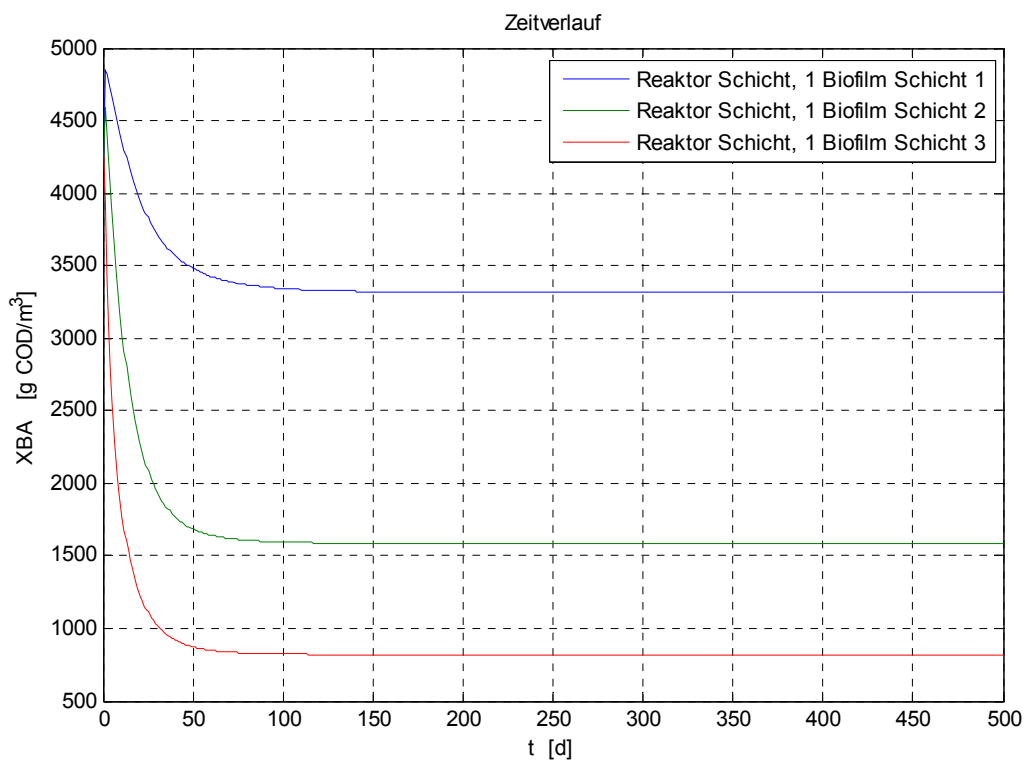
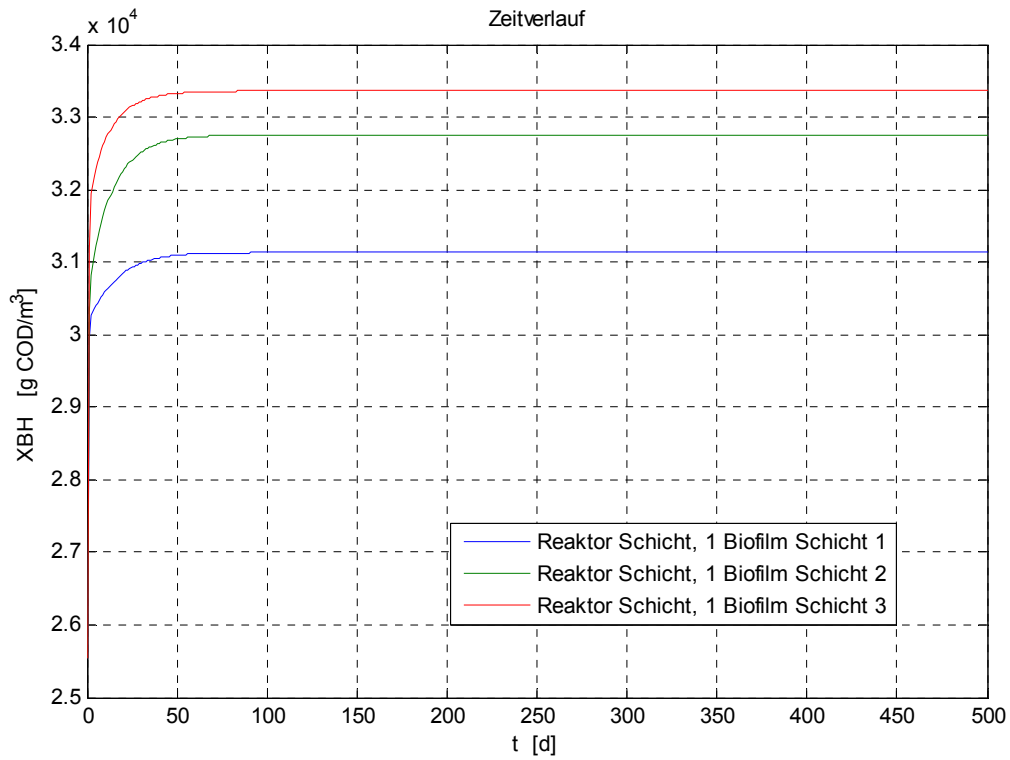
T = 40 °C



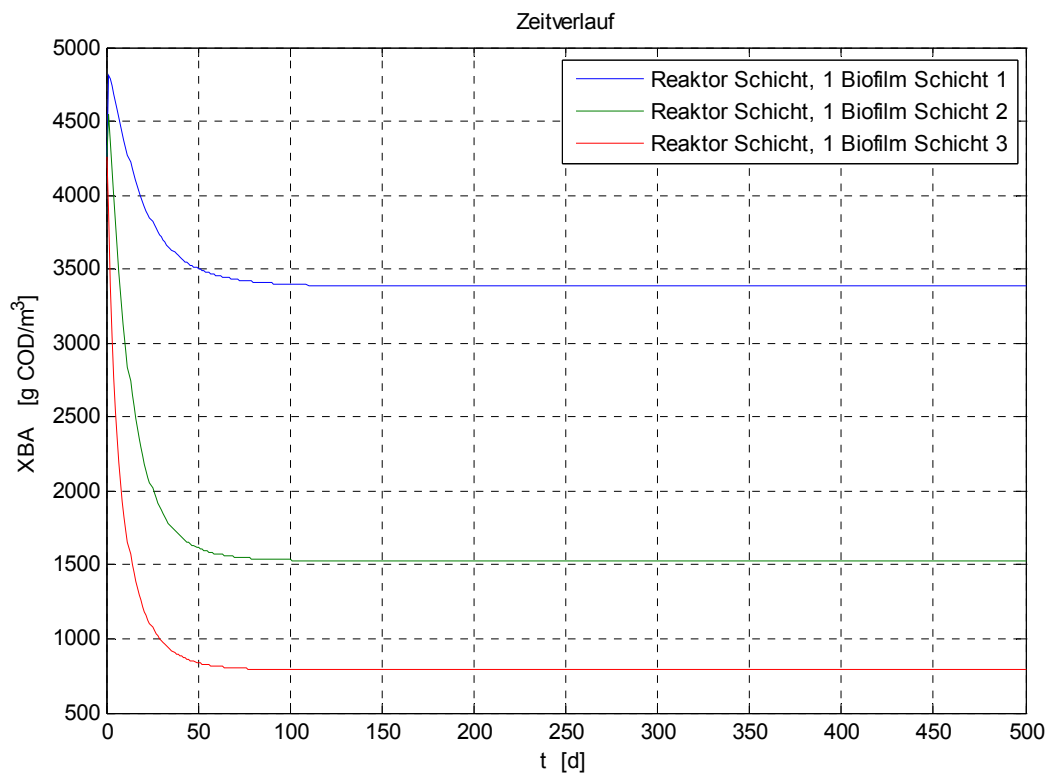
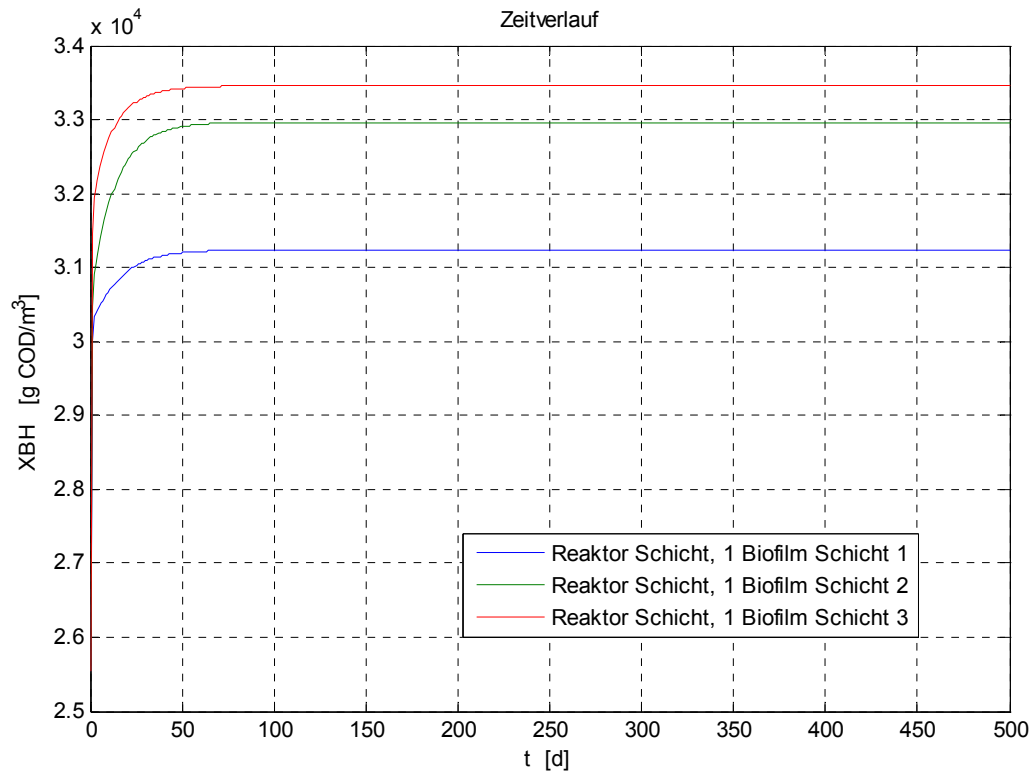
T = 30 °C



T = 25 °C

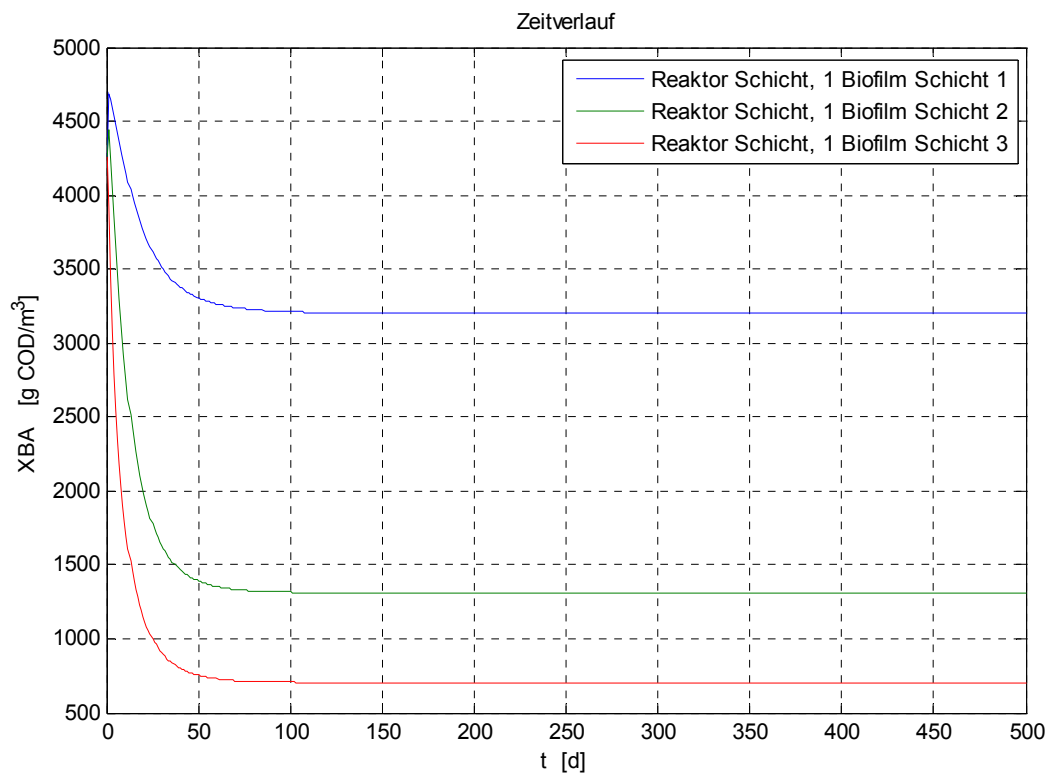
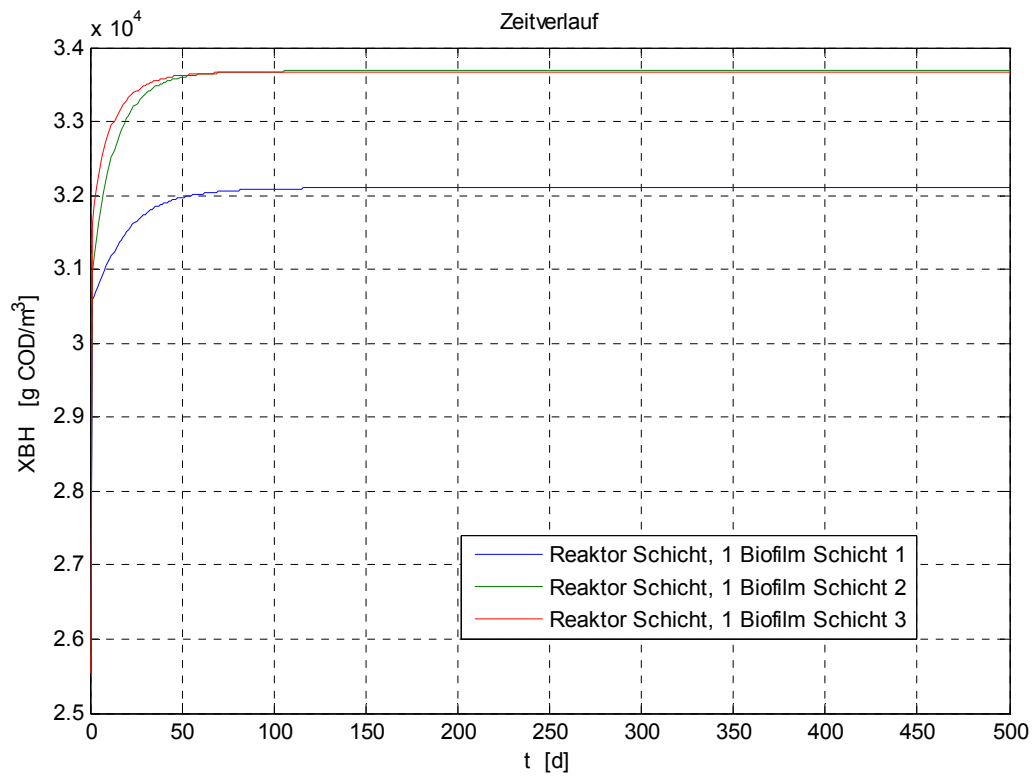


T = 20 °C





T = 10 °C



Anhang 7 – Quellcode des für die Vorgabe der Zulaufkonzentrationen (Versuchskläranlage der Universität Karlsruhe zum Scheibentauchkörperverfahren) erstellten m-files „tgang\_biofm.m“

```
function [ytg] = tgang_biofm(Q)
% tgang [ytg] = tgang(Q)
%
% Berechnet den Tagesgang für die Versuchsanlage Karlsruhe
% (BMBF-Verbundprojekt)
%
% evaluate the daily hydrograph of an example plant
%
% i f a k Institut fuer Automation und Kommunikation e.V. Magdeburg
% Steinfeldstr. (IGZ), 39179 Barleben
% EUTEC Institut fuer Umwelttechnik
% Constantiaplatz 4, 26723 Emden
%
%
% Aenderungen Autor, Datum, Version, Anlass
%
% J. Alex; R. Tschepetzki, 17.3.1994, Simba 2.0, Erstellung der Datei
% J. Alex 24.6.1994, Simba 2.0, Erweiterung um Volumenstrom
% F. Uhlenhut, 06.6.2008, Erstellung des Tagesgangs

% Zufluß in m^3/d (Mittelwert = 0.00283)
Qzu = 24*Q/0.06792*[0.00283 0.00283 0.00283 0.00283 0.00283 0.00283 0.00283 0.00283
0.00283 0.00283 0.00283 0.00283 0.00283 0.00283 0.00283 0.00283 0.00283 0.00283
0.00283 0.00283 0.00283 0.00283 0.00283 0.00283 0.00283 0.00283 0.00283 0.00283]';

% Konzentration für den BSB5 im Zulauf zur Biologie (Mittelwert = 212)
BSB5 = [212 212 212 212 212 212 212 212 212 212 212 212 212 212 212 212 212 212
212 212 212 212 212 212 212 212]';

% Konzentration für den gesamten CSB im Zufluß zur Biologie;
CSB = BSB5.*(1/0.85);

% Konzentration für ges. Kjeldahl Stickstoff im Zufluß (Mittelwert = 54.7);
TKN = [54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7
54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7 54.7]';

% Konzentration für Ammonium NH4 (Mittelwert = 41.2)
NH4 = [41.2 41.2 41.2 41.2 41.2 41.2 41.2 41.2 41.2 41.2 41.2 41.2 41.2 41.2 41.2
41.2 41.2 41.2 41.2 41.2 41.2 41.2 41.2 41.2 41.2 41.2]';

% Konzentration Nitrat/Nitrit (Mittelwert = 1)
NO3 =[1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1]';

% Konzentration für Bikarbonat im Zufluß ;
% Salk = [7.4 7.3 7.4 8.2 7.7 7.8 8.0 7.8 7.6 7.3 7.7 8.0 7.9 7.6 7.7 7.7
7.7 7.6 7.6 7.3 7.3 7.4 7.5 7.5 7.4]';

ti = [0:(1/24):1]';
m=size(ti,1);

cSi = 0.01; %Anteil biologisch inerter, gelöster Stoffe
cSs = 0.95; %Anteil biologisch schnell abbaubarer, gelöster Stoffe
cXi = 0.01; %Anteil biologisch inerter, partikulärer Stoffe
cXs = 0.01; %Anteil biologisch schwer abbaubarer, partikulärer Stoffe
cSxs = 0.02; %Anteil biologisch schwer abbaubarer, gelöster Stoffe
cXbh = 0; %Anteil aktive heterotrophe Biomasse
```

```

nSs = 0.03;      %Anteil biologisch schnell abbaubarer, gelöster Stoffe
nXs = 0.04;      %Anteil biologisch schwer abbaubarer, partikulärer Stoffe

Si = CSB.*cSi;   %Biologisch inerte, gelöste Substanzen [g CSB/m³]
Ss = CSB.*cSs;   %Biologisch schnell abbaubare, gelöste Substanzen [g
CSB/m³]
Xi = CSB.*cXi;   %Biologisch inerte, partikuläre Substanzen [g CSB/m³]
Xs = CSB.*cXs;   %Biologisch schwer abbaubare, partikuläre Substanzen [g
CSB/m³]
Sxs = CSB.*cSxs; %Biologisch schwer abbaubare, gelöste Substanzen [g
CSB/m³]
Xbh = CSB.*cXbh; %Aktive heterotrophe Biomasse [g CSB/m³]

Xba = 0.01*ones(m,1); %Aktive autotrophe Biomasse [g CSB/m³]
So = 0.6*ones(m,1);  %Sauerstoffkonzentration [g/m³]
Sno = NO3;           %Nitratkonzentration [g/m³]
Snh = NH4;           %Ammoniumkonzentration [g/m³]

SND = nSs.*Ss;
XND = nXs.*(Xs+Sxs);

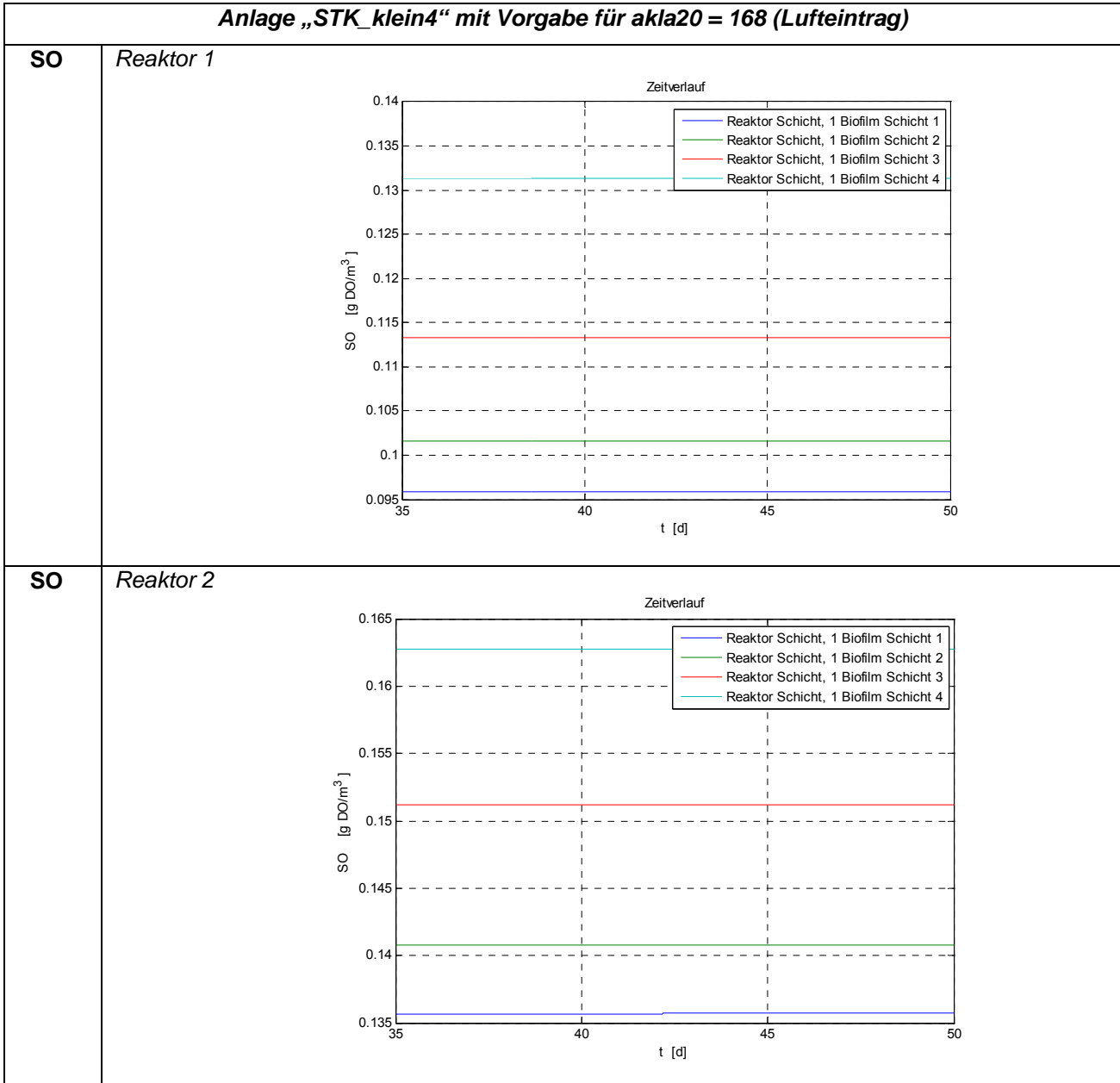
Salk= 7.0*ones(m,1); %Alkalinität [mol/m³]

%%%%%%%%%%%%%%
%Tagesgangmatrix%
%%%%%%%%%%%%%%
ytg = [ti,Si,Ss,Sxs,Xs,Xbh,Xba,Xi,So,Sno,Snh,SND,XND,Salk,Qzu];

```

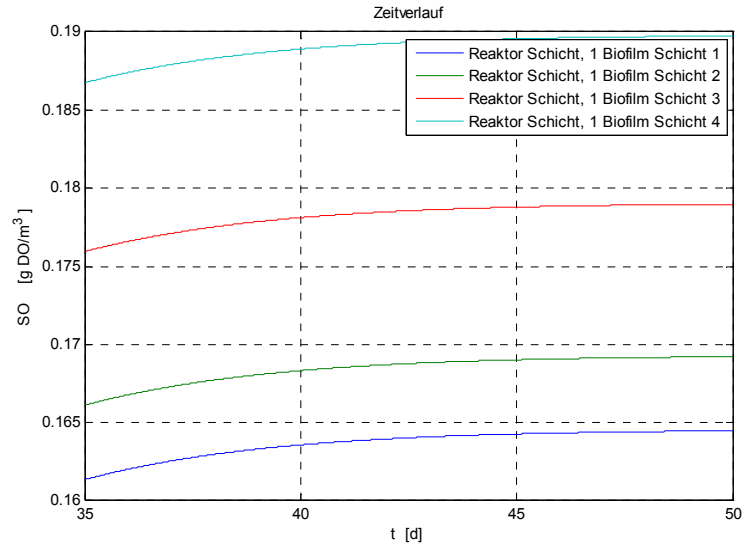
Anhang 8 – Konzentrationsprofile ausgewählter Parameter in den verschiedenen Biofilmschichten für die drei Biofilmreaktor-Blöcke des Anlagenmodells „STK\_klein4“ (Versuchskläranlage der Universität Karlsruhe zum Scheibentauchkörperverfahren)

Anlage „STK\_klein4“ mit Vorgabe für  $akla20 = 168$  (Lufteintrag)



SO

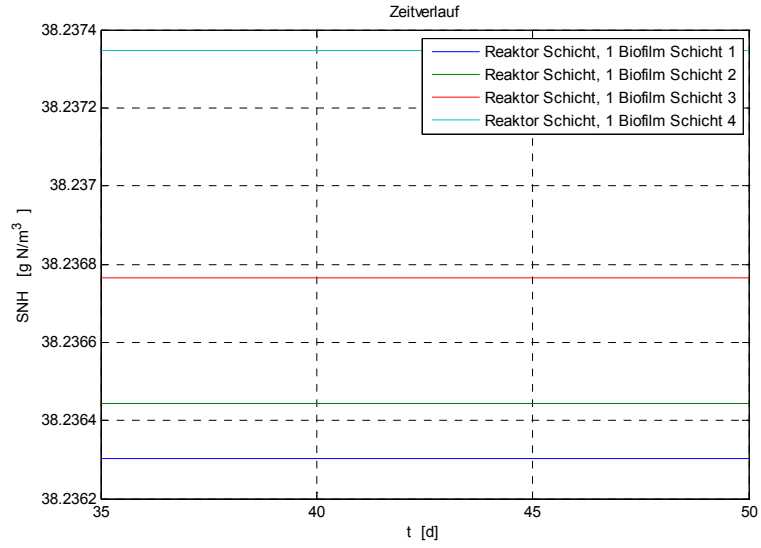
Reaktor 3



Anlage „STK\_klein4“ mit Vorgabe für akla20 = 168 (Lufteintrag)

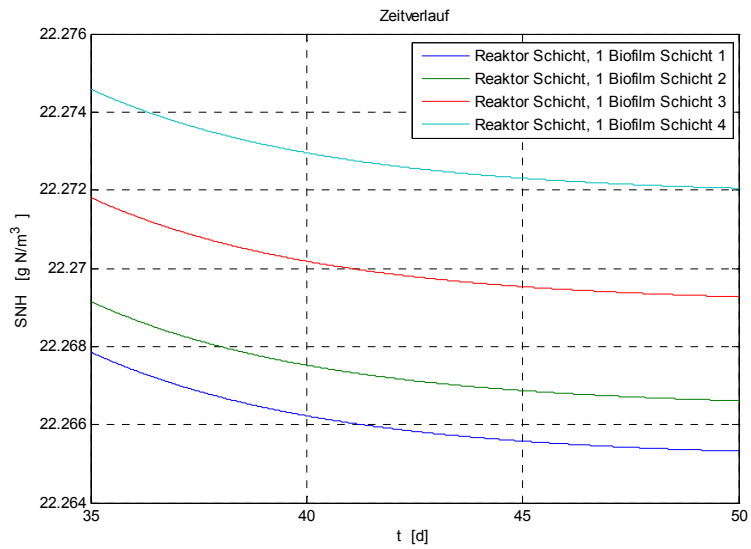
SNH

Reaktor 1



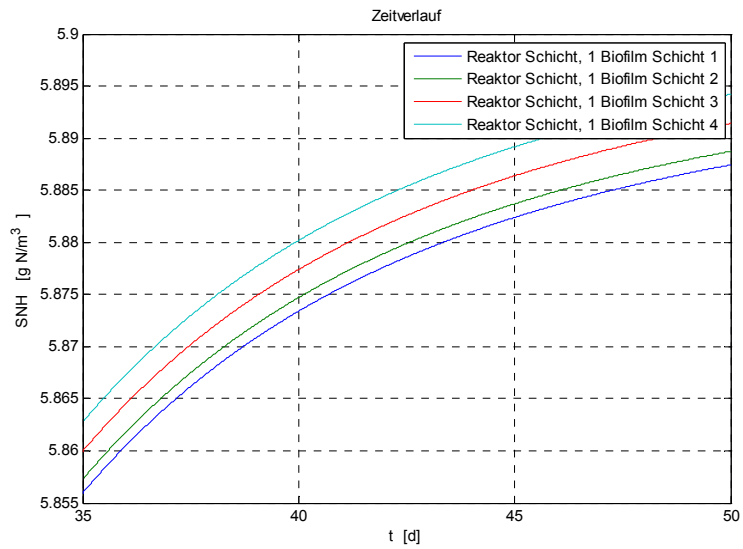
SNH

Reaktor 2

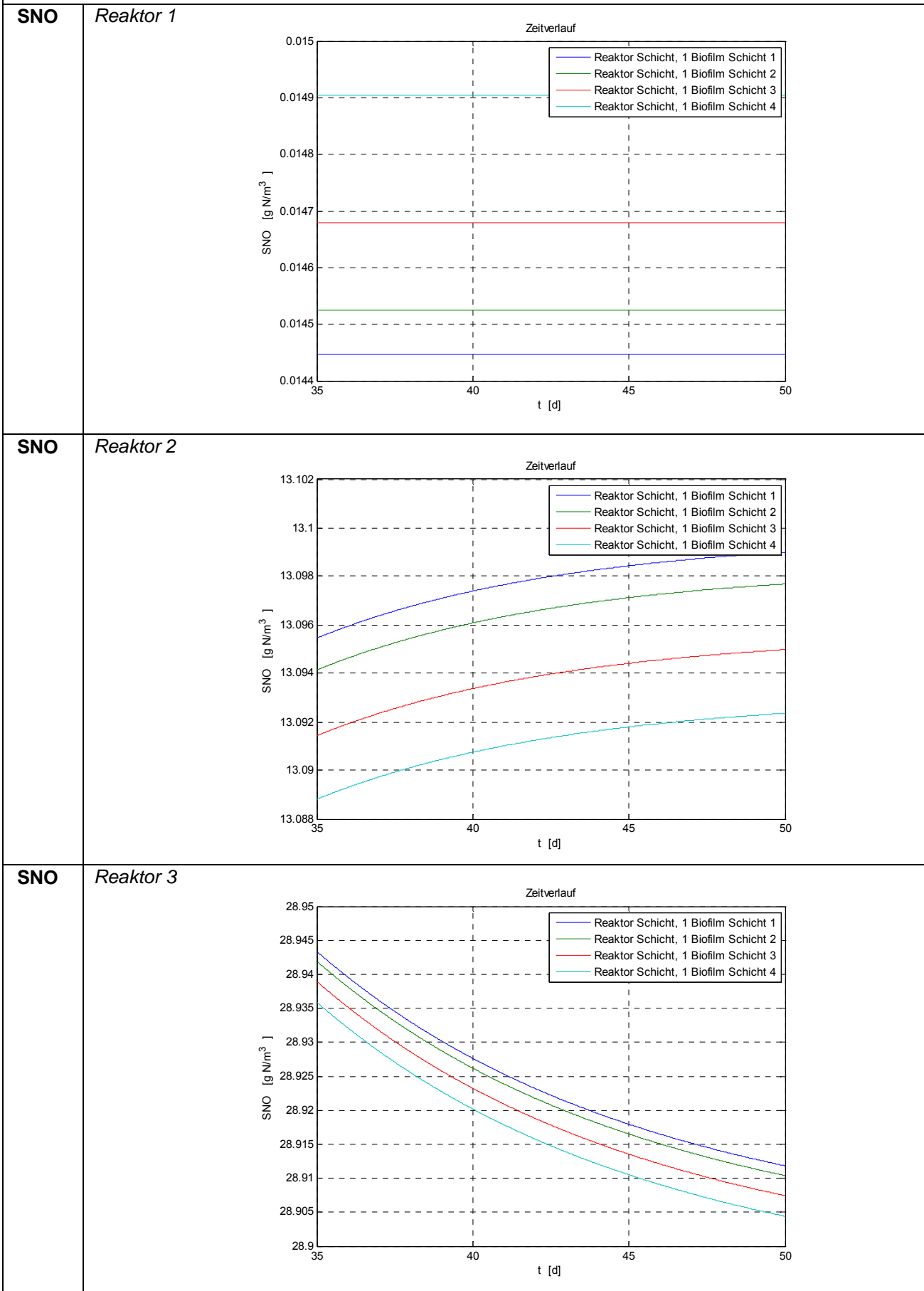


SNH

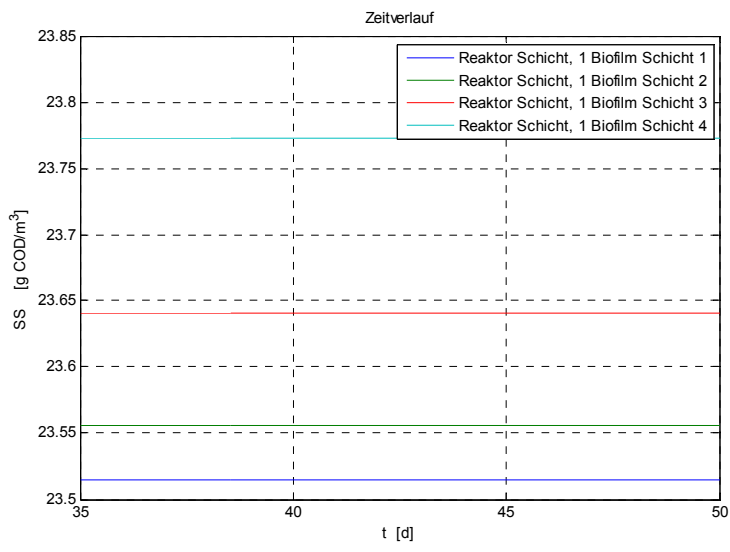
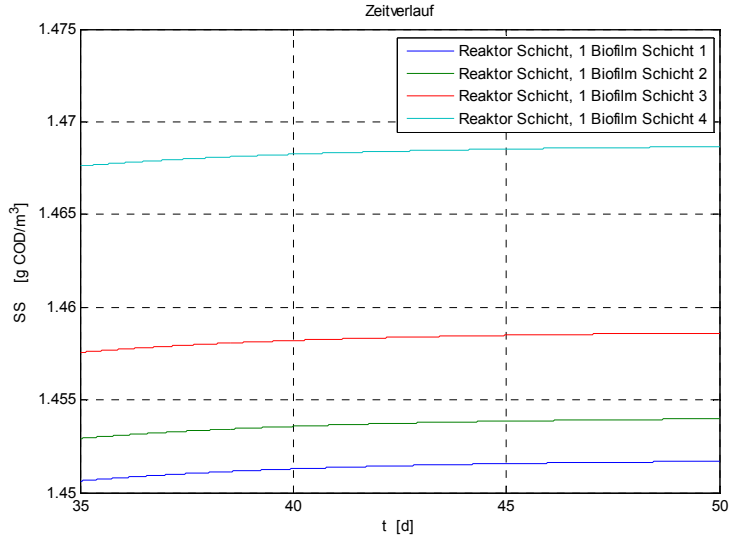
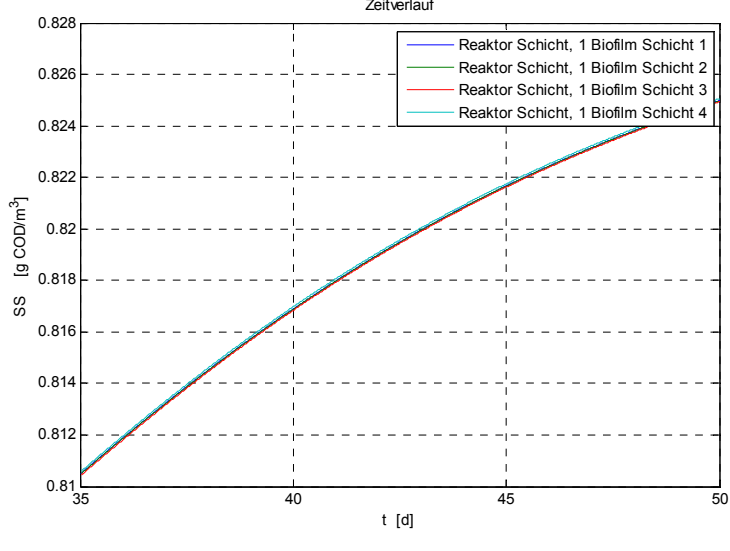
Reaktor 3



**Anlage „STK\_klein4“ mit Vorgabe für akla20 = 168 (Lufteintrag)**



Anlage „STK\_klein4“ mit Vorgabe für akla20 = 168 (Lufteintrag)

<p><b>SS</b></p>	<p>Reaktor 1</p>  <p>Zeitverlauf</p> <p>SS [g COD/m<sup>3</sup>]</p> <p>t [d]</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 1</li> <li>Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 2</li> <li>Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 3</li> <li>Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 4</li> </ul>
<p><b>SS</b></p>	<p>Reaktor 2</p>  <p>Zeitverlauf</p> <p>SS [g COD/m<sup>3</sup>]</p> <p>t [d]</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 1</li> <li>Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 2</li> <li>Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 3</li> <li>Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 4</li> </ul>
<p><b>SS</b></p>	<p>Reaktor 3</p>  <p>Zeitverlauf</p> <p>SS [g COD/m<sup>3</sup>]</p> <p>t [d]</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 1</li> <li>Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 2</li> <li>Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 3</li> <li>Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 4</li> </ul>



## Ergebnisse:

SO (Reaktor 1): Die Konzentration nimmt zu den äußeren Schichten hin leicht zu (von 0.097 auf 0.132).

SO (Reaktor 2): Die Konzentration nimmt zu den äußeren Schichten hin leicht zu (von 0.136 auf 0.163), ist insgesamt aber höher als in Reaktor 1.

SO (Reaktor 3): Die Konzentration nimmt zu den äußeren Schichten hin leicht zu (von 0.164 auf 0.189), ist insgesamt aber höher als in Reaktor 2.

SNH (Reaktor 1): Die Konzentration ist annähernd konstant (38.24).

SNH (Reaktor 2): Die Konzentration ist annähernd konstant (22.27).

SNH (Reaktor 3): Die Konzentration ist annähernd konstant (5.86 – 5.89).

Allgemein: Die Konzentration nimmt zu den äußeren Schichten hin leicht zu.

SNO (Reaktor 1): Die Konzentration ist annähernd konstant (0.014 – 0.015), nimmt zu den äußeren Schichten hin leicht zu.

SNO (Reaktor 2): Die Konzentration ist annähernd konstant (13.09 – 13.1), nimmt zu den äußeren Schichten hin leicht ab.

SNO (Reaktor 3): Die Konzentration ist annähernd konstant (28.9 – 28.95), nimmt zu den äußeren Schichten hin leicht ab.

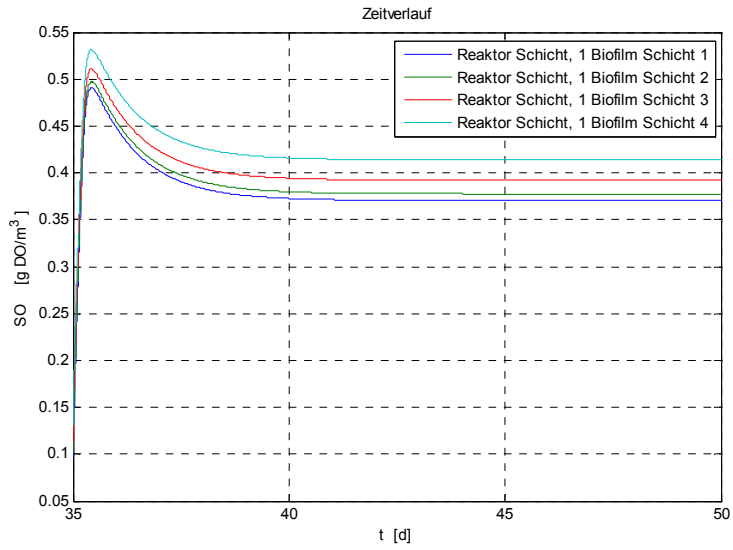
SS (Reaktor 1): Die Konzentration ist annähernd konstant (23.5 – 23.8), nimmt zu den äußeren Schichten hin leicht zu.

SS (Reaktor 2): Die Konzentration ist annähernd konstant (1.45 – 1.47), nimmt zu den äußeren Schichten hin leicht zu.

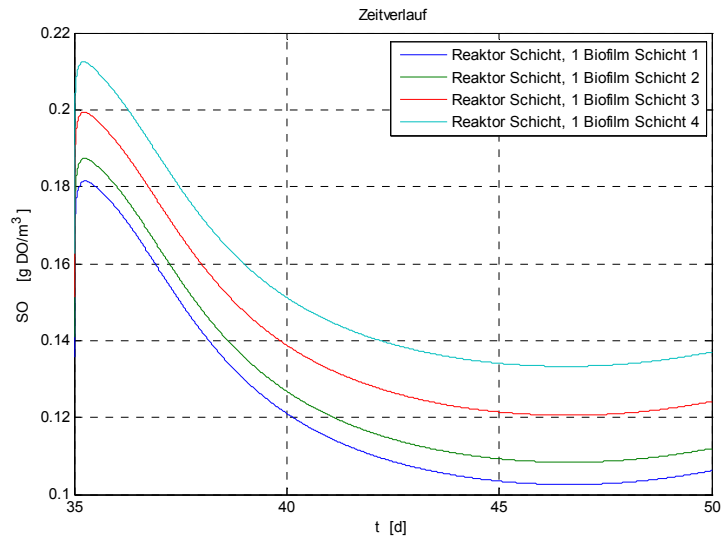
SS (Reaktor 3): Die Konzentration steigt geringfügig an (von 0.81 auf 0.83) und ist in allen 4 Schichten identisch!

Anlage „STK\_klein4“ mit Vorgabe für  $akla_{20} = 194$  (Lufteintrag)

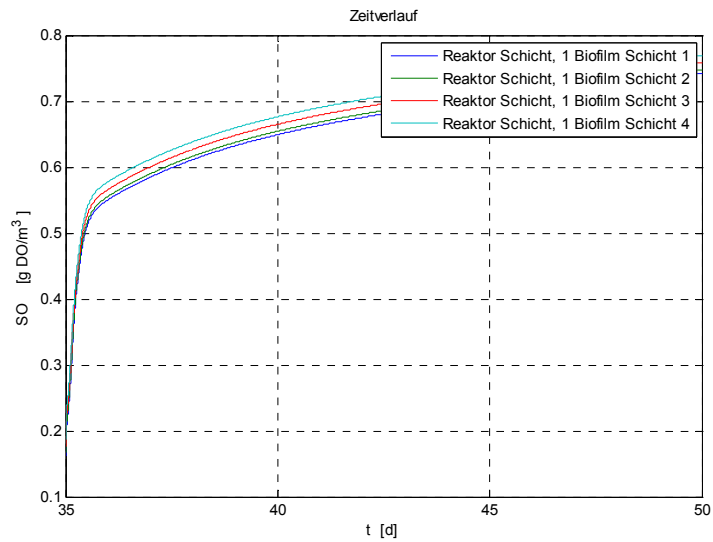
SO Reaktor 1



SO Reaktor 2



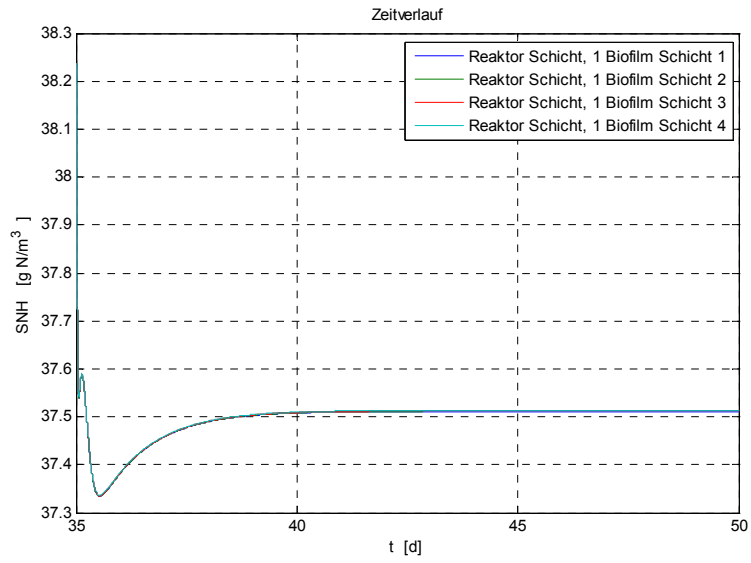
SO Reaktor 3



Anlage „STK\_klein4“ mit Vorgabe für  $akla_{20} = 194$  (Lufteintrag)

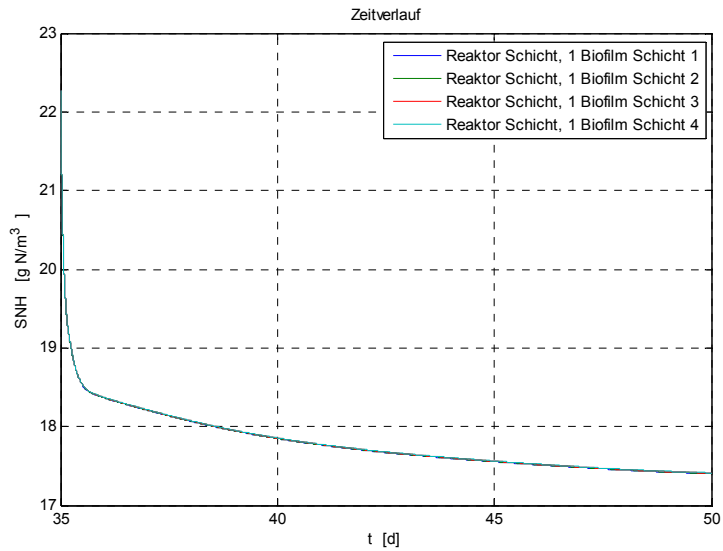
SNH

Reaktor 1



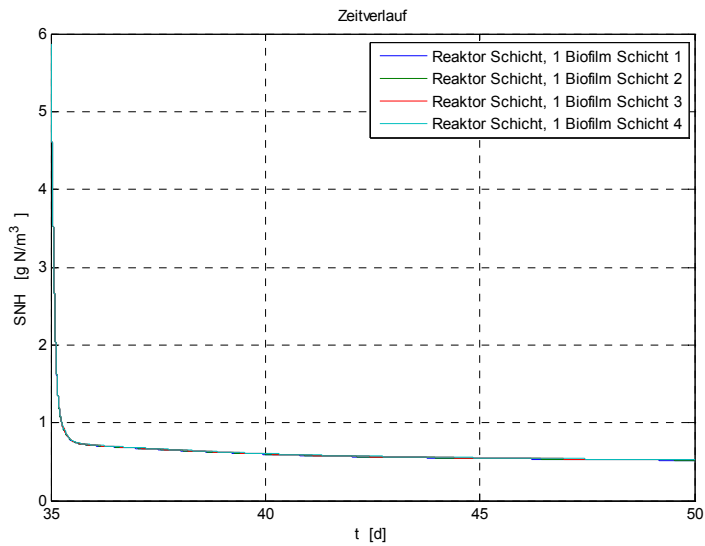
SNH

Reaktor 2



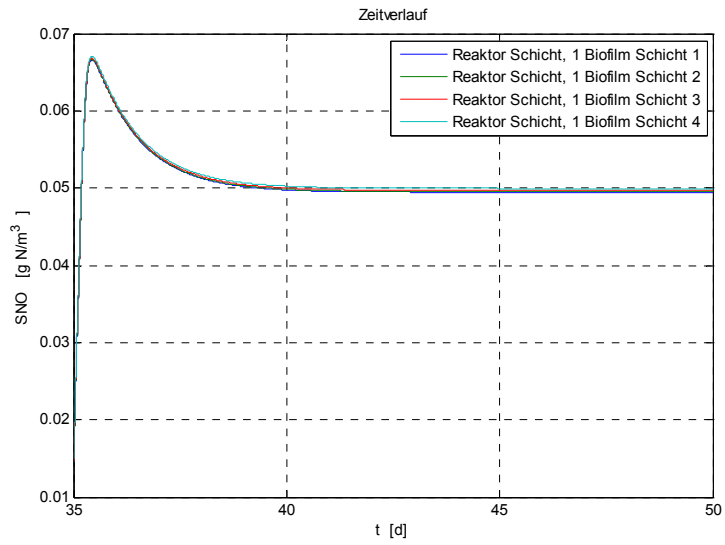
SNH

Reaktor 3

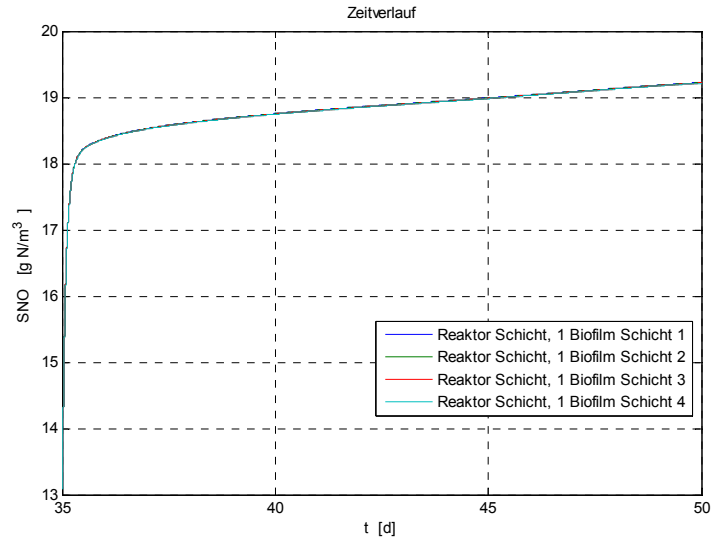


Anlage „STK\_klein4“ mit Vorgabe für akla20 = 194 (Lufteintrag)

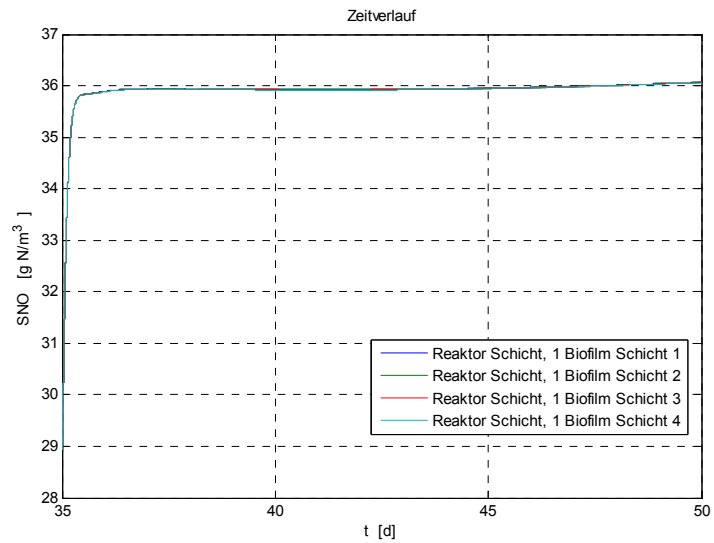
SNO Reaktor 1



SNO Reaktor 2



SNO Reaktor 3



Anlage „STK\_klein4“ mit Vorgabe für akla20 = 194 (Lufteintrag)

<p><b>SS</b></p>	<p>Reaktor 1</p> <p>Zeitverlauf</p> <p>             — Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 1              — Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 2              — Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 3              — Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 4         </p>
<p><b>SS</b></p>	<p>Reaktor 2</p> <p>Zeitverlauf</p> <p>             — Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 1              — Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 2              — Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 3              — Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 4         </p>
<p><b>SS</b></p>	<p>Reaktor 3</p> <p>Zeitverlauf</p> <p>             — Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 1              — Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 2              — Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 3              — Reaktor Schicht, 1 Biofilm Schicht 4         </p>

## Ergebnisse:

SO (Reaktor 1): Die Konzentration nimmt zu den äußeren Schichten hin leicht zu (von 0.37 auf 0.42).

SO (Reaktor 2): Die Konzentration nimmt zu den äußeren Schichten hin leicht zu (von 0.1 auf 0.14), liegt aber insgesamt niedriger als bei Reaktor 1. Innerhalb der Simulationsdauer ist eine deutliche Abnahme erkennbar!

SO (Reaktor 3): Die Konzentration nimmt zu den äußeren Schichten hin leicht zu, liegt aber insgesamt höher als bei Reaktor 2 (ca. 0.77). Innerhalb der Simulationsdauer ist eine deutliche Zunahme erkennbar!

SNH (Reaktor 1): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (37.5).

SNH (Reaktor 2): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (17.4).

SNH (Reaktor 3): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (0.5).

SNO (Reaktor 1): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (0.05).

SNO (Reaktor 2): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (19.3).

SNO (Reaktor 3): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (36.1).

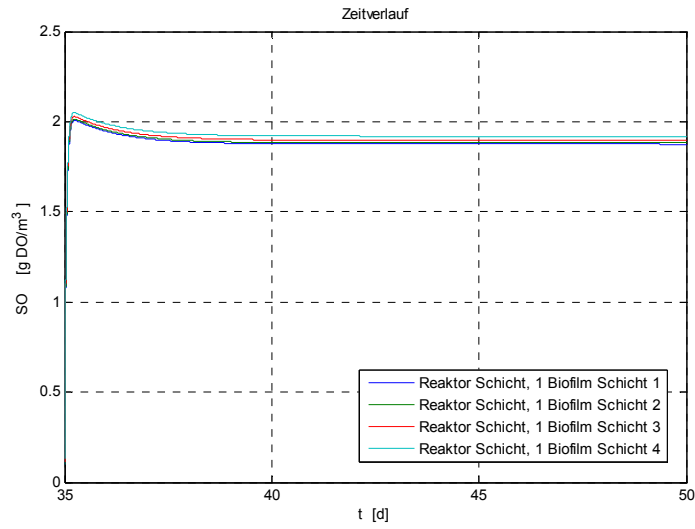
SS (Reaktor 1): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (ca. 4).

SS (Reaktor 2): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (0.96).

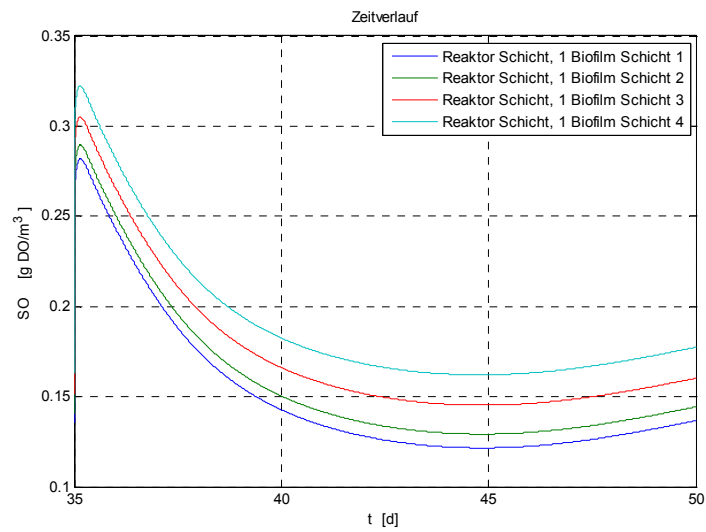
SS (Reaktor 3): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (0.67).

Anlage „STK\_klein4“ mit Vorgabe für  $akla_{20} = 250$  (Lufteintrag)

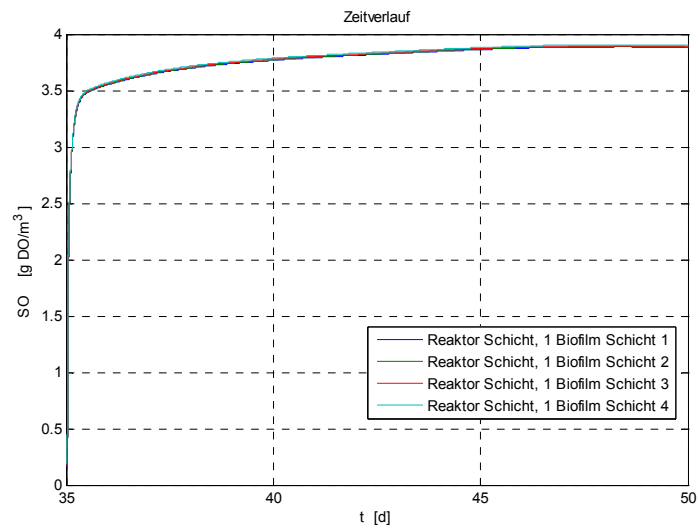
SO Reaktor 1



SO Reaktor 2



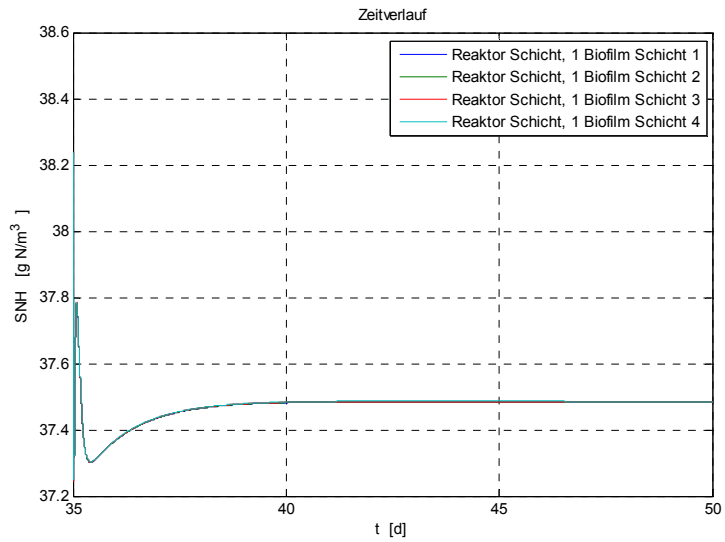
SO Reaktor 3



Anlage „STK\_klein4“ mit Vorgabe für akla20 = 250 (Lufteintrag)

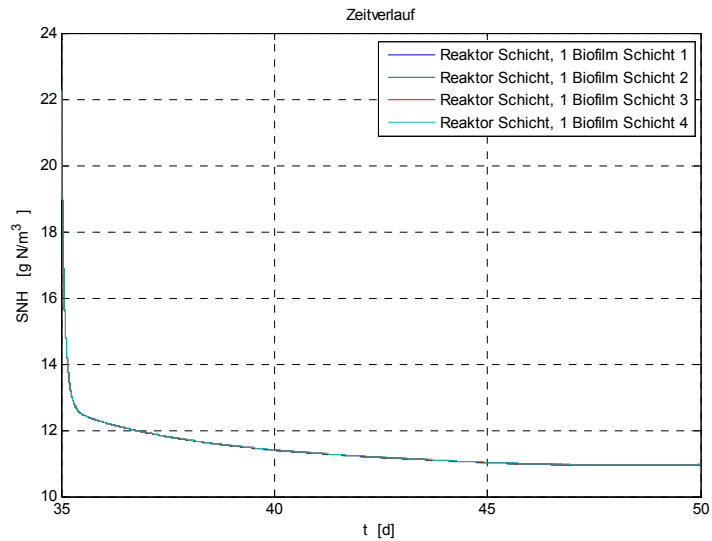
SNH

Reaktor 1



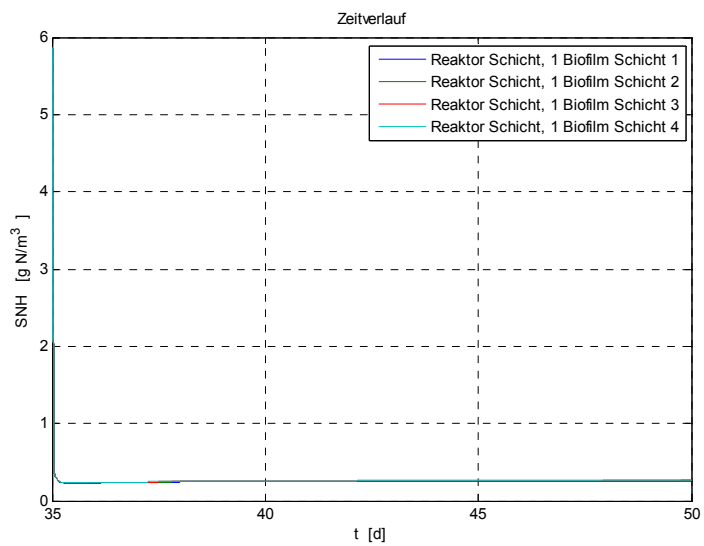
SNH

Reaktor 2



SNH

Reaktor 3

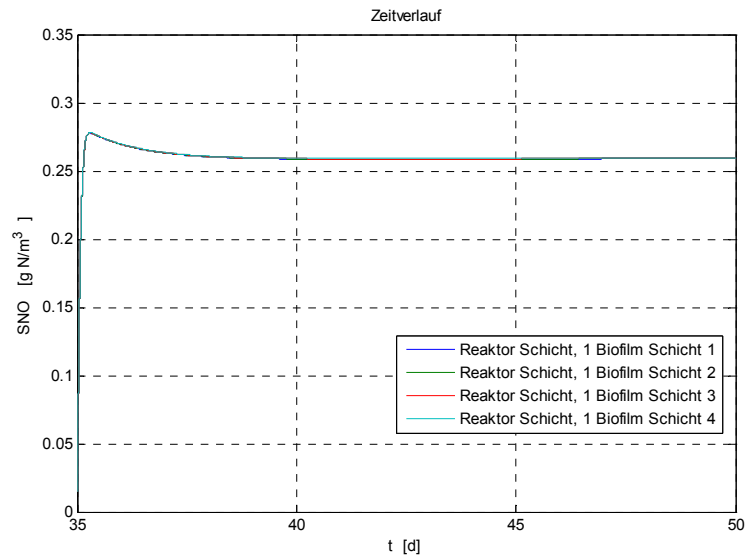




Anlage „STK\_klein4“ mit Vorgabe für  $akla_{20} = 250$  (Lufteintrag)

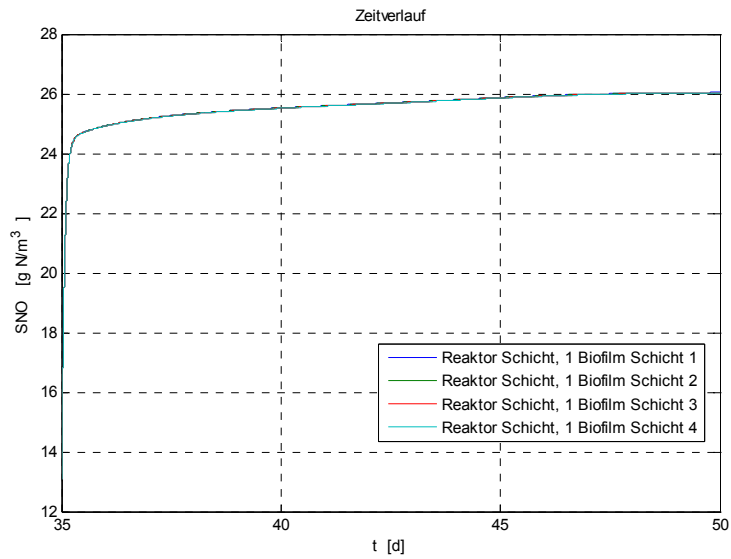
SNO

Reaktor 1



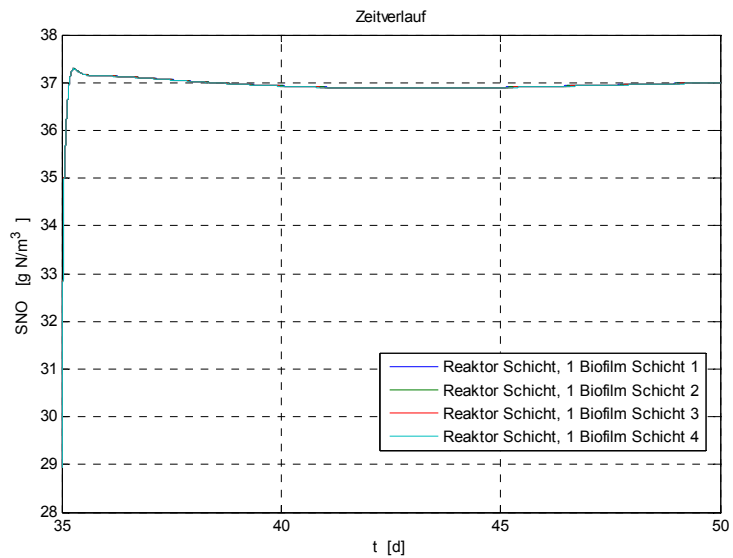
SNO

Reaktor 2



SNO

Reaktor 3



**Anlage „STK\_klein4“ mit Vorgabe für  $akla_{20} = 250$  (Lufteintrag)**

<p><b>SS</b></p>	<p><i>Reaktor 1</i></p> <p align="center">Zeitverlauf</p> <p align="center">SS [g COD/m<sup>3</sup>]</p> <p align="center">t [d]</p>
<p><b>SS</b></p>	<p><i>Reaktor 2</i></p> <p align="center">Zeitverlauf</p> <p align="center">SS [g COD/m<sup>3</sup>]</p> <p align="center">t [d]</p>
<p><b>SS</b></p>	<p><i>Reaktor 3</i></p> <p align="center">Zeitverlauf</p> <p align="center">SS [g COD/m<sup>3</sup>]</p> <p align="center">t [d]</p>

## Ergebnisse:

SO (Reaktor 1): Die Konzentration nimmt zu den äußeren Schichten hin leicht zu (von 1.8 auf 1.9).

SO (Reaktor 2): Die Konzentration nimmt zu den äußeren Schichten hin leicht zu (von 0.135 auf 0.175), ist insgesamt aber deutlich niedriger als bei Reaktor 1. Innerhalb der Simulationsdauer ist eine deutliche Abnahme erkennbar!

SO (Reaktor 3): Die Konzentration nimmt zu den äußeren Schichten hin leicht zu, ist insgesamt aber deutlich höher als bei Reaktor 1 und 2 (ca. 3.9!). Innerhalb der Simulationsdauer ist eine deutliche Zunahme erkennbar!

SNH (Reaktor 1): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (37.5).

SNH (Reaktor 2): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (ca. 11).

SNH (Reaktor 3): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (ca. 0.3).

SNO (Reaktor 1): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (0.27).

SNO (Reaktor 2): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (26).

SNO (Reaktor 3): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (37).

SS (Reaktor 1): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (ca. 2.5).

SS (Reaktor 2): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (0.84).

SS (Reaktor 3): Die Konzentration ist für alle 4 Schichten annähernd identisch (0.58).