

Modelování a výpočty v technologii vody

**Úvod, terminologie a využití v
praxi**

Rozdělení modelů

- Fyzické modely
- Matematické modely

Modely biologické ČOV

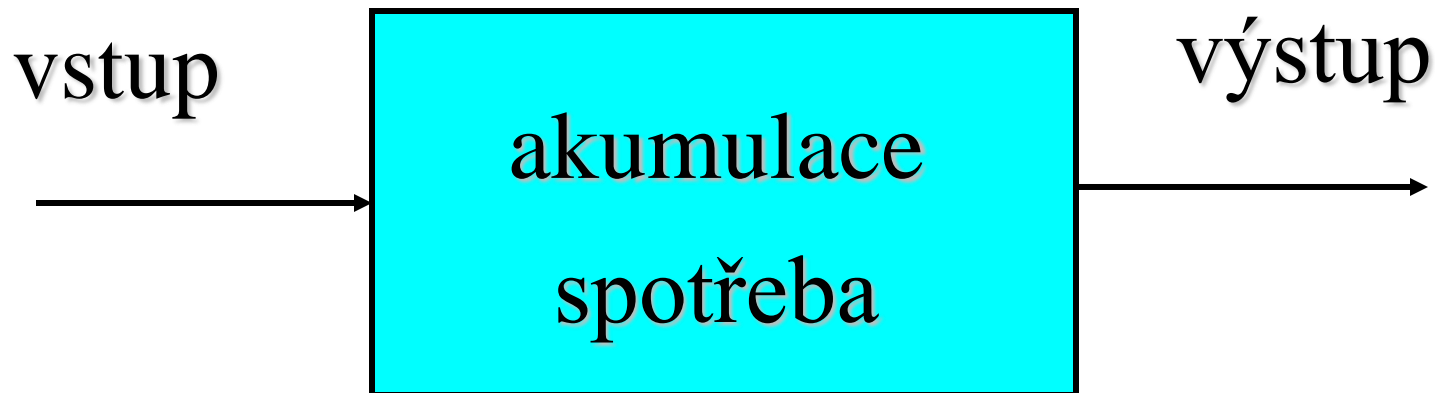
- modely samostatného aktivačního reaktoru
 - odtokové parametry vztaženy jakoby k „filtrovanému“ vzorku; tj. neuvažuje se zhoršení kvality odtoku špatnou funkcí dosazovací nádrže – **nejčastější případ**
 - proud vratného kalu jako jeden ze vstupů, bez ohledu na jeho vznik v dosazovací nádrži; tj. **zanedbává se zahušťovací funkce** dos. nádrže
- modely dosazovacích nádrží
 - bilanční, látkové toky biomasy
 - hydrodynamické modely (**1D, 2D, 3D**)

Modely biologické ČOV

- **kombinované** modely popisující interakce aktivačního reaktoru a dosazovací nádrže
- **komplexní** modely jako základ **profesionálních software** pro popis celého čistírenského procesu
 - každá jednotková operace tvoří uzel, který je modelován samostatně
 - celkový systém se skládá z těchto uzlů a je propojen „modelovým“ potrubím
 - hotové knihovny jednotkových operací

Popis jednotkového uzlu

- zásada **zachování hmoty** pro modelování změn látkových parametrů
- zásada zachování kontinua pro hydrodynamické modelování



Obecný postup při tvorbě modelu

- jedná se o postup při tvorbě modelu, který bude simulovat:
 - **konkrétní** proces či technologii
 - v **konkrétním** uspořádání a pro určitou odpadní vodu
 - v **určitém rozsahu** provozních podmínek a parametrů
- takto **nelze** postupovat při tvorbě obecného modelu popisujícího nějakou ideální situaci

Obecný postup při tvorbě modelu

- **Předběžná fáze**

- modelující se musí detailně seznámit s modelovaným reaktorem, systémem, čistírnou
- k dispozici by měl mít kompletní technickou dokumentaci včetně technologických schémat a proudových diagramů
- doporučuje se osobní návštěva ČOV, detailní diskuse s provozním personálem a pořízení kvalitní fotodokumentace pro případ pochybností o uspořádání systému

Obecný postup při tvorbě modelu

- **Fáze získání dat**

- rozhodující pro spolehlivost vyvinutého modelu
- nutno získat i **relevantní** historická data o průtoku a složení jednotlivých významných proudů
- historická data jsou často zatížena nepřesnostmi
- provedení vlastních měření, u nás nejčastěji 24-hodinové odběry (příp. 36-hodinové)
- reprezentativní vzorky pro **kinetická měření**

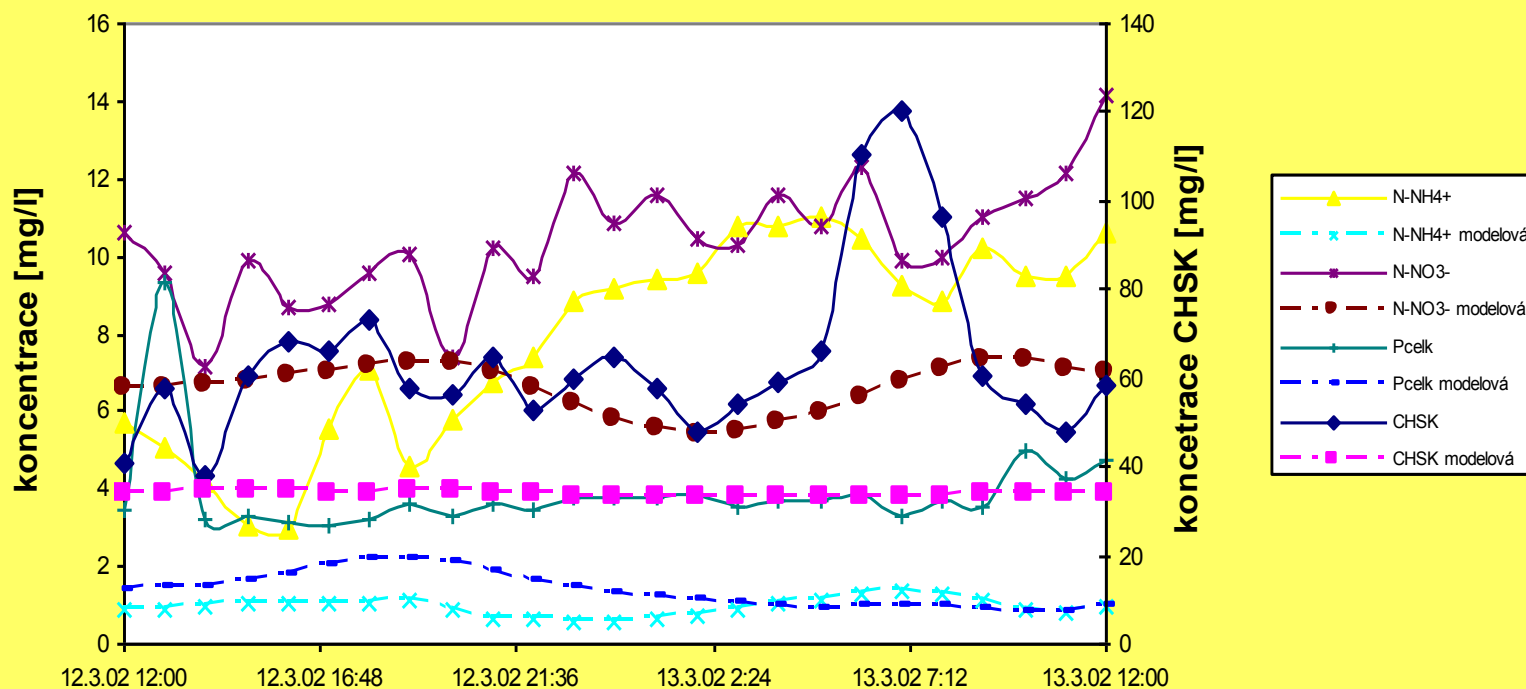
Obecný postup při tvorbě modelu

24-hodinové sledování ČOV

- **získání podkladů pro dynamickou simulaci**
- zjištění koncentračních profilů jednotlivých ukazatelů znečištění
- zjištění kolísání přítoku čištěné OV během dne
- zjištění průběhu denního kolísání teploty

Obecný postup při tvorbě modelu

Koncentrace na odtoku z ČOV B



Obecný postup při tvorbě modelu

Jednorázové kinetické testy – získání konstant AK + OV

- složení AK se stabilizuje samovolně podle OV, hydraulického režimu, doby zdržení aj. → funkční skupiny mikroorganismů (anox. a ox. organotrofové, litotrofové, poly-P) rozhodují o odstraňování znečištění
- aktivita funkčních skupin se stanovuje jako rychlost odstraňování substrátu ve specifických podmínkách

Obecný postup při tvorbě modelu

Mezi základní testy patří:

- kinetický test nitrifikační, denitrifikační, uvolňování a akumulace fosforu, odstraňování substrátu
- respirometrický test na zjištění max. růstové rychlosti μ_{Hmax}
- respirometrické stanovení Y_h a Y_{HAc}
- frakcionace OV

Doplňkové testy:

- stanovení frakce aktivní biomasy, maximální růstové rychlosti autotrofů (μ_{Amax}), hydrolytické a fermentační procesy a další

Obecný postup při tvorbě modelu



**Přístrojové vybavení pro
respirometrické testy** ▲

Cely pro kinetické testy ►



Obecný postup při tvorbě modelu

- **Fáze kalibrace**

- kalibrace se provádí **vůči skutečným datům** získaným z daného zařízení, procesu, systému
- každý ze sady parametrů měřených *on site* by měl být použit jako vstup do modelu a **prověřen** s použitím ostatních parametrů jako tzv. **defaultních** veličin modelu (tj. pevně nastavených)
- provede se simulace po dostatečnou dobu (např. **trojnásobek** stáří kalu)

Obecný postup při tvorbě modelu

- **Fáze kalibrace**

- predikce dané modelem se **porovnají** se skutečnými výsledky modelovaného systému
- dále je nutno určit, které parametry modelu je vhodné měnit, aby se dosáhlo nejlepší shody se skutečným stavem (**best fitting**)

Obecný postup při tvorbě modelu

- **Fáze kalibrace**

Úroveň kalibrace

- statická kalibrace (na základě slévaných vzorků nebo výsledků provozního ustáleného stavu)
- dynamická kalibrace (na základě 24-hodinového sledování)

Obecný postup při tvorbě modelu

- **Fáze kalibrace**

Postup kalibrace

- frakcionace CHSK a kalibrace procesů odstraňování uhlíkatého znečištění
- kalibrace stáří kalu
- kalibrace oxidace amoniaku a odtokové koncentrace dusičnanů
- kalibrace procesů odstraňování fosforu
- kalibrace teplotní závislosti

Obecný postup při tvorbě modelu

- **Fáze validace, verifikace**

- nakalibrovaný model je nutno dále **prověřit**, jak věrně popisuje reakce zařízení, systému na změnu v některém parametru
- k tomu je vhodné mít další **nezávislou** sadu dat měření z reálného systému, nejlépe popisující chování systému při nějaké dynamické **změně** (pokles či vzestup zatížení apod.)
- takto kalibrovaný a verifikovaný model lze pro dané uspořádání používat až do doby nějaké významné změny v systému

Obecný postup při tvorbě modelu

Metodika modelování podle projektu TA ČR

ASIO & VŠCHT Praha

Cíle metodiky

- Poskytovat vodítka i méně zkušeným v oblasti matematického modelování s cílem:
 - Umožnit investorovi/provozovateli provádět simulace jako podporu pro rozhodovací analýzy
 - Hledání scénářů pro zlepšení ekonomiky čištění OV
- Využití pro ochranu vodních zdrojů
- Nástroj pro projektanty při výběru technologií pro nové i rekonstruované ČOV, při výběru strategie zpracování dešťových vod, simulaci maximální kapacity technologie, apod.
- Náhrada drahých fyzikálních modelů a provozních zkoušek

Kde dále možno použít

- Pedagogické účely: - výuka biologického čištění odpadních vod i vlastního modelování
- Inženýrské a konzultační firmy – nabídka služeb spojených s matematickým modelováním provozovatelům, auditů a hodnocení provozů
- Provozovatelé – dosahování úspor, školení personálu, optimalizace provozu
- Sběr a ukládání dlouhodobých informací o ČOV, simulace operačních strategií, např. výpadek průmysl. OV
- Možnosti provozních úspor, dimenzování strojů, již známy aplikace i v ČR

ASM1

1. Odstranění sloučenin organického uhlíku a dusíku se simultánní spotřebou kyslíku a dusičnanu jako elektronového akceptoru.

ASM2

2. Přidán popis odstranění fosforu, přičemž je zahrnuto i chemické odstranění.

ASM3

3. Přidán předpoklad, že všechen snadno rozložitelný substrát (S_s) je nejprve použit jako zásobní látka k růstu organismů (X_{STO}).

ASM2d

4. Principiálně přejímá matici modelu ASM2, tj. rozp. i partikulované složky
5. Oproti ASM2 přidány dva procesy ukazující na schopnost PAO denitrifikovat, tj. nový proces $j=12$ anoxická tvorba polyfosfátů PP a proces $j=14$ anoxický růst X_{PAO} na X_{PHA}

Základní modely IWA

Koncept modelu IWA: východiska

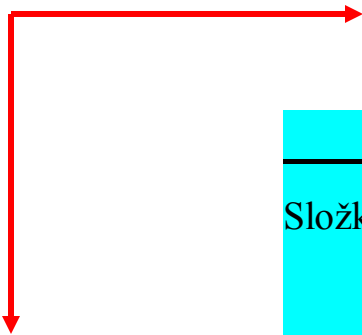
- interaktivní model
- **identifikace složek modelu a procesů, kterými se transformují**
- matematické formulace rychlosti dějů
- stechiometrické koeficienty pro popis interakcí složek
- základem modelů rovnice popisující růst (vznik) a rozklad biomasy; k popisu růst biomasy se používá Monodova funkce

Koncept modelu IWA: maticový zápis

zákon zachování

Složka $i \rightarrow$	1	2	3	Rychlost procesu ρ_j
Heterotrofní biomasa $X_{B,H}$	[M (CHSK)/L ³]	[M (CHSK)/L ³]	[M (- CHSK)/L ³]	
Proces $j \downarrow$				
1 Růst	1	- 1/Y _H	- (1 - Y _H)/Y _H	$\mu_H \frac{S_S}{K_{SH} + S_S} \cdot X_{BH}$
2 Rozklad	- 1		- 1	
Pozorované konverzní rychlosti [M L ⁻³ T ⁻¹]		$r_i = \sum_j v_{ij} \rho_j$		

hmotnostní
bilance



Matrice modelu ASM1

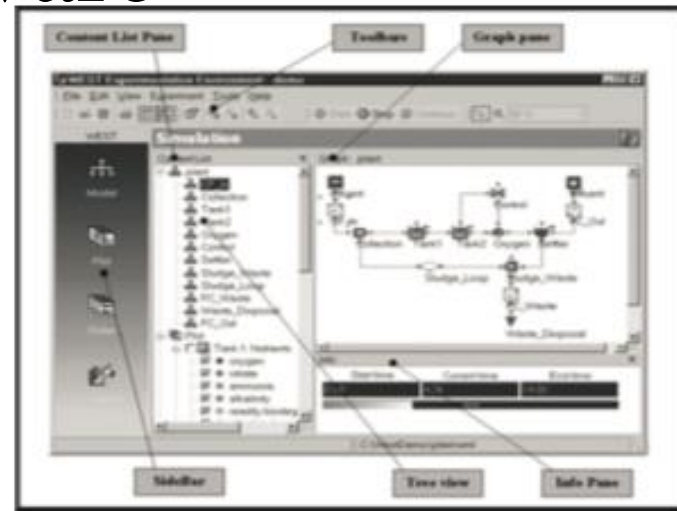
	S_U	S_B	$X_{U,PT}$	$X_{C,B}$	$X_{O,IO}$	$X_{A,NO}$	$X_{U,E}$	S_{O_2}	S_{NH_4}	S_{NO_2}	$S_{B,N}$	$X_{C,B,N}$	S_{ALK}	S_{H_2}	Process rate
1 Aerobic growth of heterotrophs		$-1/Y_{CHO}$			1			$-(1-Y_{CHO})/Y_{CHO}$		$-1/Y_{CHO}$					$\mu_{CHO,MAX} [S_B / (K_{S,B,CHO} + S_B)] [S_{O_2} / (K_{O_2,CHO} + S_{O_2})] [S_{NH_4} / (K_{NH_4,CHO} + S_{NH_4})] X_{CHO}$
2 Anaerobic growth of heterotrophs		$-1/Y_{CHO}$			1			$-(1-Y_{CHO}) / ((1-\theta_{NO_2}) Y_{CHO})$		$-1/Y_{CHO}$				$(1-Y_{CHO}) / ((1-\theta_{NO_2}) Y_{CHO})$	$\mu_{CHO,MAX} [S_B / (K_{S,B,CHO} + S_B)] [K_{O_2,CHO} / (K_{O_2,CHO} + S_{O_2})] [S_{NH_4} / (K_{NH_4,CHO} + S_{NH_4})]^{n_{NO_2}} X_{CHO}$
3 Aerobic growth of autotrophs						1		$-(1-\theta_{NO_2}) / Y_{ANO}$	$1/Y_{ANO}$	$-1/Y_{ANO}$					$\mu_{ANO,MAX} [S_{NH_4} / (K_{NH_4,ANO} + S_{NH_4})] [S_{O_2} / (K_{O_2,ANO} + S_{O_2})] X_{ANO}$
4 Decay of heterotrophs				$1-f_{SU,CHO}$	-1		$f_{SU,CHO}$					$1/Y_{CHO}$ $f_{SU,CHO} / Y_{CHO}$			$b_{CHO} X_{CHO}$
6 Decay of autotrophs				$1-f_{SU,ANO}$		-1	$f_{SU,ANO}$					$1/Y_{ANO}$ $f_{SU,ANO} / Y_{ANO}$			$b_{ANO} X_{ANO}$
8 Ammonification of soluble organic Nitrogen										1	-1				$q_{AN} S_{B,N} X_{CHO}$
7 Hydrolysis of entrapped organics		1		-1											$q_{X_{C,B,N}} [(X_{C,B} / X_{CHO}) / (K_{X_{C,B,N}} + X_{C,B} / X_{CHO})] [S_{O_2} / (K_{O_2,CHO} + S_{O_2})]^{n_{O_2}} [K_{O_2,CHO} / (K_{O_2,CHO} + S_{O_2})] [S_{NH_4} / (K_{NH_4,CHO} + S_{NH_4})] X_{CHO}$
8 Hydrolysis of entrapped organic nitrogen											1	-1			$q_{X_{C,B,N}} (X_{C,B,N} / X_{C,B}) [(X_{C,B} / X_{CHO}) / (K_{X_{C,B,N}} + X_{C,B} / X_{CHO})] [S_{O_2} / (K_{O_2,CHO} + S_{O_2})]^{n_{O_2}} [K_{O_2,CHO} / (K_{O_2,CHO} + S_{O_2})] [S_{NH_4} / (K_{NH_4,CHO} + S_{NH_4})] X_{CHO}$

State Variables	Parameter **	Standardised notation	Unit
	Soluble biodegradable organics	S_B	S_B
Soluble undegradable organics	S_U	S_U	$g\ COOD.m^{-3}$
Dissolved oxygen	S_{O_2}	S_{O_2}	$-g\ COOD.m^{-3}$
Particulate biodegradable organics	X_B	$X_{C,B}$	$g\ COOD.m^{-3}$
Particulate undegradable organics from the influent	X_I	$X_{U,PT}$	$g\ COOD.m^{-3}$
Particulate undegradable endogenous products	X_P	$X_{U,E}$	$g\ COOD.m^{-3}$
Ammonia ($NH_4 + NH_3$)	S_{NH}	S_{NH_4}	$g\ N.m^{-3}$
Nitrate and nitrite ($NO_3 + NO_2$) (considered to be NO_3 only for stoichiometry)	S_{NO}	S_{NO_2}	$g\ N.m^{-3}$
Particulate biodegradable organic N	X_{NB}	$X_{C,B,N}$	$g\ N.m^{-3}$
Soluble biodegradable organic N	S_{NB}	$S_{B,N}$	$g\ N.m^{-3}$
Ordinary heterotrophic organisms	X_{BH}	X_{CHO}	$g\ COOD.m^{-3}$
Autotrophic nitrifying organisms (NH_4 to NO_3)	X_{BA}	X_{ANO}	$g\ COOD.m^{-3}$
Alkalinity (HCO_3^-)	S_{ALK}	S_{ALK}	$mol\ HCO_3.m^{-3}$

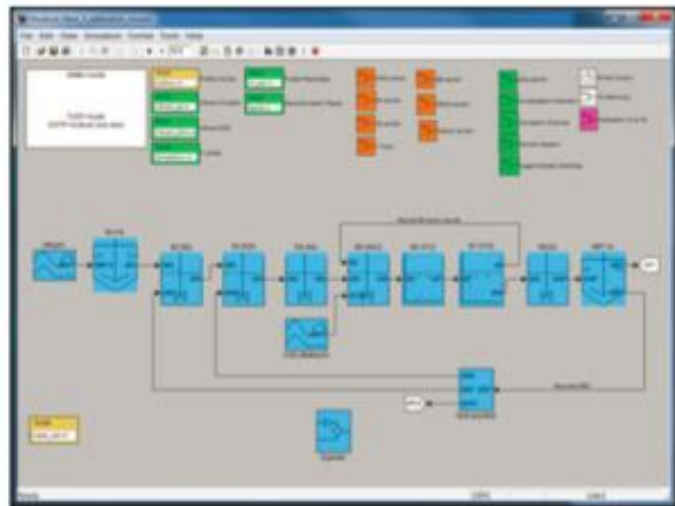
Dnes nejčastěji používané simulační software



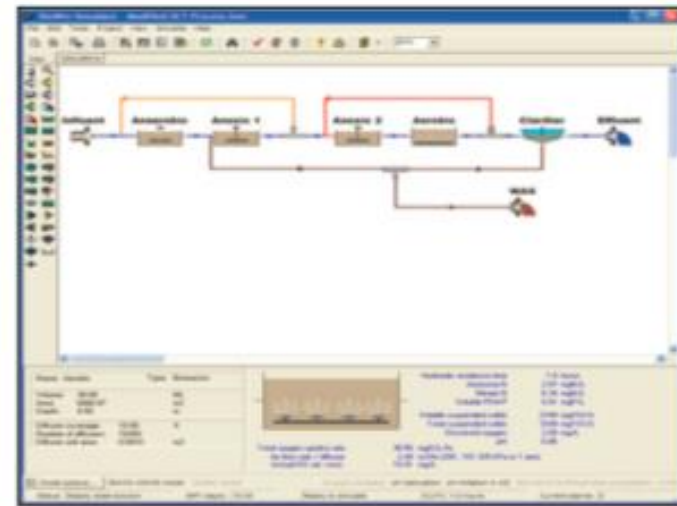
Obr. 1 GPS-X¹



Obr. 2 WEST¹



Obr. 3 SIMBA¹

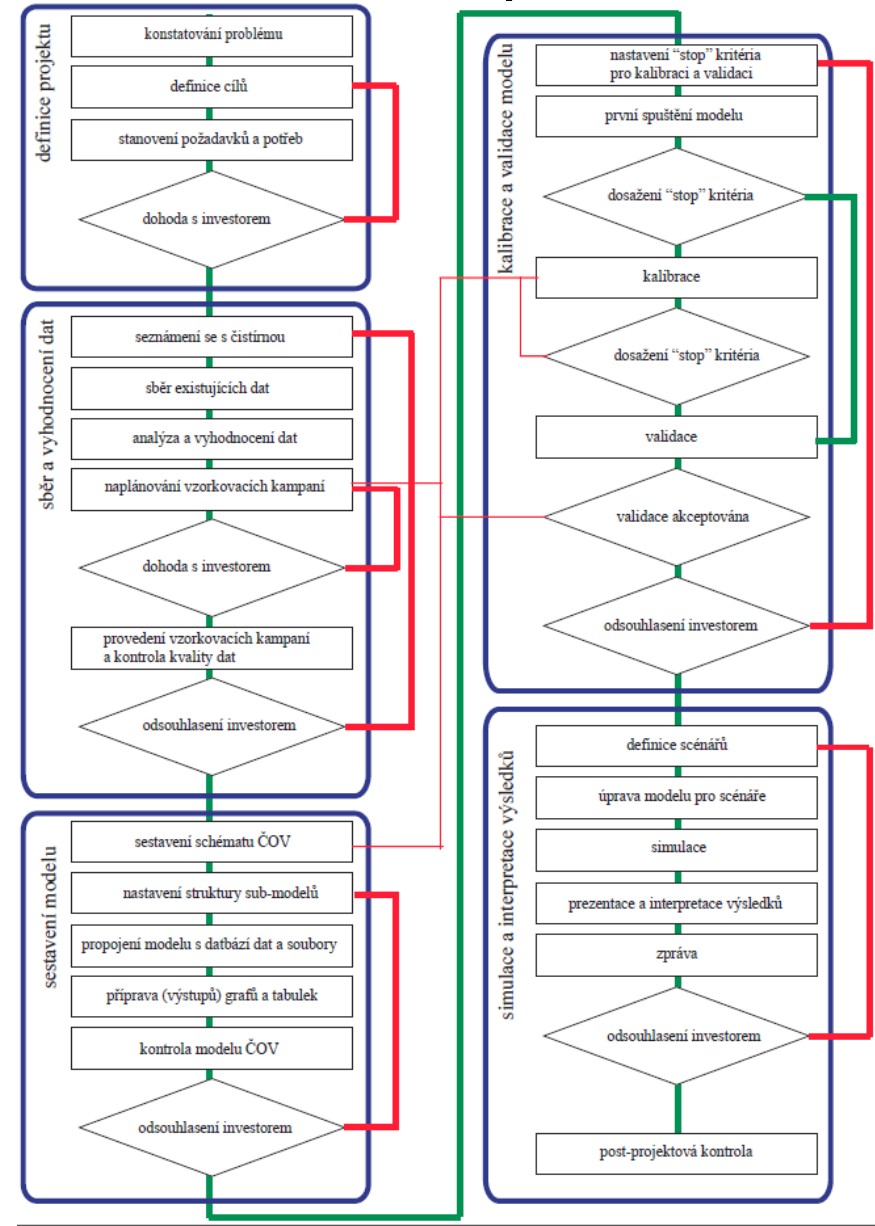


Obr. 4 BioWin¹

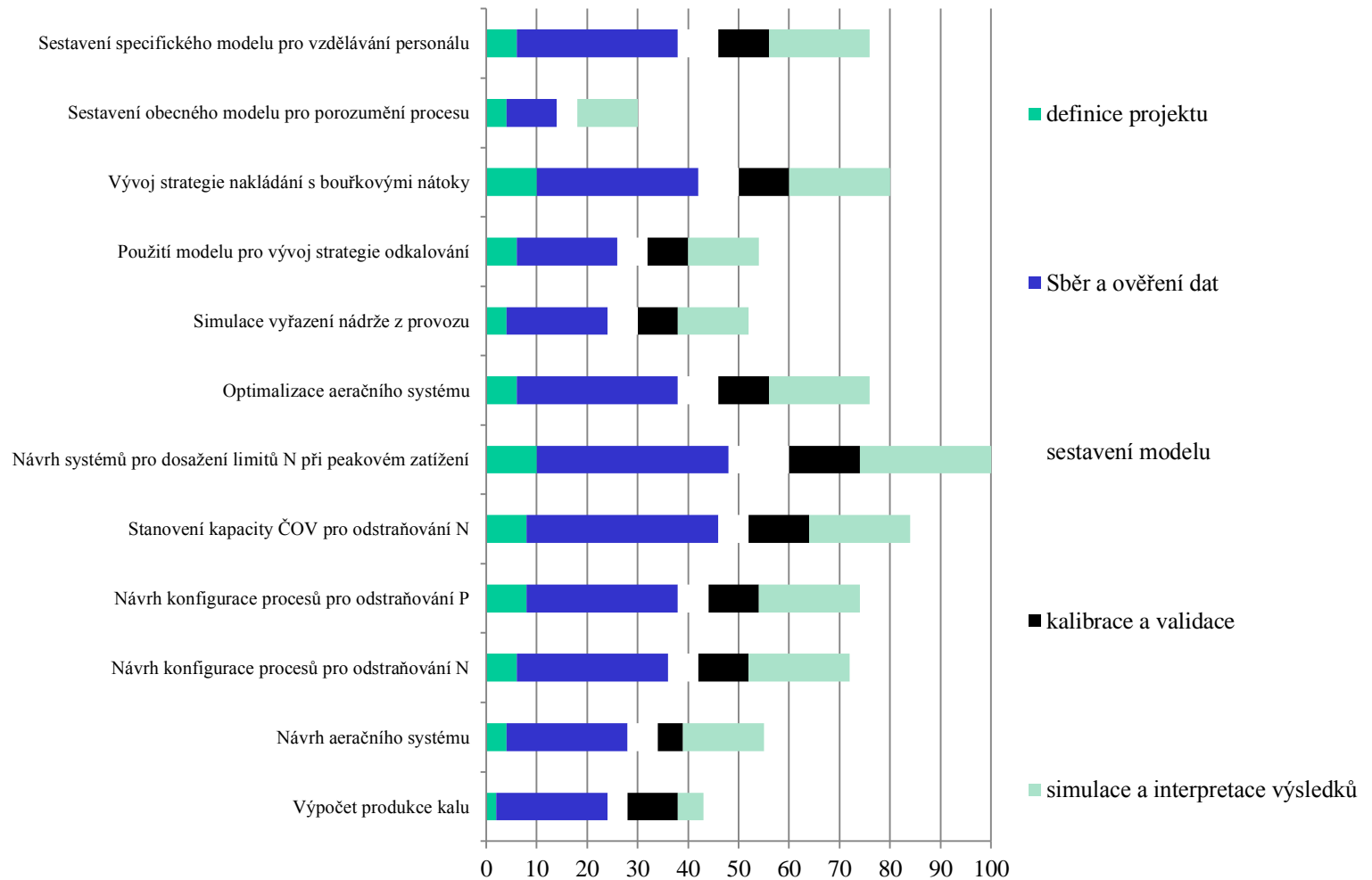
Metodika postupu při tvorbě modelu – obecný unifikovaný protokol GMP

- Pro účely sestavení certifikované metodiky dále využíváme **unifikovaného protokolu**, jako nejnovějšího a nejpropracovanějšího postupu pro vytvoření matematického modelu, tedy jako kostru, ke které jsou zpracovávány jednotlivé postupy a doporučení.
- Unifikovaný protokol zahrnuje doporučení ve vztahu k investorovi a identifikuje kroky, které by měly být s investorem komunikovány a odsouhlaseny.
- Dalším důležitým prvkem unifikovaného protokolu je to, že každý krok je propojen s tzv. aplikační maticí která pomáhá stanovit míru úsilí, která je potřebná pro dosažení určitých výsledků.

Blokové a organizační schéma unifikovaného protokolu



Aplikační matice pro stanovení míry úsilí vytvoření modelu



1) Definice projektu

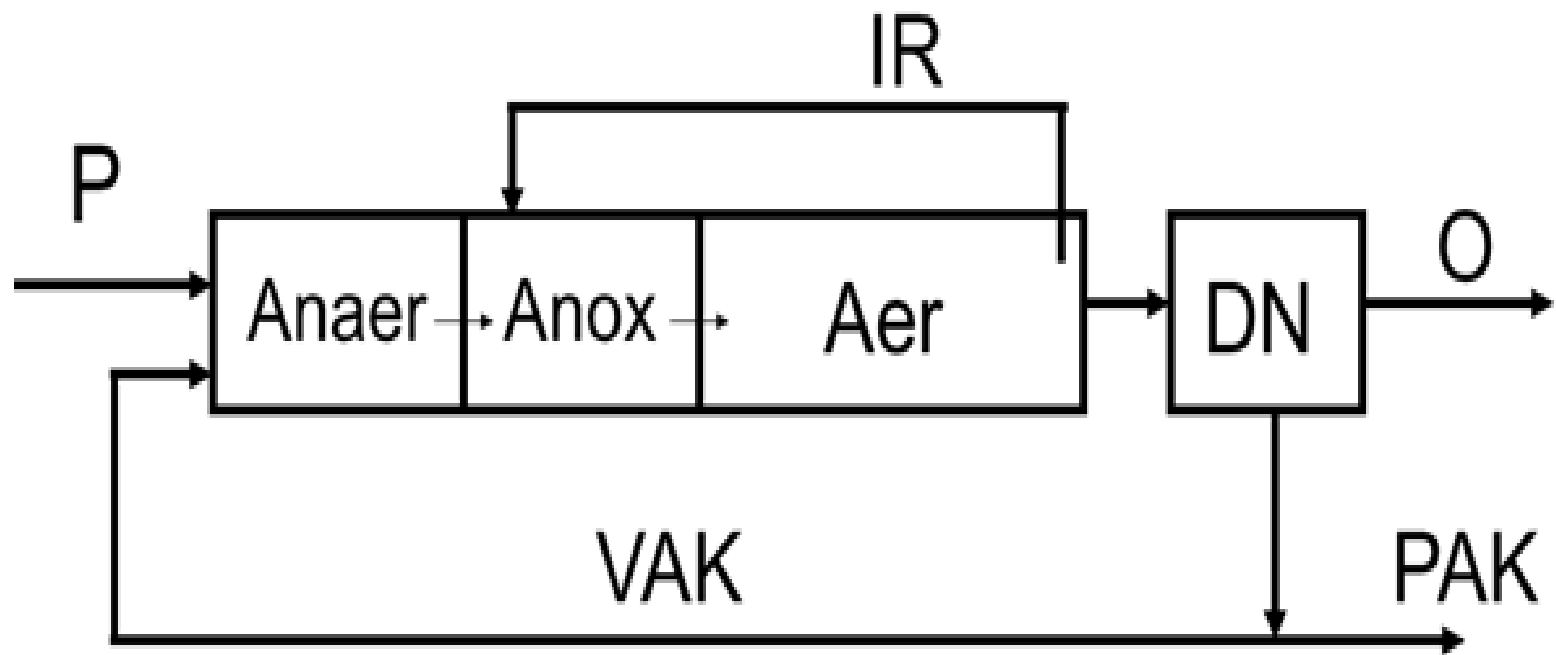
- V tomto kroku se doporučuje navštívit čistírnu a získat jasné konstatování problému a stanovit cíle projektu. Správným definováním problému (projektu) jsou pak ovlivňovány a určovány zejména hranice projektu, úroveň komplexnosti, výběr modelů a „stop“ kritérií, zodpovědnosti zúčastněných stran a jsou stanoveny případné překážky.
- Pro obě strany (objednatel/zhotovitel) se jedná o předcházení budoucím nedorozuměním, jak z hlediska výstupů, tak i z hlediska financí a časové náročnosti. Je pak jasné dáno, čeho se má dosáhnout a co je k tomu potřeba.

2) Sběr a vyhodnocení dat

- Základními otázkami tohoto kroku je, kde a jak získat dobrou sadu dat pro model a kolik dat je potřeba. Současně se jedná o krok, kterému je připisována nejvyšší míra úsilí, kterou je potřeba vynaložit pro vytvoření matematického modelu.
- Na otázku, kolik dat je potřeba, není odpověď zcela jednoduchá, protože množství potřebných dat je silně závislé na tom, jaké jsou cíle projektu a jaká je kvalita a kvantita dat historických.

Postup při sběru a vyhodnocení dat

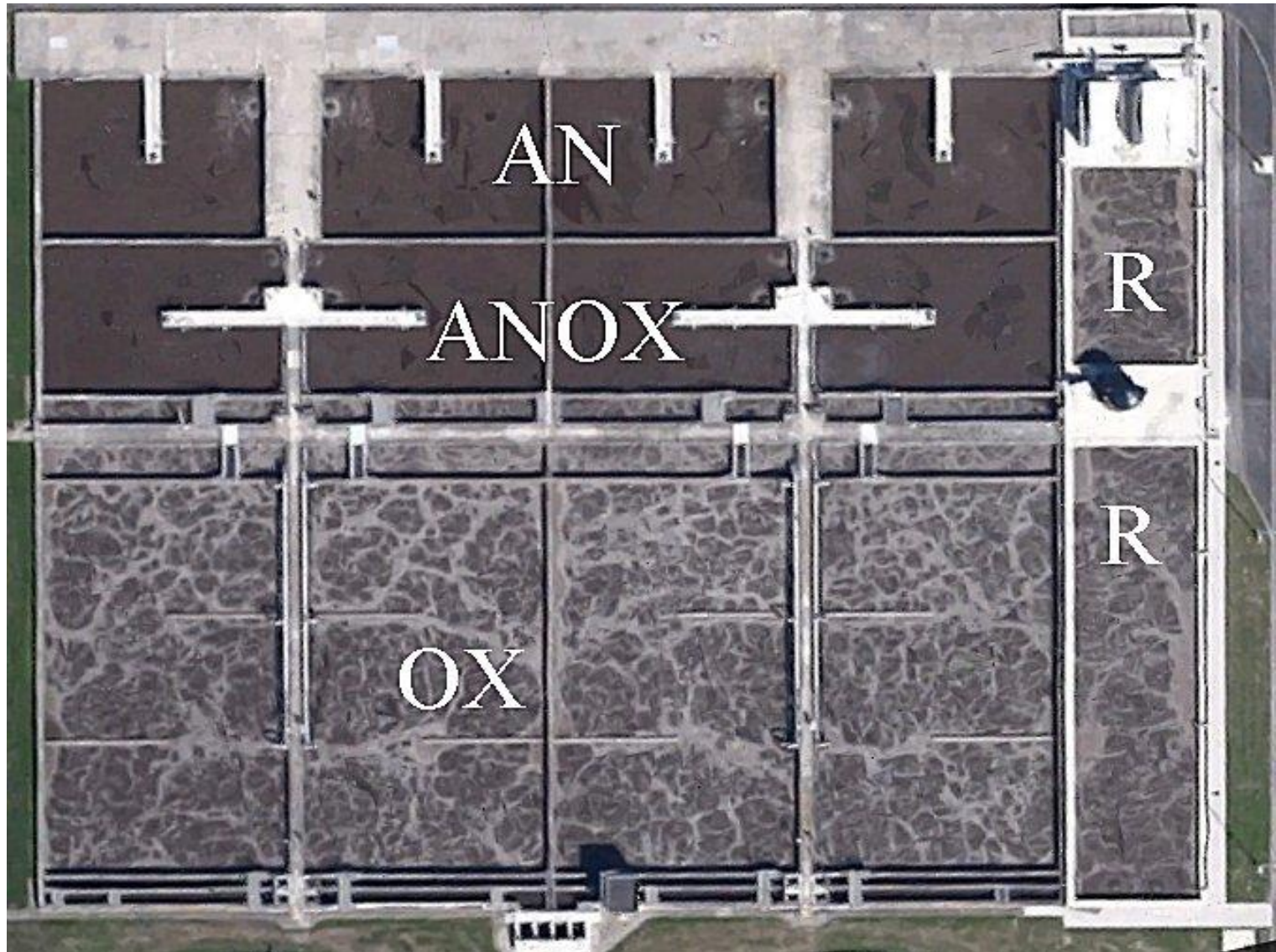
- 1) Rozdělení dat podle typu
- 2) Sestavení blokového schématu procesu s vyznačením proudů, reaktorů a odběrových míst
- 3) Doplnit o vlastní fotodokumentaci či letecké snímky ČOV
- 4) Zvážit ekonomickou náročnost sběru dat dle relevantních ceníků odběrů i analýz



Blokové schéma modelované linky s označením jednotlivých reaktorů i proudů

P – přítok, O – odtok, Anaer – anaerobní zóna, Anox - anoxická zóna, Aer – aerovaná, oxická zóna, R – regenerační zóna, DN – dosazovací nádrž, VAK – vratný aktivovaný kal, PAK – přebytečný aktivovaný kal, IR – interní recirkulace

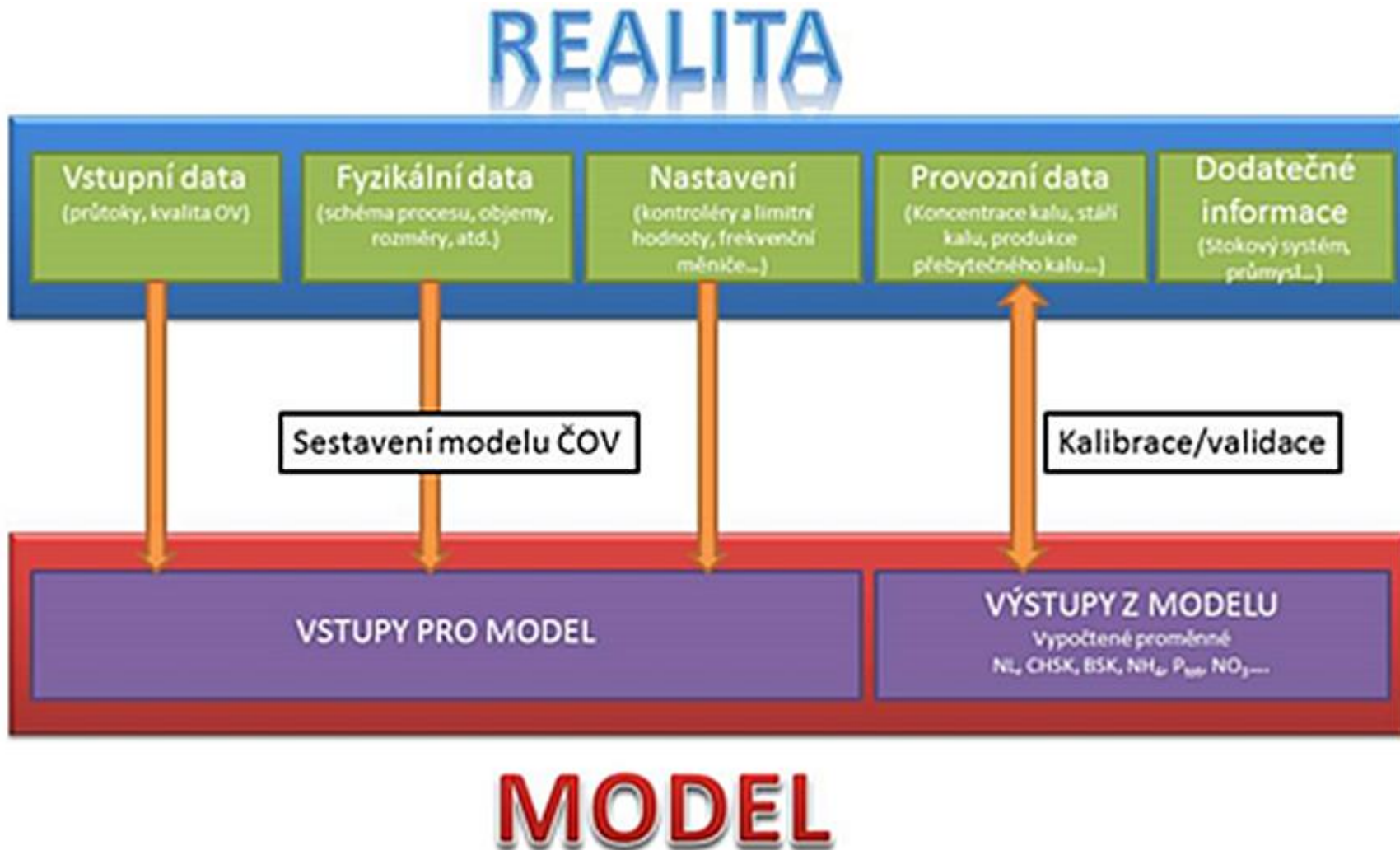
Letecký snímek aktivace se zakreslenými reakčními zónami



Vlastní fotodokumentace uspořádání ČOV a odběrových míst



Diagram rozdělení a využití dat potřebných pro matematické modelování



Získávání potřebných dat pro popis dějů a složek i kinetických

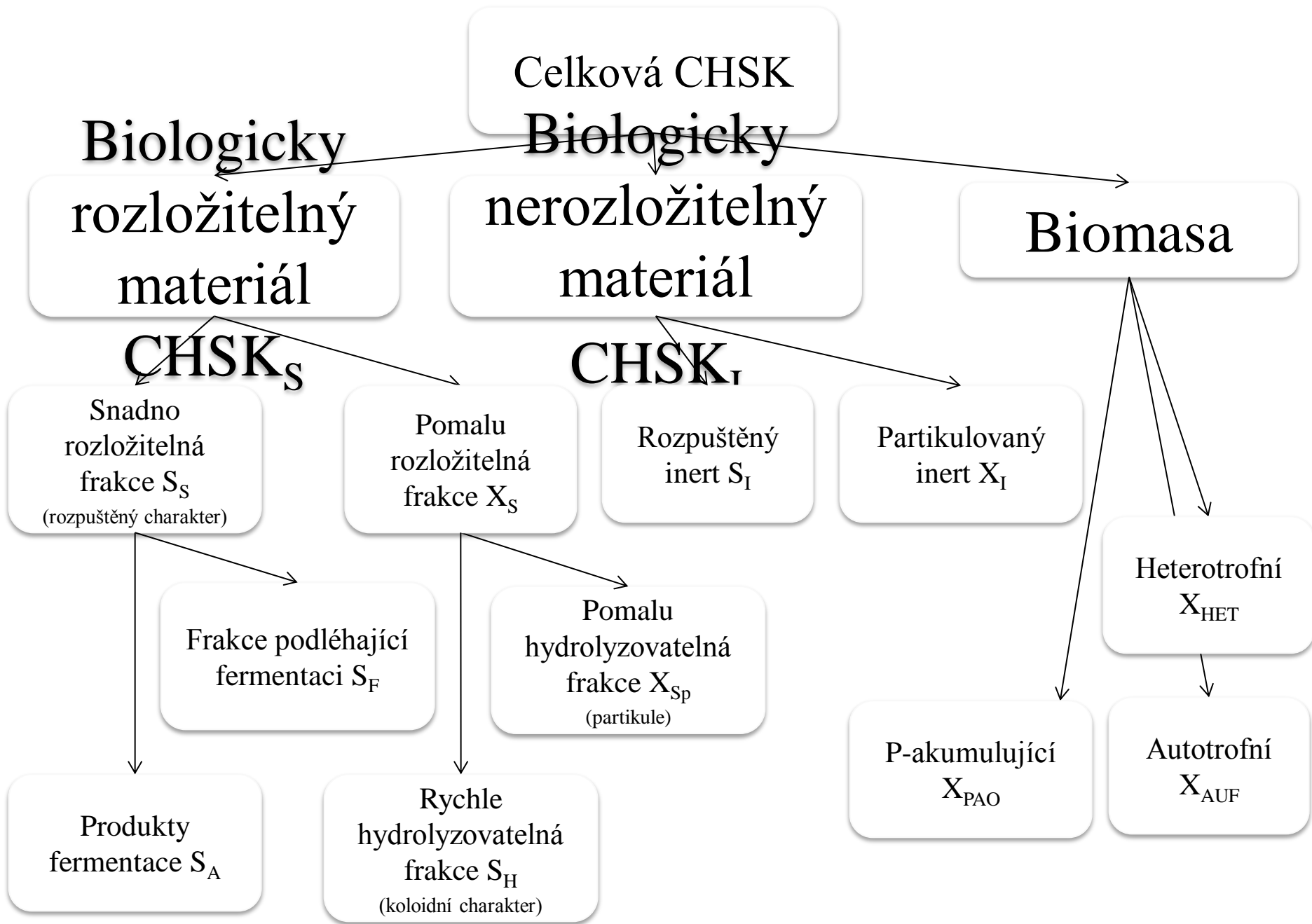
- Biomasa i organické znečištění OV charakterizovány v jednotkách CHSK
- Rozpuštěný kyslík jako záporné CHSK
- Kyslíkové ekvivalenty forem dusíku
- Frakcionace odpadní vody z hlediska rozložitelnosti
- Frakce biomasy – pro jednotlivé procesy v matici
- Specifické rychlosti popisovaných dějů

Rozhodnutí před zahájením experimentálního sběru dat a před volbou modelu

- Co chci modelovat – tj. jaké je zadání a účel
- K čemu budou výstupy z modelu sloužit
- Jaké procesy a složky mě zajímají – umožní vybrat adekvátní model i přiměřený rozsah potřebných dat
- Zhodnotit ekonomickou náročnost (pořízení dat, software, zaškolení pracovníků) s ohledem na očekávané benefity

Metody stanovení frakcí organického znečištění v OV

- Respirometricky
- Dlouhodobou aerací
- **Fyzikálně chemické metody:**
 - ultrafiltrace
 - centrifugace
 - **koagulace**



Zařízení pro respirometrická měření



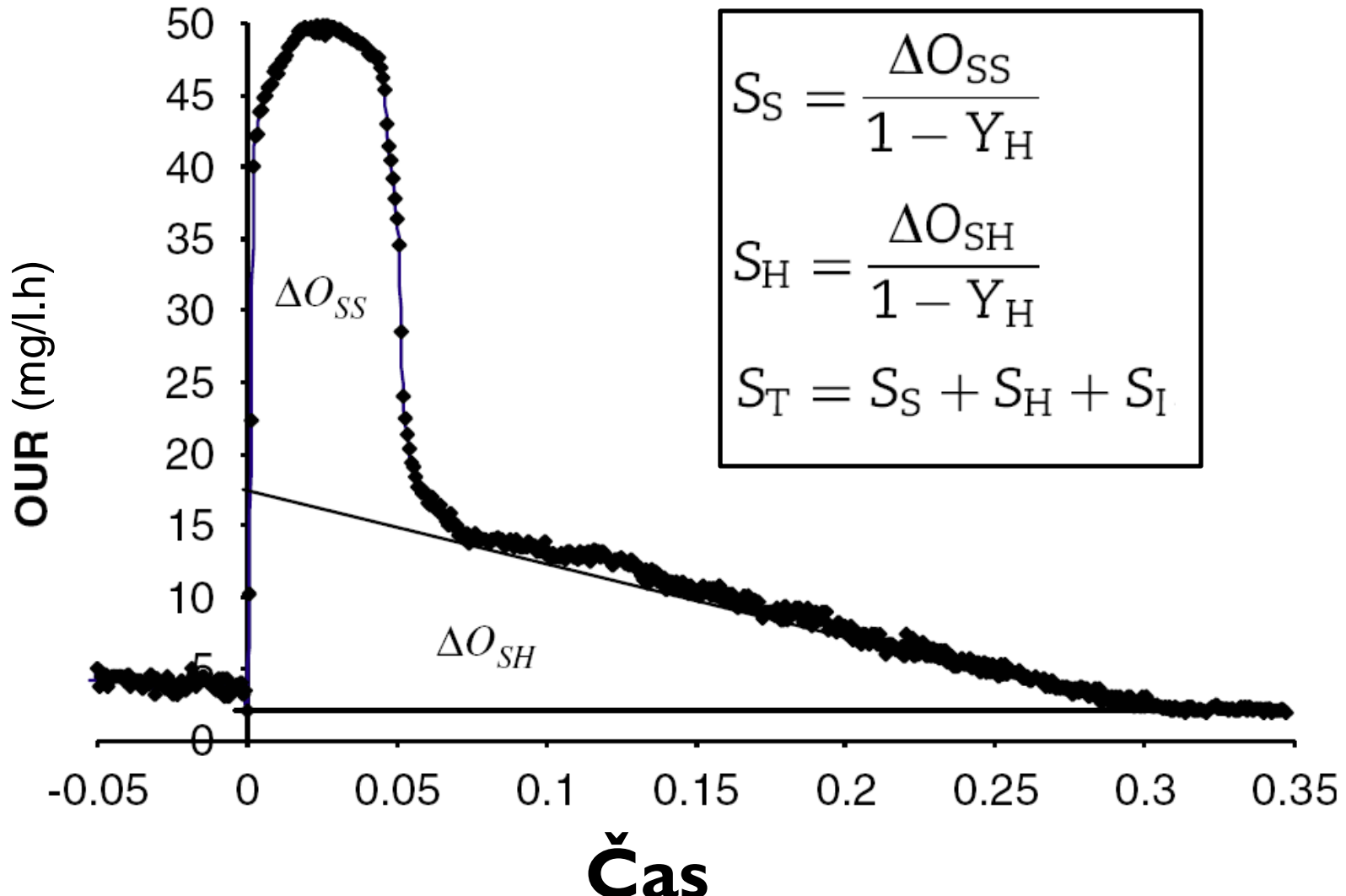
Využití respirometrických metod při získávání dat

- Stanovení maximální růstové rychlosti heterotrofních mikroorganismů - μ_{Hmax} .
- Stanovení výtěžku heterotrofní biomasy - Y_H
- Stanovení výtěžku autotrofní biomasy - Y_A

MatM



Stanovení frakcí organického znečištění respirometricky



Stanovení frakcí organického znečištění dlouhodobou aerací

- Filtrace přes 0,45 μm
- Stanovení CHSK filtrovaného a nefiltrovaného vzorku
- Provzdušňování obou vzorků ve válcích
- Po 30 dnech aerace opětovné stanovení CHSK filtrovaného a nefiltrovaného vzorku

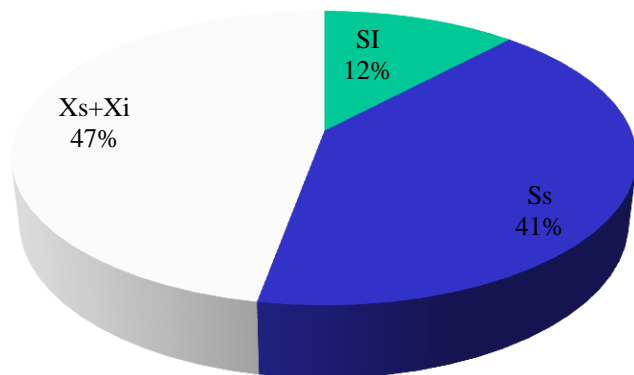
- $\text{CHSK}_{\text{celk}} = S_S + S_I + X_S + X_I$
- $S_S = \text{CHSK}_{\text{fil, zač}} - \text{CHSK}_{\text{fil, kon}}$
- $S_I = \text{CHSK}_{\text{fil, kon}}$
- $X_I = \text{CHSK}_{\text{nefil, kon}} - \text{CHSK}_{\text{fil, kon}}$
- $X_S = \text{CHSK}_{\text{nefil, zač}} - S_S - S_I - X_I$

Koagulace

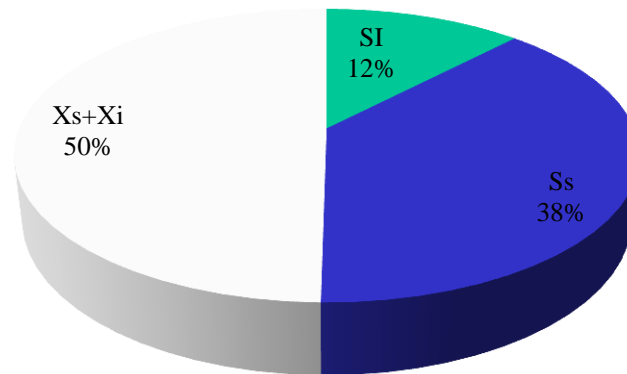
- Mamais 1993
- 100 ml OV
- 1ml ZnSO_4 (100 g/l)
- pH 10,5 (přídavek 6M NaOH)
- filtrace přes 0,45 μm synpor
- rychlá a levná metoda



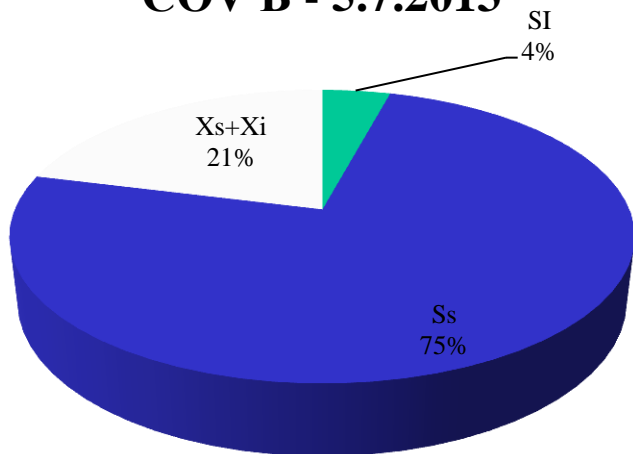
ČOV A - 26.2.2014



ČOV A - 12.11.2013



ČOV B - 5.7.2013

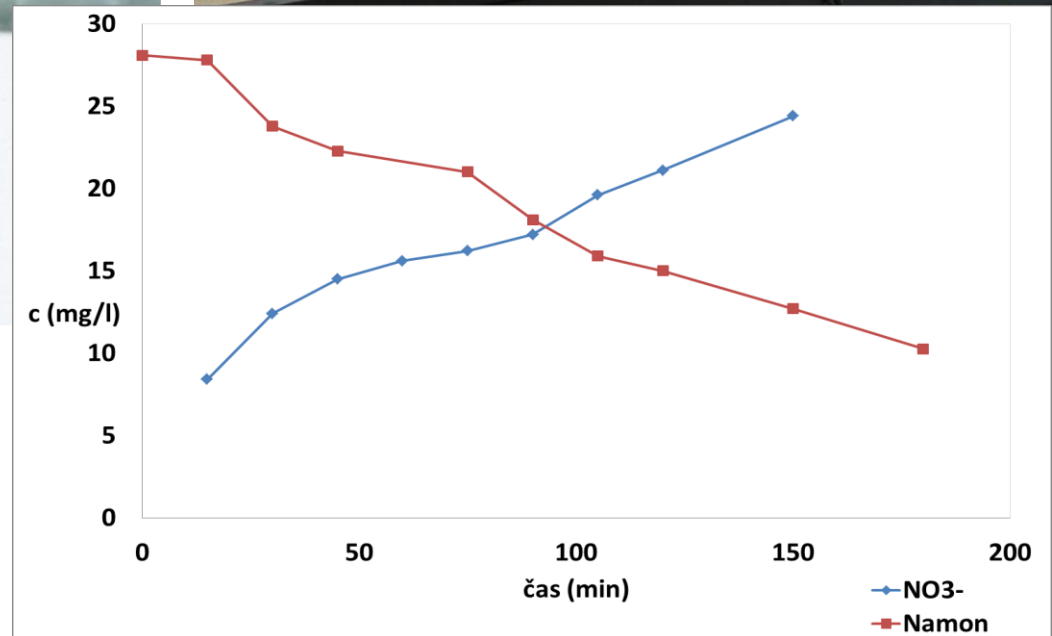
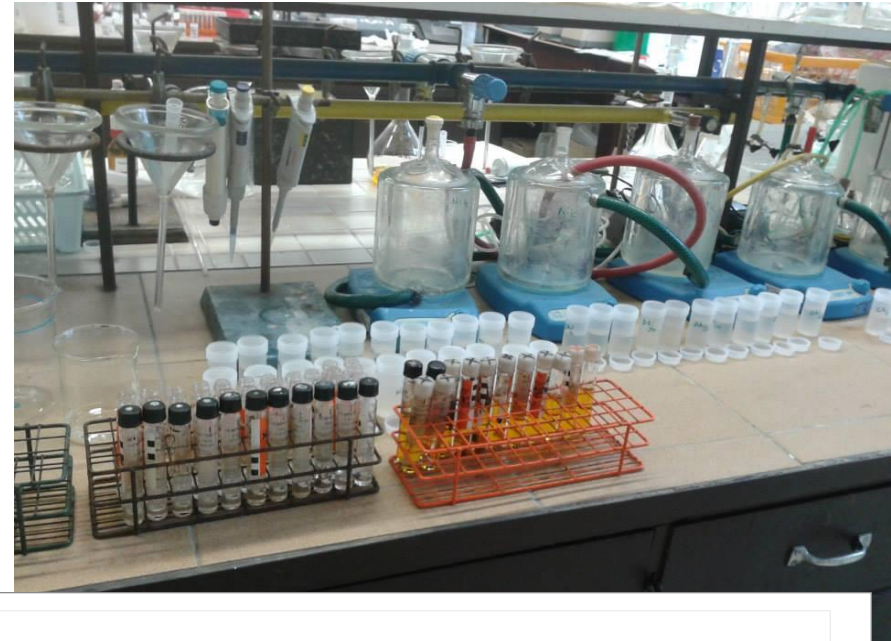


ČOV B - 26.9.2013

Vliv dávkování org.
substrátu do **OV**



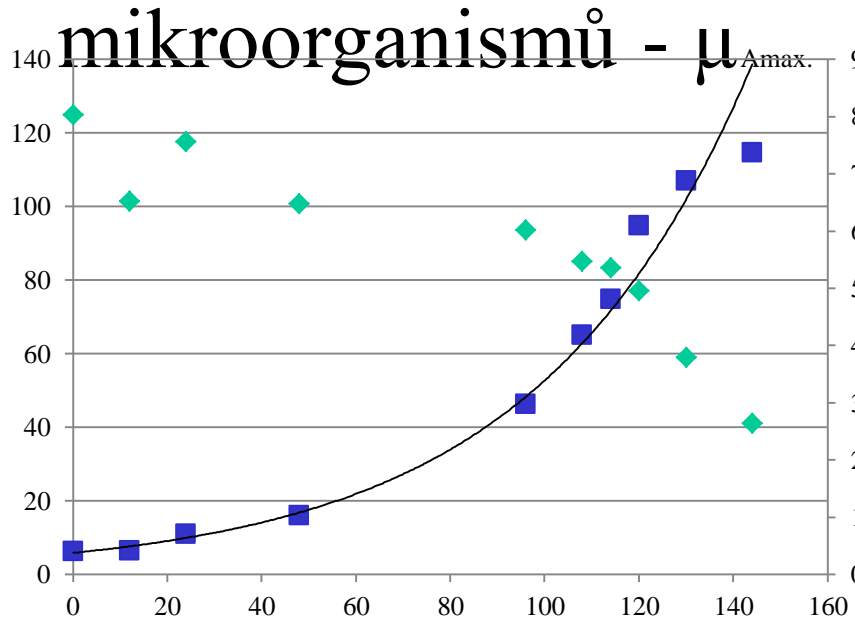
Kinetické testy



Využití kinetických testů při získávání dat pro

- Stanovení maximální
růstové rychlosti
autotrofních

- **Vysoký F/M batch test**

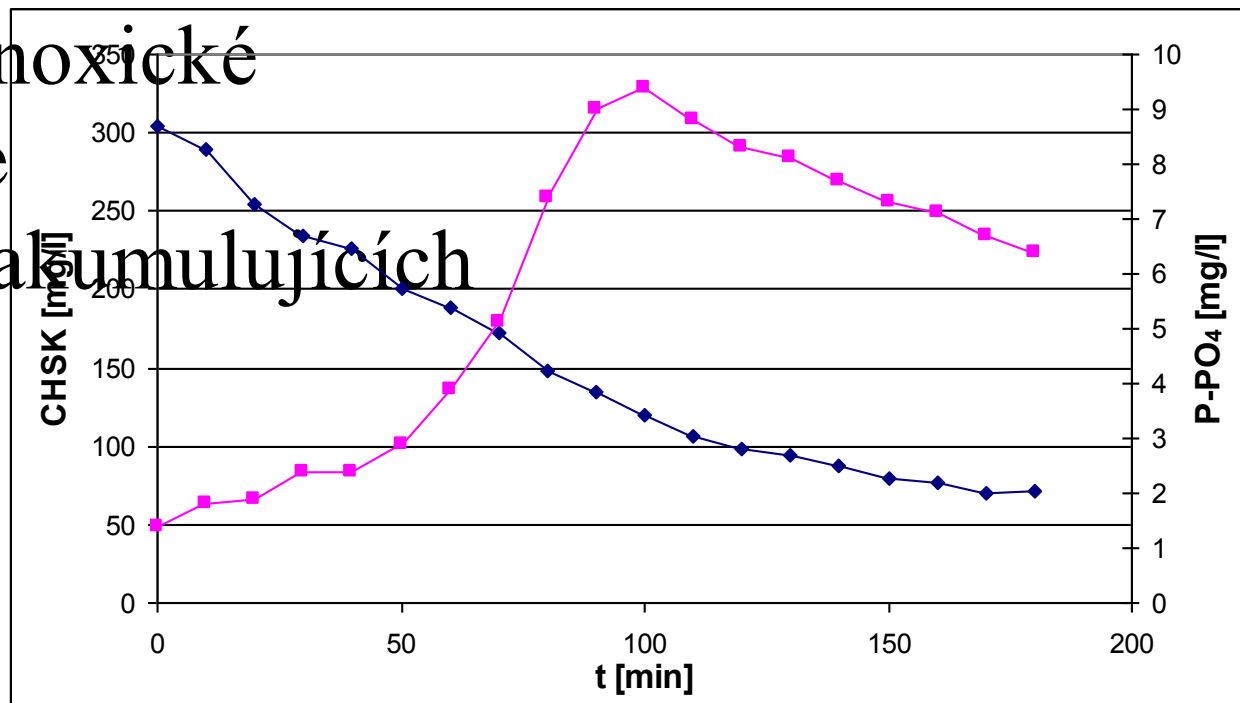


- **Nízký F/M batch test**

- **Metoda vymývání biomasy**

Využití kinetických testů při získávání dat pro

- Stanovení rychlosti
uvolňování a následné
oxické a anoxické
akumulace
polyfosfátů
organismů



3) Kalibrace

- kalibrace se provádí vůči skutečným datům získaným z daného zařízení, procesu, systému
- každý ze sady parametrů měřených *on site* by měl být použit jako vstup do modelu a prověřen s použitím ostatních parametrů jako tzv. defaultních veličin modelu (tj. pevně nastavených)
- provede se simulace po dostatečnou dobu (např. trojnásobek stáří kalu)

3) Kalibrace

- predikce dané modelem se porovnají se skutečnými výsledky modelovaného systému
- dále je nutno určit, které parametry modelu je vhodné měnit, aby se dosáhlo nejlepší shody se skutečným stavem (*best fitting*)
- statická kalibrace (na základě slévaných vzorků nebo výsledků provozního ustáleného stavu)
- dynamická kalibrace (na základě 24-hodinového sledování)

Seznam základních parametrů potřebných pro kalibraci modelu aktivační části ČOV

Proces/objekt	Minimální potřebná data	Význam pro modelování
Primární usazovací nádrže	% odstraněných NL, BSK, CHSK Průtok, množství odtahovaného kalu a jeho NL a organický podíl	Určuje, jaké zatížení vstupuje do biologického čištění Určuje, kolik kalu vstupuje do kalového hospodářství
Aktivace	Odtokové koncentrace forem N, formy P, Sušinu v nádržích, org. sušinu, DO, interní recykly průtoky	Kalibrace modelu aktivační linky Podává užitečné info o profilech nutrientů a organiky (rozpuštěné CHSK, BSK)
Dosazovací nádrž	SVI, odtokové NL, CHSK, BSK, recykly kalů a množství přebytečného kalu (průtoky a NL)	Kalibrace modelu dosazovací nádrže Množství přebytečného kalu určuje výtěžek kalu

K tomu přistupují data z frakcionace OV a biomasy a z kinetických měření - viz výše

4) Validace modelu

- nakalibrovaný model je nutno dále **prověřit**, jak věrně popisuje reakce zařízení, systému na změnu v některém parametru
- k tomu je vhodné mít další **nezávislou** sadu dat měření z reálného systému, nejlépe popisující chování systému při nějaké dynamické **změně** (pokles či vzestup zatížení apod.)
- takto kalibrovaný a validovaný model lze pro dané uspořádání používat až do doby nějaké významné změny v systému

POKRAČOVÁNÍ

Některé další základní termíny

- **prvky a subsystemy**

- víceméně logicky vytvořené základní části či jednotky systému (např. usazovací nádrž jako prvek mechanického čištění)

- **system nebo proces**

- soubor prvků navzájem **svázaných** společným látkovým proudem a/nebo tokem informací; **výstup** ze systému je **výsledkem** interakcí a vzájemných vztahů prvků nebo procesů

Některé další základní termíny

- **parametr**

- vlastnost procesu či jeho prostředí, které může být přidělena **numerická** hodnota
- dále pak **konstanta** nebo **koeficient** v rovnici

- **simulace**

- studium systému nebo jeho částí **manipulací** s jeho/jejich matematickým popisem (lze však použít i pro **fyzický** model, kdy dochází k manipulaci s jeho částmi – např. objemem určitých reakčních prostor)

Některé další základní termíny

- **procesní analýza**

- prozkoumání celého procesu jako takového, jeho alternativ či studium ekonomiky procesu

Obecné principy procesní analýzy

- **definice** problému(ů) a stanovení cílů
 - např. odstraňování org. znečištění a dosažení legislativou požadované odtokové koncentrace
- předběžné **prozkoumání a klasifikace** procesu pro jeho rozdělení na subsystémy (např. rozklad partikulovaného substrátu hydrolýzou a vztah hydrolýzních produktů k reakci)
- odhad/určení vzájemných vztahů mezi subsystémy

Obecné principy procesní analýzy

- **analýza proměnných** k získání jednoduchého a konsistentního souboru dat
- matematické modelování vztahů mezi tzv. proměnnými parametry
- vyhodnocení, jak model **věrně** popisuje chování vzájemně proměnných
- vyhodnocení, jak **reálně** model reprezentuje skutečný proces nebo jeho matematické představení
- aplikace, interpretace a porozumění výsledkům

„Varování“, která musí být zohledněna při tvorbě modelu a procesní analýze

- dostupnost a **přesnost** dat
 - ovlivňuje přesnost studie systému; různá data mají různý vliv na proces a jeho model
- **omezení** nástrojů dostupných k manipulaci matematických vyjádření tvořících model
 - vlastní omezenost některých matematických vztahů
- pokud se model skládá z bloků, které nejsou fyzicky realizovatelné, hrozí nebezpečí **přílišného** zjednodušování
- předpoklad, že model popisuje reálný systém i **mimo rozsah** proměnných, které měl model zahrnovat

Nejběžnější zjednodušující předpoklady a z nich vyplývající omezení simulačních modelů aktivace

- systém je provozován za konstantní **teploty**
- **pH** je konstantní a nemá vliv na žádný proces
- **charakteristika** odpadní vody je konstantní
 - jakoby se odebíral jen bodový vzorek
- vliv **limitace** N a P na odstraňování organického substrátu a růst buněk se neuvažuje

Nejběžnější zjednodušující předpoklady a z nich vyplývající omezení simulačních modelů aktivace

- **korekční** faktory pro procesy v anoxických podmínkách (růst, hydrolýza) jsou konstantní
- **koeficienty** pro nitrifikaci jsou konstantní
- organotrofní biomasa je **homogenní**
- zachycení partikulovaného substrátu do biomasy je **okamžité**
- hydrolýza organických látek i organického dusíku se děje současně se **stejnou rychlostí**

Nejběžnější zjednodušující předpoklady a z nich vyplývající omezení simulačních modelů aktivace

- typ akceptoru elektronů **neovlivňuje** rychlost rozkladu biomasy
- dosazovací nádrže je většinou uvažována jen jako **místo separace** odtoku a biomasy
- jednotlivé sub-systémy či reaktory jsou pojímány jako **ideálně míchané**

Charakteristika odpadních vod pro účely matematického modelování

- **Organické znečištění: v jednotkách $CHSK_{Cr}$**
 - rozpuštěné inertní S_I
 - rozpuštěné snadno rozložitelné S_S
 - stejný charakter produkty hydrolýzy S_H
 - rovněž tak produkty fermentace S_{AC}
 - partikulované inertní X_I
 - pomalu rozložitelné organické látky (částečně rozpuštěné, koloidní i partikulované) X_S

Charakteristika odpadních vod pro účely matematického modelování

- **Dusíkaté znečištění rozpuštěné:**
 - amoniakální dusík S_{NH}
 - rozpuštěné ox. formy (dusičnany, dusitany) S_{NO}
 - rozpuštěný inertní org. dusík S_{NI}
 - rozpuštěný biologicky rozlož. org. dusík S_{ND}
- **Dusíkaté znečištění partikulované:**
 - pomalu rozložitelný organický dusík X_{ND}
 - produktem jeho **hydrolýzy** je S_{NH}
 - inertní partikulovaný org. dusík X_{NI} nevýznamný

Charakteristika odpadních vod pro účely matematického modelování

- **Další ukazatele:**
 - koncentrace rozpuštěného kyslíku S_O
 - pro účely bilancí je $S_O = -CHSK$
 - kyselinová neutr. kapacita (alkalita) S_{ALK}
 - teplota T

Charakteristika biomasy pro účely matematického modelování

- **Obecně koncentrace biomasy celk. X_B**
- **Organotrofní biomasa:**
 - celková heterotrofní biomasa $X_{B,H}$
 - frakce heterotrofní biomasy:
 - např. $X_{B,H,PAO}$ – polyfosfátakumulující
 - $X_{B,H,F}$ – fermentativní
 - $X_{B,H,GAO}$ – glukózuakumulující
 - $X_{B,H,D}$ – denitrifikující heterotrofní biomasa

Charakteristika biomasy pro účely matematického modelování

- **litotrofní biomasa:**

- litotrofní biomasa (= nitrifikanti) $X_{B,A}$
- teoreticky pro specifický případ můžeme uvažovat frakci např. $X_{B,A,S}$ – litotrofní biomasa oxidující síru, apod.

Ostatní parametry a charakteristiky nutné pro sestavení modelu

- **Parametry, které nutno vyhodnotit, případně experimentálně určit:**
 - koeficient produkce heterotrofní biomasy Y_H
 - max. spec. růstová rychl. het. biomasy $\mu_{MAX,H}$
 - koeficient rozkladu heterotrofní biomasy b_H
 - „půl“-saturační konstanta heterotr. biomasy K_S
 - max. spec. růstová rychl. aut. biomasy $\mu_{MAX,A}$
 - „půl“-saturační konstanta autotr. biomasy K_{NH}
 - „půl“-saturační konstanta hydrolýzy pomalu rozložitelného substrátu K_X

Ostatní parametry a charakteristiky nutné pro sestavení modelu

- **Parametry, které nutno vyhodnotit, případně experimentálně určit:**
 - rychlost amonifikace (hydrolýzy X_{ND}) k_a
 - korekční faktor pro μ_H v anoxických podm. η_g
 - korekční faktor pro hydrolýzu za anoxických podmínek η_h
 - maximální spec. rychlost hydrolýzy k_h

Ostatní parametry a charakteristiky nutné pro sestavení modelu

$$\eta_g = \frac{2,86 \times NUR_g}{OUR_g}$$

$$\eta_h = \frac{2,86 \times NUR_h}{OUR_h}$$

Ostatní parametry a charakteristiky nutné pro sestavení modelu

- **Parametry, které možno předpokládat (a měnit ve výpočtu):**
 - výtěžek autotrofní biomasy Y_A
 - koeficient rozkladu autotrof. biomasy b_A
 - frakce biomasy vedoucí k inertnímu partikulovanému produktu (X_I) f_P
 - podíl hmoty dusíku ku hmotě CHSK v biomase i_{XB} a endogenní biomase i_{XE}
 - podíl hmoty dusíku ku hmotě CHSK v produktech z biomasy i_{XP}

Ostatní parametry a charakteristiky nutné pro sestavení modelu

- **Parametry, které možno předpokládat (a měnit ve výpočtu):**
 - „půl“-saturační konstanta pro kyslík pro heterotrofní biomasu $K_{O,H}$
 - „půl“-saturační konstanta pro dusičnanový dusík pro denitrifikační heterotrofní biomasu K_{NO}
 - „půl“-saturační konstanta pro kyslík pro autotrofní biomasu $K_{O,A}$

Typické rozsahy hodnot parametrů, „defaultní“ hodnoty

- **Stechiometrické parametry**

Symbol	jednotka	20 °C	10 °C
Y_A	g bun. CHSK/g N oxid.	0,24	0,24
Y_H	g bun. CHSK/g CHSK oxid.	0,67	0,67
f_P	bezrozměrné	0,08	0,08
i_{XB}	g N/g CHSK v biomase	0,086	0,086
i_{XE}	g N/g CHSK v endogen.biom.	0,06	0,06

Typické rozsahy hodnot parametrů, „defaultní“ hodnoty

- Kinetické parametry**

Symbol	jednotka	20 °C	10 °C
$\mu_{MAX,H}$	den ⁻¹	6,0	3,0
K_S	g CSKK/m ³	20	20
$K_{O,H}$	g O ₂ /m ³	0,2	0,2
K_{NO}	g NO ₃ -N/m ³	0,5	0,5
b_H	den ⁻¹	0,62	0,2
η_g	bezrozměrné	0,8	0,8
η_h	-“-	0,4	0,4

Typické rozsahy hodnot parametrů, „defaultní“ hodnoty

- Kinetické parametry**

Symbol	jednotka	20 °C	10 °C
k_h	g pom.roz.CHSK/g bun.CHSK.d	3,0	1,0
K_X	g pom.roz.CHSK/g bun.CHSK	0,03	0,01
$\mu_{MAX,A}$	den ⁻¹	0,8	0,3
K_{NH}	g NH ₃ -N/ m ³	1,0	1,0
$K_{O,A}$	g O ₂ /m ³	0,4	0,4
k_a	g NH ₃ -N/ g CHSK.d	0,08	0,08

Koncept modelu IAWQ: východiska

- interaktivní model
- identifikace složek modelu a procesů, kterými se transformují
- matematické formulace rychlosti dějů
- stechiometrické koeficienty pro popis interakcí složek
- vzhledem k jednoznačnějšímu popisu jsou základem modelu rovnice popisující růst (vznik) a rozklad biomasy

Koncept modelu IAWQ: východiska

- jako přiblížení procesu „růst biomasy“ se používá Monodova funkce
- k popisu procesu „rozklad biomasy“ se používá koncept endogenní respirace případně regenerační přístup

Koncept modelu IAWQ: popis systému

- rychlosti procesů a stechiometrie interakcí složek definuje chování v jednom bodě systému
- k získání požadované odezvy systému nutno dále do modelu zahrnout:
 - konfiguraci systému (jednotlivý reaktor, násobné reaktory)
 - typ reaktoru (kontinuální přítok, SBR)
 - látkové toky (druhy recyklů, bypasy, apod.)
 - konkrétní provedení dáno obslužným software

Koncept modelu IAWQ: maticový zápis

- k objasnění sestavení matice poslouží nejjednodušší hypotetický model
- tři složky:
 - heterotrofní biomasa X_{BH}
 - rozpuštěný substrát S_S
 - rozpuštěný kyslík S_O
- tyto 3 složky podléhají dvěma základním procesům:
 - růst biomasy
 - rozklad biomasy

Koncept modelu IAWQ: maticový zápis

Základní kroky při sestavování matice:

- identifikace relevantních složek modelu
 - v našem „scénáři“ tři složky seřazené vodorovně v horním řádku v pořadí s indexem i (v našem případě $i = 3$)
- identifikace procesů odehrávajících se v systému, tj. konverze či transformace složek v prvním řádku
 - procesy seřazené svisle v levém sloupci s indexem j (pro náš příklad $j = 1$ nebo 2)

Koncept modelu IAWQ: maticový zápis

Základní kroky při sestavování matice:

- sloupec zcela vpravo zaznamenává kinetické vyjádření nebo rychlostní rovnice
- tyto objemové rychlosti jsou označovány symbolem ρ_j ; j koresponduje s číslem procesu v levém sloupci
- jednotlivými prvky matice jsou stechiometrické koeficienty ν_{ij} ; ty vyjadřují hmotnostní vztahy mezi složkami v jednotlivých procesech

Koncept modelu IAWQ: maticový zápis

Základní kroky při sestavování matice:

- např. růst biomasy (+1) se děje na úkor rozpuštěného substrátu (- 1/Y)
- kyslík je spotřebován při růstu [$-(1-Y)/Y$]
- stechiometrické koeficienty jsou značně zjednodušovány používáním konzistentních jednotek – zde vyjádření všech složek v jednotkách CHSK (tj. **kyslík = - CHSK**)
- znaménko - spotřeba; + produkce

Koncept modelu IAWQ: maticový zápis

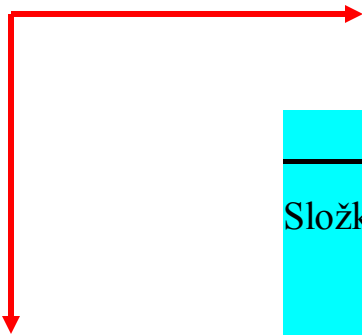
Component $i \rightarrow$	1	2	3	
	Heterotrophic biomass $X_{B,H}$	Soluble substrate S_S	Oxygen	Process rate ρ_j
Process $j \downarrow$	$[M (CHSK)/L^3]$	$[M (CHSK)/L^3]$	$[M (-CHSK)/L^3]$	
1 Growth	1	$- 1/Y_H$	$- (1 - Y_H)/Y_H$	$\mu_H \frac{S_S}{K_{SH} + S_S} \bullet X_{BH}$
2 Decay	- 1		- 1	bX_{BH}
Observed Conversion rates $[M L^{-3} T^{-1}]$				$r_i = \sum_j v_{ij} \rho_j$

Koncept modelu IAWQ: maticový zápis

zákon zachování

Složka $i \rightarrow$	1	2	3	Rychlost procesu ρ_j
	Heterotrofní biomasa $X_{B,H}$	Rozpuštěný substrát S_S	Složka kyslík	
Proces $j \downarrow$	$[M (CHSK)/L^3]$	$[M (CHSK)/L^3]$	$[M (-CHSK)/L^3]$	
1 Růst	1	$- 1/Y_H$	$- (1 - Y_H)/Y_H$	$\mu_H \frac{S_S}{K_{SH} + S_S} \bullet X_{BH}$
2 Rozklad	- 1		- 1	
Pozorované konverzní rychlosti $[M L^{-3} T^{-1}]$		$r_i = \sum_j v_{ij} \rho_j$		

hmotnostní
bilance



Využití maticového zápisu

Použití k látkovým bilancím

- maticový zápis umožňuje rychlé a snadné poznání, co se děje s každou složkou systému, což usnadňuje přípravu rovnic látkové bilance
- pro každou složku se postupuje dolu ve směru šipky v daném sloupci
- základní rovnicí látkové bilance je:

$$\text{Vstup} - \text{Výstup} + \text{Reakce} = \text{Akumulace}$$

Využití maticového zápisu

Použití k látkovým bilancím

- termíny Vstup a Výstup jsou transportními jevy a závisejí na fyzikálních charakteristikách modelovaného systému
- reakční složka je dána sumou součinů stechiometrických koeficientů a reakčních rychlostí

$$r_i = \sum_j v_{ij} \rho_j$$

Využití maticového zápisu

Použití k látkovým bilancím

- pro náš případ to budou rovnice

$$r_{XBH} = \frac{\mu_{\max} S_S}{K_S + S_S} X_{BH} - bX_{BH}$$

$$r_{S_S} = -\frac{1}{Y} \frac{\mu_{\max} S_S}{K_S + S_S} X_{BH}$$

$$r_{S_o} = -\left(\frac{1-Y}{Y}\right) \frac{\mu_{\max} S_S}{K_S + S_S} X_{BH} - bX_{BH}$$

Využití maticového zápisu

Použití k látkovým bilancím

- k sestavení látkové bilance bude daná rovnice kombinována s příslušnou advektivní složkou (tj. průtokem apod.)
- k látkové bilanci nutno vždy definovat hranice systému

Využití maticového zápisu

Kontrola zákona zachování (continuity check)

- při použití konzistentních jednotek, např. CHSK, je provedení kontroly velmi jednoduché
- součet stechiometrických koeficientů na řádce **musí být nula**
- nezapomenout, že kyslík = - CHSK
- příklad: **druhý řádek naší matice**

Model zahrnující oxidaci org. C, nitrifikaci a denitrifikaci

„Switching functions“ – přepínání mezi jednotlivými kultivačními podmínkami

- koncept přepínacích funkcí použit v modelu ASM 1 k „zapínání“ nebo „vypínání“ rychlostních rovnic jednotlivých procesů v závislosti na kultivačních podmínkách
- důležité zejména pro reakce, které závisejí na typu akceptoru elektronů

Model zahrnující oxidaci org. C, nitrifikaci a denitrifikaci

Příklad – nitrifikační bakterie a nitrifikace

- nitrifikační bakterie rostou pouze v oxických podmínkách
- pokud koncentrace rozp. O_2 klesá k nule, klesá k nule i rychlost nitrifikace, i když je v systému dostatek substrátu (NH_4-N)
- skupina autorů ASM1 zvolila koncept přepínacích funkcí na bázi monodovské funkce

Model zahrnující oxidaci org. C, nitrifikaci a denitrifikaci

Přepínací funkce pro kyslík

$$\frac{S_o}{K_o + S_o}$$

- při volbě nízké hodnoty K_o se hodnota zlomku blíží „1“ už při nízkých koncentracích rozpuštěného kyslíku, takže rychlost oxického děje se nemění

Model zahrnující oxidaci org. C, nitrifikaci a denitrifikaci

Přepínací funkce pro kyslík

$$\frac{S_o}{K_o + S_o}$$

- jakmile se koncentrace kyslíku snižuje k nule, klesá k nule i hodnota přepínací funkce
- z hlediska numerické stability modelu je důležité, že přepínací funkce je spojitá

Model zahrnující oxidaci org. C, nitrifikaci a denitrifikaci

Přepínací funkce pro kyslík

- vliv koncentrace kyslíku na oxický růst heterotrofní biomasy

$$\rho_1 = \frac{\mu_{\max} S_S}{K_S + S_S} \frac{S_O}{K_O + S_O} X_{BH}$$

Model zahrnující oxidaci org. C, nitrifikaci a denitrifikaci

Přepínací funkce pro procesy probíhající bez přítomnosti rozpuštěného kyslíku

- koncept přepínacích funkcí použit v modelu ASM 1 k „zapínání“ nebo „vypínání“ rychlostních rovni jednotlivých procesů v závislosti na kultivačních podmínkách

$$\frac{K_o}{K_o + S_o} \longrightarrow 1 \quad \text{pro } S_o \longrightarrow 0$$

Component →		i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	Process Rate, ρ_j [$ML^{-3}T^{-1}$]
j	Process ↓		S_i	S_s	X_i	X_s	$X_{B,H}$	$X_{B,A}$	X_P	S_O	S_{NO}	S_{NH}	S_{ND}	X_{ND}	S_{ALK}	
1	Aerobic growth of heterotrophs			$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$		$-i_{XB}$			$-\frac{i_{XB}}{14}$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) X_{B,H}$
2	Anoxic growth of heterotrophs			$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{2.86 Y_H}$		$-i_{XB}$			$\frac{1-Y_H}{14 \cdot 2.86 Y_H}$ $-i_{XB}/14$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right)$ $\times \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \eta_g X_{B,H}$
3	Aerobic growth of autotrophs							1		$-\frac{4.57 - Y_A}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$-i_{XB} - \frac{1}{Y_A}$			$\frac{i_{XB} - 1}{14 \cdot 7 Y_A}$	$\hat{\mu}_A \left(\frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) X_{B,A}$
4	'Decay' of heterotrophs				$1 - f_P$	-1			f_P					$i_{XB} - f_P i_{XP}$		$b_H X_{B,H}$
5	'Decay' of autotrophs				$1 - f_P$			-1	f_P					$i_{XB} - f_P i_{XP}$		$b_A X_{B,A}$
6	Ammonification of soluble organic nitrogen											1	-1		$\frac{1}{14}$	$k_a S_{ND} X_{B,H}$
7	'Hydrolysis' of entrapped organics			1		-1										$k_h \frac{X_S/X_{B,H}}{K_X + (X_S/X_{B,H})} \left[\left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) \right.$ $\left. + \eta_h \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] X_{B,H}$
8	'Hydrolysis' of entrapped organic nitrogen												1	-1		$\rho_7 (X_{ND}/X_S)$
Observed Conversion Rates [$ML^{-3}T^{-1}$]			$r_i = \sum_j v_{ij} \rho_j$													
Stoichiometric Parameters: Heterotrophic yield: Y_H Autotrophic yield: Y_A Fraction of biomass yielding particulate products: f_P Mass N/Mass COD in biomass: i_{XB} Mass N/Mass COD in products from biomass: i_{XP}			Soluble inert organic matter [$M(COD)L^{-3}$]	Readily biodegradable substrate [$M(COD)L^{-3}$]	Particulate inert organic matter [$M(COD)L^{-3}$]	Slowly biodegradable substrate [$M(COD)L^{-3}$]	Active heterotrophic biomass [$M(COD)L^{-3}$]	Active autotrophic biomass [$M(COD)L^{-3}$]	Particulate products arising from biomass decay [$M(COD)L^{-3}$]	Oxygen (negative COD) [$M(-COD)L^{-3}$]	Nitrate and nitrite nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	NH_4^+ + NH_3 nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Soluble biodegradable organic nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Particulate biodegradable organic nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Alkalinity – Molar units	Kinetic Parameters: Heterotrophic growth and decay: $\hat{\mu}_H, K_S, K_{O,H}, K_{NO}, b_H$ Autotrophic growth and decay: $\hat{\mu}_A, K_{NH}, K_{O,A}, b_A$ Correction factor for anoxic growth of heterotrophs: η_g Ammonification: k_a Hydrolysis: k_h, K_X Correction factor for anoxic hydrolysis: η_h

Component →		i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	Process Rate, ρ_j [$ML^{-3} T^{-1}$]	
j	Process ↓		S_I	S_S	X_I	X_S	$X_{B,H}$	$X_{B,A}$	X_P	S_O	S_{NO}	S_{NH}	S_{ND}	X_{ND}	S_{ALK}		
1	Aerobic growth of heterotrophs			$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$		$-i_{XB}$			$-\frac{i_{XB}}{14}$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) X_{B,H}$	
2	Anoxic growth of heterotrophs			$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{2.86 Y_H}$		$-i_{XB}$			$\frac{1-Y_H}{14 \cdot 2.86 Y_H}$ $-i_{XB}/14$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right)$ $\times \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \eta_r X_{B,H}$	
3	Aerobic growth of autotrophs							1		$-\frac{4.57 - Y_A}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$-i_{XB} - \frac{1}{Y_A}$			$\frac{i_{XB}}{14} - \frac{1}{7 Y_A}$	$\hat{\mu}_A \left(\frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) X_{B,A}$	
4	'Decay' of heterotrophs					$1 - f_P$	-1		f_P						$i_{XB} - f_P i_{XP}$	$b_H X_{B,H}$	
5	'Decay' of autotrophs					$1 - f_P$		-1	f_P						$i_{XB} - f_P i_{XP}$	$b_A X_{B,A}$	
6	Ammonification of soluble organic nitrogen											1	-1		$\frac{1}{14}$	$k_a S_{ND} X_{B,H}$	
7	'Hydrolysis' of entrapped organics			1			-1									$k_h \frac{X_S / X_{B,H}}{K_X + (X_S / X_{B,H})} \left[\left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) \right.$ $\left. + \eta_h \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] X_{B,H}$	
8	'Hydrolysis' of entrapped organic nitrogen												1	-1		$\rho_7 (X_{ND} / X_S)$	
Observed Conversion Rates [$ML^{-3} T^{-1}$]		$r_i = \sum_j v_{ij} \rho_j$															
Stoichiometric Parameters: Heterotrophic yield: Y_H Autotrophic yield: Y_A Fraction of biomass yielding particulate products: f_P Mass N/Mass COD in biomass: i_{XB} Mass N/Mass COD in products from biomass: i_{XP}		Soluble inert organic matter [$M(COD)L^{-3}$]	Readily biodegradable substrate [$M(COD)L^{-3}$]	Particulate inert organic matter [$M(COD)L^{-3}$]	Slowly biodegradable substrate [$M(COD)L^{-3}$]	Active heterotrophic biomass [$M(COD)L^{-3}$]	Active autotrophic biomass [$M(COD)L^{-3}$]	Particulate products arising from biomass decay [$M(COD)L^{-3}$]	Oxygen (negative COD) [$M(-COD)L^{-3}$]	Nitrate and nitrite nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	NH_4^+ + NH_3 nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Soluble biodegradable organic nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Particulate biodegradable organic nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Alkalinity – Molar units	Kinetic Parameters: Heterotrophic growth and decay: $\hat{\mu}_H, K_S, K_{O,H}, K_{NO}, b_H$ Autotrophic growth and decay: $\hat{\mu}_A, K_{NH}, K_{O,A}, b_A$ Correction factor for anoxic growth of heterotrophs: η_r Ammonification: k_a Hydrolysis: k_h, K_X Correction factor for anoxic hydrolysis: η_h		

Component →															Process Rate, ρ_j [$ML^{-3}T^{-1}$]	
j	Process ↓	1 S_I	2 S_S	3 X_I	4 X_S	5 $X_{B,H}$	6 $X_{B,A}$	7 X_P	8 S_{O_2}	9 S_{NO_3}	10 S_{NH_4}	11 S_{ND}	12 X_{ND}	13 S_{ALK}		
1	Aerobic growth of heterotrophs		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$		$-i_{XB}$			$-\frac{i_{XB}}{14}$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{S_{O_2}}{K_{O,H} + S_{O_2}} \right) X_{B,H}$	
2	Anoxic growth of heterotrophs		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{2.86 Y_H}$		$-i_{XB}$			$\frac{1-Y_H}{14 \cdot 2.86 Y_H}$ $-\frac{i_{XB}}{14}$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_{O_2}} \right)$ $\times \left(\frac{S_{NO_3}}{K_{NO_3} + S_{NO_3}} \right) \eta_R X_{B,H}$	
3	Aerobic growth of autotrophs						1		$-\frac{4.57 - Y_A}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$-i_{XB} - \frac{1}{Y_A}$			$\frac{i_{XB}}{14} - \frac{1}{7 Y_A}$	$\hat{\mu}_A \left(\frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4} + S_{NH_4}} \right) \left(\frac{S_{O_2}}{K_{O,A} + S_{O_2}} \right) X_{B,A}$	
4	'Decay' of heterotrophs				$1 - f_P$	-1		f_P					$i_{XB} - f_P i_{XP}$		$b_H X_{B,H}$	
5	'Decay' of autotrophs				$1 - f_P$		-1	f_P					$i_{XB} - f_P i_{XP}$		$b_A X_{B,A}$	
6	Ammonification of soluble organic nitrogen										1	-1		$\frac{1}{14}$	$k_a S_{ND} X_{B,H}$	
7	'Hydrolysis' of entrapped organics		1		-1										$k_h \frac{X_S / X_{B,H}}{K_X + (X_S / X_{B,H})} \left[\left(\frac{S_{O_2}}{K_{O,H} + S_{O_2}} \right) + \eta_h \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_{O_2}} \right) \left(\frac{S_{NO_3}}{K_{NO_3} + S_{NO_3}} \right) \right] X_{B,H}$	
8	'Hydrolysis' of entrapped organic nitrogen											1	-1		$\rho_T (X_{ND} / X_S)$	
Observed Conversion Rates [$ML^{-3}T^{-1}$]		$r_i = \sum_j v_{ij} \rho_j$														
Stoichiometric Parameters: Heterotrophic yield: Y_H Autotrophic yield: Y_A Fraction of biomass yielding particulate products: f_P Mass N/Mass COD in biomass: i_{XB} Mass N/Mass COD in products from biomass: i_{XP}		Soluble inert organic matter [$M(COD)L^{-3}$]	Readily biodegradable substrate [$M(COD)L^{-3}$]	Particulate inert organic matter [$M(COD)L^{-3}$]	Slowly biodegradable substrate [$M(COD)L^{-3}$]	Active heterotrophic biomass [$M(COD)L^{-3}$]	Active autotrophic biomass [$M(COD)L^{-3}$]	Particulate products arising from biomass decay [$M(COD)L^{-3}$]	Oxygen (negative COD) [$M(-COD)L^{-3}$]	Nitrate and nitrite nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	NH_4^+ and NH_3 nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Soluble biodegradable organic nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Particulate biodegradable organic nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Alkalinity - Molar units	Kinetic Parameters: Heterotrophic growth and decay: $\hat{\mu}_H, K_S, K_{O,H}, K_{NO_3}, b_H$ Autotrophic growth and decay: $\hat{\mu}_A, K_{NH_4}, K_{O,A}, b_A$ Correction factor for anoxic growth of heterotrophs: η_R Ammonification: k_a Hydrolysis: k_h, K_X Correction factor for anoxic hydrolysis: η_h	

Component →		i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	Process Rate, ρ_j [$ML^{-3}T^{-1}$]	
j	Process ↓		S_I	S_S	X_I	X_S	$X_{B,H}$	$X_{B,A}$	X_P	S_O	S_{NO}	S_{NH}	S_{ND}	X_{ND}	S_{ALK}		
1	Aerobic growth of heterotrophs			$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$		$-i_{XB}$			$-\frac{i_{XB}}{14}$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) X_{B,H}$	
2	Anoxic growth of heterotrophs			$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{2.86 Y_H}$		$-i_{XB}$			$\frac{1-Y_H}{14 \cdot 2.86 Y_H}$ $-i_{XB}/14$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right)$ $\times \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \eta_R X_{B,H}$	
3	Aerobic growth of autotrophs							1		$-\frac{4.57 - Y_A}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$-i_{XB} - \frac{1}{Y_A}$			$\frac{i_{XB}}{14} - \frac{1}{7 Y_A}$	$\hat{\mu}_A \left(\frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) X_{B,A}$	
4	'Decay' of heterotrophs				$1 - f_P$	-1			f_P						$i_{XB} - f_P i_{XP}$	$b_H X_{B,H}$	
5	'Decay' of autotrophs				$1 - f_P$			-1	f_P						$i_{XB} - f_P i_{XP}$	$b_A X_{B,A}$	
6	Ammonification of soluble organic nitrogen											1	-1		$\frac{1}{14}$	$k_a S_{ND} X_{B,H}$	
7	'Hydrolysis' of entrapped organics		1			-1										$k_h \frac{X_S/X_{B,H}}{K_X + (X_S/X_{B,H})} \left[\left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) + \eta_h \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] X_{B,H}$	
8	'Hydrolysis' of entrapped organic nitrogen												1	-1		$\rho_7 (X_{ND}/X_S)$	
Observed Conversion Rates [$ML^{-3}T^{-1}$]			$r_i = \sum_j v_{ij} \rho_j$														
Stoichiometric Parameters: Heterotrophic yield: Y_H Autotrophic yield: Y_A Fraction of biomass yielding particulate products: f_P Mass N/Mass COD in biomass: i_{XB} Mass N/Mass COD in products from biomass: i_{XP}		Soluble inert organic matter [$M(COD)L^{-3}$]	Readily biodegradable substrate [$M(COD)L^{-3}$]	Particulate inert organic matter [$M(COD)L^{-3}$]	Slowly biodegradable substrate [$M(COD)L^{-3}$]	Active heterotrophic biomass [$M(COD)L^{-3}$]	Active autotrophic biomass [$M(COD)L^{-3}$]	Particulate products arising from biomass decay [$M(COD)L^{-3}$]	Oxygen (negative COD) [$M(-COD)L^{-3}$]	Nitrate and nitrite nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	NH_4^+ + NH_3 nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Soluble biodegradable organic nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Particulate biodegradable organic nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Alkalinity - Molar units	Kinetic Parameters: Heterotrophic growth and decay: $\hat{\mu}_H, K_S, K_{O,H}, K_{NO}, b_H$ Autotrophic growth and decay: $\hat{\mu}_A, K_{NH}, K_{O,A}, b_A$ Correction factor for anoxic growth of heterotrophs: η_R Ammonification: k_a Hydrolysis: k_h, K_X Correction factor for anoxic hydrolysis: η_h		

Component →		i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	Process Rate, ρ_j [$ML^{-3}T^{-1}$]
j	Process ↓		S_I	S_S	X_I	X_S	$X_{B,H}$	$X_{B,A}$	X_P	S_O	S_{NO}	S_{NH}	S_{ND}	X_{ND}	S_{ALK}	
1	Aerobic growth of heterotrophs			$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$		$-i_{XB}$			$-\frac{i_{XB}}{14}$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) X_{B,H}$
2	Anoxic growth of heterotrophs			$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{2.86 Y_H}$		$-i_{XB}$			$\frac{1-Y_H}{14 \cdot 2.86 Y_H}$ $-i_{XB}/14$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right)$ $\times \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \eta_R X_{B,H}$
3	Aerobic growth of autotrophs							1		$-\frac{4.57 - Y_A}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$-i_{XB} - \frac{1}{Y_A}$			$\frac{i_{XB}}{14} - \frac{1}{7 Y_A}$	$\hat{\mu}_A \left(\frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) X_{B,A}$
4	'Decay' of heterotrophs					$1 - f_P$	-1		f_P					$i_{XB} - f_P i_{XP}$		$b_H X_{B,H}$
5	'Decay' of autotrophs					$1 - f_P$		-1	f_P					$i_{XB} - f_P i_{XP}$		$b_A X_{B,A}$
6	Ammonification of soluble organic nitrogen											1	-1		$\frac{1}{14}$	$k_a S_{ND} X_{B,H}$
7	'Hydrolysis' of entrapped organics			1		-1										$k_h \frac{X_S/X_{B,H}}{K_X + (X_S/X_{B,H})} \left[\left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) + \eta_h \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] X_{B,H}$
8	'Hydrolysis' of entrapped organic nitrogen												1	-1		$\rho_7 (X_{ND}/X_S)$
Observed Conversion Rates [$ML^{-3}T^{-1}$]		$r_i = \sum_j v_{ij} \rho_j$														
Stoichiometric Parameters: Heterotrophic yield: Y_H Autotrophic yield: Y_A Fraction of biomass yielding particulate products: f_P Mass N/Mass COD in biomass: i_{XB} Mass N/Mass COD in products from biomass: i_{XP}		Soluble inert organic matter [$M(COD)L^{-3}$]	Readily biodegradable substrate [$M(COD)L^{-3}$]	Particulate inert organic matter [$M(COD)L^{-3}$]	Slowly biodegradable substrate [$M(COD)L^{-3}$]	Active heterotrophic biomass [$M(COD)L^{-3}$]	Active autotrophic biomass [$M(COD)L^{-3}$]	Particulate products arising from biomass decay [$M(COD)L^{-3}$]	Oxygen (negative COD) [$M(-COD)L^{-3}$]	Nitrate and nitrite nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	NH_4^+ + NH_3 nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Soluble biodegradable organic nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Particulate biodegradable organic nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Alkalinity - Molar units	Kinetic Parameters: Heterotrophic growth and decay: $\hat{\mu}_H, K_S, K_{O,H}, K_{NO}, b_H$ Autotrophic growth and decay: $\hat{\mu}_A, K_{NH}, K_{O,A}, b_A$ Correction factor for anoxic growth of heterotrophs: η_R Ammonification: k_a Hydrolysis: k_h, K_X Correction factor for anoxic hydrolysis: η_h	

Component →		i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	Process Rate, ρ_j [$ML^{-3}T^{-1}$]
j	Process ↓		S_I	S_S	X_I	X_S	$X_{B,H}$	$X_{B,A}$	X_P	S_O	S_{NO}	S_{NH}	S_{ND}	X_{ND}	S_{ALK}	
1	Aerobic growth of heterotrophs			$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$		$-i_{XB}$			$-\frac{i_{XB}}{14}$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) X_{B,H}$
2	Anoxic growth of heterotrophs			$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{2.86 Y_H}$		$-i_{XB}$			$\frac{1-Y_H}{14 \cdot 2.86 Y_H}$ $-i_{XB}/14$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right)$ $\times \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \eta_R X_{B,H}$
3	Aerobic growth of autotrophs							1		$-\frac{4.57 - Y_A}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$-i_{XB} - \frac{1}{Y_A}$			$\frac{i_{XB}}{14} - \frac{1}{7 Y_A}$	$\hat{\mu}_A \left(\frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) X_{B,A}$
4	'Decay' of heterotrophs					$1 - f_P$	-1		f_P					$i_{XB} - f_P i_{XP}$		$b_H X_{B,H}$
5	'Decay' of autotrophs					$1 - f_P$		-1	f_P					$i_{XB} - f_P i_{XP}$		$b_A X_{B,A}$
6	Ammonification of soluble organic nitrogen											1	-1		$\frac{1}{14}$	$k_a S_{ND} X_{B,H}$
7	'Hydrolysis' of entrapped organics		1			-1										$k_h \frac{X_S/X_{B,H}}{K_X + (X_S/X_{B,H})} \left[\left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) \right.$ $\left. + \eta_h \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] X_{B,H}$
8	'Hydrolysis' of entrapped organic nitrogen												1	-1		$\rho_7 (X_{ND}/X_S)$
Observed Conversion Rates [$ML^{-3}T^{-1}$]			$r_i = \sum_j v_{ij} \rho_j$													
Stoichiometric Parameters: Heterotrophic yield: Y_H Autotrophic yield: Y_A Fraction of biomass yielding particulate products: f_P Mass N/Mass COD in biomass: i_{XB} Mass N/Mass COD in products from biomass: i_{XP}			Soluble inert organic matter [$M(COD)L^{-3}$]	Readily biodegradable substrate [$M(COD)L^{-3}$]	Particulate inert organic matter [$M(COD)L^{-3}$]	Slowly biodegradable substrate [$M(COD)L^{-3}$]	Active heterotrophic biomass [$M(COD)L^{-3}$]	Active autotrophic biomass [$M(COD)L^{-3}$]	Particulate products arising from biomass decay [$M(COD)L^{-3}$]	Oxygen (negative COD) [$M(-COD)L^{-3}$]	Nitrate and nitrite nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	NH_4^+ + NH_3 nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Soluble biodegradable organic nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Particulate biodegradable organic nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Alkalinity – Molar units	Kinetic Parameters: Heterotrophic growth and decay: $\hat{\mu}_H, K_S, K_{O,H}, K_{NO}, b_H$ Autotrophic growth and decay: $\hat{\mu}_A, K_{NH}, K_{O,A}, b_A$ Correction factor for anoxic growth of heterotrophs: η_R Ammonification: k_a Hydrolysis: k_h, K_X Correction factor for anoxic hydrolysis: η_h

Component →															Process Rate, ρ_j [$ML^{-3}T^{-1}$]	
j	Process ↓	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13		
		S_I	S_S	X_I	X_S	$X_{B,H}$	$X_{B,A}$	X_P	S_O	S_{NO}	S_{NH}	S_{ND}	X_{ND}	S_{ALK}		
1	Aerobic growth of heterotrophs		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$		$-i_{XB}$			$-\frac{i_{XB}}{14}$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) X_{B,H}$	
2	Anoxic growth of heterotrophs		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{2.86 Y_H}$		$-i_{XB}$			$\frac{1-Y_H}{14 \cdot 2.86 Y_H}$ $-i_{XB}/14$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right)$ $\times \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \eta_R X_{B,H}$	
3	Aerobic growth of autotrophs						1		$-\frac{4.57 - Y_A}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$-i_{XB} - \frac{1}{Y_A}$			$\frac{i_{XB}}{14} - \frac{1}{7 Y_A}$	$\hat{\mu}_A \left(\frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) X_{B,A}$	
4	'Decay' of heterotrophs				$1 - f_P$	-1		f_P					$i_{XB} - f_P i_{XP}$		$b_H X_{B,H}$	
5	'Decay' of autotrophs				$1 - f_P$		-1	f_P					$i_{XB} - f_P i_{XP}$		$b_A X_{B,A}$	
6	Ammonification of soluble organic nitrogen										1	-1		$\frac{1}{14}$	$k_a S_{ND} X_{B,H}$	
7	'Hydrolysis' of entrapped organics		1		-1										$k_h \frac{X_S/X_{B,H}}{K_X + (X_S/X_{B,H})} \left[\left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) + \eta_h \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] X_{B,H}$	
8	'Hydrolysis' of entrapped organic nitrogen											1	-1		$\rho_7 (X_{ND}/X_S)$	
Observed Conversion Rates [$ML^{-3}T^{-1}$]		$r_i = \sum_j v_{ij} \rho_j$														
Stoichiometric Parameters: Heterotrophic yield: Y_H Autotrophic yield: Y_A Fraction of biomass yielding particulate products: f_P Mass N/Mass COD in biomass: i_{XB} Mass N/Mass COD in products from biomass: i_{XP}		Soluble inert organic matter [$M(COD)L^{-3}$]	Readily biodegradable substrate [$M(COD)L^{-3}$]	Particulate inert organic matter [$M(COD)L^{-3}$]	Slowly biodegradable substrate [$M(COD)L^{-3}$]	Active heterotrophic biomass [$M(COD)L^{-3}$]	Active autotrophic biomass [$M(COD)L^{-3}$]	Particulate products arising from biomass decay [$M(COD)L^{-3}$]	Oxygen (negative COD) [$M(-COD)L^{-3}$]	Nitrate and nitrite nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	NH_4^+ + NH_3 nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Soluble biodegradable organic nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Particulate biodegradable organic nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Alkalinity - Molar units	Kinetic Parameters: Heterotrophic growth and decay: $\hat{\mu}_H, K_S, K_{O,H}, K_{NO}, b_H$ Autotrophic growth and decay: $\hat{\mu}_A, K_{NH}, K_{O,A}, b_A$ Correction factor for anoxic growth of heterotrophs: η_R Ammonification: k_a Hydrolysis: k_h, K_X Correction factor for anoxic hydrolysis: η_h	

Activated Sludge Model No. 2

- IAWQ Task Group
(Henze, Gujer a spol., 1992)
- oproti ASM1 zařazen mechanismus **EBPR**
(zvýšené biologické odstraňování fosforu)
- heterotrofní biomasa už není jen $X_{B,H}$, ale má vnitřní buněčnou strukturu
(frakce v buňce)
- rovněž členění substrátu na frakce je rozmanitější
- bohužel byla opomenuta schopnost poly-P bakterií anoxické akumulace $PO_4\text{-P}$

Activated Sludge Model No. 2

- **Složky rozpuštěného substrátu S:**
- S_A – na bázi acetátu, z hlediska stechiometrických výpočtů = H_{Ac}
- S_{ALK} – alkalita, aproximuje zachování elektrických nábojů v reakcích, pro stechiometrické výpočty = HCO_3^-
- S_F – fermentovatelný, snadno rozložitelný substrát

$$S_A + S_F = S_S$$

Activated Sludge Model No. 2

- **Nové frakce biomasy a buněčné struktury**
- X_{PAO} – biomasa polyfosfát-akumulujících mikroorganismů; „čistá biomasa“ bez hmotnosti granulí v buňce
- X_{PHA} – buněčná zásobní látka typu polyhydroxy-alkanoatu (PHB, PHV) nebo glykogen aj.
- pro stechiometrické výpočty $X_{\text{PHA}} = \text{PHB}$
($\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2$)_n

Activated Sludge Model No. 2

- **Nové frakce biomasy a buněčné struktury**
- X_{PP} – buněčný polyfosfát v PAO mikroorganismech
- pro stechiometrické výpočty se používá formule $(K_{0,33}Mg_{0,33}PO_3)_n$
- obě složky X_{PHA} a X_{PP} jsou vždy asociované s frakcí biomasy X_{PAO}

Activated Sludge Model No. 2

- **Chemické srážení fosforu**
- srážení reakce PO_4^{3-} s kovovým kationem Me^{3+}
- proto se zavádějí další partikulované frakce
- X_{MeOH} – hydroxidy či hydratované oxidy Me^{3+}
- X_{MeP} – nerozpustné fosforečnany Me^{3+}

Activated Sludge Model No. 2

- **Matrice modelu ASM2**
- v sloupcích je 19 složek (i), jejich seznam viz Tabulku 2.1 z manuálu k modelu
- v řádcích je 19 procesů (j), jejich seznam a příslušné rychlostní rovnice reakcí viz Tabulku 2.7 z manuálu
- přehled základních stechiometrických koeficientů a jejich typických hodnot viz Tabulky 3.2 a 3.3 z manuálu

Activated Sludge Model No. 2

- **Základní skupiny procesů v modelu**
- hydrolytické procesy
- procesy spojené s heterotrofními organismy X_H (včetně denitrifikačních)
- procesy spojené s polyfosfátakumulujícími mikroorganismy X_{PAO}
- procesy spojené s nitrifikanty X_{AUT}
- simultánní srážení fosforečnanů reakcí s $Me(OH)_3$

Activated Sludge Model No. 2^d

- IAWQ Task Group
(Henze, Gujer a spol., 1998)
- Principiálně přejímá matici modelu ASM2,
tj. rozp. i partikulované složky
- Oproti ASM2 přidány dva procesy ukazující
na schopnost PAO denitrifikovat, tj.

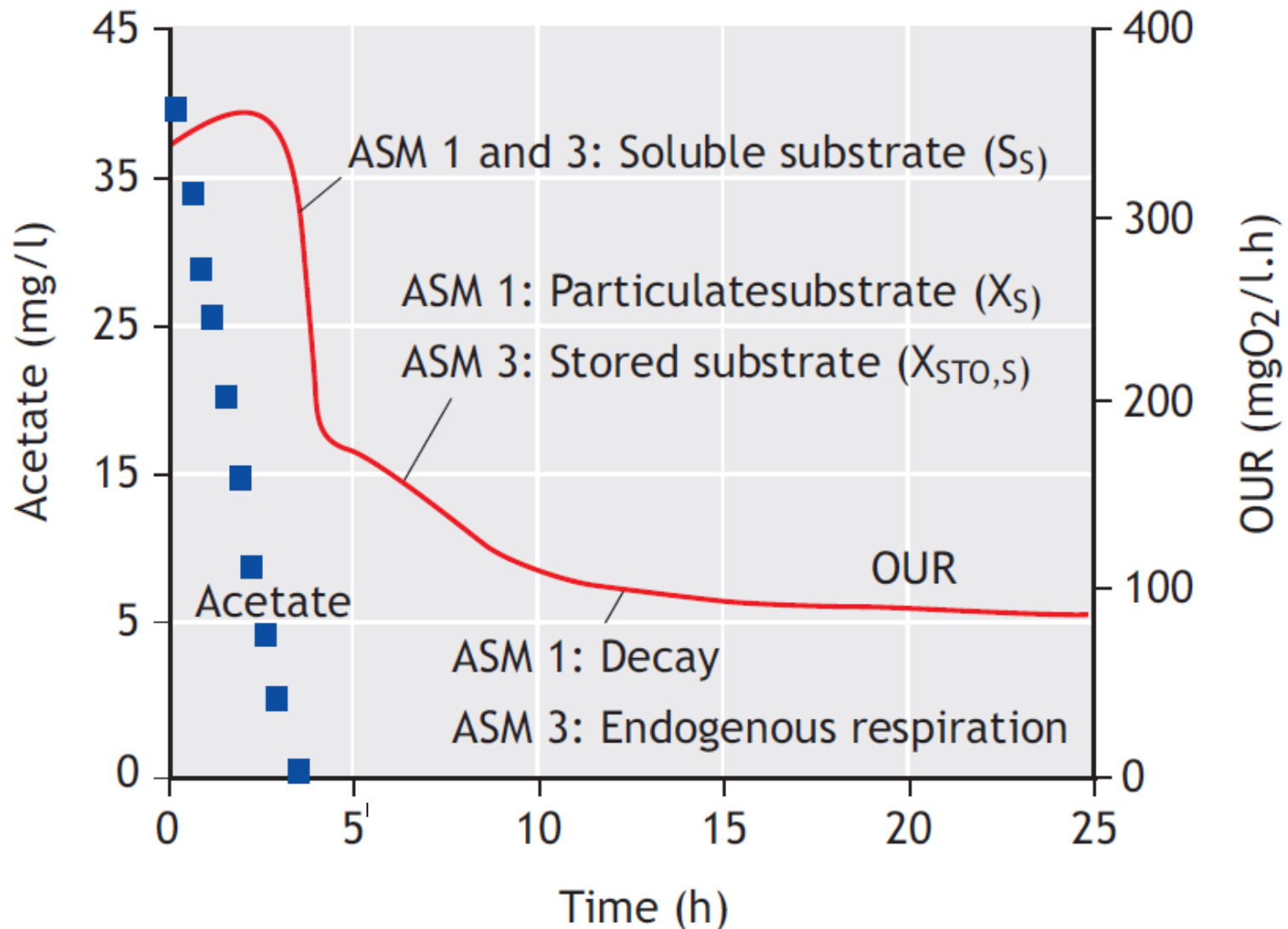
Activated Sludge Model No. 2d

- tj. nový proces $j=12$ anoxická tvorba polyfosfátů PP
- a proces $j=14$ anoxický růst X_{PAO} na X_{PHA}
- porovnejte Tabulku 2.7 a 3.3 z manuálů modelů ASM2 a ASM2d

Activated Sludge Model No. 3

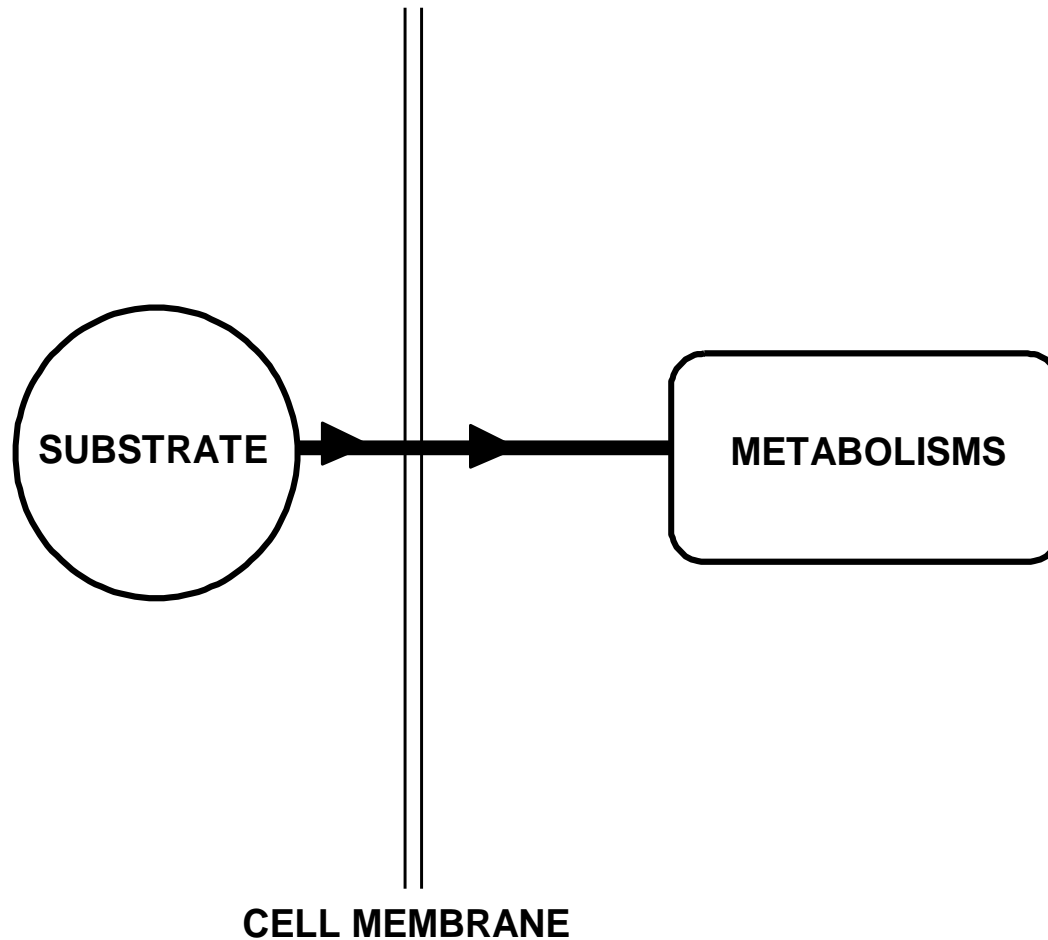
- Model ASM3 měl korigovat nesrovnalost při výkladu respirační křivky modelem ASM1
- Model ASM1 reaguje, jako by i v případě S_s se při respiraci objevoval X_s (zpomalení křivky)
- Podle ASM3 lze tuto zpomalenou fázi vysvětlit respirací zásobních produktů X_{STO}
- Rychlá akumulace substrátu následovaná růstem

Activated Sludge Model No. 3



Bacterial kinetics and selection

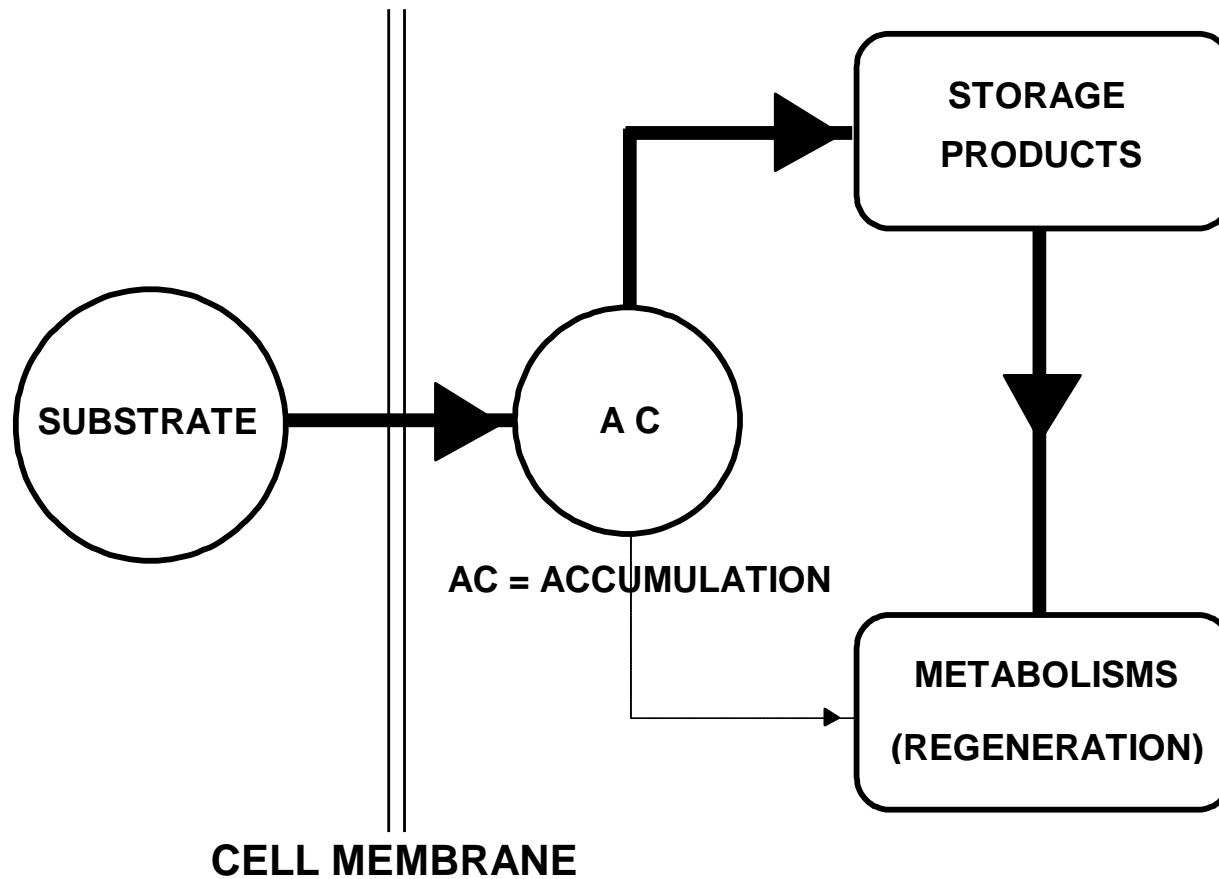
KINETIC SELECTION - BALANCED GROWTH



**RATE OF TRANSPORT = RATE OF METABOLISM
= SLOW**

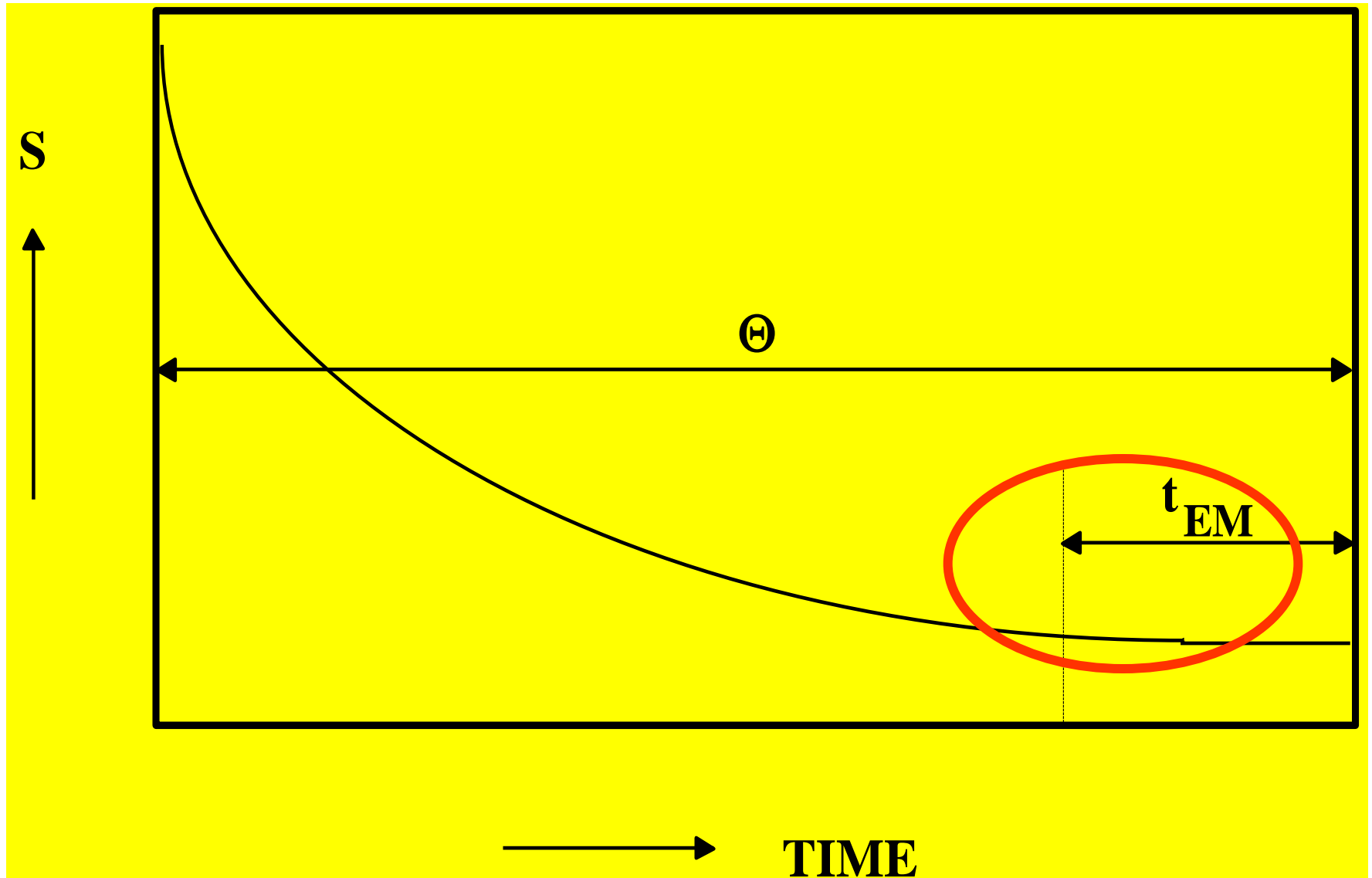
Bacterial kinetics and selection

KINETIC SELECTION - UNBALANCED GROWTH



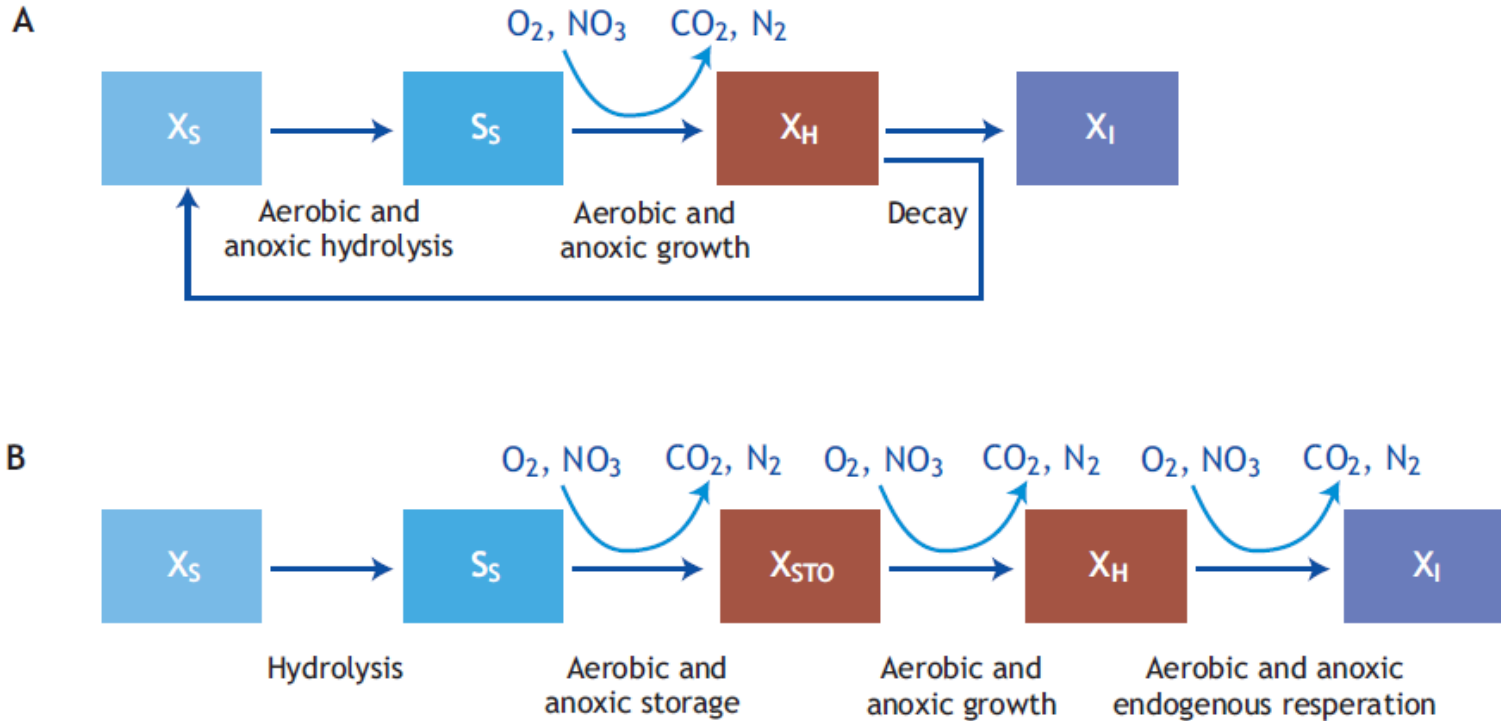
**RATE OF TRANSPORT = RATE OF
ACCUMULATION/ /STORAGE = FAST**

CONCENTRATION PROFILE IN A PLUG-FLOW SYSTEM



Activated Sludge Model No. 3

- Rozdíl v celkovém toku org.C v obou modelech



Activated Sludge Model No. 3

- Otázka chování snadno rozložitelného substrátu při respiraci (různý způsob růstu, vyrovnaný a nevyrovnaný) nemá vliv na průběh nitrifikace a denitrifikace
- Produkce a rozklad biomasy u autotrofů jsou z hlediska celkové bilance org.C zanedbatelné
- ASM1 stále dobře použitelný pro procesy odstraňování dusíku

Activated Sludge Model No. 3

Table 5.1. Stoichiometric matrix $v_{j,i}$ and composition matrix $u_{k,i}$ of ASM3. The values of x_j , y_j , z_j and t_j can be obtained in this sequence from mass and charge conservation (Equation 5.1) and composition (Equation 5.2).

Compound $i \rightarrow$		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
j Process		S_{O_2}	S_I	S_S	S_{NH_4}	S_{N_2}	S_{NOX}	S_{ALK}	X_I	X_S	X_H	X_{STO}	X_A	X_{SS}
\downarrow Expressed as \rightarrow		O_2	COD	COD	N	N	N	Mole	COD	COD	COD	COD	COD	SS
1 Hydrolysis			f_{S_I}	x_1	y_1			z_1			-1			$-i_{X_S}$
<i>Heterotrophic organisms, aerobic and denitrifying activity</i>														
2 Aerobic storage of S_S	x_2			-1	y_2			z_2				Y_{STO,O_2}		t_2
3 Anoxic storage of S_S				-1	y_3	$-x_3$	x_3	z_3				$Y_{STO,NOX}$		t_3
4 Aerobic growth of X_H	x_4				y_4			z_4			1	$-1/Y_{H,O_2}$		t_4
5 Anoxic growth (denitrific.)					y_4	$-x_5$	x_5	z_5			1	$-1/Y_{H,NOX}$		t_5
6 Aerobic endog. respiration	x_6				y_6			z_6	f_I		-1			t_6
7 Anoxic endog. respiration					y_7	$-x_7$	x_7	z_7	f_I		-1			t_7
8 Aerobic respiration of X_{STO}	x_8											-1		t_8
9 Anoxic respiration of X_{STO}						$-x_9$	x_9	z_9				-1		t_9
<i>Autotrophic organisms, nitrifying activity</i>														
10 Aerobic growth of X_A	x_{10}				y_{10}		$1/Y_A$	z_{10}					1	t_{10}
11 Aerobic endog. respiration	x_{11}				y_{11}			z_{11}	f_I				-1	t_{11}
12 Anoxic endog. respiration					y_{12}	$-x_{12}$	x_{12}	z_{12}	f_I				-1	t_{12}
<i>Composition matrix $u_{k,i}$</i>														
<i>k Conservatives</i>														
1 ThOD	g ThOD	-1	1	1		-1.71	-4.57		1	1	1	1	1	1
2 Nitrogen	g N		i_{N,S_I}	i_{N,S_S}	1	1	1		i_{N,X_I}	i_{N,X_S}	$i_{N,BM}$			$i_{N,BM}$
3 Ionic charge	Mole +				1/14		-1/14	-1						
<i>Observables</i>														
4 SS	g SS								i_{SS,X_I}	i_{SS,X_S}	$i_{SS,BM}$	0.60		$i_{SS,BM}$

Activated Sludge Model No. 3

Table 6.1. Kinetic rate expressions ρ_j for ASM3. All $\rho_j \geq 0$.

j Process	Process rate equation ρ_j , all $\rho_j \geq 0$.
1 Hydrolysis	$k_H \cdot \frac{X_S/X_H}{K_X + X_S/X_H} \cdot X_H$
<i>Heterotrophic organisms, aerobic and denitrifying activity</i>	
2 Aerobic storage of S_S	$k_{STO} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_S}{K_S + S_S} \cdot X_H$
3 Anoxic storage of S_S	$k_{STO} \cdot \eta_{NOX} \cdot \frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \cdot \frac{S_S}{K_S + S_S} \cdot X_H$
4 Aerobic growth	$\mu_H \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4} + S_{NH_4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{K_{ALK} + S_{ALK}} \cdot \frac{X_{STO}/X_H}{K_{STO} + X_{STO}/X_H} \cdot X_H$
5 Anoxic growth (denitrification)	$\mu_H \cdot \eta_{NOX} \cdot \frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \cdot \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4} + S_{NH_4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{K_{ALK} + S_{ALK}} \cdot \frac{X_{STO}/X_H}{K_{STO} + X_{STO}/X_H} \cdot X_H$
6 Aerobic endogenous respiration	$b_{H,O_2} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot X_H$
7 Anoxic endogenous respiration	$b_{H,NOX} \cdot \frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \cdot X_H$
8 Aerobic respiration of X_{STO}	$b_{STO,O_2} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot X_{STO}$
9 Anoxic respiration of X_{STO}	$b_{STO,NOX} \cdot \frac{K_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{NOX} + S_{NOX}} \cdot X_{STO}$
<i>Autotrophic organisms, nitrifying activity</i>	
10 Aerobic growth of X_A , nitrification	$\mu_A \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{A,O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NH_4}}{K_{A,NH_4} + S_{NH_4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{K_{A,ALK} + S_{ALK}} \cdot X_A$
11 Aerobic endogenous respiration	$b_{A,O_2} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{A,O_2} + S_{O_2}} \cdot X_A$
12 Anoxic endogenous respiration	$b_{A,NOX} \cdot \frac{K_{A,O_2}}{K_{A,O_2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NOX}}{K_{A,NOX} + S_{NOX}} \cdot X_A$

Porovnání používaných modelů

Model	Nitrification	Denitrification	Heterotrophic / autotrophic decay	Hydrolysis	EBPR	Denitrifying PAO	Lysis of PAO / PHA	Fermentation	Chemical P removal	Reactions	State variables	Reference
UCTOLD	●	●	DR, Cst	EA						8	13	Dold <i>et al.</i> , 1980, 1991
ASM1	●	●	DR, Cst	EA						8	13	Henze <i>et al.</i> , 1987
ASM3	●	●	ER, EA	Cst						12	13	Gujer <i>et al.</i> , 1999
UCTPHO	●	●	DR, Cst	EA	●		Cst	●		19	19	Wentzel, 1988, 1989a,b
ASM2	●	●	DR, Cst	EA	●		Cst	●	●	19	19	Henze <i>et al.</i> , 1995
ASM2d	●	●	DR, Cst	EA	●	●	Cst	●	●	21	19	Henze <i>et al.</i> , 1999
B&D	●	●	DR, Cst	EA	●	●	EA	●		36	19	Barker and Dold, 1997
TUDP	●	●	DR, Cst	EA	●	●	EA	●		21	17	Meijer, 2004
ASM3-bioP	●	●	ER, EA	Cst	●	●	EA			23	17	Rieger <i>et al.</i> , 2001

Den. PAO, Denitrifying PAO activity included in the model; DR, death regeneration concept; EA, electron acceptor depending; ER, endogenous respiration concept; Cst= not electron acceptor depending

Modelování populační dynamiky

- Další dělení heterotrofní biomasy $X_{B,H}$
- Vlákniťá populace: dělení podle W. a Graua:
 - Vlákna *S*: aerobní bytnění *S. natans*, *H. hydrossis*, ...
 - Vlákna *C*: *Thiothrix*, *Beggiatoa*, Typ 021N
 - Vlákna *A*: bytnění při nízkém zatížení (F/M) a pěnění: *M. parvicella*, *N. limicola*, Typ 0092
 - Vlákna *F*: pěnotvorné atinonycety
- Vločkotvorná populace: podle akceptoru e^-

„AEROFIL“ MODEL“

- Kappeler a Gujer, 1992-1993
- Rozšíření matice o frakce vláknitých a vločkovatelných m.o.
- $X_{B,Fil}$ = obligátně aerobní vláknité m.o.
- $X_{B,Floc}$ = fakultativně aerobní vločkovatelné m.o.
- Nová frakce snadno rozložitelného substrátu
- $S_H =$ snadno rozložitelný produkt hydrolýzy
 X_S

„AEROFIL“ MODEL“

- $X_{B, Fil}$ roste jen při $S_O > 0$ (nutnost „switching function“)
- Růstová strategie $X_{B, Fil}$ a $X_{B, Floc}$ v aerobních podmínkách:

**Rozdílné hodnoty K_S pro S_S i pro S_H
(viz Tabulky 2 a 3)**

- Významný vliv inokulace systému $X_{B, Fil}$

„ACTISCUM MODEL“

- Nové frakce snadno rozložitelného i partikulovaného substrátu S a X s indexy:
- **Hil – hydrofilní**
- **Lip – hydrofobní**
- „specializace“ určena zvláštními přepínacími funkcemi $S_{Hil}/(K_{Hil}+S_{Hil})$ a $S_{Lip}/(K_{Lip}+S_{Lip})$
- Matice a rychlostní rovnice viz Tabulky 1,2

Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

- Pro posouzení **aktuálního stavu** čistírny je třeba mj. provádět laboratorní kinetické batch testy, za účelem zjištění **aktivity jednotlivých skupin mikroorganismů** zastoupených v aktivovaném kalu.

Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

- Aktivovaný kal představuje **funkční polykulturu**, jejíž složení se stabilizuje samovolně podle složení odpadní vody, hydraulického režimu, doby zdržení biomasy a dalších parametrů v reaktoru a v závislosti na kultivačních podmínkách, za kterých je využívána rozhodující většina dostupného substrátu.

Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

- Z hlediska odstraňování složek znečištění odpadních vod jsou pro správnou funkci aktivačního procesu rozhodující následující funkční skupiny mikroorganismů
 - **anoxické a oxické heterotrofní mikroorganismy**
 - **autotrofní mikroorganismy**
 - **polyfosfátakumulující mikroorganismy**

Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

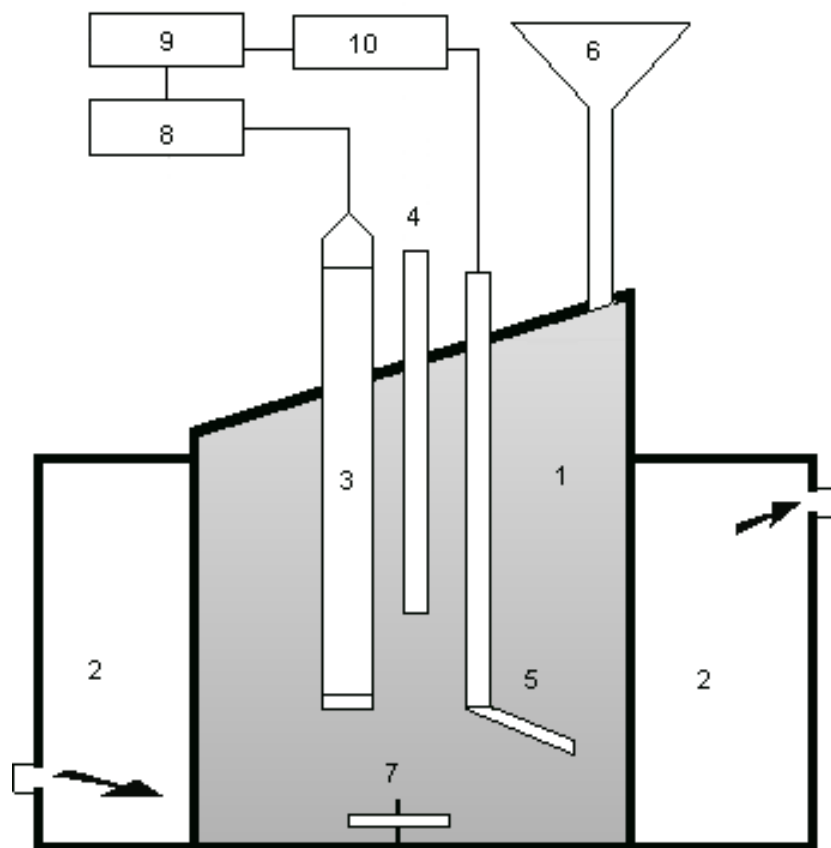
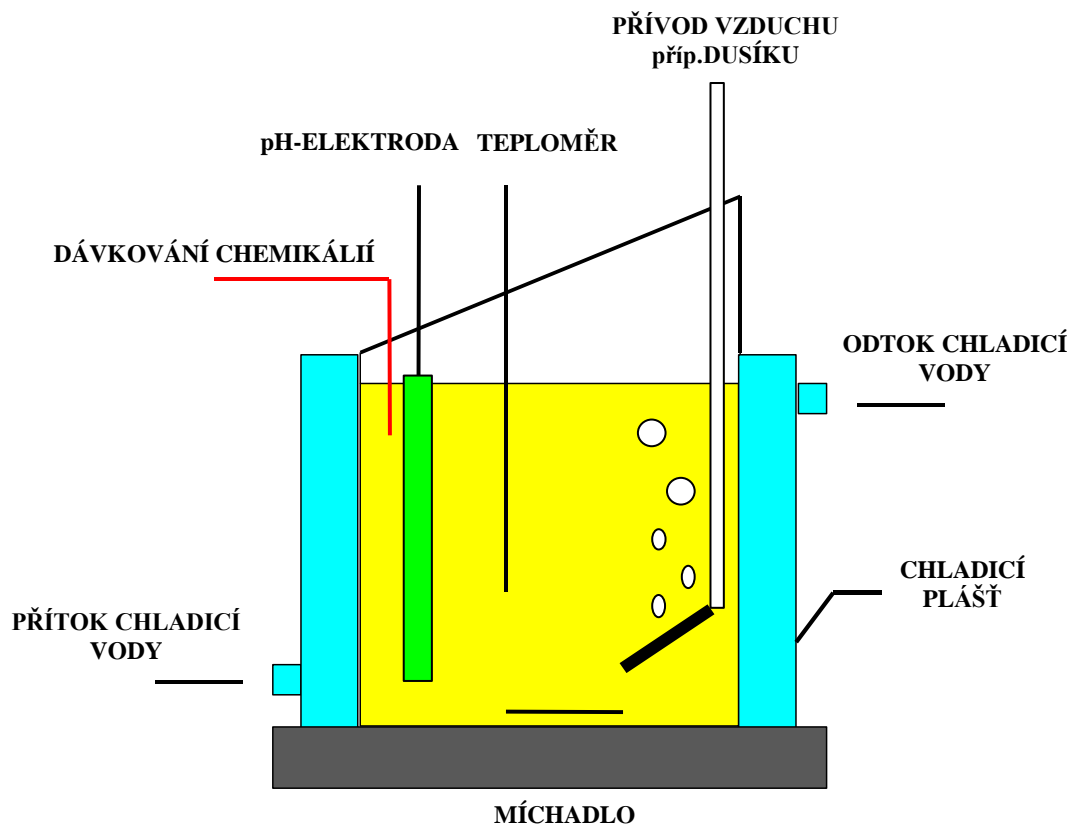


Schéma respirometru:

- 1 aktivační směs,
- 2 chladičí plášť,
- 3 sonda na měření CO_2 ,
- 4 teploměr,
- 5 jemnobublinná aerace,
- 6 expanzní nálevka,
- 7 míchadlo,
- 8 výstup do počítače (shromažďování dat),
- 9 vzduchová pumpa,
- 10 počítač

Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

Schéma cely pro kinetické „batch“ testy



Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody



Respirometrie

Kinetické cely



Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

- *Stanovení maximální růstové rychlosti heterotrofních mikroorganismů - μ_{Hmax} .*
 - Standardní respirometrická metoda
 - Kinetický test

Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

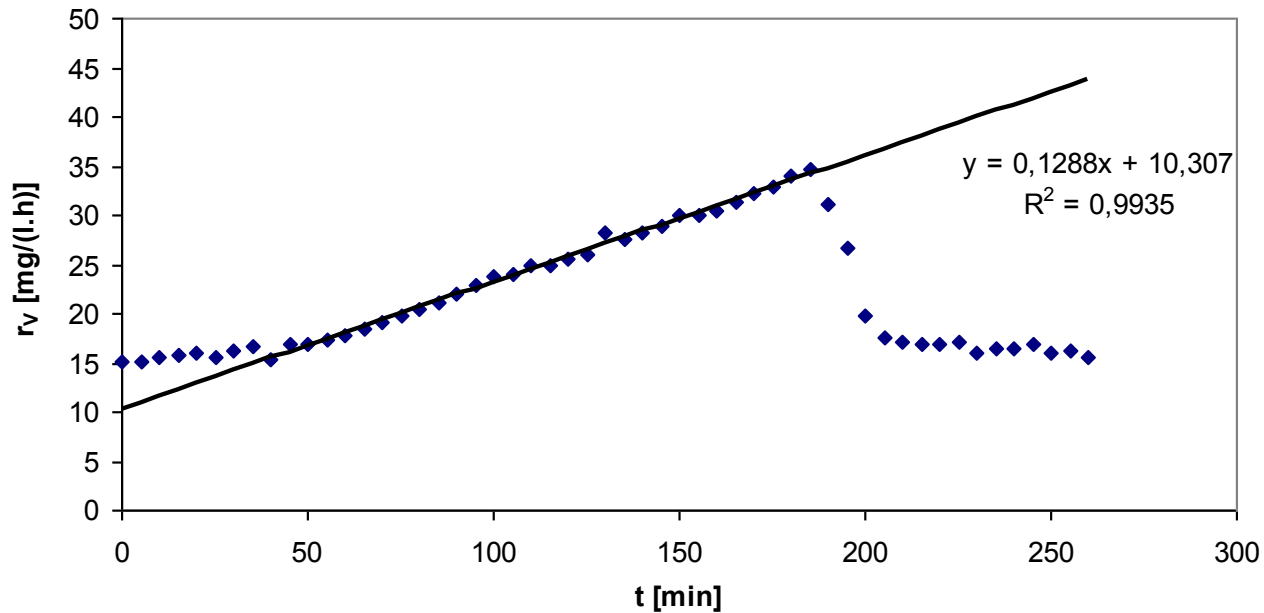
Standardní respirometrická metoda

- provádíme v respirometrické cele
- smícháme 1 l nefiltrované odpadní vody s aktivovaným kalem v poměru CHSK/X cca 4:1
- nitrifikace je potlačena přidavkem allylthiomočoviny
- je měřena rychlost respirace v závislosti na čase při konstantní teplotě a pH

Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

$$\mu_{Hmax.} = 1.05 \cdot (\mu_{Hmax.} - b_H)$$

Batch test pro získání $\mu_{Hmax.}$



Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

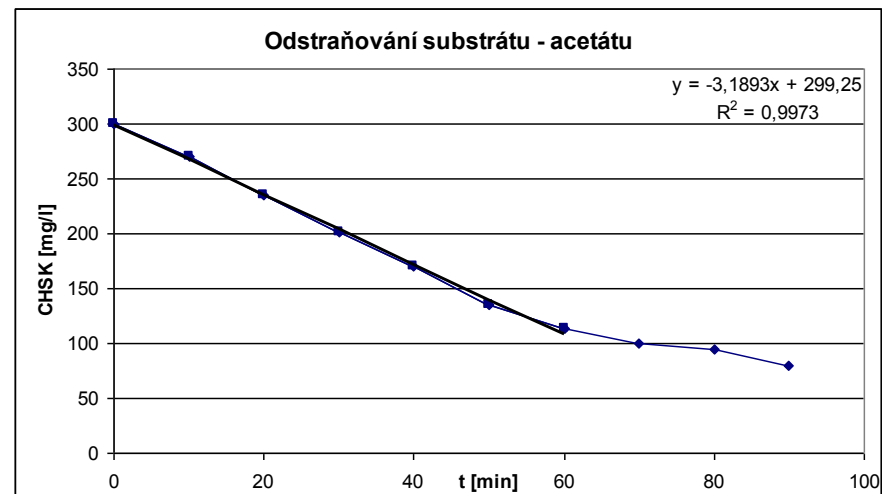
Kinetický test

- měření jsou prováděna v podmínkách jednorázové kultivace
- sušina aktivovaného kalu je upravena na 3 g/l
- do aktivovaného kalu je přidán substrát v poměru $S/X = 0,1$
- teplota $T = 20 \text{ }^\circ\text{C}$ a pH v rozmezí 7.0 – 7.5
- výsledky kinetických testů jsou objemové rychlosti probíhajících dějů

Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

$$\mu_{\text{HAcmax.}} = \frac{Y_{\text{HAc}}}{1 - Y_{\text{HAc}}} \frac{r_{\text{VAc}}}{X_{\text{org}} \cdot f_{\text{A}} \cdot f_{\text{HET}}}$$

$$\mu_{\text{Hmax.}} = \frac{Y_{\text{H}}}{1 - Y_{\text{H}}} \frac{r_{\text{V}}}{X_{\text{org}} \cdot f_{\text{A}} \cdot f_{\text{HET}}}$$



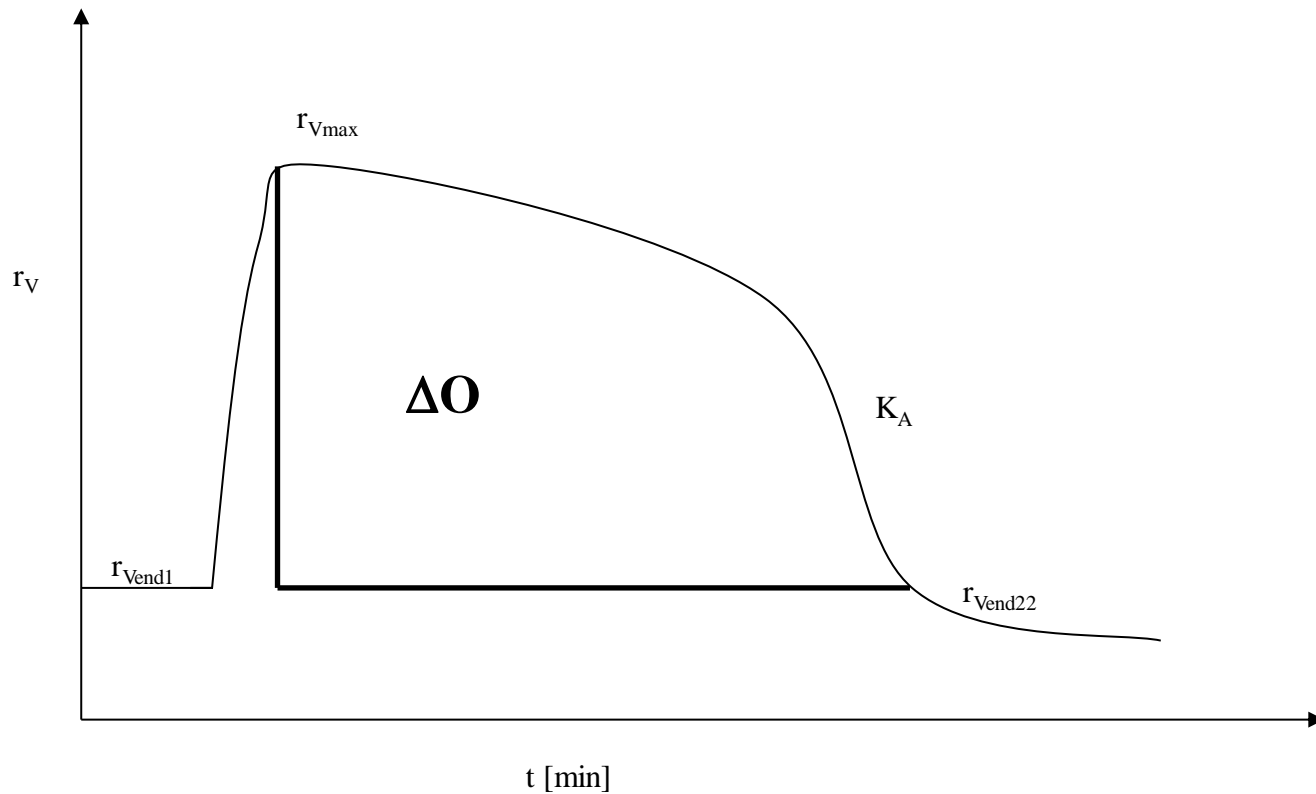
Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

Stanovení Y_H a Y_{HAc}

- respirometrické cele měříme endogenní rychlost aktivovaného kalu
- o jejím odečtu nadávkuje substrát (nefiltrovaná odpadní voda, příp. syntetický substrát - acetát)

$$Y_H = 1 - \Delta O / \Delta S$$

Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody



Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

Stanovení f_A

- test je prováděn ve válcích s provzdušňovaným aktivovaným kalem
- na začátku a na konci testu (zhruba po 25 dnech) je stanovena organická sušina

$$f_a = \frac{X_{\text{org},0} - X_{\text{org,konec}}}{X_{\text{org},0}(1 - f_{\text{EX}})}$$

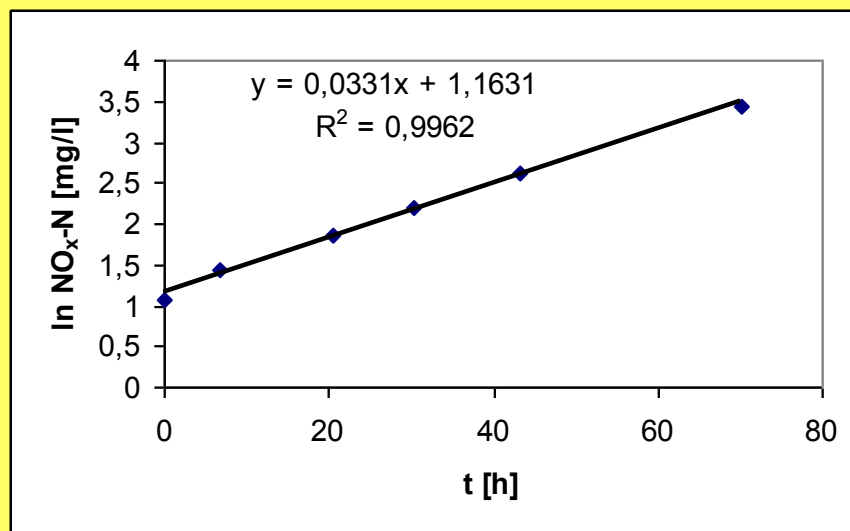
Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

Stanovení maximální růstové rychlosti autotrofních organismů - μ_{Amax} .

- test je prováděn v provzdušňovaných celách, nejlépe při konstantní teplotě 20 °C
- do cely s 1 litrem odpadní vody je přidáno obvykle 20 - 50 ml aktivovaného kalu, tak aby byly splněny poměr S/X v poměru zhruba 4:1
- vzorky jsou odebírány v průběhu 5 dní každých 12 - 24 hodin.

Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

- analyticky stanovujeme koncentrace N-NO_2^- a N-NO_3^- , z jejichž součtu zjistíme N-NO_x
- směrnice závislosti $\ln \text{N-NO}_x$ na čase nám pak udává hodnotu $\mu_{\text{Amax}} - b_{\text{A}}$

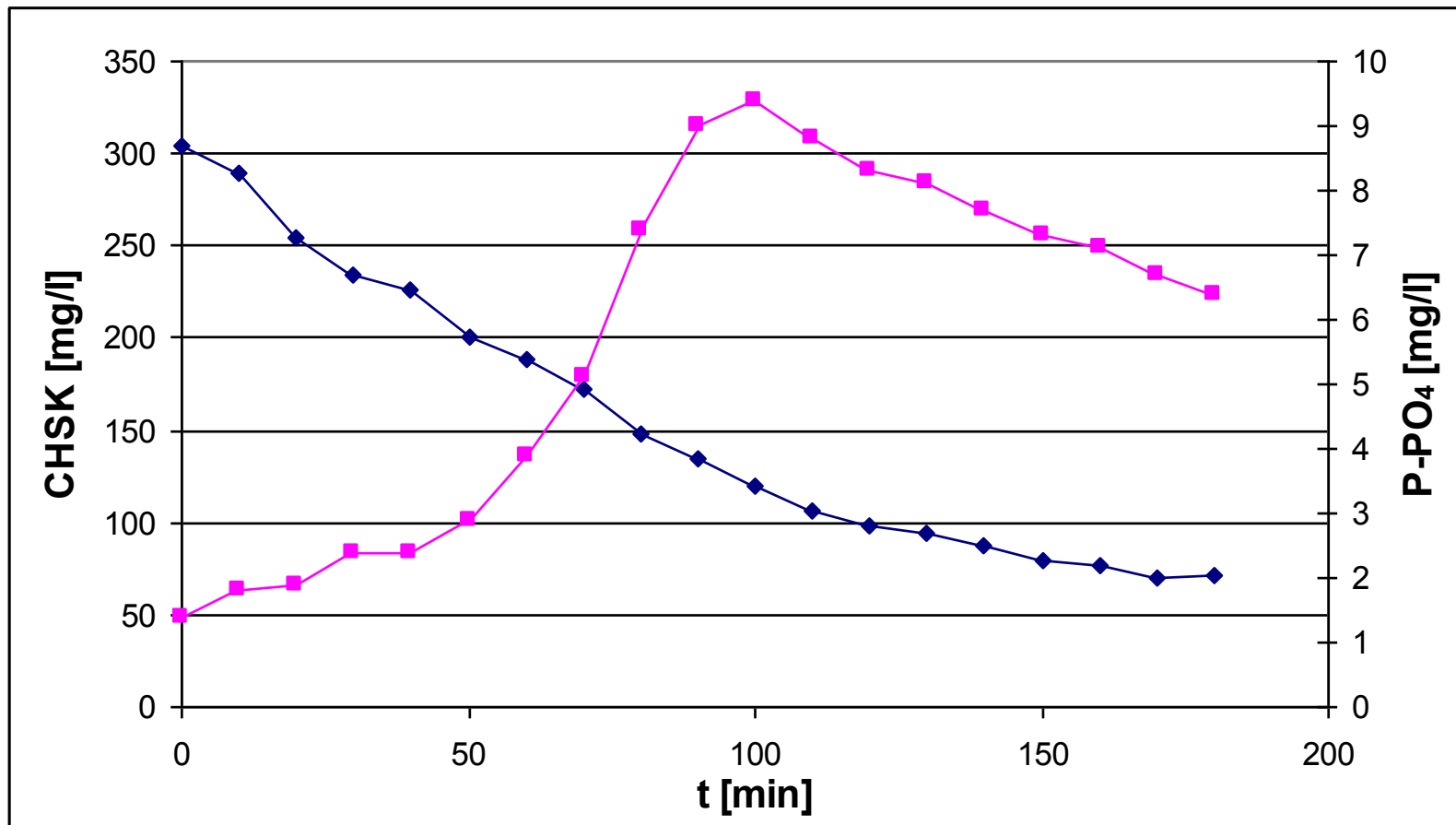


Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

Stanovení rychlosti uvolňování a následné oxické a anoxické akumulace polyfosfátakumulujících organismů

- střídání anaerobní a oxických (anoxických) podmínek
- směrnice křivky uvolňování a anoxické a oxické akumulace P-PO₄³⁻ nám udává objemovou rychlost sledovaného jevu

Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

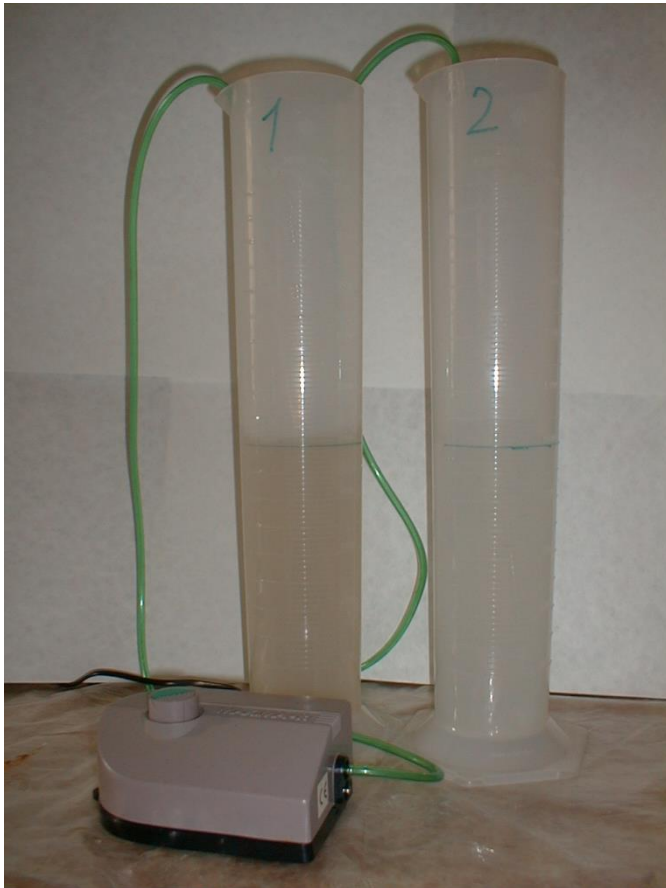


Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

Frakcionace odpadní vody

- ve vzorku odpadní vody je stanovena $\text{CHSK}_{\text{nefiltr}}$, $\text{CHSK}_{\text{filtr}}$
- filtrace přes $0.45 \mu\text{m}$
- ve dvou válcích jsou vzorky filtrované a nefiltrované vody provzdušňovány
- po určité době (cca 1 měsíc) jsou opět stanoveny koncentrace filtrované a nefiltrované CHSK v obou vzorcích

Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody



$$\text{CHSK}_{\text{celk}} = S_S + S_I + X_S + X_I$$

$$S_S = \text{CHSK}_{f,\text{zač}} - \text{CHSK}_{f,\text{kon}}$$

$$S_I = \text{CHSK}_{f,\text{kon}}$$

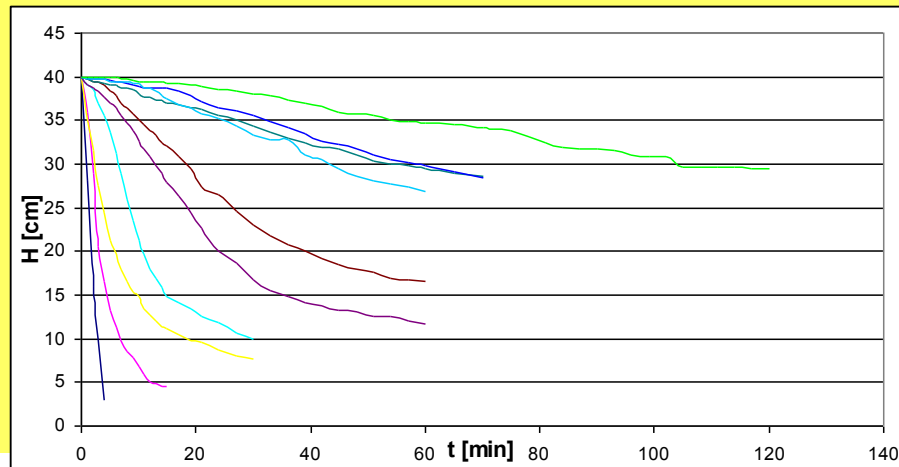
$$X_I = \text{CHSK}_{n,\text{kon}} - \text{CHSK}_{f,\text{kon}}$$

$$X_S = \text{CHSK}_{n,\text{zač}} - S_I - X_I - S_S$$

Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

Stanovení parametrů popisujících chování kalu v dosazovacích nádržích

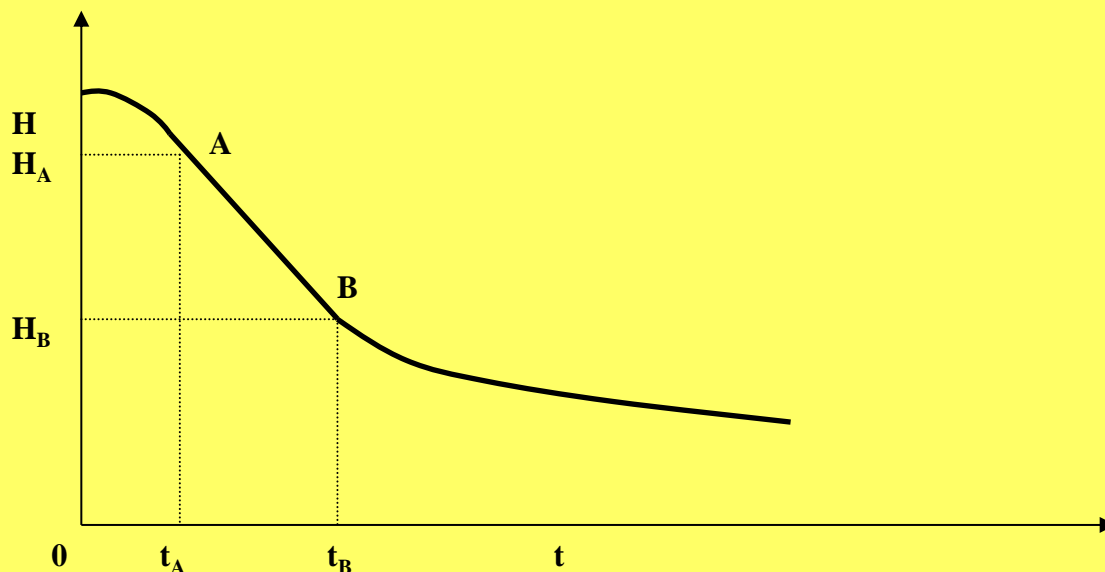
- sada zahušťovacích testů ve 2 l válcích při různých sušinách aktivovaného kalu (řádově $X = 0.5 - 12 \text{ g/l}$)



Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

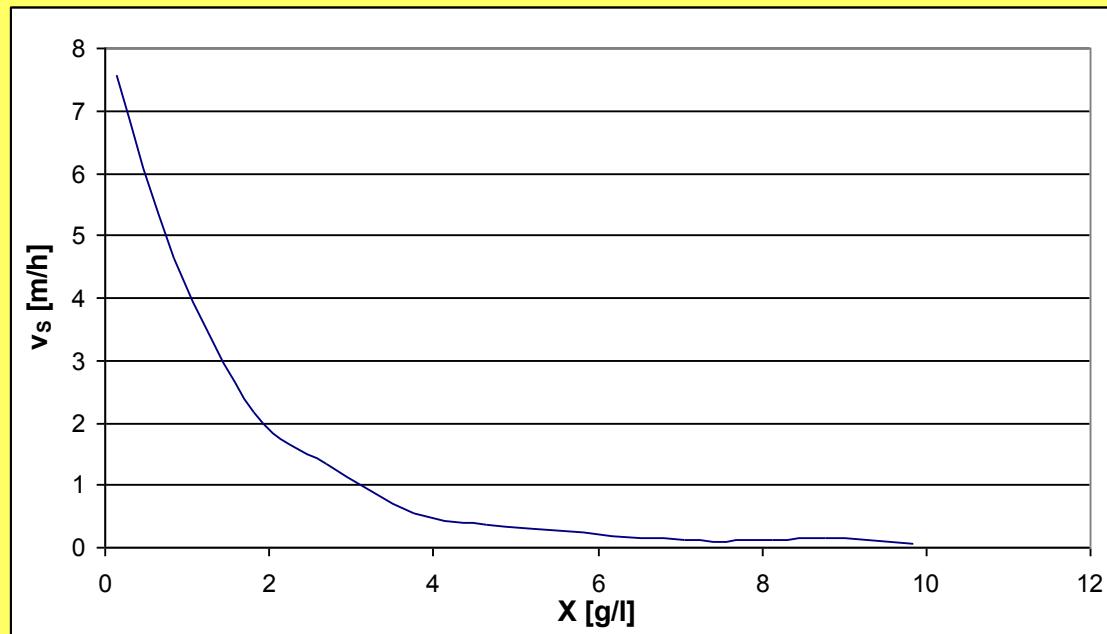
- z lineárních částí jednotlivých křivek jsou získány sedimentační rychlosti pro danou sušinu aktivovaného kalu podle rovnice

$$v_S = (H_A - H_B)/(t_B - t_A)$$



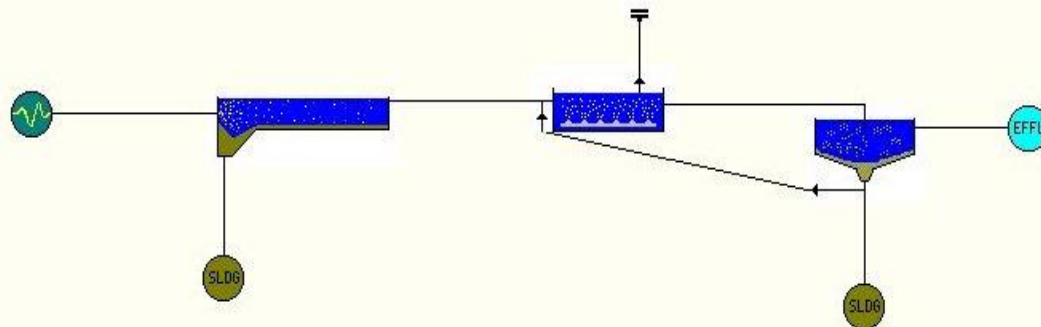
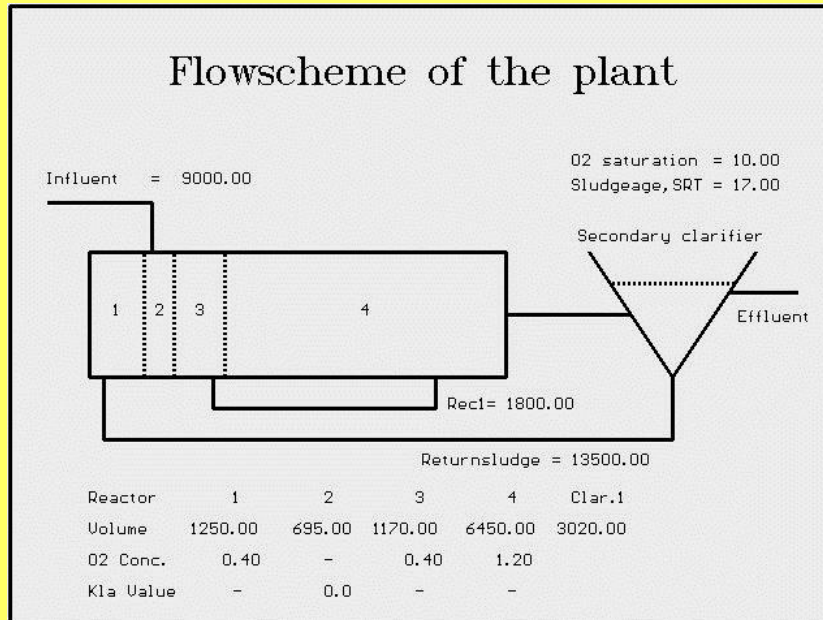
Metodiky laboratorních kinetických batch testů pro popis vlastností aktivovaného kalu a odpadní vody

- z jednotlivých sedimentačních rychlostí můžeme získat její závislost na koncentraci sušiny aktivovaného kalu



Programy pro matematické modelování

- ASIM,
- AQUASIM,
- GPS-X,
- SassPro,
- STOAT



Využití matematického modelování v praxi

- navrhování nových čistíren odpadních vod
- rekonstrukce čistíren odpadních vod
- optimalizace a řízení provozu čistíren
- výzkumná a vědecká činnost
- zaučování odborného personálu
- didaktické účely