

**ΜΙΑ ΝΕΑ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΤΗΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΑΣ ΕΝΕΡΓΟΥ ΙΛΥΟΣ
ΠΡΟΣΑΡΜΟΣΜΕΝΗ ΣΤΙΣ ΑΝΑΓΚΕΣ ΤΗΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΩΝ
ΒΙΟΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΩΝ ΜΕΜΒΡΑΝΩΝ**

Σ.Ι. Πάτσιος και Α.Ι. Καράμπελας

Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης &
Ινστιτούτο Τεχνικής Χημικών Διεργασιών - ΕΚΕΤΑ, Τ.Θ. 60361, 570 01 Θέρμη,
Θεσσαλονίκη, ΕΛΛΑΔΑ

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Ένα νέο, εναλλακτικό μοντέλο προσομοίωσης των βιολογικών δράσεων προσαρμοσμένο στις ιδιαίτερες συνθήκες και απαιτήσεις της τεχνολογίας των βιοαντιδραστήρων μεμβρανών παρουσιάζεται στην εργασία αυτή. Το μοντέλο είναι δομημένο με γνώμονα τόσο τη λεπτομερή περιγραφή των πολύπλοκων βιολογικών αντιδράσεων, όσο και τη δυνατότητα εκτίμησης της συγκέντρωσης οργανικών κλασμάτων του μικτού υγρού (π.χ. διαλυτά μικροβιακά προϊόντα και εξωκυτταρικές πολυμερικές ουσίες) τα οποία παίζουν σημαντικό ρόλο στο φαινόμενο της ρύπανσης των μεμβρανών. Σύγκριση των αποτελεσμάτων του προτεινόμενου μοντέλου με εκείνα ενός μοντέλου ενεργού ιλύος για συμβατικά συστήματα (ASM3) και με πειραματικά δεδομένα λειτουργίας ενός συστήματος βιοαντιδραστήρα μεμβρανών από τη βιβλιογραφία υποδεικνύουν τόσο την ορθότητα όσο και τα πλεονεκτήματα της νέας αυτής, εναλλακτικής προσέγγισης.

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

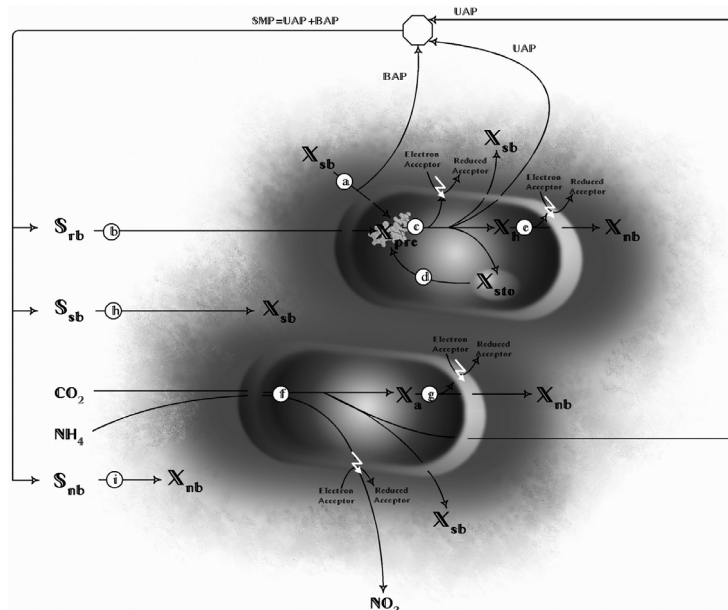
Οι βιοαντιδραστήρες μεμβρανών (Membrane Bioreactors - MBR) είναι μια σύγχρονη μέθοδος η οποία επιτρέπει την προηγμένη επεξεργασία αστικών και βιομηχανικών λυμάτων και την ανάκτηση - επαναχρησιμοποίηση της παραγόμενης υδάτινης απορροής σε ένα πλήθος εφαρμογών (άρδευση, εμπλουτισμός υδροφόρου ορίζοντα, δευτερεύουσες χρήσεις κ.α.). Η συγκεκριμένη τεχνολογία στηρίζεται στην ενοποίηση μιας βιοχημικής διεργασίας (βιολογική επεξεργασία λυμάτων) και μιας φυσικής διεργασίας διαχωρισμού με μεμβράνες (απόληψη καθαρού διηθήματος) αποτελώντας την τεχνολογία αιχμής στον τομέα της επεξεργασίας των λυμάτων. Τα πλεονεκτήματα που προκύπτουν από την σύζευξη των δύο αυτών διεργασιών, σε σχέση με την συμβατική μέθοδο της ενεργού ιλύος, είναι πολλά και αναγνωρισμένα, και περιλαμβάνουν τη μικρότερη απαίτηση σε χώρο και όγκο δεξαμενών αερισμού, τη σταθερά υψηλή ποιότητα της παραγόμενης εκροής, την αποτελεσματική συγκράτηση βακτηρίων και ιών με αποτέλεσμα τη μερική απολύμανση της εκροής, τη δυνατότητα διαχείρισης σημαντικών διακυμάνσεων στην παροχή και στις συγκεντρώσεις της τροφοδοσίας και τέλος τη μειωμένη ποσότητα παραγόμενης πλεονάζουσας ιλύος [1,2]. Παρόλα τα παραπάνω πλεονεκτήματα, το φαινόμενο της ρύπανσης (fouling) των μεμβρανών, δηλαδή της εναπόθεσης ή/και προσρόφησης σωματιδίων, κolloειδών και διαλυτών ουσιών στην επιφάνεια και στους πόρους της μεμβράνης, αποτελεί το βασικό και αναπόφευκτο μειονέκτημα της τεχνολογίας, το οποίο έχει σαν συνέπεια την επιδείνωση της διηθητικής ικανότητας των μεμβρανών [3] και το αυξημένο κόστος λειτουργίας και συντήρησης των εγκαταστάσεων.

Η μελέτη του φαινομένου της ρύπανσης των μεμβρανών καθώς και της επίδρασης διαφόρων παραμέτρων - όπως λειτουργικές συνθήκες, ιδιότητες μεμβρανών, χαρακτηριστικά τροφοδοσίας και μικτού υγρού (mixed liquor) - έχουν αποτελέσει αντικείμενο εκτεταμένης έρευνας από τα πρώτα στάδια της τεχνολογίας των βιοαντιδραστήρων μεμβρανών. Εν τούτοις, παρόλο που είναι διαθέσιμη σημαντική εμπειρία καθώς και ένα μεγάλο πλήθος πειραματικών δεδομένων, η πρόβλεψη και αντιμετώπιση της ρύπανσης των μεμβρανών εξακολουθεί να χαρακτηρίζεται από μεγάλη αβεβαιότητα λόγω ελλιπούς γνώσης σημαντικών πτυχών του φαινομένου [4]. Επιπλέον, λίγες προσπάθειες έχουν γίνει για την ολοκληρωμένη μαθηματική

προσομοίωση της διεργασίας και την παρουσίαση αξιόπιστων μοντέλων που θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν τόσο για την κατανόηση των φαινομένων όσο και για την αξιολόγηση της απόδοσης διαφορετικών λειτουργικών συνθηκών. Ακόμη, τα περισσότερα από αυτά τα μοντέλα εστιάζονται ξεχωριστά στις δύο βασικές διεργασίες της τεχνολογίας των βιοαντιδραστήρων μεμβρανών, δηλαδή στη βιολογική επεξεργασία ή στο διαχωρισμό με μεμβράνες, παρόλο που έχει αναγνωρισθεί ότι υπάρχει έντονη αλληλεπίδραση μεταξύ τους [4] με αποτέλεσμα να είναι αδόκιμη η ξεχωριστή μελέτη τους και ο μη ενοποιημένος τρόπος αντιμετώπισης της προσομοίωσής τους.

Ειδικότερα, όσον αφορά την προσομοίωση της βιολογικής επεξεργασίας στη βιβλιογραφία, αυτή βασίζεται σε καθιερωμένα ή σε ελαφρώς τροποποιημένα μοντέλα ενεργού υλύος τα οποία είχαν αρχικά αναπτυχθεί για την περιγραφή συμβατικών συστημάτων ενεργού υλύος [5]. Τα καθιερωμένα μοντέλα ενεργού υλύος (ASM1, 2, 2d και 3) παρουσιάζουν εγγενείς αδυναμίες και παραλείψεις με αποτέλεσμα, παρόλο που σε γενικές γραμμές προσομοιάζουν ικανοποιητικά τις βιολογικές δράσεις σε συστήματα βιοαντιδραστήρων μεμβρανών [6], αφενός δεν ανταποκρίνονται ευχερώς στις ιδιαίτερες λειτουργικές συνθήκες των βιοαντιδραστήρων μεμβρανών (υψηλοί χρόνοι παραμονής υλύος) και αφετέρου δεν παρέχουν πληροφορίες για οργανικά κλάσματα του μικτού υγρού (π.χ. διαλυτά μικροβιακά προϊόντα και εξωκυτταρικές πολυμερικές ουσίες) τα οποία παίζουν σημαντικό ρόλο στο φαινόμενο της ρύπανσης των μεμβρανών. Για το λόγο αυτό έχουν προταθεί διάφορες παραλλαγές των παραπάνω μοντέλων [5] τα οποία ενσωματώνουν την παραγωγή και κατανάλωση διαλυτών μικροβιακών προϊόντων και κινούνται προς την σωστή κατεύθυνση της ενοποιημένης προσέγγισης στην μοντελοποίηση της τεχνολογίας. Όμως, οι παραλλαγές αυτές εξακολουθούν να είναι και υπερβολικά πολύπλοκες ενσωματώνοντας στα σχετικά μοντέλα οργανικά κλάσματα τα οποία είναι αδύνατον να προσδιοριστούν πειραματικά.

Σκοπό της παρούσας εργασίας αποτελεί η παρουσίαση ενός εναλλακτικού μοντέλου ενεργού υλύος, εστιασμένου πάνω στις ιδιαίτερες απαιτήσεις της τεχνολογίας των βιοαντιδραστήρων μεμβρανών. Το μοντέλο περιλαμβάνει τρεις βασικές βιολογικές δράσεις (οξειδωση οργανικών ουσιών, νιτροποίηση και απονιτροποίηση) ενώ λαμβάνει υπόψη όλα τα βασικά φαινόμενα του μεταβολισμού των βακτηρίων (πρόσληψη θρεπτικών ουσιών, ανάπτυξη και φθορά, εσωτερική αποθήκευση πολυμερών, υδρόλυση σωματιδιακών οργανικών ουσιών και έκκριση διαλυτών μικροβιακών προϊόντων και εξωκυτταρικών πολυμερικών υλικών). Παράλληλα παρέχει πληροφορίες για οργανικά κλάσματα στο μικτό υγρό τα οποία έχει αποδειχθεί ότι παίζουν σημαντικό ρόλο στο φαινόμενο της ρύπανσης των μεμβρανών, ενώ έχει



Σχήμα 1. Σχηματική αναπαράσταση των διεργασιών του προτεινόμενου μοντέλου

γίνει συστηματική προσπάθεια για τον ορισμό και υπολογισμό πειραματικά μετρήσιμων μεταβλητών που θα επιτρέψουν τον έλεγχο της ορθότητας και της αξιοπιστίας του μοντέλου. Τέλος, παρουσιάζεται μια τυπική εφαρμογή του προτεινόμενου μοντέλου για μια αρχική αποτίμηση της απόδοσής του σε σχέση τόσο με ένα ευρέως διαδεδομένο μοντέλο ενεργού ιλύος για συμβατικά συστήματα, όσο και με πειραματικά δεδομένα λειτουργίας ενός συστήματος βιοαντιδραστήρα μεμβρανών από τη βιβλιογραφία.

ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΜΕΡΟΣ

Οι μεταβλητές του μοντέλου χωρίζονται σε δύο κατηγορίες: τις διαλυτές και τις σωματιδιακές ουσίες. Για το σαφή διαχωρισμό τους επιλέχθηκε ως τυπικό όριο τα 0,45μm [7]. Οι ουσίες οι οποίες μπορούν να διαπεράσουν ένα φίλτρο με το παραπάνω ονομαστικό μέγεθος πόρων ορίζονται ως διαλυτές και περιλαμβάνουν οκτώ μεταβλητές: διαλυμένο οξυγόνο (S_{O_2}), άμεσα βιοδιασπασίμες οργανικές ενώσεις (S_{rb}), έμμεσα βιοδιασπασίμες οργανικές ενώσεις (S_{sb}), μη βιοδιασπασίμες οργανικές ενώσεις (S_{nb}), αμμωνιακό άζωτο (S_{NH_4}), νιτρικό άζωτο (S_{NO_3}), διαλυμένο μοριακό άζωτο (S_{N_2}) και αλκαλικότητα (S_{HCO_3}). Στις σωματιδιακές ουσίες περιλαμβάνονται έξι μεταβλητές: ετερότροφα βακτήρια (X_h), αυτότροφα βακτήρια (X_a), εσωτερικά πολυμερή αποθήκευσης (X_{sto}), πρόδρομες ενώσεις (X_{pre}), έμμεσα βιοδιασπασίμες οργανικές ενώσεις (X_{sb}) και μη βιοδιασπασίμες οργανικές ενώσεις (X_{nb}). Όπως προαναφέρθηκε, στην επιλογή των παραπάνω μεταβλητών ελήφθη υπόψη η δυνατότητα για τον αξιόπιστο, πειραματικό προσδιορισμό τους και επομένως, εκτός από τη συγκέντρωση των πρόδρομων ενώσεων (X_{pre}) που μπορούν να καθοριστούν ως ένα ποσοστό της μάζας των ετερότροφων βακτηρίων, όλες οι υπόλοιπες μεταβλητές μπορούν να προσδιοριστούν είτε μέσω πρότυπων πειραματικών τεχνικών είτε να υπολογιστούν από τα πειραματικά δεδομένα.

Λαμβάνοντας υπόψη τις βασικές αρχές και γνώσεις του μεταβολισμού και της φυσιολογίας των βακτηρίων καθώς και τις ιδιαίτερες απαιτήσεις της τεχνολογίας των βιοαντιδραστήρων μεμβρανών, ορίστηκαν οι παρακάτω φυσικοχημικές διεργασίες (**Σχήμα 1**): υδρόλυση των έμμεσα βιοδιασπασίμων σωματιδιακών οργανικών ουσιών (**a**), πρόσληψη των άμεσα βιοδιασπασίμων διαλυτών οργανικών ουσιών (**b**), αερόβιος ή ανοξικός μεταβολισμός των ετερότροφων βακτηρίων (**c**), καταβολισμός των εσωτερικών βιοπολυμερών αποθήκευσης (**d**), αερόβια ή ανοξική ενδογενής αναπνοή των ετερότροφων (**e**), νιτροποίηση αυτότροφων βακτη-

Πίνακας 1. Κινητικές εκφράσεις του προτεινόμενου μοντέλου

№	Διεργασία	Ρυθμός Διεργασίας
Ετερότροφα Βακτήρια		
1	Υδρόλυση του X_{sb}	$k_{h1} \times \frac{K_{rb}}{K_{rb} + S_{rb}} \times \frac{X_{sb}/X_{h1}}{K_{h1} + X_{sb}/X_{h1}} \times X_{h1}$
2	Πρόσληψη του S_{rb}	$k_{u1} \times \frac{K_{pre}}{K_{pre} + X_{pre}/X_{h1}} \times \frac{S_{rb}}{K_{rb} + S_{rb}} \times X_{h1}$
3	Αερόβιος Μεταβολισμός	$k_{m1} \times \frac{S_o}{K_o + S_o} \times \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4} + S_{NH_4}} \times \frac{S_{HCO_3}}{K_{HCO_3} + S_{HCO_3}} \times \frac{X_{pre}/X_{h1}}{K_{pre} + X_{pre}/X_{h1}} \times X_{h1}$
4	Ανοξικός Μεταβολισμός	$\eta_{NO_3} \times k_{m1} \times \frac{K_o}{K_o + S_o} \times \frac{S_{NO_3}}{K_{NO_3} + S_{NO_3}} \times \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4} + S_{NH_4}} \times \frac{S_{HCO_3}}{K_{HCO_3} + S_{HCO_3}} \times \frac{X_{pre}/X_{h1}}{K_{pre} + X_{pre}/X_{h1}} \times X_{h1}$
5	Καταβολισμός του X_{sto}	$k_{c1} \times \frac{K_{pre}}{K_{pre} + X_{pre}/X_{h1}} \times \frac{X_{sto}/X_{h1}}{K_c + X_{sto}/X_{h1}} \times X_{h1}$
6	Αερόβια Ενδογενής Αναπνοή του X_h	$k_{d1} \times \frac{S_o}{K_o + S_o} \times \frac{K_{pre}}{K_{pre} + X_{pre}/X_{h1}} \times X_{h1}$
7	Ανοξική Ενδογενής Αναπνοή του X_h	$\eta_{NO_3} \times k_{d1} \times \frac{K_o}{K_o + S_o} \times \frac{S_{NO_3}}{K_{NO_3} + S_{NO_3}} \times \frac{K_{pre}}{K_{pre} + X_{pre}/X_{h1}} \times X_{h1}$
Αυτότροφα Βακτήρια		
8	Νιτροποίηση	$k_{n1} \times \frac{S_o}{K_{o,a} + S_o} \times \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4,a} + S_{NH_4}} \times \frac{S_{HCO_3}}{K_{HCO_3,a} + S_{HCO_3}} \times X_a$
9	Αερόβια Ενδογενής Αναπνοή του X_a	$k_{d2} \times \frac{S_o}{K_o + S_o} \times X_a$
10	Ανοξική Ενδογενής Αναπνοή του X_a	$\eta_{NO_3} \times k_{d2} \times \frac{K_o}{K_o + S_o} \times \frac{S_{NO_3}}{K_{NO_3} + S_{NO_3}} \times X_a$
Φυσικοχημικές Διεργασίες		
11	Ενσωμάτωση του S_{sb}	$k_{a1sb} \times S_{sb} \times \frac{K_{a1sb}}{K_{a1sb} + X_{sb}/(X_{h1} + X_a)} \times (X_{h1} + X_a)$
12	Ενσωμάτωση του S_{nb}	$k_{a1nb} \times S_{nb} \times \frac{K_{a1nb}}{K_{a1nb} + X_{nb}/(X_{h1} + X_a)} \times (X_{h1} + X_a)$

Πίνακας 2. Στοιχειομετρικός πίνακας προτεινόμενου μοντέλου

N ^ο	Διεργασία	Μεταβλητές Μοντέλου												
		S_{O_2}	$S_{r,b}$	$S_{s,b}$	$S_{n,b}$	S_{NH_4}	S_{N_2}	S_{NO_3}	S_{HCO_3}	X_h	X_a	X_{z10}	$X_{p,pg}$	$X_{s,b}$
Στοιχειομετρικός Πίνακας														
Ετερότροφα Βακτήρια														
1	Υδρόλυση του $X_{s,b}$		$f_{BAP} \cdot f_{s,b}$	$f_{BAP} \cdot f_{s,b}$	$f_{BAP} \cdot f_{s,b}$	Y_1	Z_1					f_h		-1
2	Πρόσληψη του $S_{r,b}$		-1			Y_2	Z_2					$+1$		
3	Αερόβιος Μεταβολισμός	X_3	$f_{UMP} \cdot f_{s,b} \cdot Y_k$	$f_{UMP} \cdot f_{s,b} \cdot Y_k$	$f_{UMP} \cdot f_{s,b} \cdot Y_k$	Y_3	Z_3	$f_{X_h} \cdot Y_k$		$f_{X_{z10}} \cdot Y_k$	-1	$f_{X_{p,pg}} \cdot Y_k$		$f_{X_{s,b}} \cdot Y_k$
4	Ανοξικός Μεταβολισμός		$f_{UMP} \cdot f_{s,b} \cdot Y_k$	$f_{UMP} \cdot f_{s,b} \cdot Y_k$	$f_{UMP} \cdot f_{s,b} \cdot Y_k$	Y_4	Z_4	$f_{X_h} \cdot Y_k$		$f_{X_{z10}} \cdot Y_k$	-1	$f_{X_{p,pg}} \cdot Y_k$		$f_{X_{s,b}} \cdot Y_k$
5	Καταβολισμός του X_{z10}					Y_5	Z_5			-1	$+1$			
6	Αερόβια Ενδογενής Αναπνοή του X_h					Y_6	Z_6	-1						$f_{X_{s,b}}$
7	Ανοξική Ενδογενής Αναπνοή του X_h					Y_7	Z_7	-1						$f_{X_{s,b}}$
Αυτότροφα Βακτήρια														
8	Νιτροποίηση	X_8	$f_{UMP,a} \cdot f_{s,b} \cdot Y_k$	$f_{UMP,a} \cdot f_{s,b} \cdot Y_k$	$f_{UMP,a} \cdot f_{s,b} \cdot Y_k$	Y_8	Z_8	$+1$		$f_{X_a} \cdot Y_a$				$f_{X_{n,b}} \cdot Y_k$
9	Αερόβια Ενδογενής Αναπνοή του X_a					Y_9	Z_9			-1				$f_{X_{n,b}}$
10	Ανοξική Ενδογενής Αναπνοή του X_a					Y_{10}	Z_{10}	$-X_{10}$		-1				$f_{X_{n,b}}$
Φυσιολογικές Διεργασίες														
11	Ενωμάτωση του $S_{r,b}$					Y_{11}	Z_{11}							$+1$
12	Ενωμάτωση του $S_{n,b}$					Y_{12}	Z_{12}							$+1$
Πίνακας Σύστασης														
a	COD (g COD)	-1	$+1$	$+1$	$+1$		-1.71	-4.57	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$
b	Στοιχειακό Άζωτο (g N)		i_{N_2}	i_{N_2}	i_{N_2}	$+1$	$+1$	$+1$	i_{N_2}	i_{N_2}	i_{N_2}	i_{N_2}	i_{N_2}	i_{N_2}
c	Ιοντικό Φορτίο (mole +)					$+1/14$	$-1/14$	-1						

ρίων (**f**), αερόβια ή ανοξική ενδογενής αναπνοή των αυτότροφων (**g**), ενσωμάτωση των διαλυτών έμμεσα βιοδιασπάσιμων οργανικών κλασμάτων (**h**) και ενσωμάτωση των διαλυτών μη βιοδιασπάσιμων οργανικών κλασμάτων (**i**).

Για την προσομοίωση των ρυθμών των διεργασιών επιλέχθηκαν οι γνωστές εξισώσεις τύπου *Monod* (**Πίνακας 1**) οι οποίες χρησιμοποιούνται στο σύνολο σχεδόν των μαθηματικών μοντέλων ενεργού ιλύος δεδομένου ότι αποδίδουν ικανοποιητικά τις δύο βασικές αρχές των βιοδιεργασιών: (i) ότι οι ρυθμοί των δράσεων είναι ανάλογοι της συγκέντρωσης της ενεργού βιομάζας και (ii) ότι υπάρχει ένα ανώτατο όριο κορεσμού του ρυθμού για κάθε βιοαντίδραση.

Πίνακας 3. Τυπικές τιμές παραμέτρων προτεινόμενου μοντέλου

Σύμβολο	Περιγραφή	Τιμή	Μονάδες	Πηγή
Κινητικές Παράμετροι				
k_h	Σταθερά ρυθμού υδρόλυσης	3	$g\ COD_{X_{ih}}\ g^{-1}\ COD_{X_a}\ d^{-1}$	[11]
K_{rb}	Σταθερά κορεσμού για S_{rb}	2	$g\ COD_{S_{ib}}\ m^{-3}$	[13]
K_h	Σταθερά κορεσμού υδρόλυσης	1	$g\ COD_{X_{ih}}\ g^{-1}\ COD_{X_a}$	[11]
k_u	Σταθερά ρυθμού πρόσληψης	0.6	$g\ COD_{S_{ib}}\ g^{-1}\ COD_{X_a}\ d^{-1}$	[13]
K_{pre}	Σταθερά κορεσμού για X_{pre}	0.01	$g\ COD_{X_{pre}}\ g^{-1}\ COD_{X_a}$	Υπόθεση
k_m	Σταθερά ρυθμού μεταβολισμού	14.4	$g\ COD_{X_{pre}}\ g^{-1}\ COD_{X_a}\ d^{-1}$	[13]
K_o	Σταθερά κορεσμού για S_{O_2}	0.1	$g\ O_2\ m^{-3}$	[11]
K_{NH_4}	Σταθερά κορεσμού για S_{NH_4}	0.01	$g\ N_{NH_4}\ m^{-3}$	[11]
K_{HCO_3}	Σταθερά κορεσμού για S_{HCO_3}	0.1	$mole\ HCO_3^-\ m^{-3}$	[11]
η_{NO_3}	Παράγων ανοξικής μείωσης	0.6	-	[8]
K_{NO_3}	Σταθερά κορεσμού για S_{NO_3}	0.5	$g\ N_{NO_3}\ m^{-3}$	[8]
k_c	Σταθερά ρυθμού καταβολισμού X_{sto}	8.5	$g\ COD_{X_{sto}}\ g^{-1}\ COD_{X_a}\ d^{-1}$	[13]
K_c	Σταθερά κορεσμού X_{sto}	1	$g\ COD_{X_{sto}}\ g^{-1}\ COD_{X_a}$	[13]
k_{dh}	Σταθερά ρυθμού ενδογενούς αναπνοής X_h	0.1	d^{-1}	[11]
k_{ni}	Σταθερά ρυθμού νιτροποίησης	4.2	$g\ N_{NO_3}\ g^{-1}\ COD_{X_a}\ d^{-1}$	[8]
$K_{o,a}$	Σταθερά κορεσμού S_{O_2} (νιτροποίηση)	0.5	$g\ O_2\ m^{-3}$	[11]
$K_{NH_4,a}$	Σταθερά κορεσμού S_{NH_4} (νιτροποίηση)	2	$g\ N_{NH_4}\ m^{-3}$	[11]
$K_{HCO_3,a}$	Σταθερά κορεσμού S_{HCO_3} (νιτροποίηση)	0.5	$mole\ HCO_3^-\ m^{-3}$	[11]
k_{da}	Σταθερά ρυθμού ενδογενούς αναπνοής X_a	0.061	d^{-1}	[11]
$k_{enl,b}$	Σταθερά ρυθμού ενσωμάτωσης S_{sb}	0.05	$g^{-1}\ COD_{X_a+X_b}\ d^{-1}$	Υπόθεση
$K_{enl,b}$	Σταθερά κορεσμού για S_{sb}	0.5	$g\ COD_{S_{sb}}\ g^{-1}\ COD_{X_a+X_b}\ d^{-1}$	Υπόθεση
$k_{enl,nb}$	Σταθερά ρυθμού ενσωμάτωσης S_{nb}	0.01	$g^{-1}\ COD_{X_a+X_b}\ d^{-1}$	Υπόθεση
$K_{enl,nb}$	Σταθερά κορεσμού για S_{nb}	0.1	$g\ COD_{S_{nb}}\ g^{-1}\ COD_{X_a+X_b}\ d^{-1}$	Υπόθεση
Στοιχειομετρικές Παράμετροι				
f_{BAP}	Ποσοστό παραγωγής BAP στην υδρόλυση	0.2	$g\ COD_{BAP}\ g^{-1}\ COD_{X_{ih}}$	$1 - f_h$
f_h	Ποσοστό προσλαμβανόμενων υδρολυμένων ολιγομερών	0.8	$g\ COD_{X_{pre}}\ g^{-1}\ COD_{X_{ih}}$	Υπόθεση
$f_{S_{rb}}$	Ποσοστό S_{rb} στα SMP	0.75	$g\ COD_{S_{rb}}\ g^{-1}\ COD_{SMP}$	Υπόθεση
$f_{S_{ib}}$	Ποσοστό S_{ib} στα SMP	0.10	$g\ COD_{S_{ib}}\ g^{-1}\ COD_{SMP}$	$1 - (f_{S_{rb}} + f_{S_{ia}})$
$f_{S_{nb}}$	Ποσοστό S_{nb} στα SMP	0.15	$g\ COD_{S_{nb}}\ g^{-1}\ COD_{SMP}$	Υπόθεση
f_{UAP}	Ποσοστό παραγωγής UAP κατά τον μεταβολισμό των ετερότροφων	0.05	$g\ COD_{UAP}\ g^{-1}\ COD$	[14]
Y_h	Ποσοστό απόδοσης ετερότροφων	0.64	$g\ COD\ g^{-1}\ COD_{X_{pre}}$	[13]
f_{X_h}	Ποσοστό παραγωγής X_h	0.62	$g\ COD_{X_h}\ g^{-1}\ COD$	$1 - (f_{X_{no}} + f_{X_{sb}} + f_{UAP})$
$f_{X_{no}}$	Ποσοστό παραγωγής X_{sto} κατά τον μεταβολισμό των ετερότροφων	0.15	$g\ COD_{X_{no}}\ g^{-1}\ COD$	Υπόθεση
$f_{X_{sb}}$	Ποσοστό παραγωγής X_{sb} κατά τον μεταβολισμό των ετερότροφων	0.18	$g\ COD_{X_{sb}}\ g^{-1}\ COD$	[14]
$f_{X_{nb}}$	Ποσοστό παραγωγής X_{nb} κατά την ενδογενή αναπνοή των ετερότροφων	0.2	$g\ COD_{X_{nb}}\ g^{-1}\ COD_{X_a}$	[11]
$f_{UAP,a}$	Ποσοστό παραγωγής UAP κατά την νιτροποίηση	0.05	$g\ COD_{UAP}\ g^{-1}\ COD$	[14]
Y_a	Ποσοστό απόδοσης αυτότροφων	0.24	$g\ COD\ g^{-1}\ N_{NO_3}$	[11]
f_{X_a}	Ποσοστό παραγωγής X_a	0.77	$g\ COD_{X_a}\ g^{-1}\ COD$	$1 - (f_{X_{sb,a}} + f_{UAP,a})$
$f_{X_{sb,a}}$	Ποσοστό παραγωγής X_{sb} κατά την νιτροποίηση	0.18	$g\ COD_{X_{sb}}\ g^{-1}\ COD$	[14]
$f_{X_{nb,a}}$	Ποσοστό παραγωγής X_{nb} κατά την ενδογενή αναπνοή των αυτότροφων	0.2	$g\ COD_{X_{nb}}\ g^{-1}\ COD_{X_a}$	[11]
Παράμετροι Σύστασης				
i_{N_s}	Περιεκτικότητα αζώτου των διαλυτών οργανικών κλασμάτων	0.02	$g\ N\ g^{-1}\ COD$	[8]
i_{N_b}	Περιεκτικότητα αζώτου των X_h και X_a	0.07	$g\ N\ g^{-1}\ COD$	[8]
i_{N_x}	Περιεκτικότητα αζώτου των X_{sb} και X_{nb}	0.03	$g\ N\ g^{-1}\ COD$	[8]
Παράμετροι Λειτουργίας				
f_r	Ποσοστό απόρριψης μεμβράνης	0.75	-	Υπόθεση

Παρόλο που η κινητική τύπου *Monod* προήλθε από εργαστηριακά πειράματα σε καθαρές βακτηριακές αποικίες αναπτυσσόμενες σε απλό οργανικό υπόστρωμα, εν τούτοις χρησιμοποιείται ευρύτατα και σε μη προσδιορισμένα βιοσύνολα που καταναλώνουν ένα σύνθετο μίγμα οργανικού υποστρώματος, όπως δηλαδή και τα συστήματα ενεργού ιλύος [8]. Στην περίπτωση αυτή οι κινητικές σταθερές αντιπροσωπεύουν μέσες τιμές ενός συνόλου βιοαντιδράσεων από διαφορετικά είδη βακτηρίων και για το λόγο αυτό επηρεάζονται σε μεγάλο βαθμό από τις εκάστοτε (*site-specific*) συνθήκες [9], καθιστώντας επιτακτικό τον πειραματικό προσδιορισμό τουλάχιστον των πιο σημαντικών από αυτές τις παραμέτρους.

Δεδομένου ότι ο αριθμός των εξισώσεων των επιμέρους διεργασιών και ο αριθμός των παραμέτρων είναι μεγάλος, για την παρουσίαση του μοντέλου επιλέχθηκε η μορφή του πίνακα-μήτρας (**Πίνακας 2**) όπως αυτή παρουσιάστηκε στο μοντέλο ASM1 και υιοθετήθηκε και στα υπόλοιπα μοντέλα της σειράς (ASM2, 2d, 3). Για κάθε ζεύγος διεργασίας και μεταβλητής ορίζεται ένας στοιχειομετρικός παράγοντας ο οποίος περιγράφει το πόσο επηρεάζει η κάθε διεργασία την αντίστοιχη μεταβλητή του μοντέλου [10]. Θετικοί ή αρνητικοί παράγοντες χρησιμοποιούνται για να δηλώσουν μια αύξηση ή μείωση αντίστοιχα της συγκέντρωσης της μεταβλητής ενώ κάθε άδειο κελί υποδηλώνει μηδενικό παράγοντα. Οι περισσότεροι στοιχειομετρικοί παράγοντες προκύπτουν από βασικές γνώσεις στοιχειομετρίας ή εκ των προτέρων γνώση της σχέσης τους με την αντίστοιχη μεταβλητή. Παρόλα αυτά, ορισμένοι στοιχειομετρικοί παράγοντες δεν μπορούν να προκύψουν απευθείας και για το λόγο αυτό απαιτείται η κατάστρωση ισοζυγίων μάζας όσον αφορά το χημικώς απαιτούμενο οξυγόνο (*COD*), το στοιχειακό άζωτο και το ιοντικό φορτίο. Για περισσότερες πληροφορίες ο αναγνώστης παραπέμπεται στην εργασία των *Gujer and Larsen* [10].

Το προτεινόμενο μοντέλο ενεργού ιλύος ειδικά προσαρμοσμένο στις ανάγκες της τεχνολογίας των βιοαντιδραστήρων μεμβρανών περιλαμβάνει 43 παραμέτρους οι οποίες πρέπει να εκτιμηθούν πριν γίνει δυνατή η χρησιμοποίησή του. Στον **Πίνακα 3**, παρατίθεται ένα σύνολο τυπικών τιμών από όλες τις παραμέτρους που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο και το οποίο αναφέρεται σε μια τυπική θερμοκρασία των 20 °C. Δεδομένου ότι οι περισσότερες κινητικές παράμετροι επηρεάζονται από την θερμοκρασία, η χρήση του μοντέλου για διαφορετικές θερμοκρασίες καθιστά αναγκαία τη διόρθωση των παραμέτρων αυτών όπως περιγράφεται από τους *Gujer et al.* [8]. Τέλος πρέπει να τονιστεί ότι ενώ μερικές παράμετροι έχουν κατ' επανάληψη χρησιμοποιηθεί σε παλιότερα μοντέλα [11], άλλες χρησιμοποιούνται για πρώτη φορά στην παρούσα εργασία και για το λόγο αυτό οι τιμές τους πρέπει απλά να θεωρηθούν ως τυπικές τιμές οι οποίες παρουσιάζονται κυρίως για τη διευκόλυνση του αναγνώστη και ως μια πρώτη εκτίμηση του εύρους μεταβολής τους.

ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Για να εξεταστούν τόσο οι δυνατότητες όσο και τα πλεονεκτήματα του νέου μοντέλου, παρατίθεται μια τυπική εφαρμογή του και τα αποτελέσματα συγκρίνονται με το καθιερωμένο μοντέλο ASM3 καθώς και με πειραματικά δεδομένα από την βιβλιογραφία [12]. Τα δεδομένα αυτά αναφέρονται σε ένα βιοαντιδραστήρα μεμβρανών ο οποίος επεξεργάζεται με αερόβια διεργασία (διαλυμένο οξυγόνο 2-3 mg/l) ένα συνθετικό απόβλητο κάτω από τυπικές λειτουργικές συνθήκες (χρόνος παραμονής ιλύος 20-40 ημέρες, υδραυλικός χρόνος παραμονής 4 ώρες). Τα αποτελέσματα των μαθηματικών μοντέλων που παρουσιάζονται στον **Πίνακα 4** προέκυψαν έπειτα από μια προκαταρκτική βαθμονόμησή τους που έγινε μέσω δοκιμής και σφάλματος στη συγκέντρωση της βιομάζας (*MLVSS*). Δεδομένου ότι η συγκέντρωση των οργανικών κλασμάτων και στα δύο χρησιμοποιηθέντα μοντέλα εκφράζεται σε $g\ COD/m^3$, για τον υπολογισμό της βιομάζας ($g\ MLVSS/m^3$) χρησιμοποιήθηκε ένας τυπικός συντελεστής μετατροπής $0,75\ g\ MLVSS/g\ COD$ [11].

Με βάση τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στον **Πίνακα 4**, μπορούν να γίνουν τα παρακάτω σχόλια:

- Το προτεινόμενο μοντέλο φαίνεται να αποδίδει σωστά τα πειραματικά δεδομένα λειτουργίας ενός αερόβιου συστήματος βιοαντιδραστήρα μεμβρανών.

Πίνακας 4. Συγκριτική παρουσίαση αποτελεσμάτων μοντέλων και πειραματικών δεδομένων

	ASM3	Προτεινόμενο Μοντέλο	Πειραματικά Δεδομένα [12]
SRT = 20d, HRT = 4h, $S_{O_2} = 2-3\text{g/m}^3$			
BOD ₅ Διηθήματος (g/m ³)	0,02	0,18	-
COD Διηθήματος (g/m ³)	0,02	7,9	8,0
COD Υπερκείμενου (g/m ³)	0,16	56,39	56,0
NH_4^+ Διηθήματος (g/m ³)	0,34	0,5	0,4
NO_3^- Διηθήματος (g/m ³)	18,4	19,9	18,3
MLVSS (kg/m ³)	9,4	9,38	9,4
EPS (g COD/kg MLVSS)	-	21,7	-
SRT = 40d, HRT = 4h, $S_{O_2} = 2-3\text{g/m}^3$			
BOD ₅ Διηθήματος (g/m ³)	0,04	0,27	-
COD Διηθήματος (g/m ³)	0,04	7,72	8,0
COD Υπερκείμενου (g/m ³)	0,16	30,9	31,0
NH_4^+ Διηθήματος (g/m ³)	0,28	0,36	0,5
NO_3^- Διηθήματος (g/m ³)	18,3	20,3	16,2
MLVSS (kg/m ³)	13,3	13,32	13,3
EPS (g COD/kg MLVSS)	-	15,4	-

- Σε σχέση με το μοντέλο ASM3, το νέο μοντέλο φαίνεται να αποδίδει καλύτερα τη συμπεριφορά του βιοαντιδραστήρα μεμβρανών στις συγκεκριμένες συνθήκες λειτουργίας (υψηλός χρόνος παραμονής υλός). Στις συνθήκες αυτές η επίδραση των διαλυτών μικροβιακών προϊόντων στη συγκέντρωση του COD τόσο του υπερκείμενου υγρού όσο και του διηθήματος είναι αρκετά σημαντική, με αποτέλεσμα το μοντέλο ASM3, το οποίο δεν λαμβάνει υπόψη την ύπαρξή τους, να αδυνατεί να αποδώσει σωστά τη συγκέντρωση του COD στο υπερκείμενο και στο διήθημα.
- Είναι πολύ σημαντικό το γεγονός ότι το προτεινόμενο μοντέλο μπορεί να δώσει μια εκτίμηση της συγκέντρωσης των εξωκυτταρικών πολυμερικών ουσιών (EPS) στα βιολογικά συσσωματώματα (bioflocs) σε αντίθεση με το μοντέλο ASM3 το οποίο δεν μπορεί να παράσχει τέτοια πληροφορία δεδομένου ότι δεν προβλέπει την ύπαρξη κάποιας μεταβλητής που να περιγράφει τη συγκέντρωση των εξωκυτταρικών πολυμερικών ουσιών.
- Τέλος, όσον αφορά τη σχετικά υψηλότερη συγκέντρωση νιτρικών στο διήθημα, που υπολογίζει το νέο μοντέλο σε σχέση με τα πειραματικά δεδομένα, αυτή μπορεί να αποδοθεί στην ύπαρξη ανοξικών ζωνών μέσα στον πειραματικό αντιδραστήρα, φαινόμενο το οποίο δεν λαμβάνεται υπόψη από το μαθηματικό μοντέλο και το οποίο, όπως φαίνεται και από τα πειραματικά δεδομένα, είναι εντονότερο στους υψηλότερους χρόνους παραμονής υλός οπότε και η συγκέντρωση του μικτού υγρού (MLVSS) είναι σχετικά υψηλή.

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Μια εναλλακτική προσέγγιση της μαθηματικής προσομοίωσης των βιολογικών διεργασιών σε συστήματα βιοαντιδραστήρων μεμβρανών παρουσιάζεται στην παρούσα εργασία. Το προτεινόμενο μοντέλο έχει αναπτυχθεί με στόχο, εκτός από την επαρκή περιγραφή των βιολογικών δράσεων, την παροχή δεδομένων ώστε να συνδεθούν οι βιολογικές δράσεις με τη διεργασία διαχωρισμού με μεμβράνες και το φαινόμενο της ρύπανσής τους. Τα προκαταρκτικά αποτελέσματα που παρουσιάζονται δείχνουν τόσο την ορθότητα όσο και τα πλεονεκτήματα του νέου μοντέλου. Στο σημείο αυτό πρέπει να τονιστεί ότι απαιτούνται επιπλέον συστηματικές ενέργειες, που βρίσκονται ήδη σε εξέλιξη, για τον έλεγχο και αποδοχή του

εναλλακτικού αυτού μοντέλου. Οι ενέργειες αυτές περιλαμβάνουν την ανάλυση της ευαισθησίας του μοντέλου, τη συστηματική αποτίμηση της απόδοσής του σε ένα ευρύ πεδίο λειτουργικών συνθηκών μέσω πειραματικών δεδομένων από ένα πιλοτικό σύστημα βιοαντιδραστήρα μεμβρανών [15] που προσομοιάζει τη λειτουργία συστημάτων πραγματικής κλίμακας (full scale), και τέλος τη ρύθμιση και βαθμονόμηση του μοντέλου. Το προτεινόμενο μοντέλο, με την ολοκλήρωση και βαθμονόμησή του θεωρείται ότι θα παρέχει επιπλέον δυνατότητες για τη βελτίωση του σχεδιασμού και λειτουργίας των συστημάτων βιοαντιδραστήρων μεμβρανών, επιτρέποντας την ταυτόχρονη βελτιστοποίηση των βιολογικών διεργασιών και τον περιορισμό του φαινομένου της ρύπανσης των μεμβρανών.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Ο Σ.Ι. Πάτσιος ευχαριστεί θερμά το Ίδρυμα Μποδοσάκη για την οικονομική υποστήριξη που του παρέχει κατά την εκπόνηση της διδακτορικής του διατριβής.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1]. Stephenson T., Judd S., Jefferson B., Brindle K., Membrane Bioreactors for Wastewater Treatment, IWA Publications, London, England, (2001).
- [2]. Cote P., Masini M., Mourato D., Comparison of membrane options for water reuse and reclamation, *Desalination* **167**:1 (2004).
- [3]. Judd S., The MBR book: Principles and applications of membrane bioreactors in water and wastewater treatment, Elsevier Publications, Oxford, England, (2006).
- [4]. Le-Clech P., Chen V. and Fane A.G.T., Fouling in membrane bioreactors used in wastewater treatment, *J. Membr. Sci.* **284**:17 (2006).
- [5]. Ng A.N.L. and Kim A.S., A mini-review of modeling studies on membrane bioreactor (MBR) treatment for municipal wastewaters, *Desalination* **212**:261 (2007).
- [6]. Wintgens T., Rosen J., Melin T., Brepols C., Drensla K. and Engelhardt N., Modelling of a membrane bioreactor system for municipal wastewater treatment, *J. Membr. Sci.* **216**:55 (2003).
- [7]. Metcalf and Eddy, Wastewater Engineering: Treatment and Reuse, 4th Edition, MacGraw-Hill, New York, USA, (2003).
- [8]. Gujer W., Henze M., Mino T. and van Loosdrecht M., Activated sludge model no. 3, *Water Sci. Technol.* **39**:183 (1999).
- [9]. Kovar K.K. and Egli T., Growth kinetics of suspended microbial cells: From single-substrate-controlled growth to mixed-substrate kinetics, *Microbiol. Mol. Biol. R.* **62**:646 (1998).
- [10]. Gujer W. and Larsen T.A., The implementation of biokinetics and conservation principles in ASIM, *Water Sci. Technol.* **31**:257 (1995).
- [11]. Henze M., Gujer W., Mino T. and van Loosdrecht M., Activated Sludge Models: ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3, Scientific and Technical reports Series vol. 9, IWA Publishing, London, England, (2000).
- [12]. Holakoo L., Nakhla G, Bassi A.S. and Yanful E.K., Long term performance of MBR for biological nitrogen removal from synthetic municipal wastewater, *Chemosphere* **66**:849 (2007).
- [13]. Beccari M., Dionisi D., Giullani A., Majone M., and Ramadori R., Effect of different carbon sources on aerobic storage by activated sludge, *Water Sci. Technol.* **45**:157 (2002).
- [14]. Lapidou C.S. and Rittmann B.E., Non-steady modeling of extracellular polymeric substances, soluble microbial products, and active and inert biomass, *Water Res.* **36**:1983 (2002).
- [15]. Πάτσιος Σ.Ι., Μελέτη βιοαντιδραστήρων μεμβρανών για επεξεργασία λυμάτων και ανάκτηση νερού, Διδακτορική διατριβή, *εν εξελίξει*.