

Metropolia Ammattikorkeakoulu
Kemiantekniikan koulutusohjelma

Tiina Ikäläinen

**AKTIIVILIETEPROSESSIN SIMULOINTIOHJELMAN
KÄYTTÖÖNOTTO**

Insinööriyö 30.9.2008

Ohjaaja: prosessi-insinööri Teemu Koskinen
Ohjaava opettaja: yliopettaja Veli-Matti Taavitsainen

Tekijä	Tiina Ikalainen
Otsikko	Aktiivilieteprosessin simulointiohjelman käyttöönotto
Sivumäärä	52
Aika	30.9.2008
Koulutusohjelma	Kemiantekniikan koulutusohjelma
Tutkinto	Insinööri (AMK)
Ohjaaja	Prosessi-insinööri Teemu Koskinen
Ohjaava opettaja	Yliopettaja Veli-Matti Taavitsainen
<p>Biologisessa jätevedenpuhdistuksessa käytetään usein aktiivilietemenetelmää. Aktiivilieteprosessin avulla voidaan jätevesistä poistaa suurin osa happea kuluttavista orgaanisista aineista sekä mikrobeja ravinnokseen tarvitsevista typpi- ja fosforiyhdisteistä. Prosessi on fysikaalisten, kemiallisten ja biologisten osaprosessien muodostama systeemi, jonka tärkeänä tutkimustyökaluna nykyaikana toimivat matemaattinen mallintaminen ja simulointi. Näiden tekijöiden avulla pyritään prosessin optimoituun suunnitteluun ja ajoon, jolloin saadaan parempi puhdistustehokkuus ja säästetään kustannuksissa.</p> <p>Insinöörityön aiheena oli Hydromantiksen GPS-X-simulointiohjelman käyttöönotto. FCG Planeko Oy aikoo tulevaisuudessa käyttää ohjelmaa hyödyksi laitosten käyttötukitoiminnassa ja prosessisuunnittelussa. Tämän työn tavoitteena oli rakentaa GPS-X-ohjelmalla esimerkkimalli ja saada se simuloitua onnistuneesti. Työssä esimerkkikohteena toimi Hermanninsaaren jätevedenpuhdistamo. Puhdistamolle rakennettiin malli, ja sen lähtötiedot syötettiin ohjelmaan laitoksen prosessitietoja vastaavaksi. Puhdistamolta saatu prosessidata muokattiin ohjelman vaatimaan formaattiin ja data asetettiin syöttötiedoiksi ohjelmaan simulointia varten.</p> <p>Simulointi suoritettiin ilman kalibrointia ja tarkasteltiin, minkälaisia tuloksia saadaan pelkillä parametrien oletusarvoilla. Mallin toimintaa kokeiltiin eri aktiivilietemalleilla. Osalla malleista päästiin ennusteissa suhteellisen lähelle laitoksen mitattuja arvoja.</p>	
Hakusanat	GPS-X, simulointi, matemaattinen mallintaminen, aktiivilieteprosessi, käyttöönotto, karakterisointi

Author	Tiina Ikäläinen
Title	Commissioning of simulation software in the activated sludge process
Number of Pages	52
Date	30 September 2008
Degree Programme	Chemical Engineering
Degree	Bachelor of Engineering
Instructor	Teemu Koskinen, Process Engineer
Supervisor	Veli-Matti Taavitsainen, Principal Lecturer
<p>Activated sludge method is often used in biological waste water treatment. Most of the oxygen consuming organic substances as well as the microbe consuming nitrogen- and phosphorus compounds can be removed by the activated sludge process. The process comprises physical, chemical and biological sub processes and can be studied using mathematic modeling and simulation. The aim of these research methods is to optimize process design and run and thus achieve better purification efficiency and lower expenses.</p> <p>The main objective in this final year project was to commission Hydromantis's GPS-X-simulation program. FCG Planeko Oy is going to exploit the program in the plant's operation support systems and process design. The goal of the commissioning was to build an example model with the GPS-X program and to simulate it successfully. Hermanninsaari's waste water plant was the example target of the modeling. The model was built for the plant and its initial data were entered into the program to match the plant process data. The process flow rate data received from the plant were edited to match the format required by the program and reset as a input data into the program for the simulation.</p> <p>The simulation was performed without calibration because the idea was to examine what kind of results would be received with the default values of the parameters. The functioning of the model was tested with different activated sludge models. For some of these models the predicted values were relatively close to those measured in the plant.</p>	
Keywords	GPS-X, simulation, mathematical modeling, activated sludge process, commissioning, characterization

Sisällys

Tiivistelmä

Abstract

1 Johdanto	6
2 Jäteveden karakterisointi	7
2.1 Yleistä	7
2.2 Laatuominaisuudet	8
2.3 Jäteveden fraktiointi	9
2.3.1 Orgaaniset fraktiot	9
2.3.2 Kiintoaine SS	11
2.3.3 Typen fraktiot	11
2.3.4 Fosforin fraktiot	12
2.3.5 Muut tekijät	13
3 Aktiivilieteprosessin mallinnus	14
3.1 Yleistä mallinnuksesta	14
3.2 Aktiivilieteprosessi	14
3.3 Aktiivilietemallit	17
3.3.1 ASM1	21
3.3.2 ASM2 ja ASM2d	22
3.3.3 ASM3	23
4 Aktiivilieteprosessin simulointi	25
4.1 Yleistä simuloinnista	25
4.2 Simulointiohjelmisto GPS-X	25
4.3 Mallin rakentaminen ja simulointi	26
4.3.1 Kirjaston valinta	26
4.3.2 Mallin piirtäminen	27
4.3.3 Lähtötietojen muokkaaminen	28
4.3.4 Mallin kalibrointi	28
4.3.5 Mallin kääntäminen ja simulointi	29
4.4 Laitokselta tulevan datan siirtäminen ohjelmaan	30
4.5 Simulointituloksia	32
4.5.1 Simulointituloksia keskimääräisten kuormitusten pohjalta	32
4.5.2 Simulointituloksia todellisen kuormituksen pohjalta	33

Lähteet	35
Liitteet	36
Liite 1: Päivittäinen virtaama tulevalle ja lähtevälle vedelle	36
Liite 2: Lähtevän veden muuttujat mallille ASM1	37
Liite 3: Lähtevän veden muuttujat mallille ASM2d	38
Liite 4: Lähtevän veden muuttujat mallille ASM3	39
Liite 5: Lähtevän veden muuttujat mallille Mantis	40
Liite 6: Lähtevän veden muuttujat mallille Newgeneral	41
Liite 7: Hermanninsaaren puhdistamolle tulevan ja lähtevän veden virtaama 21.–23.4.2008	42
Liite 8: Hermanninsaaren puhdistamon mitatut ja mallinnetut lähtevän veden typpi- sekä fosforipitoisuudet mallilla ASM1 21.–23.4.2008	43
Liite 9: Hermanninsaaren puhdistamon lähtevän veden kiintoaine- sekä BOD5-pitoisuudet mallilla ASM1 21.–23.4.2008	44
Liite 10: Hermanninsaaren puhdistamon mitatut ja mallinnetut lähtevän veden typpi- sekä fosforipitoisuudet mallilla ASM2d 21.–23.4.2008	45
Liite 11: Hermanninsaaren puhdistamon lähtevän veden kiintoaine- sekä BOD5-pitoisuudet mallilla ASM2d 21.–23.4.2008	46
Liite 12: Hermanninsaaren puhdistamon mitatut ja mallinnetut lähtevän veden typpi- sekä fosforipitoisuudet mallilla ASM3 21.–23.4.2008	47
Liite 13: Hermanninsaaren puhdistamon lähtevän veden kiintoaine- sekä BOD5-pitoisuudet mallilla ASM3 21.–23.4.2008	48
Liite 14: Hermanninsaaren puhdistamon mitatut ja mallinnetut lähtevän veden typpi- sekä fosforipitoisuudet mallilla Mantis 21.–23.4.2008	49
Liite 15: Hermanninsaaren puhdistamon lähtevän veden kiintoaine- sekä BOD5-pitoisuudet mallilla Mantis 21.–23.4.2008	50
Liite 16 (1/2): Hermanninsaaren puhdistamon kolmen vuorokauden prosessidataa 21.–23.4.2008	51
Liite 16 (2/2): Hermanninsaaren puhdistamon kolmen vuorokauden prosessidataa 21.–23.4.2008	52

1 Johdanto

Biologisen jätevedenkäsittelyn tutkimuksen nykyaikaisia työkaluja ovat simulointi ja matemaattinen mallintaminen. Matemaattisten mallien avulla pystytään simuloimaan sekä testaamaan hypoteeseja nopeammin ja halvemmin kuin kokeilutoiminnalla. Simulointia pystytään käyttämään hyödyksi suunnittelussa, joka mahdollistaa puhdistustuloksen parantamisen ja kustannussäästöt prosessien optimoidulla suunnittelulla ja ajolla.

Tämän työn tarkoituksen oli Hydromantiksen GPS-X-simulointiohjelmiston käyttöönotto. Työn tilaajana toimi FCG Planeko Oy, joka kuuluu FCG-konsernin Infra- ja ympäristöliiketoimintaryhmään. FCG Planeko Oy:n suunnitelmissa on tulevaisuudessa saada ohjelma tuotantokäyttöön ja hyödyntää sitä prosessisuunnittelussa. Yritys aikoo myös käyttää tässä työssä rakennettua Hermanninsaaren jätevedenpuhdistamon mallia laitoksen käyttötuki-toiminnassa.

Työn tavoitteisiin kuului ohjelmiston käytön oppiminen, soveltamismahdollisuuksien kartoittaminen, lähtötietojen laajuuden ja siirtoformaattien selvittäminen, lähtötietojen muokkaus sekä esimerkkikohteen simulointi onnistuneesti. Tarkoituksena ei ollut kuitenkaan mallin optimointi, joten on tärkeää huomata, että mallin kalibrointia ei ole tässä työssä suoritettu. Tarkoituksena oli siis katsoa, mihin pystytään pelkillä lähtötiedoilla ja antaako malli niillä lainkaan järkeviä tuloksia.

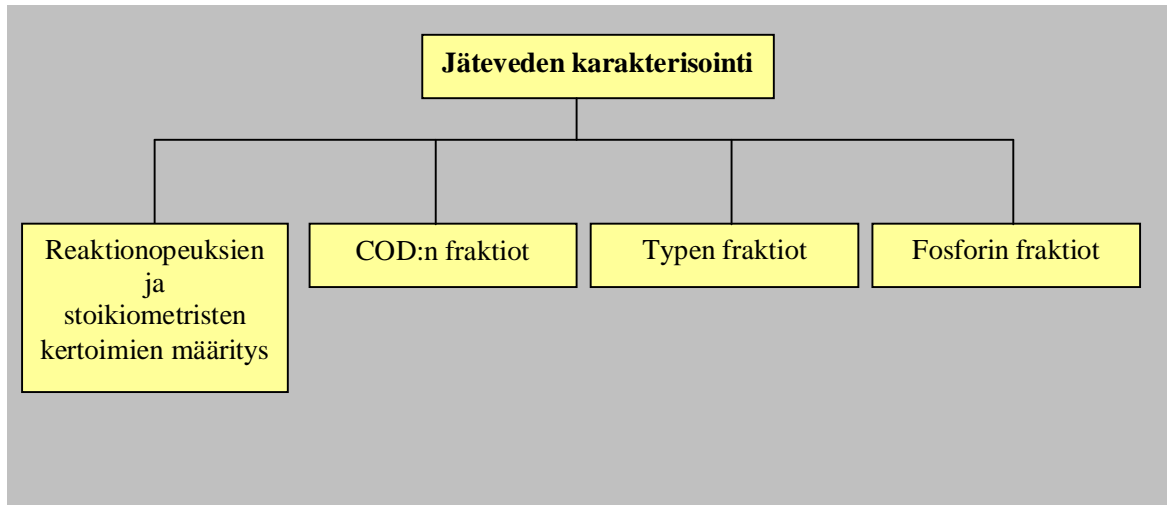
2 Jäteveden karakterisointi

2.1 Yleistä

Jätevesiprosessin simuloinnilla pyritään mm. jäteveden optimaaliseen puhdistukseen. Jotta todellisen prosessin simulointi olisi mahdollista, on jäteveden ominaisuudet tunnettava tarkasti. Karakterisoinnilla eli poistettavien komponenttien perusteellisella havainnoinnilla pyritään analysoimaan prosessiin tuleva jätevesi tarkasti. Jätevedenpuhdistusprosessin tärkeimpiä lähtötietoja ovat seuraavat:

- tilavuusvirtaus ja sen vaihtelut (m^3/d)
- biologinen hapenkulutus BOD (kg/d)
- kemiallinen hapenkulutus COD (kg/d)
- kiintoaine SS (kg/d)
- fosfori P (kg/d)
- typpi N (kg/d)
- alkaliteetti.

Näiden tekijöiden lukuarvot vaihtelevat eri puhdistuslaitosten välillä, mikä taas vaikuttaa puhdistustehokkuuteen. Kun jäteveden koostumus tunnetaan, voidaan laitos suunnitella siten, että haluttu puhdistustehokkuus pystytään saavuttamaan. Näin ollen jäteveden karakterisointi on lähtökohtana laitoksen mitoitukselle sekä prosessin simuloinnille. Kuten kuvasta 1 nähdään, karakterisointiin tulisi kuulua COD-, typpi- ja fosforifraktiointi sekä reaktionopeuksien ja stoikiometristen kertoimien määrittäminen. Ongelmallisinta on orgaanisen aineen karakterisointi, koska se ei perustu yhtä suoriin analyyseihin kuin fosforin ja typen karakterisointi. [1, s. 19]



Kuva 1. Jäteveden karakterisointi.

2.2 Laatuominaisuudet

Jäteveden laatuominaisuuksien tunteminen on lähtökohtana ravinneaineita poistettaessa. Hyvänä esimerkkinä laatuominaisuuksista ovat $BOD_5:COD$ -suhde, $COD:N$ -suhde sekä $BOD_5:N$ -suhde. $BOD_5:COD$ -suhdetta voidaan kutsua jäteveden käsittelyn indikaattoriksi. Sitä kutsutaan biologisen käsiteltävyyden indeksiksi. Se kuvaa helposti ja hitaasti biohajoavan orgaanisen aineen osuutta. $COD:N$ -suhteen tunteminen on erityisen tärkeää denitrifikaatioprosessien (ks. yhtälö 3.1) suunnittelussa, koska prosessi tarvitsee tapahtuakseen hiilen lähteen. Denitrifikaatiolla on ratkaiseva rooli kokonaistypen poiston onnistumisessa. Nitrifikaatioprosessin (ks. yhtälö 3.3) onnistumisen yksi kriittisimpiä tekijöitä on $BOD_5:N$ -suhde. [2]

Kineettisiä ja stoikiometrisiä kertoimia, jotka riippuvat laatuominaisuuksista, ovat heterotrofisen ja autotrofisen kasvunopeuden maksimit μ_H ja μ_A , heterotrofinen tuotto Y_H , hydrolyysin nopeusvakio K_h ja anoksisen olosuhteiden korjauskertoimet η_g ja η_h . Heterotrofit eli heterotrofiset bakteerit käyttävät orgaanista hiiltä hiili- ja energialähteenä ja happea terminaalisenä elektroniakseptorina. Autotrofiset eli nitrifioivat bakteerit käyttävät ammoniumtyyppä energialähteenä, epäorgaanista hiiltä hiililähteenä ja happea terminaalisenä

elektroniakseptorina. Molempien edellä mainittujen bakteerien kasvu riippuu lämpötilasta (ks. yhtälö 3.2). [2]

2.3 Jäteveden fraktiointi

Jäteveden fraktioinnilla tarkoitetaan sen jakamista osiin tietyn ominaisuuden mukaan. Fraktioitavat suureet riippuvat mallinnuksen tarkoituksesta ja käytettävästä mallista. Yleisesti tunnettuja jäteveden fraktioitavia suureita ovat BOD, COD, fosfori, typpi ja kiintoaine. Näiden lisäksi on olemassa lukuisia eri fraktioita eli jakeita, joiden tuntemusta tarvitaan jäteveden puhdistusprosessin mallinnuksessa. Nämä jakeet esitellään seuraavina.

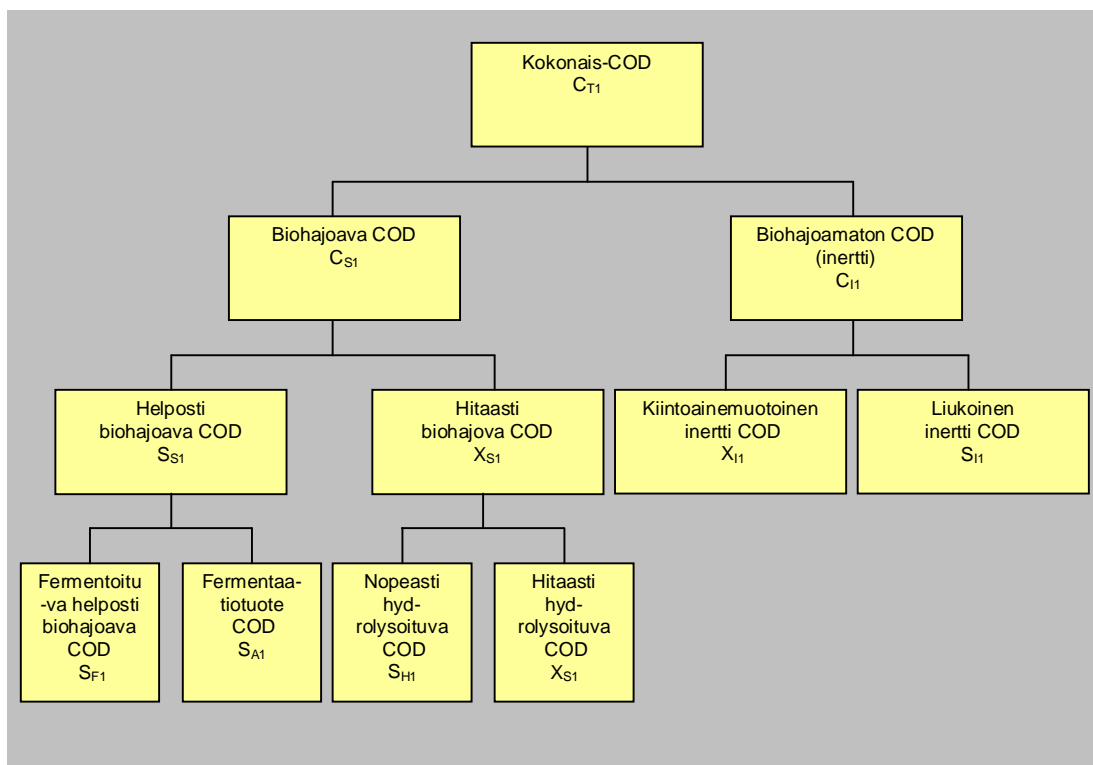
2.3.1 Orgaaniset fraktiot

COD:ta pidetään käyttökelpoisempänä orgaanisen aineen mittana kuin biologista hapenkulutusta (BOD), koska se mahdollistaa substraatin, biomassan ja liukoisen hapen vertaamisen elektroekvivalenteina. Orgaanisen aineen fraktiointi on paljon haastavampaa kuin esimerkiksi typen ja fosforin fraktiointi, koska siinä ei pystytä yhtä suoriin analyyseihin. Käsite COD sisältää erilaisia orgaanisen hiilen muotoja, jotka edelleen eritellään niiden biohajoavuusominaisuuksien mukaan (ks. kuva 3). [1, s. 19]

Kokonais-COD eli C_{T1} jakaantuu kahteen pääkomponenttiin, jotka ovat kokonaisbiohajoamaton COD (C_{I1}) eli inertti COD ja biohajoava COD (C_{S1}). [3, s. 284]

Inertillä CODilla on edelleen kaksi alajakoa: liukoinen inertti COD (S_{I1}) ja kiintoainemuotoinen inertti COD (X_{I1}). Liukoinen inertti COD kulkee prosessin läpi osallistumatta biokemiallisiin reaktioihin, kun taas kiintoainemuotoinen inertti COD poistuu raakalietteen mukana esikäsitelyssä tai sitoutuu aktiivilietteeseen ja poistuu prosessista ylijäämälietteen mukana. [3, s. 284]

Biohajoavalla COD:lla on myös kaksi alajaetta: helposti biohajoava COD (S_{S1}) ja hitaasti biohajoava COD (X_{S1}). Fraktioiden jaottelu perustuu siis biohajoavuusnopeuksien suuruuden erotteluun. Hitaasti biohajoavan COD:n on havaittu jakaantuvan vielä edelleen Doldin ja Maraisin vuonna 1986 julkaiseman bi-substraattimallin vastaisesti kahteen alajakeeseen: nopeasti hydrolysoituvaan CODiin (S_{H1}) ja hitaasti hydrolysoituvaan CODiin (X_{S1}). Hydrolyysillä tarkoitetaan reaktiota, jossa orgaaninen aine hajoaa liukoiseen muotoon. Helposti biohajoavalla CODilla on myös kaksi alajakoa: fermentoituva helposti biohajoava COD (S_{F1}) ja fermentaatiotuote COD (S_{A1}). Tässä tapauksessa fermentaatiolla tarkoitetaan anaerobista käymisreaktiota. [3, s. 285]



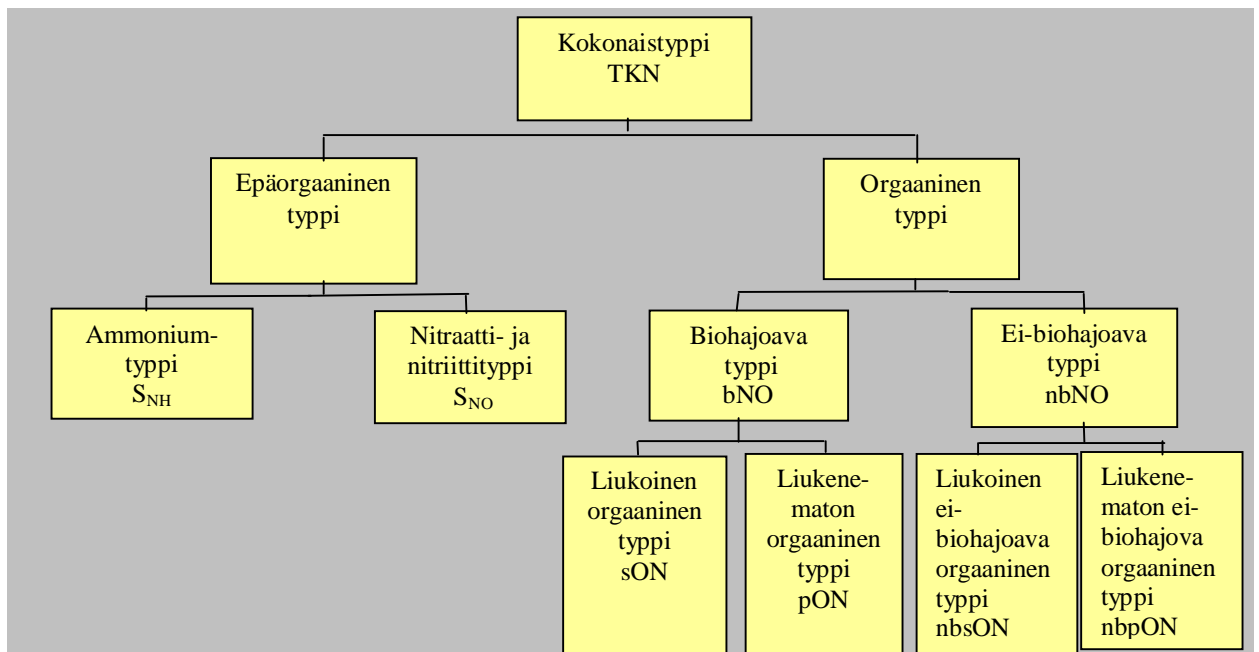
Kuva 2. COD:n fraktiot.

2.3.2 Kiintoaine SS

Kiintoaine SS sisältää sekä orgaanisen jakeen että epäorgaanisen osuuden kiintoaineesta. Vedenpuhdistusprosessin rinnakkaissaostuksessa fosforin saostukseen käytettävät kemikaalit lisäävät kiintoaineen määrää prosessissa. Epäorgaaninen kiintoaine (Xii) sisältää lähinnä Fe-yhdisteitä. [4, s.23]

2.3.3 Typen fraktiot

Puhdistusprosessiin tulevan jäteveden sisältämä typpi on pääasiassa ammoniumtyppimuodossa S_{NH} noin 60-70 %. Jäteveden typen koostumus on havaittavissa kuvasta 3, jossa kokonaistyyppi on jaettu orgaaniseen tyyppiin ja epäorgaaniseen tyyppiin. Epäorgaaninen typpi sisältää ammoniumtypen S_{NH} sekä nitraatti- ja nitriittityypin S_{NO} . Orgaaninen typpi jakaantuu biohajoavaan tyyppiin bON ja biohajoamattomaan tyyppiin nbON. bON jakaantuu vielä liukoiseen orgaaniseen tyyppiin sON ja liukenemattomaan orgaaniseen tyyppiin pON. Biohajoamaton typpi jakaantuu myös edelleen liukoiseen ei-biohajoavaan orgaaniseen tyyppiin nbsON ja liukenemattomaan ei-biohajoavaan orgaaniseen tyyppiin nbpON. [5, s. 670]



Kuva 3. Typen fraktiot.

Ammoniumtyppi S_{NH} ja nitraattityppi S_{NO} ovat varsinaiset typpijakeiden mallimuuttajat. Muu typpi lasketaan käyttäen stoikiometrisiä kertoimia suhteessa orgaanisen aineen eri fraktioihin.

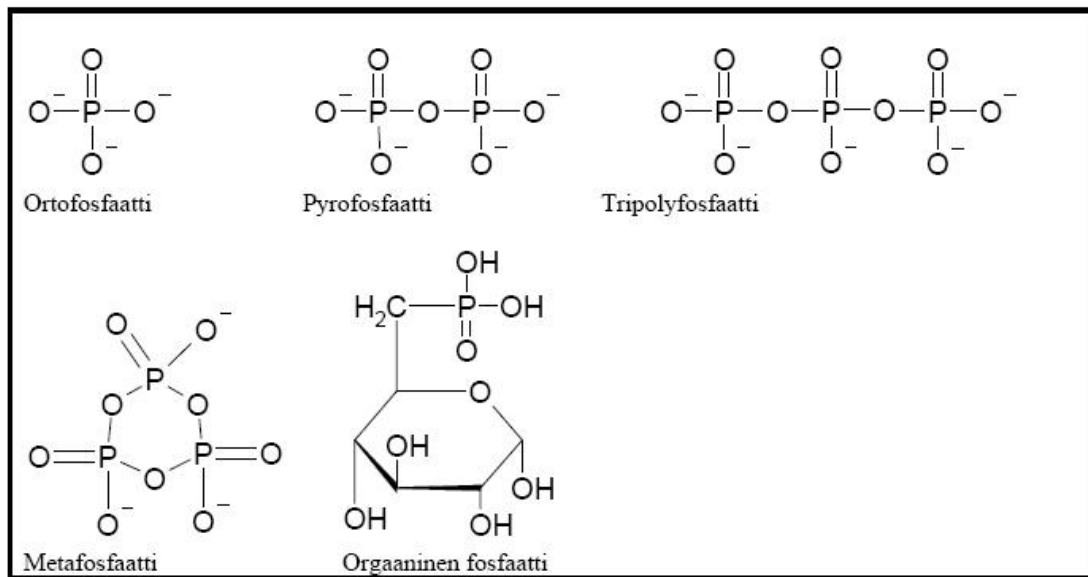
Näitä ovat mm. seuraavaksi luetellut fraktiot:

- Inertin liukoisen orgaanisen aineen typpi i_{NSI} , joka kuvaa inerttiin liukoiseen orgaaniseen aineeseen sitoutuneen typen määrää suhteessa inerttiin liukoiseen orgaaniseen aineeseen.
- Helposti hajoavan liukoisen orgaanisen aineen typpi i_{NSS} , joka vapautuu käsittelyprosessinaikana samalla nopeudella kuin helposti hajoavaa orgaanista ainetta S_S varastoidaan soluun.
- Inertin orgaanisen aineen sisältämä typpi i_{NXS} , joka vapautuu hitaasti hajoavan orgaanisen aineen hydrolyysin myötä. [4, s.24]

Molekylaarinen typpi S_{N2} kuvaa kaasumaisen typen osuutta, joka on denitrifikaation lopputuote.

2.3.4 Fosforin fraktiot

Tulevan jäteveden fosfori voi esiintyä erilaisissa kemiallisissa muodoissa kuten epäorgaanisena ortofosfaattina tai fosfaattikomplekseina (polyfosfaatit, metafosfaatit) sekä orgaanisesti sitoutuneena fosforina. Ortofosfaatit, kuten PO_4^{3-} , HPO_4^{2-} , $H_2PO_4^-$ ja H_3PO_4 , ovat sellaisenaan käytettävissä biologisessa metaboliassa. Vesiliuksissa polyfosfaatit hydrolysoituvat ortofosfaateiksi. Yleensä hydrolysoituminen tapahtuu puhtaissa vesiliuksissa suhteellisen hitaasti. Jätevesissä hydrolysoituminen on nopeampaa biokatalyysin vuoksi. Hydrolysoituminen nopeutuu myös lämpötilan noustessa. Ympäristön kannalta ongelmallisin fosforin muoto on heikosti biohajoavat fosfonaattiyhdisteet. Erilaisissa puhdistusaineissa käytettävien fosfonaattien ei ole juurikaan biohajoavan ja muuntuvan jäteveden käsittelyprosesseissa. Fosfonaatit poistuvat pääasiallisesti jätevedestä adsorboitumalla aktiivilietteeseen. Kuvassa 4 on esitetty yleisempiä fosforin esiintymismuotoja. [5, s. 63]



Kuva 4. Fosforin yleisempiä esiintymismuotoja.

2.3.5 Muut tekijät

Alkaliteetti (veden kyky vastustaa pH:n muutosta) S_{HCO} on tärkeä tekijä jätevedenpuhdistuksen biologisessa puhdistuksessa, koska nitrifikaatio kuluttaa jäteveden alkaliteettia. Riittävä alkaliteetti tarvitaan, jotta vältetään jäteveden happamuuden kasvulta. Veden alkaliteettiin vaikuttaa mm. vuotovesien määrä sekä käytetyn kalkin annostuksen taso. [4, s. 27]

Happipitoisuus S_{O} on yksi aktiivilieteprosessin parametreista. Veden hapettumista tapahtuu, kun vesi putoaa altaasta ylivuotokourujen pohjalle ja kokoojakanaviin. Varsinainen jäteveden hapetus tapahtuu kuitenkin ilmastusaltaissa, johon puhalletaan ilmaa kompressoreilla. [4, s. 27]

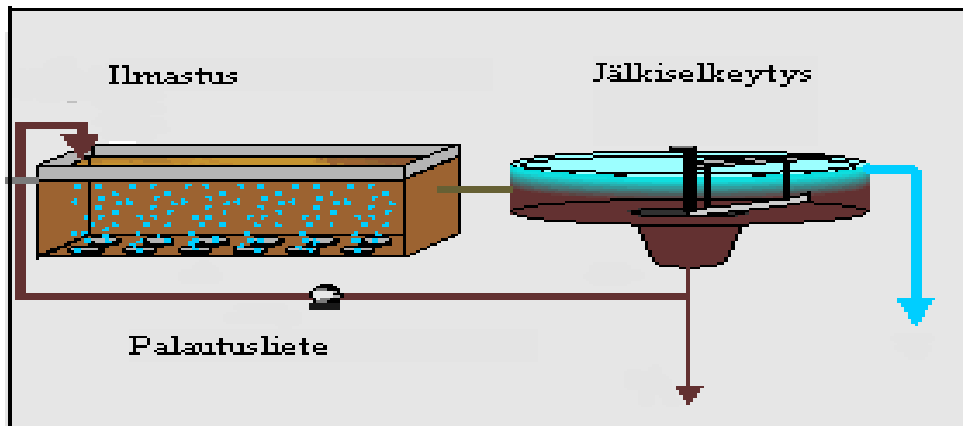
3 Aktiivilieteprosessin mallinnus

3.1 Yleistä mallinnuksesta

Mallintaminen tarkoittaa todellisuuden osan, esimerkiksi tietyn ilmiön tai systeemin esittämistä muulla tavalla kuin sillä itsellään. Mallintamista tehdään usein matemaattisesti, jolloin malli on matemaattinen kuvaus todellisesta prosessista. Mallin avulla pyritään selvittämään kokeellisia tuloksia ja niihin johtaneita syitä. Mallinnuksen tavoitteena on yleensä simulointi (ks. kohta 4.1). Mallit voidaan jakaa mekanistisiin ja empiirisiin malleihin. Empiiriset mallit rakennetaan kuvaamaan mitattua tietoa, jolloin malli ei välttämättä kuvaa prosessia oikealla tavalla tai saattaa olla toimiva vain tarkoin rajatulla toiminta-alueella. Mekanistiseksi malliksi kutsutaan mallia, joka perustuu tiettyihin fysikaalisiin tai kemiallisiin lakeihin. Mekanistiset mallit ovat alhaalta ylöspäin rakennettuja malleja, ja niiden toimintaa on helppo ymmärtää. Empiiristen ja mekaanisten mallien avulla rakennettuja malleja käytetään prosessien syuseuraussuhteiden ymmärtämiseen. [4, s. 3]

3.2 Aktiivilieteprosessi

Jäteveden puhdistusprosessin varsinaisen ytimen muodostaa biologinen käsittely, joka voidaan toteuttaa esimerkiksi aktiivilieteprosessina. Aktiiviliete on mikrobeista ja muusta biomassasta koostuvaa lietettä, jossa elävät pieneliöt käyttävät hyväkseen jäteveden liuenneita ravinteita ja orgaanisia yhdisteitä.



Kuva 5. Jäteveden puhdistuksen biologinen vaihe: aktiivilieteprosessi.

Prosessi koostuu kahdesta erillisestä vaiheesta: biologisesta reaktiovaiheesta ja lietteen erotusvaiheesta. Biologinen reaktio tapahtuu ilmastusaltaassa, jossa aerobisten mikro-organismien hapen saanti mahdollistetaan ilmastamalla altaan sisältöä. Erotusvaiheessa aktiiviliete johdetaan selkeytysaltaaseen, jossa liete erotetaan joko laskeuttamalla tai flotaatiolla eli vaahdottamalla. [7]

Orgaanisen aineksen poisto

Aktiivilietteen mikro-organismit poistavat vedestä liukoiset orgaaniset epäpuhtaudet. Prosessin tuloksena syntyy hiilidioksidia ja vettä. Näin pystytään poistamaan 30–50 % orgaanisesta aineksesta. Ylijäämälietteiden mukana poistuu noin 40–45 % orgaanisesta aineksesta ja loput 10 % poistuu lähtevän veden mukana.

Typen poisto

Aktiivilietealtaassa typen poisto tapahtuu nitrifikaation ja denitrifikaation avulla. Nitrifikaatio on aerobinen prosessi, jossa autotrofiset eli hiilidioksidia hiilen lähteenä käyttävät bakteerit hapettavat ammoniumtypen nitriitin kautta nitraatiksi. Reaktio on seuraavan yhtälön mukainen:



Nitrifikaatiobakterien kasvunopeus riippuu lämpötilasta. Lämpötilan vaikutusta ominaiskasvunopeuteen voidaan kuvata mm. yhtälöllä:

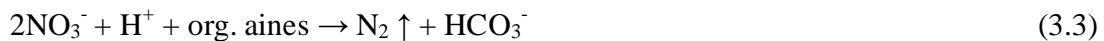
$$\mu_{\max} = \mu_{20} e^{k_T (T-20)} \quad (3.2)$$

jossa μ_{\max} = maksimimaalinen ominaiskasvunopeus, d^{-1}

k_T = lämpötilavakio, $^{\circ}C^{-1}$

T = lämpötila, $^{\circ}C$

Denitrifikaatioprosessi vaatii anoksiset olosuhteet, eli hapen pitää olla saatavissa nitraattiin sitoutuneena. Mikro-organismit muuttavat nitriitin tai nitraatin typpikaasuksi hajottaen samalla orgaanista ainetta. Orgaanista ainesta hiilen lähteenä käyttävän denitrifikaation yhtälö on seuraavanlainen:



Muodostunut energia päätyy lämmöksi tai biologiseen kasvuun. Denitrifikaatiossa puolet nitrifikaation kuluttamasta alkaliteetista palautuu. Mikro-organismit käyttävät typpeä myös solumassan biologiseen kasvuun (100 g BODia vaatii 5 g typpeä). Tavanomaisella tulevan jäteveden koostumuksella saadaan poistettua 20-40 % typestä. Loput typestä voidaan poistaa nitrifikaatio-denitrifikaation kautta, jolloin tyypillisimmin päästään yli 70 %:n typpiredukioon. [8, s. 43-59]

Fosforin poisto

Fosforia tarvitaan biologisessa puhdistuksessa mikro-organismien tuottamiseen (100 g BODia vaatii 1 g fosforia). Biologinen puhdistusvaihe pystyy poistamaan tavanomaisella tulevan jäteveden koostumuksella 30-50 % fosforista, jolloin fosfori poistuu pääosin ylijäämälietteeseen sitoutuneena. Tehostetulla biologisella puhdistuksella päästään 50-80 %:n poistotehokkuuteen. Loput fosforista voidaan poistaa kemiallisesti saostamalla.

3.3 Aktiivilietemallit

Aktiivilieteprosessia kuvaava malli koostuu useista pienempiä prosessikokonaisuuksia kuvaavista malleista. Osa näistä malleista on empiirisiä eli mitattuun tietoon perustuvia ja osa mekanistisia. Malli sisältää kuvauksen prosessin toiminnasta, joka liitetään sopivaan tietokoneohjelmaan laskennan mahdollistamiseksi. [4 s. 3]

Aktiivilietemalleja (Activated sludge models) on kehitetty neljä eri käyttötarkoituksiin sopivaa: ASM1, ASM2, ASM2d ja ASM3. Niistä ensimmäinen ASM1 esiteltiin IAWQ:n (International Association on Water Quality) toimesta jo vuonna 1987. Aktiivilietemallien käyttö edellyttää täydellistä jäteveden karakterisointia. Jätevedenpuhdistusprosessissa komponenttien reaktiot ovat erilaiset, joten fraktiointi on mallin toimivuuden kannalta tarpeen. Jäteveden fraktioitavat suuret riippuvat käytettävästä mallista, vaikka mallien fraktioilla on monesti yhtäläisyyksiä toisten mallien fraktioiden kanssa (ks. taulukot 1-3). [4, 5]

Malleja voidaan käyttää apuna eri tarkoituksiin. Niitä voidaan käyttää esimerkiksi tutkimustyökaluna arvioimaan biologista prosessin toimintaa. Niiden avulla pystytään paremmin ymmärtämään tekijöitä, jotka vaikuttavat puhdistustulokseen. Malleja voidaan käyttää myös jätevedenpuhdistusprosessin suunnitteluun ja mitoittamiseen sekä käsittelykapasiteetin arviointiin. Viimeksi mainituissa pystytään selvittämään virtauksen ja pitoisuuden vaihtelevuuksien vaikutukset prosessiin. (5, s. 861)

Seuraavassa on kerrottu tarkemmin ASM1-ASM3-malleissa esiintyvät komponentit. Fraktioitavat suuret riippuvat mallinnuksen tarkoituksesta ja käytettävästä mallista. Useimpia näistä komponenteista ei ole määritelty analyyttisesti vaan teoreettisesti.

Liukoiset komponentit (soluble components) S_2

S_I eli inertti liukoinen orgaaninen aine. Tämä aine kuvaa sitä liukoista fraktiota, jota ei kyseisellä prosessilla voida edelleen hajottaa. Tuleva jätevesi sisältää S_I :tä, mutta sitä myös syntyy hitaasti hajoavan orgaanisen aineen X_S :n hydrolyysissä. [9, s. 3]

S_A eli käymistuote. Käymistuote eli fermentaatiotuote täytyy mallintaa erikseen muista liukenevista orgaanisista materiaaleista. Käymistuotteen oletetaan olevan asetaattia, vaikka todellisuudessa se saattaa sisältää paljon muitakin fermentaatiotuotteita. [10, s. 167]

S_S eli helposti hajoava orgaaninen aine. Liukoisen biologisesti hajoavan orgaanisen aineen katsotaan olevan helposti hajoavaa ja suoraan heterotrofisten bakteerien käytössä ilman hydrolyysiä. [11, s. 185]

S_{O_2} eli liuennut happi. Tämä komponentti kuvaa liunneen hapen määrää. [11, s. 185]

S_{NH_4} eli ammoniumtyppi + ammoniakkityppi. Tasapainona sähköiselle varaukselle S_{NH_4} :n oletetaan olevan ainoastaan NH_4^+ -muodossa, vaikka todellisuudessa se sisältää NH_3 - ja NH_4^+ -N-muodot. [9, s. 3]

S_{NO_3} eli nitraattityppi + nitriittityppi. Kaikissa stoikimetrissä laskelmissa S_{NO_3} :n oletetaan olevan ainoastaan NO_3^- :a. [9, s. 3]

S_{ND} eli kaksinkertaisesti hajoava orgaaninen typpi.

S_{ALK} eli jäteveden alkalisuus. Alkalisuutta käytetään jotta pystytään arvioimaan biologisen reaktion sähköinen varaus. Kaikissa stoikimetrissä laskelmissa S_{ALK} :n oletetaan olevan pelkkää HCO_3^- :a. [9, s. 2]

S_F eli käymisalkoholi on nopeasti hajoava orgaaninen aine. S_F :n on oletettu olevan kasvualustana fermentaatioissa, siksi se ei kuulu fermentaatiotuotteeseen S_A . [9, s. 3]

S_{N2} eli molekylaarinen typpi, jonka oletetaan olevan ainoa tuote denitrifikaatiossa.

Molekylaarinen typpi kuvaa kaasumaisen typen osuutta, vastaavasti kuin kaasu S_{O2} . [9, s. 3]

S_{PO4} eli epäorgaaninen liukoinen fosfori, joka on pääosin ortofosfaatteina. Tasapainona sähköiselle varaukselle S_{PO4} :n oletetaan olevan 50 % $H_2PO_4^-$:a ja 50 % HPO_4^{2-} :a riippumatta pH:sta. [9, s. 3]

Kiintoainekomponentit (Particulate Components) X_2

X_I eli inertti orgaaninen kiintoaine. Inertti orgaaninen kiintoaine sitoutuu aktiivilieteflokkeihin ja poistuu ylijäämälietteen mukana reagoimatta prosessissa. X_I :ä on tulevassa jätevedessä sellaisenaan, mutta sitä syntyy myös käsittelyssä biologisen hajoamisen seurauksena. [9, s. 3]

X_S eli hitaasti hajoava aine. Tällä komponentilla on korkea molekyylipaino, se on kolloidinen ja sen orgaanisen kiintoaineen pitää käydä läpi solun ulkoinen hydrolyysi hajotakseen. [9, s. 4]

$X_{B,H}$ eli heterotrofinen (toisenvarainen) biomassa.

$X_{B,A}$ eli homotrofinen (omavarainen) biomassa.

X_P eli kiintoainetuote. X_P syntyy biomassan mädäntymisen seurauksena.

X_{ND} eli hajoava orgaaninen typpi.

X_{AUT} eli autotrofinen nitrifikaatio-organismi. Nitrifikaatio-organismit ovat vastuussa nitrifikaatiosta. Nitrifikaatiobakteerien oletetaan hapettavat S_{NH4} :n suoraan S_{NO3} :ksi. [9, s. 3]

X_H eli heterotrofinen organismi. Nämä organismit kasvavat aerobisesti ja anaerobisesti denitrifikaatiossa sekä ovat aktiivisia anaerobisessa fermentaatiossa. [9, s. 3]

X_{PAO} eli fosforia kumuloivat organismit (PAO). Näiden organismien oletetaan olevan edustavia kaiken tyyppisille polyfosfaatti-kumulatiivi-organismeille. Tämän komponentti ei sisällä solun sisäistä varastotuotteita X_{PHA} :ta eikä X_{PP} :tä, vaan ainoastaan ”todellisen” biomassan.

ASM2d:ssä oletetaan, että nämä organismit voivat kasvaa yhtä hyvin niin anoksisessa kuin aerobisessa ympäristössä. ASM2:ssa vain aerobinen ympäristö on otettu huomioon. [9, s. 3]

X_{PHA} eli fosforia kumuloivien organismien solun sisäinen varastotuote. Se pitää sisällään primaarisen polyhydroksialkanoaatin (PHA). X_{PHA} esiintyy vain yhdistyneenä X_{PAO} :hon, mutta ei sisällä kuitenkaan tämän massaa. X_{PHA} :a ei voida suoraan verrata analyttisesti mitattuun PHA:n konsentraatioon; X_{PHA} on vain funktionaalinen komponentti. Stoikiometrisesti PHA:lla oletetaan olevan polyhydroksibutyaatin $C_4H_6O_2$ kemiallinen rakenne. [9, s. 3]

X_{PP} eli polyfosfaatti. Se on fosforia kumuloivien organismien solun sisäinen varastotuote. X_{PP} esiintyy vain yhdistyneenä X_{PAO} :hon, mutta ei sisällä kuitenkaan tämän massaa. Se on osa kiintoainefosforia sekä kemiallisesti havaittavissa. Stoikiometrisissä laskelmissa polyfosfaatilla oletetaan olevan seuraavanlainen rakenne: $(K_{0,33}Mg_{0,33}PO_3)_n$. [9, s. 3]

X_{TSS} eli kokonaissuspendoitunut kiintoaines, TSS. Kokonaissuspendoitunut kiintoaines on esitelty biokineettisissä mallissa stoikiometristen konsentraatioiden mukaisessa järjestyksessä. TSS:n ennustaminen on ollut tärkeää siitä asti, kun fosforin poistossa ja saostuksessa on esitelty mineraalien fraktiot aktiivilietteessä. [9, s. 4]

X_{MeOH} eli metallihydroksidi. Tämä komponentti käsittelee fosforin sitoutumiskapasiteetin mahdollisiin metallihydroksideihin. Kaikissa stoikimetricissä laskelmissa on oletettu, että tämä komponentti koostuu $Fe(OH)_3$:sta. Tämä komponentti on mahdollista korvata jollain muulla lähtöaineella, mikä vaatisi kuitenkin stoikiometristen ja kineettisten tietojen muokkausta. [10, s. 168]

X_{MeP} eli metallifosfaatti, $MePO_4$. Myös tämä komponentti käsittelee fosforin sitoutumiskapasiteetin mahdollisiin metallihydroksideihin. Stoikimetricissä laskelmissa on oletettu, että komponentti koostuu $FePO_4$:sta. Myös tämä komponentti on mahdollista korvata jollain muulla lähtöaineella. [10, s. 168]

X_{STO} eli solun sisäiset varastotuotteet heterotrofisessa organismissa. Se pitää sisällään mm. polyhydroksialkanoaatit (PHA) ja glykokeenin. Se esiintyy ainoastaan liittyneenä X_H :hon, mutta se ei kuitenkaan sisällä X_H :n massaa. X_{STO} :ta ei voida suoraan verrata analyytisesti mitatun PHA:n tai glykokeenin konsentraatioon; X_{STO} on vain funktionaalisenä komponenttina tarpeellinen mallintamiselle, mutta ei suoraan tunnistettavissa kemiallisesti. X_{STO} voidaan kuitenkin regeneroida COD-analyysissä, jossa sen täytyy toteuttaa COD:n säilyminen. Stoikiometricissä tarkasteluissa X_{STO} :n oletetaan omaavan polyhydroksibutyraatin kemiallinen koostumus $(C_4H_6O_2)_n$. [11, s. 185]

X_A eli nitrifioivat organismit. X_A on vastuussa nitrifikaatiosta. Nitrifioivien organismien oletetaan hapettavan S_{NH} :n suoraan nitraatti- S_{NO} :ksi. Nitraatin välimuotokomponenttia nitrifikaatiossa ei oteta huomioon ASM3:ssa. [11, s. 186]

3.3.1 ASM1

ASM1:llä (Activated sludge model No. 1) pystytään ennustamaan hapen kulutus, lietteen muodostuminen sekä nitrifikaatio ja denitrifikaatio aktiivilietesysteemissä. Se koostuu joukosta yhtälöitä, jotka kuvaavat COD:n ja typen erottamista aktiivilieteprosessissa. ASM1 perustuu bakteerielistön kasvun ja hajoamisen mallintamiseen prosessissa. Taulukosta 1 nähdään ASM1:ssä esiintyvät komponentit.

Taulukko 1. ASM1:ssä esiintyvät komponentit.

ASM1 Komponentti	Selitys
S_I	Inertti liukoinen orgaaninen aine
S_S	Helposti hajoava orgaaninen aine
S_O	Liennut happi
S_NH	Ammoniumtyppi + ammoniakkityppi
S_NO	Nitraattityppi + nitriittityppi
S_ND	Kaksinkertaisesti hajoava orgaaninen typpi
S_ALK	Alkalisuus
X_I	Inertti orgaaninen kiintoaine
X_S	Hitaasti hajoava aine
X_BH	Heterotrofinen (toisenvarainen) biomassa
X_BA	Omavarainen biomassa
X_P	Kiintoainetuote
X_ND	Hajoava orgaaninen typpi

3.3.2 ASM2 ja ASM2d

ASM2 (Activated sludge model No. 2) pitää sisällään biologisen fosforin poiston, johon ASM1 ei pysty. Malli on paljon mutkikkaampi ja sisältää paljon enemmän eri komponentteja kuin ASM1. Merkittävin muutos ASM1:een nähden on kuitenkin se, että nyt voidaan olla varmoja siitä että biomassalla on solun sisäinen rakenne eikä sen konsentraatiota siksi voida yksinkertaisesti kuvata jakautuneella parametrilla X_{BH} . [9]

ASM2d (Activated sludge model No. 2d) pitää sisällään biologisen fosforin poiston lisäksi samanaikaisen nitrifikaatio-denitrifikaation aktiivilieteprosessissa. ASM2d pohjautuu ASM2:een. Se on hieman laajennetumpi versio ASM2:sta, joka ottaa huomioon denitrifikaation toiminnan fosforia kumuloivissa organismeissa (PAOs). Se sisältää kaksi täydentävää tosiasiaa siitä, että fosforia kumuloivat organismit pystyvät käyttämään solun sisäisiä orgaanisia tuotevarastoja denitrifikaatiossa. ASM2d:n komponentit ovat muuten samat kuin ASM2:ssa, mutta kiintoainekomponentteja on kaksi enemmän. Taulukosta 2 nähdään ASM2:ssa ja ASM2d:ssä esiintyvät komponentit. [10]

Taulukko 2. ASM2:ssa ja ASM2d:ssä esiintyvät komponentit.

ASM2 Komponentti	Selitys
S_I	Inertti liukoinen orgaaninen aine
S_O	Liuenut happi
S_N2	Molekylaarinen typpi
S_F	Käymisalkoholi on nopeasti hajoava orgaaninen aine
S_A	Käymistuote
S_NO	Nitraattityppi + nitriittityppi
S_PO	Epäorgaaninen liukoinen fosfori
S_NH	Ammoniumtyppi + ammoniakkityppi
S_ALK	Alkalisuus
X_I	Inertti orgaaninen kiintoaine
X_S	Hitaasti hajoava aine
X_H	Heterotrofinen organismi
X_PAO	Fosforin kumulatiiviset organismit
X_PP	Polyfosfaatti
X_PHA	Fosforin kumulatiivisten organismien solun sisäinen varastotuote
X_AUT	Autotrofinen nitrifikaatio-organismi
X_TSS	Kokonaissuspendoitunut kiintoaines
ASM2D	+
X_MeOH	Metallihydroksidi
X_MeP	Metallifosfaatti

3.3.3 ASM3

Myös ASM3:lla (Activated Sludge Model No. 3) pystytään ennustamaan hapen kulutus, lietteen muodostuminen sekä nitrifikaatio ja denitrifikaatio aktiivilietesysteemeissä. ASM3 on uudistetumpi versio ASM1:stä, ja se korjaa joitakin siinä esiintyviä puutteita. Malli sisältää orgaanisen substraatin varastoinnin, jota ASM1:ssä ei ole, ja siinä mätääntymisprosessi on vaihdettu endogeeniseen respiraatioon. ASM3:n tiedot on esitelty sellaisissa muodoissa, joita voidaan käyttää tietokonekielessä ilman suurempia muutoksia. Kineettiset ja stoikiometriset parametrit on annettu 10 °C:ssa ja 20 °C:ssa. Taulukosta 3 nähdään ASM3:ssa esiintyvät komponentit. [11]

Taulukko 3. ASM3:ssa esiintyvät komponentit.

ASM3 Komponentti	Selitys
S_I	Inertti liukoinen orgaaninen aine
S_S	Helposti hajoava orgaaninen aine
S_O	Liennut happi
S_NH	Ammoniumtyppi + ammoniakkityppi
S_N2	Molekylaarinen typpi
S_NO	Nitraattityppi + nitriittityppi
S_ALK	Alkalisuus
X_I	Inertti orgaaninen kiintoaine
X_S	Hitaasti hajoava aine
X_H	Heterotrofinen organismi
X_STO	Solun sisäiset varastotuotteet heterotrofisessa organismissa
X_A	Nitrifioiva organismi
X_TSS	Kokonaissuspendoitunut kiintoaines

4 Aktiivilieteprosessin simulointi

4.1 Yleistä simuloinnista

Simulointi on todellisuuden jäljittelyä eli simuloinnilla tarkoitetaan tietyn systeemin toiminnan jäljittelyä tietokoneella. Simulointi ei sinänsä edellytä ohjelmistoa, mutta aktiivilieteprosessin simulointi sisältää niin runsaasti laskentaa, ettei sen toteuttaminen ilman sopivaa ohjelmistoa ole järkevää [4, s. 3]. Käytännössä se on matemaattisen mallin yhtälöiden ratkaisua ja tulosten esittämistä. Dynaamisella simuloinnilla tarkoitetaan ajasta riippuvien ilmiöiden simulointia, jolloin tavallisten yhtälöiden sijaan malli koostuu differentiaaliyhtälöistä.

4.2 Simulointiohjelmisto GPS-X

Tässä työssä käytettiin Hydromantisin GPS-X-simulointiohjelmistoa. GPS-X on moduuleista koostuva, monikäyttöinen mallintamisympäristö. Se on tarkoitettu käytettäväksi kunnalliseen ja teolliseen jäteveden käsittelylaitosten simulointiin. GPS-X mahdollistaa monimutkaisten vuorovaikutusten tutkimisen useiden prosessin yksiköiden välillä.

Simulointiohjelmiston käyttö aloitettiin tutustumalla GPS-X-ohjelman opaskäsikirjaan ja rakentamalla siinä esiintyvät esimerkkimallit. Opas koostuu kymmenestä pienemmästä tutoriaalista, jotka sisältävät todenmukaisia esimerkkejä monista ohjelman soveltamis-mahdollisuuksista. Tutoriaalit koostuvat esimerkkimallin rakentamisesta ja sen tietojen muokkaamisesta siten, että malli saataisiin toimimaan kyseiseen käyttötarkoituksen mukaisesti. Käsikirjan tarkoituksena on kertoa lyhyesti kiteytettynä, mitä kaikkea GPS-X-ohjelmalla on mahdollista tehdä, ja se antaa hyvän pohjan GPS-X:llä simuloimiseen. Kuitenkin, jotta simulointi onnistuisi halutulla tavalla ja päästäisiin ohjelmiston todelliseen ymmärtämiseen, on GPS-X:ssä mukana myös käyttäjän käsikirja ja tekninen käsikirja, joihin myös on hyvä tutustua.

4.3 Mallin rakentaminen ja simulointi

Tämän työn esimerkkikohteena toimi Porvoon veden Hermanninsaaren puhdistamo. Se on biologis-kemiallinen aktiivilietelaitos, jossa fosfori saostetaan rinnakkaissaostusperiaatteella. Laitos sopi hyvin esimerkkikohteeksi, koska sieltä oli saatavilla poikkeuksellisen paljon historiallista online-prosessidataa sekä laboratorioanalyysyjä. Simulointi aloitettiin rakentamalla laitoksen malli ja spesifioimalla mallin syöttötiedot.

4.3.1 Kirjaston valinta

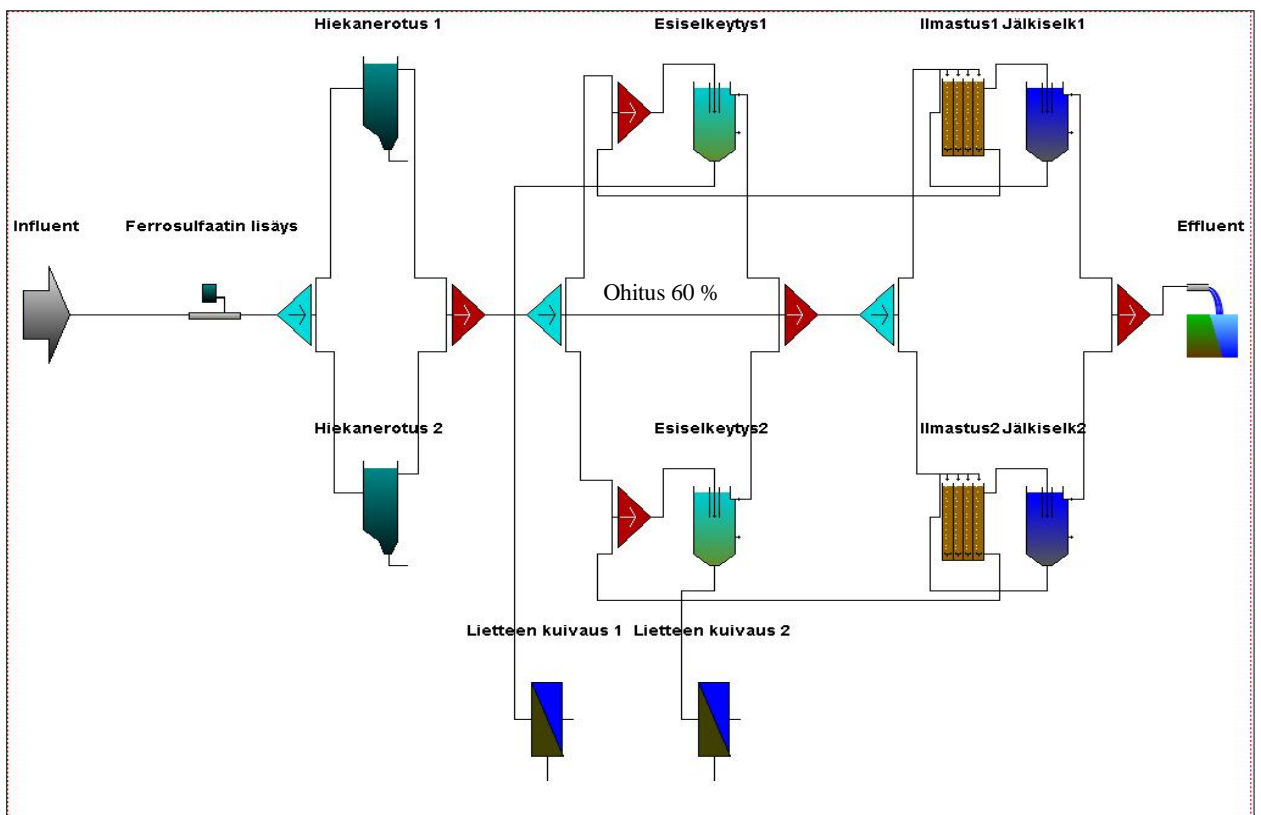
Mallin rakentaminen aloitetaan valitsemalla oikeantyyppinen kirjasto mallille. Kirjastot pitävät sisällään kokoelman jätevesiprosessin mallien peruskomponenteista ja tilamuuttujista. Kirjaston voi valita seuraavasta kuudesta vaihtoehdosta:

- Hiili-Typpi (CNLIB)
- Hiili-Typpi-Teolliset epäpuhtaudet (CNIPLIB)
- Hiili-Typpi-Fosfori (CNPLIB)
- Hiili-Typpi-Fosfori-Teolliset epäpuhtaudet (CNIPLIB)
- Kehittynyt-Hiili-Typpi (CN2LIB)
- Kehittynyt-Hiili-Typpi-Teolliset epäpuhtaudet (CN2IPLIB)

Kirjasto valitaan sen mukaan, mitä halutaan mallintaa. Esimerkiksi jos mallinnetaan fosforia, valitaan kirjastoksi CNP. Hermanninsaaren puhdistamolle käytettiin CNPIP-kirjastoa.

4.3.2 Mallin piirtäminen

Prosessimalli kasataan valmiista objekteista, jotka raahataan työpöydälle työkaluvalikosta mallinnusikkunassa. Prosessiyksiköiden rakenne ja mitat sekä muu toiminta saadaan muokattua malliin objektien alta löytyvistä valikoista. Hermanninsaaren puhdistamon malli on esitetty kuvassa 6. Sen aktiivilieteprosessin ilmastusaltaat koostuvat kahdeksasta lohkoista, joista kolme ensimmäistä ja viimeinen ovat anoksisia ja neljä keskimmäistä aerobisia.



Kuva 6. GPS-X:llä piirretty Hermanninsaaren puhdistamon prosessikaavio.

4.3.3 Lähtötietojen muokkaaminen

Objektien data muokataan mallinnettavaa laitosta vastaavaksi. Muokkaus aloitetaan valitsemalla objekteille haluttavat mallit. Ilmastuksen malleja ovat mm. ASM1, ASM2, ASM2D, ASM3, Mantis ja Newgeneral. Mantis on Hydromantiksen oma malli, joka on identtinen ASM1:n kanssa muutamaa muunnelmaa lukuun ottamatta. Newgeneral-malli pohjautuu Dold:n (1990) general-malliin, joka myös on johdettu ASM1:stä. Malli on syytä valita sen mukaan, kuinka paljon ja minkä tyyppistä tietoa tulevasta jätevedestä on saatavilla. Mallin valinnan tulisi myös kuvastaa simuloinnin tarpeen syytä.

Mallin valinnan jälkeen input-data muokataan tulevan jäteveden parametrien sekä prosessitietojen perusteella. Näitä ovat mm.

- tulevan jäteveden BOD-, kiintoaine-, typpi- ja fosforipitoisuudet
- hiekanerotuksella hiekantuotanto
- selkeyttimien raakalietteen ja palautuslietteen määrät
- ilmastuksen ilmansyöttömäärä, nitraattikierron määrä ja ylijäämälietteen määrä.

4.3.4 Mallin kalibrointi

Simulointi rakentuu normaalisti mallin rakentamisesta, kalibroinnista, itse simuloinnista ja tulosten tarkastelusta. Mallin kalibrointi on yksi tärkeimmistä osatekijöistä missä tahansa mallinnusprojektissa. Mallin kalibroinnilla tarkoitetaan mitattujen ja simuloitujen tulosten välisten erojen minimoimista. GPS-X:llä pystytään hyvin kätevällä tavalla kalibroimaan mallin parametrit. Tämä tapa pohjautuu epälineaariseen, dynaamiseen ja moni-parametriseen optimointialgoritmiin (Nelder-Mead simplex algoritmi). Tässä työssä ei mallin kalibrointia suoritettu, vaan tavoitteena oli tutkia eri mallien toimintaa parametrien oletusarvoilla.

4.3.5 Mallin kääntäminen ja simulointi

Malli käännetään mallinnusikkunasta simulointi-ikkunaan, jolloin ohjelma rakentaa mallin sille annettujen lähtötietojen pohjalta. Simulointi-ikkunassa luodaan tarvittavat input- ja output-ikkunat. Input-ikkunoihin raahataan prosessiparametreja, joita halutaan muuttella simulointia seurattaessa, ja luodaan niille tarvittavat ohjauskytkimet. Output-ikkunoihin voidaan raahata lähtevän veden parametreja ja luoda niille ajan suhteen muuttuvat kuvaajat, joita simuloinnilla halutaan seurata. Simulointi-ikkunassa ei voida enää muokata mallia. Muokkausta varten on palattava mallinnusikkunaan, tehtävä tarvittavat muutokset ja palattava takaisin simulointi-ikkunaan, jolloin ohjelma rakentaa mallin aina uudelleen.

Simulointi voidaan suorittaa joko steady-state-muodossa tai dynaamisena simulointina. Steady-state-analyysi olettaa, että mikään tilamuuttujista ei muutu ajan kuluessa, kun taas dynaamisessa simuloinnissa ne tai osa niistä muuttuu. Dynaaminen simulointi antaa täydellisemmän ja perustellumman kuvan tuloksista kuin steady-state-analyysi. Simulointi suoritetaan valitun ajanjakson mukaan, tässä työssä käytettiin 3 vuorokauden dynaamista simulointia.

Hermanninsaaren jätevedenpuhdistamon simulointi suoritettiin laitokselle tulevan veden keskimääräisten kuormitusten pohjalta. Virtaama generoitiin kuvitteellisella mallilla tuntivirtaamaksi. Esimerkkikohteen simuloinnissa ilmastuksella kokeiltiin erilaisia malleja. Esi- ja jälkiselkeytyksessä pidettiin vakiona malli Simple1d. Näiden mallien muuttujia kuvaavat käyrät löytyvät liitteistä 2-6, ja niissä käytettyä päivittäisen virtaaman kuvaaja löytyy liitteestä 1.

4.4 Laitokselta tulevan datan siirtäminen ohjelmaan

Ohjelma pystyy lukemaan dataa suoraan asianmukaisesti käsitellystä ASCII-tiedostosta olettaen, että tiedosto esiintyy kyseisen layoutin hakemistossa ja että olennaiset parametrit on asetettu FileInputeiksi ohjauskytkimissä. Tuleva data on ensin esivalmisteltava, johon GPS-X:lla pystytään kahdella eri tapaa: joko manuaalisesti tai käyttäen GPS-X:n Data File Editoria. Viimeksi mainittu on helppokäyttöinen työkalu, jolla pystytään muokkaamaan dat-tiedostoja. Sen haitta puolena on se, ettei siihen pysty asettamaan kuin yhden muuttujan per tiedosto, kun taas manuaalisesti pystytään asettamaan useita muuttujia. Esivalmistelulla tarkoitetaan lähinnä datan kopioimista halutusta tiedostosta muokkaamalla se haluttuun formaattiin ja tallentamalla se GPS-X:n vaatimaan muotoon. Manuaalisessa muokkauksessa voi käyttää mitä tahansa tekstinkäsittelyohjelmaa, mutta tiedosto on tallennettava .dat-muotoon.

Reaalitilanteessa syöttöarvot muuttuvat koko ajan, ja tätä varten GPS-X:ssa on myös datan online-käsittelytyökalu. Tässä työssä keskityttiin kuitenkin vain Hermanninsaaren puhdistamolta saadun historialliseen prosessidataan eli tiedostojen offline-käsittelyyn.

Hermanninsaaren puhdistamolta otettiin kolmen vuorokauden dataa, ja se muokattiin GPS-X:n vaatimaan ASCII-formaattiin. Näytteenotosta saatua dataa käytettiin myös prosessitietojen muokkaukseen. Taulukosta 4 nähdään Hermanninsaaren puhdistamon 21.4.2008 prosessidataa.

Taulukko 4. Yhden vuorokauden prosessidataa Hermanninsaaren jäteveden puhdistamolta.

	Tunti	Tuleva jätevesi (m ³ /h)	Ilmamäärä (n-m ³ /h)		Lähtevä vesi (mg/l)	
			linja 1	Linja 2	KOK-tyyppi N	KOK-fosfori P
21.4.2008	1	609	709	647	12.4	0.23
21.4.2008	2	553	651	609	12.4	0.22
21.4.2008	3	553	596	532	12.5	0.22
21.4.2008	4	551	561	491	12.5	0.22
21.4.2008	5	553	544	462	12.4	0.22
21.4.2008	6	549	523	447	12.3	0.22
21.4.2008	7	602	512	431	12.3	0.23
21.4.2008	8	663	499	424	12.4	0.23
21.4.2008	9	682	544	430	12.3	0.24
21.4.2008	10	649	516	463	12.3	0.24
21.4.2008	11	628	504	453	12.4	0.24
21.4.2008	12	640	584	557	12.3	0.24
21.4.2008	13	637	723	723	12.3	0.24
21.4.2008	14	591	912	822	12.2	0.24
21.4.2008	15	617	1030	858	12.3	0.24
21.4.2008	16	578	1106	891	12.4	0.23
21.4.2008	17	579	1128	900	12.5	0.23
21.4.2008	18	593	1096	919	12.7	0.24
21.4.2008	19	614	1002	916	12.9	0.24
21.4.2008	20	629	922	886	13.0	0.25
21.4.2008	21	669	887	870	13.1	0.25
21.4.2008	22	734	894	868	13.1	0.26
21.4.2008	23	764	965	911	13.1	0.26
21.4.2008	24	660	1009	930	13.1	0.25

Hermanninsaaren jäteveden puhdistamolta saatujen 3 vuorokauden (21.–23.4.2008) mittaustietojen, jotka löytyvät liitteestä 16, lisäksi käytettiin seuraavia tietoja:

- Virtaama: 14427 m³/d
- Palautusliete: 15438 m³/d
- Ylijäämäliete: 462 m³/d
- Ferrosulfaatti: 1760 kg/d
- Kokonaisilmamäärä: linja 1 = 20900 m³/d ja linja 2 = 19459 m³/d
- Ilmastuslohkojen syöttösuhde:
 - linja 1: lohko 4 = 0 %, lohko 5 = 12 %, lohko 6 = 40 % ja lohko 7 = 48 %
 - linja 2: lohko 4 = 0 %, lohko 5 = 13 %, lohko 6 = 43 % ja lohko 7 = 44 %

4.5 Simulointituloksia

4.5.1 Simulointituloksia keskimääräisten kuormitusten pohjalta

Taulukko 5. Simulointituloksia eri malleille sekä Hermanninsaaren keskimääräisiä pitoisuuksia lähtevälle jätevedelle.

	Kok-typpe (mg/l)	Kok-fosfori (mg/l)	BOD7 (mg/l)	Kiintoaine (mg/l)
ASM1	9,5-12	n. 0,2	5,5-6,5	7-9
ASM2d	n. 38	n. 0,5	5-11	6-8
ASM3	n. 25	n. 0,7	n. 3	6,5-8,5
Mantis	4-7	n. 0,2	3,5-4,2	7,5-9,5
Newgeneral	2-19	0,2-6,7	50-220	20-400
Hermanninsaari	13	0,4	5	10

Taulukosta 5 nähdään, että ASM1-mallilla päästiin lähimmäs Hermanninsaaren puhdistamon lähtevän veden koostumusta. Fosforin pitoisuudet menevät hieman liian alhaisiksi, mutta se johtune siitä, että biomassan konsentraatiota on kuvattu yksinkertaisesti jakautuneella parametrilla X_{BM} . ASM2d-mallilla, joka kuvaa nimenomaan fosforin poistoa, päästiin lähemmäs mitattua fosforin pitoisuutta, koska sillä on biomassan konsentraatio kuvattu tarkemmin. ASM2d ei kuitenkaan muilta osin antanut yhtä hyviä tuloksia. ASM3:lla kokonaisytyppi jäi liian suureksi. Mantis-malli oli myös lähellä mitattua dataa, mutta sen tyypipitoisuus laski liian pieneksi.. Newgeneral-mallilla ei saatu mitään järkeviä tuloksia.

4.5.2 Simulointituloksia todellisen kuormituksen pohjalta

Taulukko 6. Simulointi tuloksia eri malleille 21.–23.4.2008 sekä Hermanninsaaren lähtevän veden pitoisuuksia 21.4.2008.

21.-23.4.2008	Kok-typpi (mg/l)	Kok-fosfori (mg/l)	BOD7 (mg/l)	Kiintoaine (mg/l)
ASM1	5,5-9,5	n. 0,2	n. 4,3	6,5-7,5
ASM2d	21-26	n.0,3	1,2-5,5	6,5-7,5
ASM3	10-15,5	n. 0,65	n.1	6,5-7,5
Mantis	4,2-6,5	n.2,8	2,5-3,1	6,5-7,5
Hermanninsaari	12	0,23	< 3	3

Taulukon 6 perusteella voidaan havaita, että ASM3-mallilla päästään lähimmäs Hermanninsaaren puhdistamon lähtevän veden typpipitoisuutta ja ASM1-mallilla lähimmäs fosforipitoisuutta.

Simulointitulokset löytyvät liitteistä 8-15 ja virtaama päiville 21.–23.4.2008 liitteestä 7. Kuvaajien perusteella voidaan havaita, että typpipitoisuuden ennusteiden huiput tulevat mitattuja huomattavasti edellä, kun taas fosforipitoisuuden ennusteiden huiput hieman jäljessä. Virtaamien huiput ja kiintoaineen pitoisuuden huiput kulkevat hyvin käsi kädessä ja niiden mukana myös typen pitoisuus, kuten todellisuudessakin. BOD-pitoisuudet kulkevat hyvin tasaisesti, koska virtaamavaihtelutkaan eivät ole kovin huomattavia generoituihin virtaamin ja BOD-vaihteluihin verrattuna.

5 Yhteenveto

Simuloinnin tärkeyttä voidaan selittää sillä, että se on ainoa käytettävissä oleva menetelmä, kun analysoidaan mielivaltaisen systeemin käyttäytymistä, jos koetoimintaa ei oteta huomioon. Koetoiminta on usein kallista ja vie paljon aikaa, jolloin simulointi osoittautuu tärkeäksi työkaluksi, kun halutaan analysoida systeemiä, osoittaa hypoteesit oikeiksi ja tehdä johtopäätelmiä. Näin ollen matemaattisen mallintamisen ja simuloinnin avulla päästään prosessien optimoituun suunnitteluun ja ohjaukseen sekä parempaan puhdistustulokseen pienemmillä kustannuksilla.

Simulointi koostuu yleensä mallin rakentamisesta, kalibroinnista, itse simuloinnista ja tulosten tarkastelusta. Tässä työssä ei kuitenkaan pyritty tulosten optimointiin, joten mallin kalibrointia ei suoritettu, vaan tarkoituksena oli katsoa, mihin pystytään pelkillä lähtötiedoilla ja antaako malli niillä mitään järkeviä tuloksia. Työssä saadut tulokset osoittautuivat lähelle Hermanninsaaren puhdistamon mitattuja tuloksia tietyillä malleilla. Tuloksien perusteella voidaan kuitenkin havaita, että ohjelma tarvitsee enemmän lähtötietoja, kuin näissä simuloinneissa oli annettu. Myös mallin kalibroiminen on tarpeen, jotta simuloinnilla päästäisiin mitattuja arvoja vastaaviin pitoisuuksiin.

Työlle asetetut tavoitteet saavutettiin, ja työn tilaajana toiminut yritys pääsi alkuun ohjelman käytön hyödyntämisessä. Vaikka kaikkia ohjelman vaatimia lähtötietoja ei selvitetty eikä kalibrointia suoritettu, auttoi työ kuitenkin yrityksen käyttöönottoprosessissa. Yritys sai hyvät lähtötiedot ohjelman käytöstä varsinkin esimerkkimallin kohdalla.

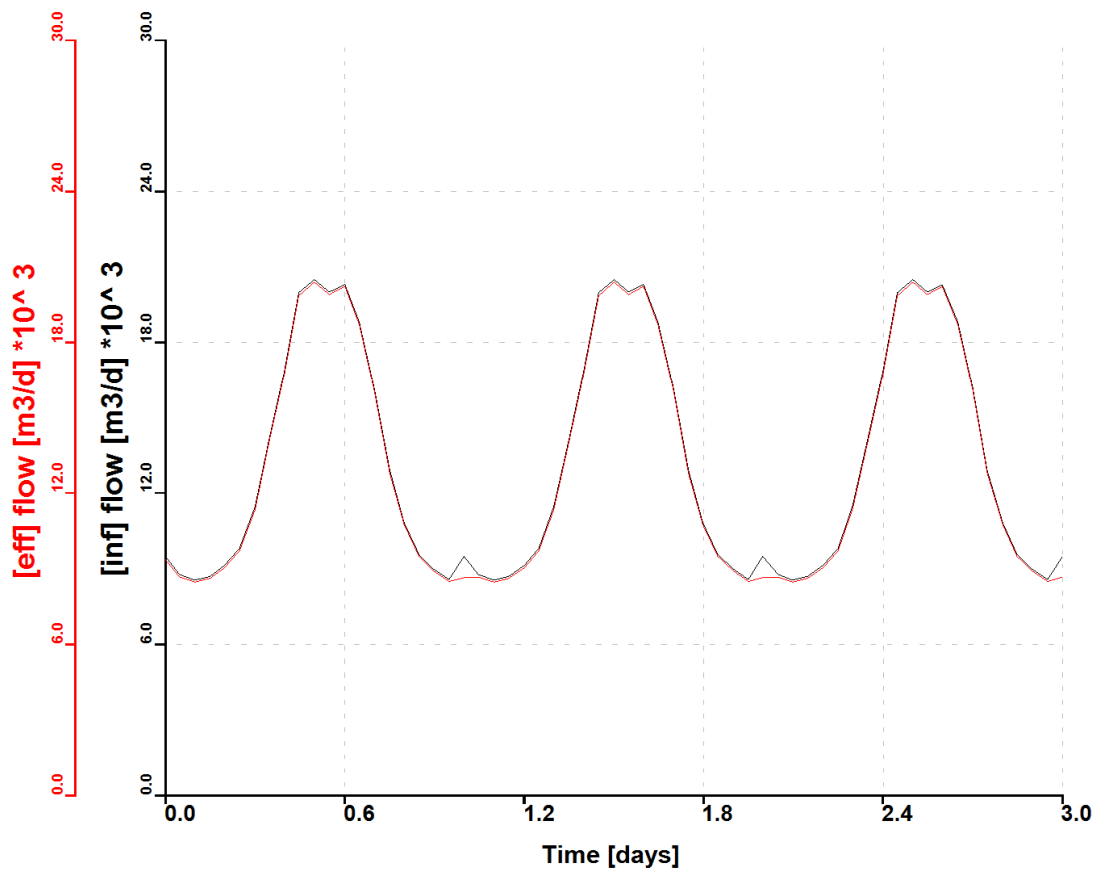
Lähteet

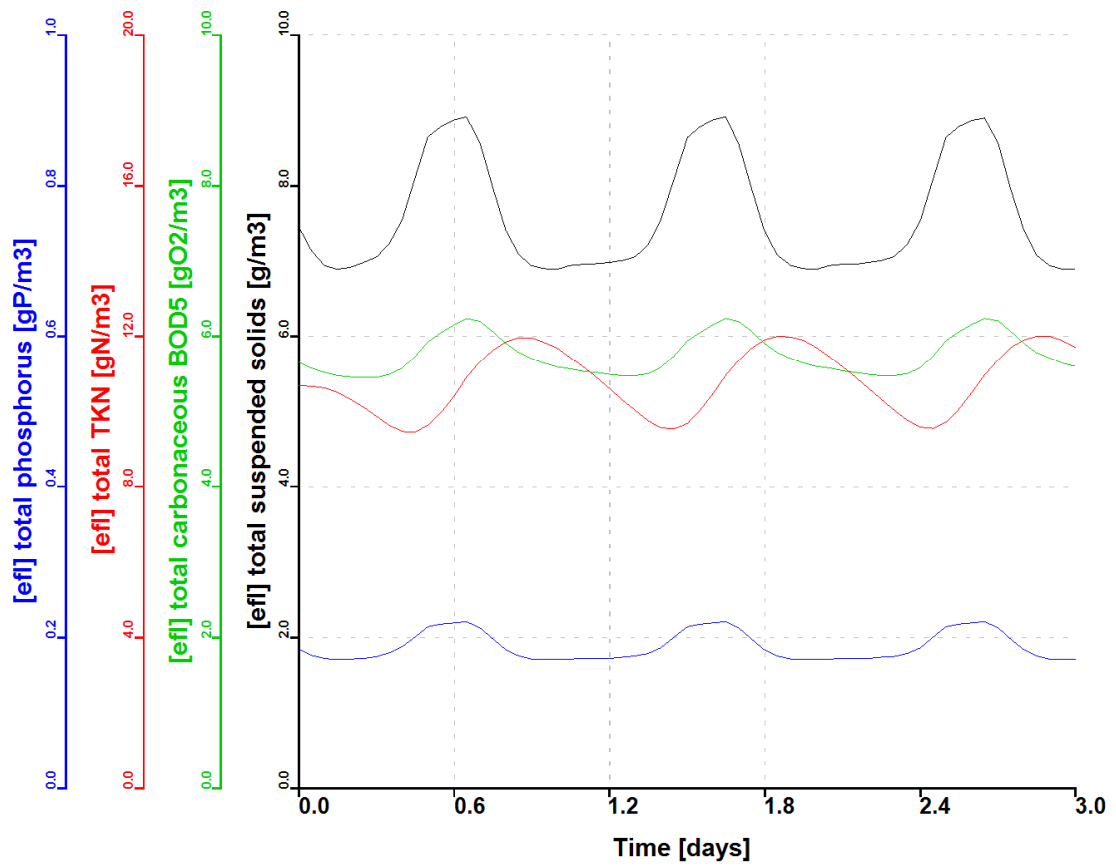
- 1 Piirtola, Liisa. Jäteveden biohajoavuustutkimus. *Vesitalous* 4/1999, s. 19–22.
- 2 Orhon D., Ates E., Sozen S. & Cokgor E.U.. Characterization and COD fractionation of domestic wastewater. *Environmental Pollution*, 95/1997, Issue 2, s. 191–204.
- 3 Orhon, Derin & Cokgör, Emine Ubay. COD Fractionation in Wastewater characterization-The State of the art. *J. Chem. Tech. Biotechnol.*, 68/1997, s. 283–293.
- 4 Fred, Tommi. Aktiivilieteprosessin dynaaminen mallinnus. *Lisensiaattityö*, 2005 TKK.
- 5 Metcalf & Eddy Inc. *Wastewater Engineering, Treatment and Reuse*. New York: McGraw-Hill, 2004.
- 6 Aktiivilieteprosessikuva. (WWW-dokumentti.) Turun opetusverkko. <www.tkukoulu.fi/~kastul/metsa/kuvat/jatevesi2.gif> 2008. Luettu 30.3.2008.
- 7 Haile, D. Mariam. Municipal wastewater treatment in sequencing batch activated sludge process package plants. Tampereen teknillinen korkeakoulu, vesi- ja ympäristötekniikan laitos, 1992.
- 8 Lehtniemi, Laura. Pienpuhdistamoiden toimivuus ja typenpoisto. *Lounais-Suomen ympäristökeskuksen moniste* 9/2004, s. 43–59.
- 9 Gujer, W., Henze, M., Mino, T., Matsuo, T. Wentzel, M. C. & Marais G. v. R.. The Activated Sludge Model No. 2: Biological Phosphorous Removal. *Wat. Sci. Tech.*, 31/1995, No. 2, s. 1–11.
- 10 Henze, M., Gujer, W., Mino, T., Matsuo, T. Wentzel, M. C., Marais G. v. R. & Loosdrecht, M.. Activated Sludge Model No. 2d, ASM2d. *Wat. Sci. Tech.*, 39/1999, No. 1, s. 165–168.
- 11 Gujer, W., Henze, M., Mino, T. & Loosdrecht, M.. Activated Sludge Model No. 3. *Wat. Sci. Tech.*, 39/1999, No. 1, s. 183–193.

Liitteet

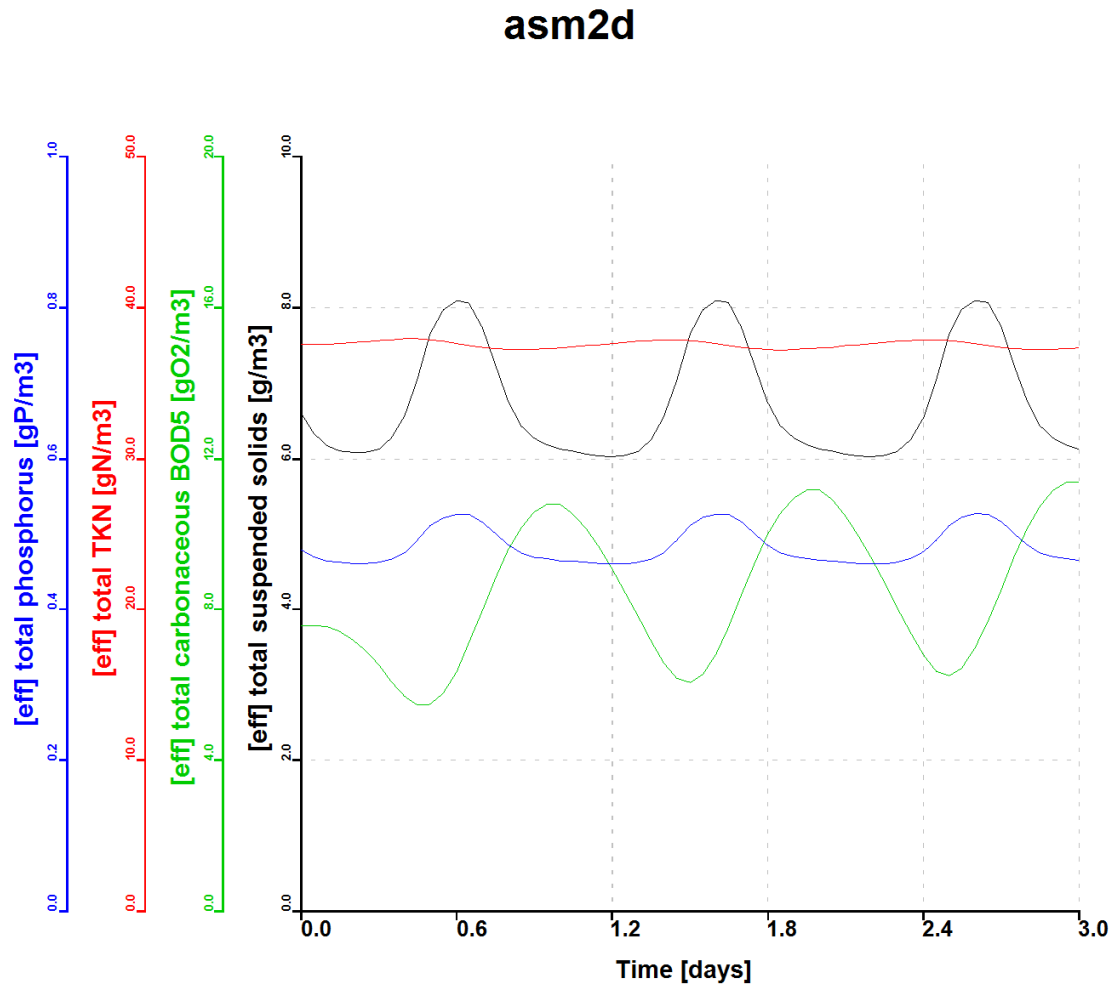
Liite 1: Päivittäinen virtaama tulevalle ja lähtevälle vedelle

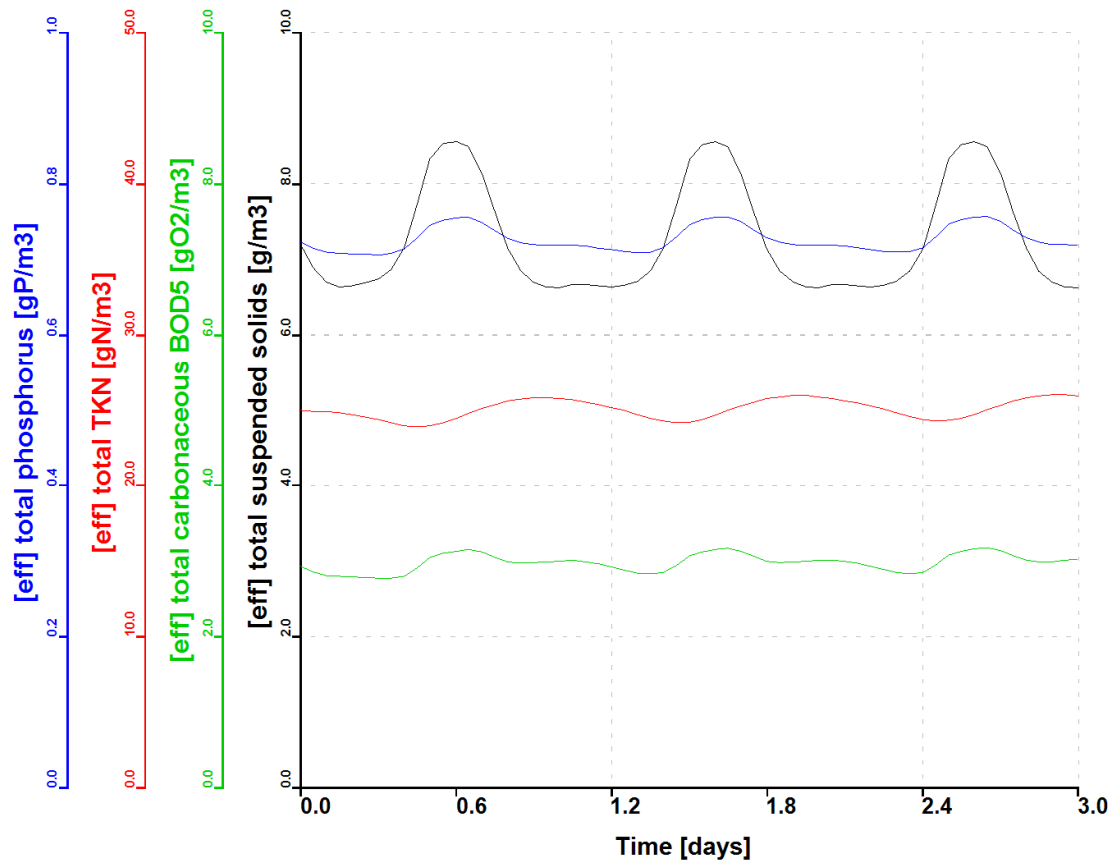
Päivittäinen virtaus

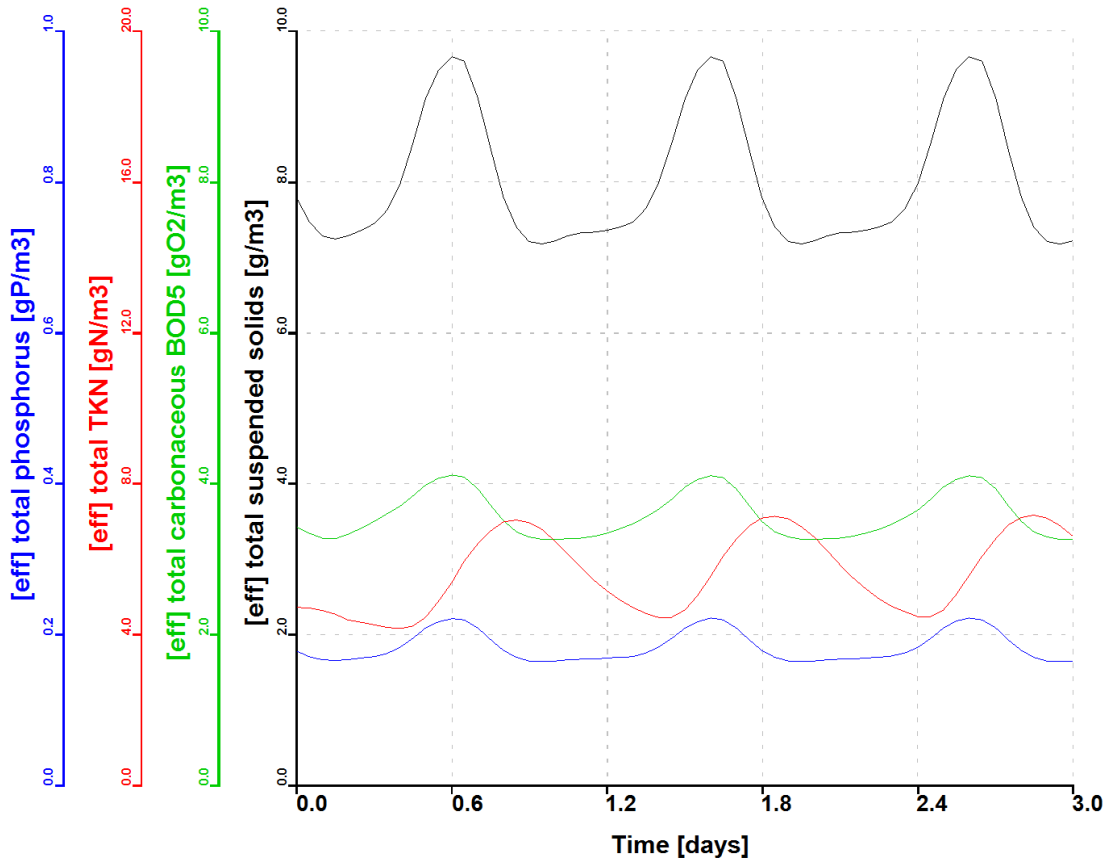


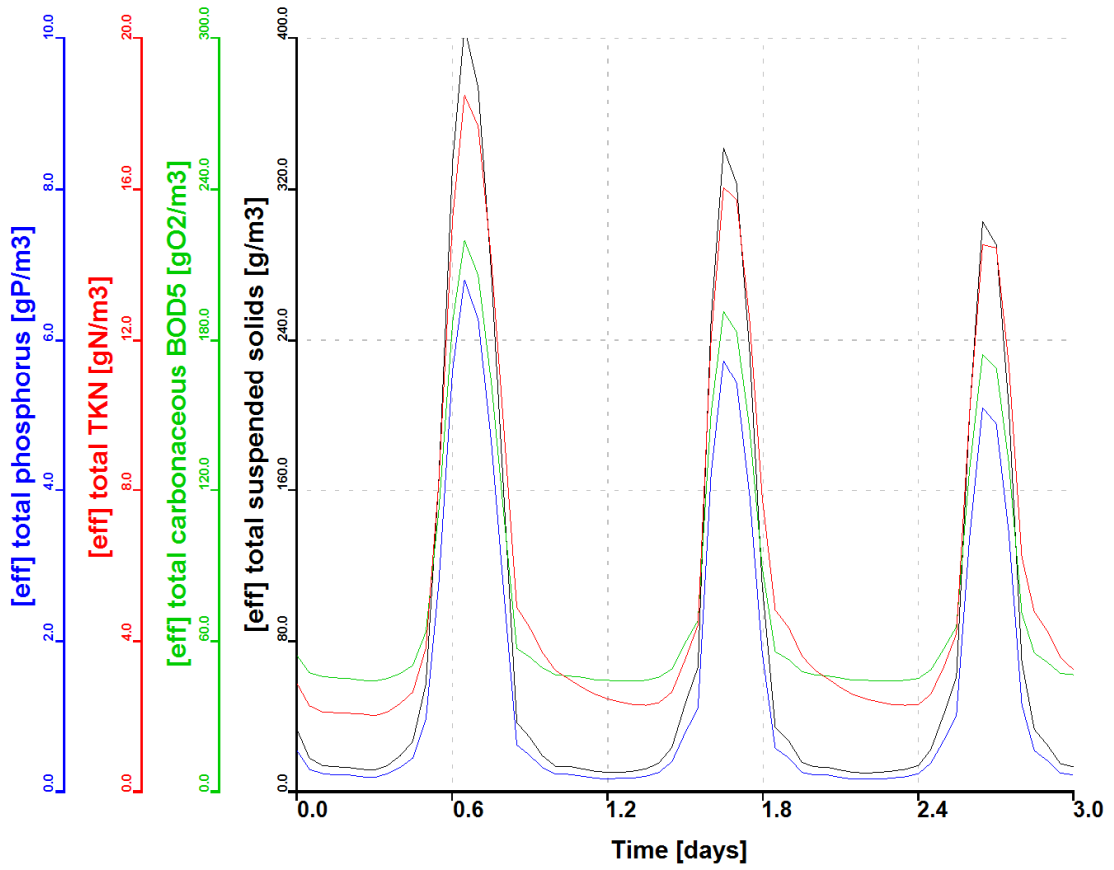
Liite 2: Lähtevän veden muuttujat mallille ASM1**asm1**

Liite 3: Lähtevän veden muuttujat mallille ASM2d



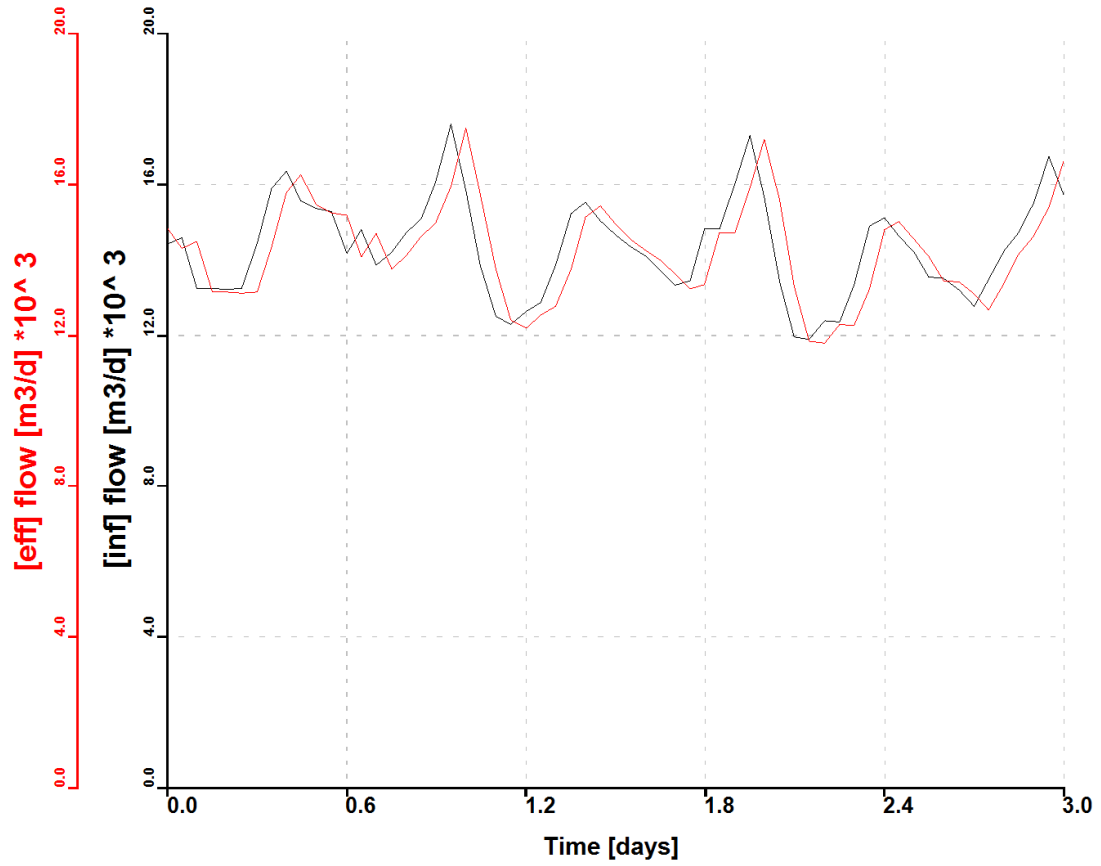
Liite 4: Lähtevän veden muuttujat mallille ASM3**asm3**

Liite 5: Lähtevän veden muuttujat mallille Mantis**mantis**

Liite 6: Lähtevän veden muuttujat mallille Newgeneral**Newgeneral**

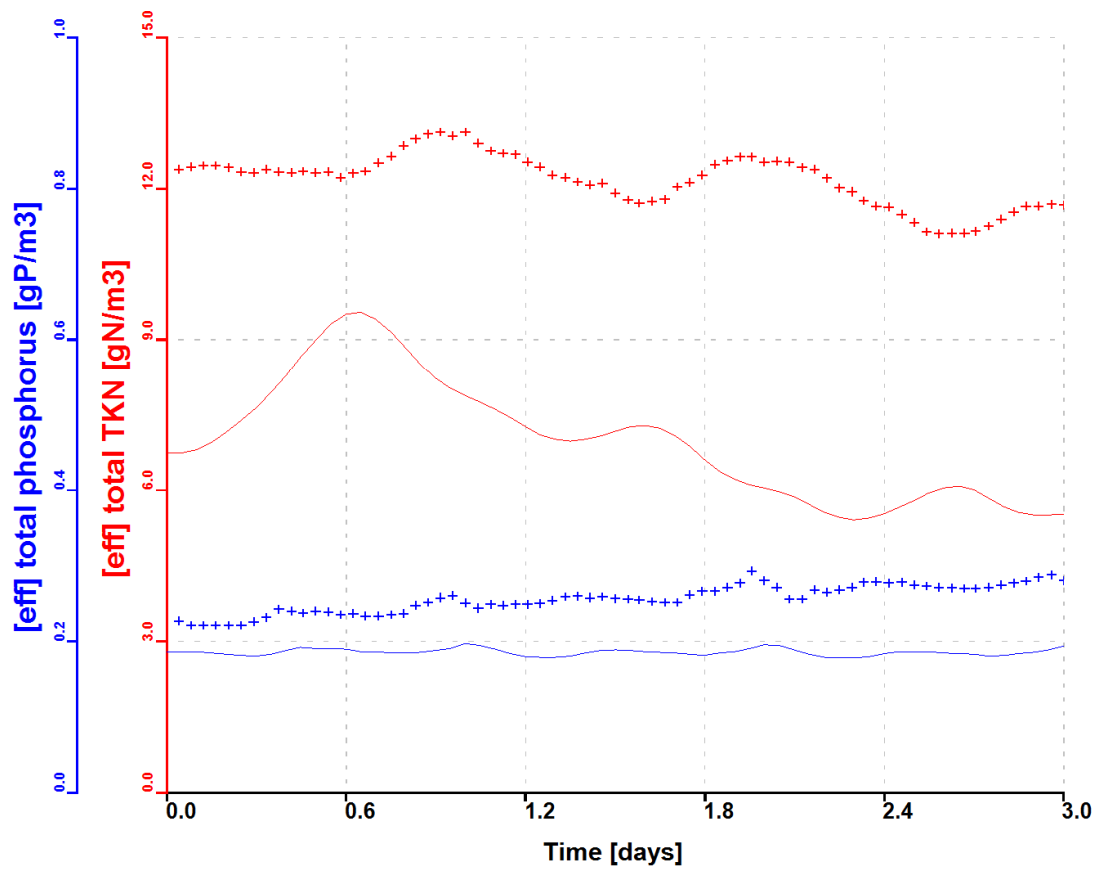
**Liite 7: Hermanninsaaren puhdistamolle tulevan ja lähtevän veden virtaama
21.–23.4.2008**

Tuleva vesi + Lähtevä vesi



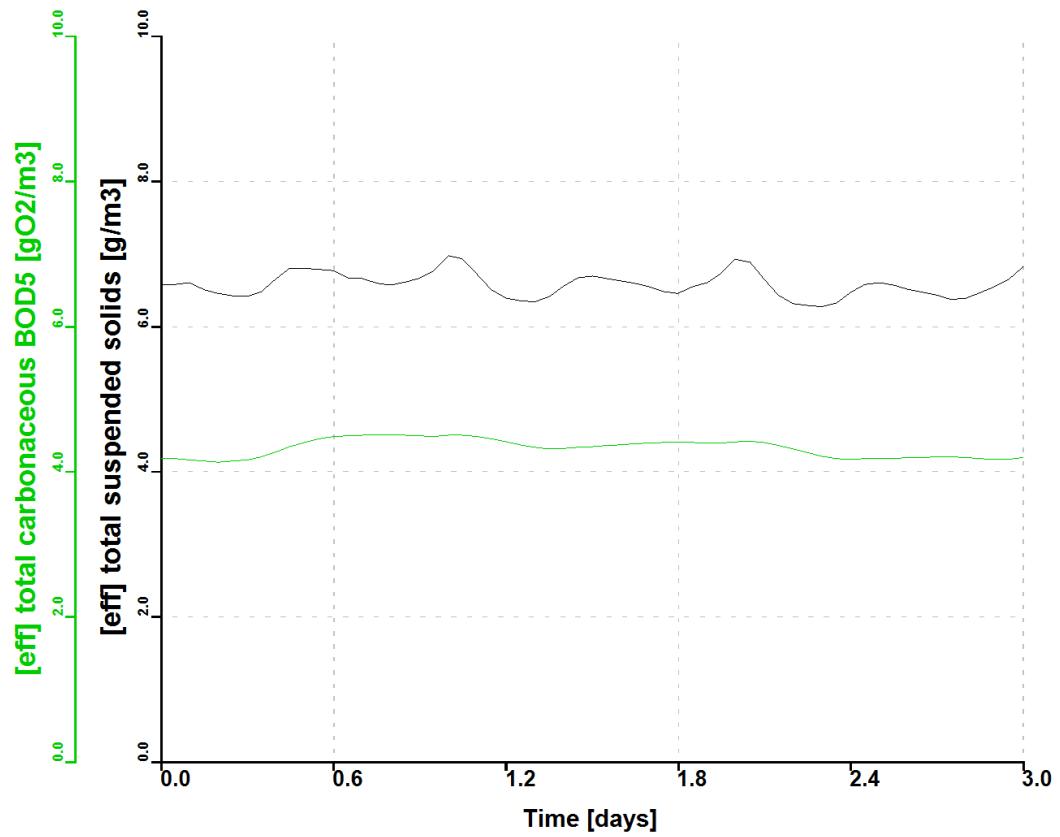
Liite 8: Hermannisaaren puhdistamon mitatut ja mallinnetut lähtevän veden typpi- sekä fosforipitoisuudet mallilla ASM1 21.–23.4.2008

mitattu + ja ennustettu -



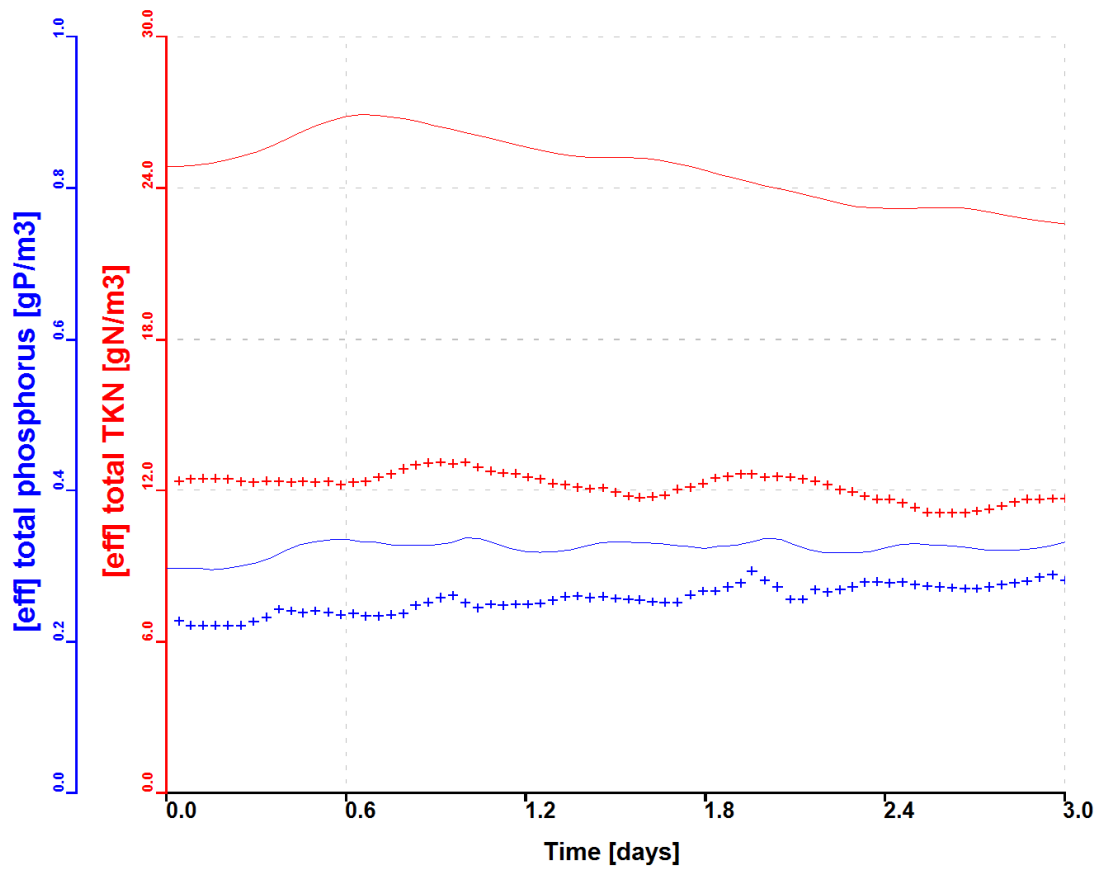
Liite 9: Hermannisaaren puhdistamon lähtevän veden kiintoaine- sekä BOD5-pitoisuudet mallilla ASM1 21.–23.4.2008

asm1



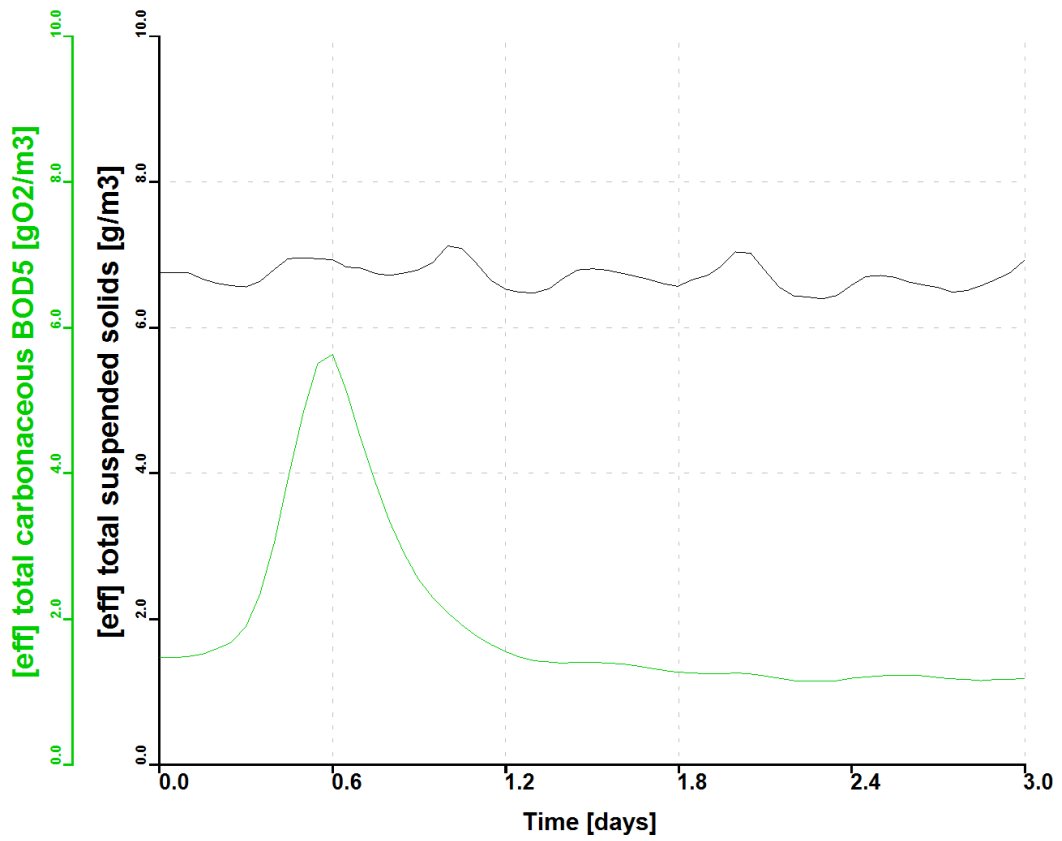
Liite 10: Hermannisaaren puhdistamon mitatut ja mallinnetut lähtevän veden typpi- sekä fosforipitoisuudet mallilla ASM2d 21.–23.4.2008

mitattu + ja ennustettu -



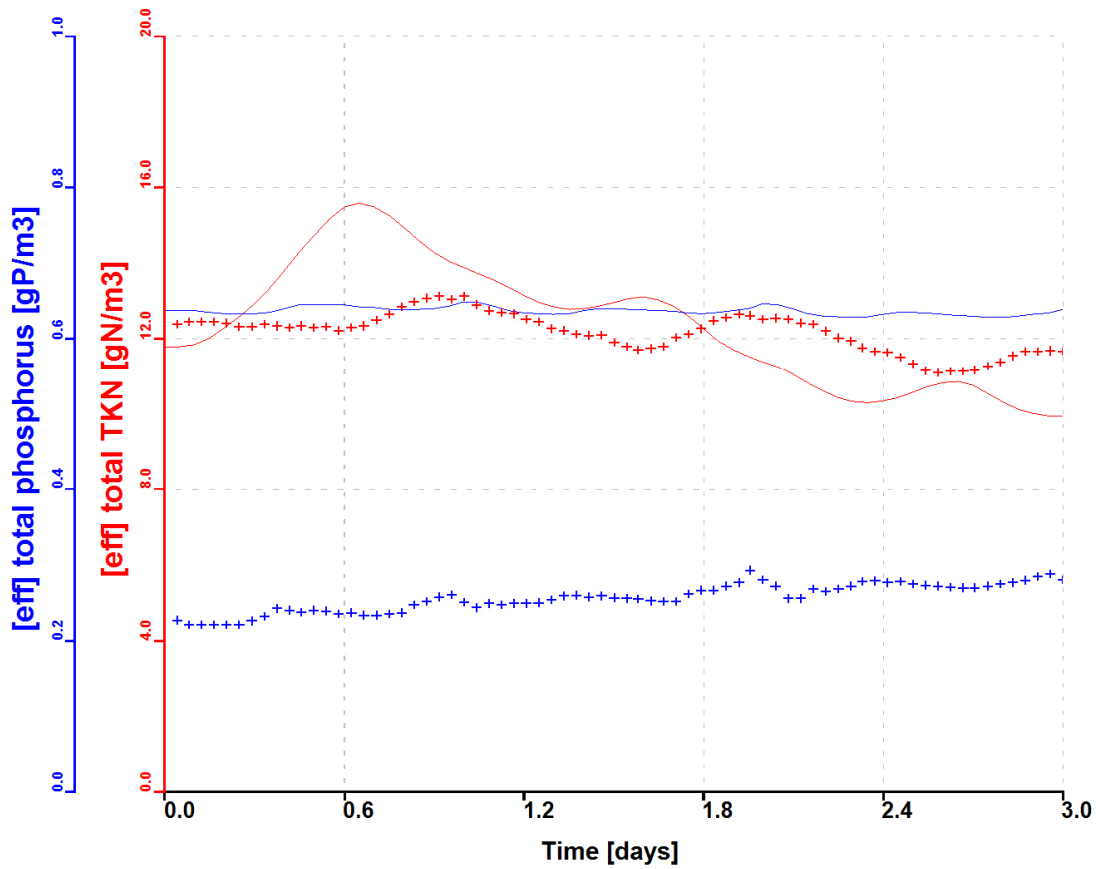
Liite 11: Hermannisaaren puhdistamon lähtevän veden kiintoaine- sekä BOD5-pitoisuudet mallilla ASM2d 21.–23.4.2008

asm2d



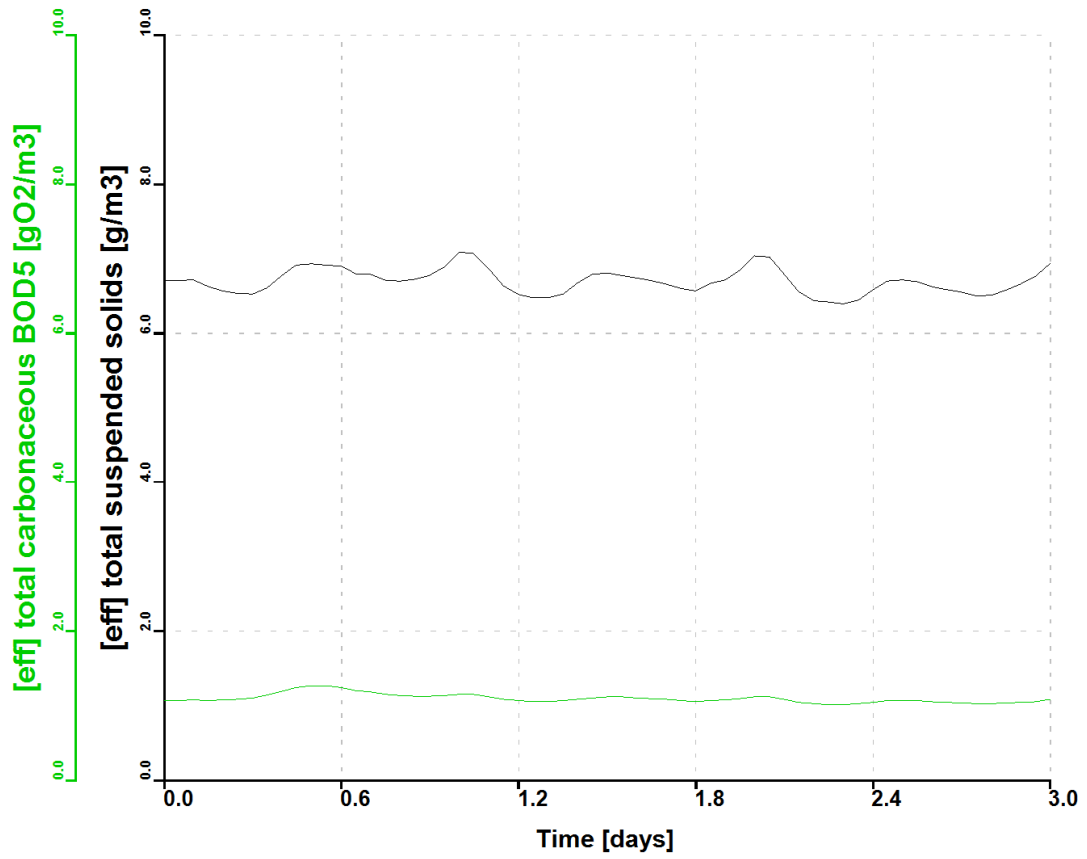
Liite 12: Hermannisaaren puhdistamon mitatut ja mallinnetut lähtevän veden typpi- sekä fosforipitoisuudet mallilla ASM3 21.–23.4.2008

mitattu + ja ennustettu -



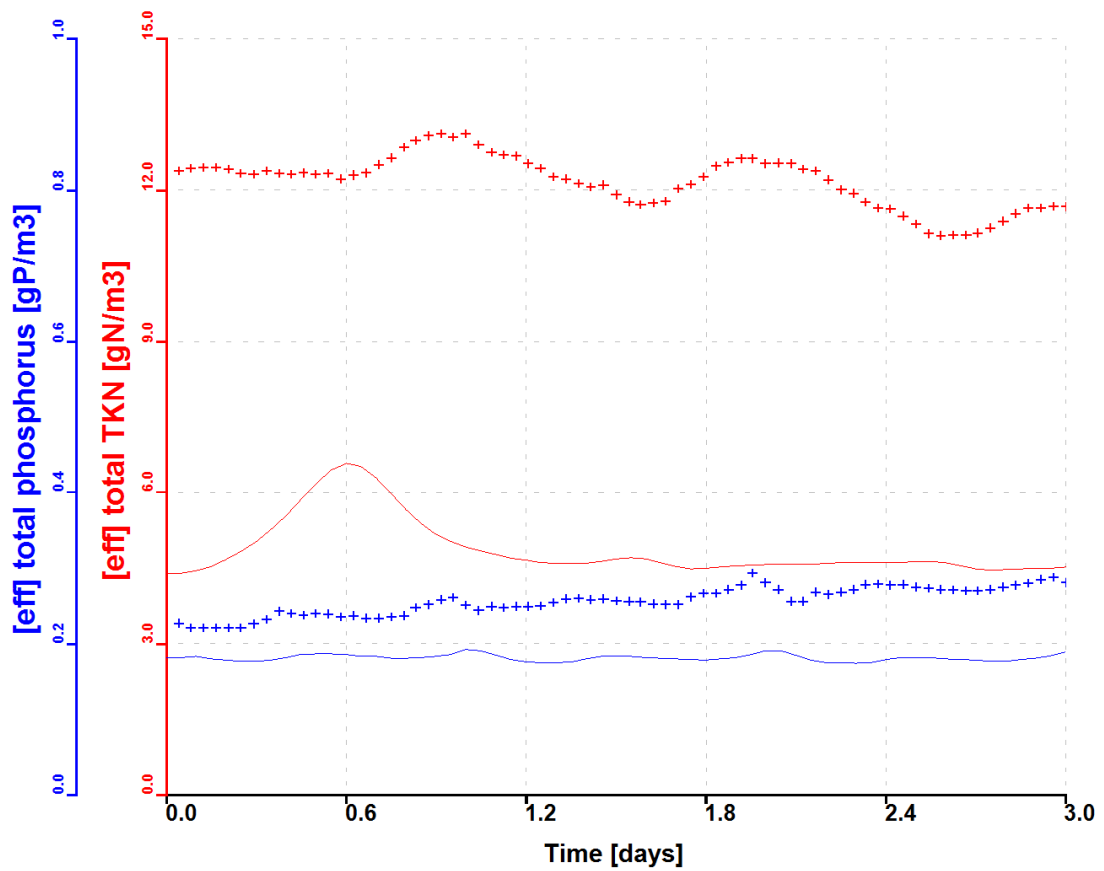
Liite 13: Hermannisaaren puhdistamon lähtevän veden kiintoaine- sekä BOD5-pitoisuudet mallilla ASM3 21.–23.4.2008

asm3



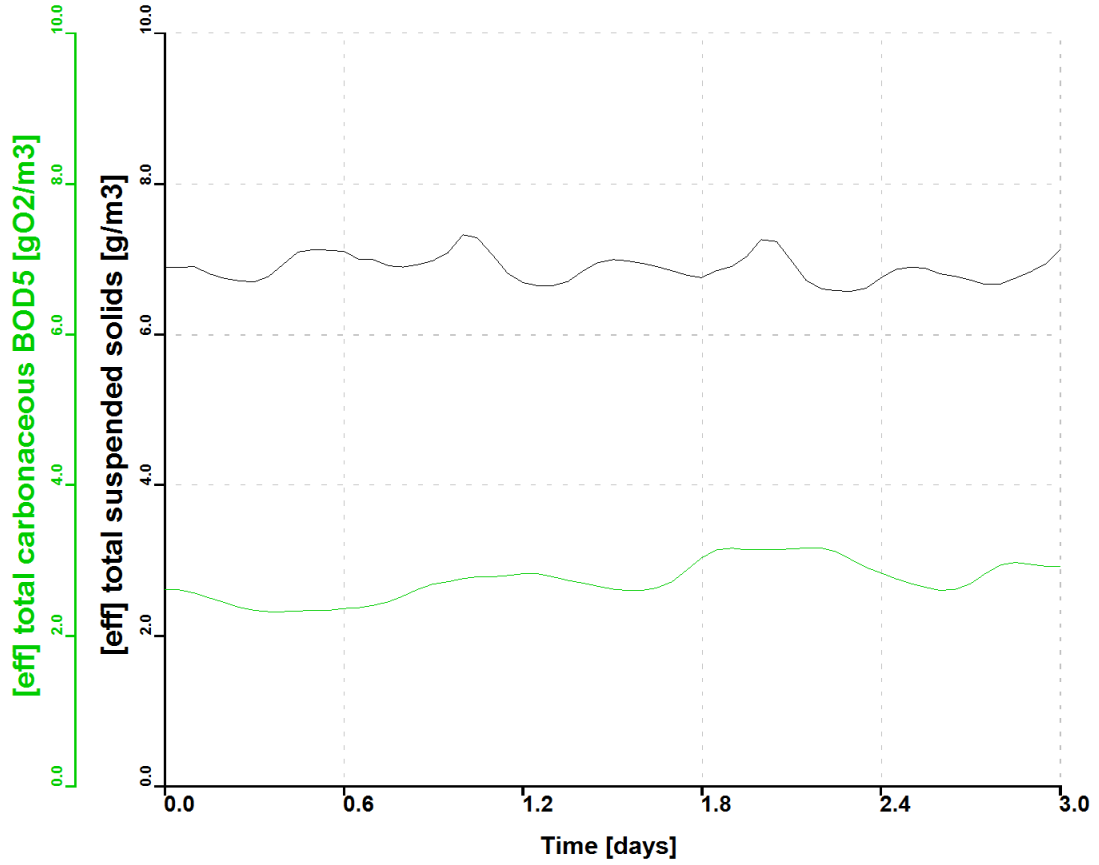
Liite 14: Hermannisaaren puhdistamon mitatut ja mallinnetut lähtevän veden typpi- sekä fosforipitoisuudet mallilla Mantis 21.–23.4.2008

mitattu + ja ennustettu -



Liite 15: Hermannisaaren puhdistamon lähtevän veden kiintoaine- sekä BOD5-pitoisuudet mallilla Mantis 21.–23.4.2008

Mantis



Liite 16 (1/2): Hermanninsaaren puhdistamon kolmen vuorokauden prosessidataa 21.–23.4.2008

	Tunti	Tuleva jätevesi (m ³ /h)	Ilmamäärä (n-m ³ /h)		Lähtevä vesi (mg/l)	
			linja 1	linja 2	KOK-typpi N	KOK-fosfori P
21.4.2008	1	609	709	647	12.4	0.227
21.4.2008	2	553	651	609	12.4	0.221
21.4.2008	3	553	596	532	12.5	0.221
21.4.2008	4	551	561	491	12.5	0.221
21.4.2008	5	553	544	462	12.4	0.221
21.4.2008	6	549	523	447	12.3	0.221
21.4.2008	7	602	512	431	12.3	0.226
21.4.2008	8	663	499	424	12.4	0.232
21.4.2008	9	682	544	430	12.3	0.243
21.4.2008	10	649	516	463	12.3	0.240
21.4.2008	11	628	504	453	12.4	0.238
21.4.2008	12	640	584	557	12.3	0.240
21.4.2008	13	637	723	723	12.3	0.239
21.4.2008	14	591	912	822	12.2	0.235
21.4.2008	15	617	1030	858	12.3	0.237
21.4.2008	16	578	1106	891	12.4	0.234
21.4.2008	17	579	1128	900	12.5	0.234
21.4.2008	18	593	1096	919	12.7	0.235
21.4.2008	19	614	1002	916	12.9	0.237
21.4.2008	20	629	922	886	13.0	0.248
21.4.2008	21	669	887	870	13.1	0.252
21.4.2008	22	734	894	868	13.1	0.258
21.4.2008	23	764	965	911	13.1	0.261
21.4.2008	24	660	1009	930	13.1	0.251
22.4.2008	25	578	1024	929	12.9	0.244
22.4.2008	26	522	993	926	12.8	0.249
22.4.2008	27	513	901	874	12.7	0.248
22.4.2008	28	527	814	813	12.7	0.249
22.4.2008	29	523	766	757	12.5	0.249
22.4.2008	30	537	744	723	12.4	0.250
22.4.2008	31	578	731	701	12.3	0.254
22.4.2008	32	635	739	701	12.2	0.259
22.4.2008	33	648	742	715	12.1	0.260
22.4.2008	34	627	746	713	12.1	0.258
22.4.2008	35	633	767	754	12.1	0.259
22.4.2008	36	611	822	802	11.9	0.257

Liite 16 (2/2): Hermanninsaaren puhdistamon kolmen vuorokauden prosessidataa 21.–23.4.2008

	Tunti	Tuleva jätevesi (m ³ /h)	Ilmamäärä (n-m ³ /h)		Lähtevä vesi (mg/l)	
			linja 1	linja 2	KOK-typpe N	KOK-fosfori P
22.4.2008	37	599	900	853	11.8	0.256
22.4.2008	38	589	976	890	11.7	0.255
22.4.2008	39	573	1086	934	11.7	0.253
22.4.2008	40	556	1147	960	11.8	0.252
22.4.2008	41	562	1168	971	12.0	0.252
22.4.2008	42	561	1098	981	12.1	0.262
22.4.2008	43	618	985	961	12.3	0.267
22.4.2008	44	618	913	932	12.5	0.267
22.4.2008	45	668	935	917	12.6	0.272
22.4.2008	46	721	996	953	12.6	0.277
22.4.2008	47	781	1062	996	12.6	0.293
22.4.2008	48	653	1130	1016	12.5	0.281
23.4.2008	49	559	1144	1024	12.5	0.272
23.4.2008	50	499	1088	999	12.5	0.256
23.4.2008	51	496	957	929	12.4	0.256
23.4.2008	52	517	826	848	12.4	0.268
23.4.2008	53	489	787	794	12.2	0.265
23.4.2008	54	515	767	756	12.0	0.268
23.4.2008	55	556	758	722	11.9	0.272
23.4.2008	56	621	768	723	11.8	0.278
23.4.2008	57	630	782	745	11.7	0.279
23.4.2008	58	610	791	759	11.6	0.277
23.4.2008	59	621	770	741	11.5	0.278
23.4.2008	60	592	802	788	11.3	0.275
23.4.2008	61	565	873	851	11.2	0.273
23.4.2008	62	564	954	908	11.1	0.272
23.4.2008	63	550	1041	966	11.1	0.271
23.4.2008	64	533	1113	1001	11.1	0.270
23.4.2008	65	536	1093	1003	11.2	0.270
23.4.2008	66	562	987	967	11.3	0.272
23.4.2008	67	594	888	895	11.4	0.275
23.4.2008	68	614	881	879	11.5	0.277
23.4.2008	69	646	919	892	11.7	0.280
23.4.2008	70	698	958	934	11.7	0.285
23.4.2008	71	733	1032	992	11.7	0.288
23.4.2008	72	655	1121	1048	11.7	0.281