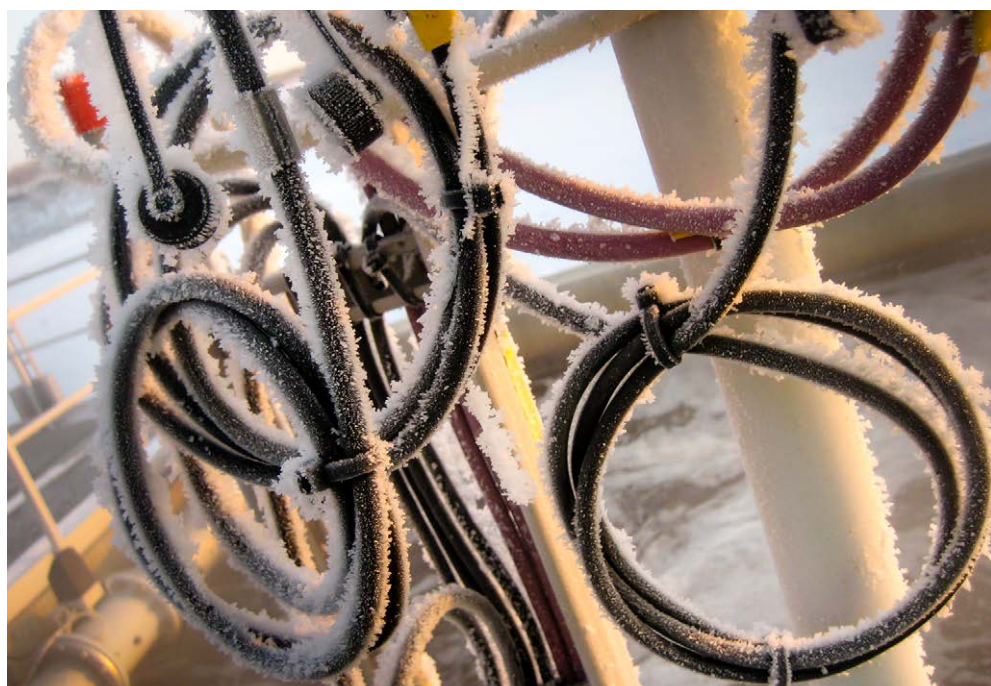


# Modellering av lustgas- emissioner från SBR- och anammoxprocesser för rejektivattenbehandling

*Erik Lindblom*

*Magnus Arnell*

*Ulf Jeppsson*





# Svenskt Vatten Utveckling

Svenskt Vatten Utveckling (SVU) är kommunernas eget FoU-program om kommunal VA-teknik. Programmet finansieras i sin helhet av kommunerna. Programmet lägger tonvikten på tillämpad forskning och utveckling inom det kommunala VA-området. Projekt bedrivs inom hela det VA-tekniska fältet under huvudrubrikerna:

Dricksvatten  
Röret & Klimat  
Avlopp & Miljö  
Management

SVU styrs av en kommitté, som utses av styrelsen för Svenskt Vatten AB. För närvarande har kommittén följande sammansättning:

Anna Linusson, ordförande	Svenskt Vatten
Daniel Hellström, utvecklingsledare	Svenskt Vatten
Per Ericsson	Norrsvatten
Tove Göthner	Sveriges Kommuner och Landsting
Tage Hägerman	Smedjebacken
Stefan Johansson	Skellefteå kommun
Kristina Laurell	Formas
Annika Malm	Kretslopp och vatten, Göteborgs Stad
Lisa Osterman	Örebro kommun
Kenneth M. Persson	Sydsvatten AB
Carl-Olof Zetterman	SYVAB

Författarna är ensamma ansvariga för rapportens innehåll, varför detta ej kan åberopas såsom representerande Svenskt Vattens ståndpunkt.

Svenskt Vatten Utveckling  
Svenskt Vatten AB  
Box 14057  
167 14 BROMMA  
Tfn 08 506 002 00  
Fax 08 506 002 10  
svensktvatten@svensktvatten.se  
www.svensktvatten.se  
*Svenskt Vatten AB är servicebolag till föreningen Svenskt Vatten.*

<b>Rapportens titel:</b>	Modellering av lustgasemissioner från SBR- och anammoxprocesser för rejektivattenbehandling
<b>Title of the report:</b>	Modelling of N <sub>2</sub> O emissions from treatment of anaerobic digester supernatant by SBR and anammox processes
<b>Författare:</b>	Erik Lindblom, Stockholm Vatten AB/Sweco Environment AB/IEA, Lunds universitet; Magnus Arnell, Urban Water Management Sverige AB/IEA, Lunds universitet; Ulf Jeppsson, IEA, Lunds universitet
<b>Rapportnummer:</b>	2015-17
<b>Antal sidor:</b>	50
<b>Sammandrag:</b>	Rejektivatten innehåller höga koncentrationer av ammonium och har potential att vid behandling producera en avsevärd mängd lustgas (N <sub>2</sub> O). För att kunna prediktera och styra rejektivattenprocesser för minimal lustgasproduktion har modeller för SBR- och anammoxprocessen inklusive reaktionsmodell för lustgasproduktion utvecklats. Modellerna har validerats med mätdata från Slottshagens ARV och Sjöstadsverket.
<b>Abstract:</b>	The concentrations of ammonia in digester supernatant are high and the potential for significant emissions of nitrous oxide (N <sub>2</sub> O) when treated is large. To predict and control treatment processes of digester supernatant to minimize the production of N <sub>2</sub> O, models for SBR and anammox processes – including production pathways for N <sub>2</sub> O – have been developed. These models have been calibrated and validated using data from Slottshagens WWTP and Sjöstadsverket.
<b>Sökord:</b>	Anammox, avloppsvattenrening, benchmarking, lustgas, modellering, rejektivatten, satsvisa reaktorer, växthusgas
<b>Keywords:</b>	Anammox, benchmarking, digester supernatant, greenhouse gas emissions, modelling, nitrous oxide, reject water, sequencing batch reactor, wastewater treatment
<b>Målgrupper:</b>	Personal på avloppsreningsverk, forskare och konsulter med intresse för lustgasproduktion och hur denna kan modelleras och simuleras
<b>Omslagsbild:</b>	Linköpings avloppsreningsverk, januari 2006. Foto: Magnus Arnell
<b>Rapport:</b>	Finns att hämta hem som PDF-fil från Svenskt Vattens hemsida <a href="http://www.svensktvatten.se">www.svensktvatten.se</a>
<b>Utgivningsår:</b>	2015
<b>Utgivare:</b>	Svenskt Vatten AB © Svenskt Vatten AB
<b>Om projektet</b>	
<b>Projektnummer:</b>	11-106
<b>Projektets namn:</b>	Modellering av lustgasemissioner från SBR- och anammoxprocesser för rejektivattenbehandling
<b>Projektets finansiering:</b>	Svenskt Vatten Utveckling, Formas, Richertska stiftelsen, VA-Ingenjörerna AB, Norrköping Vatten och Avfall AB, SYVAB, IVL Svenska Miljöinstitutet, LTH, SLU, KTH

# Förord

Denna rapport beskriver utvecklingen samt kalibrering och validering av matematiska modeller för separat rejektivattenrening vid avloppsreningsverk. Modellerna är tänkta att användas som en integrerad del av simuleringsplattformen Benchmark Simulation Model No. 2 (BSM2). Utvecklingsarbetet omfattar implementering av reaktormodeller för SBR- och biofilmprocesser samt reaktionsmodeller för lustgasproduktion och anamoxbakterier. I rapporten visas med exempel hur modellerna kan användas i praktiken för att analysera och potentiellt minska lustgasutsläpp vid rejektivattenbehandling.

Författarna vill tacka:

- Fredrik Stenström och professor Jes la Cour Jansen vid Lunds Tekniska högskola för att de delat med sig av resultat och erfarenheter från experimenten vid Slottshagens reningsverk i Norrköping.
- Jing-Jing Yang, Jozef Trela och professor Elzbieta Plaza vid Kungliga Tekniska högskolan för att de delat med sig av resultat och erfarenheter från experimenten vid Sjöstadverket i Stockholm.
- Christian Baresel och Kåre Tjus vid IVL Svenska Miljöinstitutet för att de delat med sig av resultat och erfarenheter från lustgasmätningar vid bägge anläggningarna ovan.
- Professor Håkan Jönsson vid Sveriges Lantbruksuniversitet för administrativt stöd samt personal vid de berörda reningsverken.

Vi vill också tacka Svenskt Vatten Utveckling (projekt nr 11-106), J. Gust. Richerts stiftelse och Sweco Environment AB för finansiering.

Denna rapport tillsammans med ytterligare tre nyligen publicerade SVU rapporter relaterade till lustgas och andra växthusgaser utgör en god grund för de läsare som bättre önskar förstå problematiken kring växthusgasutsläpp från avloppsreningsverk. De övriga rapporterna inom området är:

- Westling, K. (2011). Lustgasemissioner från avloppsreningsverk – en litteraturstudie. IVL Svenska Miljöinstitutet, Rapport B1977, Stockholm, Sverige.
- Arnell, M. (2013). Utsläpp av lustgas och metan från avloppssystem – en granskning av kunskapsläget. SVU rapport 2013-11, Svenskt Vatten AB, Stockholm, Sverige.
- Jönsson, H., Junestedt, C., Willén, A., Yang, J., Tjus, K., Baresel, C., Rodhe, L., Trela, J., Pell, M. & Andersson, S. (2015). Minska utsläpp av växthusgaser från rening av avlopp och hantering av avloppsslam. SVU rapport 2015-02, Svenskt Vatten AB, Stockholm, Sverige.

Detta projekt har också resulterat i presentationer vid internationella konferenser och publikationer i internationella tidskrifter:

- Lindblom, E., Arnell, M., Flores-Alsina, X., Stenström, F., Gustavsson, D.J.I., Yang, J. & Jeppsson, U. (2015). Dynamic modelling of nitrous

oxide emissions from three Swedish sludge liquor treatment systems. *Water Science and Technology* (accepted for publication).

- Lindblom, E., Arnell, M., Flores-Alsina, X., Stenström, F., Gustavsson, D.J.I. & Jeppsson, U. (2014). Dynamic modelling of nitrous oxide emissions from three Swedish full-scale sludge liquor treatment systems. *IWA 9th World Water Congress and Exhibition (IWA2014)*, Lisbon, Portugal, 21–26 september, 2014.
- Lindblom, E., Arnell, M., Stenström, F., Tjus, K., Flores-Alsina, X. & Jeppsson, U. (2013). Dynamic modelling and validation of nitrous oxide emissions from a full-scale nitrifying/denitrifying sequencing batch reactor treating anaerobic digester supernatant. *11th IWA Conference on Instrumentation, Control and Automation (ICA2013)*, Narbonne, France, 18–20 september, 2013.

Erik Lindblom, Magnus Arnell, Ulf Jeppsson

# Innehåll

Förord.....	3
Sammanfattning.....	6
Summary.....	7
<b>1 Inledning.....</b>	<b>8</b>
1.1 Bakgrund.....	8
1.2 Syfte.....	9
1.3 Omfattning.....	9
1.4 Rapportstruktur.....	10
<b>2 Lustgasbildning vid rejektivattenrening.....</b>	<b>11</b>
2.1 Produktionsvägar för lustgas.....	11
<b>3 Reaktormodeller: utveckling och beskrivning.....</b>	<b>13</b>
3.1 SBR-modellen.....	13
3.2 MBBR-modellen.....	14
<b>4 Reaktionsmodeller: utveckling och beskrivning.....</b>	<b>16</b>
4.1 ASM1.....	16
4.2 Autotrof nitrifikation i två steg.....	17
4.3 Heterotrof denitrifikation i fyra steg.....	17
4.4 NH <sub>3</sub> och HNO <sub>2</sub> .....	17
4.5 Autotrof denitrifikation.....	18
4.6 Anammoxreaktionen.....	19
4.7 Stripping av lustgas.....	19
<b>5 SBR-processen på Slottshagens avloppsreningsverk.....</b>	<b>20</b>
5.1 Processbeskrivning.....	20
5.2 Indata till SBR-modellen.....	21
5.3 Kalibrering.....	22
5.4 Resultat.....	24
5.5 Exempel på modelltillämpning.....	26
5.6 Optimeringsförsök i praktiken.....	28
<b>6 Anammoxprocessen på Sjöstadsverket.....</b>	<b>29</b>
6.1 Processbeskrivning.....	29
6.2 Indata till anammoxmodellen.....	30
6.3 Kalibrering.....	31
6.4 Resultat.....	31
6.5 Exempel på modelltillämpning.....	36
<b>7 Slutsatser och diskussion.....</b>	<b>38</b>
7.1 SBR-modellen.....	38
7.2 Anammox/MBBR-modellen.....	39
7.3 Förslag på vidare arbete.....	39
Referenser.....	41
Appendix – Parametervärden för modellerna.....	45

# Sammanfattning

Erik Lindblom vid IEA, Lunds universitet, har med visst stöd av Magnus Arnell och Ulf Jeppsson utvecklat matematiska modeller för separat rening av rejektivatten vid avloppsreningsverk, det vill säga vatten från rötslamavvattning. Syftet är att bättre förstå problematiken kring växthusgasutsläpp från avloppsreningsverk, särskilt utsläpp av lustgas ( $N_2O$ ).

Lustgas bildas och avgår till atmosfären vid biologisk kväverening på avloppsreningsverk. Lustgas påverkar den globala uppvärmningen 298 gånger mer än koldioxid. Det betyder att 1 kg lustgas har en växthuseffekt som motsvarar 298 kg koldioxid. För att driften av avloppsreningsverk ska ske effektivt och med minimal miljöpåverkan är det därför viktigt att förstå hur lustgas uppstår och hur bildningsprocesserna samverkar med övriga reningsprocesser och driftparametrar.

Genom utveckling av dynamiska processmodeller har projektet förbättrat kunskapen om hur lustgas bildas i reningsanläggningar för biologisk rejektivattenbehandling. Modellerna är implementerade i mjukvaran Matlab/Simulink för att kunna användas i simuleringsplattformen Benchmark Simulation Model No. 2 (BSM2).

Två populära processer för rejektivattenrening är anammox och nitrifikation/denitrifikation i SBR (satsvis biologisk rening). I BSM2-systemet saknas modeller för reaktorer med varierande volym vilket krävs för en *SBR-modell*. En sådan har därför utvecklats. I BSM2-systemet saknas också modeller för biofilmsprocesser vilket krävs för anammoxmodellen. Därför har även en *generell biofilmsmodell* utvecklats.

I den utvecklade reaktionsmodellen produceras lustgas genom autotrof denitrifikation (där självnärande mikroorganismer omvandlar nitrit till lustgas) under aeroba förhållanden med fritt syre närvarande, och heterotrof denitrifikation (där mikroorganismerna behöver tillgängligt organiskt material) under anoxiska förhållanden utan fritt syre närvarande. Avgång av lustgas till luft sker genom stripping, en fysikalisk process som beror på att extern luft tillförs reningsprocessen, och dessa luftbubblor rör sig genom vattnet varvid lustgas i löst form absorberas till luftbubblorna.

I rapporten redovisas utvecklingsarbetet och hur modellerna fungerar. Simuleringsresultaten jämförs med mätdata från SBR-anläggningen vid Slottshagens reningsverk i Norrköping och från anammoxprocessen vid Sjöstadverket i Stockholm. I rapporten visas också med exempel hur modellerna kan användas i praktiken för att analysera och minska lustgasutsläpp vid rejektivattenbehandling.

Sammantaget kan sägas att modellerna delvis kan beskriva de experimentella resultaten. SBR-processens dynamik med avseende på nitrifikation/denitrifikation simuleras väl. Den med anammoxmodellen simulerade distributionen av aktiva bakterier i biofilmen är realistisk. Men stora osäkerheter kvarstår, speciellt när det gäller bildningsmekanismer och parametervärden för lustgasproduktionen. Slutsatserna överensstämmer med resultat från pågående internationell forskning inom området (2015).



## Summary

Nitrous oxide ( $\text{N}_2\text{O}$ ) is produced and emitted to the atmosphere during biological nitrogen removal at wastewater treatment plants. Nitrous oxide is a strong greenhouse gas with a global warming potential of 298 kg  $\text{CO}_2$ /kg  $\text{N}_2\text{O}$  (IPCC, 2013).

To operate wastewater treatment plants efficiently in an environmentally friendly manner, a good understanding of the nitrous oxide formation and production mechanisms, and of how these interact with other operational parameters and processes, is valuable. Considering this the objective of the current study is to, by the development of dynamic process models, improve the understanding of nitrous oxide production in biological systems treating sludge liquors. The models are implemented in the software Matlab/Simulink so that they can be used within the platform Benchmark Simulation Model No. 2 (BSM2).

Today, two commonly used technologies for sludge liquor treatment are the SBR (Sequential Batch Reactor) and anammox processes. The BSM2 system lacks reactor models with variable volume, which is essential for a SBR model. Therefore such a model has been developed. Moreover, the model library of BSM2 does not include a biofilm process model, which is needed to model the anammox process. A general biofilm model has therefore been developed.

In the developed kinetic reaction model nitrous oxide is produced through *autotrophic denitrification* in aerobic conditions and *heterotrophic denitrification* in anoxic conditions. Emission of nitrous oxide to the air is described as stripping, a physical process which in the model depends on the total oxygen demand and dissolved oxygen concentration of the treatment process.

In this report the development and behaviour of the models are shown. The simulation results are compared with real measurements from the SBR process at the Slottshagen wastewater treatment plant in Norrköping, Sweden, and from the anammox process at the Sjöstadsverket pilot plant in Stockholm, Sweden. In the report, possible practical applications of the models are also demonstrated.

In general, the models can partly describe the experimental results. The dynamics of the nitrification/denitrification in the SBR process are well simulated with the model. The simulated distribution of active biomass in the biofilm of the anammox model is realistic. It is, however, clear that uncertainty remains, especially considering the formation mechanisms and parameter values of nitrous oxide production. To date, 2015, this conclusion is in accordance with international research in the field.

# 1 Inledning

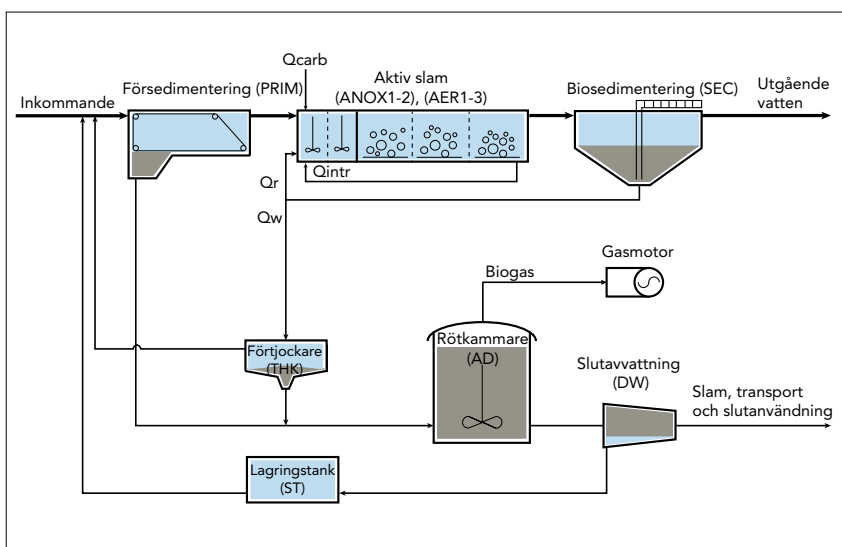
## 1.1 Bakgrund

Lustgas ( $N_2O$ ) bildas och avgår till atmosfären vid biologisk kväverening på avloppsreningsverk.  $N_2O$  är en kraftig växthusgas som påverkar den globala uppvärmningen 298 gånger mer än koldioxid (IPCC, 2013); 1 kg  $N_2O$  har ett koldioxidavtryck motsvarande 298 kg  $CO_2$ .

För att driften av avloppsreningsverk skall ske effektivt och med minimal miljöpåverkan är därför en god förståelse för hur lustgas uppstår och hur bildningsprocesserna interagerar med övriga reningsprocesser och driftparametrar eftersträfvansvärt.

I ett avloppsreningsverk med avancerad processtyrning och många recirkulationsflöden är det inte alltid intuitivt att inse var och hur lustgas kan uppstå. Ökade lustgasutsläpp kan till exempel bero på en annars energieffektiv styrstrategi för luftning eller förhöjd ammoniumhalt i rejektvatten på grund av ökad utrötning av slamm. Dynamiska processmodeller kan användas för att analysera denna typ av samverkans effekter. I kombination med mätdata kan nya samband upptäckas och modellerna utvecklas och förbättras.

Det idag mest omfattande simuleringsprotokoll som finns för benchmarking av drift- och styrstrategier vid avloppsreningsverk är Benchmark Simulation Model No. 2 (BSM2) som är en detaljerad simuleringsplattform för att implementera, analysera och utvärdera reningseffekt, kostnader och andra parametrar för såväl nya som existerande styrstrategier (Gernaey et al., 2014). BSM2 har utvecklats av en task group inom International Water Association (IWA), IWA Task Group on Benchmarking of Control Strategies for WWTPs (se [www.benchmarkwwtp.org](http://www.benchmarkwwtp.org)). Utvecklingen har skett under ledning av Lunds universitet (tekn. dr Ulf Jeppsson) och är idag ett accepterat verktyg inom forskarvärlden. Det består av en komplett uppsättning av datormodeller över de mikrobiella och fysikaliska



Figur 1-1 Processchema för reningsverket i BSM2.

förloppen för enhetsprocesserna vid ett reningsverk, se figur 1-1. Många kringssystem som styrsystem, styrdon och mätinstrument av olika slag finns implementerade för ökad realism och flexibilitet. Simuleringar utförs med dynamiska indata för en tvåårsperiod så att säsongsvariationer och driftstörningar täcks in. En central del är en utvärderingsprocedur som innefattar viktiga nyckeltal såsom utgående vattenkvalitet och driftskostnader.

I Formas-SVU projekt 10-106 ”Utveckling av operationella strategier och dynamiskt analysverktyg med fokus på energieffektivisering av avloppsreningsverk” vidareutvecklas BSM2 med fokus på reningsverkens energianvändning. Idag ingår dock inget separat rejektvattenbehandlingssteg i BSM2 utan endast en lagringstank.

Det är mycket troligt att lustgasemissioner från biologisk rejektvattenbehandling är starkt beroende av de strategier som reningsprocessen drivs enligt, varför det är viktigt att fördjupa kunskapen inom detta område inom vilket det finns få publicerade svenska studier (Björleinius, 2004; Gustavsson et al., 2011; Trela et al., 2008; Stenström et al., 2014).

## 1.2 Syfte

Det huvudsakliga syftet med föreliggande studie är att utveckla, implementera och kalibrera delmodeller för separat behandling av rejektvatten med dels SBR-teknik (Satsvis Biologisk Reaktor) och dels biofilm/anammoxteknik. Förutom en utbyggnad av BSM2 så är förhoppningen också att studien skall bidra till en ökad kunskap om lustgasutsläpp från SBR- och anammoxprocesser som används för rejektvattenbehandling.

Observera att enbart de individuella rejektvattenprocesserna har modellerats, kalibrerats och simulerats inom detta projekt. En BSM2 modell för kompletta reningsverk – inklusive produktion och emission av växthusgaserna koldioxid, metan och lustgas – har utvecklats inom ramen för andra projekt och finns tillgänglig för intresserade brukare (Flores-Alsina et al., 2011; Corominas et al., 2012; Flores-Alsina et al., 2014; Sweetapple, 2014). Denna så kallade BSM2-G modell är dock fortfarande till viss del under utveckling – testning och validering pågår. De häri beskrivna rejektvattenmodellerna kommer snart att integreras i plattformen BSM2-G.

## 1.3 Omfattning

Några förutsättningar har bidragit till att avgränsa omfattningen av projektet.

1. *De resulterande modellerna skall komplettera BSM2-systemet och modellutvecklingen sker därför i programvaran Matlab/Simulink.*

I BSM2-systemet saknas modeller för reaktorer med varierande volym vilket krävs för en SBR-modell. En sådan har därför utvecklats.

I BSM2-systemet saknas modeller för biofilmprocesser vilket krävs för anammoxmodellen. En generell biofilmmodell har därför utvecklats.

2. *För att BSM2-systemet skall bli mer användbart som besluts- och optimeringsunderlag skall rejektivattenmodellerna inkludera produktionsvägar för lustgas.*

Trots stora internationella vetenskapliga ansträngningar med experimentella försök från fullskala (Gustavsson och Jansen, 2011) till labbskala (Zhou et al., 2008), i synnerhet under de senaste åren, finns idag ingen heltäckande validerad modell för lustgasbildning vid biologisk kväverening (Ni et al., 2013a; Peng et al., 2014). I det här redovisade arbetet var det därför en utmaning att välja ut en lämplig reaktionsmodell och utvärdera den med de relativt grova mätdata från försök i fullskala enligt punkt 3. En sammanställning av kunskapsläget avseende växthusgasemissioner från avloppsreningsverk finns att studera i Arnell (2013) och en sammanfattning av flera internationella praktiska studier av lustgasemissioner från avloppsreningsverk i Westling (2011).

3. *Modellerna skall utvecklas och kalibreras mot mätningar från Slottshagens reningsverk i Norrköping samt Hammarby Sjöstadsverket i Stockholm.*

Projektets omfattning tydliggörs ytterligare i avsnittet nedan där denna rapports struktur förklaras.

## **1.4 Rapportstruktur**

I kapitel 2 introduceras kortfattat rejektivattenrening och lustgasproduktion; de tre huvudsakliga produktionsvägarna som idag anses ge upphov till lustbildning beskrivs.

I kapitel 3 förklaras strukturen på de två reaktormodeller som har utvecklats och implementerats, SBR-modellen och MBBR-modellen.

I kapitel 4 redovisas hur den reaktionsmodell som använts utvecklats genom att utöka den grundläggande modellen ASM1. I samband med detta förklaras också varför utökningarna är nödvändiga. Kapitlet avslutas med en beskrivning av hur det fysikaliska fenomenet stripping av lustgas, det vill säga lustgasemissionen, modellerats.

Kapitel 5 och kapitel 6 fokuserar på de två fallstudierna, SBR-processen på Slottshagens reningsverk (kapitel 5) och anammoxprocessen på Sjöstadsverket (kapitel 6). För respektive fall beskrivs processen, tillgängliga mätdata och kalibreringsresultat. Kapitlen avslutas med diskussioner om sannolika produktionsvägar för lustgas och scenariosimuleringar som exemplifierar hur de utvecklade modellerna kan användas i praktiken.

Slutligen i kapitel 7 sammanfattas slutsatserna från projektet och behovet av vidare arbete diskuteras.

## 2 Lustgasbildning vid rejektivattenrening

På reningsverk med anaerob rötning är oftast kvävehalterna i rejektivattnet från slutavvattningen höga och kan utgöra cirka 10–20 % av kvävebelastningen på den biologiska reningen i reningsverkets huvudlinje. Ammoniumkoncentrationen är i storleksordningen 500–1 500 mg N/l. Beroende på graden av värmeåtervinning i slamlinjen är ofta temperaturen högre jämfört med huvudflödet. Sammantaget utgör detta gynnsamma förutsättningar för ett separat reningssteg för kväve i rejektivattnet för att på så vis avlasta huvudlinjen (van Loosdrecht och Salem, 2006). Separat rejektivattenrening tillämpas idag på många svenska reningsverk.

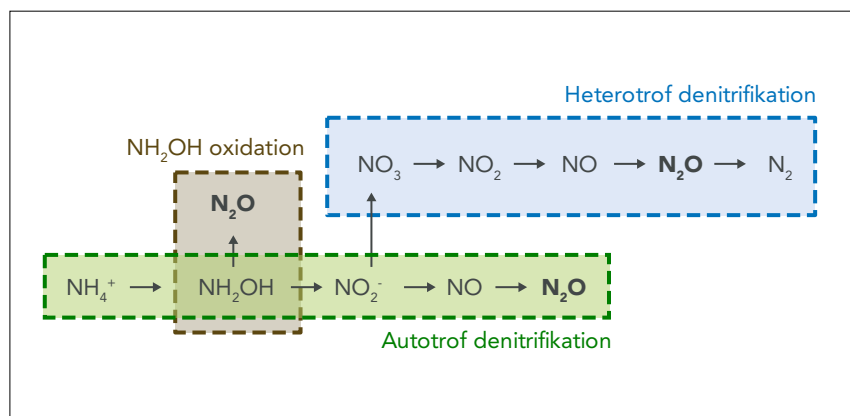
Behandling av vatten med höga kvävekoncentrationer och relativt låga koncentrationer av organiskt material (låg COD:N kvot) medför sannolikt en ökad risk för emissioner av lustgas (von Schultness et al., 1994; Kampschreur et al., 2009). Ett exempel från Sverige är de lustgasmätningar som gjordes på Sjölunda avloppsreningsverk i Malmö (Gustavsson och Jansen, 2011), vilka visar att ungefär 4 % av inkommande mängd ammoniumkväve omvandlas till lustgas i en SBR-process som drivs med enbart nitrifikation, det vill säga omvandling av  $\text{NH}_4$  till  $\text{NO}_2$ .

### 2.1 Produktionsvägar för lustgas

Aktuell forskning (Ni et al., 2013a) visar vidare att det finns tre huvudsakliga produktionsvägar för  $\text{N}_2\text{O}$  vid biologisk kväverening (figur 2-1):

1. Autotrof denitrifikation.
2. Ofullständig oxidation av hydroxylamin ( $\text{NH}_2\text{OH}$ ).
3. Inhiberad heterotrof denitrifikation.

*Autotrof denitrifikation* Nitrifikation av ammonium ( $\text{NH}_4^+$ ) till nitrat ( $\text{NO}_3^-$ ) är en flerstegsprocess där autotrofa ammoniumoxiderande bakterier (AOB)



Figur 2-1 Huvudsakliga produktionsvägar för lustgas vid biologisk kväverening.

(och arkéer, Foley et al., 2011) oxiderar ammonium via hydroxylamin ( $\text{NH}_2\text{OH}$ ) till nitrit ( $\text{NO}_2^-$ ). Nitritoxiderande bakterier oxiderar slutligen nitrit till nitrat. AOB kan emellertid också uttrycka de enzym som krävs för att reducera nitrit till kväveoxid ( $\text{NO}$ ) och vidare till lustgas. Den processen är känd som autotrof denitrifikation (Colliver och Stephenson, 2000) och illustreras i den gröna rutan i figur 2-1. AOB kan dock inte producera enzymet  $\text{N}_2\text{O}$ -reduktas, och lustgas snarare än kvävgas ( $\text{N}_2$ ) är slutprodukt i denna sidoprocess (Law et al., 2012).

Många studier indikerar att autotrof denitrifikation är den dominerande källan till lustgasutsläpp, speciellt vid ogynnsam syrehalt (låg men över noll) eller vid förhöjd nitritkoncentration (Wunderlin et al., 2012; Foley et al., 2011; Kampschreur et al., 2008; Colliver och Stephenson, 2000).

*$\text{NH}_2\text{OH}$  oxidation* Det är känt att  $\text{N}_2\text{O}$ , förutom genom autotrof och heterotrof denitrifikation, också kan produceras som en biprodukt vid ofullständig oxidation av  $\text{NH}_2\text{OH}$  (Wunderlin et al., 2012), se den grå rutan i figur 2-1. Oxidation av ammonium till nitrit via hydroxylamin katalyseras av två olika enzym. Mikrobiella studier visar att en extremt reaktiv nitrosylradikal ( $\text{NOH}$ ) bildas som en kortlivad intermediär i det andra steget. I denna process kan kväveoxid och lustgas produceras genom biokemiska reaktioner av hydroxylamin eller nitrosyl. Bildad kväveoxid kan sedan vidare reduceras till lustgas (Law et al., 2012). Dessa processer gynnas av en obalanserad aktivitet hos AOB, till exempel på grund av hög koncentration av ammonium eller att fluktuerande driftsförhållanden temporärt driver upp reaktionshastigheten för ammoniumoxidation.

Peng et al. (2015) har visat att denna produktionsväg kan vara betydande men knappast dominerande under aeroba förhållanden. Autotrof denitrifikation står sannolikt för 70–95 % av  $\text{N}_2\text{O}$ -produktionen inom ett brett spann av syrekoncentrationer. Lustgasproduktion på grund av ofullständig oxidation av hydroxylamin har därför inte inkluderats i denna studie.

*Heterotrof denitrifikation* sker i fyra sekventiella steg katalyserade av fyra olika enzym, blå ruta i figur 2-1. Studier visar att under normala förhållanden är reaktionshastigheten för reduktion av kväveoxid och lustgas 3 till 4 gånger högre än den för reduktion av nitrat och nitrit (von Schulthess et al., 1994). Det betyder att kväveoxid och lustgas normalt förbrukas och att reaktionen till  $\text{N}_2$  är fullständig. Under störda driftsförhållanden, till exempel vid ackumulering av nitrit eller närvaro av syre, visar det sig emellertid att enzymet  $\text{N}_2\text{O}$ -reduktas lätt inhiberas vilket leder till ackumulering av lustgas. Detta behöver inte leda till en mätbar ökning av lustgasutsläpp vid anläggningen eftersom lustgas har relativt hög löslighet i vatten och följer med vattenfasen. Om denitrifikationssteget däremot efterföljs av ett luftningssteg kommer dock lustgasen drivas av och släppas ut i detta processteg (Kampschreur et al., 2009).

## 3 Reaktormodeller: utveckling och beskrivning

### 3.1 SBR-modellen

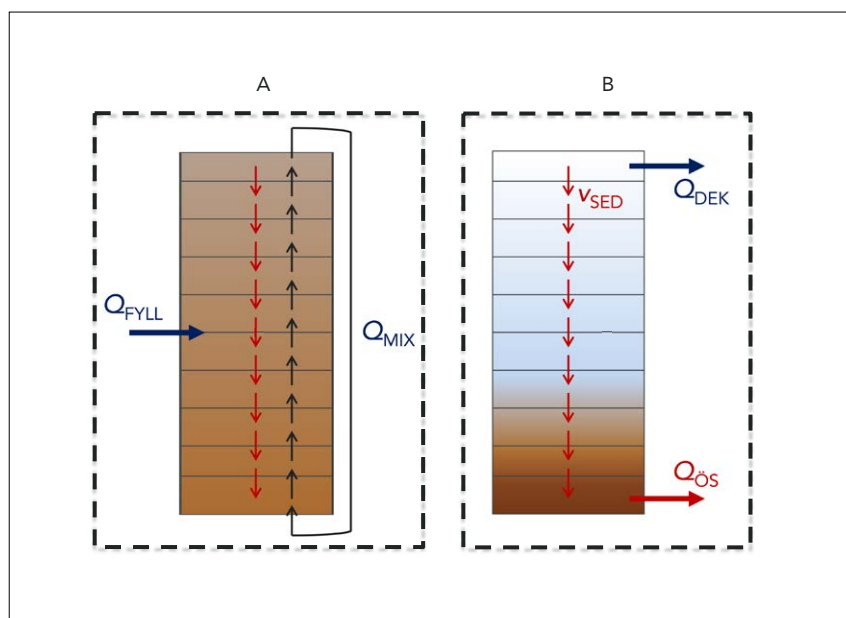
Den utvecklade SBR-modellen är baserad på en eftersedimenteringsmodell som används i BSM-systemet där biologiska/kemiska reaktioner är aktiverade (Flores-Alsina et al., 2012). Enkelt kan denna modell förstås som att en konstant sedimenteringsvolym delas in i 10 lager där varje lagers volym antas vara konstant. Sedimenteringshastigheten ( $v_{\text{sed}}$ ) i varje lager beskrivs med en så kallad dubbelexponentialfunktion (Takács et al., 1991).

TVå större ändringar i eftersedimenteringsmodellen behövde göras för att beskriva SBR-processen: omblandning av lagren och variabel lagervolym.

#### 3.1.1 Omblandning av lagren

När nytt reaktvatten pumpas in i SBR-reaktorn ( $Q_{\text{FYLL}}$ ) under *fillnadsfasen* antas det att reaktorn är totalomblandad, se figur 3-1A. Efterföljande *reaktionsfaser* är också omblandade antingen genom mekanisk omrörning (anoxisk eller anaerob reaktion) eller genom luftning (aerob reaktion).

Omblandningen är modellerad fenomenologiskt med ett fiktivt recirkulationsflöde ( $Q_{\text{MIX}}$ ) som går från reaktorns botten och uppåt. Det flöde som lämnar det översta lagret leds tillbaka till botten av reaktorn och genom att välja ett relativt högt recirkulationsflöde kan en omblandning av reaktorn simuleras.



Figur 3-1 A: SBR-modellen i omblandat läge. B: SBR-modellen i sedimenteringsläge.

### 3.1.2 Sedimenteringsfas

När inget nytt vatten pumpas in i reaktorn och då luftning och omrörning ej är aktiverade går SBR-reaktorn in i *sedimenteringsfasen*. I modellen sker detta genom att det ovan nämnda recirkulationsflödet  $Q_{\text{MIX}}$  stängs av. Partikulärt material sjunker då mot botten och en klarfas uppstår i toppen av SBR-reaktorn, se figur 3-1B.

### 3.1.3 Variabel reaktorvolym

När SBR-reaktorn fylls, när kemikalier tillsätts och när dekantat eller överskottsslam tas ut ändras den totala vattenvolymen. Till skillnad från den ursprungliga eftersedimenteringsmodellen så behöver volymen i den nya SBR-modellen därför kunna variera.

Under fyllnadsfasen antas omblandade förhållanden och volymökningen fördelas jämt mellan modellens lager.

Under *dekanteringsfasen* blir modellen något mer komplicerad, se figur 3-1B. Utgående flöde fördelas inte jämnt över reaktorvolymen utan dekanteringsflödet ( $Q_{\text{DEK}}$ ) startar från det översta lagret där slamkoncentrationen är låg. Höjden av detta minskar då i modellen och när lagret är "tömt" flyttar dekanteringen till lagret under.

Överskottsslamuttaget ( $Q_{\text{OS}}$ ) sker på samma vis men här startar pumpningen från det understa lagret där slamkoncentrationen är högst. När det understa lagret är tomt pumpas slam från lagret ovanför.

## 3.2 MBBR-modellen

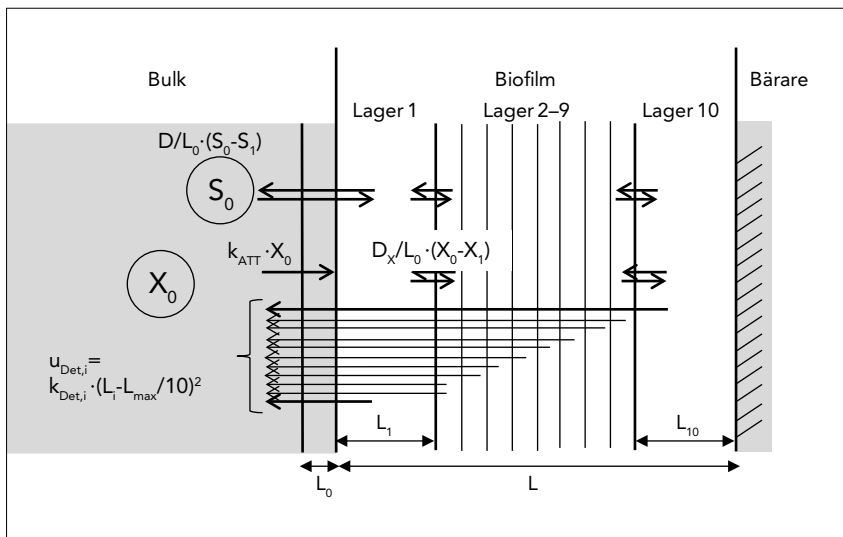
Den biofilmmodell som implementerats i detta projekt är inspirerad av modellen i den kommersiellt tillgängliga simuleringsplattformen WEST 3.7.3 (DHI, 2011). Den totala MBBR-volymen antas bestå av en bulkfas (vattnet/vätskan), bärarmaterial och biofilm, se figur 3-2. Med modellen simuleras biologiska reaktioner både i bulkfas och biofilm.

### 3.2.1 Vätska/biofilmgränssnitt

I bulkvolymen (som har index 0 i figuren) skiljer modellen mellan lösta ( $S_0$ ; t.ex.  $\text{NH}_4$ ,  $\text{O}_2$ ) och partikulära ( $X_0$ ; t.ex. partikulärt COD, biomassa) modellkomponenter.

De lösta komponenterna transporteras mellan biofilm och bulk genom diffusion genom en tunn vätskefilm närmast biofilmen och varje löst komponent i modellen har en specifik diffusionskoefficient ( $D$  [m/d]). Om ämnet förbrukas inne i biofilmen kommer transporten gå från bulk till biofilm. Om ämnet produceras inne i biofilmen kommer diffusionen tvärtom att gå i motsatt riktning, från biofilmen och ut till bulkfasen. Tjockleken på vätskefilmen närmast biofilmen ( $L_0$  [m]) är en modellparameter som är avgörande för biofilmsystemets kapacitet och begränsar till exempel hur mycket syre som diffunderar in i biofilmen. I verkligheten beror denna av faktorer som omrörning/turbulens och utformning av bärarmaterialet.





Figur 3-2 Principerna för den implementerade MBBR-modellen.

Partikulära komponenter i modellen antas inte diffundera till biofilmen. Istället modelleras transport av partiklar från bulk till biofilm som ”vidhäftning” med en hastighetsparameter  $k_{ATT}$  [1/d].

### 3.2.2 Biofilm

Biofilmen är modellerad som en endimensionell struktur i vilken koncentrationsgradienten simuleras genom 10 var för sig homogena lager. Mellan dessa transporteras samtliga ämnen som ingår i modellen genom diffusion. De partikulära modellkomponenterna antas ha en gemensam (och låg) diffusionskoefficient i biofilmen,  $D_x$  [m/d].

I varje lager sker de reaktioner som definieras av reaktionsmodellen (se kapitel 4). Detta innebär att biomassa kan nybildas varvid biofilmen växer till. Biofilmens tjocklek beräknas med kännedom om den totala biofilmytan och en antagen biofilmsdensitet. Vid en viss maximal tjocklek (modellparametern  $L_{MAX}$  [m]) antas biofilm lossna och återförs då till bulkfasen. Hastigheten ( $u_{Det}$  [m/d]) beräknas med hjälp av parametern  $k_{Det}$  [1/d].

## 4 Reaktionsmodeller: utveckling och beskrivning

Reaktionsmodellen för vattenlinjen i BSM-systemet är ASM1 (Activated Sludge Model no. 1; Henze et al., 1987). Detta är en tämligen förenklad modell men samtidigt praktisk och det är den i särklass mest använda modellen för simulering av biologisk oxidation av organiskt material och kväverening.

Lustgasbildning ( $N_2O$ ) ingår inte i ASM1 och därför har ASM1 utvidgats med ett antal reaktioner i detta arbete, se avsnitt 4.2–4.5. Inte heller anammoxreaktionen beskrivs i ASM1. Den reaktionsmodell för anammox som använts i detta projekt redovisas i avsnitt 4.6.

### 4.1 ASM1

Följande biologiska reaktioner ingår i ASM1:

1. Tillväxt av heterotrofa organismer ( $X_H$ ) under aeroba förhållanden (oxidation av organiskt material).
2. Tillväxt av heterotrofa organismer ( $X_H$ ) under anoxiska förhållanden (denitrifikation).
3. Tillväxt av autotrofa organismer ( $X_A$ ) under aeroba förhållanden (nitrifikation).
4. Avdödning av heterotrofa ( $X_H$ ) organismer.
5. Avdödning av autotrofa ( $X_A$ ) organismer.
6. Omvandling av organiskt bundet kväve till ammoniumkväve.
7. Hydrolys av partikulärt organiskt material.
8. Hydrolys av partikulärt organiskt kväve.

I ASM1 oxideras ammonium ( $NH_4^+$ ) direkt till nitrat ( $NO_3^-$ ) vid nitrifikation. Vid denitrifikation reduceras vidare  $NO_3^-$  direkt till kvävgas ( $N_2$ ). För att inkludera produktion och emission av lustgas i BSM2 utvecklades BSM2G (Flores-Alsina et al., 2011; 2014). I denna modell användes en utökad version av ASM1 med dels reaktionsmodellen ASMN (Activated Sludge Model for Nitrogen; Hiatt and Grady, 2008) dels principerna för autotrof denitrifikation i enlighet med Mampaey et al. (2013).

Det finns ett antal anledningar till varför ASMN är en bra grund för det vidare utvecklandet av en dynamisk processmodell som kan beskriva lustgasproduktion i separata reaktvattenreningsprocesser. Dessa redovisas och diskuteras nedan. I figur 4-1 sammanfattas de viktigaste modellerade reaktionsvägarna för kväve.

## 4.2 Autotrof nitrifikation i två steg

I ASMN nitrifieras  $\text{NH}_4^+$  av autotrofa organismer i två steg. Det första steget, omvandling av  $\text{NH}_4^+$  till  $\text{NO}_2^-$ , sker genom tillväxt av ammoniumoxiderande bakterier ( $X_{\text{AOB}}$ ). Det andra steget, omvandling av  $\text{NO}_2^-$  till  $\text{NO}_3^-$ , sker genom tillväxt av nitritoxiderande bakterier ( $X_{\text{NOB}}$ ).

Flera studier har visat att förekomsten av nitrit ökar risken för lustgasproduktion (Foley et al. 2011) och det är därför viktigt att en lustgasmodell inkluderar denna komponent.

Det krävs dessutom att reaktionsmodellen inkluderar nitrit för att anamoxreaktionen skall kunna modelleras.

## 4.3 Heterotrof denitrifikation i fyra steg

En annan viktig skillnad mellan ASM1 och ASMN är att denitrifikation modelleras som en reaktion i fyra steg. Heterotrofa organismer denitrifierar  $\text{NO}_3^-$  först till nitrit ( $\text{NO}_2^-$ ), vidare till kväveoxid (NO) följt av  $\text{N}_2\text{O}$  som slutligen denitrifieras till  $\text{N}_2$  (se blå pilar i figur 4-1).

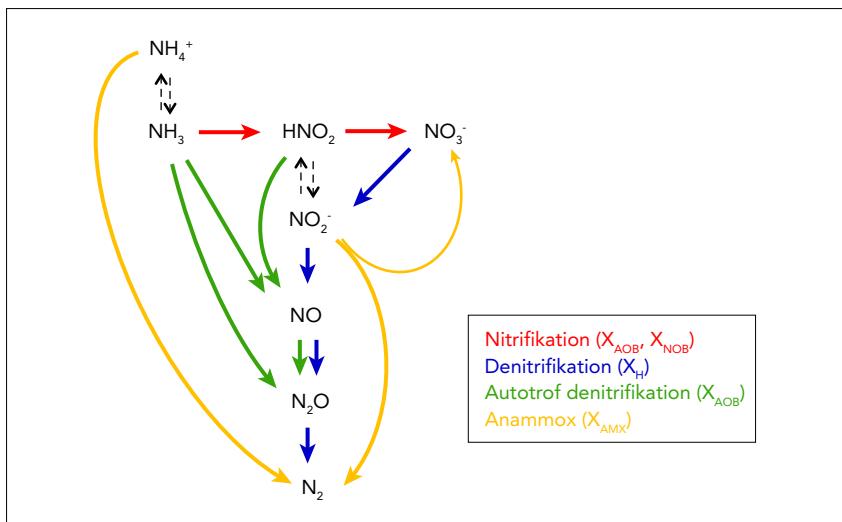
Lustgas ingår alltså som intermediär och kan ackumuleras om det sista steget i reaktionskedjan inhiberas. Denna reaktionsmekanism för lustgas är välkänd och kan sägas vara "state-of-the-art". Kinetiken i reaktionerna, hur de skall modelleras och vilka parametervärden som bör användas diskuteras dock fortfarande (Pan et al., 2013; 2015).

## 4.4 $\text{NH}_3$ och $\text{HNO}_2$

Vid simulering av kväverenningsprocesser i huvudvattenlinjen är kvävekoncentrationerna ofta relativt låga och pH-värdet nära neutralt och ganska stabilt vilket innebär att man inte behöver ta någon särskild hänsyn till eventuell inhibering av biologiska reaktioner. I rejektivattensammanhang är dock fallet det motsatta och temperaturen dessutom ofta hög. Om processen är intermitterant eller indelad i zoner kan också pH värdet variera kraftigt om det inte regleras.

Därför är en tredje viktig skillnad och orsak till varför ASMN anses lämplig som grundmodell att ammoniak ( $\text{NH}_3$ ) snarare än ammonium ( $\text{NH}_4^+$ ) och salpetersyrighet ( $\text{HNO}_2$ ) snarare än nitrit ( $\text{NO}_2^-$ ) utgör substraten för AOB respektive NOB. Dessa substratkoncentrationer beräknas som funktion av  $\text{NH}_4^+$  och  $\text{NO}_2^-$  med hjälp av kemiska syra-basjämvikter samt processtemperatur och pH (Anthonisen et al., 1976).

En ökning av temperatur och/eller pH leder till ökad  $\text{NH}_3$ -koncentration och minskad  $\text{HNO}_2$ -koncentration. Höga koncentrationer av  $\text{NH}_3$  såväl som av  $\text{HNO}_2$  kan inhibera både AOB- och NOB-bakterier. För fullständig nitrifikation behöver alltså  $\text{NH}_3$  och  $\text{HNO}_2$  finnas tillgängligt i lagom höga koncentrationer, se röda pilar i figur 4-1. Som nämnts kan förekomst av nitrit ge upphov till lustgasproduktion och förutom låga slamåldrar/höga temperaturer och kraftiga ökningar i ammoniumbelastning är det främst inhibering av NOB-bakterierna som kan ge upphov till nitritackumulation.



Figur 4-1 De viktigaste reaktionsvägarna för kväve i den implementerade reaktionsmodellen.

## 4.5 Autotrof denitrifikation

Enligt ett flertal studier (Kampschreur et al., 2008; Peng et al., 2015) bildas lustgas genom så kallad autotrof denitrifikation. De senaste åren har ett antal förslag till dynamiska modeller för denna process publicerats (Mampaey et al., 2013; Ni et al., 2013b) men de ingående biologiska/kemiska mekanismerna samt hur de skall modelleras diskuteras fortfarande. En modell som är relativt accepterad, vilken är kompatibel med ASMN och som valts ut för implementering inom detta projekt, är den som publicerats i Mampaey et al. (2013).

Enligt modellen kan AOB-bakterier, som normalt *oxiderar* kvävet i  $\text{NH}_3$  till  $\text{HNO}_2$  med syre som elektronacceptor, också *denitrifiera*  $\text{HNO}_2$  först till  $\text{NO}$  och slutligen till  $\text{N}_2\text{O}$ , se gröna pilar i figur 4-1. I detta fall *reduceras* kvävet (kvävet oxidationstal minskar) vilket innebär att det samtidigt måste ske en reaktion som ger ett överskott av elektroner. I Mampaey et al. (2013) presenteras två modeller (Mampaey-A/B) för hur dessa elektroner uppstår:

- I den ena modellen (MampaeyA) bildas ett överskott av elektroner vid oxidation av  $\text{NH}_3$  till  $\text{HNO}_2$  som kan användas för den autotrofa denitrifikationen.
- I den andra modellen (MampaeyB) bidrar intracellulär nedbrytning av biomassa till ett överskott av elektroner som kan användas för den autotrofa denitrifikationen.

Till skillnad från MampaeyB så förutsätter MampaeyA aeroba förhållanden för att autotrof denitrifikation skall ske. Ett flertal studier (se sammanställning i Peng et al. (2015)) har visat att syrekoncentrationen är en viktig faktor som påverkar lustgasproduktionen och MampaeyA (gröna pilar i figur 4-1) bedömdes därför bättre representera verkligheten än MampaeyB.

MampaeyA-modellen är också lik en annan modell för autotrof denitrifikation som är under utveckling (Ni et al., 2014). Denna är dock något mer komplicerad och inkluderar till exempel ammoniumoxidation av  $\text{NH}_3$  till  $\text{HNO}_2$  med hydroxylamin,  $\text{NH}_2\text{OH}$ , som intermediär.

## 4.6 Anammoxreaktionen

Reaktionsmodellen utökades i enlighet med Hao et al. (2002) med ytterligare en typ av biomassa ( $X_{AMX}$ , anammoxbakterier) som, när syrekoncentrationen är nära noll, vid tillväxt omvandlar  $\text{NO}_2^-$  och  $\text{NH}_4^+$  till främst  $\text{N}_2$  men också  $\text{NO}_3^-$  (se de gula pilarna i figur 4-1).

Lustgas ingår inte som biprodukt eller intermediär i den modellerade anammoxreaktionen. Denna hypotes stöds av dagens kunskapsläge (Ni och Yuan, 2013).

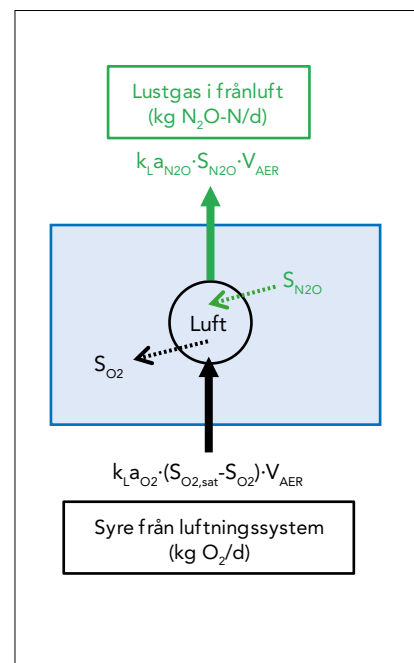
## 4.7 Stripping av lustgas

Stripping är en kemisk/fysikalisk process där en komponent i vätskefas absorberas till gasbubblor. Genom denna process överförs den biologiskt bildade lustgasen i löst form till gasfas och lämnar reningsprocessen med frånluften. Den strippingmodell som implementerats förutsätter kännedom om masstransporten av syre från luftbubblorna till vätskefasen, se figur 4-2.

Syresättningsmodellen följer den modell som ingår i BSM-systemet. Från luftbubblorna (streckad cirkel) som innehåller syre motsvarande en viss mättnadskoncentration ( $S_{O_2,SAT}$  [mg  $\text{O}_2$ /l]) transporteras syre ut till vätskefasen som löst syre ( $S_{O_2}$  [mg  $\text{O}_2$ /l]). Den drivande kraften för diffusionen är koncentrationsgradienten, det vill säga skillnaden i syrekoncentration mellan luftbubblan och vätskan,  $S_{O_2} - S_{O_2,SAT}$ . Masstransportkoefficienten för syrgas  $k_L a_{O_2}$  (enhet *per tidsenhet* t.ex.  $\text{d}^{-1}$ ) är en sammanslagning av flera parametrar och innehåller information om syrgasens benägenhet att diffundera samt luftbubblornas storlek och antal. I den implementerade modellen styrs syretillförseln till systemet genom att  $k_L a_{O_2}$  är definierad som en indataparameter vilken kan varieras/kontrolleras.

Strippingmodellen för lustgas är implementerad i enlighet med Foley et al. (2011) och bygger på samma principer som syresättningsmodellen. Eftersom koncentrationen av  $\text{N}_2\text{O}$  i luft är mycket låg antas denna i modellen vara noll och masstransporten sker genom diffusion i motsatt riktning jämfört med syret, det vill säga från lösning till gasfas (figur 4-2). Den drivande kraften blir med detta antagande koncentrationen av löst lustgas ( $S_{N_2O}$  [mg N/l]). Masstransportkoefficienten för lustgas  $k_L a_{N_2O}$  (enhet *per tidsenhet* t.ex.  $\text{d}^{-1}$ ) antas endast skilja sig från  $k_L a_{O_2}$  på grund av skillnader i de två komponenternas diffusivitet och beräknas i modellen som  $k_L a_{N_2O} = 0.91 \cdot k_L a_{O_2}$  (Flores-Alsina et al., 2011). Det simulerade massflödet av lustgas i frånluften ( $F_{N_2O}$  [kg N/d]) ges av  $F_{N_2O} = k_L a_{N_2O} \cdot S_{N_2O} \cdot V_{AER}$ , där  $V_{AER}$  [ $\text{m}^3$ ] är den luftade volymen.

Lustgas strippas alltså endast något långsammare än syrgas löser sig i vattnet. Med denna modell blir därför strippingen en snabb process.



Figur 4-2  
Syresättningsmodellen i BSM-systemet och den implementerade stripping-modellen för lustgas.

## 5 SBR-processen på Slottshagens avloppsreningsverk

Den första mätdataserien (Stenström et al., 2014) som simuleras med modellen kommer från det separata rejektvattenreningssteget på Slottshagens avloppsreningsverk i Norrköping. Den biologiska reningsprincipen är nitrifikation/denitrifikation vilken drivs i en SBR (Satsvis Biologisk Reaktor) och refereras hädanefter till som ”SBR-processen”.

Endast delar av den fullständiga experimentserien är modellerade. Fler resultat finns beskrivna i Stenström et al. (2014).

### 5.1 Processbeskrivning

SBR-reaktorn (arbetsvolym ca 950 m<sup>3</sup>) behandlar rejektvatten från en anaerob rötningsprocess och föregås av en utjämningsbassäng. Rejektvattenflödet är ungefär 180 m<sup>3</sup>/d och ammoniumkoncentrationen cirka 1 000 mg NH<sub>4</sub>-N/l.

Processen drivs normalt med en total cykeltid om 8 h, det vill säga tre cykler per dygn, se också figur 5-1:

*0,0–3,5 h: Denitrifikation*

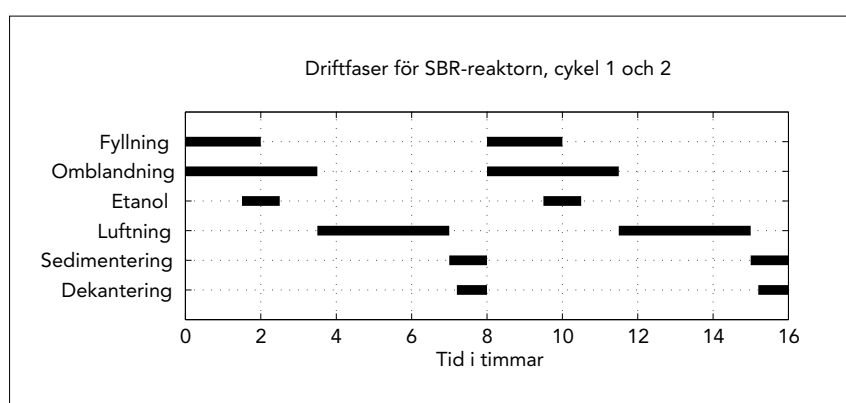
- 0,0–2,0 h: Fyllning.
- 1,5–2,5 h: Tillsats av etanol.

*3,5–7,0 h: Nitrifikation*

- 3,5–7,0 h: Luftning.

*7,0–8,0 h: Dekantering och uttag av överskottsslam*

Överskottsslam tas ut så att den totala slamåldern är i storleksordningen 15 d.



Figur 5-1 Driftfaser för den modellerade SBR-processen (Lindblom et al., 2013). X-axeln visar tid i timmar.

#### 5.1.1 Mätkampanjer

Totalt tre mätkampanjer genomfördes vid Slottshagen. Två av dessa startade då processen var påverkad för diverse driftproblem vilket gjorde att

de inte var lämpliga för modellkalibrering; både mätkampanj 1 och 3 startade efter att processen drivits utan eller med låg etanoldosering vilket hade som följd att pH var lågt och  $\text{HNO}_2$ -koncentrationen hög. Mätkampanj 2 startade då processen var i ett mer normalt tillstånd och valdes ut för kalibrering.

Den utvalda kampanjen utfördes under perioden 20–22 mars 2012 och omfattade totalt fem SBR-cykler om vardera åtta timmar. Själva experimentet gick ut på att sänka syrebövärdet i cykel 2 (0,9 mg/l) och cykel 4 (0,5 mg/l). I cykel 1, cykel 3 och cykel 5 luftades SBR-reaktorn till det normala syrebövärdet, 2 mg/l.

## 5.2 Indata till SBR-modellen

### 5.2.1 Rejektvattenflöde

Med kännedom om SBR-reaktors area och vattennivåmätningar beräknas att 60 m<sup>3</sup> rejecktatten pumpas in i reaktorn under 2 h. Med tre cykler per dygn motsvarar detta då ett dygnsflöde på 180 m<sup>3</sup>/d.

### 5.2.2 Koncentrationer i orenat rejecktatten

Flera stickprov på inkommande rejecktatten togs och analyserades med avseende på traditionella parametrar till exempel  $\text{NH}_4\text{-N}$ ,  $\text{NO}_3\text{-N}$  och COD. Resultat från dessa analyser redovisas i tabell 5-1 som medelvärden.

Från mätresultaten syns att en stor del av det organiska materialet i rejecktattnet är löst, alltså inte partikulärt. Av den totala lösta COD-koncentrationen i rejecktattnet återfinns relativt mycket i dekantatet (ca 400 mg/l) och i modellen har detta antagits vara inert COD som inte kan utnyttjas av mikroorganismerna.

Huvuddelen av kvävet föreligger i form av ammoniumkväve och organiskt bundet kväve. Den totala kvävebelastningen är 223 kg Tot-N/d eller 190 kg  $\text{NH}_4\text{-N}$ /d.

Fosfor ingår inte som variabel i den modell som använts.

Rejecktattnets naturliga innehåll av alkalinitet, 5 200 mg  $\text{HCO}_3$ /l, är inte tillräcklig för att buffra nitrifikations/denitrifikationsprocessen vilket framgår av loggade pH-värden från reaktorn (se figur 5-2A).

### 5.2.3 Luftning och syrekoncentrationer

Syrekoncentrationen i processen har stor inverkan på i princip alla biologiska reaktioner och det är därför viktigt att de värden som används är riktiga. Ofta används därför loggade syrekoncentrationer som direkt indata till modeller vid kalibrering.

I detta fall är det dessutom viktigt att modellera en realistisk syreöverföring eftersom strippingen av lustgas i modellen är proportionell mot denna, se också avsnitt 4.7. Loggade syrekoncentrationer (figur 5-2B) har därför använts som indata till den regulator som styr syreöverföringen. På detta sätt har syrekoncentrationer i enlighet med mätdata använts samtidigt som luftningen/syreöverföringen simulerats.

Tabell 5-1  
Medelkoncentrationer i orenat rejecktatten under de modellerade SBR-cyklerna. Enhet: mg/l.

Parameter	Värde
SS	205
COD	1070
COD filtr	709
Tot-N	1240
$\text{NH}_4\text{-N}$	1058
$\text{NO}_3\text{-N}$	2,8
$\text{NO}_2\text{-N}$	0,3
Tot-P	63
$\text{PO}_4\text{-P}$	53
$\text{HCO}_3$	5200

### 5.2.4 Etanoldosering

Rejektvattnet innehåller för lite biologiskt tillgängligt organiskt material och under delar av denitrifikationsfasen tillsätts därför etanol. Resultatet blir en högre total kvävereningsgrad och produktion av alkalinitet. Detta är viktigt eftersom nitrifikationsprocessen förbrukar alkalinitet vilket medför att pH-värdet sjunker.

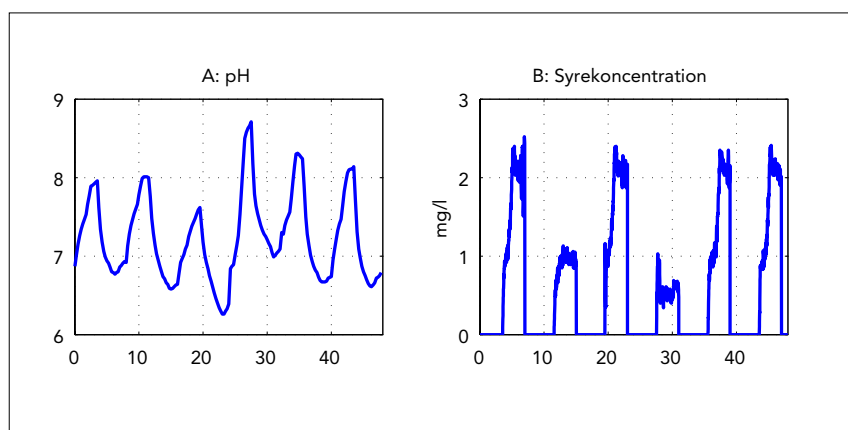
COD-innehållet i den tillsatta etanolen varierar. Under den modellerade mätkampanj 2 var koncentrationen 1 460 g COD/l.

### 5.2.5 Temperatur

Temperaturen i reaktionsvolymen påverkar hastigheten av alla ingående biologiska processer. Under mätkampanj 2 varierade temperaturen mellan 29,9 och 30,8 °C. I modellkalibreringen har en konstant temperatur motsvarande medelvärdet, 30,3 °C, använts.

### 5.2.6 pH

I dagsläget finns ingen möjlighet att beräkna pH-värdet i modellen. Därför var det nödvändigt att använda de uppmätta pH-värdena som indata till modellen. På Slottshagen som drivs intermittent varierar pH-värdet ganska kraftigt mellan 6,2 och 8,7, se figur 5-1A.



Figur 5-2 Dynamiska indata för pH (A) och syrekonzentration (B) som använts för modellkalibreringen. X-axeln visar tid i timmar.

## 5.3 Kalibrering

I enlighet med beskrivningen av reaktionsmodellen (kapitel 4) tycks samtliga fyra modellerade organismtyper, heterotrofa organismer ( $X_H$ ), autotrofa organismer ( $X_{AOB}$ ), nitritoxiderande organismer ( $X_{NOB}$ ) och anammoxorganismer ( $X_{AMX}$ ) ha en direkt eller indirekt påverkan på lustgasbildningen. I fallstudien med SBR-rening vid Slottshagens ARV antas dock inte AMX vara aktiva eftersom slamåldern inte är tillräckligt lång.



### 5.3.1 Mätdata för kalibrering

För att kalibrera tillväxtkinetiken för de tre aktuella organismtyperna ( $X_{\text{H}}$ ,  $X_{\text{AOB}}$  och  $X_{\text{NOB}}$ ) har simulerade koncentrationer jämförts med analysresultat från stickprov tagna från SBR-reaktorn var 30:e–60:e minut. De analyser som använts är  $\text{NH}_4\text{-N}$ ,  $\text{NO}_3\text{-N}$  och  $\text{NO}_2\text{-N}$ .

Mätningar av lustgas i löst form ( $S_{\text{N}_2\text{O}}$ ) fanns tillgängliga i form av on-linevärden. Enheten på data från mätinstrumentet var  $\mu\text{mol/l}$  vilket omvandlades till  $\text{mg/l}$  med sambandet  $1 \text{ mol N}_2\text{O} \Leftrightarrow 28 \text{ g N}_2\text{O-N}$ .

Även lustgashalten i frånluften från SBR-reaktors vattenyta undersöktes. En del av frånluften samlades upp i en mätthuv och analyserades on-line med avseende på  $\text{N}_2\text{O}$ . Enheten på koncentrationsdata från mätinstrumentet ( $C_{\text{N}_2\text{O,luft}}$ ) var ppm eller  $\mu\text{mol N}_2\text{O/mol luft}$ . Med kännedom om luftflödet genom huvan kunde då det i frånluften uppmätta massflödet av lustgas eller lustgasemissionen,  $F_{\text{N}_2\text{O}}$  ( $\text{kg N}_2\text{O-N/h}$ ), beräknas:

$$F_{\text{N}_2\text{O}} = Q_{\text{luft}} \cdot \rho_{\text{luft}} / M_{\text{luft}} \cdot C_{\text{N}_2\text{O,luft}} \cdot 10^{-6} \cdot 2 \cdot M_{\text{N}} \cdot A_{\text{SBR}} / A_{\text{mätthuv}}$$

$Q_{\text{luft}}$	– Luftflöde genom mätthuv,	uppmätt ( $\text{Nm}^3 \text{ luft/h}$ )
$\rho_{\text{luft}}$	– Densitet för luft,	$1200 \text{ g luft/Nm}^3 \text{ luft}$
$M_{\text{luft}}$	– Molmassa för luft,	$29 \text{ g luft/mol luft}$
$C_{\text{N}_2\text{O,luft}}$	– Koncentration $\text{N}_2\text{O}$ i luft,	uppmätt (ppm, $\mu\text{mol N}_2\text{O/mol luft}$ )
$M_{\text{N}}$	– Molmassa för N,	$14 \text{ g N/mol N}$
$A_{\text{mätthuv}}$	– Area mätthuv,	$0,81 \text{ m}^2$
$A_{\text{SBR}}$	– Area SBR,	$151,7 \text{ m}^2$

### 5.3.2 Kalibrering av modellparametrar

Värdet på vissa modellparametrar ändrades manuellt för att modellen skulle överensstämma så bra som möjligt med uppmätta värden. Kalibreringsproceduren följde tre steg med ordning enligt nedan:

- Nitrifikation:** Kinetiska parametrar för  $X_{\text{AOB}}$  och  $X_{\text{NOB}}$  kontrolleras/justeras så att simulerade *hastigheter* för ammoniumoxidation och nitrat/nitritproduktion under *aeroba förhållanden* stämmer överens med de som ges av uppmätta halter  $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{NO}_3^-$  och  $\text{NO}_2^-$ . Överskottsslamutaget justerades så att slamåldern i modellen stämde överens med den för processen uppskattade, 15 d.
- Denitrifikation:** Kinetiska parametrar för  $X_{\text{H}}$  samt andelen inkommande lättillgängligt COD kontrolleras/justeras så att simulerade *koncentrationer* under *anoxiska förhållanden* stämmer överens med de som ges av uppmätta halter  $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{NO}_3^-$  och  $\text{NO}_2^-$ .
- Lustgasbildning:** De relativt okända värdena på  $\text{N}_2\text{O}$ -relaterade parametrar väljs så att simulerad lustgasbildning under först anoxiska och därefter aeroba förhållanden stämmer överens med  $\text{N}_2\text{O}$ -data i SBR-reaktorn samt frånluften.

Samtliga parametervärden för modellen finns angivna i appendix.

## 5.4 Resultat

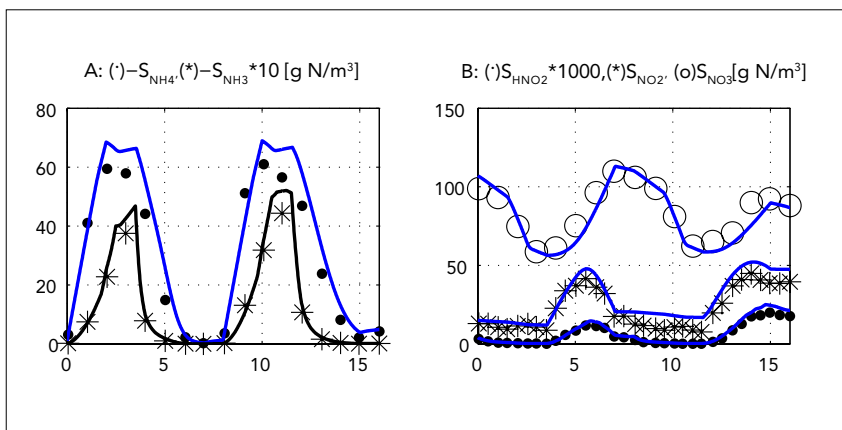
I figur 5-3A–B och figur 5-4A–B visas resultatet av modellkalibreringen för cykel 1 och cykel 2.

### 5.4.1 Ammonium ( $\text{NH}_4^+/\text{NH}_3$ ), nitrit ( $\text{NO}_2^-/\text{HNO}_2$ ) och nitrat ( $\text{NO}_3^-$ )

Figur 5-3A visar uppmätta och simulerade koncentrationer av  $\text{NH}_4\text{-N}$  och  $\text{NH}_3\text{-N}$ . Koncentrationen stiger under de första två timmarna av varje cykel då SBR-reaktorn fylls med orenat rejektivatten. Tillväxten av AOB-bakterier startar omedelbart när luftningen går igång vid  $t=3,5$  h. Vid tillväxt oxideras  $\text{NH}_3$  vilket syns i och med att den uppmätta och simulerade koncentrationen av  $\text{NH}_4\text{-N}$  minskar. Ur figuren ser man också att  $\text{NH}_3\text{-N}$ -koncentrationen avtar signifikant snabbare än  $\text{NH}_4\text{-N}$ -koncentrationen. Detta beror på att nitrifikationen förbrukar alkalinitet vilket gör att pH sjunker och att jämvikten  $\text{NH}_3 \rightleftharpoons \text{NH}_4^+$  förskjuts åt höger.

Figur 5-3B visar uppmätta och simulerade koncentrationer av  $\text{NO}_3\text{-N}$ ,  $\text{NO}_2\text{-N}$  och  $\text{HNO}_2\text{-N}$ . Nitratkoncentrationen sjunker först långsamt på grund av utspädning under fyllnadsfasen och denitrifikation med den kolkälla som finns tillgänglig i det obehandlade rejektivattnet. Under perioden  $t=1,5\text{--}2,5$  doseras extern kolkälla till processen och denitrifikationshastigheten ökar markant. Under den anoxiska fasen som pågår i 3,5 h är nitritkoncentrationen nästan konstant vilket tyder på att nitrit är en intermediär som bildas och förbrukas med ungefär samma hastighet.

När processen blir aerob bildas  $\text{NO}_2^-/\text{HNO}_2$  av AOB-bakterierna. Oxidationen av  $\text{HNO}_2$  till  $\text{NO}_3^-$ , som sker genom tillväxt av NOB-bakterierna, är något långsammare vilket leder till en temporär ackumulering av nitrit.



Figur 5-3 A–B: Uppmätta (markeringar) och simulerade (linjer) koncentrationer av olika kvävefraktioner i SBR-processen. X-axeln visar tid i timmar.

### 5.4.2 Lustgasproduktion under anoxiska förhållanden

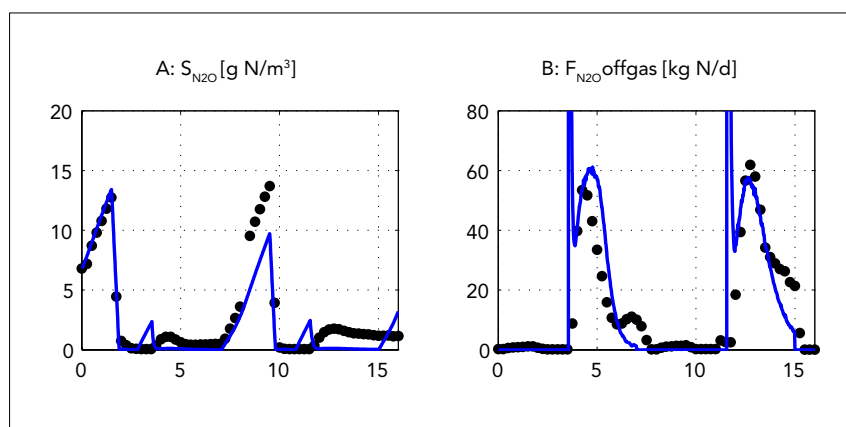
Under anoxiska förhållanden, och med endast den kolkälla som finns tillgänglig naturligt i rejektivattnet, bildas enligt mätresultaten mycket lustgas. Ur figur 5-4A syns att koncentrationen löst lustgas stiger fram tills dess att etanol tillsätts (vid  $t=1,5$  h). Den mängd  $\text{NO}_3^-$  som denitrifieras under samma period är endast något större än den mängd  $\text{N}_2\text{O}$  som ackumuleras.

En tänkbar förklaring till  $N_2O$ -bildning under anoxiska förhållanden är alltså att det sista steget i den heterotrofa denitrifikationskedjan, denitrifikation av  $N_2O$  till  $N_2$ , är inhiberad. Det är utifrån denna förklaringsmodell som simuleringsresultaten är genererade.

Frågan är då vad som ger upphov till den nästan fullständiga inhiberingen. När etanol tillsätts vid  $t=1,5$  h reduceras löst  $N_2O$  mycket snabbt och resultaten tyder därmed på att tillgång till och/eller typ av kolkälla påverkar huruvida  $N_2O$  ackumuleras. För att kunna simulera den skarpa svängningen mellan fullständig (utan etanol) och ingen (med etanol) inhibering var det nödvändigt att inkludera etanol som en egen COD-variabel med unika kinetiska parametrar.

Det bör påpekas att  $N_2O$ -ackumuleringen inte avtog i de senare cyklerna i mätkampanjen (data visas ej), trots att samma mängd och typ av kolkälla användes. I litteraturen finns flera andra möjliga orsaker till inhibering listade. I den ursprungliga ASM<sub>N</sub>-modellen anges höga halter av  $NO$  som möjlig orsak till inhibering.  $NO_2^-$  (von Schulthess et al., 1994) och  $HNO_2$  (Zhou et al., 2008) har också visats kunna inhibera denitrifikation av  $N_2O$  till  $N_2$ .

Enligt simuleringsresultaten förbrukas den tillsatta kolkällan innan denitrifikationsfasen är slut vilket i figur 5-4A indikeras genom att simulerad halt löst  $N_2O$ -N återigen ackumuleras. Detta fenomen syns inte i mätdata. Sannolikt skulle en bättre överensstämmelse kunna erhållas efter ytterligare kalibrering av modellparametervärdena.



Figur 5-4 Uppmätta (markeringar) och simulerade (linjer) koncentrationer av  $N_2O$ -N i vattenfasen (A) samt lustgasemissioner (B) i cykel 1 och cykel 2. X-axeln visar tid i timmar.

#### 5.4.3 Lustgasproduktion under aeroba förhållanden

I figur 5-4B visas uppmätta och simulerade massflöden av lustgas i frånluften från SBR-reaktorn. I cykel 1 och cykel 2 avgick 3,44 kg  $N_2O$ -N respektive 4,95 kg  $N_2O$ -N som lustgas under de luftade faserna. Givet den totala kvävebelastningen om cirka 74 kg Tot-N/cykel motsvarar den emitterade mängden 4,5–6,5 % av inkommande kvävebelastning vilket är i samma storleksordning som de emissioner som uppmättes på Sjölunda ARV (Lindblom et al., 2015).

Enligt mätningarna av lustgas i vattenfasen, vilka var mycket låga innan luftningen startade (figur 5-4A) producerades den emitterade lustgasen under den aeroba fasen.

Även modellen bekräftar att den emitterade lustgasen produceras under aeroba förhållanden. Enligt denna förklaras lustgasproduktionen under aeroba förhållanden av autotrof denitrifikation (avsnitt 4.5); en viss del ammoniak ( $\text{NH}_3$ ) oxideras samtidigt som  $\text{HNO}_2$  reduceras i två steg, först till NO och därefter till  $\text{N}_2\text{O}$ .

Givet den teoretiska beskrivningen av strippingen (se avsnitt 4.7) skall eventuellt ackumulerad lustgas transporteras från vätskefasen till frånluften snabbt vid luftning. Detta skulle i så fall ge upphov till en skarp spik i emissionsprofilen vilket inte syns i mätdata (figur 5-4B). Simuleringen uppvisar dock en sådan spik på grund av att  $\text{N}_2\text{O}$  ackumulerades anoxiskt då den externa kolkällan i modellen tagit slut.

#### 5.4.4 Cykel 3–5

Cykel 3–5 (data visas inte) karakteriseras av högre lustgasemissioner som tyder på att nära 100 % av inkommande kväve omvandlas till lustgas. Enligt mätdata sammanfaller dessa höga emissioner med att  $\text{N}_2\text{O}$  inte denitrifieras vid etanoltillsats i cykel 3–5. Orsaken till att denitrifikationen inhiberas under cykel 3–5 är inte fastställd, men tänkbara förklaringar är kraftigt fluktuerande pH-värden samt stigande nitratkoncentration. För ytterligare diskussion om dessa resultat hänvisas till Stenström et al. (2014) och Jönsson et al. (2015).

### 5.5 Exempel på modelltillämpning

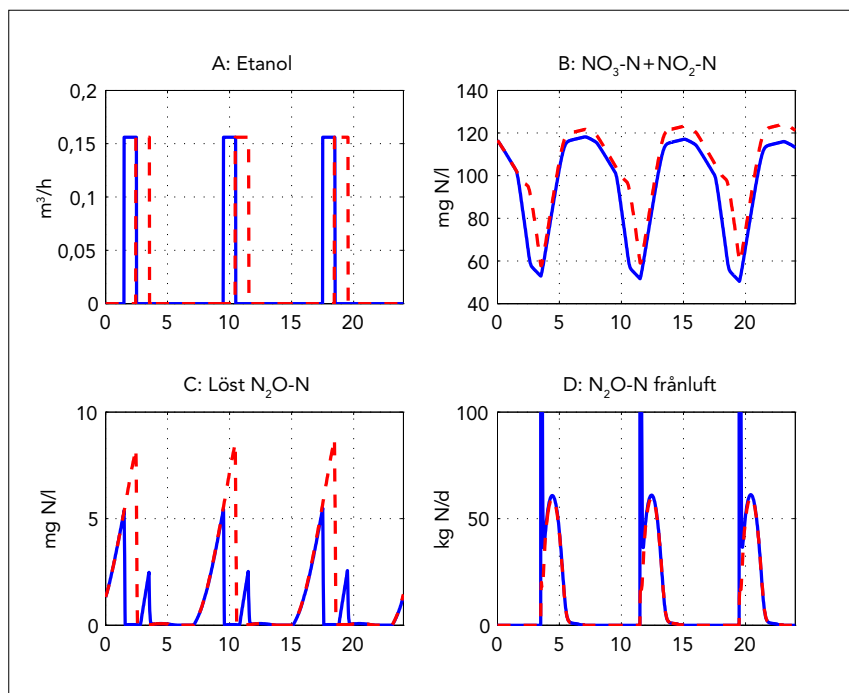
Nedan visas med två simuleringar exempel på hur den utvecklade modellen kan användas. Slutsatserna är preliminära tills dess man vet säkert hur lustgas bildas och/eller när scenarierna validerats av mätningar i fullskala.

*Scenario 0:* Eftersom pH ännu inte kan beräknas i modellen har det i simuleringarna antagits att pH-värdet regleras till ett konstant värde (7.2). Syrebörvärdet är också konstant (2 mg/l). I övrigt är alla inställningar samma som i kalibreringen ovan.

#### 5.5.1 Ny drifrutin för etanoldosering (scenario 1)

Data från vissa av cyklerna på Slottshagens reningsverk indikerar att  $\text{N}_2\text{O}$  denitrifieras mycket snabbt vid tillsats av extern kolkälla i form av etanol. Enligt den utvecklade modellen finns en risk att  $\text{N}_2\text{O}$  kan ackumuleras anoxiskt om kolkällan tar slut innan luftningen startar. Risken för att detta fenomen skall uppstå kan då eventuellt minskas genom att senarelägga etanoldoseringen i cykeln. Målet med denna enkla styrstrategi blir att bibehålla etanoldoseringen fram till dess att luftningen startat. I figur 5-5A–D visas resultatet av denna strategi.

Notera att den totala mängden etanol som doseras i scenario 1 (röd streckad linje) är densamma som i det ursprungliga scenario 0. Doseringen är förskjutet med cirka 1 h så att denna fortgår till dess att luftningen startar (A).



Figur 5-5A–D Resultat av simulering med etanoldosering förskjuten 1 h framåt i cykeln (scenario 1, röd streckad linje) jämfört med ursprunglig driftstrategi (scenario 0, blå heldragen linje). X-axeln visar tid i timmar. I D är y-axeln beskuren vid 100 kg N/d, den maximala emissionen är cirka 1000 kg N/d.

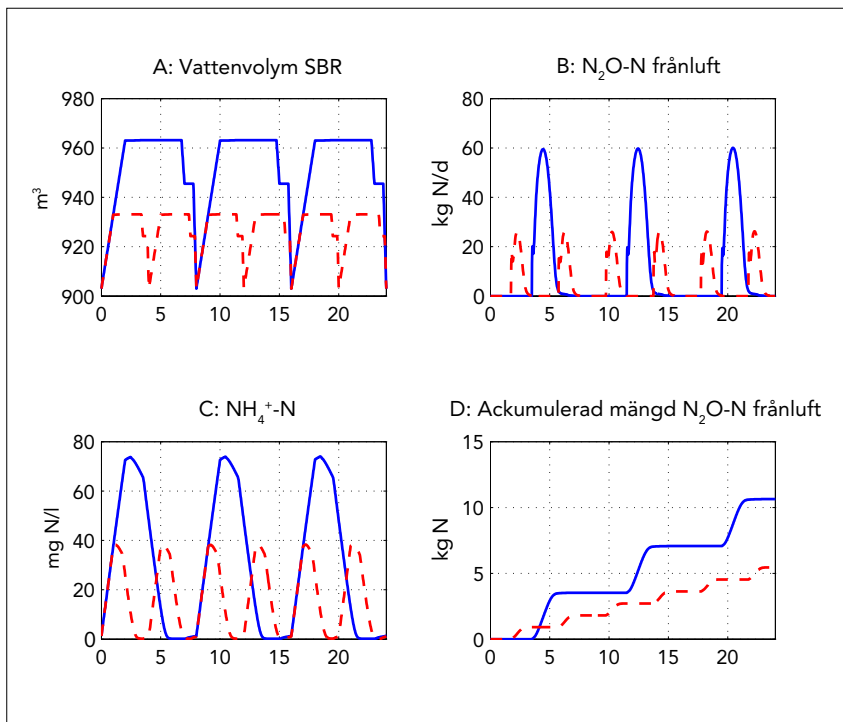
Figur 5-5B visar att den denitrifierade mängden nitrat och nitrit är ungefär densamma. Figur 5-5C visar koncentrationen av  $N_2O-N$  i vattenfasen och enligt modellen går det alltså med den testade strategin att undvika COD-begränsad denitrifikation och  $N_2O$ -ackumulation. Detta får som följd att de skarpa toppar med lustgas i frånluften, som bildas i början av luftningen, försvinner, se figur 5-5D.

Vid normaldrift (blåa linjer), grundscenariot, avgick cirka 10% av det inkommande kvävet som  $N_2O-N$ . Med den modifierade styrningen av metanoltillsats (röda linjer) kunde emissionen nästan halveras andelen minskas till 5,6%.

### 5.5.2 Förkortning av cykeltiderna (scenario 2)

Enligt den kalibrerade modellen är den aeroba lustgasproduktionen avhängig koncentrationen av  $HNO_2-N$  och  $NH_3-N$ . Ett sätt att jämna ut koncentrationerna i SBR-reaktorn är att minska den totala cykeltiden. Med modellen kan man enkelt testa effekten av en sådan styrstrategi (scenario 2) genom att minska den totala cykeltiden från, i detta fall, 8 h till 4 h.

I figur 5-6A–D visas simuleringsresultaten. I A visas vattenvolymer i SBR-reaktorn som i scenario 2 fylls dubbelt så ofta som i scenario 1. I C visas effekten på ammoniumkoncentrationen. Vid varje fyllning behöver koncentrationen bara ökas till ungefär hälften jämfört med scenario 1 eftersom nitrifikationsfaserna är dubbelt så många. I figur 5-6B, D visas den simulerade effekten på lustgasavgången. Den aeroba lustgasproduktionen blir lägre (B) med den kortare cykeltiden och den ackumulerade mängden emitterad lustgas halveras räknat på ett dygn (D).



Figur 5-6 A–D: Resultat av simulering med olika cykeltider i SBR-reaktorn. scenario 1 (blå linjer, 8 h) och scenario 2 (röda linjer, 4 h). X-axeln visar tid i timmar.

## 5.6 Optimeringsförsök i praktiken

IVL Svenska Miljöinstitutet har vid senare försök under 2012–2014 försökt optimera driften av SBR-processen på Slottshagens reningsverk (IVL, 2014) för att minska utsläppen av lustgas genom att tillsätta en konstant och något högre dos av etanol. Alltför många andra parametrar har ändrats i processen för att man med säkerhet skall kunna dra slutsatsen om insatsen lett till lägre utsläpp. Det verkar dock som att cykler med extremt höga utsläpp idag inträffar mera sällan. En annan potentiell möjlighet för att reducera lustgasemissioner från SBR-processen är att använda intermittenta luftning (20–30 minuter luftning följt av en kort anoxisk fas) inom varje SBR cykel (Rodriguez-Caballero et al., 2015). Denna princip har dock inte testats inom detta projekt.

## 6 Anammoxprocessen på Sjöstadsverket

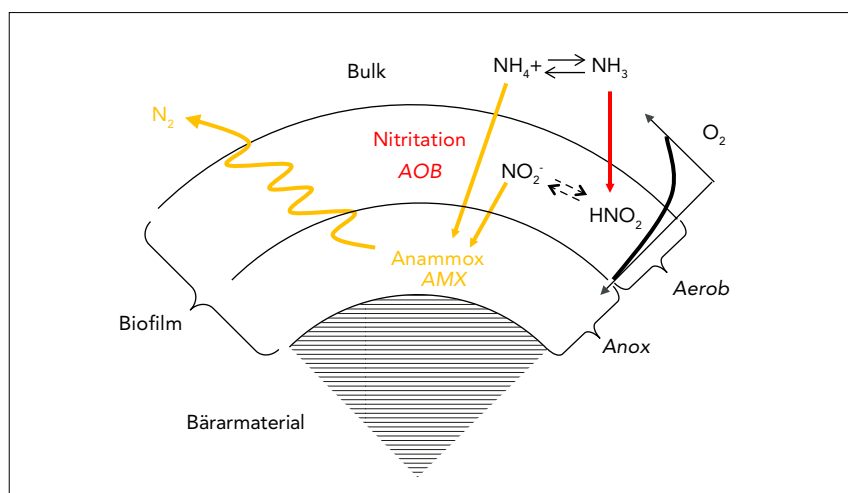
Den andra mätdataserien kommer från en rejektivattenreningsreaktor i pilotskala på Hammarby Sjöstadsverk i Stockholm. Den biologiska reningsprincipen är 1-steps nitritation/anammox vilken drivs i en omrörd volym med bärrmaterial i suspension (MBBR: Moving Bed Biofilm Reactor) och refereras hädanefter till som ”anammoxprocessen”.

Endast delar av den fullständiga experimentserien är modellerad. Fler resultat finns beskrivna i Yang et al. (2013) och Trela et al. (2015).

### 6.1 Processbeskrivning

Försöksanläggningen bestod av två parallella reaktorer som under försöken behandlade rejektivatten från den anaeroba rötningsprocessen på Bromma reningsverk i Stockholm. Den ena (R1) reaktorn luftades oftast intermittent med 45 min luftning följt av 15 min omrörning medan den andra (R2) luftades kontinuerligt. I denna rapport har resultat från den intermittent luftade reaktorn använts. I Trela et al. (2015) finns försöksupställningen beskriven i detalj.

Anläggningen drivs som en 1-steps MBBR vilket innebär att kvävereningen sker i en och samma volym, se figur 6-1. Reaktorn (200 l) är fylld med suspenderat bärrmaterial på vilken biofilm växer. Den specifika ytan på bärrmaterialet är  $500 \text{ m}^2/\text{m}^3$  och volymen bärare sådan att den totala biofilmytan i processen är  $40 \text{ m}^2$  (d.v.s. 40 % fyllnadsgrad av bärrmaterial). En del av ammoniumkvävet i rejektivattnet omvandlas till nitrit i reaktorns syresatta vattenfas och i den yttre delen av biofilmen. Anammoxreaktionen, omvandling av nitrit och ammonium till kvävgas, sker i biofilmens inre anoxiska del.



Figur 6-1 En konceptuell förenklad bild över omvandling av ammonium till kvävgas i en 1-steps anammoxprocess med biofilm. Notera att simuleringarna gjordes med en plan biofilm.

### 6.1.1 Mätkampanjer

Vid försöket som pågick under 85 dagar i R1 varierades den hydrauliska belastningen, syrebörvärdet och luftningsstrategin (intermittent/kontinuerlig luftning).

För modellkalibreringen valdes en mätsekvens med relativt låg ammoniumbelastning om  $1,7 \text{ g N}/(\text{m}^2 \text{ biofilm} \cdot \text{d})$  under tre dagar.

## 6.2 Indata till anammoxmodellen

### 6.2.1 Mätningar på orenat rejektvatten

På rejektvattnet från Bromma reningsverk i Stockholm togs stickprov cirka två gånger per vecka som analyserades med avseende på kväve och organiskt material. Medelvärden av dessa analyser redovisas i tabell 6-1.

Under den period som modellerades var inflödet  $91 \text{ l/d}$ .

Tabell 6-1

Medelkoncentrationer i rejektvatten från Bromma reningsverk för den modellerade perioden.

Parameter	Enhet	Värde
COD	mg/l	670
COD filtr	mg/l	380
NH <sub>4</sub> -N	mg/l	769

### 6.2.2 Temperatur och pH

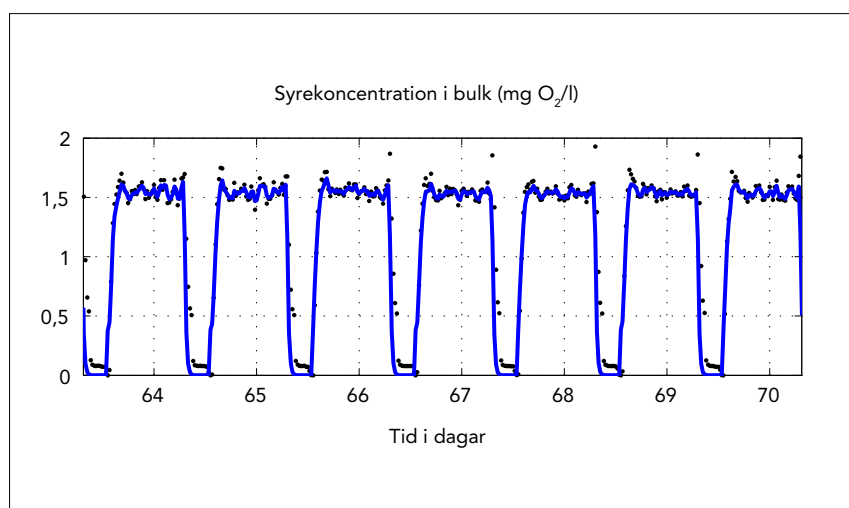
Temperaturen på rejektvattnet var konstant och  $25^\circ\text{C}$ .

Eftersom reaktorn kontinuerligt tillfördes rejektvatten var pH-variationerna små i jämförelse med SBR-processen och i modellen antogs ett konstant värde (7,1).

### 6.2.3 Luftning och syrekoncentrationer

På samma vis som i SBR-fallstudien (avsnitt 5.2.3) användes loggade syrekoncentrationer som indata till den regulator som styr syreöverföringen i modellen.

Processen drevs intermittent med 45 min luftning (börvärde  $1,5 \text{ mg O}_2/\text{l}$ ) och 15 min omrörning, se figur 6-2.



Figur 6-2 Dynamiska indata till anammoxmodellen. X-axeln visar tid i timmar.



## 6.3 Kalibrering

### 6.3.1 Mätdata för kalibrering

För att kalibrera tillväxtkinetiken för samtliga fyra organismtyper ( $X_H$ ,  $X_{AOB}$ ,  $X_{NOB}$  och  $X_{AMX}$ ) samt biofilmuppbyggnaden jämfördes simulerade koncentrationer med analysresultat från stickprov tagna i anammoxreaktorn med några dagars mellanrum. De analyser som använts är  $NH_4$ -N,  $NO_3$ -N och  $NO_2$ -N. För  $NH_4$ -N och  $NO_3$ -N fanns också on-linedata tillgängliga.

Mätningar av lustgas i vattenfasen ( $S_{N_2O}$ ) och i frånluften fanns tillgängliga i form av on-linevärden och behandlades på samma vis som för SBR-processen (avsnitt 5.3.1).

### 6.3.2 Karakterisering av rejektivattnet

Cirka 40% av inkommande COD återfanns i utgående behandlat rejektivatten och antogs vara inert i modellen.

### 6.3.3 Kalibrering av modellparametrar

I samstämmighet med Hao et al. (2002) var modellresultaten relativt okänsliga för de parametrar som avgör hur mycket biomassa som finns i systemet. Detta gäller förutsatt att mängden är tillräckligt stor för att omvandla den inkommande mängden kväve. Biofilmparametrarna som användes var:

- Maximal biofilmtjocklek = 1,2 mm.
- Densitet biofilm = 50 000 g TS/m<sup>3</sup>.
- Porositet = 50 %.

I övrigt följde kalibreringsmetodiken den för SBR-fallstudien (avsnitt 5.3.2).

Det faktum att diffusion påverkar modellresultaten komplicerar anammoxmodellen jämfört med SBR-modellen. I denna studie har standardvärden använts för samtliga diffusionsparametrar.

Tjockleken på vätskefilmen närmast biofilmen ( $L_0$  i figur 3-2) justerades så att massflödet av syre in i biofilmen genererade en nitritationskapacitet som överensstämde med mätdata. Det använda värdet (59  $\mu$ m) är realistiskt vid jämförelse med andra liknande studier, till exempel van Hulle et al. (2014) och Ni och Yuan (2013).

Samtliga parametervärden för modellen finns angivna i appendix.

## 6.4 Resultat

Nedan jämförs modellresultaten med delar av de mätdata som samlats in under experimenten och ett försök att förklara dessa med hjälp av modellen görs.

### 6.4.1 Fördelning av biomassa i biofilmen

I figur 6-3 visas hur fördelningen av biomassa i bulken och genom biofilmen ser ut enligt den kalibrerade modellen. Värdet på x-axeln motsvarar sträckan mellan biofilmens yttre gräns och bärrarmaterialet.

Prickarna till vänster om "avståndet noll" visar *koncentrationen av* biomassa (mg COD/l) i bulkfasen. Reaktorvolymen och den luftade slamåldern i bulkfasen (uppehållstiden), 1,75 dagar, gör att en viss mängd AOB-bakterier tillåts växa i bulkfasen och att nitrifikation därmed kan ske i både vattenfas och biofilm.

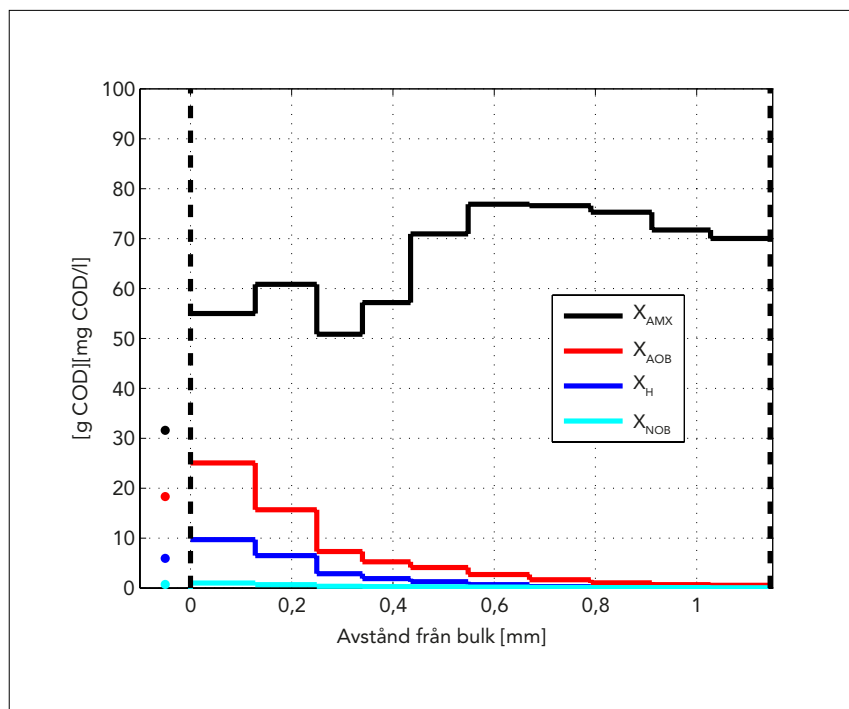
Från avståndet 0 mm till den antagna maximala tjockleken 1,2 mm visar de heldragna linjerna *mängden* biomassa (uttryckt i gram COD) som finns i respektive lager (totalt 10 stycken).

Anammoxbakterierna ( $X_{AMX}$ ) dominerar i hela biofilmen.  $X_{AMX}$  kan inte växa i syresatta miljöer men eftersom luftningen är avstängd 15 min/h bildas de även i de yttre lagren av biofilmen.

De ammoniumoxiderande ( $X_{AOB}$ ) bakterierna kräver syre för att kunna växa och återfinns främst i biofilmens yttre lager (lager 1 och 2).

Även heterotrofa organismer ( $X_{HET}$ ) finns i första hand långt ut i biofilmen nära vattenfasen. Dessa bakterier kan växa utan syre om nitrat finns tillgängligt men i modellen förbrukas löst biologiskt tillgängligt organiskt kol från det inkommande rejektvattnet snabbt i de yttre lagren och heterotroferna kan enbart växa med internt producerad kolkälla (genom hydrolys av döda bakterier) längre in.

En liten mängd NOB-bakterier som oxiderar  $HNO_2$  till  $NO_3$  återfinns i biofilmen. Både den heterotrofa och nitritoxiderande biomassaaktiviteten som förutsågs av modellen bekräftas av experimentellt utförda aktivitetsmätningar.



Figur 6-3 Punkter: Simulerade koncentrationer av biomassa i bulkvolymen [mg COD/l]. Linjer: Simulerade mängder biomassa uttryckt som g COD i modellens 10 lager. Biofilmen innehåller totalt 1 200 g TS. Varje lager innehåller  $40 \text{ m}^2 \cdot 0,12 \text{ mm} = 0,005 \text{ m}^3$  biofilm och genom att multiplicera värdena i figuren med 200 erhålls enheten g COD/m<sup>3</sup>.

## 6.4.2 Koncentrationsprofiler under luftade och oluftade förhållanden

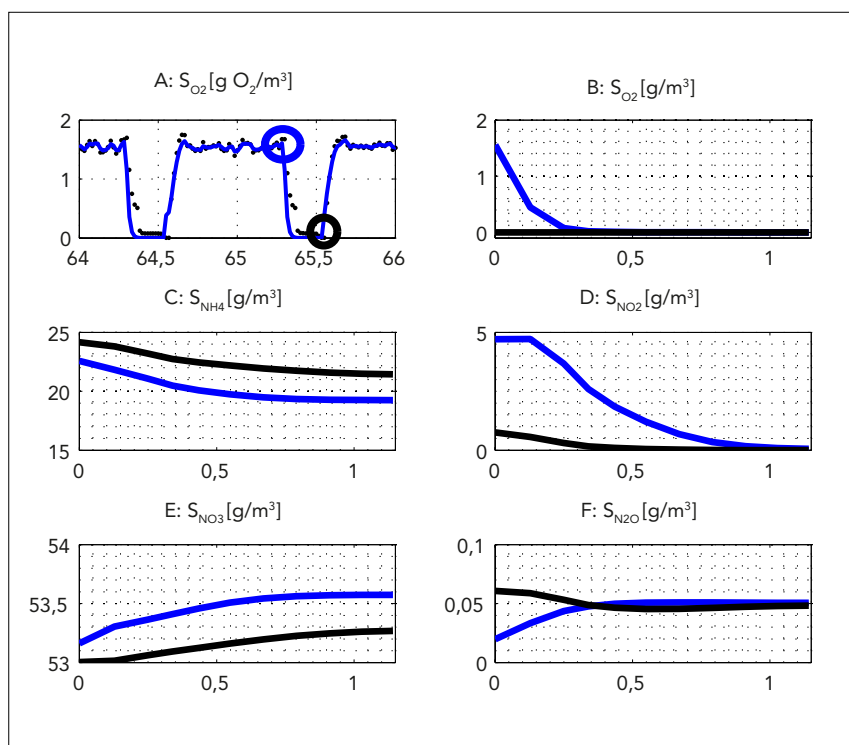
Den intermittenta syrestyrningen med 45 minuter luftning per timme resulterar i bulksyrekoncentrationer i enlighet med figur 6-4A. Den blå respektive svarta cirkeln indikerar de tidpunkter för vilka ett antal koncentrationsprofiler genom biofilmen har åskådliggjorts, se figur 6-4B–F. Profilerna visar simulerade koncentrationer i biofilmen i slutet av den luftade (blå linje) och i slutet av den oluftade fasen (svart linje).

### Syre

Syrekoncentrationsprofilerna (figur 6-4B) visar först att syret som väntat är noll genom hela biofilmen efter 15 min utan luftning. Efter 45 min luftning är bulkkoncentrationen i enlighet med mätdata 1,5 mg O<sub>2</sub>/l. Även den yttre delen av biofilmen är syresatt men syret konsumeras relativt snabbt och i den största delen av biofilmen är syrekoncentrationen nästan 0.

### Ammonium

I figur 6-4C visas motsvarande profil för ammoniumkoncentrationen. I enlighet med mätningarna varierar bulkkoncentrationen under den relativt lågbelastade simulerade perioden mellan 23 och 25 mg NH<sub>4</sub>-N/l. NH<sub>4</sub> genomtränger hela biofilmen vilket indikerar att anammoxreaktionen inte begränsas av låga ammoniumkoncentrationer.

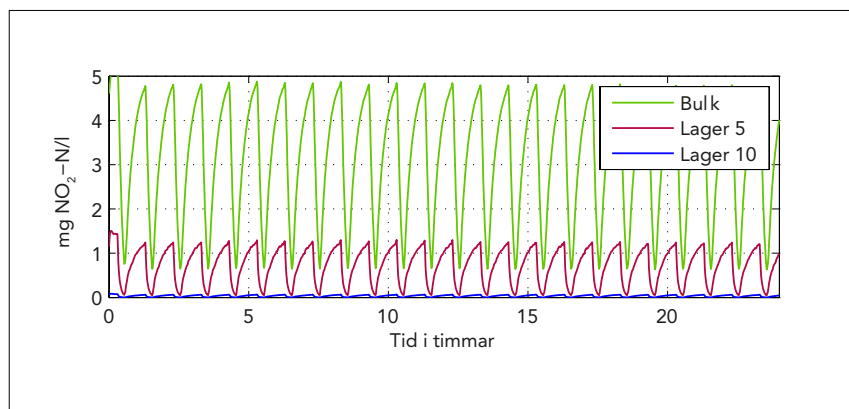


Figur 6-4 A: Loggade (punkter) och simulerade (linje) syrekoncentrationer i bulksfasen. Cirkelarna visar tidpunkter för generering av koncentrationsprofiler i de övriga figurerna. B–F: Simulerade koncentrationsprofiler i de övriga figurerna. B–F: Simulerade koncentrationsprofiler efter 45 minuter luftning (blå linjer) och efter 15 minuter enbart omrörning (svarta linjer). X-axeln i B–F visar tjockleken av biofilmen i mm (bulksfas vid 0 mm och bärarmaterial vid 1,2 mm).

### Nitrit och nitrat

I figur 6-4D kan utläsas att bulkkoncentration av nitrit ( $\text{NO}_2\text{-N}$ ) sjunker från cirka 5 mg N/l till 1 mg N/l under de 15 min som reaktorn ej är luftad. Detta beror på att det inte sker någon nybildning av  $\text{NO}_2$  utan syre. Samtidigt diffunderar  $\text{NO}_2$  in i biofilmen och omvandlas av anammoxbakterierna.

Nitrit genomtränger hela biofilmen efter den luftade fasen. Efter 15 min utan luftning har dock  $\text{NO}_2$  förbrukats och anammoxreaktionen begränsas sannolikt av de låga koncentrationerna inne i biofilmen. Förloppet visas också i figur 6-5 där nitritkoncentrationerna visas som funktion av tiden i bulkfasen samt på två ställen i biofilmen. Den med modellen beräknade nitritkoncentrationen i bulkvolymen stämmer väl överens med uppmätta halter.



Figur 6-5 Koncentrationen av nitritkväve i bulkfasen, mitten av biofilmen (lager 5) och längst in i biofilmen (lager 10).

När luftningen startar och syrekoncentrationen i bulkvolymen ökar aktiveras förutom AOB-organismerna också NOB-organismer som oxiderar  $\text{NO}_2$  till  $\text{NO}_3$ . Även anammoxreaktionen har  $\text{NO}_3$  som en biprodukt. I figur 6-4E visas de simulerade nitratkoncentrationsprofilerna.

Figur 6-4F visar slutligen de simulerade koncentrationerna av löst lustgas i bulkfasen och biofilm före och efter luftning. Lustgasbildningen diskuteras vidare nedan.

#### 6.4.3 Lustgasproduktion under luftade och oluftade förhållanden

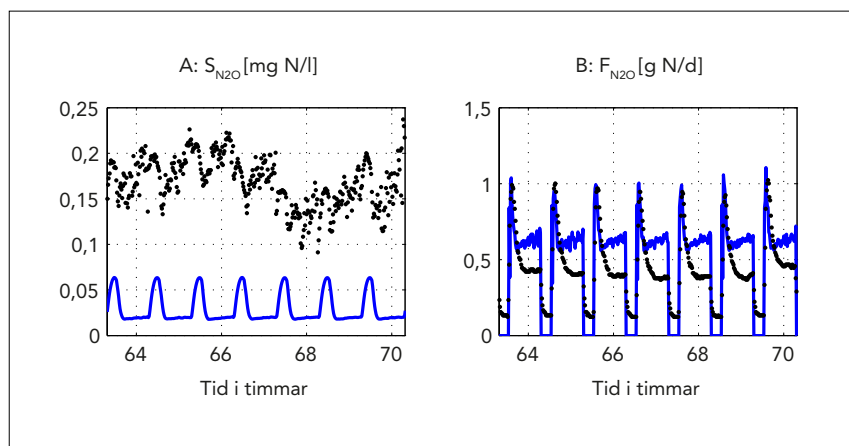
Under det simulerade försöket med låg belastning ( $1,7 \text{ g N/m}^2 \cdot \text{d}$ ) omvandlades 0,5 % av kvävet i det inkommande rejektivattnet till lustgas i frånluften. I figur 6-6 visas ett exempel på hur koncentrationen av löst lustgas (A) och massflödet av lustgas i frånluften (B) varierade.

Jämfört med SBR-fallstudien är det i detta fall mer vanskligt att säga huruvida lustgasproduktionen skedde aerobt eller anoxiskt. Att reaktorn luftas intermittent innebär inte att processen varierar mellan aeroba och anoxiska förhållanden; en stor del av biofilmen är anoxisk hela tiden (figur 6-4 B, E).

För det modellerade försöket kan lustgasbildningen förklaras relativt väl av ofullständig heterotrof denitrifikation enligt ASM<sub>N</sub>-modellen (avsnitt 4.2).

I denna är det sista steget i denitrifikationen, omvandling av  $N_2O$  till  $N_2$ , känsligt för låga koncentrationer av löst organiskt material och denna typ av miljö bildas enligt modellen i biofilmen.

Med ASMN-modellens grundinställningar av parametervärden omvandlas ungefär 3% av det inkommande kvävet genom traditionell heterotrof denitrifikation. 20% av detta inhiberas i sista steget ( $N_2O \rightarrow N_2$ ) vilket då totalt ger 0,5% heterotrof lustgasbildning räknat på inkommande mängd kväve.



Figur 6-6 Uppmätta (markeringar) och simulerade (linjer) koncentrationer av  $N_2O$  i vattenfasen (A) samt lustgasemissioner (B) i anammoxprocessen.

I simuleringarna (blå linjer i figur 6-6A–B) är den biologiska lustgasproduktionen nästan konstant, dynamiken förklaras av stripping. När luftningen startar absorberas löst lustgas till luftbubblorna varvid koncentrationen i vattenfasen sjunker. Samtidigt ökar koncentrationen och massflödet lustgas i frånluften. Efter ett par minuter har jämvikt uppnåtts och en konstant lustgasemission på cirka 0,6 g N/d simuleras. När luftningen stängs av ökar koncentrationen igen eftersom stripping inte sker.

Även om dynamiken i simuleringen tidvis överensstämmer med data avseende löst  $N_2O$ -N så ger simuleringen fyra gånger lägre koncentrationer, 0,02–0,06 mg N/l jämfört med uppmätta 0,1–0,2 mg N/l. Man skulle kunna tro att det är enkelt att förbättra överensstämmelsen genom justering av lämplig modellparameter men så är inte fallet.

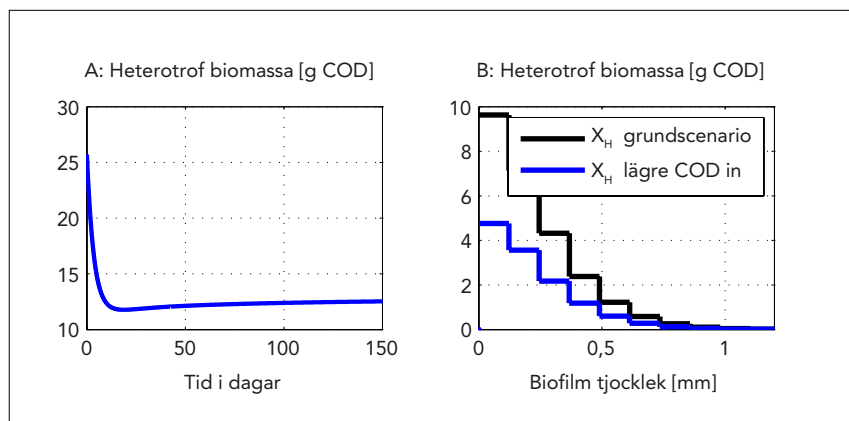
Enligt den strippingmodell som används (avsnitt 4.7) är massflödet lustgas i frånluften proportionellt mot masstransportkoefficienten för syrgas ( $k_L a_{O_2}$ ) och koncentrationen löst lustgas. Om en fyra gånger högre koncentration löst lustgas skulle produceras vid simulering skulle massflödet lustgas i frånluften också bli fyra gånger högre om inte syröverföringen minskades signifikant. Detta skulle i sin tur påverka alla övriga reaktioner i modellen. I sammanhanget skall det noteras att den totala lustgasproduktionen predikteras väl av modellen. Det massflöde  $N_2O$  som lämnar processen som löst  $N_2O$  är mycket liten jämfört med andelen som strippas. Observera att inkommande koncentration  $NH_4$ -N var 769 mg N/l och utgående koncentration  $N_2O$ -N endast 0,1–0,2 mg N/l.

## 6.5 Exempel på modelltillämpning

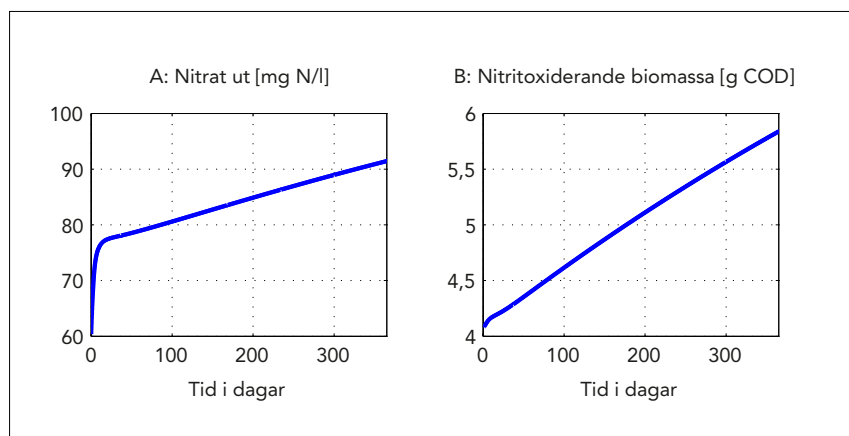
Nedan visas ett exempel på hur den utvecklade modellen kan användas. I scenariot undersöks vad det skulle innebära om rejektivattnet som behandlas i anammoxprocessen hade innehållit en lägre halt av biologiskt tillgängligt organiskt material. Hypotesen är att en mindre aktivitet av heterotrof biomassa i biofilmen erhålls och att detta i sin tur ger upphov till en minskad lustgasproduktion.

Grundfallet är anammoxprocessen med rejektivatten enligt avsnitt 6.3 ovan men med kontinuerlig luftning. I scenariot minskas koncentrationen av biologiskt tillgängligt COD med 186 mg/l varefter modellen simuleras under ett år. Luftningen styrs så att ammoniumkoncentrationen är konstant 10 mg  $\text{NH}_4\text{-N/l}$ .

I figur 6-7A–B visas hur mängden heterotrof biomassa i hela biofilmen, uttryckt som g COD, som väntat minskar när biologiskt tillgängligt COD i inkommande rejektivatten minskas. Biomassan minskar signifikant till hälften de första 10 dagarna.



Figur 6-7 A: Förändring av total mängd heterotrof biomassa i biofilmen vid minskad koncentration COD i inkommande rejektivatten. B: Förändrad distribution av heterotrof biomassa i biofilmen vid ursprungligt (svart linje) och lägre (blå linje) koncentration.

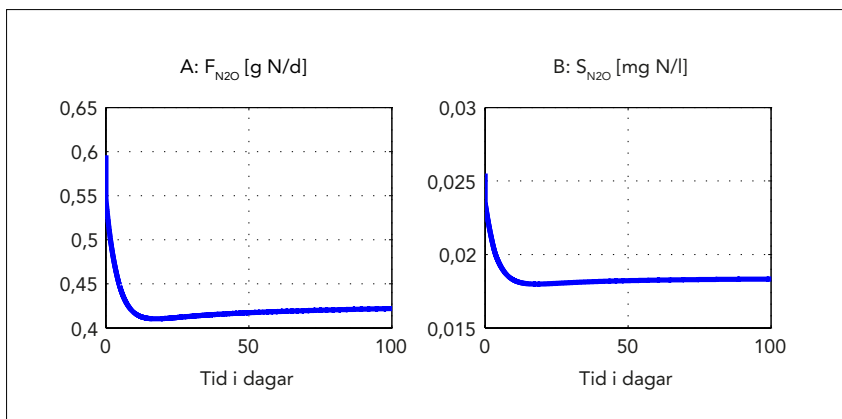


Figur 6-8 Simulerad nitratkoncentration (A) och mängd nitritoxiderande biomassa i biofilmen (B) efter en minskning av inkommande halt COD.

När massan av heterotrofa organismer minskar ökar nitratkoncentrationen eftersom en mindre del av det  $\text{NO}_3$  som bildas i anammoxprocessen denitrifieras när inkommande COD minskar, se figur 6-8A. Ökningen de första 10–20 dagarna beror på den minskade tillgängligheten av COD och sammanfaller med den minskade mängden heterotrofer (figur 6-7A). Nitrathalten fortsätter dock att öka även efter att biomassan stabiliserats. Detta beror på att de nitritoxiderande bakterierna tycks få större möjlighet att ackumulera i biofilmen (figur 6-8B).

Ett exempel på vidare tillämpning av modellen är i detta fall att använda densamma för att studera olika luftningsstrategier för att undvika nitritackumulering.

Figur 6-9 visar slutligen simulerat massflöde av lustgas i frånluften (A) och koncentrationen av löst lustgas i vattenfasen (B). Genom att minska den heterotrofa aktiviteten i biofilmen minskar i detta fall lustgasproduktionen med 30 %, från 0,6 till 0,42 g  $\text{N}_2\text{O-N/d}$ .



Figur 6-9 Simulerad lustgasemission (A) och koncentration av  $\text{N}_2\text{O-N}$  i vattenfasen efter en minskning av inkommande halt COD (B).

## 7 Slutsatser och diskussion

I detta arbete har modeller för separat rejektivattenrening implementerats i programvaran Matlab/Simulink. SBR-modellen är kalibrerad mot mätdata från Slottshagens reningsverk och anammoxmodellen mot mätdata från Hammarby Sjöstadsverket. Resultatet innebär att det nu finns möjlighet att inkludera rejektivattenrening i BSM-systemet inklusive produktion och emission av lustgas.

Detta innebär i sin tur att simulering med BSM-systemet kan bli mer verklighetstrogen, i synnerhet om miljöpåverkan från utsläpp av växthusgaser är av intresse. I samstämmighet med de mätdata som studerats i detta projekt är det inte orimligt att 0,5–5 % av kvävet i rejektivattnet omvandlas till lustgas. Antaget att mängden kväve i rejektivattnet omfattar en tillkommande internbelastning om 10–20 % av mängden kväve i inkommande avloppsvatten så skulle då, med antagen 75 % kväverening, lustgasproduktionen i enbart rejektivattenreningssteget motsvara 0,07–1,33 % av den totala mängd kväve som totalt avlägsnats ut systemet (via nitrifikation/denitrifikation eller via assimilation i slammet). Detta motsvarar 0,05–1 % av den totala inkommande kvävebelastningen. Observera att enbart rejektivattenprocesserna har modellerats och simulerats inom detta projekt. En komplett BSM2 modell – inklusive produktion och emission av växthusgaserna koldioxid, metan och lustgas – har utvecklats inom ramen för andra projekt och finns tillgänglig för intresserade brukare (Flores-Alsina et al., 2011; Corominas et al., 2012; Flores-Alsina et al., 2014; Sweetapple, 2014). Denna så kallade BSM2-G modell är dock fortfarande till viss del under utveckling – testning och validering pågår.

### 7.1 SBR-modellen

Den implementerade och kalibrerade SBR-modellen beskriver traditionella parametrar som  $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{NO}_2^-$  och  $\text{NO}_3^-$  väl. Det är dock viktigt att tänka på är att det är vanskligt med generella parametervärden för rejektivatten, i synnerhet när inte pH är inkluderat i modellen. Många parametrar samverkar och beroende på hur SBR-processen för rejektivattenrening styrs (t.ex. som här nitrifikation/denitrifikation eller enbart nitritation som på Sjölunda i Malmö) ackumuleras olika typer av biomassa som har olika beteenden (den kan t.ex. vara mer eller mindre anpassad för höga  $\text{NH}_4^+$ -koncentrationer).

Resultaten från Slottshagens reningsverk indikerar tydligt att lustgas kan produceras under anoxiska förhållanden och då ackumuleras som löst lustgas. Mätdata visar på att tillgången till lättnedbrytbar kolkälla påverkar ackumuleringen och den implementerade 4-stegs denitrifikationsmodellen kan delvis beskriva fenomenet.

Det är vidare tydligt från mätdata att lustgas produceras även under aeroba förhållanden. Denna kan enligt modellen förklaras av autotrof denitrifikation. Huvuddelen av den producerade lustgasen avgår sedan till frånluften genom stripping.



## 7.2 Anammox/MBBR-modellen

Den implementerade generella biofilmmodellen tillsammans med reaktionsmodellen ger tillsammans upphov till en mycket komplex modell som samtidigt antagligen är en grov förenkling av verkligheten. Resultaten tyder dock på att modellstrukturen utgör en god grund för att simulera ingående processer i anammox/MBBR-system och för vidare förbättringar. Den modellerade fördelningen av aktiv biomassa i biofilmen är realistisk.

Inom detta projekt har endast ett av flertalet experiment modellerats. Resultaten från detta visade på en relativt låg lustgasproduktion om 0,5 % av inkommande mängd kväve. Denna kan med modellen förklaras av en nära konstant lustgasproduktion genom heterotrof denitrifikation. Dynamiken i mätningarna kan förklaras av den intermittenta luftningen.

## 7.3 Förslag på vidare arbete

Under de senaste fem åren har en mängd nationella och internationella forskningsprojekt initierats och genomförts relaterat till lustgasproduktion vid avloppsvattenrening. Detaljförståelsen av de processer som påverkar lustgasproduktion samt hur olika reningsprocesser bör drivas och styras för att minimera densamma ökar stadigt, även om många frågetecken fortfarande existerar. En internationell expertgrupp håller för närvarande på att sammanställa en rapport för att beskriva kunskapsläget och ge vissa rekommendationer (IWA Task Group on Modelling of Greenhouse Gas Emissions from WWT Systems, se <http://www.iwataskgroupghg.com>). Denna rapport publiceras förhoppningsvis under 2016.

Inom ramen för arbetet inom detta SVU projekt modellerades lustgasproduktionen i enlighet med de bästa metoder som finns tillgängliga. Emellertid kan inte pH beräknas i dessa modeller utan istället användes mätdata för pH som en direkt in-variabel för modellerna. Då pH har en avsevärd inverkan på produktionskinematiken för lustgas är det önskvärt att pH kan beräknas och predikteras i modellen. Avsevärda forskningsinsatser pågår inom detta område och inom något/några år torde vi ha tillgång till modeller som på ett tillfredsställande sätt kan prediktera pH dynamiken (Flores-Alsina et al., 2015).

Inte alla potentiella produktionsvägar för lustgas var inkluderad i denna studie. Lustgasproduktion på grund av ofullständig oxidation av hydroxylamin togs inte med då den bedömdes vara av begränsad betydelse och inte är möjlig att på ett naturligt sätt kombinera med autotrof denitrifikation. Emellertid pågår utveckling av en ”ny generation” av modeller för lustgasproduktion (Ni et al., 2014; Pan et al., 2015) som kanske kan förbättra situationen. Dessa nya modeller är dock ännu tämligen oprövade och bygger på en annorlunda princip som gör dem svåra att integrera med processmodeller för övriga typer av reaktioner i ett reningsverk.

Slutligen finns fortfarande behov av flera experimentella detaljstudier i fullskala avseende lustgasproduktion vid olika operationella och processmässiga förhållanden. Det är då centralt att lustgas mäts parallellt i såväl vatten- som luftfasen. Vid de allra flesta experimentella studier som genomförts

har  $N_2O$  endast mätts i luftfasen, vilket gör osäkerheten vid modellering och bestämning av parametervärden mycket stor. Även enklare mätningar av total lustgasproduktion (gas) i ett verk är av intresse och kan mycket enkelt genomföras vid reningsverk som är placerade under mark (typ Käppala, Henriksdal och Bromma i Stockholm) genom kontinuerliga mätningar av  $N_2O$  i de utgående ventilationskanalerna.

## Referenser

- Anthonisen, A.C., Loehr, R.C., Prakasam, T.B.S. & Srinath E.G. (1976). Inhibition of nitrification by ammonia and nitrous acid. *Journal Water Pollution Control Federation*, 48(5), 835–852.
- Arnell, M. (2013). Utsläpp av lustgas och metan från avloppssystem – en granskning av kunskapsläget. SVU rapport 2013-11, Svenskt Vatten AB, Stockholm, Sverige.
- Björleinius, B. (1994). Lustgasutsläpp från kommunala reningsverk. Naturvårdsverket, Rapport Nr. 4309. Naturvårdsverkets Förlag, Solna, Sverige.
- Colliver, B.B. & Stephenson, T. (2000). Production of nitrogen oxide and dinitrogen oxide by autotrophic nitrifiers. *Biotechnology Advances*, 18(3), 219–232.
- Corominas, Ll., Flores-Alsina, X., Snip, L. & Vanrolleghem, P.A. (2012). Comparison of different modelling approaches to better understand and minimize greenhouse gas emissions from wastewater treatment plants. *Biotechnology and Bioengineering*, 109(11), 2855–2863.
- DHI (2011). WEST: modelling wastewater treatment plants – user guide. DHI, Hørsholm, Danmark.
- Flores-Alsina, X., Arnell, M., Amerlinck, Y., Corominas, L., Gernaey, K.V., Guo L., Lindblom, E., Nopens, I., Porro, J., Shaw, A., Snip, L., Vanrolleghem, P.A. & Jeppsson, U. (2014). Balancing effluent quality, economic cost and greenhouse gas emissions during the evaluation of (plant-wide) control/operational strategies in WWTPs. *Science of the Total Environment*, 466/467, 616–624.
- Flores-Alsina, X., Corominas, L., Snip, L. & Vanrolleghem, P.A. (2011). Including greenhouse gas emissions during benchmarking of wastewater treatment plant control strategies. *Water Res.*, 45(16), 4700–4710.
- Flores-Alsina, X., Gernaey, K.V. & Jeppsson, U. (2012). Benchmarking biological nutrient removal in wastewater treatment plants: influence of mathematical model assumptions. *Water Sci. Technol.*, 65(8), 1496–1505.
- Flores-Alsina, X., Kazadi-Mbamba, C., Solon, K., Vrecko, D., Tait, S., Batstone, D., Jeppsson, U. & Gernaey, K.V. (2015). A plant-wide aqueous phase chemistry module describing pH variations and ion speciation/pairing in wastewater treatment process models. *Water Research* (submitted).
- Foley, J., Yuan, Z., Keller, J., Senante, E., Chandran, K., Willis, J., van Loosdrecht, M.C.M. & van Voorthuizen, E. (2011). N<sub>2</sub>O and CH<sub>4</sub> emission from wastewater collection and treatment systems. Technical report, Global Water Research Coalition, London, UK.
- Gernaey, K.V., Jeppsson, U., Vanrolleghem, P.A. & Copp, J.B. (2014). *Benchmarking of Control Strategies for Wastewater Treatment Plants*. Scientific and Technical Report No. 23, IWA Publishing, London, UK.

Gustavsson, D.J.I. & Jansen, J. la Cour (2011). Dynamics of nitrogen oxides emission from a full-scale sludge liquor treatment plant with nitrification. *Water Sci. Technol.*, 63(12), 2838–2845.

Hao, X.D., Heijnen, J.J. & van Loosdrecht, M.C.M. (2002). Sensitivity analysis of a biofilm model describing a one-stage completely autotrophic nitrogen removal (CaNON) process. *Biotechnol. Bioeng.*, 77, 266–277.

Henze, M., Grady, C.P.L., Gujer, W., Marais, G.v.R. & Matsuo, T. (1987). A general model for single-sludge wastewater treatment systems. *Water Res.*, 21(5), 505–515.

Hiatt, W.C. & Grady, Jr. C.P.L. (2008). An updated process model for carbon oxidation, nitrification and denitrification. *Water Environ. Res.*, 80(11), 2145–2156.

Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) (2013). *Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change* [Stocker, T.F., D. Qin, G.-K. Plattner, M. Tignor, S.K. Allen, J. Boschung, A. Nauels, Y. Xia, V. Bex and P.M. Midgley (eds.)]. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA.

Jönsson, H., Junestedt, C., Willén, A., Yang, J., Tjus, K., Baresel, C., Rodhe, L., Trela, J., Pell, M. & Andersson, S. (2015). Minska utsläpp av växthusgaser från rening av avlopp och hantering av avloppsslam. SVU rapport 2015-02, Svenskt Vatten AB, Stockholm, Sverige.

IVL (2014). Utsläppsmätningar för uppföljning av lustgasutsläpp från rektvattenbehandling vid Slottshagens reningsverk. IVL Svenska Miljöinstitutet, Rapport U4927, Stockholm, Sverige.

Kampschreur, M.J., Tan, N.C.G., Kleerebezem, R., Picioreanu, C., Jetten, M.S.M. & van Loosdrecht, M.C.M. (2008). Effect of dynamic process conditions on nitrogen oxide emission from a nitrifying culture. *Environmental Science and Technology*, 42, 429–435.

Kampschreur, M.J., Temmink, H., Kleerebezem, R., Jetten, M.S.M. & van Loosdrecht, M.C.M. (2009). Nitrous oxide emission during wastewater treatment. *Water Res.*, 43(17), 4093–4103.

Law, Y., Ye, L., Pan, Y. & Yuan, Z. (2012). Nitrous oxide emissions from wastewater treatment processes. *Phil. Trans. R. Soc. B.*, 367, 1265–1277.

Lindblom, E., Arnell, M., Flores-Alsina, X., Stenström, F., Gustavsson, D.J.I., Yang, J. & Jeppsson, U. (2015). Dynamic modelling of nitrous oxide emissions from three Swedish sludge liquor treatment systems. *Water Science and Technology* (submitted).

Lindblom, E., Arnell, M., Stenström, F., Tjus, K., Flores-Alsina, X. & Jeppsson, U. (2013). Dynamic modelling and validation of nitrous oxide emissions from a full-scale nitrifying/denitrifying sequencing batch reactor treating anaerobic digester supernatant. *11th IWA Conference on Instrumentation, Control and Automation (ICA2013)*, Narbonne, Frankrike, 18–20 september, 2013.

- Mampaey, K.E., Beuckels, B., Kampschreur, M.J., Kleerebezem, R., van Loosdrecht, M.C.M. & Volcke, E.I.P. (2013). Modelling nitrous and nitric oxide emissions by autotrophic ammonia-oxidizing bacteria. *Environ. Technol.*, 34(12), 1555–1566.
- Ni, B.J., Ye, L., Law, Y., Byers, C. & Yuan, Z. (2013a). Mathematical Modeling of Nitrous Oxide (N<sub>2</sub>O) Emissions from Full-Scale Wastewater Treatment Plants. *Environ. Sci. Technol.*, 47(14), 7795–7803.
- Ni, B.J. & Yuan, Z. (2013). A model-based assessment of nitric oxide and nitrous oxide production in membrane-aerated autotrophic nitrogen removal biofilm systems. *Journal of Membrane Science*, 428, 163–171.
- Ni, B.J., Yuan, Z., Chandran, K., Vanrolleghem, P.A. & Murthy, S. (2013b). Evaluating four mathematical models for nitrous oxide production by autotrophic ammonia-oxidizing bacteria. *Biotechnol. Bioeng.*, 110(1), 153–163.
- Ni, B.J., Peng, L., Law, Y., Guo, J. & Yuan, Z. (2014). Modeling of nitrous oxide production by autotrophic ammonia-oxidizing bacteria with multiple production pathways. *Environ. Sci. Technol.*, 48, 3916–3924.
- Pan, Y., Ni, B.-J., Lu, H., Chandran, K., Richardson, D. & Yuan, Z. (2015). Evaluating two concepts for the modelling of intermediates accumulation during biological denitrification in wastewater treatment. *Water Res.*, 71, 21–31.
- Pan, Y., Ni, B.J. & Yuan, Z. (2013). Modeling electron competition among nitrogen oxides reduction and N<sub>2</sub>O accumulation in denitrification. *Environ. Sci. Technol.*, 47(19), 11083–11091.
- Peng, L., Ni, B.J., Ye, L. & Yuan, Z. (2015). The combined effect of dissolved oxygen and nitrite on N<sub>2</sub>O production by ammonia oxidizing bacteria in an enriched nitrifying sludge. *Water Res.*, 73, 29–36.
- Stenström, F., Tjus, K. & Jansen, J. la Cour (2014). Oxygen-induced dynamics of nitrous oxide in water and off-gas during the treatment of digester supernatant. *Water Sci. Technol.*, 69(1), 84–91.
- Sweetapple, C.G. (2015). *Developing Strategies for the Reduction of Greenhouse Gas Emissions from Wastewater Treatment*. PhD thesis, University of Exeter, UK.
- Takács, I., Patry, G.G. & Nolasco, D. (1991). A dynamic model of the clarification-thickening process. *Water Res.*, 25(10), 1263–1271.
- Trela, J., Yang, J., Plaza, E. & Levin, E. (2015). Nitritation/ anammox-processen för rejektvattenbehandling. SVU rapport 2015-01, Svenskt Vatten AB, Stockholm, Sverige.
- van Hulle, S.W.H., Callensa, J., Mampaey, K.E., van Loosdrecht, M.C.M. & Volcke, E.I.P. (2012). N<sub>2</sub>O and NO emissions during autotrophic nitrogen removal in a granular sludge reactor – a simulation study. *Environmental Technology*, 33(2), 2281–2290.

- van Loosdrecht, M.C.M. & Salem, S. (2006). Biological treatment of sludge digester liquids. *Water Sci. Technol.*, 53(12), 11–20.
- von Schulthess, R., Wild, D. & Gujer, W. (1994). Nitric and nitrous oxides from denitrifying activated-sludge at low-oxygen concentration. *Water Sci. Technol.*, 30(6), 123–132.
- Westling, K. (2011). Lustgasemissioner från avloppsreningsverk – en litteraturstudie. IVL Svenska Miljöinstitutet, Rapport B1977, Stockholm, Sverige.
- Wunderlin, P., Mohn, J., Joss, A., Emmenegger, L. & Siegrist, H. (2012). Mechanisms of  $N_2O$  production in biological wastewater treatment under nitrifying and denitrifying conditions. *Water Res.*, 46, 1027–1037.
- Yang, J., Trela, J., Plaza, E. & Tjus, K. (2013).  $N_2O$  emissions from a one stage partial nitrification/anammox process in moving bed biofilm reactors. *Water Sci. Technol.*, 68(1), 144–152.
- Zhou, Y., Pijuan, M., Zeng, R.J. & Yuan, Z. (2008). Free nitrous acid inhibition on nitrous oxide reduction by a denitrifying-enhanced biological phosphorus removal sludge. *Environ. Sci. Technol.*, 42(22), 8260–8265.

# Appendix

## Parametervärden för modellerna

I nedanstående tabell redovisas notation, beskrivning, enhet och värden för samtliga relevanta och kalibrerade parametrar som återfinns i SBR- och/eller anammoxmodellen. Observera att beskrivningarna anges på engelska då dessa är att betrakta som de vedertagna (översättning till svenska kan medföra vissa tvetydigheter).

\* Högt värde valt då ingen inhibering kunde ses i mätdata.

Notation	Description	Unit	SBR (30°C)	Anammox (25°C)
$f_p$	Fraction of biomass leading to particulate products	-	0.08	0.08
$i_{XB}$	Mass of nitrogen per mass of COD in biomass	$g\ N \cdot (g\ cell\ COD)^{-1}$	0.086	0.086
$i_{XP}$	Mass of nitrogen per mass of COD in products from biomass	$g\ N \cdot (g\ COD)^{-1}$	0.06	0.06
<b>Heterotrophic bacteria</b>				
$\mu_{MAX,H}$	Maximum specific growth rate	$d^{-1}$	9.8	7.9
$b_H$	Decay rate coefficient	$d^{-1}$	1.3	0.7
$Y_H$	Heterotrophic yield	$g\ cell\ COD \cdot (g\ COD)^{-1}$	0.6	0.6
$K_{S1-4}$	Half-saturation coefficient for substrate	$g\ COD \cdot m^{-3}$	20	20
$K_{S5}$	Half-saturation coefficient for substrate	$g\ COD \cdot m^{-3}$	100	40
$K_{S1-4,Ethanol}$	Half-saturation coefficient for methanol	$g\ COD \cdot m^{-3}$	20	-
$K_{S5,Ethanol}$	Half-saturation coefficient for methanol	$g\ COD \cdot m^{-3}$	1.0	-
$K_{O,H1-5}$	Half-saturation coefficient for $O_2$	$g\ O_2 \cdot m^{-3}$	0.01	0.01
$K_{NO_3}$	Half-saturation coefficient for nitrate	$g\ N \cdot m^{-3}$	0.20	0.20
$K_{NO_2}$	Half-saturation coefficient for nitrite	$g\ N \cdot m^{-3}$	0.20	0.20
$K_{NO}$	Half-saturation coefficient for nitric oxide	$g\ N \cdot m^{-3}$	0.05	0.05
$K_{N_2O}$	Half-saturation coefficient for nitrous oxide	$g\ N \cdot m^{-3}$	0.05	0.05
$K_{13NO}$	Nitric oxide inhibition coefficient	$g\ N \cdot m^{-3}$	0.5	0.5
$K_{14NO}$	Nitric oxide inhibition coefficient	$g\ N \cdot m^{-3}$	0.3	0.3
$K_{15NO}$	Nitric oxide inhibition coefficient	$g\ N \cdot m^{-3}$	-	0.075
$K_{15HNO_2}$	Free nitrous oxide inhibition coefficient	$g\ N \cdot m^{-3}$	0.001	-
$\eta_g$	Anoxic yield factor	-	0.9	0.9
$\eta_{g2}$	Anoxic growth factor	-	0.28	0.28
$\eta_{g3}$	Anoxic growth factor	-	0.16	0.16
$\eta_{g4}$	Anoxic growth factor	-	0.35	0.35
$\eta_{g5}$	Anoxic growth factor	-	0.35	0.35
$k_h$	Hydrolysis rate coefficient	$g\ COD \cdot (g\ cell\ COD \cdot d)^{-1}$	6.8	3.8
$K_X$	Half-saturation coefficient for hydrolysis of slowly biodegradable substrate	$g\ COD \cdot (g\ cell\ COD)^{-1}$	0.15	0.15
$\eta_h$	Anoxic hydrolysis factor	-	0.4	0.4
$k_a$	Ammonification rate coefficient	$m^3 \cdot (gCOD \cdot d)^{-1}$	0.082	0.057
<b>AOB bacteria</b>				
$\mu_{MAX,AOB}$	Maximum specific growth rate	$d^{-1}$	2.00	1.41
$b_{AOB}$	Decay rate coefficient	$d^{-1}$	0.230	0.08
$Y_{AOB}$	Autotrophic yield. AOB	$g\ cell\ COD \cdot (g\ N)^{-1}$	0.180	0.18
$K_{O,AOB}$	Half-saturation coefficient for $O_2$	$g\ O_2 \cdot m^{-3}$	1.0	1.0
$K_{NH_3}$	Half-saturation coefficient for free ammonia	$g\ N \cdot m^{-3}$	0.053	0.053

Notation	Description	Unit	SBR (30°C)	Anammox (25°C)
$K_{NH_3, DN}$	Half-saturation coefficient for free ammonia, AOB denitrification	$g\ N\cdot m^{-3}$	0.368	-
$K_{I, NH_3, AOB}$	Free ammonia inhibition coefficient, AOB	$g\ N\cdot m^{-3}$	1000*	1.0
$K_{I, HNO_2, AOB}$	Free nitrous acid inhibition coefficient, AOB	$g\ N\cdot m^{-3}$	100*	0.1
$K_{HNO_2, AOB}$	Half-saturation coefficient for free nitrous acid, AOB denitrification	$g\ N\cdot m^{-3}$	0.003	-
$K_{NO, AOB}$	Half-saturation coefficient for nitric oxide, AOB denitrification	$g\ N\cdot m^{-3}$	0.06	-
$f_{DNT, A}$	Fraction of ammonia oxidized with nitrite as partial electron acceptor	-	0.12	-
<b>NOB bacteria</b>				
$\mu_{MAX, NOB}$	Maximum specific growth rate	$d^{-1}$	1.200	1.08
$b_{NOB}$	Decay rate coefficient,	$d^{-1}$	0.110	0.05
$Y_{NOB}$	Autotrophic yield	$g\ COD\cdot(g\ N)^{-1}$	0.060	0.06
$K_{O, NOB}$	Half-saturation coefficient for $O_2$	$g\ O_2\cdot m^{-3}$	1.4	1.4
$K_{HNO_2}$	Half-saturation coefficient for free nitrous acid	$g\ N\cdot m^{-3}$	0.001	0.0001
$K_{I, NH_3, NOB}$	Free ammonia inhibition coefficient, NOB	$g\ N\cdot m^{-3}$	0.2	1000*
<b>Anammox bacteria</b>				
$\mu_{MAX, AMX}$	Maximum specific growth rate, anammox	$d^{-1}$	-	0.045
$b_{AMX}$	Decay rate coefficient	$d^{-1}$	-	0.003
$Y_{AMX}$	Anammox yield	$g\ cell\ COD\cdot(g\ N)^{-1}$	-	0.159
$K_{O, AMX}$	Half-saturation coefficient for oxygen	$g\ O_2\cdot m^{-3}$	-	0.010
$K_{NH_4, AMX}$	Half-saturation coefficient for ammonium	$g\ N\cdot m^{-3}$	-	0.140
$K_{NO_2, AMX}$	Half-saturation coefficient for nitrite	$g\ N\cdot m^{-3}$	-	1.000
<b>Stripping</b>				
$D_{O_2}$	Diffusion coefficient $O_2$	$m^2\cdot s^{-1}$	$2.12\cdot 10^{-9}$	$2.12\cdot 10^{-9}$
$D_{NO}$	Diffusion coefficient NO	$m^2\cdot s^{-1}$	$8.70\cdot 10^{-11}$	$8.70\cdot 10^{-11}$
$D_{N_2O}$	Diffusion coefficient $N_2O$	$m^2\cdot s^{-1}$	$1.77\cdot 10^{-9}$	$1.77\cdot 10^{-9}$
$D_{N_2}$	Diffusion coefficient $N_2$	$m^2\cdot s^{-1}$	$1.86\cdot 10^{-9}$	$1.86\cdot 10^{-9}$
<b>Biofilm</b>				
$L_{MAX}$	Maximum biofilm thickness	mm	-	1.2
$L_0$	Boundary layer	$\mu m$	-	59
$\rho$	Biofilm density	$g\ TS\cdot m^{-3}$	-	50000
$\eta$	Porosity of biofilm	-	-	0.5
$k_{ATT}$	Attachment rate	$d^{-1}$	-	0.1
$k_{DET}$	Biofilm detachment rate	$d^{-1}$	-	100000
$D_X$	Diffusion in biofilm coefficient particulate components	$m^2\cdot s^{-1}$	-	$5.00\cdot 10^{-14}$
$D_{SI}$	Diffusion coefficient biofilm, inert soluble COD	$m^2\cdot s^{-1}$	-	$0.69\cdot 10^{-9}$
$D_{SS}$	Diffusion coefficient biofilm, soluble COD	$m^2\cdot s^{-1}$	-	$1.20\cdot 10^{-9}$
$D_{O_2}$	Diffusion coefficient biofilm, $O_2$	$m^2\cdot s^{-1}$	-	$2.55\cdot 10^{-9}$
$D_{NO_3}$	Diffusion coefficient biofilm, $NO_3$	$m^2\cdot s^{-1}$	-	$1.60\cdot 10^{-9}$
$D_{NH_4}$	Diffusion coefficient biofilm, $NH_4$	$m^2\cdot s^{-1}$	-	$1.74\cdot 10^{-9}$
$D_{SND}$	Diffusion coefficient biofilm, soluble organic nitrogen	$m^2\cdot s^{-1}$	-	$1.37\cdot 10^{-9}$
$D_{NO_2}$	Diffusion coefficient biofilm, $NO_2$	$m^2\cdot s^{-1}$	-	$1.28\cdot 10^{-9}$
$D_{NO}$	Diffusion coefficient biofilm, NO	$m^2\cdot s^{-1}$	-	$0.87\cdot 10^{-10}$
$D_{N_2O}$	Diffusion coefficient biofilm, $N_2O$	$m^2\cdot s^{-1}$	-	$1.77\cdot 10^{-9}$
$D_{N_2}$	Diffusion coefficient biofilm, $N_2$	$m^2\cdot s^{-1}$	-	$1.86\cdot 10^{-9}$







Box 14057, 167 14 Bromma

Tel 08 506 002 00

Fax 08 506 002 10

E-post [svenskvatten@svenskvatten.se](mailto:svenskvatten@svenskvatten.se)

[www.svenskvatten.se](http://www.svenskvatten.se)