4 La ricostruzione modellistica di un sistema a fanghi attivi

Oggigiorno la frontiera nel campo dei processi a fanghi attivi, in particolare nella previsione delle loro prestazioni, consiste nell'impiego (sviluppo e applicazione) di modelli matematici avanzati di tipo dinamico, in grado di simulare l'andamento della qualità degli effluenti in funzione del tempo, note le caratteristiche del refluo in ingresso e le cinetiche che si realizzano nell'impianto a fanghi attivi. I primi modelli avanzati sono stati sviluppati già negli anni '80; in figura 4.1 viene riportato uno schema dell'evoluzione storica dei vari modelli. L'ASM No. 1 (ASM acronimo di *Activated Sludge Model*) proposto dal Task Group dell'IAWQ (International Association for Water Quality) è stato sviluppato nel 1987 da il gruppo di ricerca guidato a Henze. Successivamente nel luglio 1995 è stato pubblicato il modello ASM No. 2 da parte di Henze et al., ed infine nel 1999 è stata presentata l'ultima versione l'ASM No.3 da Gujer et al.





Il modello ASM No. 1, e le successive versioni No. 2 e No. 3, rappresentano lo stato dell'arte dei risultati ottenuti nel campo modellistico e si basano sulla differenziazione delle diverse frazioni della sostanza organica e dell'azoto presenti nel liquame e sul coinvolgimento nelle equazioni matematiche dei parametri cinetici e stechiometrici della biomassa attiva eterotrofa ed autotrofa.

I modelli ASM consentono di effettuare il dimensionamento e l'analisi di un processo a fanghi attivi tramite bilanci di massa che riguardano le sostanze organiche, quantificate in termini di COD, azoto e fosforo.

L'evoluzione del modello ASM No. 1, che prevede la sola rimozione biologica della sostanza organica e dell'azoto, ha portato a considerare nuovi processi, come ad esempio la rimozione biologica del fosforo considerata nel modello ASM No. 2, descritti attraverso un certo numero di equazioni e di nuove variabili.

L'ASM No. 3 è stato formulato come modello correttivo all'ASM No. 1, esso non comprende i processi di rimozione del fosforo e vuole essere un *upgrade* dell'ASM No. 1 avendone individuati i limiti in dieci anni di applicazione.

L'impiego dei modelli può essere utile nelle seguenti applicazioni:

- · verifica di dimensionamento di impianti da realizzare ex-novo;
- supporto nell'adeguamento di impianti esistenti (simulazione di diverse configurazioni impiantistiche);
- supporto alla gestione di impianti esistenti (supporto decisionale per affrontare diversi scenari operativi);
- gestione in modalità automatica di alcuni parametri operativi (DO in vasca di ossidazione, portate di ricircolo, ecc.) in funzione dei livelli nell'effluente, in questo caso l'implementazione di un modello semplificato, validato e costantemente ricalibrato da dati rilevati da sensori *on-line* (portata, COD, nutrienti, SST, ecc.), permette di disporre di un impianto "quasi virtuale", si tratta di una applicazione futuribile, vincolata alla disponibilità di molti dati di monitoraggio on-line.

Scenari di indagine valutabili con l'ausilio di modelli di simulazione sono per esempio: la variazione della concentrazione di ossigeno nei reattori biologici ai fini della riduzione dei consumi energetici, la verifica del sovraccarico sopportabile da un impianto di depurazione (nuovi allacciamenti o trattamento bottini) e l'implementazione di un nuovo schema operativo.

Sono disponibili numerose piattaforme commerciali che implementano i modelli ASM: il vantaggio di questi simulatori è quello di offrire interfacce grafiche *user-friendly* che aiutano l'utente nella creazione del *layout* dell'impianto.

I modelli avanzati sono raramente applicati alla progettazione e gestione degli impianti poiché vengono spesso sollevate dagli operatori le seguenti perplessità:

· l'approccio ai modelli matematici è talvolta difficile;

- la complessità di alcuni modelli può apparire sproporzionata rispetto alla dimensione dei problemi da risolvere;
- per utilizzare i modelli è necessario conoscere ed acquisire una certa sensibilità con parametri non abituali;
- la determinazione sperimentale e/o la calibrazione dei parametri del modello possono essere difficili;
- i processi biologici sono non-stazionari e quindi è spesso necessario effettuare simulazioni dinamiche.

In realtà nei casi di impianti a fanghi attivi che trattino reflui civili, a fronte di un elevato numero di parametri richiesto nel modello (è la principale obiezione sollevata in merito), solo pochi devono necessariamente essere determinati *ad hoc*, mentre per molti altri si possono adottare i valori tipici.

Nonostante lo sforzo che i modelli richiedono, la loro applicazione permette di ottenere simulazioni di funzionamento dell'impianto secondo numerosi e alternativi scenari operativi in breve tempo e con costi contenuti [Andreottola et al., 2005].

4.1 I modelli matematici dei sistemi a fanghi attivi

Tradurre in equazioni matematiche le complesse reazioni biologiche che portano alla degradazione delle sostanze inquinanti da parte dei microrganismi presenti in una vasca di ossidazione di un sistema a fanghi attivi è estremamente complesso.

I modelli ASM sono formulati sulla base di equazioni di bilancio di massa per la risoluzione delle quali si utilizzano le equazioni che riproducono le cinetiche di rimozione e le equazioni che governano i rapporti stechiometrici tra le diverse componenti del sistema.

Le assunzioni semplificative alla base dei modelli matematici ASM adottate per l'individuazione delle espressioni che possano riprodurre le cinetiche di rimozione delle sostanze inquinanti sono:

- 1. tutti gli organismi di una data specie sono uguali all'interno di un reattore del sistema;
- 2. i fenomeni stocastici possono essere trascurati, cioè le differenze *random* tra le cellule di un dato tipo possono essere ignorate;
- 3. all'interno di una classe funzionale tutti i microrganismi sono trattati come se fossero della stessa specie e all'interno di una data classe gli individui vengono ignorati;

4. le reazioni all'interno dei reattori sono omogenee.

Note le reazioni cinetiche e stechiometriche che descrivono il fenomeno di degradazione biologica delle sostanze inquinanti, si possono risolvere le equazioni di bilancio di massa rispetto al volume di controllo per ogni componente del sistema.

4.1.1 Struttura matriciale dei modelli ASM

Per facilitare la rappresentazione matematica di un numero elevato di equazioni e per meglio rappresentare le relazioni tra le equazioni stesse (bilanci di massa, cinetiche, stechiometriche), i modelli ASM utilizzano un formato matriciale di rappresentazione proposto da Petersen nel 1965.

Il vantaggio nell'utilizzo di una matrice consiste nel fatto che la condizione di continuità può essere verificata semplicemente muovendosi attraverso la matrice stessa, poiché se si sono usate unità di misura omogenee, la somma dei coefficienti stechiometrici di un processo deve essere zero.

In figura 4.2 è riportato come esempio la schema tipico di una matrice di Petersen: nelle righe j-esime sono descritte le equazioni di continuità legate ai processi biologici che coinvolgono biomassa e substrati, mentre nelle colonne i-esime sono descritte le variazioni di concentrazione della biomassa o dei substrati. In questo modo è possibile leggere la derivata nel tempo del componente i-esimo come somma dei prodotti ottenuti moltiplicando i fattori presenti sulla colonna i-esima per il corrispondente termine reattivo presente nell'ultima colonna.

Equazioni di continuità							
anci di massa	Componenti (i) Processi (j)	1 S _I	2 S _S		Velocità di reazione ρ		
	1. Crescita aerobica degli eterotrofi		-1/Y _H		$\hat{\mu}_{H}\left(\frac{S_{s}}{K_{s}+S_{s}}\right)\left(\frac{S_{o}}{K_{OH}+S_{o}}\right)X_{H}$		
	 Crescita anossica degli eterotrofi 		-1/Y _H				
Bila							

Figura 4.2 Esempio di matrice di Petersen per un modello ASM

4.1.2 I sub-modelli necessari alla modellizzazione

Il punto di partenza per l'utilizzo di un qualsiasi modello a fanghi attivi è la comprensione dei sub-modelli che lo compongono (figura 4.3). Essi permettono di configurare un impianto a fanghi attivi nel suo complesso.



Figura 4.3 Schema dell'insieme dei sub-modelli necessari alla modellizzazione di un sistema a fanghi attivi [Makinia J., 2010]

I sub-modelli includono tipicamente un modello per la caratterizzazione del refluo in ingresso, un modello idrodinamico della vasca di ossidazione su cui implementare il modello a fanghi attivi vero e proprio (ASM No. 1,2 o 3) e infine un modello dedicato al processo di sedimentazione.

Il modello per la caratterizzazione dell'influente permette di calcolare le concentrazioni nell'influente delle variabili di stato in funzione dello stato fisico e della biodegradabilità.

Il modello riguardante il bioreattore associa al modello per la miscelazione idrodinamica, il modello biocinetico (descrivendo le conversioni biochimiche nel fango attivo) e altri sub-modelli che descrivono le condizioni ambientali, per esempio la temperatura di processo e il trasferimento di ossigeno.

Lo schema di flusso in un bioreattore può essere generalmente descritto o come un CSTR o come un plug flow.

I modelli per i sedimentatori presentano diversi gradi di approfondimento: dai più semplici, che non descrivono reazione di biodegradazione da parte della biomassa, fino ai più complessi modelli idrodinamici 2D [Makinia J. 2010].

Le fasi di applicazione di un modello numerico ad un impianto di depurazione

Le principali fasi che si affrontano nell'applicazione di modelli di simulazione sono le seguenti:

- 1. **COSTRUZIONE DEL MODELLO NUMERICO.** Durante questa fase si decide quali comparti dell'impianto reale modellizzare, creando così uno schema di flusso dell'impianto. Per ogni comparto da modellizzare occorre scegliere il modello adeguato. *Passi fondamentali*
 - a) selezionare i componenti da modellizzare definizione delle *variabili di stato*;
 - b) valutare le reazioni coinvolte e la loro dinamica definizione delle *cinetiche di reazione*;
 - c) valutare le quantità di ciascun componente coinvolto definizione della *stechiometria*;
 - d) identificare le condizioni al contorno definizione delle condizioni operative;
 - e) caratterizzare le stato iniziale definizione delle *condizioni iniziali*.
- 2. CALIBRAZIONE DEL MODELLO. In questa fase si raccoglie un set di misure sperimentali, il più completo possibile, e si fa una analisi di sensitività per determinare i valori dei parametri non direttamente misurabili (specialmente quelli cinetici), in modo da ottenere concentrazioni effluenti simulate dal modello coincidenti con i valori reali. Per esempio, per la velocità specifica di crescita dei batteri nitrificanti (molto variabile e fortemente influente sulle concentrazioni di TKN dell'effluente e quindi sulle prestazioni complessive dell'impianto), se non è possibile disporre di una misura diretta (che richiede test respirometrici) il valore viene in genere ottenuto mediante calibrazione.
- 3. *VALIDAZIONE DEL MODELLO*. La validità del modello calibrato viene verificata su un diverso set di dati reali derivanti da campionamenti sul refluo in ingresso ed in uscita dall'impianto.

APPLICAZIONE DELLE STRATEGIE DI INTERVENTO. Disponendo di un modello, calibrato su un specifico impianto, è possibile variare le condizioni gestionali dell'impianto, ottenendo i corrispondenti valori di concentrazioni nell'effluente, come se si utilizzasse un impianto "virtuale". In questo modo si possono valutare e confrontare numerose e diversificate condizioni operative e scegliere quella ottimale per gli obiettivi che si desiderano raggiungere[Andreottola et al., 2005].

I modelli matematici necessitano però di un intensiva caratterizzazione dei reflui in ingresso, con un dettaglio superiore a quello derivante dalla sola conoscenza di COD o BOD₅. Maggiore è la conoscenza della composizione dei reflui e maggiore è la capacità di previsione dei modelli.

È problematico applicare i modelli avanzati quando non si dispone di una conoscenza sufficientemente dettagliata.

4.1.3 Frazionamento del COD

Il COD viene suddiviso in frazioni che hanno un preciso significato fisico ed impiantistico. La suddivisione del COD è stata proposta inizialmente nel modello ASM No. 1 ed è oggi riconosciuta e adottata a livello internazionale. Il COD totale può essere suddiviso in frazioni sia sulla base di caratteristiche fisico-chimiche che biologiche. Per quanto riguarda il frazionamento fisico-chimico (come indicato in figura 4.4), il COD totale si differenzia in:

- una frazione sedimentabile;
- una frazione colloidale;
- una frazione solubile.



Figura 4.4 Frazionamento fisico- chimico del COD totale

La frazione solubile è costituita dai composti organici disciolti, mentre le frazioni colloidali e sedimentabili possono essere aggregate nella cosiddetta frazione particolata.

Dato che si tratta di un frazionamento fisico, operato principalmente in funzione della dimensione, si possono caratterizzare le frazioni secondo le specifiche indicate in Tabella 4.1.

Sono indicate dimensioni orientative, utili per comprendere l'ordine di grandezza, ma chiaramente non è possibile attribuire una soglia esatta tra le varie frazioni.

Tabella 4.1 Frazionamento del COD in funzione delle dimensioni delle particelle

Frazione del COD	Dimensioni [µm]
Totale	0.001-100
Solubile	<0.1
Colloidale	0.1-50
Sedimentabile	>50

Il COD totale contiene particelle che possono arrivare orientativamente fino a 100 $\mu m.$

Il COD solubile sarebbe a rigore la frazione con dimensioni inferiori a 0.1 $\mu\text{m},$ ma spesso nella comune praticata questo valore viene approssimato a 0.45 $\mu\text{m}.$

Un'altro frazionamento può essere effettuato considerando la biodegradabilità o meno dei composti costituenti il COD totale, si tratta del frazionamento biochimico. In questo caso vengono considerate le seguenti frazioni:

- una frazione rapidamente biodegradabile;
- una frazione lentamente biodegradabile;
- biomassa batterica;
- una frazione inerte (non biodegradabile) costituita sia da composti solubili, che colloidali, che sedimentabili.

Questo frazionamento sta alla base della suddivisione del COD secondo l'approccio dell'ASM.

Il COD rapidamente biodegradabile (RBCOD: *Readily Biodegradable COD*) ricade in gran parte nella frazione solubile, mentre una piccola parte appartiene al COD colloidale.

Per questo motivo generalmente si assume in prima approssimazione che la frazione rapidamente biodegradabile appartenga completamente al COD solubile.

La frazione lentamente biodegradabile (SBCOD: *Slowly Biodegradable COD*), che appartiene sia al COD colloidale che al COD sedimentabile, ricade invece completamente nel COD particolato.

Se quindi si considera il COD diviso, da un punto di vista fisico, solo in COD solubile e in COD particolato, e si assume che l'RBCOD ricada completamente nel COD solubile, si ottiene la suddivisione semplificata di Figura 4.5.

Invertendo la priorità di suddivisione il COD totale si divide in una parte biodegradabile e una non-biodegradabile (inerte), ciascuna delle quali è a sua volta suddivisibile in due frazioni, una solubile e l'altra particolata. Al COD totale va inoltre ascritta anche la biomassa batterica attiva.



Nel diagramma in figura 4.6 viene presentato l'intero frazionamento del COD totale, integrando le frazioni biochimiche con quelle fisico-chimiche. Il COD totale è costituito dalla somma delle seguenti frazioni:

$$COD_{TOTALE} = S_{S} + X_{S} + S_{I} + X_{I} + X_{H} + X_{A}$$
(5.1)

Questa suddivisione del COD permette di comprendere, non solo la composizione fisico-chimica, ma soprattutto il diverso destino subito dal substrato organico nell'impianto di trattamento.

Di seguito vengono approfonditi alcuni aspetti concettuali relativi alle singole frazioni rappresentate nello schema a blocchi.

- 1. *COD TOTALE*: si determina mediante analisi chimica convenzionale senza alcun pre-trattamento sul refluo.
- 2. *COD SOLUBILE*: (indicato come **S**) si determina mediante analisi chimica dopo flocculazione e filtrazione del campione.
- 3. **COD PARTICOLATO:** (indicato come **X**) si determina come differenza tra COD totale e il COD solubile.



4. **COD SOLUBILE BIODEGRADABILE:** (indicato come S_s) è costituito da molecole di piccole dimensioni che possono essere direttamente

metabolizzate e che quindi vengono considerate come rapidamente biodegradabili: sono acidi grassi volatili, alcoli (etanolo, metanolo), peptoni ed amminoacidi. Rappresenta in genere circa il 10-30% del COD totale di un'acqua reflua civile grezza. Gli acidi grassi volatili e specialmente l'acido acetico, rappresentano la maggior parte dell'RBCOD con una percentuale generalmente pari al 50-70%. Tale frazione può essere misurata per via respirometrica mediante uno specifico test per la determinazione diretta dell'RBCOD o calcolata a partire da dati convenzionali.

- 5. COD PARTICOLATO BIODEGRADABILE. (indicato come X_s) è rappresentato dal materiale sedimentabile e colloidale che viene lentamente biodegradato. È costituito da un insieme di molecole complesse di notevoli dimensioni che necessitano di essere idrolizzate prima di poter essere metabolizzate. La velocità con cui questa frazione viene degradata, sia in condizioni aerobiche (presenza di O_2) che anossiche (assenza di O_2 , presenza di NO_X), è limitata dalla velocità del processo di idrolisi enzimatica. La cinetica di rimozione dei composti lentamente biodegradabili può essere anche 10 volte minore rispetto a quella dei substrati rapidamente biodegradabili. Costituisce la maggior quantità della sostanza organica biodegradabile presente, con una percentuale nei reflui civili grezzi in genere variabile tra il 40 e il 60% del COD totale. La quantificazione di questa frazione può essere effettuata mediante un test respirometrico prolungato, di durata pari a circa 1 giorno, o può essere calcolato sulla base di dati convenzionali.
- 6. **COD SOLUBILE INERTE**: (indicato come S_I) è costituito da molecole disciolte non biodegradabili. Le acque reflue grezza contengono una percentuale di materiale solubile inerte pari in genere a circa il 5-10% del COD totale. La frazione inerte solubile può essere quantificata per differenza dopo aver determinato S con analisi chimica e S_S con un test respirometrico, oppure può essere calcolato sulla base di dati convenzionali.
- 7. **COD PARTICOLATO INERTE**: (indicato come X_I) è rappresentato da composti in forma colloidale o sedimentabile di tipo non biodegradabile. Ammonta ad una percentuale del 10-20% del COD totale. Può essere determinato come differenza tra X e X_s .
- 8. BIOMASSA ATTIVA ETEROTROFA: (indicata come X_H) questo termine viene spesso trascurato nel frazionamento del COD. È costituito dalle cellule batteriche attive di tipo eterotrofo (cioè legate alla degradazione della sostanza organica) presenti nel refluo grezzo ed in grado di svolgere anch'esse un ruolo depurativo nella rete di fognatura e nell'impianto stesso. Per la quantificazione della biomassa attiva eterotrofa si può eseguire un test respirometrico. Se non si

effettua la quantificazione, il suo valore ricade nel COD particolato non biodegradabile.

9. **BIOMASSA ATTIVA AUTOTROFA**: (indicata come X_A) come nel caso della biomassa attiva eterotrofa, questo termine viene spesso trascurato nel frazionamento del COD, è costituita dalle cellule batteriche nitrificanti presenti nel refluo grezzo, generalmente in esigua quantità. La quantificazione, proposta per via respirometrica è piuttosto problematica. Se non si effettua la quantificazione, il suo valore ricade nel COD particolato non biodegradabile [Andreottola et al., 2005].

4.1.4 Frazionamento dell'azoto

In maniera analoga al frazionamento del COD anche l'azoto può essere suddiviso in una frazione solubile e una particolata, ed in frazioni biodegradabili e altre non biodegradabili. Da un punto di vista operativo è possibile ricorrere solo ad analisi fisico-chimiche, e sfruttare il frazionamento del COD associando a ciascuna frazione biodegradabile una certa percentuale di azoto. Non sono invece disponibili metodi diretti routinabili per la valutazione della biodegradabilità dell'N organico ed i metodi basati sulla respirometria rimangono per ora limitati al campo della ricerca. In figura 4.7 sono indicate le principiali componenti dell'N totale determinabili mediante analisi chimiche convenzionali. Al calcolo dell'azoto totale contribuiscono, oltre all'N in forma organica, anche le forme ioniche di azoto ammoniacale, azoto nitroso e nitrico.



Un'altra suddivisione dell'N totale parte invece dalla caratterizzazione della frazione solubile o particolata (figura 4.8).

Le forme ioniche vengono tutte coinvolte nei processi biologici di nitrificazione e denitrificazione e quindi risultano essere, ovviamente, solubili e biodegradabili. Più complesso invece è frazionare l'N organico. L'interesse inerente il frazionamento avanzato riguarda il parametro TKN, mentre vengono esclusi gli NO_x.

Nel diagramma in figura 4.9 viene presentato l'intero frazionamento del TKN, in cui viene individuata una parte biodegradabile e una nonbiodegradabile (inerte), ciascuna delle quali è a sua volta suddivisibile in due frazioni, una solubile e l'altra particolata. Anche la biomassa batterica attiva (eterotrofa e autotrofa) presente in acqua reflua contribuisce al valore di TKN.



Figura 4.8 Componenti dell'N totale in un'acqua reflua, determinabili mediante analisi fisico-chimiche

Per quanto riguarda le frazioni dell'azoto organico, esse vengono distinte sulla base della biodegradabilità, in frazioni biodegradabili indicate con pedice "D" e frazioni inerti indicate con pedice "I". Le frazioni di N nella biomassa sono indicate con pedice "B".

Il TKN è costituito dalla somma delle seguenti frazioni:

$$TKN = S_{NH} + S_{ND} + S_{NI} + X_{ND} + X_{NI} + N_{H} + N_{A}$$
(5.2)

Questa suddivisione del TKN permette di comprendere, non solo la composizione fisico-biochimica, ma soprattutto il diverso destino subito dal substrato organico nell'impianto di trattamento.



Figura 4.9 Schema del frazionamento del TKN in un'acqua reflua

Di seguito vengono approfonditi alcuni aspetti concettuali relativi alle singole frazioni. In particolare, per ciascuna frazione di N organico viene spiegata la correlazione con la rispettiva frazione del COD.

- 1. **TKN**: si determina mediante analisi chimica.
- 2. **Ammoniaca** : (indicata come S_{NH}) si determina mediante analisi chimica.
- 3. **N** solubile **BIODEGRADABILE**: (indicato come S_{ND}) è associato al COD rapidamente biodegradabile, che viene metabolizzato in breve tempo.
- N SOLUBILE INERTE : (indicato come S_{NI}) è associato al COD solubile inerte S_I, dato che la frazione S_I è di modesta entità nei reflui civili,

anche la quantità di N in essa contenuta è piccola. Per questo nel modello ASM la frazione di azoto S_{NI} viene spesso trascurata. Tale frazione non può essere rimossa nell'impianto di depurazione, ne dalla sedimentazione ne dal processo biologico e quindi si ritroverà inalterata nell'effluente. La sua quantificazione può essere utile quando si debba rispettare un valore di concentrazione effluente per l'N totale particolarmente restrittivo oppure nel caso di reflui industriali per i quali tale valore potrebbe essere non trascurabile.

- 5. **N** PARTICOLATO BIODEGRADABILE: (indicato come X_{ND}) tale frazione corrisponde all'N contenuto nel COD particolato biodegradabile X_S, che necessita di una preventiva idrolisi prima di essere metabolizzato. L'idrolisi di X_S e quindi di X_{ND} produce N organico solubile che viene successivamente convertito in ammoniaca mediante il processo di ammonificazione.
- 6. **N PARTICOLATO INERTE:** (indicato come X_{NI}) è associato al COD particolato inerte X_I e come tale frazione non viene biodegradato e rimane prevalentemente nei fanghi.
- 7. **N** NELLA BIOMASSA ATTIVA ETEROTROFA: (indicato come N_H) rappresenta la quantità di N incorporata nelle strutture cellulari della biomassa eterotrofa.
- 8. **N** NELLA BIOMASSA ATTIVA AUTOTROFA: (indicato come N_A) rappresenta la quantità di N incorporata nelle strutture cellulari della biomassa eterotrofa [Andreottola et al., 2005].

4.1.5 Frazionamento del fosforo

Il fosforo totale può essere suddiviso in una frazione particolata (indicata come X_P) e una frazione solubile (indicata come S_P), come in figura 4.10. Al fosforo solubile appartengono la frazione costituita da ortofosfati (PO₄-P) e una frazione di P organico. Nel P in forma particolata invece ricadano i polifosfati (indicati come X_{PP}) e un'altra frazione di fosforo organico.

Per una più dettagliata caratterizzazione del fosforo organico, si deve fare riferimento alle frazione del COD. Questo perché il fosforo in forma organica appartiene inevitabilmente alla sostanza organica quantificata con il parametro COD. In pratica si applica il medesimo approccio descritto per il frazionamento dell'azoto. Il procedimento prevede di adottare valori prefissati del contenuto di P per ogni frazione del COD biodegradabile o non, solubile o particolata.

9. Inoltre nel fosforo organico viene conteggiato il fosforo contenuto nella biomassa batterica attiva (eterotrofa e autotrofa) presente nell'acqua reflua [Andreottola et al., 2005].



Figura 4.10 Componenti del P totale in un'acqua reflua

4.1.6 L'Activated Sudge Model No.1

Nel 1983 la *International Association for Water Quality* (IAWQ) ora *International Water Association* (IWA) promosse un gruppo di studio per l'esame dei modelli esistenti allo scopo di proporre un modello semplice ma efficace per poter predire il rendimento depurativo dei depuratori biologici operanti mediante i processi di:

- Ossidazione del Carbonio
- Nitrificazione
- Denitrificazione.

Venne così creato l'*Activated Sludge Model n. 1* (ASM No.1), come perfezionamento di un precedente modello UCT (University of Cape Town), basato sulle seguenti ipotesi:

- Cinetiche di Monod bi-substrato: la cinetica di degradazione è data dal prodotto di due termini limitanti di tipo Michaelis-Menten.
- Ciclo batterico basato su *Death-Regeneration*: il metabolismo di morterigenerazione consiste nella morte di una quota di biomassa, con produzione di materiali riciclabili senza consumo di ossigeno.
- Suddivisione del COD in:

- Rapidamente biodegradabile (solubile Ss): molecole semplici in grado di attraversare la membrana cellulare ed essere immediatamente biodisponibili;
- □ *Lentamente biodegradabile (particolato Xs):* molecole complesse che necessitano di frazionamento ad opera di enzimi extracellulari (idrolisi) prima di attraversare la membrana cellulare.

Il modello ASM No. 1 comprende:

- 13 variabili di stato (componenti)
- 5 parametri stechiometrici
- 13 costanti cinetiche
- · 8 processi.

4.1.6.1 Variabili di stato

Le variabili di stato considerate nel modello ASM No.1 sono riportate in tabella 4.2.

Tabella 4.2 Varia	
COMPONENTE	Definizione
S_{I}	Sostanza organica inerte solubile
Ss	Substrato facilmente biodegradabile solubile
X_I	Sostanza organica particolata inerte
Xs	Substrato lentamente biodegradabile particolato
X _{BH}	Biomassa attiva eterotrofa
X _{BA}	Biomassa attiva autotrofa
X _P	Prodotti particolati del dacadimento della biomassa
S_{O}	Ossigeno disciolto
S _{NO}	Azoto in forma di nitrito e nitrita
S _{NH}	Azoto come NH ₄ ⁺ e NH ₃
S _{ND}	Azoto organico biodegradabile solubile
X _{ND}	Azoto organico biodegradabile particolato
S _{ALK}	Alcalinità

4.1.6.2 Parametri stechiometrici

I valori dei parametri stechiometrici di tabella 4.3 sono riferiti a valori di letteratura per un'acqua reflua domestica a pH neutro e a 20°C.

Tabella 4.3 Parametri stechiometrici in ASM No.1							
	DADAMETDO	ΙΙΝΙΤλ	ΙΛΙΟΡΕ				
SINDOLO		UMIA	VALONL				
Y _H	Fattore di resa eterotrofa	mgCODprodotto/mg COD rimosso	0.6				
Υ _A	Fattore di resa autotrofa	mgCODprodotto/mg N ossidato	0.24				
f _P	Frazione di biomassa che produce particolato inerte	-	0.08				
İ _{XP}	Rapporto tra massa N/ massa COD nei prodotti inerti	mgN/mgCOD	0.06				
i _{xB}	Rapporto tra massaN/massa COD nella biomassa	mgN/mgCOD	0.086				

4.1.6.3 Parametri cinetici

I valori dei parametri di tabella 4.4 sono riferiti a valori di letteratura per un'acqua reflua domestica a pH neutro e a 20°C.

Tabella 4.4 Parametri cinetici in ASM No.1

SIMBOLO	PARAMETRO	UNITÀ	VALORE
µ H max	Rateo massimo di crescita eterotrofa	day ⁻¹	6.0
b _H	Rateo di decadimento eterotrofo	day⁻¹	0.408
Ks	Coefficiente di semisaturazione per il substrato rapidamente biodegradabile	mg COD/L	20
К _{ОН}	Coefficiente di semisaturazione per l'ossigeno per gli eterotrofi	mg O ₂ /L	0.10

K _{NO}	Coefficiente di semisaturazione dei nitrati	mg N/L	0.20
₽A max	Rateo massimo di crescita autotrofa	day-1	0.768
b _A	Rateo di decadimento autotrofo	day⁻¹	0.096
K _{OA}	Coefficiente di semisaturazione per l'ossigeno per gli autotrofi	mg O ₂ /L	1.0
K _{NH}	Coefficiente di semisaturazione per l'ammonio	mg N/L	0.75
η _g	Fattore correttivo per crescita anossica autotrofa	-	0.8
ka	Rateo di ammonificazione	L /(mg COD di biomassa• h)	0.0067
kh	Rateo specifico massimo di idrolisi	day ⁻¹	0.092
Кх	Coefficiente di semisaturazione per il substrato lentamente biodegradabile	mg COD/ mg COD di biomassa	0.15
η _h	Fattore correttivo per l'idrolisi anossica	-	0.4

4.1.6.4 Processi fondamentali

- 1. CRESCITA AEROBICA DEGLI ETEROTROFI. Rappresenta la crescita aerobica della biomassa eterotrofa a spese del substrato solubile e dell'ossigeno disciolto. L'azoto ammoniacale solubile viene assimilato dalle nuove cellule. La cinetica della crescita è limitata sia dal substrato solubile, che dall'ossigeno disciolto. La dipendenza dalla concentrazione di ossigeno è data dalla "*switch function*", in grado di annullare questa reazione nel caso di bassa concentrazione.
- 2. CRESCITA ANOSSICA DEGLI ETEROTROFI. Esamina la crescita anossica della biomassa eterotrofa a spesa del substrato solubile, i nitrati agiscono come accettori di elettroni e la loro rimozione è proporzionale al substrato rimosso meno la quantità di nuove cellule formate. La cinetica è simile alla precedente in quanto dipende dal

substrato con lo stesso coefficiente di "*half saturation*", ma la velocità massima di crescita della biomassa in condizione anossiche è minore e questo viene rappresentato dal fattore correttivo η_G <1.

- **3. CRESCITA AEROBICA DEGLI AUTOTROFI.** Descrive la crescita aerobica della biomassa autotrofa: l'azoto ammoniacale solubile serve come fonte di energia per la crescita dei batteri nitrificatori, dando nitrati come prodotto finale. Sia l'azoto ammoniacale che l'ossigeno influenzano la cinetica con una funzione di saturazione, con l'ossigeno agente secondo una "*switch functiorl*".
- **4. DECADIMENTO DEGLI ETEROTROFI.** Descrive il decadimento della biomassa eterotrofa secondo l'approccio di morte e rigenerazione. Il processo è di primo ordine rispetto alla concentrazione di biomassa, la biomassa è convertita in una combinazione di substrato lentamente biodegrdabile e di prodotto particolato senza perdita di COD e senza bisogno di accettori di elettroni. Il processo continua indisturbato in qualsiasi condizione ambientale.
- **5. DECADIMENTO DEGLI AUTOTROFI.** Rappresenta il decadimento della biomassa autotrofa, secondo il medesimo approccio del processo precedente, in entrambi i casi ha un impatto anche sul riciclo dell'azoto attraverso il sistema con la conversione di azoto organico biodegradabile influente ad azoto ammoniacale.
- **6. Ammonificazione Dell'Azoto solubile organico.** Descrive la trasformazione dell'azoto organico biodegradabile influente ad azoto ammoniacale attraverso un'espressione empirica del primo ordine.
- **7. IDROLISI DEGLI ORGANICI.** Si assume una dipendenza lineare verso la biomassa presente con saturazione da substrato. Poiché la sintesi richiede enzimi, la velocità dipende dalla concentrazione di accettori di elettroni presenti, si è convenuto che il processo non avvenga in assenza di accettori di elettroni mentre in condizioni anossiche è stato introdotto il fattore moltiplicativo correttivo $\eta_H < 1$.
- 8. IDROLISI DELL'AZOTO ORGANICO. Illustra l'ipotesi adottata per l'idrolisi dell'azoto organico biodegradabile secondo il medesimo approccio del processo precedente. Si è assunta una distribuzione omogenea dell'azoto organico all'interno del substrato lentamente biodegradabile, in modo tale che la velocità di idrolisi sia proporzionale a quella della sostanza organica [Cimarosti I., 2005].

4.1.6.5 Matrice di Petersen ASM1

Componente i→	1	2	3	4	5 X	6	7	Velocità di processo
Processo j ↓	S _I	S 5	S ₅ X ₁	Xs	Х ВН Х	X _{BA}	Х _{ВА} Х _Р	$\rho_j[ML^3T^1]$
Crescita aerobica degli eterotrofi		$-\frac{1}{Y_{_H}}$			1			$\hat{\mu}_{H}\left(\frac{S_{S}}{K_{S}+S_{S}}\right)\left(\frac{S_{O}}{K_{OH}+S_{O}}\right)X_{BH}$
Crescita 2 anossica degli eterotrofi		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$\hat{\mu}_{H} \left(\frac{S_{S}}{K_{S} + S_{S}} \right) \left(\frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_{O}} \right) \times \\ \times \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \eta_{G} X_{BH}$
Crescita 3 aerobica degli autotrofi						1		$\hat{\mu}_{A} \left(\frac{S_{_{NH}}}{K_{_{NH}} + S_{_{NH}}} \right) \left(\frac{S_{_{O}}}{K_{_{OA}} + S_{_{O}}} \right) X_{_{BA}}$
4 Decadimento degli eterotrofi				$1 - f_P$	-1		f_P	<i>b_H X</i> _{вн}
5 Decadimento degli eterotrofi				$1 - f_P$		-1	f_P	$b_{\scriptscriptstyle A} X_{\scriptscriptstyle BA}$



Tabella 4.5.2 Matrice di Petersen per il modello ASM No.1 – componenti 8-13 Componente i→ Velocità di processo ρ_j[ML⁻³T¹] 8 9 10 11 12 13 **S**0 **S**NO S_{NH} **S**_{ND} **X**_{ND} **S**ALK Processo i ↓ Crescita $\hat{\mu}_{H}\left(\frac{S_{S}}{K_{S}+S_{S}}\right)\left(\frac{S_{O}}{K_{OH}+S_{O}}\right)X_{BH}$ $-\frac{1-Y_{H}}{Y_{H}}$ $-\frac{i_{XB}}{14}$ aerobica 1 $-i_{XB}$ degli eterotrofi $\hat{\mu}_{H}\left(\frac{S_{s}}{K_{s}+S_{s}}\right)\left(\frac{K_{OH}}{K_{OH}+S_{O}}\right)\times\times\left(\frac{S_{NO}}{K_{NO}+S_{NO}}\right)\eta_{G}X_{BH}$ Crescita $1-Y_H$ $\frac{1-Y_H}{14\cdot 2.86Y_H} - \frac{i_{XB}}{14}$ anossica 2 $2.86Y_{H}$ $-i_{XB}$ degli eterotrofi Crescita $4.57 - Y_{A}$ $\hat{\mu}_{A}\left(\frac{S_{NH}}{K_{NH}+S_{NH}}\right)\left(\frac{S_{O}}{K_{OA}+S_{O}}\right)X_{BA}$ $-\frac{1}{7Y_A}-\frac{i_{XB}}{14}$ $-\frac{1}{Y_A}$ $-i_{XB}-\frac{1}{Y_A}$ aerobica 3 Y_{A} degli autotrofi Decadiment $-i_{XB}-f_Pi_{XP}$ $b_H X_{BH}$ 4 o degli eterotrofi Decadiment $-i_{XB}-f_Pi_{XP}$ $b_A X_{BA}$ 5 o degli eterotrofi

Capi	itolo 4					
6	Ammonificaz ione dell'azoto solubile organico	1	-1		$\frac{1}{14}$	k _A S _{ND} X _{BH}
7	Idrolisi degli organici					$ \begin{cases} k_h \frac{X_s / X_{BH}}{K_s + X_s / X_{BH}} \\ \left[\left(\frac{S_o}{K_{OH} + S_o} \right) + \eta_H \left(\frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_o} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] X_{BH} \end{cases} $
8	Idrolisi dell'azoto organico		1	-1		$\rho_{r}\left(X_{ND} / X_{s} \right)$
, co	Velocità osservate di nversione[ML ⁻ ³ T ¹]	 	â	r _i =	$=\sum_{j}v_{ij}\rho_{j}$	5 m

4.1.6.6 Limiti del modello ASM No. 1

Oltre dieci anni di applicazione dell'ASM No. 1 hanno messo in evidenza alcuni limiti del modello:

- 1. L' ASM No.1 non include espressioni cinetiche che riguardino limitazioni per gli organismi eterotrofi legate all'azoto od all'alcalinità. Questo ha fatto si che i software non potessero essere basati sul modello originale che in certe circostanze avrebbe condotto a concentrazioni negative. Questo ha condotto alla creazione di diverse versioni dell' ASM No.1.
- L' ASM No.1 include l'azoto organico biodegradabile solubile e particolato come componenti del modello. Essi non possono essere facilmente misurati per cui sono stati eliminati in numerose versioni dell' ASM No.1.
- 3. Le cinetiche di nitrificazione nell' ASM No.1 non possono essere realmente quantificate. Di nuovo in numerose versioni dell' ASM No.1 questo processo è stato eliminato assumendo una composizione costante di tutti i composti organici (rapporto N/COD costante).
- 4. L' ASM No.1 differenzia il materiale particolato organico in base alla sua origine, influente o derivante dal decadimento della biomassa. Nella realtà è impossibile distinguere queste due frazioni.
- Il processo di idrolisi riveste un ruolo predominante sulle previsioni di consumo di ossigeno e di denitrificazione da parte dei microrganismi eterotrofi. La quantificazione dei parametri cinetici di questo processo è piuttosto complessa.
- 6. La lisi, combinata all'idrolisi ed alla crescita, è utilizzata per descrivere gli effetti combinati di respirazione endogena , morte, predazione e lisi della biomassa. Questo porta a difficoltà nella valutazione dei parametri cinetici.
- 7. L'accumulo dei poli-idrossi-alcalinati, e a volte del glicogeno, viene rilevata negli impianti a fanghi attivi in condizioni aerobiche ed atossiche in cui siano disponibili elevate concentrazioni di substrato organico rapidamente biodegradabile. Questo processo non è compreso nell' ASM No.1.
- 8. L' ASM No.1 non include la possibilità di differenziare tassi di decadimento dei nitrificatori in condizioni aerobiche ed anossiche. Con tempi di ritenzione (SRT) elevati e grandi porzioni di reattore in

condizioni atossiche questo porta a problemi con la stima della velocità massima di nitrificazione.

9. L' ASM No.1 non permette la previsione dei solidi sospesi del mixed liquor direttamente osservabile.

Considerando tali difetti il Task Group dell'IAWQ ha proposto l' ASM No.3 (Gujer e al., 1999) allo scopo di correggerli [Cimarosti I., 2004].

4.1.7 Activated Sludge Model No.2 (ASM No.2)

L^{*}Activated Sludge Model No. 2" è un'estensione dell' ASM No.1. Esso include processi biologici addizionali, principalmente al fine di considerare la rimozione del fosforo.

Alcune assunzioni dell'ASM No.1 sono state estese al No. 2:

- la biomassa eterotrofa e la biomassa accumulatrice di fosforo sono omogenee e non sono soggette a cambiamenti con il tempo (parametri cinetici costanti);
- l'idrolisi del materiale organico, dell'azoto organico e del fosforo organico sono accoppiate ed avvengono simultaneamente.

Il cambiamento più significativo rispetto al primo è che si considera che la biomassa presenti una struttura interna per cui la sua concentrazione non può essere descritta semplicemente dal parametro X_B .

Inoltre l'ASM No. 2 include 2 "processi chimici" che vengono utilizzati per modellizzare la precipitazione chimica del fosforo.

Come per il modello ASM No. 1 si fa una distinzione tra componenti solubili "S" e particolati "X".

Gli X possono essere concentrati tramite sedimentazione/ispessimento e devono essere elettricamente neutri mentre gli S possono solo venire trasportati dall'acqua e possono portare cariche ioniche.

Si assume che tutti i componenti siano omogenei e distribuiti in tutto il sistema di interesse.

4.1.7.1 Variabili di stato

Tabella 4.6 Variabili di stato in ASM2						
COMPONENTE	Definizione					
S_{I}	Sostanza organica inerte solubile					
Ss	Substrato facilmente biodegradabile solubile					

X _I	Sostanza organica particolata inerte
Xs	Substrato lentamente biodegradabile particolato
Х _{вн}	Biomassa attiva eterotrofa
X _{BA}	Biomassa attiva autotrofa
S_{O}	Ossigeno disciolto
S _{NO}	Azoto in forma di nitrito e nitrato
S _{NH}	Azoto come NH_4^+ e NH_3
S _{ALK}	Alcalinità
SA	Prodotti finali della fermentazione
S _F	Substrato organica facilmente biodegradabile fermentabile
S _{N2}	Azoto gassoso prodotto dalla denitrificazione
Х _{теОН}	Metal-idrossidi
X _{meP}	Metal-fosfato
$\chi_{\scriptscriptstyle PAO}$	Organismi Accumulatori di Fosforo
Х _{РНА}	Prodotto dell'accumulo interno alla cellula PAO
$\chi_{\scriptscriptstyle PP}$	Polifosfato
X _{TSS}	Solidi sospesi totali

4.1.7.2 Processi fondamentali

- **1. Idrolisi aerobica:** idrolisi aerobica del substrato lentamente biodegradabile che caratterizza l'idrolisi in condizioni aerobiche (S_{02} >0).
- **2. Idrolisi anossica:** idrolisi anossica del substrato lentamente biodegradabile che caratterizza l'idrolisi in condizioni anossiche ($S_{O2} \approx 0$ e $S_{NO3} > 0$). Più lento dell'idrolisi aerobica.

- Crescita aerobica su S_F: rappresenta la crescita aerobica dei microrganismi su substrato fermentabile S_F.
- 5. Crescita aerobica su S_A : rappresenta la crescita aerobica dei microrganismi su substrato fermentabile S_A , si assume la stessa velocità μ_m e gli coefficienti di resa Y_H . Entrambi i processi richiedono ossigeno S_{O2} . nutrienti S_{NH4} e S_{PO4} , alcalinità S_{ALK} e producono solidi sospesi X_{TSS} .
- 6. Crescita anossica su S_F Denitrificazione: rappresenta la crescita anossica dei microrganismi eterotrofi su substrato fermentabile, richiede nitrato S_{NO3} come accettore di elettroni. si assume che tutto il nitrato S_{NO3} sia ridotto ad azoto S_{N2} . La denitrificazione rilascia alcalinità, si assume che sia inibita dall'ossigeno e la velocità massima di crescita μ_m è ridotta rispetto al caso aerobico tramite il coefficiente η_{NO3} .
- **7.** Crescita anossica su S_A Denitrificazione: analogamente al processo precedente rappresenta la crescita anossica dei microrganismi eterotrofi sui prodotti della fermentazione S_A .
- **8. Fermentazione:** indica la fermentazione, in condizioni anaerobiche si assume che gli organismi eterotrofi siano in grado di compiere la fermentazione in cui S_{F_r} substrato facilmente degradabile, viene trasformato nei prodotti di fermentazione S_A . E' introdotto come semplice processo di trasformazione.
- **9.** Lisi: rappresenta la lisi degli organismi eterotrofi ed è modellata analogamente all'ASM1.
- Accumulo di X_{PHA}: il Task Group ha suggerito un modello semplificato per caratterizzare i PAOs, facendo alcune severe restrizioni. Il modello assume che questi organismi non possano denitrificare e possano crescere solamente sul materiale organico immagazzinato X_{PHA} all'interno della cellula.
- **11. Accumulo di X**_{PP}: rappresenta l'accumulo di polifosfati: l'accumulo degli ortofosfati S_{PO4} nella forma di polifosfato interno alla cellula, X_{PP}, richiede ai PAOs di ricavare dell'energia, che può essere ottenuta dalla respirazione degli X_{PHA}. La rigenerazione di polifosfati è una richiesta per la crescita dei PAOs, perché il substrato organico S_A è accumulato solo in seguito al rilascio dei polifosfati. Se il contenuto di fosforo è eccessivo si blocca l'accumulo, perciò viene introdotto un termine inibitore che diviene attivo quando il valore del rapporto X_{PP}/X_{PAO} raggiunge un valore massimo ammissibile K_{max}

- **12.** Crescita aerobica di X_{PAO} : descrive la crescita dei PAOs: si assume che crescano solo a spese degli X_{PHA} Il fosforo è continuamente rilasciato dalla lisi di X_{PP} , perciò si può assumere che gli organismi consumino l'ortofosfato S_{PO4} come nutriente per la produzione di biomassa. La crescita dei PAOs è modellata come un processo obbligatoriamente aerobico.
- **13.** Lisi di X_{PAO} : rappresenta la lisi dei PAOs.
- **14.** Lisi di X_{PP}: rappresenta la lisi dei prodotti di accumulo.
- **15.** Lisi di X_{PHA}: rappresenta la lisi dei prodotti di accumulo.
- **16.** Crescita aerobica degli X_A: rappresenta la crescita degli organismi nitrificatori. Si tratta di organismi obbligatoriamente aerobici, consumano ammoniaca come substrato e nutriente e producono nitrato, diminuendo l'alcalinità. Il processo viene modellato in modo analogo all'ASM1.
- **17.** *Lisi di X_A:* rappresenta la lisi degli organismi nitrificatori. e viene modellato in modo analogo all'ASM1.
- 18. Precipitazione del fosfato
- 19. Riddisoluzione del fosfato

4.1.7.3 Limiti del modello ASM2

Il comportamento degli organismi accumulatori di fosforo (PAOs) non è ancora stato ben compreso. Essi sono stati definiti come un gruppo di batteri che nei processi a fanghi attivi in cui sono presenti zone aerobiche e zone anaerobiche, dimostrano di consumare il fosforo.

In particolare il modello è basato sulle assunzioni:

- il solo substrato organico che può essere utilizzato dai PAOs siano i soli prodotti della fermentazione come acetato S_A . Gli altri organismi eterotrofi possano utilizzare sia S_A che S_F ;
- I PAOs possano crescere anaerobicamente solo su PHA non direttamente su S_A. Dunque c'è una competizione per S_A in condizioni aerobiche tra i PAOs e gli altri eterotrofi. Nel modello tale comportamento è a vantaggio degli eterotrofi. Perciò il modello non può essere utilizzato per input di S_A significativi;
- I PAOs non possiedono capacità denitrificatorie;
- I poli-idrossi-alcalinati PHAs rappresentino tutto il materiale carbonaceo di stoccaggio nella cellule dei PAOs;

 Gli eterotrofi qui definiti sono assunti crescere aerobicamente, denitrificare anossicamente e fermentare anaerobicamente il che non è microbiologicamente corretto.

Inoltre il modello presenta le seguenti restrizioni:

- concentrazioni di fosforo e ammoniaca basse;
- le frazioni di substrati organici (X_S,S_A ed S_F) sono assunte essere omogenee e la loro natura viene considerata immutabile rispetto ai comportamenti che possono esserci nelle varie frazioni;
- non si considerano gli effetti limitanti di potassio e magnesio nella rimozione del fosforo;
- non si considerano gli effetti inibitori nella rimozione del fosforo di nitrito (NO_2^- e monossido di azoto (NO).

Esistono dei vincoli:

- Il modello è valido per acque reflue di origine domestica;
- L'ASM2 non si occupa della separazione dei solidi nei sedimentatori;
- Il pH deve essere vicino alla neutralità;
- La temperatura deve essere compresa in un range limitato (possibilmente tra 10 e 25°) [Cimarosti I., 2004].

4.1.8 Activated Sludge Model No.3 (ASM3)

L'ASM No.3 è stato proposto da Gujer et al. nel 1999 al fine di superare le limitazioni di ASM No.1, fornendo un modello di più facile utilizzo e calibrazione.

L'ASM No.3 si riferisce ai medesimi processi dell' ASM No.1: consumo di ossigeno, produzione di fango, nitrificazione e denitrificazione nei sistemi a fanghi attivi che trattino principalmente acque reflui municipali.

Come nei modelli precedenti si fa una distinzione tra componenti solubili S e particolati X Analogamente agli altri modelli gli X possono essere concentrati tramite sedimentazione/ispessimento e devono essere elettricamente neutri mentre gli S possono solo venire trasportati dall'acqua e possono portare cariche ioniche.

Una differenza importante rispetto agli ASM No.1 e 2 è che nell' ASM No.3 i componenti solubili e particolati possono essere più agevolmente differenziati tramite filtrazione attraverso filtri con porosità di 0,45 μ m dal momento che una porzione significativa del substrato organico lentamente biodegradabile, X_S, negli ASM No.1 e No.2 sarebbe stato contenuto nel filtrato del refluo in ingresso.

L'ASM No.3 include solamente processi di trasformazione microbiologici, non sono compresi i processi di precipitazione chimica (considerati invece all'interno dell'ASM No.2).

Le ipotesi fondamentali alla base di ASM No.3 sono:

- Accumulo X_{STO}: si ha accumulo di materia nel metabolismo della biomassa, S_S è immagazzinato come componente cellulare X_{STO} e usato per la crescita, non vi è quindi crescita diretta sul substrato esterno;
- Decadimento endogeno: il decadimento della biomassa attiva è associato alla generazione di massa inerte endogena o di prodotti particolati inerti. Si tratta di un processo di ossidazione che richiede una quantità equivalente di accettore di elettroni;
- Alcalinità: l'alcalinità influisce sui processi di crescita e di respirazione.

Tabella 4.7 Variabili di stato in ASM3						
COMPONENTE	Definizione					
S_{I}	Sostanza organica inerte solubile					
S _S	Substrato facilmente biodegradabile solubile					
XI	Sostanza organica particolata inerte					
Xs	Substrato lentamente biodegradabile particolato					
Х _{вн}	Biomassa attiva eterotrofa					
X _{BA}	Biomassa attiva autotrofa					
X _{sto}	Accumulo interno di sostanza organica					
<i>S</i> ₀₂	Ossigeno disciolto					
S _{NO}	Azoto in forma di nitrito e nitrita					
S _{NH}	Azoto come NH_4^+ e NH_3					
S _{N2}	Azoto gassoso					
S _{ALK}	Alcalinità					

4.1.8.1 Variabili di stato

4.1.8.2 Parametri stechiometrici

I valori dei parametri sono riferiti a valori di letteratura per un'acqua reflua domestica a pH neutro e a 20°C.

Tabella 4.8 Parametri stechiometrici in ASM3							
SIMBOLO	PARAMETRO	UNITÀ	VALORE				
Y _{sto}	Fattore di resa eterotrofo aerobico per lo stacaggio del substrato solubile	mgCOD/mg COD	0.85				
Y _{sto,NOX}	Fattore di resa eterotrofo anossico per lo stacaggio del substrato solubile	mgCOD/mg COD	0.8				
Υ _H	Fattore di resa eterotrofo aerobico per la crescita sul substrato stoccato	mgCOD/mg COD	0.63				
Y _{H,NOX}	Fattore di resa eterotrofo anossico per la crescita sul substrato stoccato	mgCOD/mg COD	0.54				
Υ _Α	Fattore di resa autotrofa	mgCOD/mg N	0.24				
fxi	Frazione di materiale particolato inerte prodotto nella respirazione endogena	-					
fsi	Frazione di materiale solubile inerte prodotto nell'idrolisi	-	0				

4.1.8.3 Parametri cinetici

 Tabella 4.9
 Parametri cinetici in ASM3

SIMBOLO	PARAMETRO	UNITÀ	VALORE
µ _{Н,тах}	Rateo massimo di crescita eterotrofa	day ⁻¹	2
k sto	Rateo costante di stocaggio	day⁻¹	5
$\eta_{\scriptscriptstyle NO}$	Fattore di riduzione anossico	-	0.6

К ₀₂	Coefficiente di semisaturazione per l'ossigeno	mg O ₂ /L	0.2				
Κ _{ΝΟ}	Coefficiente di semisaturazione per i nitrati	mg N/L	0.5				
Ks	Coefficiente di semisaturazione per il substrato rapidamente biodegradabile	mg COD/L	2				
Ksto	Coefficiente di semisaturazione per il substrato stoccato	mg COD/mg COD	1				
K _{NH}	Coefficiente di semisaturazione per l'ammonio	mg N/L	0.01				
K _{ALK}	Coefficiente di semisaturazione per l'alcalinità	moleHCO3/m ³	0.1				
b _H	Rateo di respirazione endogena aerobica per gli eterotrofi	day ⁻¹	0.2				
b _{нғ NOX}	Rateo di respirazione endogena anossica per gli eterotrofi	day ⁻¹	0.1				
b _{sto}	Rateo di respirazione endogena aerobica per i prodotti stoccati all'interno della cellula	day ⁻¹	0.2				
b _{sto,NOX}	Rateo di respirazione endogena anossica per i prodotti stoccati all'interno della cellula	day ⁻¹	0.1				
μ _{Hmax,A}	Rateo massimo di crescita autotrofa	day⁻¹	1				
К _{д,NH}	Coefficiente di semisaturazione mg N/L per l'ammonio come substrato per gli autotrofi						

К _{А,О2}	Coefficiente di semisaturazione per l'ossigeno per gli autotrofi	mg O₂/L	0.5
K _{A,ALK}	Coefficiente di semisaturazione per l'alcalinità per gli autotrofi	moleHCO3/m ³	0.5
b _A	Rateo di respirazione endogena aerobica per gli autotrofi	day ⁻¹	0.15
b _{Ar NOX}	Rateo di respirazione endogena anossica per gli autotrofi	day ⁻¹	0.5
<i>k_H</i>	Rateo specifico massimo di idrolisi	day ⁻¹	3
K _X	Coefficiente di semisaturazione per il substrato lentamente biodegradabile	mg COD/ mg COD di biomassa	1

4.1.8.4 Processi fondamentali

- Idrolisi: questo processo rende disponibili tutti i substrati lentamente biodegradabili X_s contenuti nell'influente del sistema fanghi attivi. Questo processo è differente dall'analogo processo dell'ASM1: è di importanza minore per le velocità di consumo dell'ossigeno e di denitrificazione.
- 2. Accumulo aerobico del substrato rapidamente biodegradabile: questo processo descrive lo stoccaggio dl substrato rapidamente biodegradabile S_s nella forma di prodotti di accumulo interno alla cellula X_{STO.} Questo processo richiede energia in forma di ATP che è ottenuta dalla respirazione aerobica. Si assume che tutti i substrati prima divengano materiale stoccato e solo in seguito vengano assimilati dalla biomassa. Questo non è osservato nella realtà, tuttavia attualmente non è disponibile un modello attendibile per predire il flusso del substrato nell'accumulo, l'assimilazione e la dissimilazione, rispettivamente. Per questo motivo il Task Group propone al momento di adottare tale assunzione semplificativa.

- **3.** Accumulo anossico del substrato rapidamente biodegradabile: questo processo è identico allo stoccaggio aerobico, ma in questo caso la denitrificazione in luogo della respirazione aerobica fornisce l'energia richiesta. Non è chiaro se sia solo una frazione degli organismi eterotrofi X_H nel fango attivo sia in grado di compiere la denitrificazione o se tutti gli eterotrofi possano denitrificare ad una velocità inferiore rispetto alla respirazione aerobica. L'ASM3 considera questo fatto riducendo la velocità di stoccaggio anossico rispetto a quello aerobico, ma non individua due gruppi di organismi eterotrofi distinti.
- 4. Crescita aerobica degli eterotrofi: si assume che il substrato per la crescita degli eterotrofi consista unicamente nel materiale organico stoccato X_{STO}. Questa assunzione semplifica notevolmente il modello.
- 5. Crescita anossica degli eterotrofi: questo processo è simile alla crescita aerobica ma la respirazione è basata sulla denitrificazione. Anche in questo caso non è chiaro se tutti gli organismi eterotrofi X_H siano in grado di compiere la denitrificazione. Sperimentalmente si osserva una velocità di denitrificazione ridotta rispetto alla respirazione aerobica.
- 6. **Respirazione endogena aerobica:** questo processo descrive tutte le forme di perdita della biomassa e le richieste di energia non associate alla crescita considerando la respirazione correlata in condizioni aerobiche: decadimento (mantenimento), respirazione endogena , lisi, predazione, morte,... Il modello di questo processo è notevolmente diverso dal processo di decadimento introdotto dall'ASM1.
- **7. Respirazione endogena anossica:** questo processo è simile alla respirazione endogena aerobica ma tipicamente più lenta. In particolare i protozoi (predazione) sono notevolmente meno attivi in condizioni di denitrificazione che in condizioni aerobiche.
- **8. Respirazione aerobica dei prodotti di accumulo:** questo processo è analogo alla respirazione endogena. Esso assicura che i prodotti di accumulo decadano assieme alla biomassa.
- 9. Respirazione anossica dei prodotti di accumulo: questo processo è analogo al processo aerobico, ma in condizioni di denitrificazione [Cimarosti I., 2004].

4.1.8.5 Stechiometria dell'ASM3

La tabella 4.10 illustra la matrice stechiometrica $v_{j,i}$ dell'ASM No.3 assieme alla matrice di composizione $\iota_{k,i}$ proposta da Gujer e Larsen (1995). Mentre la matrice stechiometrica è nota dall'introduzione dell'ASM No.1, la matrice di composizione è meno conosciuta. In relazione alla tabella 4.10 la matrice di composizione può essere interpretata come segue: $\iota_{2,3}$ contiene il simbolo i_{NSS} e indica che ogni grammo di COD nella forma S_S contiene i_{NSS} grammi di N. L'indice k=2 si riferisce al secondo conservativo che è l'azoto, l'indice i=3 si riferisce al terzo componente che è S_S. S_S è misurato in termini di COD e l'azoto conservativo è misurato in grammi di N, i_{NSS} perciò indica la composizione di S_S in relazione all'azoto, per tale motivo $\iota_{k,i}$ viene chiamata matrice delle composizioni.

Tutti gli elementi vuoti di $v_{j,i}$ e di $\iota_{k,i}$ indicano il valore 0. Tutti i valori di x_j , y_j , e z_j possono essere ottenuti dall'equazione di conservazione (4.3) per i tre conservativi k: COD, azoto e carica ionica:

$$\sum_{i} v_{ji} i_{ki} = 0 \text{ per } i=1, \dots, 12$$
(4.3)

In questo caso viene enfatizzato che il coefficiente stechiometrico per S_{N2} in ogni processo di denitrificazione è il negativo del coefficiente per S_{NO} .

I coefficienti di composizione per il COD conservativo per S_{N2} (-1,71 g COD $g^{-1} N_2$), per S_{NO} (-4,57 g COD $g^{-1} NO_3$ -N) e per S_0 (-1 g COD $g^{-1} O_2$) sono negativi per i donatori di elettroni relativamente al riferimento redox che è NH₄, CO₂ ed H₂O.

I coefficienti stechiometrici per $X_{TSosservable}$ possono essere ricavati dall'equazione di composizione (4.3):

$$v_{j13} = \sum_{i} v_{ji} i_{4i} = 0 \text{ per } i=8, ..., 12$$
 (4.4)

E' noto che il tasso dell'energia biochimica (APT) della respirazione anossica è inferiore a quello della respirazione aerobica. Questo comporta che i coefficienti di resa aerobici (Y_{STOO2} ed Y_{HO2}) siano superiori a quelli anossici (Y_{STON0} ed Y_{HN0}). Assumendo che il tasso di energia anossica η_{anoxic} sia compreso tra lo 0 ed il 70 % del tasso di energia aerobico si applica la seguente relazione energetica:

$$\frac{1 - Y_{STO, O2}}{Y_{STO, O2}} = \frac{\eta_{anoxic} - (1 - Y_{STO, NO})}{Y_{STO, NO}} e \frac{1 - Y_{H,O2}}{Y_{H,O2}} = \frac{\eta_{anoxic} - (1 - Y_{H,NO})}{Y_{H,NO}}$$
(4.5)

Il quantitativo netto di biomassa X_H prodotta per unità di substrato S_S rimosso nell'ASM3 si ottiene dall'equazione (4.5):

 $Y_{net,O2} = Y_{STO,O2} * Y_{H,O2} \quad e \quad Y_{net,NO} = Y_{STO,NO} * Y_{H,NO}$ (4.6) [Henze et al., 2000]

4.1.8.6 Cinetiche dell'ASM3

Le espressioni cinetiche dell'ASM No.3 sono basate su funzioni di switch (termini iperbolici o di saturazione, equazioni di Monod, ecc.) per tutti i composti solubili consumati. Questa forma di cinetiche è stata scelta non tanto per evidenza sperimentale quanto per comodità in termini di computazioni matematiche. Queste funzioni di switch bloccano ogni attività biologica non appena la variabile di un processo raggiunge la concentrazione nulla, tale fatto costituisce un'importante differenza rispetto all'ASM No.1. Similmente per le variabili particolate le funzioni di switch sono in relazione

alle frazioni $X_{\text{STO}}/X_{\text{H}}$ ed $X_{\text{S}}/X_{\text{H}}$.

La tabella 5.11 è un riepilogo di tutte le espressioni cinetiche dell'ASM No.3. [Henze et al., 2000]

Tal	hella 4 10 Matrici stechiometrica		مالم دم	mnociz	vioni <i>i</i>								Сари	010 4
Ia		vj,i e u		mposiz		k, i.								
	Comp. i \rightarrow	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
j	Processo	So	Sıi	S₅	S _{NH}	S _{N2}	S _{NO}	S _{HCO}	Xı	Xs	Х _н	Х _{это}	Xa	Х _{тs}
\downarrow	Unità \rightarrow	O ₂	COD	COD	N	N	N	Moli	COD	COD	COD	COD	COD	TSS
1	Idrolisi		f _{SI}	x 1	y 1			Z 1		-1				-i _{xs}
Org	ganismi eterotrofi, denitrificazione	9				- -					ā	•••••••••••••••••••••••••••••••••••••••		
2	Stoccaggio aerobico di COD	x ₂		-1	y 2			Z ₂				Y _{STO,O2}		t ₂
3	Stoccaggio anossico di COD			-1	Уз	-x ₃	X 3	Z ₃				Y _{STO,NO}		t3
4	Crescita aerobica	X 4			y 4			Z4			1	-1/Y _{H,O2}		t4
5	Crescita anossica (denitrificazione)			<u></u>	Y 5	-x ₅	X 5	Z 5			1	-1/Y _{H,NO}		t5
6	Respirazione endogena aerobica	x ₆			y 6			Z ₆	f_{I}		-1			t ₆
7	Respirazione endogena anossica				y 7	-x ₇	X 7	Z 7	f _I		-1	A		t7
8	Respirazione aerobica di X _{STO}	X 8		4					-			-1		t ₈

Сар	pitolo 4																
9	Respirazione anos	sica di X _{sto}						-x 9	X 9		Z 9					-1	t9
Org	ganismi autotrofij	, nitrificazione					I	I	1					I			
10	Nitrificazione		X 10			y 10		1/Y _A	Z ₁₀					1	t ₁₀		
11	Respirazione endo	ogena aerobica	X ₁₁	İ		y ₁₁			Z ₁₁	fI				-1	t ₁₁		
12	Respirazione endo	ogena anossica				y 12	- x ₁₂	X 12	Z 12	fI				-1	t ₁₂		
Ма	trice delle compo	sizioni ι _{k,i}						<u>.</u>									
k	Conservativi																
1	COD	g COD	-1	1	1		-1,71	-4,57		1	1	1	1	1			
2	N	g N				4		5							4		
3	Carica ionica	Moli +															
	Osservabili							<u>.</u>									
4	TSS	g TSS		<u>.</u>			1	<u>.</u>									
D					•*••••••		·····	*****	£						a	a	

Tabe	bella 4.11 Espressioni delle velocità cinetiche ρ_j dell'A.S.M. No 3, con $\rho_j \ge 0$								
j	Processo↓	Velocità di processo ρj, con ρj ≥ 0							
1	Idrolisi	$K_h \frac{X_s / X_H}{K_x + X_s / X_H} X_H$							
	Organismi eterotrofi: den	itrificazione							
2	Stoccaggio aerobico di COD	$k_{STO} \frac{S_O}{K_O + S_O} \frac{S_S}{K_S + S_S} X_H$							
3	Stoccaggio anossico di COD	$k_{STO} \eta_{NO} \frac{S_O}{K_O + S_O} \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \frac{S_S}{K_S + S_S} X_H$							
4	Crescita aerobica	$ \mu_{H} \frac{S_{O}}{K_{O} + S_{O}} \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \frac{S_{HCO}}{K_{HCO} + S_{HCO}} $ $ \frac{X_{STO} / X_{H}}{K_{STO} + X_{STO} / X_{H}} X_{H} $							
5	Crescita anossica (denitrificazione)	$ \begin{array}{l} \mu_{H}\eta_{NO}\frac{S_{O}}{K_{O}+S_{O}}\frac{S_{NO}}{K_{NO}+S_{NO}}\frac{S_{NH}}{K_{NH}+S_{NH}} \\ \frac{S_{HCO}}{K_{HCO}+S_{HCO}}\frac{X_{STO}/X_{H}}{K_{STO}+X_{STO}/X_{H}}X_{H} \end{array} $							
6	Respirazione endogena aerobica	$b_{H,O2} \frac{S_O}{K_O + S_O} X_H$							
7	Respirazione endogena anossica	$b_{H,O2} \frac{S_O}{K_O + S_O} \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} X_H$							
8	Respirazione aerobica di X _{STO}	$b_{STO,O2} \frac{S_O}{K_O + S_O} X_{STO}$ $b_{STO,O2} \ge b_{H,O2}$							
9	Respirazione anossica di X _{STO}	$b_{STO,NO} \frac{S_O}{K_O + S_O} \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} X_{STO}$ $b_{STO,NO} \ge b_{H,NO}$							
	Organismi autotrofi: deni	trificazione							
10	Nitrificazione	$\mu_A \frac{S_O}{K_{A,O} + S_O} \frac{S_{NH}}{K_{A,NH} + S_{NH}} \frac{S_{HCO}}{K_{A,HCO} + S_{HCO}} X_A$							

```
Capitolo 4
```

11	Respirazione endogena aerobica	$b_{A,O2} \frac{S_O}{K_O + S_O} X_A$
12	Respirazione endogena anossica	$b_{A,NO} \frac{S_O}{K_O + S_O} \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} X_A$

4.1.9 Confronto ASM No.1 e ASM No.3

La maggiore differenza fra ASM No.1 e ASM No.3 è nell'importanza dell'accumulo nel metabolismo eterotrofo di materia. Nel modello ASM No.3 tutto il materiale rapidamente biodegradabile (S_S) è prima immagazzinato come componente cellulare (X_{STO}) che viene poi utilizzato per la crescita.

In AMS No.3 non c'è crescita diretta sul substrato esterno come in ASM No.1.

ASM No.3 è più semplice da calibrare a causa della conversione del modello grazie ai maggiori disaccoppiamenti interni. E' dimostrato che ASM No.3 funziona meglio per i reflui industriali dove i meccanismi di accumulo sono significativi o dove le zone non areate sono notevoli.

Se confrontato con l'ASM No.1, il No.3 comprende una descrizione più dettagliata dei processi interni alla cellula e premette un migliore adattamento dei processi di decadimento alle condizioni ambientali. L'importanza dell'idrolisi è stata ridotta e la degradazione dell'azoto organico solubile e particolato è stata integrata nei processi di idrolisi, di decadimento e di crescita.

Le espressioni cinetiche dell'ASM No.3 sono basate su funzioni di switch per tutti i composti solubili consumati. Questa forma di cinetiche è stata scelta non tanto per evidenza sperimentale quanto per comodità in termini di computazioni matematiche. Queste funzioni di switch bloccano ogni attività biologica non appena la variabile di un processo raggiunge la concentrazione nulla, tale fatto costituisce un'importante differenza rispetto all'ASM No.1.

Nell'ASM No.1 era stato introdotto un solo processo di decadimento (lisi) per descrivere la somma di tutti i processi di decadimento. Tale approccio era dovuto al fatto che nel 1985, quando l'ASM No.1 fu pubblicato, il potere computazionale degli elaboratori era ancora scarso. La descrizione più semplice possibile permetteva un notevole risparmio di tempo computazionale. Attualmente la computazione non costituisce più un simile limite alla simulazione, per cui è stato possibile introdurre una descrizione più realistica dei processi di decadimento: la respirazione endogena è vicina ai fenomeni osservati (tipicamente si misura una velocità di respirazione) e le costanti di velocità rilevanti possono essere ottenute direttamente ed

indipendentemente dai parametri stechiometrici. Il flusso di COD nell'ASM No.1 è piuttosto complesso. Il ciclo di morte-decadimento-rigenerazione degli eterotrofi ed il processo di decadimento dei nitrificatori sono fortemente correlati. I due processi di decadimento differiscono però notevolmente nei dettagli (Fig.4.11): questo produce una certa caoticità nell'ASM No.1. Nell'ASM No.3 tutti i processi di conversione dei due gruppi di organismi sono nettamente separati ed i processi di decadimento vengono descritti con modelli identici. Similmente all'ASM No.2, l'ASM No.3 include i composti di accumulo interno alla cellula. Questo implica che la biomassa venga modellizzata con una struttura interna della cellula. I processi di decadimento devono includere entrambe le frazioni della biomassa, per cui sono necessari ben quattro processi di decadimento (la perdita di $X_{\rm H}$ come quella di $X_{\rm STO}$ sia aerobica che anossica) e le cinetiche dei processi di crescita (aerobico ed anossico) devono essere in relazione al rapporto $X_{\rm STO}/X_{\rm H}$. [Henze et al., 2000]



4.2 Il software GPS-X 5.0

Il GPS-X[©] è un ambiente modulare per la simulazione di impianti di trattamento di acque reflue municipali ed industriali realizzato dall'azienda canadese *Hydromantis*.

Esso utilizza un'interfaccia grafica con l'utente per facilitare la costruzione del layout dell'impianto e l'implementazione delle simulazioni.

Il GPS-X[©] mette a disposizione dell'utente un'ampia gamma di modelli tra i quali scegliere, a seconda delle necessità.

La modellizzazione di un impianto di trattamento su larga scala richiede che vengano definiti un grande numero di parametri. Molti parametri possono venire misurati direttamente o stimati dalla letteratura, gli altri parametri richiedono tecniche di ottimizzazione non lineari dinamiche basate sui dati reali dell'impianto o su dati ottenuti in laboratorio da impianti pilota.

E' evidente che l'affidabilità del modello calibrato diminuisce rapidamente all'aumentare del numero dei parametri ottimizzati matematicamente.

In figura 4.12 è riportata la schermata riferita alla fase di creazione del layout dell'impianto, in questa prima fase l'utente può scegliere i sub-modelli più adatti a caratterizzare l'impianto da modellizzare.



Figura 4.12 Schermata GPS-X nella prima fase di creazione del modello

In figura 4.13 è invece riportata la schermata del GPS-X in cui il modello di calcolo è già stato costruito e si può procedere all'implementazione delle simulazioni sia allo stato stazionario che dinamico. Dall'immagine appare chiaro come in questa seconda fase il GPS-X permetta facilmente di impostare i parametri che si vogliono modulare e monitorare nelle varie simulazioni.



Figura 4.13 Schermata GPS-X nella fase di simulazione vera e propria

4.2.2 Le librerie

Una libreria del GPS-X è una collezione di modelli per i processi di trattamento che utilizza un set di componenti di base, o "*state variables*", le quali vengono integrate nel tempo.

A partire da tali variabili vengono calcolate la variabili dipendenti, o "*composite variables*".

Sono disponibili 6 librerie, in particolare si è presa in considerazione la libreria CN (Carbon Nitrogen).

E' evidente che ad una maggior complessità del modello corrisponde un numero via via più elevato di *state variables* presenti.

Un gruppo di *state variables*, in particolare l'ossigeno, la biomassa eterotrofa, i nitrati, l'ammoniaca, il substrato solubile e quello particolato, ecc. vengono calcolati dal GPS-X in qualsiasi punto di connessione del lay-

out. Ma queste variabili fondamentali non sono sempre facilmente misurabili o interpretabili per le applicazioni pratiche per cui a partire dalle *state variables* vengono calcolate numerose variabili composite o "*composite variables*" come ad esempio i solidi sospesi totali (TSS), BOD, COD e TKN. Il modo in cui le "*composite variables*"vengono calcolate a partire dalle variabili indipendenti cambia da libreria a libreria, e da modello a modello. Esse sono calcolate attraverso l'applicazione di costanti stechiometriche alle "*state variables*" come è schematizzato nella figura seguente in cui ad esempio la variabile composta Y2 è composta dalla somma della variabile indipendente x2 moltiplicata per il parametro k3 e della variabile indipendente x1 moltiplicata per il parametro k2.



Figura 4.14 Schema generico di calcolo delle Composite Variables

4.2.3 Layout di un impianto

Il programma permette di costruire il modello dell'impianto selezionando le unità di processo da un'apposita lista e di collegare tali unità secondo le necessità progettuali.

Ogni oggetto costituente un'unità di processo va definito univocamente assegnandogli un modello di comportamento ed i parameri caratteristici di tale modello.

Tutti gli oggetti possono essere descritti come privi di un volume o dotati di un volume, questi ultimi presentano uno o più punti di connessione influenti ed uno o più punti di connessione effluenti.

Il modello matematico con cui viene descritto un oggetto viene assegnato come una proprietà.

Per quanto riguarda l'influente si definiscono la composizione ed il flusso, è possibile rappresentare fedelmente l'andamento temporale sia delle portate di carico che di fluido.

Tutte le altre unità di processo presentano il menu "Parameters", suddiviso in "Physical, Operational" e "Consistency", che attraverso ulteriori sub-menu permettono di inserire i valori di tutti i parametri.

Inoltre è possibile impostare su quali variabili indipendenti ("State Variables") si intende compiere controlli interattivi durante la successiva simulazione dinamica.

Si possono definire le variabili dipendenti ("Display Variables") che verranno poi visualizzate nei grafici di output o che si desidera riportare su file di output.

Inoltre il GPS-X permette di definire nuove variabili, derivate dalle indipendenti, come medie giornaliere, SRT, F/M (rapporto "Food/Microorganisms") secondo le necessità del progettista.

4.2.4 Condurre le simulazioni

Modellizzazione e simulazione costituiscono un processo iterativo che implica lo sviluppo di un modello e la simulazione per osservarne il comportamento. Le simulazioni possono essere svolte sia allo stato stazionario che dinamico.

L'analisi allo stato stazionario assume che nessuna delle "state variables" vari nel tempo.

Trovare i valori delle "state variables" allo stato stazionario implica un processo iterativo di soluzione simultanea di un sistema di equazioni.

Il risolutore "steady-state" utilizzato nel GPS-X è una routine molto robusta basata su un approccio di ricerca diretta che non utilizza gradienti.

Spesso la convergenza allo steady-state appare lenta o diverge a causa del modo in cui si è fatto il set-up del modello, comunque in tutti i casi di scarsa convergenza l'utente può esaminare a fondo tutte le unità di processo per specificare i parametri nel modo più appropriato.

Il programma presenta molti parametri di regolazione che possono essere regolati per assicurare i risultati desiderati.

- si può impostare il numero di prove per l'iterazione, cioè il numero di volte che il risolutore ritenterà di raggiungere la convergenza se fallisce.
- si stabilisce una tolleranza per l'errore al di sotto della quale il risolutore ignora la variabile, cioè se il risolutore, facendo variare la "state variable", fa divenire l'errore inferiore a questo valore il risolutore ignora questa variabile considerandola allo stato stazionario.
- si imposta un valore della somma delle derivate delle "state variables" che serva come criterio per terminare l'iterazione: quando la somma è inferiore a tale valore (10.0 di default) si considera raggiunta la convergenza.

- la dimensione dello step tra le iterazioni viene pure impostata. Quando il risolutore riscontra un miglioramento tale "step" viene incrementato, mentre viene diminuito se non si è trovato alcun miglioramento; i fattori di espansione e di contrazioni vanno dunque indicati dall'utente. Il fattore di espansione è limitato dal "maximum step size in one iteration", questo è smorzato quando la soluzione di "steady-state" è raggiunta.E' presente un fattore che regola l'effetto di smorzamento nell'approccio finale
- l'entità dello step iniziale è regolato da un parametro di perturbazione iniziale, che normalmente è impostato inferiore al "maximum step size".
- è possibile impostare il numero massimo di iterazioni, come pure il numero massimo di iterazioni senza successo. Questo fa terminare i l risolutore "steady-state" se non c'è un miglioramento nella somma delle derivate in questo numero di iterazioni.

Il sistema di equazioni algebrico differenziali può essere risolto con metodi espliciti (Eulero o Runge-Kutta del quarto ordine) e questo offre notevoli vantaggi in termini di velocità di calcolo.

L'utente può scegliere tra:

- modello di Eulero;
- modello di Runge-Kutta (1 e 2);
- modello di Runge-Kutta-Fehlberg (1 e 2);
- modello di Adams-Moulton, etc.

Il modello di default è il modello di Runge-Kutta-Fehlberg del 4° ordine, che ha dimostrato essere valido per gran parte dei modelli.

I parametri numerici coinvolti nell'impostazione sono ben 27, essi includono limiti di campo di derivazione per le portate, per le "state variables", le derivate, i parametri , gli esponenziali ed i volumi.

Per trovare una soluzione che sia unica per il set delle equazioni differenziali che costituiscono il modello è necessario assegnare dei valori iniziali alle variabili.

Ci sono due modi per farlo:

- inserire i valori direttamente;

- calcolare i valori allo "steady-state" al tempo t=0 ed usarli come valori iniziali.

Se si adotta la prima procedura i valori vengono assegnati come dei parametri, il menu si chiama proprio "initialization".

Se non si conosce il comportamento dinamico prima di t=0 ed i valori sono inseriti direttamente, magari da dati registrati attraverso una campagna di

misure, non è sempre chiaro se il comportamento dopo t=0 rifletta accuratamente le dinamiche nel sistema modellizzato.

Errori relativamente piccoli nelle condizioni iniziali, di una singola "state variable", possono causare errori significativi nei risultati della simulazione. E' anche possibile che vengano inseriti valori che violano i vincoli di validità del modello (valori negativi per le concentrazioni, valori insensatamente elevati o ridotti) con un basso errore di integrazione, ma i risultati non sono validi.

Solo se si ha una conoscenza esatta delle dinamiche precedenti a t=0 è possibile determinare esattamente le derivate e, dunque, il comportamento del sistema.

In alternativa un modo sicuro per attribuire i valori iniziali è quello di usare il risolutore "steady-state" per calcolare i valori allo stato stazionario ed in seguito utilizzarli come valori iniziali.

4.2.5 Strumenti di analisi

Lo scopo dell'analisi è di fornire la possibilità di osservare dall'interno il comportamento del sistema modellizzato.

Una metodologia di analisi è l'analisi di sensitività, che consiste nell'osservazione degli outputs del modello in seguito a variazioni negli inputs. Si tratta di esaminare, tramite la simulazione, gli effetti che i cambiamenti nelle variabili indipendenti del modello hanno sulle variabili dipendenti del modello.

Le analisi di sensitività possono essere condotte nel GPS-X secondo due modalità : statica e dinamica.

Analisi allo stato stazionario

E' uno strumento utile quando non è necessario introdurre un'ulteriore complicazione data dai cambiamenti dinamici. Ad esempio una analisi allo "steady-state" può essere sufficiente per fare utili previsioni circa il comportamento dell'impianto e per avere un'idea delle relazione tra le variabili del modello.

Analisi dinamica

L'assunzione di un funzionamento allo stato stazionario è conveniente, ma non è una situazione realistica. Per osservare la dipendenza dal tempo delle variabili è necessario condurre analisi di sensitività dinamiche. Nell'analisi dinamica è di primaria importanza il criterio con cui si assegnano le condizioni iniziali.

Si hanno due modi per visualizzare i risultati dell'analisi:

- "*Time dynamic sensitivity analysis*"
- Permette di visualizzare la variabile dipendente selezionata su un grafico con il tempo in ascissa.
- "Phase dynamic analysis"
- Viene visualizzato il punto finale della simulazione dinamica per ogni valore della variabile indipendente. In questo grafico le variabili dipendenti sono rappresentate in funzione delle variabili indipendenti in un determinato istante temporale.

4.3 Conclusioni

Nella gestione di un impianto di depurazione acque di una determinata taglia e che in particolare tratti reflui a forte variabilità di carico inquinante in ingresso, è opportuno dotarsi di uno strumento, economicamente valido, che consenta di quantificare i vantaggi potenzialmente indotti da un intervento in termini di resa e di confrontare tra più soluzioni tutte tecnicamente valide ma economicamente molto distanti l'una dall'altra.

Lo strumento in questione è fornito dalla modellistica di simulazione: a partire dalla ricostruzione modellistica dell'impianto oggetto di studio è possibile simularne il comportamento sotto diverse condizioni di carico e ipotizzare cambiamenti o ampliamenti dello stesso, al fine di confrontare le rese di depurazione alle quali si perviene adottando diversi interventi di *upgrade* e la passività degli stessi.

La modellizzazione matematica dei processi di depurazione biologica delle acque reflue ha conosciuto, nel corso degli ultimi anni, un interesse scientifico sempre maggiore, il cui sviluppo ha favorito la nascita di nuovi modelli e nuovi software applicativi.

Le potenziali applicazioni progettuali e gestionali derivanti dall'utilizzo di modelli di simulazione matematica e la progressiva semplificazione dell'interfaccia dei software che implementano i modelli stessi, sono tali da permettere l'analisi di molteplici problematiche di natura biologica.

Nel corso del dimensionamento di un nuovo impianto o di parti di esso, la disponibilità di un modello di simulazione matematica costituisce un valido strumento decisionale per poter scegliere lo schema migliore tra quelli individuati inizialmente. Analogamente dal punto di vista gestionale, la possibilità di simulare interventi su determinati parametri di funzionamento, quali ad esempio la portata d'aria immessa in vasca di ossidazione, attivazione e spegnimento di pompe, consente di affrontare in modo più

efficace il verificarsi di determinate situazioni come precipitazioni intense, sovraccarichi organici in ingresso o interventi di manutenzione ordinaria o straordinaria.

Il modello ASM No.3 rappresenta ad oggi lo stato dell'arte dei modelli di simulazione di impianti a fanghi attivi; una corretta applicazione dello stesso richiede la determinazione sperimentale di un determinato numero di parametri caratterizzanti il refluo in ingresso e la biomassa operante nell'impianto.

L'ASM No.3 È STATO PROPOSTO DA GUJER ET AL. NEL 1999 AL FINE DI SUPERARE LE LIMITAZIONI DELL'ASM No.1, FORNENDO UN MODELLO DI PIÙ FACILE UTILIZZO E CALIBRAZIONE.

ASM NO.3 È PIÙ SEMPLICE DA CALIBRARE A CAUSA DELLA CONVERSIONE DEL MODELLO GRAZIE AI MAGGIORI DISACCOPPIAMENTI INTERNI. E' DIMOSTRATO CHE ASM NO.3 FUNZIONA MEGLIO PER I REFLUI INDUSTRIALI DOVE I MECCANISMI DI ACCUMULO SONO SIGNIFICATIVI O DOVE LE ZONE NON AREATE SONO NOTEVOLI.

A DIFFERENZA DEGLI ASM No.1 E No.2 , NELL' ASM No.3 I COMPONENTI SOLUBILI E PARTICOLATI POSSONO ESSERE PIÙ AGEVOLMENTE DIFFERENZIATI TRAMITE FILTRAZIONE.

AD OGNI MODO RIMANGONO NUMEROSI I PARAMETRI CINETICI E STECHIOMETRICI LA CUI DETERMINAZIONE PER UNA CORRETTA CALIBRAZIONE DEL MODELLO RICHIEDONO PROVE SPECIFICHE, IN PARTICOLARE DI TIPO RESPIROMETRICO COME VERRA' ILLUSTRATO NEL CAPITOLO 5.