1 Einleitung

Als die Menschen noch in kleinen Gemeinschaften lebten, gab es kaum Probleme mit der Beschaffung und der Entsorgung von Wasser. Siedlungen wurden dort gebaut, wo ausreichend Wasser vorhanden war. Die Abfallstoffe konnten sowohl auf dem Land als auch im Wasser auf natürliche Weise abgebaut werden. Die biologische Reinigungsleistung der Gewässer war ausreichend. Mit dem Entstehen von größeren Städten wurde die Trinkwasserbeschaffung zum Problem auf Grund dessen viele wasserbauliche Maßnahmen durchgeführt wurden. Um die Entsorgung des Wassers machte man sich jedoch lange Zeit wenige Gedanken. Auch mit der Einführung der Kanalisation wurde das Abwasser oft auf kürzestem Weg in die Flüsse geleitet mit dem Ergebnis, dass u.a. auch durch die fortschreitende Industrialisierung viele Flüsse und Gewässer für den zivilen Nutzen unbrauchbar wurden. In Deutschland begann man erst Anfang des 20. Jahrhunderts sich ernsthaft mit dem Abwasserproblem zu befassen. Allmählich verbot man das direkte Einleiten von Schmutzwasser und es wurden Methoden zur biologischen Abwasserreinigung entwickelt, aus denen das Belebtschlammverfahren als eines der wichtigsten Verfahren zur biologischen Abwasserreinigung hervorging. Viele moderne Kläranlagen arbeiten heute nach dem Prinzip des Belebtschlammverfahrens. Dabei werden die natürlichen Selbstreinigungsprozesse der Gewässer auf engstem Raum nachempfunden. Allerdings steigt bei Anwendung dieses Verfahrens gleichzeitig der energetische Aufwand und die notwendige Technologie, da der natürliche Reaktionsraum erheblich verkleinert wird.

Inzwischen ist diese weitergehende Abwasserreinigung, bestehend aus Kohlenstoff- und Stickstoffelimination (Nitrifikation und Denitrifikation) sowie der Phosphorentfernung gesetzlich vorgeschrieben und allgemeiner Stand der Technik. Die Rahmen-Abwasserverwaltungsvorschrift [Dar98, Dar99] schreibt Mindestanforderungen an den Reinheitsgrad des kommunalen Abwassers bezüglich der Einleitung von organischen Kohlenstoffverbindungen (CSB), des Ammonium- (NH_4^+-N) und Gesamtstickstoffs (N_{ges}) sowie der Begrenzung des Phosphoreintrages in die Gewässer vor. Diese teilweise strengen Grenzwerte stellen einen entscheidenden Schritt zur Verbesserung der Umweltbedingungen und insbesondere der Gewässerqualität dar. Flankierend dazu existiert ein Abwasserabgabengesetz, das Gebühren von den Betreibern kommunaler Abwasserreinigungsanlagen auf die Parameter Kohlenstoff, Stickstoff und Phosphor in Abhängigkeit der Schadstoffeinleitung festlegt. Außerdem können die Ablaufwerte durch die sogenannte "4 von 5 Regelung" durch qualifizierte Stichproben überwacht werden. Danach dürfen die Ergebnisse von vier der letzten fünf Uberprüfungen die Grenzwerte nicht überschreiten. Diese Überwachungspraxis und die existierenden Regelungen stellen heutzutage hohe Anforderungen an die Reinigungsleistung und die Prozessstabilität der Kläranlagen und erfordern dadurch zunehmend, den Abwasserprozess zu modellieren und zu simulieren. Auf Grund des hohen Kostendrucks auf die Betreiber kommunaler Kläranlagen ist zusätzlich ein wirtschaftlicher Anlagenbetrieb mit der Zielsetzung, die Betriebskosten zu minimieren, erstrebenswert. Gleichzeitig soll dabei auch die Belastung für die Umwelt möglichst gering gehalten werden. Diese Zielsetzung erfordert die Anwendung von Optimierungsstrategien.

Daher arbeiten gegenwärtig interdisziplinäre Forscherteams ([IWA,COS] u. a.) unter dem Gesichtspunkt einer nachhaltigen Entwicklung auf dem Wassersektor und der Wasserqualität an der Modellierung, Simulation und Optimierung (Abschnitt 1.1) sowohl des Entwurfs als auch der Betriebsführung von kommunalen Abwasserreinigungsanlagen mit dem Fernziel, die Umweltverschmutzung, hier insbesondere die der Vorfluter, ebenso wie die Betriebskosten zu reduzieren. Unter anderem ist dies eine Folge der nationalen und internationalen Regelungen, wie z. B. die der Europäischen Abwasserrichtlinie (91/271/EEC und 98/15/EEC). Große Anstrengungen werden unternommen, die Betrachtungen zur Abwasserreinigung auf eine anlagenweite Sichtweise auszudehnen einschließlich solcher Prozesse wie Schlammentwässerung, Überschussschlammentsorgung, Energieumwandlung durch Biogaserzeugung etc. Auch eine Einbeziehung des gesamten Abwassersammlernetzes oder wesentlicher Teile davon ist Gegenstand der Untersuchungen, um eine sogenannte Systemlösung zu entwickeln [SBB02].

Um die genannten Ziele zu erreichen, ist ein besseres Verständnis der mikrobiologischen und chemischen Zusammenhänge des Abwasserprozesses notwendig. Die Auswirkungen der Steuerungen und der Betriebsführung auf die Abwassersysteme, besonders auf die Ablaufqualität und die entstehenden Kosten, sind zu bewerten. Dabei sind Modellrechnungen sowohl beim Entwurf von neuen Anlagen als auch bei der Überwachung des Betriebes von existierenden Anlagen ein wichtiger Aspekt. Deshalb wurden in der Vergangenheit eine Reihe von mathematischen Modellen zur Beschreibung der komplexen Reinigungsprozesse entwickelt, z. B. [HHlA97,HGMvL00]. Die meisten Modelle werden zu Simulationszwecken, d. h. zur Lösung sogenannter Initialwertaufgaben, benutzt, in einigen wenigen Fällen im Zusammenhang mit der Dimensionierung einfacher Regler auch für Bewirtschaftungszwecke. Dies spiegelt sich auch in den zur Verfügung stehenden Simulationswerkzeugen für Abwassersysteme wider, u. a. [Hyd, IFA97].

Auf Grund des steigenden Aufwands beim Aufstellen von Computermodellen großer, komplexer und heterogener Systeme, siehe z.B. [MAÅ93, Ott99, PRF99], wird in dieser Arbeit ein objekt-orientierter Ansatz gewählt. Objekt-orientierte Modellierungssprachen für dynamische Systeme versprechen die einfachere, strukturierte und hierarchische Implementierung von mathematischem Modellwissen. Dies wurde z.B. in [Ott95a] für mechatronische Systeme gezeigt. Die Vorteile dieser Vorgehensweise sind die Eignung für fachübergreifende Modellierung, die Benutzung der allgemeinen Beschreibungsgleichungen physikalischer Phänomene, die Wiederverwendbarkeit von Modellkomponenten und eine hierarchische Modellstruktur. Diese Konzepte lassen sich auch vorteilhaft auf Abwasserreinigungssysteme anwenden, wie in [Rei03] gezeigt wird. Das Gesamtziel besteht jedoch im Aufbau eines objekt-orientierten Systemmodells und darüber hinaus in der nun möglichen Nutzung des automatisch generierten, effizienten Simulationscodes, der sowohl zur Simulation als auch für Steuerungs- und wie in dieser Arbeit gezeigt wird, zu Optimierungszwecken geeignet ist. Durch die Verfügbarkeit der sortierten, verkoppelten Modell-

gleichungen eines komplexen dynamischen Systems in der Form von Gleichung (1.1) und deren möglicher flexibler Verknüpfung mit modernen Berechnungsmethoden wird die Lösung sogenannter inverser Aufgabenstellungen praktisch erst ermöglicht, z. B. detaillierte Untersuchungen zur optimalen Systembewirtschaftung.

Bei der Berechnung von Gesamtsystemen müssen Teilmodelle der Systemkomponenten, z. B. von Vorklärung, Belebungsbecken oder Nachklärung, zu Systemmodellen kombiniert werden. Somit ist der erste Schritt auf diesem Weg die in dieser Arbeit beschriebene Modellierung der Abwasserreinigungsprozesse entsprechend ihrer physikalischen Gesetzmäßigkeiten und die Entwicklung einer umfangreichen Abwasserbibliothek Waste Water basierend auf den international akzeptierten Modellen und mit den entsprechenden Komponenten. Die Modellierung wird unter Nutzung der objekt-orientierten Modellierungssprache Modelica [Mod] durchgeführt. Das Softwarepaket Dymola [EBM⁺], das geeignete Methoden und Algorithmen zur Ausnutzung der objekt-orientierten Beschreibungsform enthält, wird zur Durchführung von Simulationsexperimenten und hauptsächlich zur Generierung des Gesamtsystemmodells zu Optimierungszwecken verwendet.

Als Referenzanlage für die simulativen Untersuchungen zur modellprädiktiven Bewirtschaftung von Abwasserreinigungsanlagen mit dem Ziel der Minimierung der Elektroenergie- bzw. der Gesamtkosten dient in dieser Arbeit die zentrale Kläranlage der Stadt Jena. In Thüringen wurden seit 1990 etwa 430 kommunale Abwasserbehandlungsanlagen neu errichtet oder umfangreich saniert. Dies brachte eine beachtliche Verbesserung der Gewässerqualität mit sich [ThM03], allerdings stiegen gleichzeitig die Abwasserbehandlungskosten und somit auch die Abwassergebühren. Eine der komplett sanierten Abwasserreinigungsanlagen in Thüringen ist die Kläranlage der Stadt Jena. Diese Anlage ist mit moderner Onlinemesstechnik und einem neuen Prozessleitsystem ausgestattet, wodurch sie sehr gut als Referenzobjekt für die Untersuchungen zur optimalen Bewirtschaftung von Kläranlagen in dieser Arbeit geeignet ist [Kö91, Kö96].

1.1 Modellierung, Simulation und Optimierung

Eine treffende Zusammenstellung zu den Begriffen Modellierung, Simulation und Optimierung, die auch sehr gut zu den behandelten Problemen in dieser Arbeit passt, ist in [Fra98a] dargestellt und soll daher in Auszügen an dieser Stelle zitiert werden.

Eine Definition für den Begriff Modell und den Sinn der Modellierung wird in [Cel91, Min65] folgendermaßen gegeben:

"A model (M) for a system (S) and an experiment (E) is anything to which E can be applied in order to answer questions about S."

Das Ziel der **Modellierung** ist demnach die Entwicklung eines geeigneten Systemmodells, mit dem anschließend Simulationsexperimente durchgeführt werden können. Die Eignung eines jeweiligen Modells wird durch die Art der Fragestellung und das zu ihrer Beantwortung durchzuführende Experiment bestimmt.

Eine grundlegende Beschreibungsform für dynamische Systeme sind gewöhnliche Differentialgleichungen. Das Systemmodell in Zustandsdarstellung [Lun04] hat dann die Form

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}[t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{z}(t), \mathbf{p}],
\mathbf{y}(t) = \mathbf{h}[t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{z}(t), \mathbf{p}],$$
(1.1)

wobei zusätzliche algebraische Gleichungen zur Definition von Ausgängen $\mathbf{y}(t)$ dienen.

Die **Simulation** des Systemverhaltens innerhalb eines vorgegebenen Zeithorizontes $t \in [t_0, t_f]$ ist ein naheliegendes Experiment, das auf ein Modell in der Form (1.1) angewendet werden kann. Dies geschieht in der Regel durch Lösen einer Initialwertaufgabe. Hierzu müssen die Anfangszustände $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$, die Eingangsverläufe $\mathbf{u}(t)$ und $\mathbf{z}(t)$ sowie die Parameterwerte \mathbf{p} vorgegeben werden. Die Durchführung des Experimentes kann direkt durch Lösung von (1.1) erfolgen, wodurch die Zustands- und Ausgangsverläufe $\mathbf{x}(t)$ und $\mathbf{y}(t)$, $t \in [t_0, t_f]$, ermittelt werden.

Häufig geht allerdings die Fragestellung bei den Experimenten über die Lösung von direkten Aufgabenstellungen hinaus. Weiterführende Untersuchungen können z. B. zum Ziel haben:

- die Ermittlung von Parameterwerten **p** für bekannte Eingangs- und Ausgangsverläufe (Parameterschätzproblem)
- \bullet die Ermittlung von Steuertrajektorien $\mathbf{u}(t)$ zum Erreichen von vorgegebenen Ausgangsverläufen (Steuerungsproblem)
- \bullet die Ermittlung von Parameterwerten \mathbf{p} bzw. Steuerungen $\mathbf{u}(t)$ und des zugehörigen Systemverhaltens zur Minimierung oder Maximierung einer Kostenfunktion

In dieser Arbeit werden folgende Beispiele betrachtet:

- die Ermittlung von Modellparametern für ein komplexes Belebtschlammmodell unter Verwendung von Messdaten der Referenzkläranlage Jena (Abschnitt 4.2)
- die Bestimmung von optimalen Bewirtschaftungen der Referenzkläranlage unter Einhaltung gesetzlicher und physikalischer Rahmenbedingungen für unterschiedliche Kriterien (Abschnitt 5.3)

Diese Aufgabenstellungen werden als invers bezeichnet, da Modelleingänge $\mathbf{u}(t)$ oder Parameter \mathbf{p} gesucht sind. Inverse Aufgabenstellungen können häufig in Form eines mathematischen Optimierungsproblems formuliert werden. Die **Optimierung** ist ein universelles Werkzeug zur Lösung von inversen Aufgabenstellungen.

1.2 Ziele der Arbeit

Diese Arbeit soll einen Beitrag zur optimalen Bewirtschaftung von biologischen kommunalen Abwasserreinigungsanlagen unter Anwendung der Methode der modellprädiktiven Regelung leisten. Dabei stehen die variablen Kosten beim Betrieb der Kläranlage im Vordergrund, die anhand von speziell anzupassenden Gütekriterien minimiert werden sollen. Die Umweltbelastung ist dabei möglichst gering zu halten. Die Schwerpunkte liegen in der geeigneten mathematischen Modellierung des komplexen Gesamtsystems und in der gezielten Verwendung der Modelle innerhalb zu formulierender Optimalsteuerungsprobleme. Es sollen allgemeingültige Verfahren sowohl zur Modellierung als auch zur Optimierung dynamischer Systeme eingesetzt werden, die einen flexiblen Modellaustausch des nichtlinearen Gesamtsystems (1.1) ermöglichen.

Dieser notwendige Modellaustausch zur Lösung inverser Aufgabenstellungen (siehe Abschnitt 1.1) ist bei Verwendung von existierenden Simulationswerkzeugen für Abwasserreinigungsanlagen nicht möglich und daher beschäftigt sich ein Großteil dieser Arbeit mit der erneuten, objekt-orientierten Modellierung von Systemkomponenten für Kläranlagen. Hierbei kann auf international anerkannte und umfangreiche Modelle aus der Literatur zurückgegriffen werden. Um die effiziente Implementierung des vorhandenen Modellwissens und die darauf aufbauende Formulierung von Optimierungsproblemen zu ermöglichen, werden aktuell entwickelte Verfahren zur Modellierung dynamischer Systeme eingesetzt. Die große Anzahl an Modellen für Belebungsbecken und Nachklärung soll daher in einer frei verfügbaren Bibliothek Waste Water in der objekt-orientierten Modellierungssprache Modelica verfügbar gemacht werden. Das Zusammentragen und die erneute Beschäftigung mit den auf physikalischen Gesetzmäßigkeiten beruhenden Modellgleichungen hat zum Ziel, möglichst einfache Beschreibungen und hierarchische Strukturen zu erhalten, mit denen die Erstellung nichtlinearer Gesamtmodelle möglich wird. Diese Modelle sollen als Grundlage für die Verwendung in Optimierungswerkzeugen und damit zur Formulierung und Lösung von nichtlinearen Optimierungsproblemen dienen.

1.3 Überblick über diese Arbeit

In Kapitel 2 werden die Grundprinzipien der biologischen kommunalen Abwasserreinigung nach dem Belebungsverfahren erläutert und die in die entwickelte Modelica-Bibliothek Waste Water aufgenommenen Modelle vorgestellt. Die modellierten Prozesse von drei verschiedenen Belebtschlammmodellen sowie von fünf unterschiedlich komplexen Nachklärbeckenmodellen werden dargestellt.

In Kapitel 3 wird die neue Modelica-Anwendungsbibliothek Waste Water entwickelt. Die objekt-orientierte Modellierungssprache Modelica mit ihren Eigenschaften und Vorzügen wird vorgestellt und ein Überblick über die Struktur von Waste Water gegeben. Nach der Definition von geeigneten Schnittstellen, werden hierarchisch strukturierte Implementierungen für Komponenten wie z. B. Vorklärung, Belebungsbecken und Nachklärung abgeleitet. Darüber hinaus werden Komponenten für Gebläse, Pumpen und Sensoren aufgebaut,

die eine Modellierung von Gesamtsystemen erst ermöglichen. Die Bibliothek Waste Water wird anhand der COST-Benchmark Studie [Cop01] verifiziert.

Kapitel 4 befasst sich mit der Anwendung der entwickelten Modelica-Bibliothek. Für die vorgestellte Referenzkläranlage wird ein objekt-orientiertes Systemmodell erstellt. Das mit der Simulationsumgebung generierte gleichungsbasierte Gesamtmodell der Referenzanlage wird zur Systemsimulation sowie zur Lösung inverser Aufgabenstellungen verwendet. Hauptanliegen dieses Kapitels ist die Formulierung sowohl eines Parameterschätzproblems als auch eines Optimalsteuerungsproblems für die Referenzanlage.

Das vorgestellte Optimalsteuerungsproblem der Referenzkläranlage wird in Kapitel 5 in einen modellprädiktiven Regelungsalgorithmus integriert und an einem repräsentativen Untersuchungszeitraum simulativ getestet. Es werden Untersuchungen zur optimalen Bewirtschaftung bezüglich der Minimierung der Elektroenergiekosten und der Gesamtkosten durchgeführt.

2 Modellierung von Abwasserreinigungsanlagen

Um ein besseres Verständnis über die mikrobiologischen und chemischen Zusammenhänge des Abwasserreinigungsprozesses und dessen Wechselwirkungen zu erhalten und eine Computersimulation zu ermöglichen, wurden in der Vergangenheit eine Reihe von mathematischen Modellen entwickelt. In diesem Kapitel werden zunächst die grundlegenden, in der kommunalen biologischen Abwasserreinigung ablaufenden Prozesse skizziert. Anschließend werden die am häufigsten verwendeten und international akzeptierten Modelle für Belebungsbecken, Nachklärungen und ein Modell für die Vorklärung vorgestellt.

2.1 Grundprinzipien der biologischen kommunalen Abwasserreinigung

Ziel der biologischen kommunalen Abwasserreinigung ist es, dem Abwasser den Charakter einer Nährlösung zu nehmen. Dabei nutzt man die natürlichen Selbstreinigungsprozesse von Gewässern, die in einer biologischen Kläranlage viel schneller und auf engerem Raum als in der Natur ablaufen. Somit kann man auch ein System zur biologischen Abwasserreinigung als ein vom Menschen geschaffenes Ökosystem betrachten ([GT98]). Hier ist allerdings der energetische Aufwand und die notwendige Technologie auf Grund des erheblich verkleinerten Reaktionsraumes viel größer. Die wesentlichen Reinigungsprozesse bei der biologischen kommunalen Abwasserbehandlung sind der Kohlenstoffabbau, die Nitrifikation, die Denitrifikation sowie die biologische und chemische Phosphorelimination. Im Anschluss an die Biologie folgt noch die Nachklärung, in der durch Sedimentation der Belebtschlamm vom gereinigten Abwasser getrennt wird.

Kohlenstoffabbau

Der Abbau der organischen Kohlenstoffverbindungen wird von den heterotrophen Mikroorganismen durchgeführt. Diese verwenden sowohl für den Baustoffwechsel ihrer Zellbestandteile als auch zur Deckung ihres Energiebedarfs organische Verbindungen. Die Umwandlung der organischen Kohlenstoffverbindungen in anorganische Endprodukte (z. B. Kohlendioxid und Wasser) beruht auf enzymatischen Reaktionen, auf die hier nicht eingegangen werden soll. Ausführlich sind diese in [Här90] oder [Hoe97] beschrieben. Der

Kohlenstoffabbau wird in den Belebtschlammmodellen mittels des Parameters CSB (Chemischer Sauerstoffbedarf) bilanziert und findet im aeroben und anoxischen Milieu statt. Als Beispiel sei hier nur die Summengleichung für den Abbau der Kohlenstoffverbindung Glucose angegeben:

$$C_6H_{12}O_6 + 6O_2 \longrightarrow 6CO_2 + 6H_2O.$$
 (2.1)

Die vollständige Umwandlung von 1 g Glucose entspricht etwa 970 mg CSB [IV03].

Nitrifikation

Unter der Nitrifikation versteht man die Umsetzung von Ammonium zu Nitrat. Sie wird von nitrifizierenden, obligat aeroben Bakterien durchgeführt, die zur Gruppe der autotrophen Organismen gehören. Die bekanntesten sind die Nitrosomonas und die Nitrobacter. Sie decken ihren Bau- und Energiestoffwechsel nur aus anorganischen Substanzen. Ammonium dient ihnen dabei als leicht oxidierbare Verbindung vorwiegend zur Deckung ihres Energiebedarfs. Als Kohlenstoffquelle zum Aufbau der Zellsubstanzen verwenden sie Kohlendioxid. Auf Grund der geringen Energieausbeute bei der Oxidation von Ammonium wachsen die Nitrifikanten im Vergleich zu den heterotrophen Organismen deutlich langsamer [Hoe97].

Die wesentliche Voraussetzung für die Nitrifikation ist, dass Stickstoff in Form von Ammonium vorliegt. Dieser wird größtenteils schon in der Kanalisation durch die Ammonifikation des gebundenen organischen Stickstoffs zu Ammonium gebildet.

Die Nitrifikation läuft in zwei Stufen ab, der Nitritation und der Nitratation. Die Nitritation wird von den Nitrosomonas bewirkt und wird durch folgende Reaktionsgleichung beschrieben:

$$2NH_4^+ + 3O_2 \longrightarrow 2NO_2^- + 2H_2O + 4H^+.$$
 (2.2)

In der zweiten Stufe wird das erzeugte, sehr instabile Nitrit weiter zu Nitrat oxidiert. Diese als Nitratation bezeichnete Oxidation wird von den Nitrobactern unter Energiegewinnung für das Zellwachstum durchgeführt und lässt sich wie folgt beschreiben:

$$2NO_2^- + O_2 \longrightarrow 2NO_3^-. \tag{2.3}$$

Fasst man nun beide Reaktionsgleichungen zu einer Summengleichung zusammen, sieht die Nitrifikation wie folgt aus:

$$NH_4^+ + 2O_2 \longrightarrow NO_3^- + H_2O + 2H^+.$$
 (2.4)

Die Nitrifikation wird durch höhere Ammonium- und Nitritkonzentrationen sowie durch die pH-Wert-Absenkung in ihrer Prozessgeschwindigkeit gehemmt. Daher besteht die Möglichkeit, dass sich die Nitrifikation durch die Senkung des pH-Wertes bei geringer Säurekapazität (Pufferkapazität) selbst hemmen kann. Außerdem ist die Nitrifikationsleistung, d. h. die Wachstumsgeschwindigkeit der autotrophen Organismen von der Abwassertemperatur abhängig.

Weiterhin ist die Nitrifikation der sauerstoffintensivste Prozess bei der biologischen Abwasserreinigung. So müssen für die Umsetzung von 1 g Ammonium ca. 4.6 g Sauerstoff