

АЛЕКСАНДР НИКОЛАЕВИЧ КИРИЛЛОВ

доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории моделирования природно-технических систем, Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН, профессор кафедры математического анализа математического факультета, Петрозаводский государственный университет (Петрозаводск, Российская Федерация)
kirillov@krc.karelia.ru

НИКОЛАЙ ВАСИЛЬЕВИЧ СМИРНОВ

аспирант, Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН, преподаватель кафедры теории вероятностей и анализа данных математического факультета, Петрозаводский государственный университет (Петрозаводск, Российская Федерация)
smirnov_work@mail.ru

ТАТЬЯНА ВИКТОРОВНА РЕЙСС

гидробиолог испытательной лаборатории контроля качества воды, ОАО «ПКС» «Водоканал» (Петрозаводск, Российская Федерация)
smirnov_work@mail.ru

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ НИТРИФИКАЦИИ И ОКИСЛЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ В ПРОТОЧНОЙ БИОСИСТЕМЕ*

Целью данной работы является разработка математической модели биохимических процессов в проточных биосистемах для решения задач прогнозирования и управления. К проточным биосистемам, в частности, относятся аэротенки, в которых происходит очистка сточных вод с помощью активного ила. На основе предлагаемой модели предполагается разработка методов стабилизации процесса биоочистки. На основе компартментального подхода предложена математическая модель взаимосвязанных процессов нитрификации и окисления органических веществ. Динамика двух агрегированных видов субстратов и соответствующих видов микроорганизмов описывается системой нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений. В правые части уравнений введены пороговые функции, позволяющие учесть преимущественное протекание процессов нитрификации или окисления в соответствующих зонах аэротенка. При этом аэротенк идеального перемешивания разбивается на компартменты, каждому из которых соответствует свой вектор текущих и начальных состояний. Вследствие недостатка экспериментальных данных, что характерно для изучаемых процессов, параметрическая идентификация математических моделей промышленных проточных биосистем является трудноразрешимой проблемой. Для ее частичного решения в статье используется метод сканирования и указывается путь дальнейшего уточнения полученных значений параметров.

Ключевые слова: проточная биосистема, аэротенк, нитрификация, окисление, дифференциальные уравнения, параметрическая идентификация

ВВЕДЕНИЕ

Проточные биосистемы, к которым можно отнести и систему биологической очистки сточных вод активным илом, представляют значительный интерес как для биологов, экологов, так и для специалистов в области математического моделирования. Для последних это связано с постановкой новых математических задач и разработкой методов исследования динамики соответствующих процессов.

Для описания такого рода процессов обычно используют системы нелинейных дифференциальных уравнений. Из-за сложности моделей, недостатка экспериментальных данных параметрическая идентификация таких систем является трудноразрешимой задачей. В данной статье

предложена модель процесса биоочистки и подход к решению задачи параметрической идентификации.

ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССА

На большинстве очистных сооружений сточная вода, пройдя предварительные этапы обработки, попадает в специальные резервуары, аэротенки, где происходит биологическая очистка. В работе рассмотрен процесс, происходящий в аэротенке-смесителе, в который активный ил и сточная вода поступают непрерывно. Иловая смесь движется вдоль оси аэротенка. Сточная вода, содержащая разные виды субстрата, поступает с одинаковой объемной скоростью равными порциями в нескольких точках аэротенка.

На рис. 1 приведена схема аэротенка очистных сооружений г. Петрозаводска. Выделим два вида субстрата, которые окисляются на очистных сооружениях:

- органический субстрат, характеризуемый концентрацией S_s ;
- азот в аммонийной форме, характеризуемый концентрацией S_{NH} .

Очистные сооружения, как правило, успешно справляются с окислением органического субстрата, достаточная же степень окисления аммония может не достигаться. Возникает проблема математического моделирования процесса нитрификации с целью уменьшения величины S_{NH} в очищенной воде.

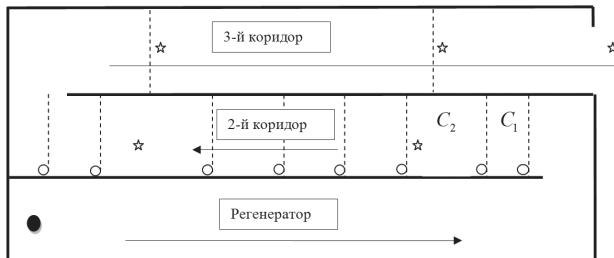


Рис. 1. Схема аэротенка:

- – место вхождения сточной воды в аэротенк;
- – место вхождения иловой смеси в аэротенк;
- ☆ – место отбора проб;
- – направление движения иловой смеси;
- – границы компартментов

В аэротенке выделим участок длиной l_{el} (например, $l_{el} = 1$ м) и объем $V_{el} = a \cdot b \cdot l_{el}$, где a – ширина коридора аэротенка, b – высоты иловой смеси в аэротенке. Пусть за время Δt в систему попадают объемы ΔV_{cv} , ΔV_{il} сточной воды и активного ила соответственно. Тогда $v_1 = \frac{\Delta V_{cv}}{\Delta t}$ и $v_2 = \frac{\Delta V_{il}}{\Delta t}$ – объемные скорости вхождения в аэротенк сточной воды и активного ила соответственно. $t_{el} = \frac{V_{el}}{v_1 + v_2}$ – время продвижения иловой смеси на расстояние l_{el} . Учитывая, что сточная вода подается через n труб, рассчитаем объем, который входит через одну трубу за время t_{el} : $V_{cv} = \frac{v_1 \cdot t_{el}}{n}$.

Иловая смесь, двигаясь по коридору аэротенка, попадет к месту вхождения сточной воды (через очередную трубу), где происходит их перемешивание. Таким образом, места вхождения сточной воды естественным образом делят аэротенк на компартменты (C_i , $i=1, 2, \dots$), объемы которых равны $V_i = k_i \cdot V_{el}$, где k_i – количество участков длиной l_{el} , входящих в C_i . Будем предполагать, что в каждом компартменте происхо-

дит идеальное перемешивание иловой смеси, которой на прохождение каждого компартмента требуется время $t_i = k_i \cdot t_{el}$. За время t_i в C_i вливается сточная вода объемом $V_{cv, i} = k_i \cdot V_{cv}$.

Пусть S_s^* , S_{NH}^* и $S_{s,i}$, $S_{NH,i}$ – концентрации субстратов в сточной воде и иловой смеси на выходе из i -го компартмента соответственно, $X_{H,i}$, $X_{A,i}$ – концентрации гетеротрофных и автотрофных микроорганизмов иловой смеси на выходе из i -го компартмента соответственно.

При попадании иловой смеси в следующий компартмент, где она перемешивается со сточной водой, концентрации субстратов и микроорганизмов активного ила на входе в $i+1$ -й компартмент рассчитываются по формулам:

$$S_{s,i+1}^{in} = \frac{S_s^* \cdot V_{cv,i} + S_{s,i} \cdot V_i}{V_{cv,i} + V_i}, \quad S_{NH,i+1}^{in} = \frac{S_{NH}^* \cdot V_{cv,i} + S_{NH,i} \cdot V_i}{V_{cv,i} + V_i}, \quad (1)$$

$$X_{H,i+1}^{in} = \frac{X_{H,i} \cdot V_i}{V_{cv,i} + V_i}, \quad X_{A,i+1}^{in} = \frac{X_{A,i} \cdot V_i}{V_{cv,i} + V_i}.$$

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Группой исследователей во главе с M. Henze был предложен ряд моделей для описания процесса биоочистки [7]. Их подход носит методологический характер и указывает направления для получения конкретных моделей. На основании подхода, предложенного этой группой, разработана модель, учитывающая динамику концентраций органического субстрата, азота в аммонийной форме и микроорганизмов, окисляющих эти субстраты.

В активном иле выделим 2 группы микроорганизмов: гетеротрофные и автотрофные. В общей биомассе гетеротрофов значительно больше, чем автотрофов [8]. Гетеротрофные микроорганизмы преимущественно окисляют органический субстрат, обеспечивая за счет этого рост своей биомассы. Концентрацию органического субстрата будем характеризовать показателем БПК_{полн} (полное биохимическое потребление кислорода для окисления субстрата). Однако последний показатель включает в себя расход кислорода и на процессы окисления других веществ, в том числе тех, которые не будут окислены в аэротенке. Поэтому введем пороговую функцию f_1 , позволяющую описать переключение процесса окисления с органики на аммоний азота при достижении концентрации S_s некоторого значения $c + \delta$. В качестве значения c можно взять БПК_{полн} надиловой жидкости на выходе из аэротенка. Константа $\delta > 0$ – достаточно малая величина, которая обеспечит ограничение на уменьшение концентрации S_s до величины чуть большей c , что необходимо для непрерывности предложенной ниже математической модели. Значение $\delta = 10^{-3}$ при проведении компьютерных экспериментов оказалось

вполне достаточным. Пусть $f_1 = \frac{1}{1 + e^{\frac{10^6(c+\delta-1)}{S_s}}}$. Поведение функции f_1 имеет ступенчатый характер. При этом $f_1 \approx 0$ при $S_s \in (0, c + \delta - \varepsilon)$, $f_1 \approx 1$ при $S_s \in (c + \delta + \varepsilon, \infty)$, где $\varepsilon > 0$ – достаточно малая величина. Константа 10^6 обеспечивает близость функции f_1 к разрывной ступенчатой функции.

Наличие органических веществ активизирует развитие гетеротрофных микроорганизмов, которые выигрывают у нитрифицирующих микроорганизмов в борьбе за кислород [2]. В результате процесс нитрификации сначала в значительной мере затормаживается и начинает активизироваться по мере удаления органического субстрата. Введем функцию, отражающую этот факт: $f_2 = \frac{S_{NH}}{K_\alpha + S_{NH}} / (S_s - c)$, где K_α – некоторая постоянная. Заметим, что $f_2 \in (0, 1)$, f_2 возрастает при увеличении отношения концентраций $S_{NH} / (S_s - c)$.

Используя зависимость Моно $f(S, K) = \frac{S}{S+K}$ и введенные выше функции f_1, f_2 , получаем динамическую систему, описывающую процесс биоочистки в компартменте:

$$\begin{aligned}\dot{S}_s &= Q(S_s^{in} - S_s) - \frac{\mu_H}{Y_H} f(S_s, K_s) f(S_o, K_{o,H}) \frac{1}{1 + e^{\frac{10^6(c+\delta-1)}{S_s}}} X_H, \\ \dot{S}_{NH} &= Q(S_{NH}^{in} - S_{NH}) - \\ &- \frac{\mu_A}{Y_A} f(S_{NH}, K_{NH}) f(S_o, K_{o,A}) \frac{S_{NH} / (S_s - c)}{K_\alpha + S_{NH} / (S_s - c)} X_A,\end{aligned}\quad (2)$$

$$\begin{aligned}\dot{X}_H &= Q(X_H^{in} - X_H) + \left(\mu_H f(S_s, K_s) f(S_o, K_{o,H}) \frac{1}{1 + e^{\frac{10^6(c+\delta-1)}{S_s}}} - b_H \right) X_H, \\ \dot{X}_A &= Q(X_A^{in} - X_A) + \left(\mu_A f(S_{NH}, K_{NH}) f(S_o, K_{o,A}) \frac{S_{NH} / (S_s - c)}{K_\alpha + S_{NH} / (S_s - c)} - b_A \right) X_A,\end{aligned}$$

где $Q = \frac{1}{T}$ [1] – расход смеси ила и сточной воды, T – время прохождения аэротенка иловой смесью, S_o – концентрация растворенного кислорода;

Концентрации соответственно на входе и выходе компартмента: S_s^{in}, S_s – растворенных органических веществ; S_{NH}^{in}, S_{NH} – растворенного азота в аммонийной форме; X_H^{in}, X_H – гетеротрофных микроорганизмов; X_A^{in}, X_A – автотрофных микроорганизмов.

Параметры модели: K_s – константа полунасыщения гетеротрофов органическими веществами; K_{NH} – константа полунасыщения автотрофов амmonием азота; $K_{o,H}$ – константа полунасыщения гетеротрофов кислородом; $K_{o,A}$ – константа полунасыщения автотрофов кислородом; Y_H – константа перехода массы органического субстрата в биомассу гетеротрофов; Y_A – константа перехода массы аммония азота в биомассу автотрофов; b_H – скорость рас-

пада гетеротрофов; b_A – скорость распада автотрофов; μ_H – максимальная скорость роста гетеротрофов; μ_A – максимальная скорость роста автотрофов.

Для нахождения концентраций на выходе из каждого компартмента производится численное интегрирование системы (2). Результаты интегрирования с использованием параметров из таблицы представлены на рис. 2 и 3. Концентрации на входе в каждый компартмент вычисляются по формулам (1). На рис. 2 показано изменение концентраций в первом компартменте, причем характер изменения сохраняется для всех компартментов, которым на вход подается сточная вода. В остальных компартментах изменение концентраций монотонно. Рис. 3 отражает изменение концентраций во времени при прохождении выделенного объема смеси через аэротенк (по всей длине). «Всплески» соответствуют моментам времени прохождения этим объемом участков входа сточной воды.

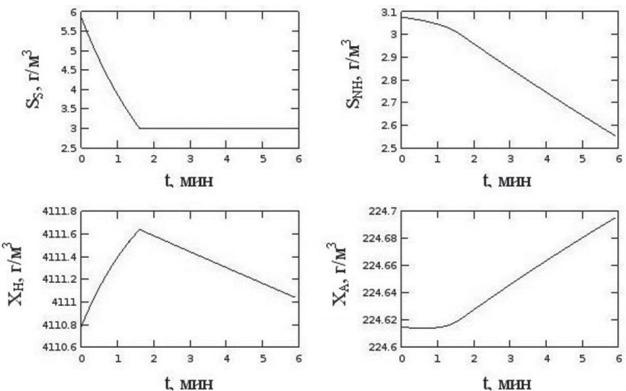


Рис. 2. Динамика концентраций в первом компартменте

Следует отметить, что представленная в данной работе модель позволяет более адекватно описывать процессы окисления органики и нитрификации по сравнению с моделью из [6], что достигается введением соответствующих пороговых функций.

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

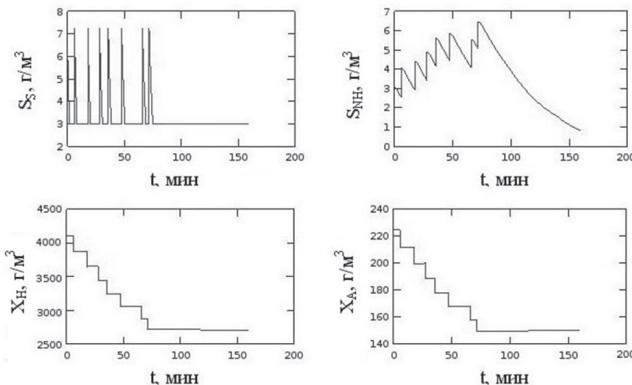
Задача параметрической идентификации математических моделей процесса биоочистки является сложной проблемой в силу следующих причин:

- невозможность учесть в модели все происходящие процессы;
- труднодоступность, а иногда невозможность получения экспериментальных данных;
- «зашумленность» имеющихся данных.

В связи с недостатком экспериментальных данных большинство методов параметрической идентификации не применимы. Для решения задачи использован метод сканирования [3] в области допустимых значений параметров, определенной с использованием полученных в [8] резуль-

татов. Решением является набор параметров $P = (Y_H, Y_A, \mu_H, \mu_A, b_H, b_A, K_S, K_{NH}, K_{O,H}, K_{O,A}, K_a)^T$, который минимизирует целевой функционал $J = \sum_{i=1}^{n_y, N} w_i (y_i - y_i^m)^T (y_i - y_i^m)$, где w_i – весовой коэффициент, n_y – количество наблюдаемых переменных, N – количество точек сбора экспериментальных данных, y_i , y_i^m – экспериментальные и модельные данные соответственно. Численное моделирование проводилось с помощью кластера «Центра высокопроизводительной обработки данных» (ЦКП КарНЦ РАН, 2012–2013). Получение модельных данных проводилось путем решения системы (2) методами прогноза и коррекции и Адамса.

При получении экспериментальных данных общепринятая в практике допустимая погрешность по концентрации аммония составляет $\pm 0,5 \frac{g}{m^3}$, по концентрации микроорганизмов – 14 %.



Проведены компьютерные эксперименты, в которых экспериментальными данными были: БПК_{полн} на выходе из аэротенка; концентрации аммония азота y_1 и общей биомассы микроорганизмов y_2 на входе, в четырех точках аэротенка и на выходе из него. Эти данные были получены на очистных сооружениях г. Петрозаводска в 2012 году. С помощью метода сканирования

был получен набор параметров, минимизирующий целевой функционал J .

Значения параметров

Параметр	Значение	Единицы измерения
Y_H	0,38	г биомассы · (г БПК _{полн}) ⁻¹
Y_A	0,24	г биомассы · (г аммония азота) ⁻¹
μ_H	5,5	сут. ⁻¹
μ_A	0,58	сут. ⁻¹
b_H	0,05	сут. ⁻¹
b_A	0,05	сут. ⁻¹
K_S	93	г БПК _{полн} · м ⁻³
K_{NH}	4,7	г аммония азота · м ⁻³
$K_{O,H}$	0,05	г О ₂ · м ⁻³
$K_{O,A}$	0,77	г О ₂ · м ⁻³
K_a	5	безразмерная величина

ВЫВОДЫ

Предложена математическая модель процесса биоочистки, учитывающая окисление органики, аммония азота и динамику биомассы активного ила. При этом используется компартментальный подход. Специфика моделируемого объекта позволяет редуцировать базовую модель, предложенную в [7], и рассматривать систему, содержащую меньшее количество дифференциальных уравнений. В результате появляется возможность параметрической идентификации модели при небольшом количестве экспериментальных данных. С помощью метода сканирования найден набор параметров, наиболее удовлетворяющий экспериментальным данным.

Возможно дальнейшее уточнение значений параметров с использованием теории чувствительности [4], [5]. Предполагается развитие модели путем введения уравнения динамики концентрации кислорода, что позволит решить задачу управления процессом биоочистки.

* Работа выполнена при поддержке Программы стратегического развития ПетрГУ рамках реализации комплекса мероприятий по развитию научно-исследовательской деятельности на 2012–2016 гг.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вавилин В. А. Время оборота биомассы и деструкция органического вещества в системах биологической очистки. М.: Наука, 1986. 143 с.
2. Жумур Н. С. Управление процессом и контроль результата очистки сточных вод на сооружениях с аэротенками. М.: Луч, 1997. 172 с.
3. Метод сканирования [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://flowmetrika.narod.ru/_algorithms/algoritm_metod_skanirovania.htm
4. Пупков К. А. и др. Методы классической и современной теории автоматического управления: В 3 т. Т. 1: Анализ и статистическая динамика систем автоматического управления. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2000. 748 с.
5. Розенвассер Е. Н., Юсупов Р. М. Чувствительность систем автоматического управления. Л.: Энергия, 1969. 208 с.

6. Смирнов Н. В. Математическое моделирование процесса биологической очистки сточных вод // Ярославский педагогический вестник. Сер. «Естественные науки». 2012. Т. 3. № 3. С. 44–49.
7. Henze M., Gujer W., Takashi M., Van Loosdrecht M. Activates sludge models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3. London: IWA Publishing. Scientific and Technical Report series, 2000. 130 p.
8. Boukroune B., Darouach M., Zasadzinski M., Gille S. A nonlinear observer for an activated sludge wastewater treatment process // USA, American Control Conference. 2009. P. 1027–1033.

Kirillov A. N., Institute of Applied Mathematical Research of the Karelian Research Centre of RAS,
Petrozavodsk State University (Petrozavodsk, Russian Federation)

Smirnov N. V., Institute of Applied Mathematical Research of the Karelian Research Centre of RAS,
Petrozavodsk State University (Petrozavodsk, Russian Federation)

Reyss T. V., JSC «PKS», «Vodokanal» (Petrozavodsk, Russian Federation)

MATHEMATICAL MODELING OF NITRIFICATION AND ORGANIC MATTER OXIDATION PROCESSES IN FLOW-THROUGH BIOSYSTEM

We developed a mathematical model of biochemical processes occurring in the flow-through biosystems for the purpose of prediction and control of the above-mentioned processes. A wastewater treatment aeration tank is estimated as an example of such a system. We have considered a well-mixed continuous aeration tank divided into compartments. Vectors of current and initial states correspond to each compartment. The nitrification and organic matter oxidation mathematical model is proposed. Dynamics of the two types of aggregated substrates and related types of microorganisms are described by the system of nonlinear ordinary differential equations. The threshold functions are introduced in the right-hand side of the equations. This makes nitrification or oxidation of organic matter in the aeration tank possible. The industrial flow-through biosystem parametrical identification is a complex problem due to insufficient amount of experimental data. A scanning method is used to obtain a numerical solution to this problem. Perspectives of the further model development and ways of more precise parameters' assessment are discussed.

Key words: flow-through biosystem, aeration tank, nitrification, oxidation, differential equations, parametric identification

REFERENCES

1. Vavilin V. A. *Vremya oborota biomassy i destruktsiya organicheskogo veshchestva v sistemakh biologicheskoy ochistki* [Turnover time of biomass and degradation of organic matter in biological treatment systems]. Moscow, Nauka Publ., 1986. 143 p.
2. Zhmur N. S. *Upravlenie protsessom i kontrol' rezul'tata ochistki stochnykh vod na sooruzheniyakh s aerotankami* [Process management and control of cleaning results at wastewater treatment plants equipped with aeration tanks]. Moscow, Luch Publ., 1997. 172 p.
3. Metod skanirovaniya [Scanning Method]. Available at: http://flowmetrika.narod.ru/_algorithms/algoritm_metod_skanirovania.htm
4. Pupkov K. A. et al. *Metody klassicheskoy i sovremennoy teorii avtomaticheskogo upravleniya. T. I: Analiz i statisticheskaya dinamika sistem avtomaticheskogo upravleniya* [Methods of classical and modern automatic control theory. Vol. 1: Analysis and statistical dynamics of automatic control systems]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 2000. 748 p.
5. Rozenvasser E. N., Yusupov R. M. *Chuvstvitel'nost' sistem avtomaticheskogo upravleniya* [Sensitivity of Automatic Control Systems]. Leningrad, Energia Publ., 1969. 208 p.
6. Smirnov N. V. Mathematical modeling of biological wastewater treatment [Matematicheskoe modelirovanie protsessov biologicheskoy ochistki stochnykh vod]. *Yaroslavskiy pedagogicheskiy vestnik. "Estestvennye nauki"*. 2012. Vol. 3. P. 44–49.
7. Henze M., Gujer W., Takashi M., Van Loosdrecht M. Activates of sludge models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3. London, IWA Publishing. Scientific and Technical Report series, 2000. 130 p.
8. Boukroune B., Darouach M., Zasadzinski M., Gille S. A nonlinear observer for an activated sludge wastewater treatment process // USA, American Control Conference. 2009. P. 1027–1033.

Поступила в редакцию 08.04.2013