

活性污泥数学模型求解过程的应用研究

方荣兆¹, 范岳峰¹, 甘一萍², 王佳伟², 常江²

(1. 上海昊沧系统控制技术有限责任公司, 上海 200030; 2. 北京城市排水集团有限责任公司
科技研发中心, 北京 100022)

摘要: 活性污泥模型 (ASMs) 被广泛地使用在设计 and 过程仿真中, 其特征是用物料平衡方程来描述活性污泥工艺流程中各个连续流反应器中各种物质的变化, 表现为一系列相关联的常微分方程组。由于这些常微分方程组没有解析解, 只能用数值方法求解。分别运用 Euler 法、梯形公式法、定步长的三阶和四阶 Runge-Kutta 法及变步长的 Runge-Kutta-Fehlberg 法对这些常微分方程组进行求解, 对不同方法的计算效率、计算精度和误差累积进行评价, 发现变步长的 Runge-Kutta-Fehlberg 法为最优的求解方法。

关键词: 活性污泥模型; 常微分方程组; 求解方法

中图分类号: X703 **文献标识码:** C **文章编号:** 1000-4602(2010)17-0054-04

Application of Solving Process for Activated Sludge Models

FANG Rong-zhao¹, FAN Yue-feng¹, GAN Yi-ping², WANG Jia-wei², CHANG Jiang²

(1. Shanghai HC System Control Technology Co. Ltd., Shanghai 200030, China; 2. Center for Technology Development Beijing Drainage Group Co. Ltd., Beijing 100022, China)

Abstract: Activated sludge models (ASMs) are widely used in design and process simulation and their characteristics are that the variations of different matters in continuous flow reactors during activated sludge process are described by the mass balance equations which are written as a set of coupled ordinary differential equations (ODEs). Because there is no analytic solution for ODEs, some numerical methods are used to solve these equations. These numerical methods include Euler method, trapezoid method, fixed step third order Runge-Kutta method, fixed step fourth order Runge-Kutta method and variable step Runge-Kutta-Fehlberg method. In comparison of computational efficiency, computational accuracy and error accumulation from these methods, the variable step Runge-Kutta-Fehlberg method is suitable for dynamic simulation.

Key words: activated sludge models (ASMs); ordinary differential equations (ODEs); solving method

国际水协 (IWA) 发布的活性污泥模型 (ASM1、ASM2d、ASM3)^[1] 可以有效地描述生化池中发生的反应, 该模型以矩阵的形式对生化池中各种溶解性和颗粒性底物与微生物生长、死亡的相互关系进行

了表述。活性污泥模型的结构包括两部分: 衡量工艺过程消耗或生成的某种组分的计量系数矩阵和表征工艺过程速率的向量, 这种模型结构从最初的 ASM1 确立后, 随后的 ASM2d^[2]、ASM3 都沿用了这

基金项目: 国家科技支撑计划项目 (2006BAC19B01)

一模型概念。

ASM1描述了有机物去除、硝化反硝化过程,把表征 C、N 的常规指标细分为 7 种溶解性组分和 6 种颗粒性组分(13 种模型组分),共包括 8 个工艺过程、5 个化学计量系数、14 个动力学参数,最终表现为含有 13 个常微分方程的方程组。

ASM2d 在 ASM1 的基础上,增加了描述除磷过程的功能;其继承了 ASM1 的模型结构,把表征 C、N、P 的常规指标细分为 9 种溶解性组分和 10 种颗粒性组分(19 种模型组分),共包括 21 个工艺过程、22 个化学计量系数、45 个动力学参数;另外,ASM2d 考虑了 N、P 和碱度对微生物生长动力学的影响,引入 COD、电荷、氮和磷的四个守恒方程,每个守恒方程包含一个预测性信息,用此方程结合其中的转换因子即可求得计量系数矩阵中未知系数的表达式;ASM2d 模型最终表现为含有 19 个常微分方程的方程组。

由于 ASM1 在实际应用过程中暴露出来的缺点越来越明显,WA 公布了 ASM3 以改进 ASM1 的不足。ASM3 模型同样采用矩阵的形式,用 7 种溶解性组分和 6 种颗粒性组分(共 13 种模型组分)囊括了污水中污染物的总和,但 ASM3 中组分的划分并非继承 ASM1,其还考虑了测量方法是否合理等因素。ASM3 共包括 12 个工艺过程、15 个化学计量系数、21 个动力学参数,最终表现为含有 13 个常微分方程的方程组。

在有进、出水以及回流的情况下,用物料平衡方程来描述活性污泥工艺流程中各个反应器中各种物质的变化,每个方程都包括进水和出水微分项、回流微分项和生化反应微分项。其中,生化反应微分项可根据不同的仿真要求,选择国际水协发布的不同版本的活性污泥模型。

活性污泥数学模型的最终用途是在非稳态条件下对活性污泥系统中的生化反应进行模拟,比单个工艺的单组分数学模型要庞大得多和复杂得多。如果用物料平衡方程来描述活性污泥工艺流程中的各过程单元,则可生成多组相关联的常微分方程组(ODEs),若选用 ASM 来描述生化反应部分,则引入的生化反应部分是高度非线性的,因此不可能获得反应器中各类组分的解析解,必须采用数值方法求解。活性污泥数学模型对每个生化过程单元都有一定数量的独立的状态变量,这就要求在开始数值计

算之前确定大量的初始值。上述问题最终可以转化为解常微分方程的初值问题,但采用不同的数值方法求解 ODEs 得到的结果也会有较大差异。

1 ODEs 的求解方法

求解 ODEs 的常用方法有 Euler 法及其改进方法、不同阶数的 Runge-Kutta 法。笔者分别采用 Euler 法、梯形公式法、定步长的三阶和四阶 Runge-Kutta 法以及变步长的 Runge-Kutta-Fehlberg 法,对活性污泥工艺中单个生化反应器和复杂工艺流程进行模拟,其中生化反应微分项选用活性污泥模型中最复杂的 ASM2d 来表示,通过比较不同算法的计算效率以及精度,确定模型对应的最优求解方法,同时分别运用上述求解方法编写计算程序,求解 ASM2d 生成的常微分方程组。

评价常微分方程解法的好坏一般有以下几点:算法的稳定性、收敛性、计算效率和计算精度^[3]。收敛性是反映数值方法本身的截断误差对计算结果的影响,而稳定性则反映某一计算步骤中出现的误差对计算结果的影响。稳定性与步长密切相关,对某一步长是稳定的计算公式,对大一些的步长可能就不稳定。显然,只有既收敛又稳定的算法才能在实际计算中得到应用。计算效率与计算精度是数值计算中需要考虑的另外两个因素。求解过程中的每一步计算都会有误差产生,这就带来了误差累积。采用定步长求解算法时,步长跟计算精度与计算效率的关系密不可分,需要事先选好合适的步长。

2 ASM2d 用于单个 CSIR 的模拟

在只考虑进、出水而没有曝气的情况下,采用不同求解方法对单个生化反应池进行模拟,并将模拟结果与商业仿真软件 Hydromantis 的 GPS-X 5.0 进行对比。反应池类型为 CSTR,进水水质见表 1,计算效率及模拟结果见图 1。用定步长法求解 ODEs 时,步长的选择一定要合理,否则模拟结果会出现不合理的值。步长较小带来的问题就是需要计算的总次数会相应增加,计算效率会随之下降。由图 1 可知,除了求解速度外,误差累积随着算法精度的提高而相应减少;定步长的三阶和四阶 Runge-Kutta 法的计算值的相对误差在 0.05% 范围内,四阶 Runge-Kutta 法与变步长的 Runge-Kutta-Fehlberg 的计算值的相对误差也在 1.0% 范围内。若只考虑计算精度时,三阶 Runge-Kutta 法可以满足对静态生化反应部分的模拟。

表 1 进水水质

Tab 1 Quality of influent $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$

项 目	COD	BOD ₅	TSS	TN	NH ₄ ⁺ -N	TP
数 值	440	256	387	26	7. 4	8. 7

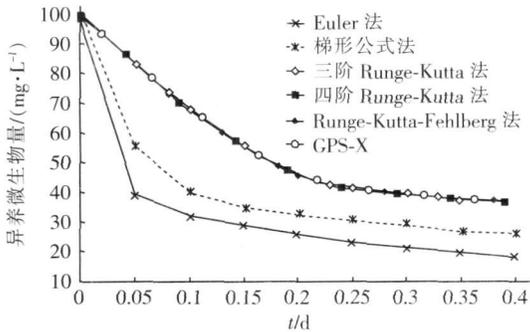


图 1 不同求解算法的模拟结果

Fig 1 Dynamic simulation results from different solving methods

表 2 列出了在 9. 6 h 模拟时长内不同算法的计算用时。定步长法采用 8 64 s 作为一个基本的时间步长, 自动步长则由程序自行优化计算。由表 2 可以看出, 能够自动调节步长的 Runge Kutta Fehlberg 法的计算效率明显优于定步长方法, 因此, Runge Kutta Fehlberg 方法的计算效率最优。

表 2 不同求解算法的计算效率

Tab 2 Computational efficiency of different solving methods

项 目	计算步长 /s	计算总步数	计算用时 /s
Euler 法	8 64	4 000	34. 81
梯形公式法	8 64	4 000	36. 77
三阶 Runge-Kutta 法	8 64	4 000	56. 45
四阶 Runge-Kutta 法	8 64	4 000	94. 31
Runge-Kutta-Fehlberg 法	自动调节	—	2. 072

3 ASM2d 用于整个工艺的模拟

在同时考虑进水和出水、曝气和回流的情况下, 对 A²/O 工艺 (不包括二沉池, 好氧池混合液回流到缺氧池) 进行模拟, 反应池类型为 CSTR, 进水水质同表 1, 混合液回流量为进水量的两倍。

采用定步长解法时, 由好氧池回流到缺氧池时溶解氧浓度对步长的大小非常敏感, 若步长选择不合理, 缺氧池溶解氧浓度模拟值会出现负值, 特别是在仿真模拟的初始阶段, 当实际的溶解氧浓度处于较低水平时, 缺氧池溶解氧浓度模拟值会出现负值, 后续的好氧池溶解氧浓度模拟值也会受到影响, 甚至也会出现负值, 这是不合理的。这就带来了算法与步长之间的对应问题, 即选择某种算法的同时, 必

须要选取合理的步长, 保证算法的准确性。

溶解氧浓度是一个关键因素, 对溶解氧浓度的计算出现偏差, 则会影响到与好氧过程有关的所有组分的计算, 进而影响到所有参与反应的组分浓度。因此, 对于有曝气输入情况下的模拟, 首先要确保溶解氧浓度计算正确。若采用定步长计算方法, 步长的选取首先要确保不能出现不合理值, 这就要求步长要足够小, 但这会影响到计算效率。因此, 采用 ASM2d 动态模拟时最好选用变步长的计算方法。

此外, 氨氮浓度也是一个重要指标, 而且氨氮浓度跟溶解氧浓度的关系密切。在模型组分的初始浓度、进水水量和水质、曝气量、回流量、CSTR 体积等都相同的情况下, 变步长的 Runge Kutta Fehlberg 法对溶解氧、氨氮浓度的模拟结果见图 2。可知, 变步长的 Runge Kutta Fehlberg 法对每一步计算过程都加入了误差检验, 计算过程中不会出现步长选择的问题, 因此能够保证算法的稳定性与计算精度。

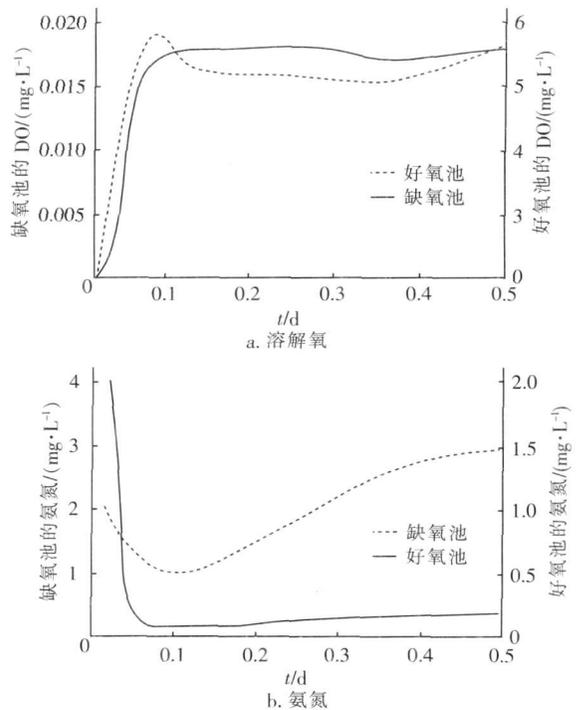


图 2 Runge-Kutta-Fehlberg 法对溶解氧和氨氮浓度的模拟结果

Fig 2 Dynamic simulation results of DO and ammonia nitrogen by Runge-Kutta-Fehlberg method

4 结论

- ① 对于单个生化反应器的模拟, 三阶和四阶 (下转第 61 页)

3[#]、4[#]、5[#]的清洗周期更短。运行到第 45 天时,对 2[#]膜进行化学清洗,其他时间仅进行物理清洗,化学清洗药剂是 0.5% 的 NaClO 溶液。可以看出,进行化学清洗后,2[#]膜的初始抽吸压力为 5.59 kPa 远低于物理清洗后的初始抽吸压力,表明化学清洗较物理清洗能更好地去除膜表面的污染物。

在运行结束后,对达到洗膜压差(30 kPa 左右)的 2[#]、4[#]、5[#]装置进行阻力分布测试。结果表明:2[#]、4[#]、5[#]装置内部阻力所占比例依次为 8.5%、43.4%、73.4%,滤饼层阻力所占比例依次为 54.5%、6.2%、0.9%,浓差极化阻力所占比例依次为 31.4%、6.2%、0.9%。由此可知,随着膜通量的增大,内部阻力的比例增大,而由滤饼层和浓差极化形成的阻力比例减小。

3 结论

① 采用平板膜生物反应器处理餐饮废水,不仅能高效地去除 COD、NH₃-N、TN、TP 等污染物,也可以很好地去除油类等,并改善出水的 pH 和 ORP。在适宜的膜通量下,MBR 处理餐饮废水的出水水质完全符合 GB/T 18920-2002 的要求。

② 随着膜通量的增大,MLSS、污泥粘度、SV₃₀ 随之增大,且 MLSS、SV₃₀ 与粘度之间有很好的线性关系;随着膜通量的增大,膜污染速率加快,清洗周期明显缩短,内部阻力所占比例逐渐增大,而滤饼层阻力和浓差极化阻力所占比例减小。

(上接第 56 页)

的 Runge-Kutta 法即可满足计算精度的要求,且两者的计算值相对误差在 0.05% 范围内。

② 除满足计算精度外,高阶的变步长计算方法在计算效率上具有明显优势,当仿真时长相同时,Runge-Kutta-Fehlberg 法的计算用时为 2.072 s 而三阶和四阶 Runge-Kutta 法的计算用时分别为 56.45 和 94.31 s。

③ 变步长的 Runge-Kutta-Fehlberg 法每计算一步都要对计算结果进行检验,随之调节步长,能够保证收敛性与稳定性。虽然每一步的计算量增加了,但整体考虑还是合理的,特别是当数值解进入平稳状态,步长可以选择较大值,提高了计算效率。

④ 比较不同的计算方法在 CSTR 反应器的静态和动态模拟中的应用效果,无论从稳定性还是计

参考文献:

- [1] 顾国维,何义亮. 膜生物反应器——在污水处理中的研究和应用 [M]. 北京:化学工业出版社,2002.
- [2] 张立秋,封莉,张晓菲,等. 淹没式 MBR 处理啤酒废水的试验研究 [J]. 中国给水排水,2004,20(5):59-61.
- [3] 秦普丰,谭周亮,周惜时,等. PE 微滤膜处理餐饮废水的试验研究 [J]. 农业环境科学学报,2006,25(z1):194-197.
- [4] 宁平,王宏,周旭. 餐饮废水膜-生物反应器 [J]. 膜科学与技术,2002,22(1):36-38.
- [5] 尹艳华,徐复铭,赵毅,等. 膜生物反应器处理餐饮废水的初步研究 [J]. 应用基础与工程科学学报,2005,13(4):358-365.
- [6] 王志伟,吴志超,顾国维,等. 平板膜生物反应器操作运行条件对膜污染特性的影响 [J]. 膜科学与技术,2005,25(5):26-30.
- [7] Tixier N, Guibaud G, Baudu M. Determination of some rheological parameters for the characterization of activated sludge [J]. Bioresour Technol 2003, 90(2): 215-220.
- [8] Liu R, Huang X, Sun Y F, et al Hydrodynamic effect on sludge accumulation over membrane surfaces in a submerged membrane bioreactor [J]. Process Biochem 2003, 39(2): 157-163.
- [9] 高廷耀,顾国维,周琪. 水污染控制工程(下) [M]. 北京:高等教育出版社,2007.

E-mail: tjuhele@163.com

收稿日期:2010-03-14

算效率考虑,变步长的 Runge-Kutta-Fehlberg 法均更适用于对 ASM s 的求解。

参考文献:

- [1] Henze M, Gujer W, Mino T, et al Activated Sludge Models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3 [M]. London: IWA Publishing 2000.
- [2] Henze M, Gujer W, Mino T, et al Activated Sludge Model No. 2d ASM2d [J]. Water Sci Technol 1999, 39(1): 165-182.
- [3] 徐士良. 数值方法与计算机实现 [M]. 北京:清华大学出版社,2006.

E-mail: fangrongzhao@haocang.com

收稿日期:2010-03-11