



УДК 681.54

Е. К. Грудяева, С. Е. Душин

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина)

Анализ динамики процесса нитрификации в модели биологической очистки сточных вод ASM1

Рассматриваются особенности поведения математической модели нитрификации на базе модели ASM1. Представлены результаты исследования процессов преобразования аммонийного азота в нитраты, роста и распада бактерий-нитрификаторов, окисления, изменения щелочности среды в биореакторе. Анализ осуществляется с помощью компьютерного моделирования в программных средах Matlab/Simulink и Maple.

Математическая модель, активный ил, модель ASM1, нитрификация, реализуемые состояния равновесия

Одним из наиболее перспективных и эффективных способов очистки сточных вод сегодня является очистка с помощью активного ила. Организмы активного ила преобразуют соединения азота и фосфора до безопасного состояния для окружающей среды. Биологическая очистка проходит две основные стадии – денитрификацию и нитрификацию.

При денитрификации в результате жизнедеятельности бактерий-денитрификаторов нитрат превращается в атмосферный азот в условиях отсутствия кислорода.

Нитрификация происходит повсеместно в естественной среде, где развиваются нитрифицирующие бактерии. При биологической очистке в биореакторе-нитрификаторе создается искусственный биоценоз из группы бактерий-автотрофов – организмов, способных синтезировать органические вещества из неорганических. Процесс состоит из двух этапов. Вначале аммонийный азот окисляется кислородом до нитрита, затем нитрит окисляется до нитратного азота. На каждом этапе процесс подвергается влиянию определенной группы бактерий-нитрификаторов [1].

Исследование динамики модели нитрификации состоит в установлении зависимостей координат особых точек, соответствующих стационарным (равновесным) состояниям, от параметров модели, определении их типов, реализуемости и особенностей поведения с целью последующей разработки эффективных алгоритмов управления.

В 1987 г. группой исследователей во главе с Могенсом Хенце была предложена модель для систем очистки сточных вод, названная ASM1 (модель активного ила № 1) [2]. Она стала ядром для разработки многочисленных моделей и их модификаций, послужила мотивацией для дальнейших исследований, а также способствовала созданию единой системы обозначений в области моделирования очистки сточных вод.

Модель основана на базовых моделях Герберта и Моно, т. е. описывает процессы роста и распада бактерий-нитрификаторов и денитрификаторов. Кроме того, модель включает математическое описание процесса окисления, изменения щелочности, а также гидролиза органического вещества (разложения органического вещества в воде с образованием новых соединений) и аммонификацию (гниение). Авторами модели выделен процесс нитрификации из ASM1, что позволило использовать только часть уравнений в модифицированном виде.

Для изучения особенностей модели нитрификации предлагается рассматривать процессы в биореакторе-нитрификаторе без учета денитрификации с объемом V и объемным расходом потока на входе q . На вход реактора поступает кислород, аммонийный азот и нитраты. Входной поток характеризуется значением щелочности $S_{\text{вх. щел}}$.

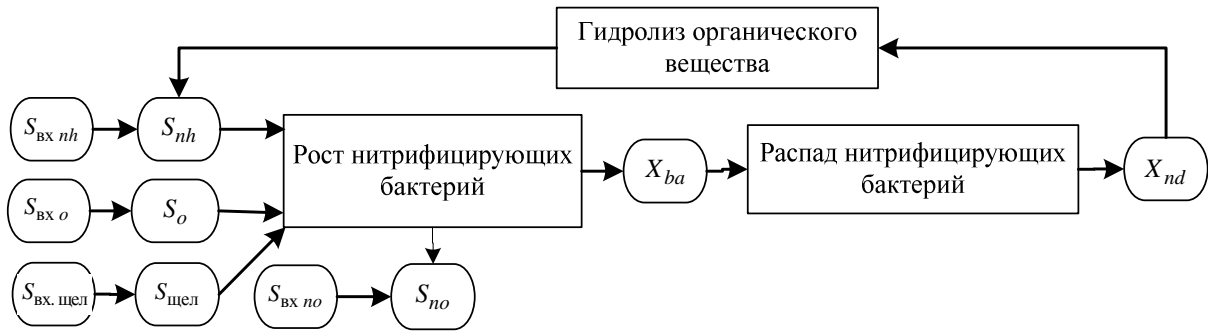


Рис. 1

При составлении модели принимались следующие ограничения и допущения:

- подача субстрата в резервуар биореактора – непрерывная;
- состав активного ила образуется с помощью бактерий-нитрификаторов;
- влияние температуры на удельные скорости роста отсутствует;
- на вход биореактора не поступают бактерии и взвешенный медленно разлагаемый азот;
- денитрификация и рециркуляция ила не учитываются.

На рис. 1 приведена схема взаимодействия элементов модели нитрификации. В прямоугольниках приводятся процессы, в овалах – концентрации. Входные стрелки концентраций означают их увеличение, выходные – снижение.

Рост нитрифицирующих бактерий снижает концентрацию аммонийного азота и кислорода, а также щелочность, при этом растет концентрация продукта реакции, нитратов. В результате распада бактерий растет концентрация взвешенного органического медленно разлагаемого азота и уменьшается в процессе гидролиза, что приводит к росту концентрации аммонийного азота. Как следует из схемы, концентрация нитратов и щелочность не влияют на оставшиеся концентрации.

Уравнение материального баланса для аммонийного азота записывается таким образом:

$$V \frac{dS_{nh}}{dt} = q(S_{вх nh} - S_{nh}) + Vr_{nh}.$$

В результате замены параметров $T = V / q$, где T – время реакции, получается дифференциальное уравнение, описывающее рост (убыль) аммонийного азота в реакторе-нитрификаторе:

$$\frac{dS_{nh}}{dt} = \frac{S_{вх nh} - S_{nh}}{T} + r_{nh}.$$

Аналогичным образом записываются уравнения материального баланса для всех составляющих модели, приведенных в структуре на рис. 1.

В результате можно получить систему дифференциальных уравнений, описывающую процесс нитрификации в биореакторе:

$$\frac{dX_{ba}}{dt} = -\frac{X_{ba}}{T} + r_{ba}; \quad \frac{dS_{nh}}{dt} = \frac{S_{вх nh} - S_{nh}}{T} + r_{nh};$$

$$\frac{dS_{no}}{dt} = \frac{S_{вх no} - S_{no}}{T} + r_{no}; \quad \frac{dS_o}{dt} = \frac{S_{вх o} - S_o}{T} + r_o;$$

$$\frac{dX_{nd}}{dt} = -\frac{X_{nd}}{T} + r_{nd}; \quad \frac{dS_{щел}}{dt} = \frac{S_{вх щел} - S_{щел}}{T} + r_{щел},$$

где

$$r_{ba} = \left(\mu_{ma} \frac{S_{nh}}{S_{nh} + K_{nh}} \frac{S_o}{S_o + K_{oa}} - b_a \right) X_{ba};$$

$$r_{nh} = -\left(\frac{1}{Y_a} + i_{xb} \right) \mu_{ma} \frac{S_{nh}}{S_{nh} + K_{nh}} \times \\ \times \frac{S_o}{S_o + K_{oa}} X_{ba} + k_h X_{nd};$$

$$r_{no} = \frac{1}{Y_a} \mu_{ma} \frac{S_{nh}}{S_{nh} + K_{nh}} \frac{S_o}{S_o + K_{oa}} X_{ba};$$

$$r_o = -\frac{4,57 - Y_a}{Y_a} \mu_{ma} \frac{S_{nh}}{S_{nh} + K_{nh}} \frac{S_o}{S_o + K_{oa}} X_{ba};$$

$$r_{nd} = i_{xb} \left(\mu_{ma} \frac{S_{nh}}{S_{nh} + K_{nh}} \frac{S_o}{S_o + K_{oa}} - b_a \right) \times \\ \times X_{ba} - k_h X_{nd};$$

$$r_{щел} = -\left(\frac{i_{xb}}{14} + \frac{1}{7Y_a} \right) \mu_{ma} \frac{S_{nh}}{S_{nh} + K_{nh}} \frac{S_o}{S_o + K_{oa}} X_{ba}.$$

Обозначения, принятые в модели, сведены в таблицу.

Система имеет несколько особых точек. Особая точка 1 тривиальна и имеет следующие координаты:

$$X_{ba01} = 0; \quad S_{nh01} = S_{вх nh}; \quad S_{no01} = S_{вх no};$$

$$S_{o01} = S_{вх o}; \quad X_{nd01} = 0; \quad S_{щел01} = S_{вх щел}.$$

Обозначение	Единица измерения	Наименование величин и параметров
X_{ba}	г ХПК/м ³	Концентрация биомассы автотрофов
X_{nd}	г N/м ³	Концентрация взвешенного органического медленно разлагаемого азота
S_{nh}	г NH ₄ ⁺ /м ³	Концентрация аммония и аммонийного азота
S_{no}	г NO ₃ ⁻ /м ³	Концентрация нитратного азота
S_o	г O ₂ /м ³	Концентрация кислорода
$S_{щел}$	экв/м ³	Щелочность
K_{oa}	г O ₂ /м ³	Константа насыщения по кислороду для автотрофов
K_{nh}	г NH ₄ ⁺ /м ³	Константа насыщения по аммонии при нитрификации
i_{xb}	г N _{общ} /г ХПК	Фракция азота в биомассе активного ила
b_a	сут ⁻¹	Константа распада нитрифицирующих бактерий
Y_a	г ХПК/г N	Максимальный коэффициент прироста биомассы для автотрофных бактерий (нитрифицирующих)
k_h	сут ⁻¹	Константа гидролиза в реакции первого порядка
μ_{ma}	сут ⁻¹	Максимальная удельная скорость роста автотрофов
r_{ba}	г ХПК/(м ³ ·сут)	Удельная объемная скорость роста концентрации бактерий-автотрофов
r_{nh}	г NH ₄ ⁺ /(м ³ ·сут)	Удельная объемная скорость роста концентрации азота
r_{no}	г NO ₃ ⁻ /(м ³ ·сут)	Удельная объемная скорость роста концентрации нитратов
r_o	г O ₂ /(м ³ ·сут)	Удельная объемная скорость роста концентрации кислорода
r_{nd}	г N/(м ³ ·сут)	Удельная объемная скорость роста концентрации взвешенного органического медленно разлагаемого азота
$r_{щел}$	экв/(м ³ ·сут)	Удельная объемная скорость роста щелочности

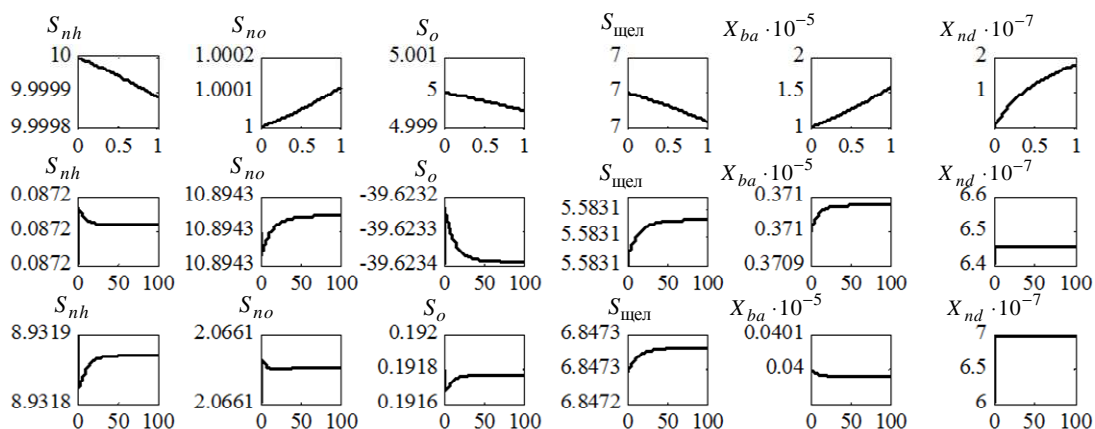


Рис. 2

Расходящиеся переходные процессы в малой окрестности этой точки приведены на рис. 2 (по оси абсцисс всех графиков t , сут) в верхнем ряду. В отсутствие бактерий и взвешенного органического медленно разлагаемого азота постоянные значения щелочности и концентраций аммония, нитратов и кислорода соответствуют входным значениям; роста медленно разлагаемого азота не происходит, поскольку нет бактерий и, следовательно, отмирания.

Состояние равновесия 2 характеризуется такими координатами:

$$X_{ba02} = \frac{-b_1 + \sqrt{b_1^2 - 4a_1c_1}}{2a_1};$$

$$S_{o02} = S_{вх o} - k_4 k_2 X_{ba02};$$

$$X_{nd02} = k_1 X_{ba02};$$

$$S_{nh02} = \frac{K_{nh} k_2 (S_{o02} + K_{oa})}{S_{o02} (T\mu_{ma} - k_2) - K_{oa} k_2};$$

$$S_{no02} = S_{вх no} + \frac{1}{Y_a} k_2 X_{ba02};$$

$$S_{щел02} = S_{вх.щел} - k_5 k_2 X_{ba02},$$

где

$$\begin{aligned} k_1 &= \frac{i_{xb}}{1 + k_h T}; \quad k_2 = 1 + b_a T; \quad k_3 = \frac{1}{Y_a} + i_{xb}; \\ k_4 &= \frac{4,57 - Y_a}{Y_a}; \quad k_5 = \frac{i_{xb}}{14} + \frac{1}{7Y_a}; \\ a_1 &= k_2 k_4 (Tk_h k_1 - k_2 k_3) (k_2 - T\mu_{ma}); \\ b_1 &= S_{вх nh} k_2 k_4 (k_2 - T\mu_{ma}) + k_2^2 k_4 K_{nh} + \\ &+ (Tk_h k_1 - k_2 k_3) (T\mu_{ma} S_{вх o} - k_2 (K_{oa} + S_{вх o})); \\ c_1 &= S_{вх nh} (T\mu_{ma} S_{вх o} - k_2 (K_{oa} + S_{вх o})) - \\ &- K_{nh} k_2 (S_{вх o} + K_{oa}). \end{aligned}$$

Переходные процессы в области притяжения данной точки не соответствуют физическим процессам, поскольку координаты принимают отрицательные значения. Сходящиеся процессы в малой окрестности состояния равновесия 2 приводятся на рис. 2 в среднем ряду.

Состояние равновесия 3 отличается от 2 координатой

$$X_{ba03} = \frac{-b_1 - \sqrt{b_1^2 - 4a_1 c_1}}{2a_1}.$$

Сходящиеся процессы в области притяжения этой точки представлены на рис. 2 в нижнем ряду.

Анализ показал, что при любых физически допустимых параметрах системы координаты особых точек принимают только вещественные значения, причем X_{ba02} и X_{ba03} никогда не совпадают.

Значения координат X_{ba02} и X_{ba03} положительны (т. е. реализуемы) при соблюдении следующих условий.

Входные концентрации аммония и кислорода должны отвечать неравенствам:

$$S_{вх nh} > S_{вх nh_q}, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} S_{вх nh_q} &= \frac{K_{nh} k_2 (S_{вх o} + K_{oa})}{T\mu_{ma} S_{вх o} - k_2 (K_{oa} + S_{вх o})}; \\ S_{вх nh} &> S_{вх nh_p}; \\ S_{вх nh_p} &= - \left[k_2^2 k_4 K_{nh} + (Tk_h k_1 - k_2 k_3) \times \right. \\ &\left. \times (T\mu_{ma} S_{вх o} - k_2 (K_{oa} + S_{вх o})) \right] / k_2 k_4 (k_2 - T\mu_{ma}). \end{aligned}$$

В результате исследования поведения системы при различных входных концентрациях аммония и кислорода определено, что установившиеся значения концентраций бактерий реализуемы для состояний 2 и 3 в области, определяемой неравенством (1). В случае, когда $S_{вх nh} = S_{вх nh_q}$, одна из установившихся концентраций становится нулевой. При дальнейшем уменьшении входной концентрации аммония или кислорода реализуема концентрация только для состояния 2, а в состоянии 3 устанавливаются близкие к нулю концентрации бактерий, удаление загрязнений проходит неэффективно и система не способна подавить залповые нагрузки аммонийного азота.

Остальные координаты состояний равновесия 2 и 3 реализуемы при следующих условиях:

1. Концентрация кислорода $S_{o02} > 0$ при $S_{вх o} > S_{вх o_0}$, где $S_{вх o_0} = k_4 (1 + b_a T) X_{ba02}$. С точки зрения биохимической кинетики для обеспечения устойчивого состояния системы нужно реализовать необходимую концентрацию кислорода на входе биореактора.

2. Концентрация взвешенного органического медленно разлагаемого азота $X_{nd02} > 0$ при $X_{ba02} > 0$. Медленно разлагаемый азот образуется в результате распада бактерий. Очевидно, что в случае ненулевой концентрации бактерий в точке равновесия концентрация продуктов распада также будет ненулевой.

3. Концентрация аммония $S_{nh02} > 0$ при $S_{o02} > \frac{K_{oa} (1 + b_a T)}{T\mu_{ma} - k_2}$. Поскольку окисление аммонийного азота происходит при участии кислорода, входная концентрация кислорода должна обеспечивать устойчивое значение S_{o02} .

4. Концентрация нитратов всегда удовлетворяет неравенству $S_{no02} > 0$ при наличии бактерий, поскольку нитратный азот – это продукт реакции.

5. Щелочность $S_{щел02} > 0$ при $S_{вх.щел} > S_{вх.щел_0}$, где $S_{вх.щел_0} > k_5 k_2 X_{ba02}$. На практике данное соотношение всегда выполняется.

В результате вычислительных экспериментов установлено, что реализуемые координаты имеют только две особые точки (1 и 3) из трех, поскольку для прихода системы в точку 2 необходимы нере-

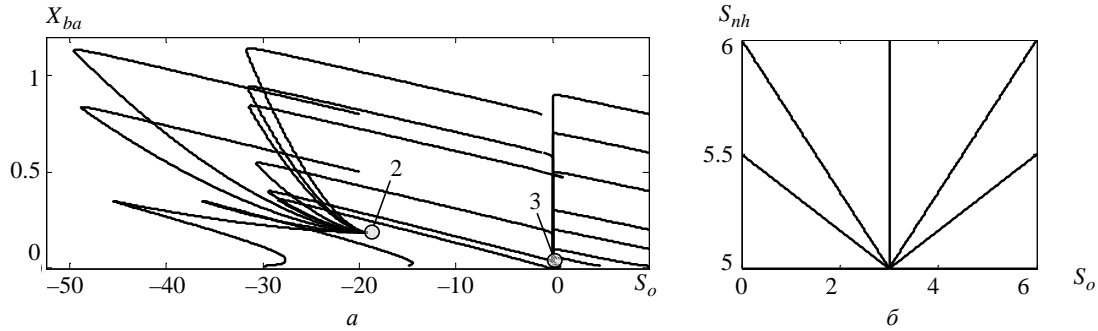


Рис. 3

ализуемые начальные концентрации кислорода или нитратов. Это означает, что система характеризуется двумя особыми точками, поскольку третья не соответствует реальным процессам.

На переход из одного состояния равновесия в другое влияют только входные концентрации аммонийного азота и кислорода, а также время реакции T системы. Из указанных величин кислород и время реакции являются управляемыми, причем время реакции может изменяться за счет расхода q .

Тип особых точек системы устанавливается в результате линеаризации модели в этих точках. Порядок системы можно понизить до 4-го, поскольку 2 уравнения не влияют на устойчивость.

Характеристическая матрица $s\mathbf{E} - \mathbf{J}$ линеаризованной системы имеет вид

$$s\mathbf{E} - \mathbf{J} = \begin{bmatrix} s + \frac{1}{T} - f_1 + b_a & f_2 & f_3 & 0 \\ -k_3 f_1 & s + \frac{1}{T} + k_3 f_2 & -k_3 f_3 & k_h \\ -k_4 f_1 & -k_4 f_2 & s + \frac{1}{T} + k_4 f_3 & 0 \\ i_{xb} f_1 - i_{xb} b_a & i_{xb} f_2 & i_{xb} f_3 & s + \frac{1}{T} + k_h \end{bmatrix},$$

где \mathbf{E} – единичная матрица; $f_1 = \mu_{ma} \frac{S_{nh0}}{S_{nh0} + K_{nh}} \times \frac{S_{o0}}{S_{o0} + K_{oa}}$; $f_2 = \mu_{ma} \frac{K_{nh}}{(S_{nh0} + K_{nh})^2} \frac{S_{o0}}{S_{o0} + K_{oa}} \times X_{ba0}$; $f_3 = \mu_{ma} \frac{S_{nh0}}{S_{nh0} + K_{nh}} \frac{K_{oa}}{(S_{o0} + K_{oa})^2} X_{ba0}$.

Анализ характеристического полинома показал, что состояния равновесия 2 и 3 устойчивы (проекция фазовых траекторий на плоскость приведены на рис. 3, а), а состояние 1 – неустойчиво. Неустойчивость состояния 1 обусловлена тем, что при любой ненулевой концентрации бактерий система переходит в состояние 2 или 3, при этом происходит рост популяции даже при малом отклонении от нулевого значения. При исключении

бактериальной составляющей данное состояние становится устойчивым (рис. 3, б).

Увеличение концентрации кислорода повышает качество очистки воды от аммонийного азота. На рис. 4 приведена зависимость $S_{nh03}(S_{vxo})$

для состояния равновесия 3 при $S_{vxo} = 5$. Зависимость нелинейная, однако нелинейность влияет на процессы только при $S_{vxo} < 3$. В остальных случаях перегиб функции лежит вне достижимых пределов концентрации кислорода (10 при использовании чистого кислорода). Регулирование кислорода обусловлено значением ПДК аммонийного азота на выходе биореактора, при достижении которого можно снизить подачу кисло-

рода. Повышение концентрации аммония на входе должно соответствовать максимальной подаче.

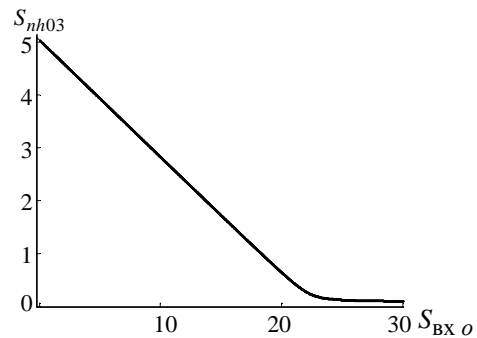


Рис. 4

Таким образом, в результате проведенного исследования определены реализуемые равновесные состояния процесса нитрификации, установ-

лены аналитические зависимости состояний от параметров и воздействий, произведен анализ устойчивости состояний для редуцированной системы 4-го порядка. Исследовано также влияние

кислорода на процесс очистки сточных вод от аммонийного азота. Полученные результаты позволяют в дальнейшем разработать управляемую модель нитрификации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Очистка сточных вод / М. Хенце, П. Армоэс, Й. Ля-Кур-Янсен, Э. Арван. М.: Мир, 2004.

2. Activated Sludge Model № 1. Scientific and Technical Report № 1 / M. Henze, C. P. L. (Jr.) Grady, W. Gujer et al. London: IAWPRC, 1987.

E. K. Grudyaeva, S. E. Dushin
Saint-Petersburg state electrotechnical university «LETI»

ANALYSIS OF DYNAMICS OF NITRIFICATION PROCESS IN THE MODEL OF BIOLOGICAL WASTEWATER TREATMENT ASM1

The behavior features of the nitrification mathematical model based on ASM1 are researched. The results of study of the transformation processes of ammonium to nitrate, the growth and decay of nitrifying bacteria, oxidation, and changes in alkalinity in the bioreactor are presented. They are received by an analysis of the model and by a computer modeling in Matlab/Simulink and by calculation in Maple.

Mathematical model, activated sludge, ASM1, nitrification, realizable steady states

УДК 621.3.049.77.001.2

С. Э. Миронов, Н. М. Сафьянников, А. К. Фролкин
Санкт-Петербургский государственный электротехнический
университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина)

Методика структурно-топологической оптимизации регулярных макроблоков СБИС

На примере конвейерного умножителя рассматриваются вопросы структурной оптимизации топологии регулярных макроблоков СБИС. На основе результатов анализа процессов преобразования топологических планов макроблоков предлагается методика структурно-топологической оптимизации регулярных макроблоков СБИС, предназначенная для уменьшения площади схем на кристалле.

Регулярные макроблоки СБИС, структурно-топологическая оптимизация, конвейерный умножитель

Структурно-топологическая оптимизация устройств для микроэлектронной реализации. Одной из основных задач в проектировании изделий микроэлектроники является поиск методов и приемов, обеспечивающих улучшение характеристик реализуемых устройств, главными из которых считаются площадь на кристалле, быстродействие и производительность. Наилучшие характеристики достигаются при комплексной оптимизации, подразумевающей учет аспектов логического, схемотехнического, топологического и структурно-топологического проектирования.

Данная статья посвящена проблеме структурно-топологического проектирования, актуальность которой не снижается с течением времени, так как постоянное развитие технологии изготовления открывает все новые возможности перед проектировщиками. При качественных изменениях в технологии (например, добавлении нового слоя металла) уже совершенно иначе могут быть организованы и связи внутри ячеек, и связи между ячейками, и размещение ячеек в макроблоке, и трассировка макроблоков в микросхеме. Однако и количественные изменения могут не просто предоставить воз-