



面向 21 世纪 课 程 教 材
Textbook Series for 21st Century

环境工程 仿真与控制

姚重华 编著



高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

面向 21 世纪 课程教材
Textbook Series for 21st Century

环境工程 仿真与控制

姚重华 编著



高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

内 容 提 要

本书是教育部“高等教育面向 21 世纪教学内容和课程体系改革计划”的研究成果,是面向 21 世纪课程教材和教育部环境工程“九五”规划教材。

本书分成五章。第一章是“仿真”,讲述环境工程过程的仿真即过程建模及求解的方法,并介绍活性污泥过程、二沉池二维流态等模型的建模和求解过程。第二章是“过程控制”,讲述反馈控制系统的控制规律及自动化仪表,并介绍污水处理主要设施的自动控制方法。第三章是“动态分析”,讲述如何导出过程的传递函数,以及如何利用传递函数对环境工程的过程动态进行定性和定量的分析。第四章是“人工智能”,重点介绍神经网络、专家系统和模糊控制的理论及在环境工程仿真与控制中的应用。第五章是“复杂控制系统”,介绍串级、分程、比值、前馈、选择性和非线性控制系统,以及在环境工程过程控制中的应用。

图书在版编目(CIP)数据

环境工程仿真与控制/姚重华编著. —北京:高等教育出版社,2001

ISBN 7-04-009332-4

I. 环... II. 姚... III. ①环境工程—计算机仿真
②环境工程—计算机控制 IV. X5-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2001)第 037837 号

环境工程仿真与控制

姚重华 编著

出版发行 高等教育出版社

社 址 北京市东城区沙滩后街 55 号

电 话 010-64054588

网 址 <http://www.hep.edu.cn>

<http://www.hep.com.cn>

邮政编码 100009

传 真 010-64014048

经 销 新华书店北京发行所

排 版 高等教育出版社照排中心

印 刷 北京民族印刷厂

开 本 787 × 960 1/16

印 张 14

字 数 250 000

版 次 2001 年 8 月第 1 版

印 次 2001 年 8 月第 1 次印刷

定 价 12.30 元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请到所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

前 言

21 世纪是信息时代。仿真与控制是信息技术在环境工程中应用的重要内容,也是环境工程学科发展的重要方向。为此,有必要在高等学校环境工程专业开设有关的课程,对学生进行适当的训练。本书正是为环境工程专业本科学生编写的一本教材。

顾名思义,仿真就是对真实的模仿。物理仿真是通过对过程建立的物理模型来进行,数字仿真是通过对过程建立的数学模型来进行。由于计算机的发展与普及,同时由于数字仿真的简易、迅捷和巨大包容性,以及相对试验而言的低成本和互补性,数字仿真在包括环境工程在内的各个领域正迅速推进,被称为是一项“无孔不入”的技术。

自动控制包括过程控制、顺序控制、运动控制等分支。化工、环境工程等领域的控制行为属于过程控制。使用过程控制时,在受控过程进行中要不断对过程的状态或参数如温度、压力、浓度等进行测量,并将测量值与设定值进行比较,然后根据一定的控制方案对过程的有关参数进行调整,使该过程按照既定的一组设定值运行,达到确保过程运行稳定、安全、经济的目的。

环境工程是以污染物的处理和处置为主要内容的。环境工程仿真与控制的目的,是了解污染物处理过程的机制、提高污染物的处理效率、降低污染物的处理费用。这对保护环境具有重要作用。同时,我国目前在环境工程设施的工艺开发、工程设计和运行管理中,还未普遍应用仿真与控制技术,因而存在一个环境工程仿真与控制的潜在市场。开发这个市场,具有重要经济价值。学习环境工程仿真与控制,还有助于提高环境工程专业毕业生与自动控制专业技术人员之间的理解与沟通。

本书分成五章。第一章是仿真,讲述环境工程过程的仿真即过程建模及求解的方法,并介绍活性污泥过程、二沉池二维流态等模型的建模和求解过程。第二章是过程控制,讲述反馈控制系统的控制规律及自动化仪表,并介绍污水处理主要设施的自动控制方法。第三章是动态分析,讲述如何导出过程的传递函数,以及如何利用传递函数对环境工程的过程动态进行定性和定量的分析。第四章是人工智能,重点介绍神经网络、专家系统和模糊控制的理论及在环境工程仿真与控制中的应用。第五章是复杂控制系统,介绍串级、分程、比值、前馈、选择性和非线性控制系统,以及在环境工程过程控制中的应用。

本书可作为大专院校环境工程专业的本科学生及研究生学习“环境工程仿真与控制”的教材或参考读物,也可供从事环境工程仿真与控制的技术人员阅读。由于信息技术发展很快,也由于本书内容涉及环境工程、自动控制、人工智能等不同学科,编写中疏漏之处在所难免,敬希读者不吝指教。本书稿由华东理工大学环境工程系赵庆祥教授审阅并提出宝贵意见,谨此致谢。

姚重华

2000.1

目 录

第一章 仿真	1
第一节 模型的建立	1
一、模型分类	2
二、建模方法	2
例 1.1 活性污泥过程模型	3
例 1.2 厌氧消化过程模型	10
例 1.3 二沉池一维浓度分布模型	14
例 1.4 沉淀池二维流场模型	18
第二节 模型的分析	29
一、四阶龙格—库塔法	29
例 1.5 活性污泥过程各组分的浓度变化分析	32
二、有限差分法	34
例 1.6 二沉池流体流速及固体浓度分布分析	41
第二章 过程控制	46
第一节 反馈控制	47
一、比例控制	47
二、积分控制	50
三、微分控制	52
第二节 自动化仪表	55
一、控制器	55
二、执行器	63
三、检测器和变送器	69
例 2.1 初沉池和污泥泵的控制	77
例 2.2 流量分配的控制	78
例 2.3 溶解氧 DO 和风机的控制	80
例 2.4 深冷制氧的控制	83
例 2.5 污泥回流的控制	83
例 2.6 废弃污泥的控制	86
例 2.7 药剂投放的控制	88
第三章 动态分析	91
第一节 输入—输出模型	91

例 3 1 搅拌槽加热器的输入 - 输出模型	92
例 3 2 混合过程的输入 - 输出模型	93
第二节 非线性系统线性化	97
一、单变量系统线性化	97
例 3.3 废水储槽液位模型线性化	98
二、多变量系统线性化	99
例 3.4 连续搅拌反应釜模型线性化	99
第三节 传递函数	100
一、拉普拉斯变换	101
二、传递函数	103
例 3.5 连续搅拌反应釜的传递矩阵	105
三、拉普拉斯反变换	106
第四节 过程动态分析	109
一、定性分析	109
二、定量分析	110
例 3.6 一阶储槽的时间常数和稳态增益	111
例 3.7 两个储槽串联相互无影响的质量容量	115
例 3.8 两个储槽串联相互有影响的质量容量	116
第五节 反馈控制过程动态响应	118
一、闭环动态响应	118
例 3.9 储槽加热器温度反馈控制系统的闭环响应	119
二、比例控制对过程动态的作用	121
三、积分控制对过程动态的作用	122
四、微分控制对过程动态的作用	123
第四章 人工智能	125
第一节 神经网络	125
一、基本概念	126
二、训练方法	130
例 4 1 活性污泥过程曝气控制神经网络模型	134
例 4 2 活性污泥过程动态分析神经网络模型	135
三、神经网络控制	138
第二节 专家系统	141
一、基本概念	141
二、知识库构建	144
例 4.3 活性污泥过程故障诊断专家系统知识库	147
三、专家系统编制	148
例 4.4 利用 MS Visual Basic 5.0 和 Access 97 编制专家系统软件	148
四、专家系统控制	154

第三节 模糊控制	158
一、模糊集原理	160
二、模糊控制设计方法	167
例 4.5 污泥脱水模糊控制系统设计	170
例 4.6 曝气池曝气流量模糊控制	175
第五章 复杂控制系统	178
第一节 串级控制系统	178
一、结构与原理	178
二、应用范围	180
第二节 比值控制系统	183
一、结构与原理	183
二、应用举例	187
第三节 均匀控制系统	188
一、简单均匀控制系统	189
二、串级均匀控制系统	190
三、双冲量均匀控制系统	191
第四节 分程控制系统	192
一、结构与原理	192
二、应用范围	193
第五节 自动选择性控制系统	196
一、选择器在变送器和调节器之间	197
二、选择器在调节器和调节阀之间	199
三、应用范围	201
第六节 前馈控制系统	204
一、结构与原理	204
二、应用范围	207
第七节 非线性控制系统	209
一、结构与原理	209
二、应用实例	211
主要参考文献	214

第一章 仿 真

仿真是一种求解实际问题的方法。当问题有一定的复杂性时,可以先建立该问题的模型,并以模型为基础对问题进行分析。这一过程,即被称为仿真。如果建立的是物理模型,如水利工程中的水坝模型、风洞试验中的飞机模型等,则建模及分析的过程为物理仿真。如果建立的是数学模型,如大气污染物的扩散模型、物质的反应动力学模型等,则建模及分析的过程为数字仿真。随着计算机信息处理速度的加快及计算机的普及,数字仿真已开始显现强劲的发展势头,在工程技术乃至社会生活的许多领域获得广泛应用,被称为是一项“无孔不入”的技术。

仿真与试验是对立统一。之所以要仿真,主要是进行试验有困难。例如,有的试验要求高温、高压,条件难以实现;有的试验时间过长、费用较高;有的研究对象变量多、要求试验次数过多等等。由于数字仿真是在建立数学模型的基础上,利用计算机速度快、容量大的优点,可以模拟各种苛刻的试验条件,可以在短时间内获得结果,可以研究包含几十甚至几百个变量的问题,因此相对于试验有很大的优越性。但是,仿真又不能完全替代试验。仿真模型中的参数,往往要通过试验来确定;仿真的结果毫无疑问仍要通过试验来验证。所以,在仿真与试验的关系上,一是要肯定仿真的重要作用,二是要确定试验的终裁性。将仿真与试验有机地结合在一起,是研究复杂系统的有效方法。

与航空、化工等领域相比,仿真在环境工程领域还处在起步发展阶段。在单元操作及处理流程的模型化方面,在模型的求解、解的验证和显示方面,以及在仿真机的研制方面,均有大量工作要做。笔者编写本章的目的,不是介绍有关仿真的完整的理论,而是试图结合环境工程实例为读者提供有关仿真的基本方法,即建模与求解的基本方法,以便读者能在环境工程的仿真中应用这些方法,以推动环境工程仿真工作的发展。

第一节 模型的建立

仿真的第一步,是要建立研究对象或过程的数学模型,以描述研究对象或过程内部各个变量间的相互关系。模型的主要用途,是对问题进行分析。在过程

的模型建立以后,可以通过有计划地变动模型的输入量,来模拟施加在该过程的外界扰动或人为控制,以考察该过程的响应情况;也可以通过改变模型的结构或参数,来模拟过程设施结构或过程参数的变化,以考察过程的输出的相应变化。

一、模型分类

数学模型主要有机理模型与统计模型两大类。机理模型是依据过程的质量、能量及动量守恒的原则,以及反应动力学等原理来建立模型,属“白箱”模型。统计模型是依据过程输入、输出数据,利用一定的统计方法对数据进行分析来建立模型,属“黑箱”模型。有的模型既利用过程机理又利用测试数据来建立模型,这种模型为混合模型,属“灰箱”模型。究竟使用机理模型还是统计模型,目前仍有不同意见。侧重工艺的技术人员倾向于使用机理模型,因为机理模型有坚实的理论基础;而侧重控制的技术人员则倾向于使用统计模型,因为只要有过程的数据,即可通过辨识来建立模型。在实际工作中,兼考虑过程机理及数据统计的混合模型获得广泛应用。但在仿真工作中,机理模型仍是使用较多的模型。

数学模型除按建模原理分类之外,还有其它分类方法。例如,在模型的数学形式上,有代数方程、微分方程、偏微分方程之分;在模型参数的适用范围上,有集总参数和分布参数之分;在模型内变量的关系上,有线性与非线性之分;在模型的时间特性上,有连续和离散之分;在变量与时间的关系上,有稳态与非稳态之分,等等。

本章内容主要涉及过程的机理模型。在机理模型中,集总参数过程的变量间关系一般用微分方程(组)来描述,而分布参数过程的变量间关系一般用偏微分方程(组)来描述。

二、建模方法

机理模型的建模原则是所谓的“一进一出—反应”,即单位时间单位体积系统内物质、能量或动量的积累量,等于进入该系统的物质、能量或动量的量,减去离开该系统的物质、能量或动量的量,加上(或减去)系统内的物质、能量或动量的反应生成量(或消失量)。例如,有关物质数量模型的建模原则为:

$$V(d\rho_j/dt) = q_{v_i}\rho_{j_i} - q_{v_o}\rho_{j_o} \pm \sum_n VR_{j_n} \quad (1.1)$$

式中, V 是反应器体积, $d\rho_j/dt$ 是组分 j 在 V 内的浓度 ρ_j 随时间 t 的变化率, q_{v_i} 、 q_{v_o} 分别是流入或流出 V 的水流量, ρ_{j_i} 、 ρ_{j_o} 分别是组分 j 在进水和出水中的浓度, R_{j_n} 是第 n 个反应中组分 j 生成或消失时浓度变化的速率。

环境工程中污染物处理过程的反应机理一般比较复杂。这种复杂性一是表现为影响反应进程的因素很多,难以全部搞清楚;二是表现为参与反应的物质种

类较多,且过程参数随空间位置会有所变化。

因此,在建立环境工程过程的机理模型时,一般需要通过合理地引入一些假定对系统进行简化,抓住主要部分,舍弃次要部分,使模型能在公认的机理的基础上得以建立;同时,需对系统进行分割,以便在较小的空间子系统范围内使机理模型得以成立,然后再通过对所有子系统的综合,来达到建立整个系统机理模型的目的。可以说,建模的基本原则,加上合理的过程假定及合理的系统分割,是成功建立机理模型的必要条件。

例 1.1 活性污泥过程模型

活性污泥过程是废水生物处理的重要方法,在城市污水和工业废水的处理中已得到大量应用。活性污泥过程的模型化工作,长期以来也因此有了长足的发展。图 1.1 是典型的活性污泥过程示意图。

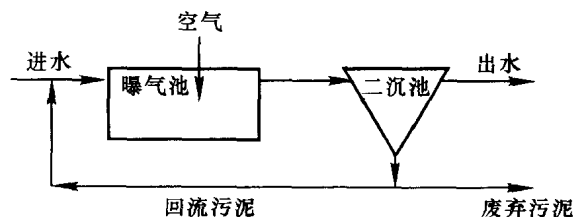


图 1.1 典型的活性污泥过程示意图

为了建立活性污泥过程的机理模型,1983 年国际水污染控制与研究协会 IAWPRC(现更名为国际水质协会 IAWQ)组织专家在前人活性污泥模型化工作的基础上进行了长达 4 年的收集、分析、比较、归纳的研究工作,于 1986 年发表了活性污泥过程的 IAWQ No.1 模型。该模型自发表以来,受到环境工程界的广泛关注,目前已成为活性污泥过程仿真和控制的重要基础。

该模型是在过程假定和系统分割的基础上,用一个微分方程组来描述活性污泥过程中曝气池内各组分浓度随时间的变化情况,模型参数无空间变化,因而是一个集总参数模型。

1. 模型假定

该模型在建模时引入了一个重要的基本假定,就是被模拟的活性污泥过程当前运行正常。该假定的具体内容包括:

- (1) 曝气池内处于正常 pH 及温度下;
- (2) 池内微生物的种群和浓度处正常状态;
- (3) 池内污染物浓度可变,但成分及组成不变;
- (4) 微生物的营养充分;
- (5) 二沉池内无生化反应,仅为一个固液分离装置。

这一假定使模型本身避免了一些不确定性,相应增强了模型的真实性和可靠性。

2. 系统分割

该模型将曝气池内的过程分成 8 个子过程,将曝气池内的物质分成 13 个组分。每个子过程有若干个组分参加,每个组分参与若干个子过程。

8 个子过程是:

- (1) 异养菌好氧生长;
- (2) 异养菌缺氧生长;
- (3) 自养菌好氧生长;
- (4) 异养菌衰减;
- (5) 自养菌衰减;
- (6) 可溶有机氮的氨化;
- (7) 被吸着缓慢降解有机碳的“水解”;
- (8) 被吸着缓慢降解有机氮的“水解”。

13 个组分是:

- (1) 易降解有机碳, S_s ;
- (2) 缓慢降解有机碳, X_s ;
- (3) 可溶性可降解有机氮, S_{nd} ;
- (4) 颗粒状可降解有机氮, X_{nd} ;
- (5) 溶解氧, S_o ;
- (6) 氨态氮, S_{nh} ;
- (7) 硝态氮, S_{no} ;
- (8) 碱度, S_{alk} ;
- (9) 异养菌, X_{bh} ;
- (10) 自养菌, X_{ba} ;
- (11) 可溶惰性有机碳, S_i ;
- (12) 颗粒惰性有机碳, X_i ;
- (13) 微生物衰减产物, X_p 。

3. 基本速率方程

相对于参与某一子过程反应的某一组分,可以写出一个反应动力学方程,以表示该组分的浓度在该子过程反应中随时间的变化情况。对于该子过程,则可写出一个或几个组分的反应动力学方程。在构成这若干个动力学方程时,以某一组分的生长或衰减的反应动力学方程作为基本的方程,其它组分的反应动力学方程以该基本动力学方程为基础经过系数调整来获得。

例如,对于异养菌好氧生长这个子过程,涉及异养菌 X_{bh} 、易降解有机碳 S_s 、溶解氧 S_o 、氨态氮 S_{nh} 和碱度 S_{alk} 。在建立该子过程中各组分的动力学模型时,以异养菌的好氧反应动力学方程为基础。

异养菌好氧生长的反应动力学方程是:

$$(dX_{bh}/dt)_1 = \hat{\mu}_h [S_s/(K_s + S_s)] [S_o/(K_{o,h} + S_o)] X_{bh} \quad (1.2)$$

式中, $\hat{\mu}_h$ 是异养菌最大比生长速率, K_s 是相应于 S_s 的饱和常数, $K_{o,h}$ 是相应于 S_o 在异养菌好氧生长中的饱和常数。脚标号表示子过程的编号,方程(1.2)中 (dX_{bh}/dt) 的脚标号“1”表示第 1 个子过程,即异养菌好氧生长。

上述模型实际上是废水生物处理中 Monod 方程再乘上一个开关函数 $[S_o/(K_{o,h} + S_o)]$ 。在开关函数中, $K_{o,h}$ 是一个较小的任意数。当溶解氧浓度 S_o 较大时,该开关函数数值趋近 1,表示异养菌的好氧反应动力学符合 Monod 方程。当溶解氧浓度 S_o 很小时,该开关函数数值趋近 0,表示异养菌的生长因溶解氧浓度低而难以进行。使用开关函数,是 IAWQ 模型的一个特色。

由于 IAWQ 模型中各种符号较多,因此在模型中某组分的符号与该组分浓度的符号未加区分,使用同一符号,这点须加注意。

在异养菌缺氧生长子过程中,各组分的反应动力学方程以异养菌的缺氧生长动力学方程为基础。该方程是:

$$(dX_{bh}/dt)_2 = \hat{\mu}_h [S_s/(K_s + S_s)] [S_{no}/(K_{no} + S_{no})] [K_{o,h}/(K_{o,h} + S_o)] \eta_g X_{bh} \quad (1.3)$$

式中, K_{no} 是 S_{no} 在异养菌生长中的饱和常数,脚标“2”表示第 2 个子过程,即异养菌缺氧生长, η_g 是校正系数。

在自养菌好氧生长子过程中,各组分的反应动力学方程以自养菌的好氧生长动力学方程为基础。该方程是:

$$(dX_{ba}/dt)_3 = \hat{\mu}_a [S_{nh}/(K_{nh} + S_{nh})] [S_o/(K_{o,a} + S_o)] X_{ba} \quad (1.4)$$

式中, $\hat{\mu}_a$ 是自养菌最大比生长速率, K_{nh} 是 S_{nh} 在自养菌生长中的饱和常数, $K_{o,a}$ 是 S_o 在自养菌生长中的饱和常数。脚标“3”表示第 3 个子过程,即自养菌好氧生长。

在异养菌衰减子过程中,各组分的反应动力学方程以异养菌的衰减动力学方程为基础。该方程是:

$$(dX_{bh}/dt)_4 = b_h X_{bh} \quad (1.5)$$

式中, b_h 是异养菌衰减一级速率方程动力学常数。脚标“4”表示第 4 个子过程,即异养菌衰减。

在自养菌衰减子过程中,各组分的反应动力学方程以自养菌的衰减动力学方程为基础。该方程是:

$$(dX_{ba}/dt)_5 = b_a X_{ba} \quad (1.6)$$

式中, b_a 是自养菌衰减一级速率方程动力学常数。脚标“5”表示第 5 个子过程, 即自养菌衰减。

在可溶有机氮氨化子过程中, 各组分的反应动力学方程以氨氮 S_{nh} 增长的动力学方程为基础。该方程是:

$$(dS_{nh}/dt)_6 = K_a S_{nd} X_{bh} \quad (1.7)$$

式中, K_a 是有机氮氨化动力学常数。脚标“6”表示第 6 个子过程, 即可溶有机氮氨化。

在被吸着缓慢降解有机碳的“水解”子过程中, 各组分的反应动力学方程以易降解有机碳 S_s 增长的动力学方程为基础。该方程是:

$$(dS_s/dt)_7 = K_h \{ (X_s/X_{bh}) / [K_x + (X_s/X_{bh})] \} \{ [S_o/(K_{o,h} + S_o)] + \eta_h [K_{o,h}/(K_{o,h} + S_o)] [S_{no}/(K_{no} + S_{no})] \} X_{bh} \quad (1.8)$$

式中, K_h 是水解动力学常数, K_x 是水解反应常数, η_h 是缺氧水解校正因子。脚标“7”表示第 7 个子过程, 即被吸着缓慢降解有机碳的“水解”。

在被吸着缓慢降解有机氮的“水解”子过程中, 各组分的反应动力学方程以易降解有机氮 S_{nd} 增长的动力学方程为基础。该方程是:

$$(dS_{nd}/dt)_8 = (X_{nd}/X_s) (dS_s/dt)_{\text{有机碳水解}} \quad (1.9)$$

式中, $(dS_s/dt)_{\text{有机碳水解}}$ 为被吸着缓慢降解有机碳的“水解”子过程速率方程。脚标“8”表示第 8 个子过程, 即被吸着缓慢降解有机氮的“水解”。

4. 相关速率方程

在各子过程基本反应动力学方程的基础上, 参与该子过程的其它组分的反应动力学方程也可依次建立。

例如, 在异养菌好氧生长子过程中, 对于易降解有机碳 S_s , 可根据微生物生长与基质消耗的关系, 利用异养菌产率系数 Y_h 及微生物生长引起基质消耗的事实, 可得方程:

$$(dS_s/dt)_1 = (-1/Y_h) (dX_{bh}/dt)_1 \quad (1.10)$$

对于溶解氧 S_o , 由于异养菌 X_{bh} 的生长主要由易降解有机碳 S_s 和溶解氧 S_o 的消耗所支撑, 因而可以认为 X_{bh} 的增长速率大体等于易降解有机碳 S_s 和溶解氧 S_o 消耗速率的和。由此可得:

$$(dS_o/dt)_1 = -[(1 - Y_h)/Y_h] (dX_{bh}/dt)_1 \quad (1.11)$$

对于氨态氮 S_{nh} , 则根据异养菌生长时的需氮量确定一个系数 i_{xb} , 可得:

$$(dS_{nh}/dt)_1 = -i_{xb} (dX_{bh}/dt)_1 \quad (1.12)$$

对于碱度 S_{alk} , 根据消耗量是氨氮的 1/14 的经验公式, 可得:

$$(dS_{alk}/dt)_1 = (-i_{xb}/14) (dX_{bh}/dt)_1 \quad (1.13)$$

由以上分析可知,某一子过程中某一组分的反应动力学方程,可以由该子过程的基本动力学方程乘以一个系数来得到。该系数对于产生基本动力学方程的组分为1(数量增加)或-1(数量减少);对于其它组分,则可根据反应机理(如方程 1.10)、质量守恒(如方程 1.11)或经验常数(如方程 1.12,1.13)来获得。活性污泥过程 IAWQ 模型各子过程的反应系数可见表 1.1。

5. 组分总动力学方程

在活性污泥过程的 IAWQ 模型中,每一个组分至少在一个子过程中参加了反应(惰性组分除外),该组分在其参与的所有子过程中的总的反应速率,为其在各个子过程中反应速率之和。

例如,对于易降解有机碳 S_s ,在子过程异养菌好氧生长“1”中消耗,在异养菌缺氧生长“2”中消耗,在被吸着缓慢降解有机碳的“水解”“7”中生成。因此,易降解有机碳 S_s 总的反应动力学方程为 3 个子过程中反应速率之和。由此可得:

$$\begin{aligned} (dS_s/dt)_T &= (dS_s/dt)_1 + (dS_s/dt)_2 + (dS_s/dt)_7 \\ &= (-1/Y_h) \hat{\mu}_h [S_s/(K_s + S_s)] [S_o/(K_{o,h} + S_o)] X_{bh} \\ &\quad + (-1/Y_h) \hat{\mu}_h [S_s/(K_s + S_s)] [S_{no}/(K_{no} + S_{no})] [K_{o,h}/(K_{o,h} + S_o)] \eta_g X_{bh} \\ &\quad + K_h \{ (X_s/X_{bh}) / [K_x + (X_s/X_{bh})] \} \{ [S_o/(K_{o,h} + S_o)] \\ &\quad + \eta_h [K_{o,h}/(K_{o,h} + S_o)] [S_{no}/(K_{no} + S_{no})] \} X_{bh} \end{aligned} \quad (1.14)$$

其它组分的总动力学方程,同样可根据:①组分所在子过程的基本动力学方程,②表 1.1 的动力学系数,③总动力学方程的构成方法,逐一写出,这里不一一列举。

6. 统一单位

在对活性污泥过程的 13 个组分分别建立反应动力学方程后,即可开始对方程求解。由于某一组分可能出现在一个以上的方程中,即若干方程包含同一组分,因此必须对这 13 个方程联立求解,以求得能同时满足 13 个方程的 13 个组分的浓度。由于这 13 个组分涉及有机碳、有机氮、微生物等不同物质,计量单位各不相同,给方程求解带来困难。因此,在计算过程中统一各组分的浓度单位,是对方程联立求解的必要条件。

IAWQ 模型在这方面有其特色,具体做法是:对于含碳的污染物,用 COD (mg/L)来表示其浓度;对于溶解氧 S_o ,是负的 COD 值,用 $-COD$ (mg/L)表示其浓度;对于好氧或厌氧微生物,用 COD (mg/L)表示其浓度,经验公式为:1 mg MLVSS=1.48 mg COD。对于 NH_3-N ,用 N(mg/L)表示,但在反应速率方程的动力学系数前加上校正因子。根据反应方程 $NH_3 + 2O_2 \rightarrow HNO_3 + H_2O$ 可知,17 g NH_3 可与 64 g O_2 作用完全,相当于 64 g COD;所以,1 g N(相当于

1.214 g NH_3) 可与 4.57 g O_2 反应, 相当于 4.57 g COD。对于 $\text{NO}_3^- - \text{N}$, 也用 $\text{N}(\text{mg/L})$ 表示, 但同样在反应速率方程的动力学系数前加上校正因子。根据氧化还原反应式, 在获得 1 mol 电子时, 需 $1/5 \text{ mol NO}_3^-$, 或 $1/4 \text{ mol O}_2$ 。因此, $1/5 \text{ mol NO}_3^-$ 相当于 $1/4 \text{ mol O}_2$; 或 1 g N (相当于 4.43 g NO_3^-) 相当于 2.86 g O_2 , 或 2.86 g - COD (COD 的负值)。对于碱度, 用 $\text{HCO}_3^- (\text{mol/L})$ 表示。由于碱度本身并没有参与其它组分的反应, 其单位不同在联立方程组内没有影响。

7. 参数值

IAWQ 模型涉及 19 个参数, 其中 5 个是化学计量系数, 14 个是反应动力学参数。经过对大量文献数据的分析归纳, 该模型给出了各参数在 20℃ 和中性 pH 的选值范围和默认值数据。具体数值可见表 1.2。

表 1.2 生活污水在中性 pH 和 20℃ 时参数的典型数值

类别	符号	单位	默认值	数值范围
化学计量系数	Y_a	(生成细胞)g COD/(氧化)g N	0.24	0.07~0.28
	Y_h	(生成细胞)g COD/(氧化)g COD	0.67	0.46~0.69
	f_p	无量纲	0.08	0.08
	i_{xb}	g N/g COD (细胞)	0.086	0.086
	i_{xp}	g N/g COD	0.06	0.06
反应动力学参数	$\hat{\mu}_h$	1/d	6.0	3~13.3
	K_s	g COD/ m^3	20	10~180
	$K_{o,h}$	g O_2 / m^3	0.1	0.01~0.15
	K_{no}	g $\text{NO}_3^- - \text{N}/\text{m}^3$	0.1	0.1~0.2
	b_h	1/d	0.62	0.09~4.38
	η_k	无量纲	0.8	0.6~1.0
	η_h	无量纲	0.4	0.4
	K_h	g 缓慢降解 COD/(细胞)g COD · d	2.2	2.2
	K_x	g 缓慢降解 COD/(细胞)g COD	0.15	0.15
	$\hat{\mu}_a$	1/d	0.6	0.34~0.65
	K_{nh}	g $\text{NH}_3 - \text{N}/\text{m}^3$	1.0	0.6~3.6
	$K_{o,a}$	g O_2 / m^3	1.0	0.5~2.0
	b_a	1/d	0.15	0.05~0.15
	K_a	$\text{m}^3/\text{g COD} \cdot \text{d}$	0.08	0.08

8. 模型生成

对活性污泥过程 IAWQ 模型的过程假定、系统分割、基本速率方程、相关速率方程、组分总动力学方程、统一单位、参数值等方面分别了解后, 现在可以进入模型生成阶段的讲述。