

污水生物处理的 数学模型与应用

*Modeling and Application for Biological
Wastewater Treatment.*

施汉昌 邱 勇 编著

污水生物处理的数学模型与应用

施汉昌 邱 勇 编著

中国建筑工业出版社

图书在版编目(CIP)数据

污水生物处理的数学模型与应用/施汉昌, 邱勇编著. —北京: 中国建筑工业出版社, 2014. 1
ISBN 978-7-112-16184-3

I. ①污… II. ①施… ②邱… III. ①污水处理-生物处理-数学模型 IV. ①X703. 1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 287542 号

本书共分 13 章, 第 1 章概述了污水生物处理数学模型的发展历史, 第 2 章和第 3 章对化学计量学和酶催化反应动力学进行了介绍, 第 4 章系统地介绍了污水生物处理的经典模型及其应用, 第 5 章和第 6 章分别介绍了厌氧生物处理的反应动力学和生物膜反应器的动力学, 第 7 章介绍了二次沉淀池的模型。从第 8 章到第 11 章介绍了由国际水质协会 (IAWQ) 提出的 ASM 系列模型, 包括 ASM1、ASM2、ASM2d 和 ASM3 模型, 工艺概化模型的建立与模型求解, ASM 模型的水质表达与动力学参数估值, 运用 ASM 模型进行模拟的方法与流程。鉴于污水生物处理的数值模拟技术主要应用于设计和优化运行, 第 12 章和第 13 章分别提供了污水生物处理工艺复算和工艺参数优化的算例。

本书可作为给水排水和环境工程专业的教材和参考书。

责任编辑: 于 莉 施佳明

责任设计: 董建平

责任校对: 姜小莲 关 健

污水生物处理的数学模型与应用

施汉昌 邱 勇 编著

*

中国建筑工业出版社出版、发行 (北京西郊百万庄)

各地新华书店、建筑书店经销

北京科地亚盟排版公司制版

北京云浩印刷有限责任公司印刷



*

开本: 787×1092 毫米 1/16 印张: 19 1/4 字数: 480 千字

2014 年 1 月第一版 2014 年 1 月第一次印刷

定价: 65.00 元

ISBN 978-7-112-16184-3
(24895)

版权所有 翻印必究

如有印装质量问题, 可寄本社退换

(邮政编码 100037)

序

早在 1982 年，水污染控制界的前辈，已故的顾夏声教授就率先在我国高校开设了“废水生物处理数学模式”这门研究生课。顾先生在 20 世纪 80 年代就学习、收集了西方水污染防治学界的新成就、新理论，于 1982 年出版了《废水生物处理数学模式》一书，被全国从事环境工程、给水排水专业的科技工作者和有关专业的研究生教学广泛用作参考书和教材，还由台湾晓园出版社在 1990 年用繁体字出版，在台湾得到了广泛的关注。顾先生又在 1993 年作了修改和补充，出版了“废水生物处理数学模式”的第二版。可以毫不夸张地说，顾先生在提高我国废水生物处理的理论研究和人才培养方面所做的贡献是历史性的，不可忘却的。

从 1993 年至今已有 20 年，在此期间我国的污水处理行业得到了高速发展，从当时全国只有几十座污水处理厂到现在已有 3500 余座大中型污水处理厂。污水处理的标准从当时以去除 COD 为主提高到 COD、总氮、总磷的综合控制，对污水处理厂的设计和运行要求进一步提高。污水生物处理的数学模型是微生物对水中污染物降解过程的数学表达，揭示这些生物化学反应的基本规律，不仅有助于对污水生物处理原理的深入理解，而且是优化设计与运行条件的有效工具。特别是 20 世纪 80 年代国际水质协会建立 ASM 系列模型以后，基于 ASM 模型的计算机模拟软件得到了发展，使污水生物处理的数学模型从研究迅速走向实际应用。

施汉昌教授所著《污水生物处理的数学模型与应用》一书在顾夏声先生所著的《废水生物处理数学模式》（第二版）的基础上增加了 ASM 系列模型及其应用方法与案例；以化学计量学和酶催化反应动力学为基础，系统地介绍了污水生物处理的经典模型、ASM 系列模型及其应用、厌氧生物处理反应动力学和生物膜反应器动力学。为了使读者能够更好地理解和运用污水生物处理的数学模型及其软件来解决工程设计与污水处理工艺运行中的问题，作者在书中详细介绍了污水处理工艺概化模型的建立与模型求解，ASM 模型的水质表达与动力学参数估值，运用 ASM 模型进行模拟的方法与流程以及污水生物处理工艺复算和工艺参数优化的案例。这些内容是作者所领导的研究团队近 20 年来在污水生物处理的数学模型与应用方面的研究成果和运用经验的总结。可以毫不夸张地说，施老师的书稿是顾先生原作的新发展，他的著作和团队的研究工作不仅提高了教学水平，也使有关方面的研究新成果对提高我国污水生物处理的运行水平发挥了实际的作用，因此，施老师的这本书和他的实践对于污水生物处理的理论研究与实践也具有重要意义。

钱 易

2013 年 10 月 17 日

前　　言

1982 年由顾夏生教授在国内率先开设了“废水生物处理数学模式”作为环境工程专业的研究生课程，并以活性污泥法的经典模型为核心出版了《废水生物处理数学模式》（第一版）。1993 年顾夏生教授对该书进行了修订，增添了废水生物脱氮除磷等新内容，出版了《废水生物处理数学模式》（第二版）。该书出版后被高校与专业人士作为重要的教材和参考书，为提高我国废水生物处理的理论研究能力和人才培养做出了历史性的贡献。1995 年钱易教授接任这门课程的主讲，首次将 ASM 系列模型引入该课程，为国内同行学习和研究 ASM 系列模型，开展污水处理的数值模拟奠定了基础。笔者有幸作为顾夏生教授的学生和钱易教授的助教，不仅向他们学习了丰富的知识和经验，而且学习了深入浅出、理论联系实际的讲课风格，实在是受益匪浅。

2000 年以来，笔者担任“废水生物处理数学模式”课程的主讲，并结合国内的工程案例开展了 ASM 系列模型的应用研究。随着我国城市污水处理厂的大规模建设和新排放标准的实施，对污水生物处理系统的设计和运行有了更高的要求，数学模型和数值模拟的应用日趋普及。鉴于从经典模型到 ASM 系列模型主要表达了城市生活污水处理的生物反应动力学，本书取名为《污水生物处理的数学模型与应用》。本书的第 1 章概述了污水生物处理数学模型的发展历史。由于化学计量学和酶催化反应动力学是污水生物处理数学模型的基础，第 2 章和第 3 章对这两部分进行了介绍。第 4 章系统地介绍了污水生物处理的经典模型及其应用。第 5 章和第 6 章分别介绍了厌氧生物处理反应动力学和生物膜反应器动力学。二次沉淀池是污水生物处理系统的重要单元，第 7 章介绍了二次沉淀池的模型和计算流体力学及其软件的应用。从第 8 章到第 11 章介绍了由国际水质协会（IAWQ）提出的 ASM 系列模型，包括 ASM1、ASM2、ASM2d 和 ASM3 模型，工艺概化模型的建立与模型求解，ASM 模型的水质表达与动力学参数估值，运用 ASM 模型进行模拟的方法与流程。鉴于污水生物处理的数值模拟技术主要应用于设计和优化运行，第 12 章和第 13 章分别提供了污水生物处理工艺复算和工艺参数优化的算例。

本书编著过程中受到学界前辈和同行的关心与帮助。顾夏生教授生前曾多次关心本书的编写工作。钱易教授通读了本书的初稿，并提出了宝贵的修改意见。博士后范茏和邱勇参加了本书第 7 章和第 12 章的研究与编写工作；博士研究生柯细勇、徐丽婕、刘艳臣和沈童刚等参加了 ASM 模型应用与工艺优化运行的研究；青年教师刘广立、温沁雪、周小红和吴静等人参与了文献资料和书稿的整理工作；在此笔者对他们的贡献表示衷心的感谢。本书编著过程中参考了众多国内外的杂志与书籍，每章末都列出了主要参考文献，笔者谨向本书取材引用过的文献作者致以谢意。本书受到“北京市高等教育精品教材项目”经费的资助，在此一并致谢。

施汉昌

2013 年 10 月 20 日

目 录

第 1 章 概述	1
1.1 污水生物处理技术的发展	1
1.2 污水生物处理的数学模型	1
1.3 活性污泥模型 (ASM)	4
1.4 污水生物处理的其他数学模型	5
1.4.1 固定生长好氧生物处理过程的数学模型	5
1.4.2 厌氧生物处理过程的数学模型	6
1.5 小结	8
第 2 章 污水生物处理的化学计量学与能量转化	11
2.1 微生物细胞的经验分子式	11
2.2 污水生物处理的化学计量学基础	12
2.3 广义反应速率与多重反应的表达	15
2.4 细胞生长与基质利用	16
2.5 小结	21
第 3 章 酶和酶催化反应动力学	23
3.1 酶和酶的催化特性	23
3.1.1 酶的概念	23
3.1.2 酶的催化特性	24
3.2 酶催化反应的动力学模型	26
3.2.1 酶促反应与米—门公式	26
3.2.2 酶促反应动力学参数的估值	28
3.2.3 酶促反应的抑制	29
3.3 小结	32
第 4 章 活性污泥法的经典模型	34
4.1 污水生物处理的经典模型	34

目 录

4.2 Eckenfelder 模型	34
4.3 Grau 模型	40
4.4 Lawrence-McCarty 模型	40
4.5 McKinney 模型	53
4.6 基质降解与生物增长量之间的关系	55
4.7 基质降解与需氧量之间的关系	56
4.8 pH 条件	58
4.9 对营养的要求	58
4.10 温度的影响	59
4.11 生物处理系统污泥最佳沉降条件	60
4.11.1 概述	60
4.11.2 表示活性污泥沉降性能的主要参数	61
4.11.3 污泥的最佳沉降条件	62
4.12 活性污泥法经典模型的应用	63
4.12.1 概述	63
4.12.2 传统活性污泥法	64
4.12.3 完全混合活性污泥法	64
4.13 小结	73
第 5 章 厌氧生物处理的反应动力学	75
5.1 厌氧生物反应动力学	76
5.1.1 厌氧生物反应动力学模型	76
5.1.2 厌氧系统中的细胞合成	78
5.1.3 颗粒有机物水解	78
5.1.4 水解产物的厌氧反应	79
5.1.5 产甲烷过程	81
5.1.6 温度对厌氧生物反应动力学的影响	83
5.1.7 对温度影响和温度系数的表达	85
5.2 厌氧过程中自由能的释放	86
5.2.1 释放的标准自由能	86
5.2.2 标准状态与环境条件	87
5.2.3 氢分压对转化自由能的影响	88
5.3 厌氧过程的化学计量学	88

5.3.1 产气预测和生物体的合成	88
5.3.2 由碳源和氮源合成细胞需要的能量	89
5.4 厌氧生物反应器的动力学	92
5.4.1 厌氧生物反应器	92
5.4.2 有回流厌氧生物反应器的动力学	93
5.4.3 无回流厌氧生物反应器的动力学	95
5.4.4 厌氧生物反应器的分相模型	95
5.5 厌氧消化 1 号模型 (ADM1)	98
5.6 小结	104
第 6 章 生物膜反应器的动力学	107
6.1 生物膜的形成	108
6.1.1 固定生长微生物的特点	108
6.1.2 生物膜的形成过程	110
6.1.3 生物膜增长的一般描述	111
6.2 生物膜动力学	114
6.2.1 一级反应	115
6.2.2 零级反应	116
6.2.3 不同组分的扩散	118
6.3 生物膜动力学参数	119
6.3.1 生物膜内的扩散系数	119
6.3.2 生物膜动力学参数的测定方法	120
6.3.3 生物膜的扩散—反应模型	121
6.3.4 动力学参数的求解方法	122
6.4 水膜的扩散	124
6.5 生物膜动力学的应用	125
6.5.1 生物膜反应限制因素的判别	125
6.5.2 生物膜反应器的物料平衡	125
6.6 小结	126
第 7 章 二次沉淀池的模型	131
7.1 二沉池模型简述	131
7.1.1 经验模型	131

目 录

7.1.2 固体通量模型	131
7.1.3 Takács 模型	132
7.1.4 计算流体力学模型	132
7.1.5 二沉池模型的应用	132
7.2 基于固体分离率的二沉池模型及计算	133
7.3 二沉池的一维通量模型	134
7.3.1 一维通量模型的建立	134
7.3.2 一维通量模型的应用	136
7.3.3 一维二沉池模型计算	139
7.4 运用计算流体力学及其软件对二沉池的模拟	141
7.4.1 计算流体力学 (CFD) 的特点及求解方法	141
7.4.2 CFD 的应用软件	143
7.4.3 CFD 的基本方程	145
7.4.4 二沉池的 CFD 模拟	148
7.5 小结	152
第 8 章 IAWQ 活性污泥法模型	156
8.1 IAWQ 模型简介	156
8.2 活性污泥法 1 号模型 (ASM1)	156
8.2.1 ASM1 模型的组分	156
8.2.2 ASM1 模型描述的工艺过程	159
8.3 活性污泥法 2 号模型 (ASM2)	160
8.3.1 ASM2d 模型的组分	161
8.3.2 ASM2d 模型描述的生物过程	162
8.4 活性污泥法 3 号模型 (ASM3)	170
8.4.1 ASM3 模型的组分	171
8.4.2 ASM3 模型描述的生物反应过程	171
8.5 IAWQ 模型的比较	176
8.6 小结	177
第 9 章 活性污泥工艺的建模基础与模型求解	180
9.1 活性污泥模型的适用原则	180
9.2 污水处理工艺的概化模型	181

9.2.1 污水处理工艺的概化模型	181
9.2.2 基于 CSTR 反应器的模拟与计算	182
9.3 污水处理工艺的水力学特性	183
9.3.1 进水动态过程的数据获取	183
9.3.2 实际污水处理工艺的描述	184
9.3.3 回流对反应器水力特性的影响	184
9.3.4 进水流量变化对传质的影响	189
9.4 ASM 模型的计算	194
9.4.1 稳态求解及初值确定	195
9.4.2 动态过程的模拟计算	198
9.4.3 基于 ASM 模型的计算软件	200
9.5 小结	203
第 10 章 IAWQ 模型的水质表达与动力学参数估值	206
10.1 活性污泥 1 号模型 (ASM1) 的水质表达与动力学参数估值	206
10.1.1 污水特性和参数值的估计	206
10.1.2 典型参数范围、默认值和环境因素的影响	212
10.2 活性污泥法 2 号模型 (ASM2) 的水质表达与计量学参数	215
10.2.1 模型的动力学和化学计量参数	215
10.2.2 活性污泥工艺中污水水质特性的表征	219
10.2.3 模型组分的常规分析	224
10.3 活性污泥法 3 号模型 (ASM3) 的水质表达和计量学参数	224
10.4 小结	226
第 11 章 ASM 模型用于污水处理过程模拟的方法与流程	229
11.1 模拟方法与流程	229
11.2 建立模型	232
11.3 模型校正	233
11.3.1 进水组分	234
11.3.2 反应动力学参数及化学计量系数	237
11.3.3 模拟结果验证	240
11.4 模型的敏感性分析	240
11.4.1 模型缺省状态下的敏感度分析	241

目 录

11.4.2 确定模型的敏感度分析	244
11.4.3 动态敏感性分析	246
11.5 小结	247
第 12 章 ASM 模型在污水处理工艺设计中的应用	250
12.1 模型辅助工艺设计的方法	250
12.2 设计方案的分析与建模	251
12.2.1 设计方案介绍	251
12.2.2 工艺概化模型	251
12.2.3 设计工艺的运行参数	252
12.2.4 设计工艺的模型参数	253
12.3 工艺初始方案的复算	255
12.3.1 工艺初始方案的复算内容	255
12.3.2 工艺设计方案的复算结果	256
12.3.3 工艺初始方案的复算结论	259
12.4 设计修改方案的复算	260
12.4.1 工艺设计的修改方案	260
12.4.2 工艺修改方案的复算内容	260
12.4.3 工艺修改方案复算的结果	260
12.4.4 工艺修改方案复算的结论	263
12.5 工艺修改方案的优化模拟	263
12.5.1 修改工艺优化运行的目的	263
12.5.2 修改工艺优化运行的结果	264
12.5.3 工艺优化运行的结论	266
12.6 工艺方案复算的结论	266
12.7 小结	267
第 13 章 ASM 模型在污水处理厂优化运行中的应用	268
13.1 优化运行分析的准备工作	268
13.1.1 污水处理厂的基本情况	268
13.1.2 污水处理厂工艺流程的概化	269
13.1.3 描述污水处理过程的数学模型选择	270
13.1.4 动态实时模拟与日均模拟结果的验证	271

13.1.5 反应器运行状态验证 ······	272
13.1.6 反应器沿程变化验证 ······	272
13.2 对本案例污水处理厂存在问题的分析 ······	273
13.3 反应器停留时间的优化 ······	274
13.3.1 优化研究方法 ······	274
13.3.2 模拟结果分析与讨论 ······	274
13.3.3 反应器停留时间优化的结论 ······	279
13.4 同步化学除磷 ······	280
13.4.1 化学除磷方法的选择 ······	280
13.4.2 同步化学除磷的优化方法 ······	281
13.4.3 同步化学除磷的不同加药点比较 ······	281
13.4.4 好氧区末端同步化学除磷 ······	281
13.4.5 同步化学除磷优化的结论 ······	285
13.5 工艺参数的优化 ······	286
13.5.1 污泥龄的优化 ······	286
13.5.2 污泥浓度的优化 ······	287
13.5.3 内回流比的优化 ······	288
13.5.4 运行参数优化的结论 ······	289
13.6 综合优化运行策略的结论与案例分析 ······	290
13.6.1 综合优化运行策略的结论 ······	290
13.6.2 综合优化运行策略的案例分析 ······	291
13.7 综合优化运行策略的技术经济分析 ······	292
13.8 小结 ······	295

第 1 章 概 述

1.1 污水生物处理技术的发展

污水生物处理技术已经有 100 余年的历史。它是一种模仿自然界中微生物降解有机物过程的工艺，依靠处理系统内自身的微生物，发挥它们正常的降解有机物的功能，使污水中的有机污染物最终转化为水和二氧化碳。从几十亿年前生命在地球上的进化开始，这些微生物实质上就在循环利用自然界的废物，包括利用死亡或腐烂植被中的元素进行有益的循环。这一过程也是一种在环境中消除人类抛弃的大部分天然和合成有机化合物的可靠方法。由于人类的增长和生活水平的提高，人类排向自然界的污水和废弃物日益增加，远远超出了自然过程的净化能力。因此，人们将这种自然过程移植到工厂里，提供一定的工艺条件予以强化，从而形成了今天的污水生物处理工艺。微生物在污水生物处理系统中起主导作用，各种反应器和工艺条件只是为微生物提供适宜的生态环境，提高它们对目标污染物降解的活性和能力。与污水的物理化学处理相比，生物处理技术在大规模污水处理中得到了广泛的应用并经久不衰，其中的本质原因是微生物降解有机物的过程是一种低能耗的酶催化反应。微生物的酶催化反应可以在常温常压条件下将有机物分解为无机物，并且所需的自由能较低，而低能耗对于污水处理至关重要。

近 50 年来，污水生物处理技术得到了迅速的发展，产生了许多不同类型的新工艺和新技术。这些新技术发展围绕的主要目标是：①提高处理工艺的出水水质，使处理出水的水质不仅满足向天然水体排放的标准，而且可以进一步满足污水回用的水质标准；②通过技术的改进尽可能地降低污水处理系统的造价、能耗和运行费用；③改善污水生物处理工艺的稳定性，使运行和维护工作更加简单；④在污水处理达到要求的同时尽可能地减少剩余污泥的产量。随着污水生物处理技术的不断发展，污水生物处理已经包括了好氧生物处理、缺氧生物处理和厌氧生物处理，以及在不同的处理出水目标下这三种工艺的组合工艺。同时按照微生物在污水处理系统中存在的状态不同，又可以将污水生物处理分为悬浮生长的生物处理系统和固定生长的污水生物处理系统。

在污水生物处理技术发展的同时，污水生物处理的理论也得到了进一步的发展。污水处理的微生物学原理和生物过程中有机物的降解机理得到了深入的研究。这些研究揭示了污水生物处理过程中微生物的生长、有机物的降解、溶解氧的消耗、能量和氮磷等营养物质的迁移转化过程，以及这些过程之间的相互关系、反应速率及影响因素，从而形成了污水生物处理的反应动力学。

1.2 污水生物处理的数学模型

长期以来污水生物处理构筑物的设计和运行大多根据经验数据进行，从 20 世纪 50 年

代开始国外一些学者在污水生物处理的动力学方面作了大量的研究工作，如美国的 H. Heukelekian、W. W. Eckenfelder, Jr. R. E. McKinney、J. F. Andrews、A. W. Lawrence、P. L. McCarty 及英国的 A. L. Downing 等人都较深入地研究了基质降解和微生物生长的规律，以便更合理地进行处理构筑物的设计与运行^[1]。污水生物处理动力学主要包括以下内容：

- (1) 基质降解动力学，涉及基质降解与基质浓度、生物量等因素之间的关系。
- (2) 微生物增长动力学，涉及基质降解与基质浓度、生物量、增长常数等因素之间的关系。

- (3) 基质降解与生物量增长、基质降解与需氧、营养要求等关系。

许多学者根据各自研究的成果提出了不少描述上述关系的数学表达式或数学模型。在各个模型中含有一些常数。这些常数的数值表示了一类污水生物降解的特性。

在研究污水生物处理动力学时，一般作如下一些假设：

- (1) 整个处理系统是在稳定状态下运行的；
- (2) 进入反应器内的污水中的基质均为溶解性的，污水中不含微生物群体；
- (3) 微生物在二次沉淀池中没有活性，不进行代谢活动；
- (4) 二次沉淀池中污泥没有累积且固液分离良好；
- (5) 除特别注明外，都假定生物反应器内的物料是充分混合均匀的。

由于活性污泥法的普遍应用，所以目前所提出的数学模型主要是根据活性污泥法推导出来的。这些模型的建模思路和模型结构为其后建立其他好氧生物处理法和厌氧生物处理法的模型提供了借鉴。污水生物处理的数学模型大致可以分为三类：

(1) 经验模型

这一类模型以 Eckenfelder 模型为代表，主要考虑了污水处理厂的负荷与处理之间的关系，模型的推导常以基质的降解服从一级反应为基础。Eckenfelder 模型更适用于含有多种基质的污水，因为对于含有多种基质的污水来说，每一基质的去除虽然用零级反应来描述，其速率是恒定的，不受其他基质的影响，但基质的总去除量则为每个单一基质去除量之和，所以一般可以认为整个系统的动力学遵循一级反应关系。

(2) 基本模型

这一类模型是将 Monod 方程引入污水处理领域而推导出来的。它以微生物生理学为基础，更深入地说明了微生物增长与基质降解之间的关系，一般可以 Lawrence-McCarty 模型为代表。因为 Monod 方程是根据纯菌种对单纯有机化合物作间歇培养的试验结果而得出的，所以 Lawrence-McCarty 模型较适用于含有单一基质的污水。

(3) 综合模型

由于水污染控制的需要，污水生物处理不仅要去除污水中的有机碳，还要去除污水中的氮磷等营养元素。这就要求污水生物处理的数学模型增加对硝化过程、反硝化过程和生物除磷过程的表达。污水生物处理的实践已经发展到这样的程度，即所有这些反应过程都可以在一个单纯的活性污泥系统内完成。由于存在着微生物系统间的相互作用，因此描述这些过程的数学模型相当复杂。在综合模型研究的初期，由于模型计算的复杂性，研究人员不得不从事大量的计算，并最大限度地从数学模型中谋求答案。矩阵型综合模型的出现使模型表达大为简化，而计算机技术在模型解算中的应用与发展为综合模型的实际应用提

供了重要的条件。

综合模型的早期研究可以追溯到 20 世纪 60 年代。1964 年, Downing、Painter 和 Knowles 联合发表了关于活性污泥法中硝化反应模型的文章^[2], 该文章是早期尝试在污水生物处理方面引入质量平衡和动力学平衡关系的重要文献, 他们的工作大大推进了对于活性污泥反应过程中硝化反应的理解。在此基础上, Wuhrmann^[3]提出硝化反应的设计参数污泥龄的概念。

1977 年瑞士的 Gujer 基于活性污泥法反应进程中某种硝化菌的动力学实验, 提出以下模拟计算模型^[4]:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{Q \cdot S_0 + R \cdot S_R - (Q+R) \cdot S}{V} - \hat{q} \cdot \frac{S}{K_s + S} \cdot X \quad (1.1)$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\hat{q}}{\hat{\mu}} \cdot \frac{d\hat{\mu}}{dt} + \frac{\hat{q} \cdot V \cdot X}{M} \cdot \left(\hat{\mu} \cdot \frac{S}{K_s + S} - D_x \right) \quad (1.2)$$

$$S_R = S(t - t_D) \quad (1.3)$$

式中: S , S_0 , S_R , X ——反应器中的氨, 流入的氨, 回流氨和活性污泥浓度;

Q , R , D_x ——入流量, 回流量, 单位体积内生物溶解比率 (污泥停留时间 SRT 的倒数);

\hat{q} ——活性污泥最大比硝化反应速率;

$\hat{\mu}$, K_s ——硝化细菌最大生长速率和饱和常数;

V , M ——反应器体积, 整个系统中活性污泥量;

t , t_D ——反应时间和二级沉淀池的停留时间。

方程 (1.1) 是单一完全混合反应器的氨质量平衡方程; 式 (1.2) 是关于活性污泥的硝化反应活性平衡方程, 其中考虑了温度和二级沉淀池中生物量变化带来的改变; 式 (1.3) 是描述二次沉淀池中氨的停留平衡方程。这个模型得到了动力学实验的验证。

污水生物处理数学模型在欧洲发展的同时, 南非开普敦大学的 Gerrit v. R. Marais 研究组也做了大量的研究工作。20 世纪 70 年代, 研究组开发了大尺度范围内有机物综合降解、硝化反应和反硝化反应, 以及混合反应器中氧消耗速率的计算模型。研究组首先建立了稳态条件下的计算模型 (Marais and Ekama^[5]), 然后又建立了动力学计算模型。该研究组对污水生物处理数学模型研究的重要贡献之一是引入了易生物降解和难生物降解基质的概念。这两类基质可以通过仪器观测每日负荷的变化、反应器中氧的消耗和反硝化作用的关系来表达。研究组根据细胞外水解过程做出的难降解基质分类已经被应用于 ASM 系列模型中。

1980 年 Dold 等人在国际水污染研究与控制协会 (IAWPRC) 的会议上提出了活性污泥法综合计算模型^[6]。该报告长达 31 页, 包含了 63 个反应方程式和 40 个实验验证数据图表, 其中的 6 个方程式都包含相同的速率项 $b'_h \cdot x_a$ 。这些方程采用转化速率项建立了 COD 守恒、化学计量平衡与动力学的关系。报告已经基本上涵盖了污水生物处理中所有能够建立联系的相关过程。但是这样复杂的模型在应用上遇到了困难, 就是阅读和完全理解这份具有重要意义的模型研究报告的每个细节都是很艰辛的工作。

IAWPRC 于 1983 年成立了课题组 (Task group), 提出为污水生物处理系统的设计与运行开发并研究实用的模型。课题组的任务首先是对当时已有的模型进行评估, 第二步是

从中找到最简明的模型形式，能够真实地预测单纯的活性污泥系统的性能，包括碳氧化、硝化和反硝化过程。

1.3 活性污泥模型（ASM）

1986年课题组提出了第一份研究成果报告——活性污泥1号模型（ASM1），ASM1模型为更深入的活性污泥模型研究奠定了基础^[7]。

ASM1模型采用的数学结构绝大部分来自开普敦大学研究组（IAWPRC）的工作成果，而IAWPRC课题组主要工作的卓越之处不在于具体过程模型的数学结构，而在于提供了表达整体模型的精密矩阵结构，从而使模型的表达更加简单清晰，为研究人员在科学交流和会议中讨论这些复杂模型提供了一个共同的基础。以往需要40多页，艰涩难以读懂的报告，现在只用一个表格即可表达^[8]。

ASM1，ASM2等模型的编号也是IAWPRC课题组的一个重要工作贡献。ASM1模型在今天仍是活性污泥模型的主要工作框架，其他的模型都是在ASM1模型基础上扩增开发出来的。

ASM1模型开发考虑了环境工程中常见的硝化及反硝化反应。由于模型的软件程序设计十分精密，当时只有某些高级研究组能够进行动力学模拟，从而确定生物反应动力学参数和活性污泥法的工艺条件。

ASM1模型首先应用动力学模拟并计算出模型中的约42个参数（如表1.1所示）。同时课题组开始研究生物除磷过程及其在模型中的表达。1995年，课题组发表了ASM2模型，这是第一个包涵生物和化学除磷过程的计算模型。在此基础上课题组于1999年提出了ASM2d模型。由于涵盖了众多的生物反应过程，ASM2模型十分复杂，要用该模型描述一个活性污泥生物除磷工艺的状态，需要确定的131个独立的参数。各国的研究人员对ASM2d模型的应用进行了大量的研究，根据Brun^[9]的分析结论，ASM2d模型的参数可识别性是可以实现的。

ASM1-ASM3模型计算需要的独立参数量

表1.1

参数类型	参数数量			
	ASM1	ASM2	ASM2d	ASM3
组分参数	2	13	13	8
化学计量学参数	3	9	9	7
动力学参数	14	43	45	21
温度系数	14	43	45	21
进水浓度	>9	19	19	13
参数总个数	>42	>127	>131	>70

至今活性污泥法的动力学模拟已经基本成熟，有多种应用软件可以采用，对于不同的应用目的及连续流和间歇流都分别有相应的参数设置和适用模型，甚至还开发了相应的控制策略。一个新的IWA课题组已经组建，目的是完成活性污泥模拟计算工具质量评价的协议草案，这意味着这项技术将在更广泛的范围内得到应用。

ASM系列模型的缺点是收集模型所有有效的校准数据的工作量巨大，软件数据包的

智能应用需要有高水平的专家经验，开发获取这种专家经验往往比购买软件的使用权还要昂贵得多，只有部分大型专业公司才能定期获得这种专家经验。这些缺点使得 ASM 系列模型的应用受到了限制。

ASM 系列模型应用的一个重要发展方向是运用模型来计算模拟真实污水厂的运行，能够得到甚至包括暴雨等突发状况的污水处理厂运行控制决策，因此可以更为合理地调配能源和资金的使用^[10]。随着原有模型经过多次在线信息升级，其计算结果会逐步变得更加可靠。

1.4 污水生物处理的其他数学模型

ASM 系列模型反映的是好氧条件下悬浮生长的生物处理的主要过程。在污水生物处理中还有好氧条件下固定生长的生物处理过程和厌氧生物处理过程。

1.4.1 固定生长好氧生物处理过程的数学模型

污水的好氧生物处理技术中有一大类是固定生长的好氧生物处理技术。微生物生长在生物载体上形成生物膜，当污水流经生物膜时污水中的污染物被微生物所降解。从好氧生物处理的原理来分析，对于生物膜某处的一个微元，可以认为是处于一个相对稳定和均匀的环境条件下，也就是说好氧生物处理的反应动力学可以适用于这一微元。但是从整体看生物膜是很不均匀的，从液体到生物膜的内部，不仅基质、氧和营养元素的分布不同，而且连微生物的种群分布也是不同的。因此，研究固定生长好氧生物处理过程的数学模型主要是研究微生物在载体表面聚集生长的过程和有机物从生物膜表面向内部的传质过程。由于生物膜内部的复杂性，固定生长好氧生物处理过程的数学模型远没有悬浮生长好氧生物处理过程的数学模型健全，在模型的应用上也很不成熟。

长期的研究表明，生物膜的形成过程可以分为：微生物向载体表面的运移、可逆附着与不可逆附着过程。微生物从液相向载体表面的运移主要是通过以下两种方式完成：①主动运移是指细菌借助于水流的动力和各种扩散力向载体表面迁移；②被动运移是由布朗运动、细菌自身运动、重力或沉降等作用完成的。1980 年 Daniels 等研究人员提出，在尺度上细菌可按胶体粒子处理，细菌自身的布朗运动增加了细菌与载体表面的接触机会^[11]。由浓度扩散而形成的悬浮相与载体表面间的浓度梯度对细菌从液相向载体表面移动起着不可忽视的直接作用。

微生物可逆附着的概念是 Marshall 等人在 1971 年提出的^[12]。微生物被运送到载体表面后，二者间将直接发生接触，通过各种物理或化学力作用使微生物附着固定于载体表面。在细菌与载体表面接触的最初阶段，微生物与载体间首先形成的是可逆附着。微生物在载体表面的可逆附着实际上反映的是一个附着与脱附的双向动态过程。在这一阶段，可以认为微生物增长不起主要作用。微生物可逆附着的概念已被广泛接受，并被应用于微生物在载体表面附着动力学的研究中。

不可逆附着过程是可逆过程的延续。这一过程通常是由于微生物分泌多聚糖等黏性代谢物质造成的，因此附着的微生物不易被水冲刷掉，不可逆附着是形成生物膜群落的基础。可逆与不可逆附着的区别就在于是否有生物聚合物参与微生物和载体表面间的相互作