

# 第一篇

## 活性污泥 1号模型



## 1.1 总 论

不论采取何种方法，模拟是废水处理系统设计不可或缺的一个步骤。最基础的设计模拟也许仅仅是一个概念，通过这个概念，工程师将一个复杂的系统简化成一种景象来表示系统如何工作，再由这个景象来决定所采用的设计方法。然而，工程师经常认识到，概念模型不能为设计提供足够的信息，于是他们构建物理模型，比如小试反应器或中试处理厂，这样可以测试不同的设计方法。如有足够的时间，这样可以得到完全满意的结果。然而，工程师们发现，时间和资金的限制让他们不能对各种可行的方案进行试验。这样，他们经常转而使用数学模型来进一步确定可行的设计。他们也许通过统计方法模拟物理模型实验获得的结果来创建经验模型，或者当他们对概念的理解足够详细时，会试图以模型为基础，列出机理方程，试图解释发生在系统内部的各主要活动。这些机理模型的功能更强大，因为它可以外推出在物理模型实验条件之外的环境下的设计。通过这个方法，可以迅速估计许多可行的方案，由此，可以选择一个最可靠的方案进行物理模拟实验。

对废水生物处理系统的模拟已多次经历以上各步骤。首先，是仅仅对有机物质的去除；然后，对硝化过程的模拟；第三，对生物反硝化除氮的模拟。废水处理实践已经发展到可以将这些过程在单个污泥系统中完成。由于系统内的相互联系，描述他们的数学模型相当复杂，增加了其应用的难度。然而，只有在对复杂系统进行描述的数学模型中，工程师们才能获得最大的益处。

认识到数学模型带来的好处，同时考虑到使用得不多，国际水污染研究和控制协会 (IAWPRC) 于 1982 年成立了一个课题组，其任务是促进模型的发展，推动模型的利用，将模型应用于污水生物处理系统的设计和运行。其首要目标是回顾业已存在的模型，其次是开发一个公认的最简化的模型，能对同时进行碳氧化、硝化和反硝化的单个活性污泥系统的运行作出预测。模型的报告中，清楚地列出包含的反应过程及模型使用的程序。这份报告便是课题组努力的结果。课题组参考了许多研究论文，但由于篇幅限制无法一一列出。因此，课题组只选择列出了那些早先作过翔实调查工作的研究论文，或提出重要新概念的论文。对这些选择，只提出了基本依据与大概内容而没有详细的说明，读者可以通过参考文献来了解其详细内容。课题组讨论的目的也是引导其成员对一些现有的模型进行改进，以提高它们的预测能力。

## 1.2 模型提出的方法

对于结合了如碳氧化、硝化和反硝化等现象的活性污泥系统反应的模拟，必须解释众多组分之间的大量反应，使其数学上易操作、模拟准确，能代表系统内的基本过程。在本书中，“过程”被用作形容发生在一个或多个系统中组分的活动，而且，模型应该量化每个过程的动力学（速率对浓度的依赖）和化学计量学（反应中一个组分与另一个组分的关系）参数。在开发模型的过程中，首要的任务是定义其主要过程和为每个过程选择合适的动力学和计量学表达式。这也是本报告要重点考虑的。

### 1.2.1 格式和符号

与描述复杂系统模型的论文相关的一个常见问题是：读者很难跟随作者思路的发展，特别是难以理解所有系统组分之间的反应。在 Peterson(1965) 工作的基础上，课题组推导出矩阵格式来描述模型。它能表达尽可能多的信息，是最好的解决问题的办法。并且，他们认为，应该使用先前课题组 (Grau et al., 1982) 提出的符号，并且在报告中将有一个说明来介绍矩阵格式和符号。

首先考虑异养微生物在好氧环境下利用溶解的底物以获得碳源和能源并生长。这种情况的简化概念是，有两个基本过程：生物量通过细胞生长而增加和因衰减而引起的下降。同时，也发生其他活动，比如说氧的利用和底物去除。但这些活动并不是最基本的，因为它们都是生物数量增长和减少而导致的结果，并且通过系统的化学计量与它们相关联。这种情形最简单的模型应该考虑 3 种组分的浓度：生物数量、底物和溶解氧。表 1-1 描述了在两个基本过程中结合了 3 种组分归宿的矩阵。

建立矩阵的第一个步骤是确定模型中相关的组分，这当中包括生物数量、底物和溶解氧。表 1-1 的表头列出了它们的符号，表底列出了它们的名称和单位。为了统一符号，使用国际水污染研究和控制协会 (IAWPRC) 的命名法 (Grau et al., 1982) 以  $X$  表示不可溶性组分， $S$  表示可溶性组分，下标  $B, S, O$  分别表示微生物、底物、氧；指数  $i$  分配给每个参数，这样，在这个简单模型中  $i$  在 1~3 的范围内代表 3 个组分。

第二个步骤是定义发生在系统中的生物过程，即对表中所列组分有影响的转化和变化。这个例子中只有两个过程：微生物的好氧生长和衰减损失。这些过程列于矩阵最左列。指数  $j$  分配给每个过程，在这里  $j$  为 1 或 2。

在矩阵对应行的最右列，列出了每个过程的动力学表达式或速率方程式。过程速率以  $\rho_j$  表示， $j$  对应于最左列相应数字的过程。如果我们用简单的 Monod-Herbert 模型 (1958) 来模拟这种情况，其速率方程式见表 1-1。Monod 方程和  $\rho_1$  说明生物的增长与生物浓度呈一级反应关系，与底物质量浓度呈混合级反应关系。Herbert 表达式和  $\rho_2$  说明生物的衰减

与生物质量浓度呈一级反应关系。表 1-1 的右下角定义了速率方程中的动力学参数。（译者注：表中 M 表示质量单位，L 表示长度单位，T 表示时间单位。后皆如此。）

表 1-1 异养微生物好氧增长的过程动力学和化学计量学

组分 i \ 反应过程 j		连续性			过程反应速率 $\rho_j$ [M/(L <sup>3</sup> ·T)]
		i=1 $X_B$	i=2 $S_S$	i=3 $S_O$	
1 生长		1	$-\frac{1}{Y}$	$-\frac{1-Y}{Y}$	$\frac{\hat{\mu} S_S}{K_S + S_S} X_B$
2 衰减		-1		-1	$b X_B$
观察到的转换速率 [M/(L <sup>3</sup> ·T)]		$r_i = \sum r_{ij} = \sum v_{ij} \rho_j$			动力学系数： $\mu$ ——最大比增长速率； $K_S$ ——半速度常数； $b$ ——比衰减速率。
化学计量系数： Y——真实增长产率		生物数量 [M(COD)/L <sup>3</sup> ]	底物 [M(COD)/L <sup>3</sup> ]	氧(-COD) [M(-COD)/L <sup>3</sup> ]	

矩阵内的化学计量系数  $v_{ij}$ ，描述了单个过程中各组分之间的数量关系。例如，每消耗可溶性底物“-1/Y”微生物增长“+1”，则代谢过程中氧被利用“- (1-Y)/Y”。系数  $v_{ij}$  通过取一致的单位得到大大的简化。在这种情况下，全部有机组分以化学需氧量 (COD) 当量来表示；同样，氧以负需量表示。矩阵中约定的符号为：负号表示消耗，正号表示产生。表 1-1 的左下角列出了所定义的化学计量系数。

## 1.2.2 质量守恒的使用

在一个系统内，单个组分的浓度可能受到各种不同过程的影响。矩阵描述的一个重要优点是可以快速简单地认识各组分的变化过程，列出质量平衡方程。顺着描述某一组分的这一列向下移动，可以看到组分的变化过程。这也是为什么标记质量平衡的箭头放在左边的原因。在任何给定的系统边界内，质量平衡基本关系式是：

$$\text{进入量} - \text{排出量} + \text{反应量} = \text{积累量} \quad (1-1)$$

进入项和排出项是一个输送项，由被模拟的系统的物理特性决定。系统反应项  $r_i$  通过计算化学计量系数  $v_{ij}$  和组分  $i$  的过程速率式  $\rho_j$  乘积之和得到：

$$r_i = \sum_j v_{ij} \rho_j \quad (1-2)$$

例如，在系统内某一点微生物  $X_B$  的反应速率  $r$  为：

$$r_{X_B} = \frac{\hat{\mu} S_S}{K_S + S_S} X_B - b X_B \quad (1-3)$$

对溶解性底物  $S_S$  而言,  $r$  应为:

$$r_{S_S} = -\frac{1}{Y} \cdot \frac{\hat{\mu} S_S}{K_S + S_S} X_B \quad (1-4)$$

对溶解氧  $S_O$ ,  $r$  应为:

$$r_{S_O} = -\left(\frac{1-Y}{Y}\right) \frac{\hat{\mu} S_S}{K_S + S_S} X_B - b X_B \quad (1-5)$$

为了在给定的系统边界内(例如一个完全混合系统)为每个组分建立物料平衡方程,应为特定的系统的转化速率结合适当的回流项。而这里没有表示这些项,因为这个例子是为了描述矩阵如何被用来定义基本反应,而不考虑系统的构造。然而,需要强调的是,特定物理系统的模拟需要定义结合了回流项的系统边界。

### 1.2.3 连续性检查

矩阵的另一个优点是可通过在矩阵内横向移动来检查其连续性,因为使用的单位一致,化学计量系数的总和必须为零。这可以通过考虑衰减过程来描述。前面提到氧是负 COD,所以它的系数必须乘以  $-1$ ,所有因衰减而从微生物中损失的 COD 必须以氧的利用量来平衡。相似地,对于生长过程,因细胞生长而从溶解性底物中损失的 COD 减去转化为新细胞的量,必须等于细胞合成所利用的氧量。

## 1.3 结合碳氧化、硝化和反硝化的模型

由于大多数废水生物处理系统的设计具有较长的固体停留时间和低生长率的特点,一般来说,不同系统构造得到的出水中溶解性可生物降解的底物浓度差别较小,相反,活性污泥浓度和电子受体需求(无论是氧或是硝酸盐)却存在较大差别。此外,好的设计要求提供足够的电子受体来满足其因时间和空间产生的需求变化,二沉池和污泥回流系统应该能控制固体浓度。这表明,考虑描述底物去除的模型时,主要是考虑它对活性污泥浓度和电子受体需求的影响,而不是考虑它预测出水底物浓度的能力。因此,课题组的首要考虑是在选择过程化学计量时预测活性污泥浓度,在建立过程速率方程时估计电子受体需求量。

在数学模型的开发过程中,要折中相冲突的需求。一方面,一个模型必须包含发生在系统中的主要活动,这和已经建立起来的对这种系统的认识一致。另一方面,模型的方程要可解。解方程的难度随反应过程数目的上升而增大,并且,过程速率表达式越是接近实际,它们就越是复杂。一个模型应该只包括那些对实际方案来说最本质的过程,必须选择合适的

速率表达式，而不至于在简化过程中引起应用结果产生大的偏差。多数情况下，要求选择较简化的速率表达式。虽然这样的速率表达式不能完全描述系统内发生的活动，但只要他们较好地模拟了各活动的结果，应用起来还是能得到满意的结果。在选择此处表述的模型所包含的过程和速率表达式的过程中，课题组着重于主要反应，并选择与他们一致的最简化速率表达式。

在此文中需要注意的是，课题组引进了开关函数的概念，以便当环境条件变化时能打开或关闭过程速率等式。这对依赖于存在的电子受体类型的过程来说是非常必要的。例如，参与硝化反应的细菌只能在好氧条件下生长，当溶解氧降为零时，无论它们的产能底物浓度为多少，它们的生长速率也降至零。这可以通过在过程速率表达式中增加一个溶解氧开关函数来模拟。课题组引入的溶解氧开关函数  $s$  是：

$$s = \frac{S_0}{K_0 + S_0} \quad (1-6)$$

其中  $S_0$  是溶解氧的质量浓度。

为  $K_0$  选择一个小的值，意味着当溶解氧 (DO) 质量浓度适中的时候，开关函数接近 1；而当溶解氧 (DO) 质量浓度达到 0 时，开关函数的值降为 0。开关函数是连续函数，这一点有助于消除由于速率方程开或关的不连续性所产生的数值不稳定性。此不稳定性为应用包含过程速率方程进行模拟时，不连续地开和关。类似地，只有在无溶解氧的条件下才发生的过程，可以用下述开关函数的形式来打开：

$$s' = \frac{K_0}{K_0 + S_0} \quad (1-7)$$

前面提到，课题组在开发模型的时候，主要考虑的是对活性污泥浓度，以及对电子受体的需求的预测，而不是容器中的可溶组分。然而，即使函数 (1-6) 和 (1-7) 的选择是为了在数值计算上的方便性而不是与任何基本速率规律保持一致，但如  $K_0$  这样的开关常数似乎会影响到这些预测。因此，在选择开关常数值的时候要注意保证模型的预测不会偏失。

### 1.3.1 模型概念

对废水中有机物浓度的测试方法不一致是引起混淆和抑制活性污泥模型发展的一个因素。目前，有三种广泛接受和使用的计量方法：生化需氧量 (BOD)、总有机碳 (TOC) 和化学需氧量 (COD)。其中，我们认为 COD 毫无疑问是最好的计量方法，因为只有它提供了有机底物、微生物和利用的氧中电子等价物之间的关联 (Gaudy and Gaudy, 1971) 并且用 COD 也能建立物料平衡。因此，在以下模型中，包括微生物在内的所有有机物质量浓度，均以 COD 为单位。

废水中有机物质可以划分为很多种 (Mckinney and Ooten, 1969; Dold et al., 1980) 最重要的划分是以其生物降解性为基础。

不可生物降解物质是生物惰性的，在经过活性污泥系统后没有形态上的变化。依据它

们的物质形态，可以分为两个部分：可溶的和颗粒的。惰性溶解有机物 ( $S_1$ ) 以进入系统相同的浓度排出系统。惰性悬浮有机物 ( $X_1$ ) 被活性污泥捕捉，并随剩余污泥排出系统。因为剩余污泥排放流量小于系统的进水流速，所以物料平衡表明系统中  $X_1$  浓度高于进水中的浓度。

可生物降解物质可以分为两部分：易生物降解物质和慢速生物降解物质。为了便于模拟，易生物降解物质  $S_s$  被当作可溶物来处理而慢速生物降解物质 ( $X_s$ ) 被当作颗粒物处理。然而，要认识到，一些慢速生物降解物质实际上是溶解的。易生物降解物质包含较简单的分子，它们可以直接被异养微生物吸收并用于新微生物的生长。这些分子的一部分能量 (COD 被结合到了微生物中，同时，一部分能量被消耗来提供细胞合成所需的能量。这部分的电子转移到外部的电子受体 (氧或硝酸盐)。相反，包含了较复杂分子的慢速降解物质在被利用之前，必须在胞外反应并转化为易生物降解物质。假设慢速生物降解物转化为易生物降解形式的过程 (水解) 中没有能量的利用，也就没有与它们相关的电子受体的利用。

慢速生物降解物质的水解速率常常比菌种对易生物降解底物的利用速率小得多。因此，当底物里只存在  $X_s$  时，水解成了生物生长速率的控制因素。并且，在缺氧条件下 (只有硝酸盐作为最终电子受体)，水解速率低于好氧条件，而且在厌氧条件 (既没有硝酸盐也没有氧) 下水解完全停止 (Van Haandel et al., 1981)。将底物划分为两种形式，能使模型自身体现电子受体的差别，从而表达氧和硝酸盐利用的时空差异性。

异养微生物的繁殖是通过在好氧或缺氧条件下利用易生物降解物质生长，而假定在厌氧条件下停止生长。微生物因为衰减而损失，这结合了包括内源代谢、死亡、捕捉和分解等大量机理。假定衰减是生物体转化为慢速生物降解物和颗粒物的结果，其产物  $X_p$  对进一步的生物的作用呈惰性 (Dold et al., 1980)，其原因将在后文中加以解释。后者在概念上与 Mckinney 和 Ooten (1969) 的内源物质相似，起着降低生物反应器中悬浮物生存时间的作用。假定衰减引起生物量的损失速率与存在的电子受体的本性及其浓度无关，但如前面所提到的，由衰减生成的慢速生物降解物质转化成可用于新细胞生长的物质的过程受电子受体的本性及其浓度影响。

废水中的含氮物质和含碳物质一样，可划分为两类：不可生物降解和可生物降解。每一类还要进一步细分。至于不可生物降解的部分，这个特定部分是和不可生物降解颗粒状 COD 相联系的。可溶部分少到可忽略不计而没有加入到此模型中。可生物降解含氮物质的组分划分为氨 (自由化合物和氨盐)  $S_{NH}$ 、可溶性有机氮  $S_{ND}$  和颗粒状有机氮  $X_{ND}$ 。在慢速生物降解有机物水解的同时，颗粒有机氮物质水解为溶解性有机氮物质。溶解性有机氮在异养菌的作用下转化为氨氮。氨氮可作为异养菌合成的氮源及提供自养硝化菌生长的能源。作为简化，自养菌将氨氮转化为硝酸盐氮的过程是被看作一个需氧的单一过程。形成的硝酸盐作为缺氧条件下异养菌的最终电子受体，生成氮气。自养菌或异养菌的细胞衰减均能导致颗粒状有机氮的释放，这部分被释放的有机氮能重新回到系统的循环中。

异养菌和自养菌都存在于废水中，因此，它们对系统的运行有重大的影响。然而，由于不清楚其发生的普遍性和激烈性，因此，课题组在开发模型时没有将其考虑进去。然而，要注意到，如要将其包含进去，唯一要求的改变就是在适当的物料平衡等式中添加一个进入

项。

### 1.3.2 数学模型的组分

表 1-2 的顶部和底部列出了模型包含的组分，溶解惰性有机物  $S_I$  和颗粒惰性有机物  $X_I$  没有包含在任何转化过程中，因此，它们所在的列 ( $i$  分别为 1, 3) 不含有任何化学计量系数。然而，它们包含在模型中，因为它们对过程的运行起着重要的作用。可溶性惰性有机物是进水 COD 的组成部分。颗粒状惰性有机物在活性污泥系统中成为挥发性悬浮固体的一部分。如前所述，包括颗粒性的所有有机成分以 COD 的单位来表示 (表 1-2)。

顺着  $i=2$  那一列下移，能看到易生物降解物质  $S_S$  在好氧或缺氧条件下由异养菌的生长去除，由水解生物絮体诱捕的颗粒状有机物生成。 $i=4$  这一列，显示了慢速生物降解物质  $X_S$  由水解去除，通过异养菌和自养菌的衰减形成。也就是说，衰减的结果是细胞物质转化为慢速生物降解物质。这将在后文中讨论。

$i=5$  和  $i=6$  的两列描述了系统中的生物， $X_{B,H}$  代表异养菌， $X_{B,A}$  代表自养菌。沿  $i=5$  列下移，可以看到异养微生物可以在好氧或缺氧条件下生长形成。衰减引起破坏。如  $i=6$  列所示，自养菌只能在好氧条件下生长，也是由衰减破坏。

$i=7$  列包含了由生物衰减生成的颗粒产物， $X_P$  (Kountz and Forney, 1959; McKinney and Ooten, 1969)。考虑到过程的动力学和化学计量，这部分颗粒产物是由异养菌和自养菌的衰减形成，但不被破坏。实际上，它们也许并不完全对生物处理呈惰性 (Obayashi and Gaudy, 1973)。然而，由于降解速率太低，实际上在活性污泥系统的泥龄 (SRT) 内，它可看作是惰性的。在模型中加入这个组分，是用来解释这样一种现象，即在活性污泥系统中并不是所有的微生物都是活性的 (Weddle and Jenkins, 1971)。

活性污泥系统中，挥发固体的质量浓度 (以 COD 单位计) 是以下 5 种颗粒组分的总和： $X_S, X_{B,H}, X_{B,A}, X_P$  和  $X_I$ 。可用适合的转化因子将 COD 单位转化为挥发性悬浮固体单位。

$i=8$  列包含反应器中 DO 浓度  $S_O$ 。矩阵中的过程只是反映了溶液中氧的去除，而没有包括氧的充入；也就是说，矩阵只包括生物反应过程。为了模拟 DO 浓度的变化，在列出氧的物料平衡等式时，合适的氧转输过程速率方程应包括输送项。即使没有包括这些项， $i=8$  列中的信息也能计算出满足生物代谢的需氧量。从这列往下移，显示了氧的利用只和异养菌及好氧菌的好氧生长有关，和微生物的衰减无关。这和传统的途径 (Grady and Lim, 1980) 不同。假定衰减导致慢速生物降解物质的释放，这部分有机物经过循环转化成可溶性底物，从而被更多细胞的生长所利用。因此，和衰减直接相关的需氧量计算，被替代为由依赖释放的底物生长的新微生物的需氧量 (Dold et al., 1980)。异养菌的生长系数小于 1，导致与衰减相关的生物量净损失，因此，依靠释放底物生成的微生物量应该比微生物损失量少。自养菌生长的化学计量系数 4.75 项是与氨态氮转化成硝态氮相关的理论需氧量。

模型中包含的另一类电子受体是硝酸盐氮  $S_{NO}$  如  $i=9$  列所示，它是由自养菌的好氧生长产生，在异养菌的缺氧生长中去除。虽然亚硝酸盐是硝化反应的一个中间产物，为了简化，在模型中假定硝酸盐是氮的唯一氧化形式。在异养菌的缺氧生长化学计量系数中，因子

表 1-2

碳氧化、硝化及反硝化的过程动力学与化学计量

组分:	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	工艺过程速率 $r_i$ [M/(L <sup>3</sup> ·T)]
工艺过程:	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	工艺过程速率 $r_i$ [M/(L <sup>3</sup> ·T)]
1 异养菌的好氧生长	S <sub>I</sub>	S <sub>S</sub>	X <sub>I</sub>	X <sub>S</sub>	X <sub>B,H</sub>	X <sub>B,A</sub>	X <sub>P</sub>	S <sub>O</sub>	S <sub>NO</sub>	S <sub>NH</sub>	S <sub>ND</sub>	K <sub>ND</sub>	S <sub>ALK</sub>	$\hat{\mu}_H \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left( \frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) X_{B,H}$
2 异养菌的缺氧生长		$\frac{1}{Y_H}$			1				$\frac{1 - Y_H}{2.867 Y_H}$	$-i_{XB}$			$-\frac{i_{XB}}{14}$	$\hat{\mu}_H \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left( \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \times \left( \frac{S_{ND}}{K_{NO} + S_{NO}} \right)^{\eta_g} X_{B,H}$
3 自养菌的好氧生长						1		$\frac{4.57 - Y_A}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$-\frac{i_{XB}}{Y_A}$			$-\frac{i_{XB}}{14} \frac{1}{Y_A}$	$\hat{\mu}_A \left( \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left( \frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) X_{B,A}$
4 异养菌的衰减				$1 - f_p$	-1					$-\frac{i_{XB}}{Y_A}$				$b_H X_{B,H}$
5 自养菌的衰减				$1 - f_p$										$b_A X_{B,A}$
6 可溶性有机氮的氨化										1	-1		$\frac{1}{14}$	$k_2 S_{ND} X_{B,H}$
7 网捕性有机物的水解		1			-1									$k_3 \frac{X_S / X_{B,H}}{K_X + (X_S / X_{B,H})^2} \left[ \left( \frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) + \eta_g \left( \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left( \frac{S_{ND}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] X_{B,H}$
8 网捕性有机氮的水解											1	-1		$r_i = \sum_j v_j r_j$
观察到的转换速率 (M/L <sup>3</sup> ·T)														$r_i \left( \frac{X_{ND}}{X_S} \right)$
化学计量参数:	<p>动力学参数:</p> <p><math>\mu_H, K_S, K_{O,H}, K_{NO}, b_H</math>——异养生长与衰减;</p> <p><math>\mu_A, K_{NH}, K_{O,A}, b_A</math>——自养生长与衰减;</p> <p><math>\eta_g</math>——异养菌缺氧生长的校正因素;</p> <p><math>k_2</math>——氨化;</p> <p><math>k_3</math>——水解;</p> <p><math>k_1, K_X</math>——水解;</p> <p><math>\eta_g</math>——N在生物量产物 COD 中的比例</p>													
Y <sub>H</sub> ——异养菌产率;	可溶性惰性有机物质 [M(COD)/L <sup>3</sup> ]													
Y <sub>A</sub> ——自养菌产率;	易生物降解基质 [M(COD)/L <sup>3</sup> ]													
f <sub>p</sub> ——颗粒性衰减产物的比例;	颗粒性惰性有机物质 [M(COD)/L <sup>3</sup> ]													
i <sub>XB</sub> ——N在生物量 COD 中的比例	慢速可生物降解基质 [M(COD)/L <sup>3</sup> ]													
例:	异养性活性生物量 [M(COD)/L <sup>3</sup> ]													
	自养性活性生物量 [M(COD)/L <sup>3</sup> ]													
	由生物量衰减而产生的颗粒性产物 [M(COD)/L <sup>3</sup> ]													
	氧(-COD) [M(COD)/L <sup>3</sup> ]													
	氮(硝化与反硝化) [M(N)/L <sup>3</sup> ]													
	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> + NH <sub>3</sub> 氮 [M(N)/L <sup>3</sup> ]													
	溶解性可生物降解有机氮 [M(N)/L <sup>3</sup> ]													
	颗粒性可生物降解有机氮 [M(N)/L <sup>3</sup> ]													
	氮——摩尔单位													

2.86 是硝态氮转化为氮气  $N_2$  的氧当量, 包含它是为了维持单位的统一。虽然模型没有清楚地表达, 但硝态氮也是由微生物的衰减去除。这是由衰减过程中有机物质的循环完成的, 就像氧的去除一样, 使其可用于异养菌的缺氧生长。

$i=10$  列包含溶解性氨氮  $S_{NH}$ , 假定其是离子(铵)和非离子(氨)形态的总和。然而在 pH 值呈中性的条件下, 非离子形态的氨氮很少, 所以可以简化模型中的氨氧化, 以总铵氮质量浓度表示。检查  $i=10$  列中化学计量系数可以看出, 氨氮是由溶解的可生物降解的有机氮的氨化生成, 通过微生物的生长去除。氨氮的主要转化是作为自氧菌好氧生长“ $-1/Y_A$ ”的能源, 然而, 在细胞合成过程中也结合了氮, 在异养菌和自养菌的生长中包含了氮的利用项“ $-i_{XB}$ ”。

$i=11$  列包含了溶解的有机氮  $S_{ND}$ , 它是由颗粒状有机氮水解生成, 通过氨化作用转化为氨态氮。 $i=12$  列给出了颗粒态可生物降解的有机氮  $X_{ND}$ 。它是由异养菌和自养菌的衰减量  $i_{XB}$  减去惰性颗粒产物量  $f_p i_{XP}$ , 它的损耗是由于氨化作用引起。尽管这部分有机氮呈颗粒状, 但它不加到其他颗粒态物质中以增加挥发性固体质量浓度。这是因为它是那些物质的子集并已包含在它们的质量浓度中。

系统中存在着另三种形态的有机氮: 与微生物有关的  $X_{NB}$ 、与颗粒状产物有关的  $X_{NP}$  和与惰性颗粒有机物有关的  $X_{NI}$ 。这几种组分各自质量浓度的计算可简化为  $X_B i_{XB}$ ,  $X_P i_{XP}$ ,  $X_I i_{XP}$ 。目前, 矩阵中并不需要这些组分, 因为, 没有包含反硝化过程中产生的氮气, 因此, 无法对氮的物料平衡进行检查, 所以没有包含他们的相关列。然而, 模型可以很方便扩展, 包括氮气产物, 用以估计沉降时的问题。如果这样做的话, 矩阵中必须包括一个含这些项的列。

上面所讨论的 12 个组分是充分模拟一个碳氧化、硝化反硝化的活性污泥系统所需的最低要求。因此, 一个完整的模型必须包括 12 个物料平衡等式。当然, 如果一个系统的设计只为达到一个或两个目的, 那么可以消除适当的组分, 模拟所需的物料平衡等式也可减少。

$i=13$  列描述了总碱度  $S_{ALK}$ 。模型并不一定要结合碱度, 但包括进来也是有道理的, 因为它能提供预测 pH 的不规则变化的信息。所有包括有质子接受能力物种增减或质子增减的反应都能引起碱度的变化。模型不考虑前者的情况, 因为它们在活性污泥系统中数量很少。模型中包括了后者的集中情形(表 1-2)。一个是发生在异养菌和好养菌合成过程氨氮向氨基酸的转化及氨化的逆过程中 (Scarce et al., 1980), 另一个是发生在硝化反应过程中。当铵( $NH_4^+$ )氧化为自养菌提供能量释放 8 个电子和 10 个质子, 氧接受 8 个电子和 8 个质子, 这样净释放 2 个质子, 因此而降低了碱度 (Downing et al., 1964)。最后一项在反硝化过程中发生。因为当硝酸盐 ( $NO_3^-$ ) 作为电子受体时, 将有质子的净吸收, 导致碱度的增加。在所有有质子增减的反应中, 硝化反应对碱度的影响最大, 能导致碱度过量的降低。从碳酸盐系统的化学平衡得知, 如果总碱度低到小于  $50g/m^3$  ( $CaCO_3$ ), 即总碱度小于  $1mol/m^3$ , pH 值将变得不稳定, 且将降到 6 以下 (WRC, 1984)。低 pH 值降低硝化速率, 并且导致如腐蚀之类的其他问题。在碱度物料平衡等式中加入适当的进入项, 能帮助使用者估计所考虑的构造在反硝化过程中是否能恢复足够的碱度来维持硝化过程中的 pH 值, 而不用考虑质子的释放。如果不行, 则要投加合适的化学品 (如石灰) 来维持合适的 pH 值。

### 1.3.3 模型中的反应过程

表 1-2 的最左列列出了模型中所包含的基本过程，它们的速率表达式在最右列中列出。这里基本上要考虑 4 个过程：微生物的生长、微生物的衰减、有机氮的氨化、被生物絮体捕获的颗粒有机物的水解。为了便于模拟，易生物降解物质被看作是异养菌生长的唯一底物。慢速生物降解物质被认为是生物絮体瞬间将它从悬浮态下捕获而被去除，然后发生的反应会将它转化为易生物降解物质。在模型中，这些反应被简称为水解，虽然实际上它们比水解复杂得多。包含它们的目的是为耗氧过程引进了延时，因为耗氧只和以易降解物质为底物的微生物生长有关。假设衰减使活性生物转变为惰性颗粒产物和慢速生物降解物质，而慢速生物降解物再进入水解、生长等循环，这就使得对单一污泥系统中不同条件下的衰减有更简单明白的表达。对应于不同的参数值，它有几个不同的重要分支。这将在后面讨论。

首先考虑过程 1——异养菌的好氧生长。查看表 1-2 的第 1 行，可以看到，生长是以溶解性物质为底物并导致异养菌的产生，同时有氧的利用。因为底物和微生物的单位都是 COD，氧看成是 COD 负值。连续性检查得出，需氧量等于净 COD 去除量（去除的溶解底物减去微生物的生成量），氨氮将从溶液中去掉并结合到细胞中。假定异养菌好氧生长动力学受双重营养物限制的影响，易生物降解底物和溶解氧 DO 是速率决定因素；各组分的影响以饱和函数来模拟。我们知道，饱和函数并不是动态模拟底物去除的理想形式，但在模拟废水处理系统中的变化时误差比较小。如前所述，氧项的主要目的是作为一个开关函数，在低溶解氧 DO 质量浓度时停止好氧生长，这样饱和系数  $K_{O,H}$  的值很小；易生物降解物质的去除与微生物的生长成正比。模型没有描述溶解性底物的胞内贮存，因为这种现象只限于单糖和醋酸盐等少数底物。当然，底物的去除并不一定与微生物的生长相联系，在模型中可通过慢速生物降解底物的快速网捕来解释这一过程。

第 2 行描述了异养菌以硝态氮为最终电子受体的缺氧生长情况。与好氧生长相似，它也是依赖于易生物降解底物，生成异养微生物。硝态氮用作最终电子受体，它的去除量和易生物降解物质去除量与细胞生成量之差成比例。与好氧生长相似，氨氮转化为微生物中的有机氮。缺氧生长的速率表达式和好氧生长的相似。实际上，易生物降解物质对速率的影响是同样的，包括饱和系数  $K_s$ 。然而，我们知道，缺氧条件下底物去除的最大速率比好氧条件下要小。这可能是因为缺氧条件下，异养菌最大比增长速率系数  $\hat{\mu}_H$  值较小，或是由于只有一部分异养菌可以利用硝酸盐作为电子受体。目前还无法区分这两种可能性。因此，从模拟的角度来讲，考虑这一影响可采用的最简单的方法是在速率表达式中加入一个经验系数  $\eta_g$ 。此处  $\eta_g < 1.0$  (Batchelor, 1982)。缺氧生长依赖于硝态氮的质量浓度，这与好氧生长与溶解氧浓度的关系相似。并且，当有氧存在时，缺氧生长会受到抑制，所以要加入  $K_{O,H}/(K_{O,H} + S_O)$  这一项来反映其影响。在好氧生长表达式中，系数  $K_{O,H}$  取同样的值，这样，当好氧生长下降时，缺氧生长上升。与其他相似的项一样，它的主要作用就是一个开关函数。

表 1-2 的第 3 行描述了自养微生物的好氧生长。溶解氨氮作为硝化菌比生长速率的能源，合成自养生物细胞，并转化为硝态氮。另外，小部分氨结合到微生物中。氧的利用量与所氧化的氨氮量成正比。模型中分别用氨氮和氧浓度的饱和函数表示自养菌比生长速率对于它们的依赖关系，后者同时还是一个开关函数。这两个饱和系数  $K_{NH}$  和  $K_{O,A}$  都很小。尽管已知自养菌的好氧生长受废水中 pH 值的影响，但考虑到实际工作中预测反应器中 pH 值的复杂性，这种依赖关系没有包含在速率等式中。比较倾向于如前所述的——使用碱度来检验与 pH 值相关的潜在问题。

随着污泥停留时间增长，异养生物的表现产率将下降。这个现象归结于多种机理，包括细胞的捕获、分解和维持能。尽管可以通过多种方式模拟，但在好氧条件下，最常用的方法是将所有的机理结合成单一的速率表达式。此表达式和活性污泥的浓度呈一级反应关系，如表 1-1 所示的简单模型中，每损失一个单位的微生物 COD，就要利用一个等单位的氧 (Grady and Lim, 1980)。虽然这种方法在模拟碳氧化和硝化反应的活性污泥系统时得到满意的结果，但当考虑除氧之外的电子受体时，会遇到许多问题。例如，许多研究表明缺氧条件下继续有衰减，至少说明有部分微生物可利用硝态氮作为最终电子受体。但是，其他的异养微生物有什么反应？同样，当厌氧条件下，既不存在氧也不存在硝酸盐时，反硝化菌会有什么反应？对于许多微生物，衰减过程似乎是以一种发酵的方式进行，但将不会有 COD 损失，因为细胞内有机物氧化总是同时伴随着有机物的还原。这些都表明，在模型中，如果细胞衰减和电子受体的利用是直接相关的，那么，至少需要 4 个速率表达式：好氧条件下的衰减，缺氧条件下反硝化菌的衰减，缺氧条件下有反硝化能力的异养菌的衰减以及厌氧条件下的衰减。这种方法引出两个问题：首先，这个结合了大量开关函数的等式将会十分复杂，将会增加物料平衡计算式的复杂度；其次，这些等式没有足够的数据库，也无法估计它们的参数。这些都表明需要一个更切实可行的方法。

模型在模拟异养菌的衰减过程时，基本采用了 Dold 等人的死亡再生理论 (1980)。这在表 1-2 的第 4 行中表述出来。可以看到，其速率表达式非常简单，与异养微生物的浓度呈一级反应关系。而速率系数无论在概念上还是在数值上都不同于以往的衰减系数。这种情况下，衰减的作用是将微生物转化为颗粒物和慢速生物降解底物的结合物。在这过程中，没有 COD 损失，也不利用电子受体。而且，无论环境条件如何，衰减总是以恒定的速率进行（即  $b_H$  不是电子受体或其质量浓度的函数）。生成的慢速生物降解物质随后水解——如第 7 行所描述，释放等量的易生物降解 COD。如果是好氧条件，这些底物将伴随着氧的吸收被用作合成新细胞；如果是缺氧状态，将消耗硝态氮进行细胞的生长；如果既没有氧又没有硝态氮可利用，将不会发生任何转化，慢速生物降解底物将产生积累。只有恢复好氧或缺氧条件时，它才被转化利用。

这里使用的衰减系数值将不同于通常的速率常数，因为这些底物将发生循环。在以往的技术中，每消耗一个单位细胞 COD，要利用一个单位氧，减去生成的惰性颗粒产物 COD。在这个模型中，每一单位细胞 COD 的消耗将最终导致一单位 COD 的形成，即易生物降解

底物与生成的惰性颗粒产物 COD 之差。当易生物降解 COD 被用作细胞合成时，因为有一部分能量被合成到细胞中，只需要不到一单位的氧。在这一单位的氧被去除之前，微生物细胞会依次衰减，所以，单位时间内的衰减都利用等量的氧耗，衰减系数必须更大。这是生物细胞转化速率增加的结果。这样，在给定的污泥停留时间内，实际得出一个偏大的微生物生长速率。

需要强调的是，上述采用的模拟方法是考虑到实效性。而使用这样一个模型，可以很好地模拟活性污泥系统中发生的微生物损失、电子受体的消耗等（Dold et al., 1980; Dold and Marais, 1986），但并不表示它反映了实际的机理。显而易见，围绕环境条件对衰减的影响所产生的问题亟需进一步研究。

第 5 行表述的自养菌的衰减，与异养菌的衰减是完全相似的。因为在富集菌种培养中观察到的自养菌的衰减也是类似的捕捉和分解，然后异养菌依赖分解产物生长。虽然这个过程可能引起许多问题，但自养菌的衰减速率常数可能比异养菌的小。

微生物的衰减还影响着系统中的氮循环。微生物转化为慢速生物降解物质继而至易生物降解物质的同时，也伴随着有机氮向氨氮的转化。这些反应与进水的有机氮向氨氮的转化反应一样。表 1-2 的第 6 行表述了可溶有机氮向氨氮转化的反应。这个简单的一级反应等式是经验公式，但和网捕的有机氮水解的速率等式结合使用时能较准确地模拟这种转化（Dold and Marais, 1986）。

表 1-2 的第 7 行和第 8 行显示了适合慢速生物降解有机物和可生物降解有机氮的水解模型。在实际活性污泥系统的模拟中，慢速生物降解有机物的降解是很重要的，它对获得实际的时空分布和电子受体的实时变化非常重要，因此，课题组对这个主题倾注了大量心血。在过去的几年里，对活性污泥模型的主要变化与革新都与描述被捕捉颗粒或贮存的溶解性底物归属的等式的发展有关。在文献中很少有实验研究颗粒有机物的降解动力学和机理。大多数在废水处理领域的研究只是复杂模型系统的一部分，因此，很难单独核实与颗粒物水解有关的那部分。不过，很显然，为使整个系统模型能描述实际的电子受体，需要有确定的特征。其一是速率与存在的异养菌质量浓度呈一级反应关系；另外，当被网捕的底物量相对于微生物量来说已很大时，水解速率将接近于饱和；最后，因为需要酶的合成，速率必然与存在的电子受体的质量浓度有关。由于除了先前所得的有限的衰减的信息外，没有其他可以说明厌氧条件下“水解”的信息，所以，假定在氧和硝酸盐都不存在的情况下水解速率趋向零。查看表 1-2 的第 7 行，我们会发现，这些特征都包括进去了。假设有机氮被均匀地分散在慢速生物降解底物中，那么，被捕捉的有机氮的水解速率与慢速生物降解底物的水解速率成正比。

## 1.4 废水特性和参数值的估计

为了使模型能应用到废水处理系统的设计和运行中，必须能够估计特定废水的参数值，还要能估计进水中各重要组分的质量浓度。表 1-2 显示模型包含 13 个组分除  $X_p$  外，进水中都包含其他各种组分。在模拟废水生物处理系统推荐的符号中（Grau et al., 1982）特定的位置用数字下标来代表组分。假设在生物处理系统之前还有其他预处理方法（比如沉淀池），那么，生化系统的进水浓度的下标应是 1。因此，进水中易生物降解物质浓度要以  $S_{s1}$  来表示，慢速生物降解物质是  $X_{s1}$ ，以此类推。表 1-2 也包含了 19 个参数其中 5 个是化学计量系数另 14 个是动力学参数。所幸的是，有些参数在各种废水之间的差别不大，可以看成是恒定值。由于各组分的特性，有必要将进水以各种组分项表征，同时要估计它们的化学计量系数。因此，我们首先阐述有关估测方法，再来总结估计动力学参数的方法。

### 1.4.1 废水特性和化学计量系数的估计

评判一个模型的重要因素是看它对于电子受体需求变化的时间和空间预测能力。正因如此，才把底物划分为两个部分：易生物降解和慢速生物降解。它们是人为的区分，并不需要与物理特性上的区分（比如说溶解性的和颗粒性的）一致。因此，进水水质的定性必须由实验来完成，才能保证模型可以准确预测电子受体需求量。在设计过程中，另一个重要因素是对活性污泥产率的预测，因为它决定污泥处理设备的大小和一定泥龄条件下活性污泥质量浓度。在一系列的污泥停留时间下，稳态运行完全混合好氧活性污泥系统，可以判定菌种的净生长速率对于电子受体需求和污泥产率的影响。所获得的数据可与其他实验一起来表征废水水质并估算化学计量系数。

进水中总 COD 的组成如下：

$$\text{COD}_{\text{tot}} = S_{s1} + X_{s1} + X_{i1} + S_{i1} \quad (1-8)$$

式中  $S_{s1}$ ——易生物降解底物；  
 $X_{s1}$ ——慢速可生物降解底物；  
 $X_{i1}$ ——惰性悬浮性有机物质；  
 $S_{i1}$ ——惰性可溶性有机物质。

惰性溶解有机物的质量浓度很容易就能确定。只要从泥龄超过 10d 的完全混合式废水处理反应器中取出一部分混合液，在间歇实验中曝气；定期取样分析其中可溶性 COD 其浓度可能恒定，也可能随时间减少；如果反应器中易生物降解 COD 浓度小到可以忽略不计，将发生前一情况；否则，将出现后面的情况。最终残留的溶解 COD 就是惰性物质，其值相当于进水中的  $S_{i1}$ 。

在能够获得易生物降解物质的质量浓度之前，必须知道异养菌产率  $Y_H$ 。这可以通过可溶底物去除过程中观察细胞物质生成量来估计。废水首先应该沉淀并滤去颗粒物。滤液中只含有可溶基质，从完全混合反应器中取出少量已经驯化的微生物接种。定期取出混合液，测量溶解性 COD 和总 COD。异养菌的产率可以由下式得到：

$$\text{COD}(\text{细胞}) = \text{COD}(\text{总}) - \text{COD}(\text{可溶性}) \quad (1-9)$$

$$Y_H = \frac{\Delta \text{COD}(\text{细胞})}{\Delta \text{COD}(\text{可溶性})} \quad (1-10)$$

重复几次，就可得到大致的  $Y_H$  值。在这个估计过程中，任何误差都能在确定其他参数或进水质量浓度时得到补偿。

知道了  $Y_H$  值，在一个完全混合反应器中，污泥停留时间约 2d 的情况下，日循环脉冲式进水（进水 12h 停止进水 12h），通过测定其耗氧速率（OUR）可以估计进水中易生物降解底物质量浓度  $S_{si}$  (Ekama et al., 1986)。如图 1-1 所示，进水结束后，氧吸收速率曲线立即有一个快速的下降。这是因为任何积累的易生物降解物质都被迅速地利用。然而 OUR 不会降至零，因为积累的慢速生物降解物质在一段时间内继续以相同的速率被利用。因而 OUR 的立即下降只与易生物降解物质有关。其可被用来计算其浓度：

$$S_{si} = \frac{\Delta \text{OUR} \cdot V}{Q(1 - Y_H)} \quad (1-11)$$

式中

$\Delta \text{OUR}$ ——停止进水后 OUR 的变化  $[\text{M}/(\text{L}^3 \cdot \text{T})]$ ;

$V$ ——反应器的容积 ( $\text{L}^3$ );

$Q$ ——进水流量 ( $\text{L}^3/\text{T}$ )。

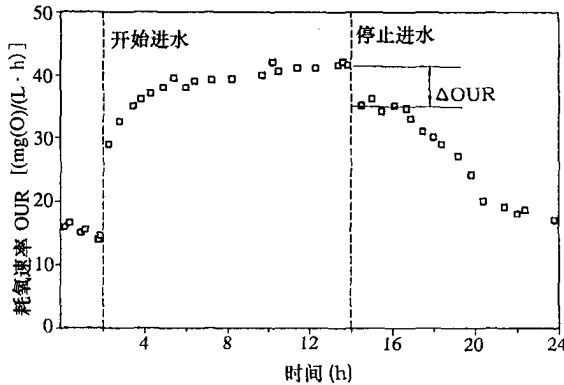


图 1-1 以 12h 日循环脉冲进水方式测定完全混合活性污泥反应器中易生物降解底物的浓度

(资料来源: Ekama 等, 1986)

已经确定了废水中的总 COD、易生物降解 COD 和惰性溶解 COD，现在只需要知道惰性悬浮有机物质  $X_{ii}$  和慢速生物降解 COD 物质  $X_{si}$  中的任何一个，因为另一项可以通过对方程 (1-8) 来确定。建议以估计惰性悬浮物 COD 浓度来修正模型数据，以体现污泥停留时

间对污泥产率的影响。

活性污泥反应过程中的污泥主要有 4 个来源：依靠可生物解物质  $S_s$  和  $X_s$  的异养菌生长，由微生物衰减产生的惰性颗粒产物，进水中惰性悬浮有机物的积累及没有降解的慢速生物降解物质。同时也存在自养微生物，但它的影响很小，在分析中可以忽略不计。异养微生物的生长速率与底物的降解速率成比例，比例系数是异养菌的产率  $Y_H$  (表 1-2)。异养菌以恒定的速率  $b_H$  发生衰减，结果是一部分微生物  $f_p$  转化为惰性颗粒产物。如果列出微生物的物料平衡方程，能够在稳态完全混合活性污泥系统中预测泥龄 (SRT) 对于污泥产率的影响，可以看到未知项有  $X_{II}$ ,  $X_{SI}$ ,  $f_p$ ,  $b_H$ ,  $S_s$ ,  $k_h$  和  $K_x$ 。因为  $f_p$  是表征微生物特性的系数，其值不会因废水水质的不同而有大的变化。对于此处提出的模型，衰减引起底物的循环， $f_p$  取值为  $0.08\text{g}(\text{COD})/\text{g}(\text{COD})$  (Dold and Marais, 1986)。衰减速率常数  $b_H$  也能独立估算，后文将阐述。如果完全混合活性污泥反应器在稳态条件下，污泥量及水力负荷恒定，SRT 超过 5d，在这种条件下运行，反应器中易降解的  $S_s$  和慢速降解的  $X_s$  相对于进水中同物质的量来说小到可忽略 (Ekama et al., 1986)。认识到这一点，可以从等式中去掉水解常数项 ( $k_h$  和  $K_x$ ) 和  $S_s$  项，从而简化了等式。利用方程 1-8) 可以按惰性颗粒 COD ( $X_{II}$ ) 由总进水 COD 来计算进水中慢速生物降解物质的浓度  $X_{SI}$ 。由于  $Y_H$ ,  $f_p$  和  $b_H$  都已知道，只要估算  $X_{II}$ 。可以使用一维搜索方法，选择一个  $X_{II}$  值，使污泥生长速率的预测值与不同 SRT 条件下的测量值之差的平方和最小。这种调整可以契合模型和被研究的特定废水，补偿估计  $Y_H$  和  $b_H$  时的误差。一旦知道了  $X_{II}$  的值，就可通过方程 1-8) 计算  $X_{SI}$ 。对于不同质量浓度的进水，通常可以假设各个不同组分之间的比例是恒定的。

多数活性污泥模型都假定相对于过程中生成的微生物量，进水中的微生物质量浓度可以忽略。本模型也是这样。如果要考虑进水中微生物的影响，还需要大量的研究工作。本模型没有推荐测量进水中微生物质量浓度的方法。如果的确需要考虑它们，那么，就要应用恰当的微生物测量方法。

表 1-2 显示的模型中还包含有溶解氧、硝酸盐及亚硝酸盐氮、氨氮和碱度。这些组分在进水中的质量浓度可通过化学方法测定。

因为模型的目的是预测单个污泥系统运行碳氧化、硝化和反硝化的情况，氮的表述是很重要的。氧化态的氮有 5 种存在形式：氨氮  $S_{NH}$ 、可溶性有机氮  $S_{NI}$ 、颗粒惰性有机氮  $X_{NI}$ 、易生物降解有机氮  $S_{ND}$  和慢速生物降解有机氮  $X_{ND}$ 。如上所述，进水中的氮质量浓度可通过对过滤样品的适当分析来确定。要测定进水中的可溶性惰性有机氮的质量浓度，要对用来测定可溶性 COD 的样品实行凯氏氮测试。凯氏氮测试同样也用来测定进水中总溶解有机氮的质量浓度。二者之差约等于易降解有机氮  $S_{NDI}$ 。如果进水中易降解和慢速降解有机氮之比类似于进水中易降解 COD 与慢速降解 COD 之比，那么，进水中慢速降解有机氮的质量浓度可以通过易降解有机氮来求得：

$$\frac{S_{NDI}}{X_{NDI} + S_{NDI}} = \frac{S_{SI}}{X_{SI} + S_{SI}} \quad (1-12)$$

方程 1-12) 中的唯一未知数是  $X_{NDI}$ 。因为有氮气的损失，无法进行氮的平衡检查，所