



POLSKA AKADEMIA NAUK
Instytut Badań Systemowych

BADANIA SYSTEMOWE
Inżynieria Środowiska

**KOMPUTEROWA SYMULACJA
I OPTYMALIZACJA MODELU
OCZYSZCZALNI ŚCIEKÓW**

Marcin Stachura

Warszawa 2008



**KOMPUTEROWA SYMULACJA
I OPTYMALIZACJA MODELU
OCZYSZCZALNI ŚCIEKÓW**

**POLSKA AKADEMIA NAUK
INSTYTUT BADAŃ SYSTEMOWYCH**

Seria: BADANIA SYSTEMOWE, tom 59

Redaktor naukowy: prof. Jakub Gutenbaum

Podseria: Inżynieria Środowiska

Warszawa 2008

**KOMPUTEROWA SYMULACJA
I OPTYMALIZACJA MODELU
OCZYSZCZALNI ŚCIEKÓW**

Marcin Stachura

Publikacja wydana ze środków projektu badawczego MINISTERSTWA NAUKI i SZKOLNICTWA WYŻSZEGO: nr R11 001 01.

W pracy omówiono sposób konstruowania modelu matematycznego dla oczyszczalni ścieków z osadem czynnym z wykorzystaniem bilansowych równań różniczkowych zwyczajnych, wynikających z zasad zachowania masy i podstawowych zależności kinetycznych i stechiometrycznych zachodzących przemian i procesów fizycznych w obiektach technicznych oczyszczalni. Równania różniczkowe opisują dynamikę procesu a występujące w równaniach współczynniki mają interpretację fizyczną. Koncepcja przedstawionego sposobu konstrukcji modelu matematycznego polega na opracowaniu modelu mogącego być pożytecznym narzędziem wspomagającym pracę operatora procesu technologicznego. Wobec tego opracowywany model opisuje konkretną i ograniczoną grupę obiektów a proces modelowania uwzględnia również kalibrację modelu na podstawie rzeczywistych pomiarów. Dzięki takiemu podejściu utworzony model matematyczny staje się przybliżeniem konkretnego obiektu i może być użyty do jego badania, co jest niewątpliwie celem nadrzędnym modelowania matematycznego. Praca ma również na celu prezentację techniki */fast--prototyping/*, czyli szybkiego prototypowania przy pomocy komputera wielowymiarowych procesów przemysłowych na przykładzie procesów zachodzących w mechaniczno--biologicznych oczyszczalniach ścieków. Pod pojęciem modelowania w pracy rozumie się zespół czynności obejmujących takie zagadnienia, jak: opracowanie modelu procesu w postaci układu równań różniczkowych (model fizyczny), implementację modelu w odpowiednim algorytmie komputerowym, kalibrację wraz z optymalizacją nieznanymi współczynników występujących w równaniach opisujących proces oraz analizę otrzymanych wyników.

Recenzenci:

Prof. dr hab. inż. Krzysztof Janiszowski
Dr hab. inż. Janusz Łomotowski

Semi
Bibl. podręczna

45905

Komputerowa edycja tekstu: Anna Gostyńska

© Instytut Badań Systemowych PAN, Warszawa 2008

Instytut Badań Systemowych PAN
Newelska 6, PL 01-447 Warsaw

Sekcja Informacji Naukowej i Wydawnictw IBS PAN
e-mail: biblioteka@ibspan.waw.pl

ISBN 978-83-89475-15-2

ISSN 0208-8029

Druk i oprawa: ARTPRESS, tel. 052 354 95 10

6. Kalibracja modelu procesu

6.1. Kalibrowane współczynniki

Na podstawie modelu fizykalnego procesu należy dobrać współczynniki w równaniach opisujących dany proces, tak aby różnica pomiędzy wartościami generowanymi przez model oraz wartościami zmierzonymi była jak najmniejsza. Zwykle stosowaną techniką jest *optymalizacja modelu*, tj. zastosowanie odpowiednich algorytmów estymujących nieznane współczynniki w równaniach opisujących model (najczęściej algorytmy gradientowe: *Powella – Fletchera*, *Davidona – Fletchera-Powella*, *Broydena-Fletchera-Goldfarba-Shanno'a*, lub algorytmy bezgradientowe: *Hooka – Jeevesa*, *Rosenbrocka*, *Powella*, *Zangwila*, *Sympleks* lub inne (Findeisen i in., 1977). W przypadku omawianego procesu oczyszczania ścieków użycie takich algorytmów nie jest zadaniem prostym ze względu na wymiarowość procesu, dużą liczbę nieznanymi współczynników oraz dużą liczbę równań opisujących proces. Dodatkowo należy podkreślić, iż występujące w opisie matematycznym współczynniki mają swoje odwzorowanie fizyczne. Co za tym idzie, nie jest dopuszczalny dowolny dobór ich wartości, a jedynie taki, który ma swoje uzasadnienie w rzeczywistych procesach. Wobec tego w pierwszej fazie pracy nad modelem zastosowano technikę *kalibracji modelu*.

Technika *kalibracji modelu* polega na ręcznym dopasowaniu nieznanymi współczynników (jako wartości początkowe w obliczeniach przyjmuje się zwykle wartości literaturowe), a następnie prowadzeniu symulacji modelu. W przypadku braku zgodności wartości procesowych generowanych przez model z rzeczywistymi, dokonuje się korekty współczynników a następnie powtarza ww. czynności.

Przy kalibracji istotne znaczenie ma doświadczenie, wiedza technologiczna i intuicja prowadzącego kalibrację.

Aby uprościć zadanie kalibracji modelu procesu mechaniczno-biologicznego oczyszczania ścieków (ograniczyć liczbę kombinacji zmian), do kalibracji wybrano następujące współczynniki:

- współczynniki A i B w równaniach (2.11) (2.12) modelu osadnika wstępnego,
- współczynniki μ_H , μ_A , b_H , b_A , b_b , b_a w równaniach (2.18)–(2.51) modelu komory z osadem czynnym,
- współczynniki v_0 , B w równaniu (2.55) modelu osadnika wtórnego.

Jednocześnie przyjęto, że wszystkie współczynniki stechiometryczne w równaniach (2.18)–(2.51) są stałe, a ich wartości zgodne z literaturowymi.

Wybrane współczynniki określają szybkości przebiegu reakcji biochemicznych, bądź szybkości sedimentacji zawiesin. Taka selekcja pozwala na dopasowanie modelu do rzeczywistego procesu bez zmian współczynników stechiometrycznych. Istotnym jest jednocześnie fakt, że z powodu braku kalibracji współczynników stechiometrycznych skalibrowane parametry mogą znacznie odbiegać od podanych wartości literaturowych.

6.2. Kalibracja współczynników występujących w równaniach opisujących model osadnika wstępnego oraz osadnika wtórnego

W modelu osadnika wstępnego oraz osadnika wtórnego kalibrowane były współczynniki A i B w równaniach (2.11), (2.12) modelu osadnika wstępnego oraz współczynniki v_0 , B w równaniu (2.55) modelu osadnika wtórnego.

Kalibracja ww. współczynników jest zagadnieniem stosunkowo prostym ze względu na małą liczbę współczynników oraz niewielką korelację z pozostałymi wartościami procesowymi. Dodatkowo, wiedząc że stężenie zawiesiny mineralnej x_{min} zależy tylko od szybkości jej sedimentacji, można jako kryterium jakości modelu przyjąć błąd pomiędzy wartościami modelowanymi zawiesiny mineralnej x_{min} oraz pomiarami zawiesiny mineralnej.

Tablica 6.1 przedstawia wypracowane metodą kalibracji wartości współczynników A i B w równaniach (2.11) (2.12) modelu osadnika wstępnego oraz współczynniki v_0 , B modelu osadnika wtórnego (2.55).

Tablica 6.1. Wartości współczynników A i B modelu osadnika wstępnego oraz współczynniki v_0 , B modelu osadnika wtórnego

	Osadnik wstępny				Osadnik wtórny				
	A		B		Rodzaj strefy	v_0		B	
	wartości wyznaczone	wartości literatu- rowe	wartości wyznaczone	wartości literatu- rowe		wartości wyznaczone	wartości literatu- rowe	wartości wyznaczone	wartości literatu- rowe
Komora 1	1,20E-006	1,20E-006	4	4,05	klarowania	167	187	6,23E-004	6,23E-004
					sedymen- tacji	147	187	6,23E-004	6,23E-004
Komora 2	1,20E-006	1,20E-006	4	4,05	klarowania	167	187	6,23E-004	6,23E-004
					sedymen- tacji	127	187	6,23E-004	6,23E-004
Komora 3	1,20E-006	1,20E-006	2,5	4,05	klarowania	210	187	6,23E-004	6,23E-004
					sedymen- tacji	127	187	6,23E-004	6,23E-004
Komora 4	1,20E-006	1,20E-006	2,5	4,05	klarowania	210	187	6,23E-004	6,23E-004
					sedymen- tacji	137	187	6,23E-004	6,23E-004

Wykonana kalibracja oparta była o wyniki wcześniejszych badań prowadzonych na modelu fizykalnym oczyszczalni ścieków w Rzeszowie, dokładnie opisanych w literaturze (Bogdan i in., 2000A, 2000B, 2002; Studziński, 2004). Proces kalibracji rozpoczynany był od przyjęcia w pierwszej kolejności tych właśnie wartości współczynników w równaniach opisujących rozpatrywane procesy. Jak widać, w omawianym przypadku dobrane parametry nie różnią się znacznie od literaturowych. Wynika to z faktu arbitralnej oceny dokonywanej przez osobę prowadzącą kalibrację, jednocześnie pozwala ocenić wyniki symulacji jako zadowalające.

6.3. Kalibracja współczynników występujących w równaniach opisujących model komory z osadem czynnym

Kalibracja współczynników występujących w opisie modelu komory z osadem czynnym jest trudniejszym zagadnieniem, niż kalibracja współczynników modelu osadnika wstępnego oraz wtórnego, głównie ze względu na dużą korelację zmienionych procesowych. Istotnym zagadnieniem jest więc dogłębna analiza przyjętego opisu matematycznego modelu komory z osadem czynnym.

Podstawowym zadaniem jest ocena wpływu poszczególnych parametrów na poszczególne zmienne procesowe (czyli szybkości poszczególnych reakcji R_i). Zadanie to rozwiązane zostało bez formalnego przeprowadzania symulacji, bazując jedynie na części matematycznego opisu procesu. Przeprowadzona analiza obejmowała zmiany wartości wybranych współczynników a następnie obliczenia lewych stron równań (2.18–2.51).

Rozwiązując ten problem przyjęto następujące założenia upraszczające:

- współczynniki stechiometryczne są stałe we wszystkich komorach i nie były kalibrowane,
- wartości stężeń poszczególnych substancji (rozpuszczonych i nie rozpuszczonych) występujących w równaniach (2.18)–(2.51) były stałe i równe średniej z całej szarży pomiarowej dla pomiarów po osadniku wtórnym.

Szczególnie drugie uproszczenie powodować może duże błędy ilościowe (tzn. różnice pomiędzy rzeczywistym a ocenionym wpływem parametrów kalibrowanych na wartości procesowe) ze względu na mieszanie ścieków opuszczających osadnik wstępny z osadem zawracanym – średnie wartości stężeń substancji mogą się znacznie różnić. Jak widać, dla oceny wpływu kalibrowanych współczynników na zmienne procesowe przyjęto pewien punkt pracy, który nie musi być rzeczywistym punktem pracy. Jednakże podstawowym celem nie jest wyznaczenie w pełni zgodnego opisu ilościowego (tj. wyznaczenie współczynników, które zapewnią te

same wartości zmiennych procesowych modelu i pomiarów), a jedynie odtworzenie poziomu zmian (tzn. ocena charakteru tego wpływu). Wykonane badania (rozdział 8) wykazały, iż taka ocena jest dla celów kalibracji zupełnie wystarczająca, zwłaszcza, że część pomiarów była prowadzona raz na dobę.

Tablica 6.2 przedstawia przyjęte literaturowe (Studziński, 2004) wartości współczynników stechiometrycznych oraz stężeń substancji występujących w równaniach (2.18)–(2.51), niezbędnych do oceny wpływu współczynników kalibrowanych na zmienne procesowe:

Tablica 6.2. Przyjęte wartości współczynników stechiometrycznych oraz stężeń substancji po osadniku wstępnym

Stężenia substancji		Współczynniki stechiometryczne	
Substancja	Wartość	Współczynnik	Wartość
BZT ₅	187,48	K ₅	10
BZT _{wy}	20,419	K _x	0,03
ChZT	442,87	K _{oh}	0,1
ChZT _{wy}	55,06	K _{OA}	0,5
X _{min}	51,13	K _{NH}	1
N _{og}	38,72	f _p	0,08
S _{NH}	30,284	i _{xb}	0,086
S _{alk}	8,25	i _{xp}	0,06
N _{org}	8,43	Y _{nh}	0,67
X _H , X _A	5700	Y _A	0,15

W celu ułatwienia i systematyzacji oceny wpływu zmian kalibrowanych współczynników poszukiwane były funkcje wrażliwości szybkości R_i zmian stężeń na zmiany parametrów kalibrowanych p_i , o postaci:

$$f_{R,i} = \sum_{i=1}^n f_i(p_i) \quad (6.1)$$

gdzie:

$f_{i,i}$ – wypadkowa funkcja zmiany szybkości stężenia substancji i ,

p_i – i -ty kalibrowany parametr,

f_i – i -ta funkcja zmiany szybkości stężenia zależna od parametru p_i ,

n – liczba parametrów kalibrowanych.

Funkcje wrażliwości $f_i(p_i)$ szybkości zmian stężeń R_i na zmiany parametrów kalibrowanych p_i poszukiwane były w następującej postaci:

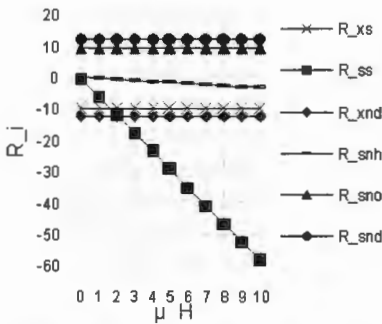
$$f_i(p_i) = A_i p_i + B_i \tag{6.2}$$

Obliczone parametry A_i , B_i odpowiednich współczynników kalibrowanych dla poszczególnych szybkości zmian parametrów procesowych przedstawia tablica 6.3:

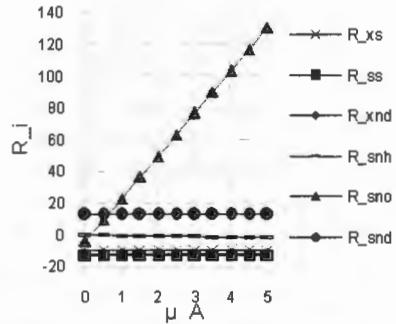
Tablica 6.3. Parametry A_i , B_i współczynników kalibrowanych dla poszczególnych szybkości zmian parametrów procesowych: μ_H - stały współczynnik maksymalnej szybkości przyrostu bakterii heterotroficznych, μ_A - stały współczynnik maksymalnej szybkości przyrostu bakterii autotroficznych, b_H - stała szybkość obumierania bakterii heterotroficznych, b_A - stała szybkość obumierania bakterii autotroficznych, b_h - stała szybkość hydrolizy x_s , b_a - stały współczynnik amonifikacji azotu organicznego s_{ND} .

		R_{xs}	R_{ss}	R_{xnd}	R_{snh}	R_{sno}	R_{snd}
μ_H	$A_{\mu H}$	0,0000	-5,8180	0,0000	-0,3296	-0,0072	0,0000
	$B_{\mu H}$	-9,9317	-0,2037	-12,2730	0,2730	9,3858	12,5000
μ_A	$A_{\mu A}$	0,0000	0,0000	0,0000	-0,3469	26,8900	0,0000
	$B_{\mu A}$	-9,9317	-12,9980	-12,2730	-0,2786	-4,0749	-12,5000
b_H	A_{bH}	3,8330	0,0000	0,3383	0,0000	0,0000	0,0000
	B_{bH}	-12,3080	-12,9980	-12,4830	-0,4521	9,3700	-12,5000
b_A	A_{bA}	3,8333	0,0000	-0,3383	0,0000	0,0000	0,0000
	B_{bA}	-10,1230	-12,9980	-12,2900	-0,4521	9,3700	12,5000
b_h	A_{b_a}	-4,1667	4,1667	-4,1667	0,0000	0,0000	4,1677
	B_{b_h}	2,5683	-25,4980	0,2267	-0,4521	9,3700	0,0000
b_a	A_{b_a}	0,0000	0,0000	0,0000	14,8800	0,0000	0,0000
	B_{b_a}	-9,9317	-12,9980	-12,2730	-0,8985	9,3700	12,5000

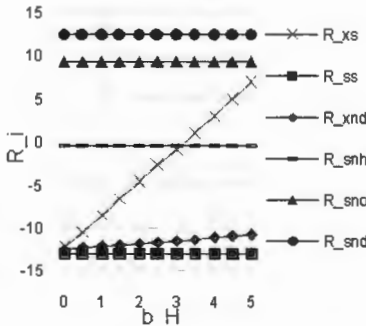
Graficzną reprezentację wyznaczonych funkcji (wokół literaturowych wartości współczynników kalibrowanych) przedstawiają kolejno rysunki 6.1 – 6.6.



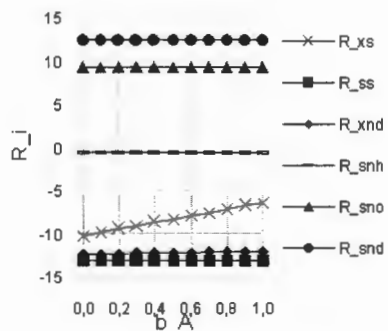
Rysunek 6.1. Szybkości zmian R_i w funkcji μ_H



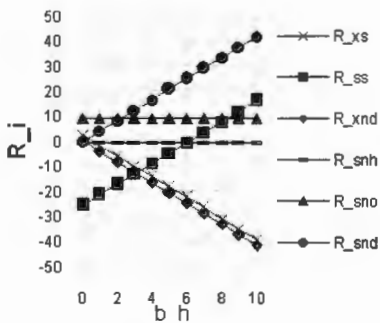
Rysunek 6.2. Szybkości zmian R_i w funkcji μ_A



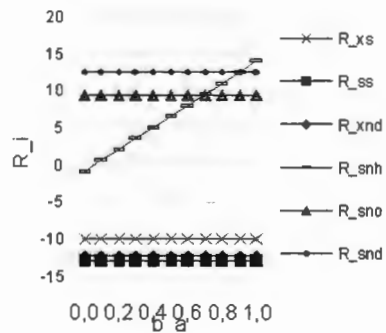
Rysunek 6.3. Szybkości zmian R_i w funkcji b_H



Rysunek 6.4. Szybkości zmian R_i w funkcji b_A .



Rysunek 6.5. Szybkości zmian R_i w funkcji b_h



Rysunek 6.6. Szybkości zmian R_i w funkcji b_a

Na podstawie wykresów 6.1–6.6 można stwierdzić, że wpływ na zmiany szybkości reakcji R_i jest zróżnicowany i należy poszukiwać głównie związków pomiędzy:

$$R_{xs} = f(b_H, b_A) \quad (6.3)$$

$$R_{ss} = f(\mu_H, b_h) \quad (6.4)$$

$$R_{xnd} = f(b_h) \quad (6.5)$$

$$R_{snh} = f(b_a) \quad (6.6)$$

$$R_{sno} = f(\mu_A) \quad (6.7)$$

$$R_{snd} = f(b_h) \quad (6.8)$$

Ze względu na sprzężenie zwrotne w układzie (zawrót ścieków do osadnika wstępnego) wszystkie prędkości R_i powinny być mniejsze od zera. W przeciwnym wypadku model układu byłby technologicznie niestabilny oraz charakteryzował się stałym wzrostem wartości procesowych.

Dzięki znajomości wyprowadzonych zależności (6.3)–(6.8) kalibracja modelu komory z osadem czynnym staje się zagadnieniem dużo prostszym.

Celem kalibracji była minimalizacja błędu średniokwadratowego σ całego modelu, definiowanego jako:

$$\sigma = \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{K} \sum_{k=1}^K [z_{m,i}(k) - z_{r,i}(k)]^2 \right) \quad (6.9)$$

gdzie: i – kolejne zmienne procesowe, $i = 1, \dots, n$,

n – liczba zmiennych procesowych,

k – kolejny krok symulacji, $k = 1, \dots, K$,

K – liczba wszystkich kroków symulacji,

z_m – wartość procesowa generowana przez model,

z_r – wartość procesowa zmierzona.

Należy zaznaczyć, iż podstawowym celem obliczeń była jakość (kierunek zmian) odwzorowania charakteru przebiegu a wtórnym zadaniem bezwzględna dokładność odwzorowania wartości modelowanych.

Tablica 6.4 przedstawia wypracowane metodą kalibracji wartości współczynników μ_H , μ_A , b_H , b_A , b_h , b_a w równaniach (2.18)–(2.51) modelu komory z osadem czynnym.

Tablica 6.4. Wartości współczynników μ_H , μ_A , b_H , b_A , b_h , b_a modelu komory z osadem czynnym

Parametry kalibrowane			Komora 1	Komora 2	Komora 3	Komora 4
		μ_H	wartości wyznaczone	2,2	2,2	2
	wartości literaturowe	2,2	2,2	2,2	2,2	
μ_A	wartości wyznaczone	0,01	0,01	0,01	0,01	
	wartości literaturowe	0,5	0,5	0,5	0,5	
b_H	wartości wyznaczone	0,62	0,62	0,62	0,62	
	wartości literaturowe	0,62	0,62	0,62	0,62	
b_A	wartości wyznaczone	0,05	0,05	0,05	0,05	
	wartości literaturowe	0,05	0,05	0,05	0,05	
b_h	wartości wyznaczone	2,7	2,7	2,7	2,7	
	wartości literaturowe	3	3	3	3	
b_a	wartości wyznaczone	0,5	0,5	0,5	0,5	
	wartości literaturowe	0,03	0,03	0,03	0,03	

Podobnie jak w przypadku poprzednim, tj. kalibracji modeli osadnika wstępnego i wtórnego, punktem wyjściowym w kalibracji modelu komory z osadem czynnym były literaturowe wartości współczynników występujących w równaniach opisujących model. Podobnie, po niewielkiej zmianie wartości współczynników, arbitralnie uznano, iż odwzorowanie procesu w modelu jest zadowalające. Należy przy tym zaznaczyć, że wyznaczone funkcje wrażliwości, które świadczą o tym, iż poszczególne parametry mają niezależne wpływy na poszczególne szybkości reakcji, znacznie uprościły poszukiwanie wartości współczynników.

IBS PAN *Sená*

45905

Bibl. podręczna

ISBN 978-83-89475-15-2
ISSN 0208-8029
