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 fizykalną. 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 fizykalny), implementację modelu w odpowiednim algorytmie komputerowym, kalibrację wraz z optymalizacją nieznanych współczynników występujących w równaniach opisujących proces oraz analizę otrzymanych wyników.

Biblioteka Instytutu Badań Systemowych PAN w Warszawie

Bibl. podręczna

45905

Recenzenci:

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

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

8. Wyniki modelowania procesu oczyszczania ścieków przy użyciu modułu *PExSim* systemu *AMandD*

Na podstawie pomiarów wykonanych w oczyszczalni ścieków w Rzeszowie (Studziński, 2004) oraz przeprowadzonej kalibracji i optymalizacji współczynników modelu zostały przeprowadzone symulacje weryfikujące poprawność modelu procesu w następujący sposób:

Jako dane wejściowe do modelu wprowadzone zostały wartości charakteryzujące stan ścieków surowych, które zostały w modelu „poddane procesom oczyszczania" (opisanym w rozdziale 2) oraz odpowiednie wartości natężeń przepływów. Po wstępnej kalibracji modelu zastosowano przedstawione powyżej algorytmy optymalizacji modelu. Następnie wyniki generowane przez model odpowiadający minimum (dla danej metody) zostały porównane ze średnimi wartościami zmierzonymi na obiekcie.

8.1. Przygotowanie danych

Dane zebrane w czasie przeprowadzonej w oczyszczalni szarży pomiarowej służyły do weryfikacji jakości modelu. Oczywiście, każdy pomiar charakteryzuje się określonymi błędami pomiarowymi. W omawianym przypadku pomiary stężeń wartości procesowych wykonywane były przez personel, a więc trudno jest określić, jakimi błędami pomiary te mogą się charakteryzować. Zaproponowano więc, w celu redukcji wpływu błędów pomiarowych, odpowiednio przefiltrować wejściowe sygnały stężeń.

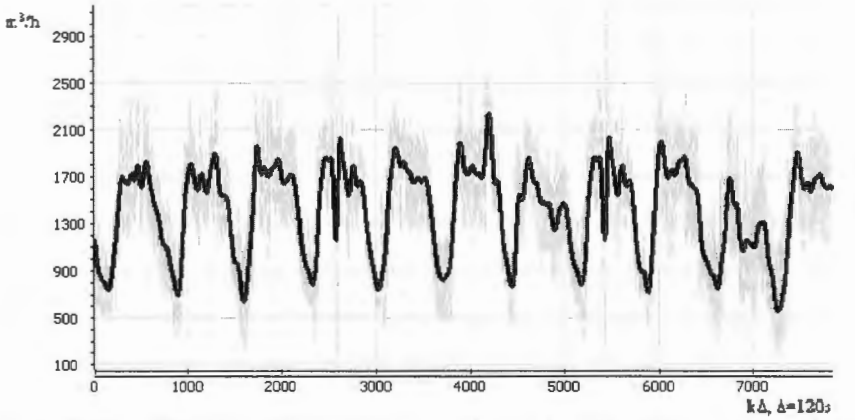
Aparatura pomiarowa również charakteryzuje się błędami wprowadzającymi tzw. *szum pomiarowy*. Rysunek 9.1 przedstawia sygnał dopływu ścieków surowych do oczyszczalni. Jak widać, charakteryzuje się on bardzo dużą zmiennością, którą zinterpretowano właśnie jako szum pomiarowy.

Dane wejściowe do modelu zostały przefiltrowane w celu:

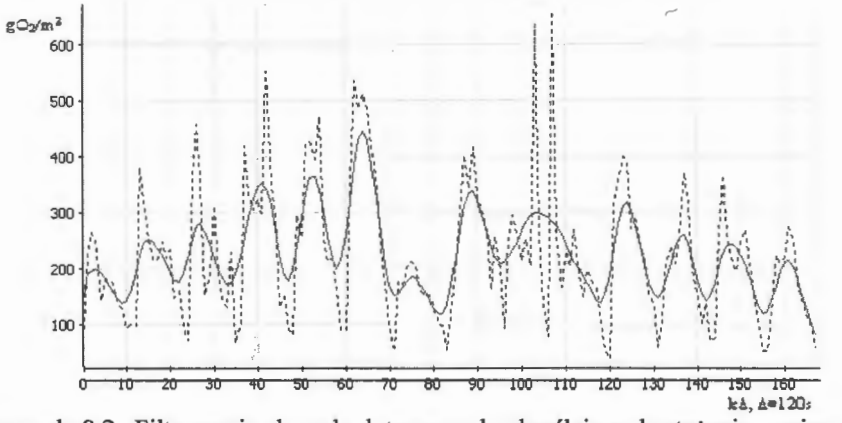
- wyeliminowania szumów pomiarowych,
- łatwiejszego dopasowania współćzynników przy mniejszych gradientach zmian wartości wejściowych modelu.

Filtrowanie danych zostało wykonane w module *MITforRD* systemu *AMandD*. Wszystkie dane zostały wygładzone przy zastosowaniu wagowej funkcji trygonometrycznej $\cos^4$.

Dla pomiarów przepływu zastosowano wygładzanie oparte na 65 kolejnych próbkach pomiarów (przedział rzędu 2h przed i po chwili pomiaru). Przykładowy wynik filtrowania danych przepływów, dla napływu ścieków surowych został przedstawiony na rysunku 8.1.



Rysunek 8.1. Filtrowanie danych przepływów na przykładzie przepływu ścieków surowych; dane oryginalne (*linia przerywana*), dane przefiltrowane (*linia gruba*). Skalą czasową jest kolejny numer próbki



Rysunek 8.2. Filtrowanie danych dotyczących określających stężenia zanieczyszczeń na przykładzie biologicznego zapotrzebowania tlenu; dane oryginalne (*linia kropkowana*), dane przefiltrowane (*linia ciągła*). Skalą czasową jest kolejny numer próbki

Należy pamiętać, że tylko pomiary przepływów były prowadzone, co 2 min. Pomiary stężeń prowadzone były odpowiednio, co 2 h lub raz na dobę dla ścieków surowych i oczyszczonych.

Dla pomiarów stężeń zanieczyszczeń zastosowano filtrowanie oparte na 7 kolejnych próbkach pomiarów (co odpowiada okresowi 14 godzin). Przykładowy wynik filtrowania pomiarów wartości zanieczyszczeń, dla biologicznego zapotrzebowania tlenu w ściekach surowych, został przedstawiony na rysunku 8.2.

Metoda filtrowania danych została dobrana arbitralnie, bazując na ocenie osoby projektującej model.

8.2. Przyjęte wskaźniki błędów pomiędzy wartościami modelowanymi i rzeczywistymi

Wartości błędów względnych pomiędzy poszczególnymi wartościami stężeń frakcji ścieków, modelowanymi oraz rzeczywistymi, zostały unormowane względem maksymalnych wartości rzeczywistych według następującej zależności:

$$X_{BN,i}(k)=\frac{X_m(k)-X_r(k)}{X_{R\max}} \tag{8.1}$$

gdzie:

$X_{BN,i}$ – błąd bezwzględny i–tej wartości procesowej rzeczywistej unormowany względem maksymalnej wartości pomiarowej,

X_m – wartość modelowana,

X_r – wartość rzeczywista,

X_{Rmax} – wartość maksymalna wielkości rzeczywistej.

Jako miarę błędu modelu przyjęto średnią arytmetyczną z modułów błędów względnych unormowanych wszystkich modelowanych wartości procesowych:

$$X_M(k)=\frac{\sum_{i=1}^{n}\left|X_{BN,i}(k)\right|}{n} \tag{8.2}$$

gdzie:

X_M – błąd unormowany średni,

n – ilość wartości modelowanych.

W celu porównania błędów wytworzonych przez modele po kalibracji o optymalizacji (różnymi metodami) obliczono wartości średnie z błędów unormowanych X_{BN}:

$$E(X_{BN}) = \frac{1}{K}\sum_{i=1}^{K}|X_{BN}(k)| \tag{8.3}$$

gdzie:

E – wartość średnia,

K – liczba kroków symulacji.

Dodatkowo, dla błędów unormowanych $X_{BN,i}$ X_M wyznaczono:

- wariancję definiowaną jako średnią arytmetyczną kwadratów różnic poszczególnych wartości od wartości oczekiwanej:

$$Var(X_{BN}) = E[(X_{BN} - E(X_{BN}))^2] \tag{8.4}$$

- odchylenie standardowe definiowane jako pierwiastek z wariancji:

$$\sigma = \sqrt{Var(X_{BN})} \tag{8.5}$$

gdzie:

Var – oszacowanie wariancji,

X_{BN} – zmienna badana (błąd),

E – oszacowanie wartości średniej,

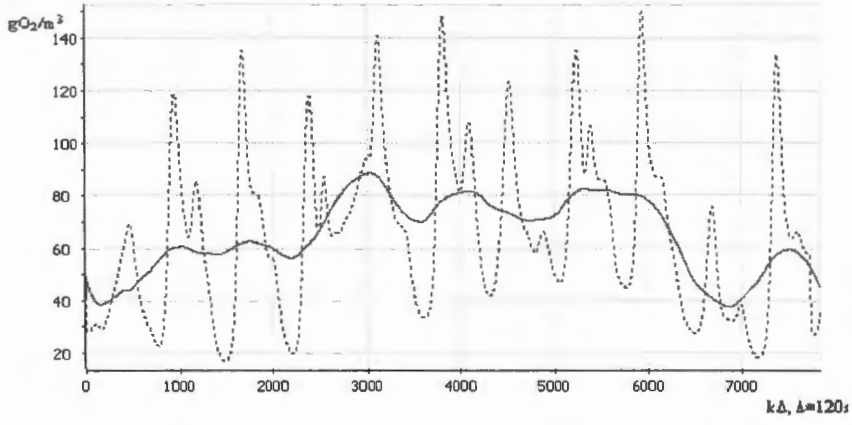
σ – odchylenie standardowe.

Należy zaznaczyć, że przyjęte wskaźniki jakości modelu nie pokrywają się bezpośrednio z funkcjami celu dla zastosowanymi dla metod optymalizacji. Uznano, że ocena błędów bezwzględnych wraz z przedstawieniem ich wariancji będzie bardziej miarodajnym opisem jakości modelu, niż przedstawienie błędów względnych, głównie ze względu na możliwe przesunięcia fazowe pomiędzy modelowanymi a rzeczywistymi wartościami procesowymi. Wobec tego minimalizacja funkcji celu w czasie optymalizacji niekoniecznie musi pokrywać się ze zmniejszeniem błędu modelu, ale powinna wiązać się ze zmniejszeniem jego wariancji (co można traktować jako polepszenie dokładności modelu).

8.3. Sygnały modelowane a pomiary z oczyszczalni

Symulacje dla całej szarży pomiarowej (ok. 14 dni) polegały na wykorzystaniu wygładzonych pomiarów jako wartości pobudzających modelu. Wartości generowane przez model charakteryzują się dużą zmiennością w czasie doby, podczas gdy wartości pomierzone ścieków oczyszczonych były średnimi dobowymi. W celu porównania wartości wypracowanych przez model oraz wartości pomierzonych stężeń poszczególnych frakcji ścieków, wartości modelowane zostały wygładzone do średnich dobowych (tzn. zastosowano filtr wygładzający z oknem odpowiadającym 1 dobie).

Przykład takiego wygładzenia przedstawia rysunek 8.3.



Rysunek 8.3. Wygładzanie danych otrzymanych z modelu na przykładzie stężenia *ChZT*; wartości generowane przez model (*linia kropkowana*), wartości wygładzone(*linia ciągła*)

Należy zaznaczyć, iż ze względu na charakter wykonanej szarży pomiarowej nie jest wiadomym, jaki jest charakter godzinowych zmian wartości procesowych w ściekach oczyszczonych. Wykonane pomiary dają informację o średniej dobowej wartość stężeń substancji – były to pomiary wykonane dla tzw. próbek zlewanych. I jak łatwo zauważyć taka wartość nie stanowi nawet rzetelnej oceny wartości średniej stężenia, ponieważ nie zawiera czynnika proporcjonalnego do chwilowych natężeń przepływu ścieków. W celu weryfikacji poprawności modelu należałoby więc wykonać nową szarżę pomiarową, w której mierzono by stężenia wartości procesowych w ściekach oczyszczonych z częstotliwością przynajmniej rzędu 2 godzin.

Przy obecnym stanie wiedzy o obiekcie można więc jedynie porównywać średnie dobowe pomiarów ze średnimi dobowymi obliczonymi z wartości generowanych przez model i na tej podstawie próbować dokonać oceny poprawności mode-

lowania procesu. Łatwo zauważyć, iż takie podejście daje możliwość analizy pracy oczyszczalni w cyklu dobowym, natomiast do analizy w cyklu godzinowym może cechować się bardzo znacznymi błędami.

8.4. Wyniki modelowania oczyszczalni po kalibracji i optymalizacji modelu

8.4.1. Wyniki kalibracji i optymalizacji dla początkowej struktury modelu osadnika wstępnego

Jak zostało to omówione w poprzednich rozdziałach, za początkową strukturę modelu osadnika wstępnego przyjęto podział na 4 komory.

Zastosowane metody optymalizacji dały bardzo zbliżone do siebie rezultaty (rozumiane jako wartość funkcji celu (7.33, 7.34), co przedstawiono w tablicy 8.1. Wobec tego na poniżej przedstawionych rysunkach (8.6 – 8.13) przebiegi wartości procesowych po optymalizacji można rozumieć jako wspólne (takie same) dla wszystkich zastosowanych metod.

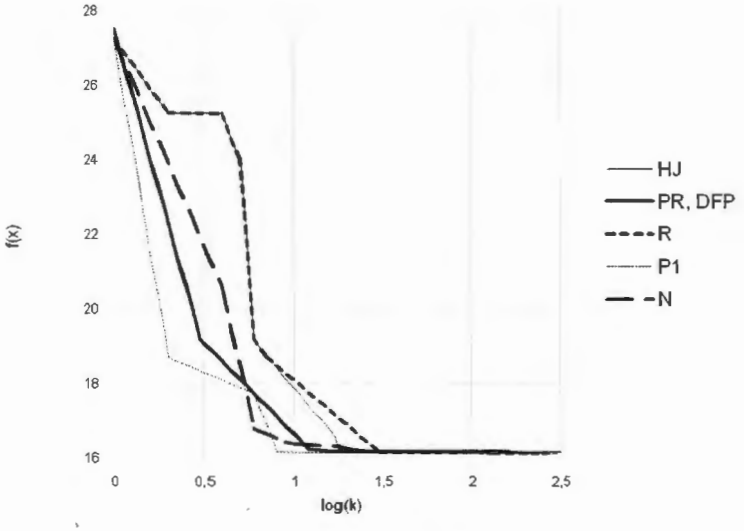
Zastosowanie metody symulowanego wyżarzania nie dało pozytywnych wyników (w sensie znalezienia lepszego minimum od pozostałych metod), dlatego nie została ona tutaj przedstawiona.

Tablica 8.1. Porównanie zastosowanych metod optymalizacji oraz kalibracji modelu dla struktury początkowej (4 komory).

Metoda	Wartość f(x)	Komora 1	Komora 2	Komora 3	Komora 4
		B	*B*	*B*	*B*
Kalibracja	27,250855	4	4	2,5	2,5
HJ	16,146531	4,181386	4,266676	-9,575852	-6,173522
R	16,115494	4,019775	4,019363	-5,516237	4,210909
P1	16,114144	4,026160	4,030669	-5,707660	4,213720
N	16,146606	4,181652	4,266439	0,147629	1,681376
PR	16,138755	4,226724	4,236394	2,500589	2,500589
DFP	16,124325	4,300525	4,321684	2,500801	2,500802

Zbieżność zastosowanych metod optymalizacji (rozumiana jako liczba obliczeń funkcji celu) również była podobna. Tym niemniej można dla zadania optymalizacji osadnika wstępnego określić najszybszą metodę, którą okazała się metoda P1, która dla omawianego przypadku była szybsza od, teoretycznie lepszych, metod gradientowych. Wynika to z faktu, iż dla danego zadania szybkość zbieżności wszystkich

algorytmów jest stosunkowo duża a metody gradientowe tracą kilka iteracji na obliczenie gradientów funkcji celu. Zbieżność metod optymalizacji przedstawiona została na rysunku 8.4. Można zauważyć, iż zbieżność metod gradientowych pokrywa się ze sobą. W istocie przebieg ich działania był podobny, ale różny przy małych wartościach funkcji celu, co jest oczywiście trudne do zauważenia na poniższym rysunku.



Rysunek 8.4. Zbieżność zastosowanych metod dla zadania optymalizacji osadnika wstępnego w funkcji logarytmu z liczby obliczeń funkcji celu, dla struktury początkowej

Analizując dane przedstawione w tablicy 8.1 można stwierdzić, iż jest możliwa redukcja modelu osadnika wstępnego. Wobec faktu, iż metoda HJ znalazła wartości optymalne funkcji celu dla parametrów *B* mniejszych od zera w komorze 3 i 4 (natomiast metody R i P1 w komorze 3), postanowiono zredukować strukturę modelu o te komory a optymalizację nowej struktury rozpocząć od wartości współczynników *B* dla komory 1 i 2 takich, jak wypracowała je metoda HJ.

8.4.2. Wyniki optymalizacji dla zredukowanej struktury modelu osadnika wstępnego

W przypadku optymalizacji modelu osadnika wstępnego o zredukowanej strukturze, podobnie jak w poprzednim przypadku, wszystkie zastosowane metody dały podobne rezultaty. Formalnie jednak można wyróżnić najlepszą metodę, którą okazała się metoda symulowanego wyżarzania M. Z dużym prawdopodobieństwem można więc stwierdzić, że znaleziony punkt jest minimum globalnym.

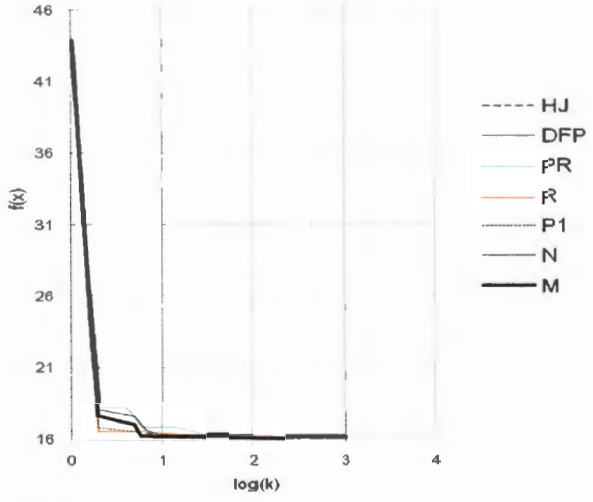
Wyniki te można zinterpretować jako pozytywne w tym sensie, że dla struktury zredukowanej wyniki (wartości funkcji celu) niemalże pokrywają się z wynikami dla struktury oryginalnej.

Tablica 8.2. Porównanie zastosowanych metod optymalizacji modelu dla struktury zredukowanej (2 komory).

Metoda	Wartość *f*(x)	Komora 1	Komora 2
		B	*B*
HJ	16,330000	4,029030	4,067796
R	16,341577	3,687866	4,226723
P1	16,218377	4,160885	3,922911
N	16,401870	4,282450	3,367869
M	16,163226	4,029182	4,067687
PR	16,166668	4,226724	4,236394
DFP	16,163226	4,300525	4,321684

Zbieżność wszystkich zastosowanych metod była niemalże identyczna (co było oczekiwane ze względu na trywialny charakter zadania optymalizacji funkcji dwóch zmiennych), z wyjątkiem oczywiście metody M, która ze względu na swój przypadkowy charakter potrzebowała około 2 razy więcej iteracji, aby zakończyć obliczenia. Zbieżności zastosowanych metod dla zadania optymalizacji osadnika wtórnego o zredukowanej strukturze przedstawia rysunek 8.5.

Podsumowując, na podstawie uzyskanych wyników można postawić tezę, że dla zadania optymalizacji modelu osadnika wstępnego wystarczające wydają się metody bezgradientowe, a w szczególności metoda Powella P1. W trakcie przeprowadzonych analiz oraz optymalizacji struktury modelu stwierdzono, że dla omawianego przypadku podział osadnika wstępnego na dwie komory daje podobne rezultaty, w sensie dokładności modelu, co podział na cztery komory. Można więc zaproponować, aby w kolejnych pracach rozpocząć modelowanie osadnika wstępnego przy podziale na dwie komory, natomiast optymalizację wykonywać metodą P1. W przypadku gdy zaproponowana metoda nie przyniosłaby zadowalających rezultatów, można kolejno wypróbowywać metody gradientowe PR oraz DFP, a następnie metody bezgradientowe. Gdyby wszystkie metody optymalizacji nieznanych współczynników nie dały pozytywnych rezultatów, należałoby zwiększać kolejno liczbę komór. Po zakończeniu takiego cyklu dobrze jest wykonać proces optymalizacji ponownie korzystając z metody przypadkowej – M, w celu upewnienia się, że znaleziony punkt minimum jest najlepszym znalezionym punktem.



Rysunek 8.5. Zbieżność zastosowanych metod dla zadania optymalizacji modelu osadnika wstępnego o zredukowanej strukturze

Należy również podkreślić, iż wszystkie zastosowane metody, znalazły wartości optymalizowanych parametrów w granicach wartości literaturowych, co potwierdza właściwy dobór struktury modelu i jego opisu. Czas optymalizacji również był stosunkowo krótki – wszystkie metody kończyły swoje procedury w czasie krótszym od godziny. Proste algorytmy zastosowanych metod oraz uzyskane wyniki powodują, że wydaje się być zbędnym poszukiwanie bardziej złożonych metod optymalizacji dla modelu osadnika wstępnego.

8.4.3. Weryfikacja modelu osadnika wstępnego

Ocenę modelu osadnika wstępnego przedstawiono w formie graficznej na poniższych wykresach. Jak widać, mimo że wartość funkcji celu dla zadania optymalizacji modelu o strukturze zredukowanej była podobna do tej w modelu o strukturze pierwotnej, to jednak znalezione modele generowały nieznacznie odmienne przebiegi.

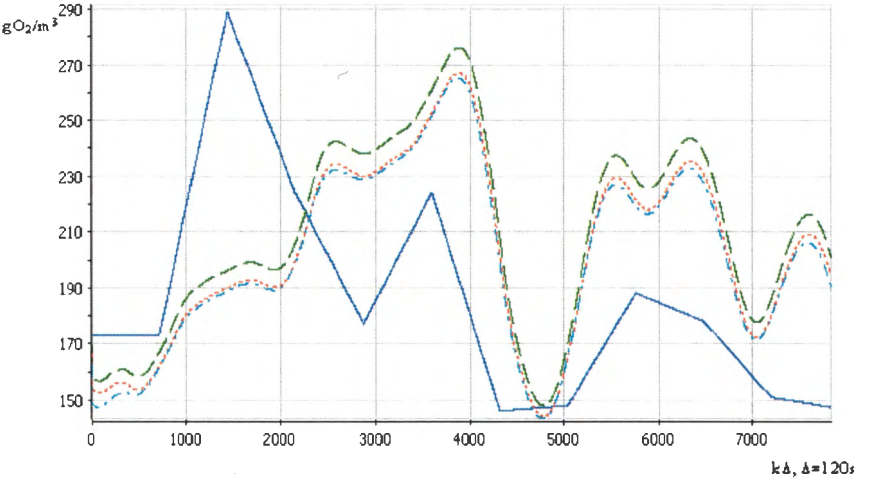
Przykładowe wyniki wypracowane przez model przedstawiają rysunki 8.6–8.13. Warto zwrócić uwagę na rysunki 8.12 oraz 8.13, na których widać iż uzyskanie wyniki dla kalibracji i optymalizacji pokrywają się. Zbieżności te tłumaczyć można faktem, iż w osadniku wstępnym dopasowywane były współczynniki odpowiadające za proces sedymentacji, czyli nie mające wpływu na związki rozpuszczone, jakim jest azot amonowy.

Z kolei tablica 8.3 zawiera porównanie błędów modelu po jego kalibracji i optymalizacji. Jak widać, średnia błędów dla wszystkich wartości procesowych nie różni się znacząco. Oznacza to, że minimum wypracowane metodą kalibracji było bardzo dobrym punktem początkowym, bliskim optymalnemu. Rozpatrując jakość modelu osadnika wstępnego ze względu na charakter procesów, jakie w nim zachodzą, można powiedzieć, że uległ on poprawie, ponieważ błąd pomiędzy wartością zmierzoną zawiesiny mineralnej x_{min} zmniejszył się o ok. 2%. Różnice w wartościach średnich pomiędzy modelami optymalizowanymi można tłumaczyć błędami numerycznymi.

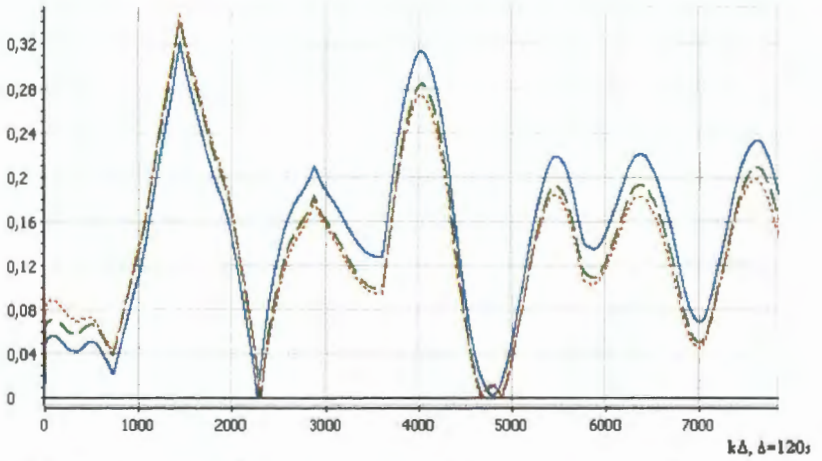
Graficzną prezentację uzyskanych średnich błędów modelu dla kalibracji oraz optymalizacji w strukturze początkowej i zredukowanej przedstawiają rysunki 8.14 w formie histogramów.

Na podstawie przedstawionych histogramów można wyciągnąć następujące wnioski:

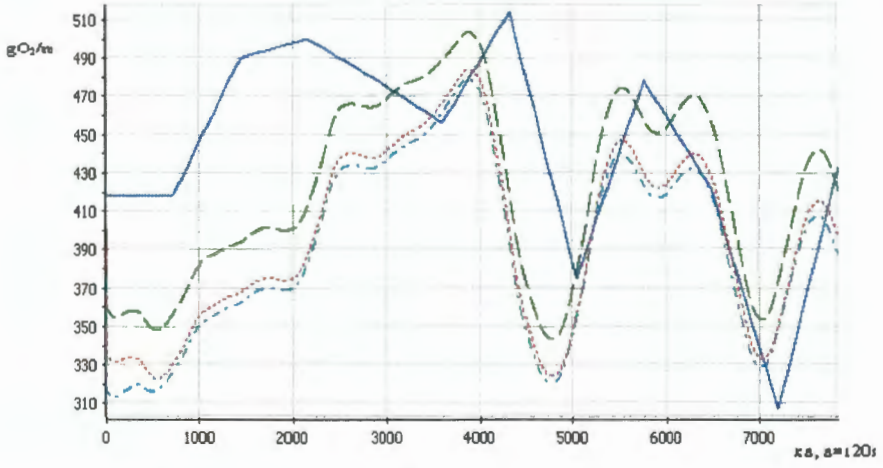
- rozkład błędów dla poszczególnych metod dopasowania modelu zmieniał się, lecz nie były to zmiany znaczne,
- dla wszystkich przypadków błąd nie przekracza 30%,
- wraz ze zmniejszeniem średniej błędu całego modelu, jego histogram „wyrównuje" się, co potwierdza wzrost wariancji (chociaż jest on właściwie nieznaczny).



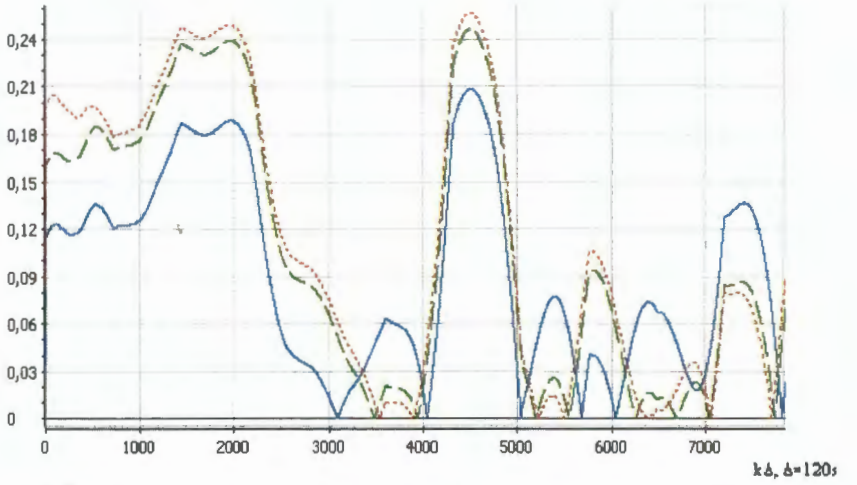
Rysunek 8.6. Wartość *Biologicznego Zapotrzebowania Tlenu* w ściekach po osadniku wstępnym: zmierzona (*linia ciągła*), generowana przez model po kalibracji (*linia kreskowana*), generowana przez model po optymalizacji modelu o strukturze początkowej (*linia kropkowana*), generowana przez model po optymalizacji modelu o strukturze zredukowanej (*linia kreska–kropka*)



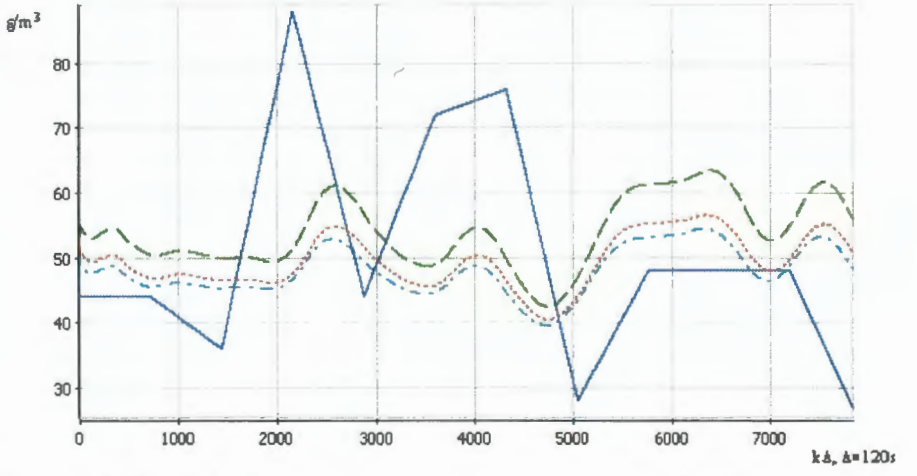
Rysunek 8.7. Przebieg wartości absolutnych z błędów unormowanych *Biologicznego Zapotrzebowania Tlenu* dla: kalibracji (*linia ciągła*), optymalizacji modelu o strukturze początkowej (*linia kreskowana*), optymalizacji modelu o strukturze zredukowanej(*linia kropkowana*)



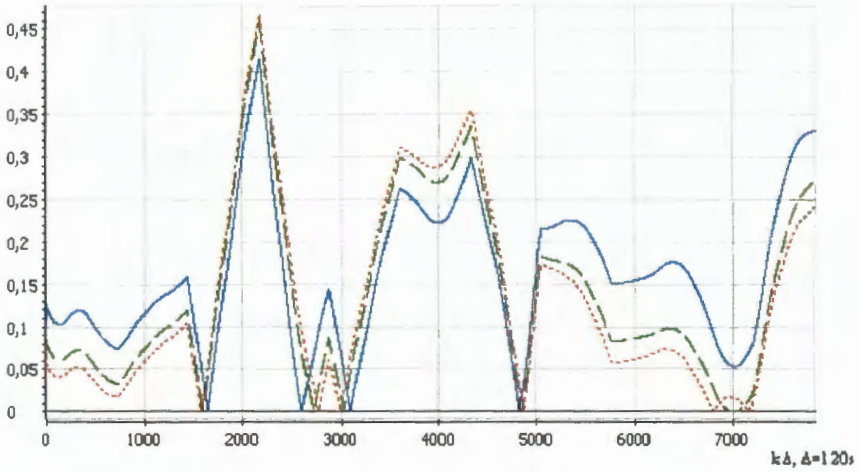
Rysunek 8.8. Wartość *Chemicznego Zapotrzebowania Tlenu* w ściekach po osadniku wstępnym: zmierzona (*linia ciągła*), generowana przez model po kalibracji (*linia kreskowana*), generowana przez model po optymalizacji modelu o strukturze początkowej (*linia kropkowana*), generowana przez model po optymalizacji modelu o strukturze zredukowanej (*linia kreska–kropka*)



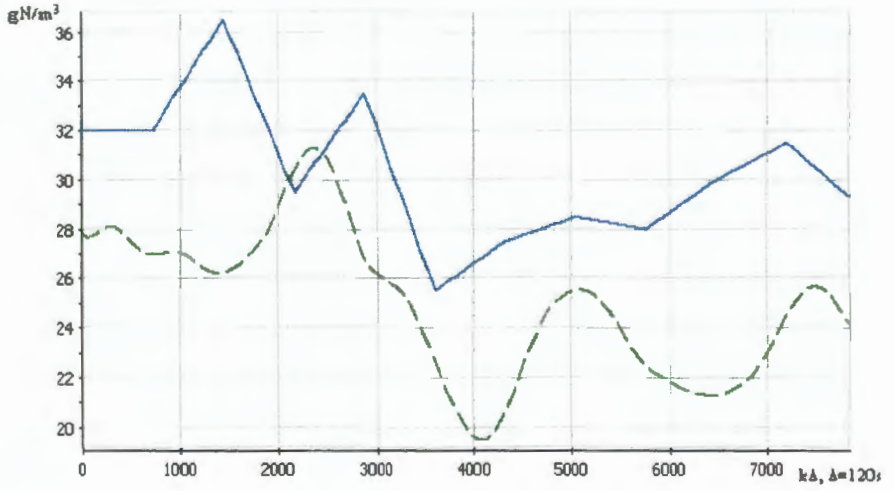
Rysunek 8.9. Przebieg wartości absolutnych z błędów unormowanych *Chemicznego Zapotrzebowania Tlenu* dla: kalibracji (*linia ciągła*), optymalizacji modelu o strukturze początkowej (*linia kreskowana*), optymalizacji modelu o strukturze zredukowanej(*linia kropkowana*)



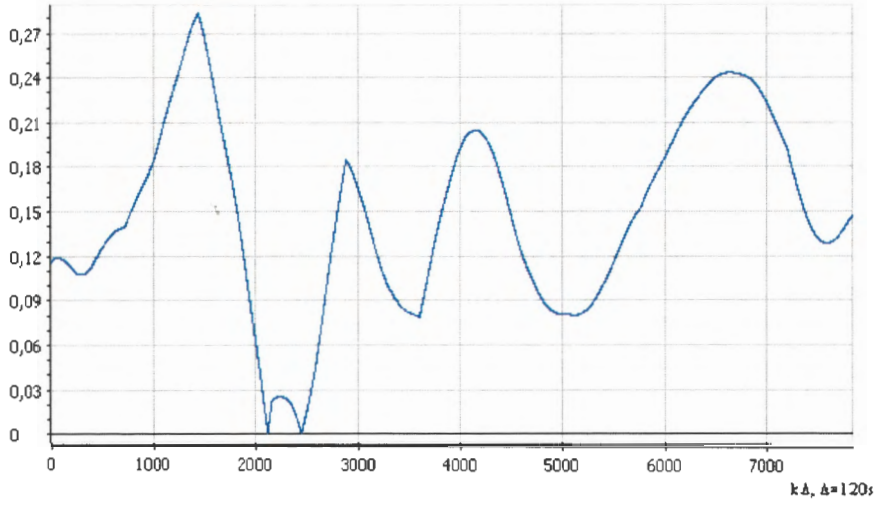
Rysunek 8.10. Wartość stężenia *Zawiesiny mineralnej* w ściekach po osadniku wstępnym: zmierzona (*linia ciągła*), generowana przez model po kalibracji (*linia kreskowana*), generowana przez model po optymalizacji modelu o strukturze początkowej (*linia kropkowana*), generowana przez model po optymalizacji modelu o strukturze zredukowanej (*linia kreska–kropka*)



Rysunek 8.11. Przebieg wartości absolutnych z błędów unormowanych *Zawiesiny Mineralnej* dla: kalibracji (*linia ciągła*), optymalizacji modelu o strukturze początkowej (*linia kreskowana*), optymalizacji modelu o strukturze zredukowanej(*linia kropkowana*)



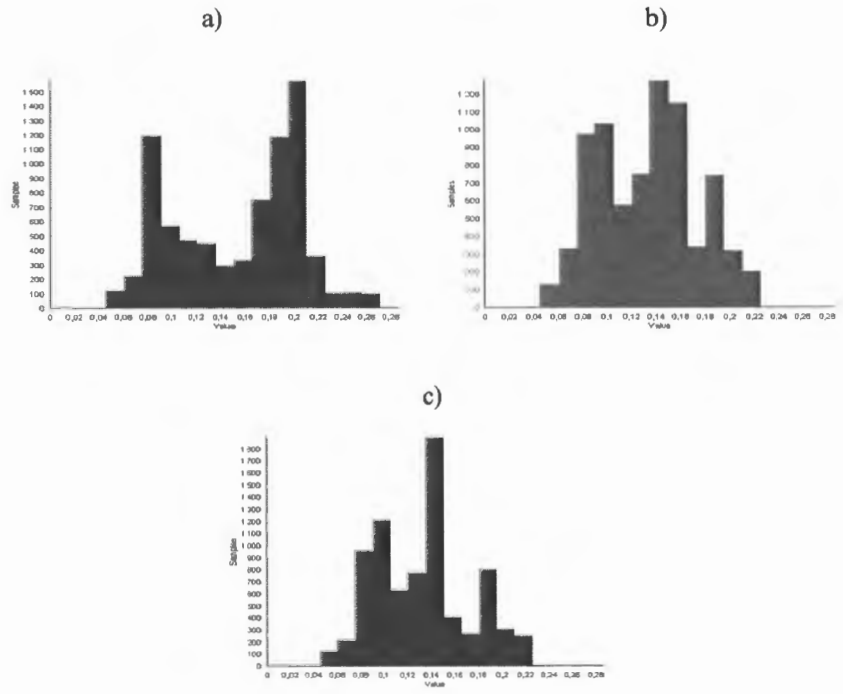
Rysunek 8.12. Wartość stężenia *Azotu amonowego (amoniaku)* w ściekach po osadniku wstępnym: zmierzona (*linia ciągła*), modelowana (po kalibracji oraz dwuetapowej optymalizacji) (*linia kreskowana*)



Rysunek 8.13. Przebieg wartości absolutnych z błędów unormowanych *Azotu Amonowego* dla: kalibracji, optymalizacji modelu o strukturze początkowej, optymalizacji modelu o strukturze zredukowanej

Tablica 8.3. Porównanie przyjętych wartości błędów dla modelu skalibrowanego (Kal), optymalizowanego o strukturze początkowej (Opt.1), oraz optymalizowanego o strukturze zredukowanej (Opt.2).

	$E(X_{BN})$			$Var(X_{BN})$			$\sigma(X_{BN})$		
Zmienna procesowa:	Kal	Opt.1	Opt.2	Kal	Opt.1	Opt.2	Kal	Opt.1	Opt.2
BZT_5	0,1514	0,1424	0,1374	0,0062	0,0057	0,0055	0,0787	0,0755	0,0741
ChZT	0,0910	0,1056	0,1131	0,0036	0,0070	0,0078	0,0603	0,0836	0,0882
X_{MIN}	0,1611	0,1406	0,1356	0,0072	0,0108	0,0182	0,0847	0,1040	0,1349
N_{OG}	0,1864	0,1916	0,1926	0,0096	0,0097	0,0097	0,0980	0,0987	0,0982
S_{NH}	0,1475	0,1475	0,1475	0,0040	0,0040	0,0040	0,0633	0,0633	0,0633
S_{ALK}	0,0706	0,0706	0,0706	0,0706	0,0706	0,0706	0,2656	0,2656	0,2656
Średnia modelu	**0,1347**	**0,1330**	**0,1328**	**0,0169**	**0,0180**	**0,0193**	**0,1084**	**0,1151**	**0,1207**



Rysunek 8.14. Histogramy (przedstawienie ilości próbek w funkcji ich wartości) średnich błędów dla całego modelu osadnika wstępnego dla: a) kalibracji, b) optymalizacji modelu o strukturze początkowej, c) optymalizacji modelu o strukturze zredukowanej

Analizując uzyskane wyniki symulacji oraz odnosząc je do danych pomiarowych zebranych na rzeczywistym obiekcie można wnioskować, że jakość modelu osadnika wstępnego (definiowana jako różnice pomiędzy wartościami procesowymi generowanymi przez model i rzeczywistymi) jest dobra. Zastanawiającymi są wyniki uzyskane w pierwszej fazie szarży pomiarowej, które charakteryzują się największymi błędami. Warto w tym momencie zwrócić uwagę na przeprowadzoną analizę uzyskanych pomiarów (rozdz. 5., rys. 5.2–5.7), w którym, podobnie jak w danych generowanych przez model, dynamika zmian stężeń substancji mierzonych w ściekach napływających nie pokrywa się z dynamiką zmian stężeń po osadniku wstępnym. Niestety, aby wyciągnąć precyzyjne wnioski na temat przyczyn takich rezultatów (pomiarów i symulacji), niezbędnym jest wykonanie nowej szarży pomiarowej z większą częstotliwością (rzędu godziny) wykonywania pomiarów zmiennych procesowych po osadniku wstępnym.

Tym niemniej, podsumowując uzyskany model osadnika wstępnego, wartości błędów średnich nie przekraczające 15% maksymalnych wartości procesowych zmierzonych można przy aktualnym opomiarowaniu obiektu uznać za zadowalające. Istotny jest również fakt, że zmiany poszczególnych wartości procesowych generowane przez model odzwierciedlają zmiany wartości rzeczywistych (tzn. wzrostom wartości rzeczywistych towarzyszą wzrosty wartości generowanych przez model, a spadkom spadki). Można więc wnioskować, że dynamika tej części procesu została opisana poprawnie.

8.4.4. Wyniki optymalizacji komory z osadem czynnym oraz osadnika wtórnego

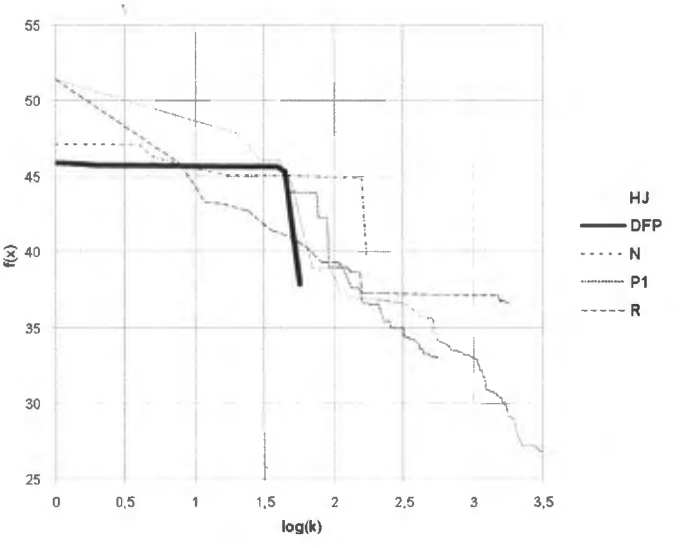
Jak zostało to omówione wcześniej, ze względu na sprzężenie zwrotne w układzie (osad zawracany) model komory z osadem czynnym był optymalizowany wspólnie z osadnikiem wtórnym. Ze względu na dużo większą liczbę parametrów to zadanie optymalizacji było zdecydowanie trudniejsze niż poprzednie (tj. optymalizacja modelu osadnika wstępnego). Co więcej, przyjęta funkcja celu może posiadać wiele minimów lokalnych. Zastosowane metody optymalizacji znalazły różne rozwiązania (lokalne). Osiągnięte funkcje celu nie we wszystkich przypadkach pokrywają się z błędem modelu, ale zawsze pokrywają się z wariancją błędu całego modelu (patrz tablice 8.4 oraz 8.5) Ponieważ funkcja celu była proporcjonalna do sumy kwadratów błędów względnych, a błąd modelu proporcjonalny jest do sumy błędów bezwzględnych, to nawet znaczne różnice funkcji celu mogą powodować niewielką zmianę błędów modelu, ale jak zauważono powyżej, różnice w wariancji są zauważalne.

Jak widać zastosowane metody optymalizacji dały różne rezultaty w postaci wartości funkcji celu. Niestety, dla tej części modelu nie można jednoznacznie stwierdzić możliwości redukcji liczby komór. Mimo, że metoda HJ dała najlepsze rezultaty, to jednak znalezione przez nią współczynniki daleko odbiegają od wartości literaturowych, dlatego, mimo dobrych wyników, nie rozważano tego rozwiązania. Podobne spostrzeżenia można przypisać metodzie R. Metoda M nie dała lepszych rezultatów niż przedstawione metody, dlatego nie uwzględniono jej w prezentacji wyników.

Tablica 8.4. Wyniki oszacowań parametrów po zastosowaniu metod optymalizacji oraz kalibracji modelu komory z osadem czynnym oraz osadnika wtórnego.

		Metoda	Kalibracja	HJ	R	P1	N	PR	DFP
		f(x)	47,55	26,80872	36,62108	33,06912	39,80333	34,53	37,87
Komora z osadem czynnym	Komora 1	μ_H	2,2	9,965472	2,20	1,980254	2,200029	2,463205	2,198028
		μ_A	0,01	0,281544	0	0,038193	0,010360	0,009735	0,010163
		b_H	0,62	0	0	0	0,620187	0,001536	0,618574
		b_A	0,05	0,574887	0	0	0,566120	0,050012	0,049344
		b_h	2,7	10	2,70	3,796454	2,700404	3,321579	2,703085
		b_a	0,5	1	0	1	0,526148	0,930360	0,505874
	Komora 2	μ_H	2,2	1,995302	2,20	2,208498	2,200739	3,342212	2,196755
		μ_A	0,01	0,01	0	0,010206	0,010194	0,000000	0,089233
		b_H	0,62	0	0	0	0,620609	0,001063	0,616755
		b_A	0,05	0,035828	0	0	0,050289	0,049932	0,051233
		b_h	2,7	5,193095	2,70	3,228603	2,700303	3,296062	2,703873
		b_a	0,5	0,240424	0	0,091069	0,500303	0,930360	0,500016
	Komora 3	μ_H	2	2,270075	2,20	2,210231	2,200684	2,070000	2,191908
		μ_A	0,01	0	0,01	0,009816	0,010350	0,010024	0,009628
		b_H	0,62	0	0	0,078533	0,620240	0,001641	0,617728
		b_A	0,05	0,043972	0	0,185006	0,050252	0,053972	0,543809
		b_h	2,7	3,703169	2,70	2,859248	2,875815	3,047921	2,700440
		b_a	0,5	0,021300	0	0,078873	0,500478	0,523434	0,494937
	Komora 4	μ_H	2	2,440743	2,16	2,198241	2,200696	2,806257	2,179881
		μ_A	0,01	0,01	0,01	0,010063	0,104470	0,013432	0,010002
		b_H	0,62	0	0	0,055273	0,629190	0,119663	0,618828
		b_A	0,05	1	0,129102	0,324479	0,057850	0,513201	0,056891
		b_h	2,7	2,671301	2,660049	2,735086	2,700866	3,481999	2,717548
		b_a	0,5	0,138373	0,535510	0,053344	0,500816	0,459020	0,499938
Osadnik wtórny	Klarowania 3	u_0	210	211	210	210	210,9605	210,960	210,1
		B	0,000623	0,000623	0,000623	0,000623	0	0	0
	Klarowania 4	u_0	210	210	209	210	209,8984	209,898	206,1366
		B	0,000623	0	0	0	0,000574	0,000574	0,000332

Najszybszymi metodami okazały się, zgodnie z oczekiwaniami, metody gradientowe. Niestety, mają one zasadniczą wadę: bardzo szybko mogą znaleźć ekstremum lokalne, którego nie będą w stanie opuścić (jest to wrażliwość na punkt startowy). Tak stało się właśnie w omawianym przypadku. Metody gradientowe nie osiągnęły najlepszych rezultatów. Rysunek 8.15 przedstawia szybkości zbieżności zastosowanych metod.



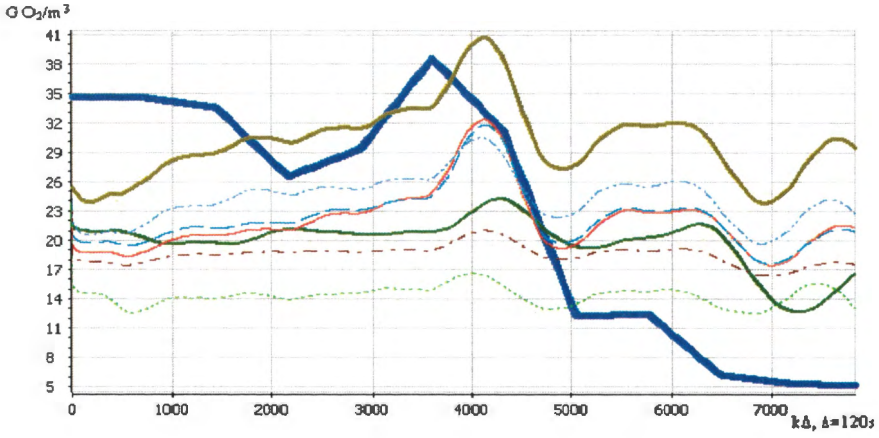
Rysunek 8.15. Zbieżności zastosowanych metod optymalizacji

Niestety, w przypadku zadania optymalizacji modelu komory z osadem czynnym oraz osadnika wtórnego trudno jest wyłonić najlepszą metodę. Wszystkie z zastosowanych metod posiadają pewne wady. Jak napisano wyżej, metody gradientowe mogą „wpaść" w minimum lokalne i zakończyć swoją procedurę. Metoda HJ, choć dała najlepsze rezultaty i była szybsza niż się spodziewano, to jednak wypracowane przez nią wartości współczynników daleko odbiegają od wartości literaturowych, mających swoje uzasadnienie technologiczne. Można jedynie powiedzieć, że do tego zadania najgorzej nadaje się metoda N, która nie dość, że okazała się czasochłonna, to jeszcze wypracowana przez nią wartość funkcji celu jest najgorsza ze wszystkich przebadanych metod.

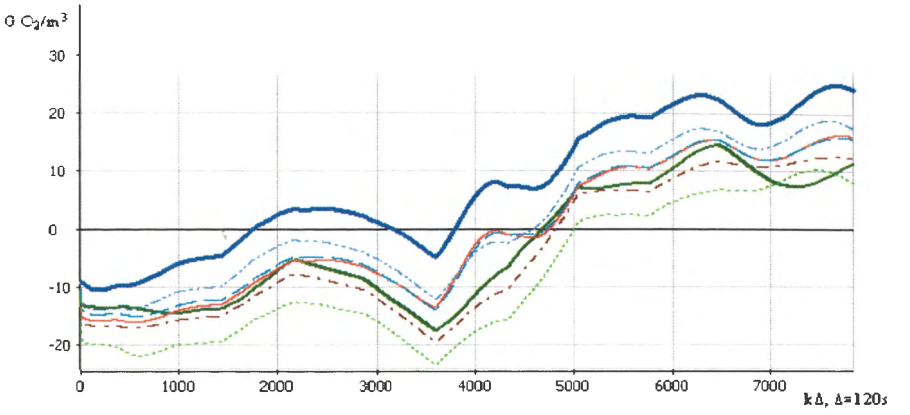
Najlepszym sposobem postępowania byłoby więc w czasie każdego procesu doboru modelu stosować wszystkie wyżej przedstawione metody, analizując wypracowane przez nie wyniki. Takie podejście do problemu jest bardzo czasochłonne, ale zapewnia dużą obiektywność postępowania. Należałoby się także zastanowić nad doborem innych metod optymalizacji, tutaj nie przedstawionych, na przykład metod genetycznych.

8.4.5. Weryfikacja modelu komory z osadem czynnym oraz osadnika wtórnego

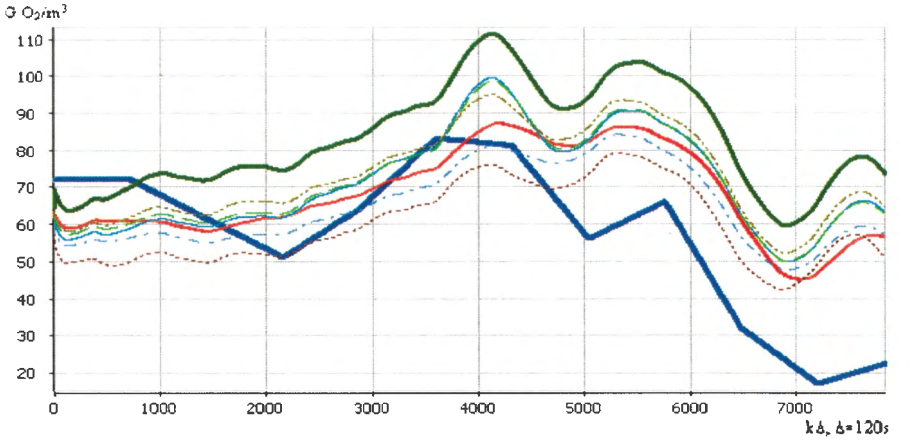
Przedstawione poniżej rysunki są wykresami przebiegów stężeń wartości procesowych w ściekach oczyszczonych, czyli na wyjściu z obiektu. Można więc je traktować jako wyniki modelowania całego procesu mechaniczno-biologicznego oczyszczania ścieków. Kolejno przedstawiono porównanie wyników uzyskanych z symulacji modelu, w którym parametry dobrano poszczególnymi metodami, oraz wartości błędów bezwzględnych pomiędzy wartościami generowanymi przez model a pomiarami rzeczywistymi.



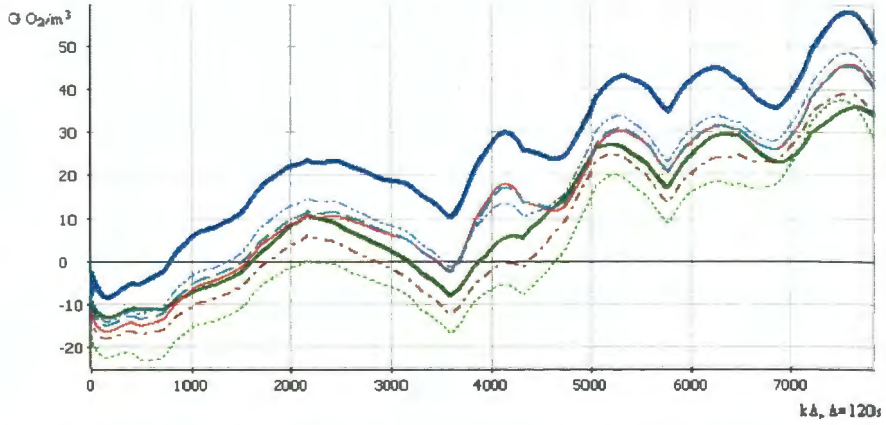
Rysunek 8.16. Wartość *Biologicznego Zapotrzebowania Tlenu* w ściekach oczyszczonych: zmierzona (*linia poczwórnie gruba, niebieska*); modelowana dla: kalibracji (*linia potrójnie gruba, brązowa*), metody HJ (*linia gruba,zielona*), R (*linia ciągła, czerwona*), P1 (*linia kreskowana, niebieska*), N (*linia kropkowana, zielona*), PR (*linia kreska-kropka, bordowa*), DFP (*linia kreska-kropka-kropka, niebieska*)



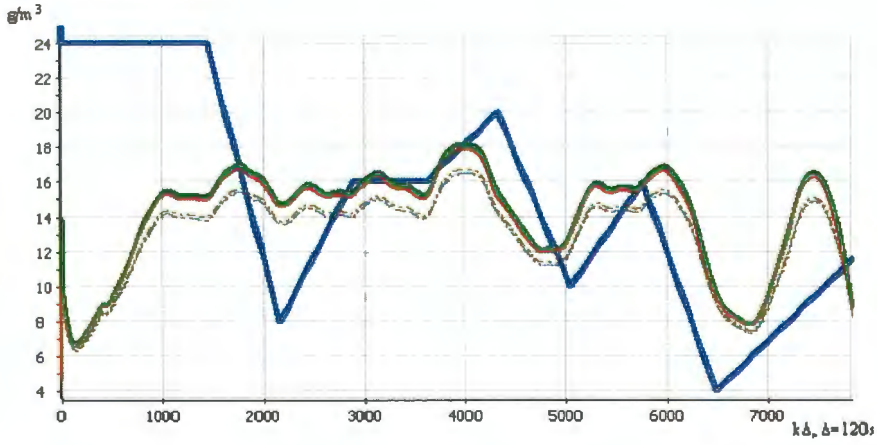
Rysunek 8.17. Wartości błędów bezwzględnych dla modelowania *Biologicznego Zapotrzebowania Tlenu* w ściekach oczyszczonych dla: kalibracji (*linia potrójnie gruba, niebieska*), metody HJ (*linia gruba, zielona*), R (*linia ciągła, czerwona*), P1 (*linia kreskowana, niebieska*), N (*linia kropkowana, zielona*), PR (*linia kreska-kropka, bordowa*), DFP (*linia kreska-kropka-kropka, niebieska*)



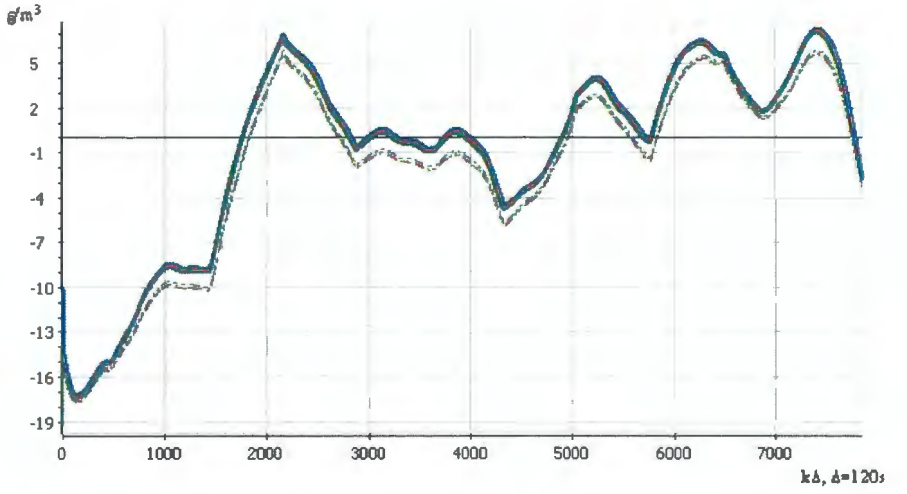
Rysunek 8.18. Wartość *Chemicznego Zapotrzebowania Tlenu* w ściekach oczyszczonych: zmierzona (*linia poczwórnie gruba, niebieska*); modelowana dla: kalibracji (*linia potrójnie gruba, brązowa*), metody HJ (*linia gruba, zielona*), R (*linia ciągła, czerwona*), P1 (*linia kreskowana, niebieska*), N (*linia kropkowana, zielona*), PR (*linia kreska-kropka, bordowa*), DFP (*linia kreska-kropka-kropka, niebieska*)



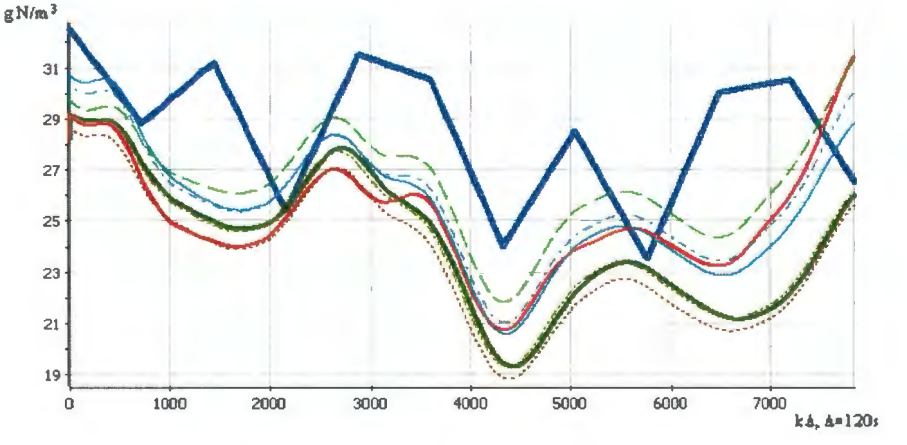
Rysunek 8.19. Wartości błędów bezwzględnych dla modelowania *Chemicznego Zapotrzebowania Tlenu* w ściekach oczyszczonych dla: kalibracji (*linia potrójnie gruba, niebieska*), metody HJ (*linia gruba, zielona*), R (*linia ciągła, czerwona*), P1 (*linia kreskowana, niebieska*), N (*linia kropkowana, zielona*), PR *(linia kreska-kropka, bordowa*), DFP (*linia kreska-kropka-kropka, niebieska*)



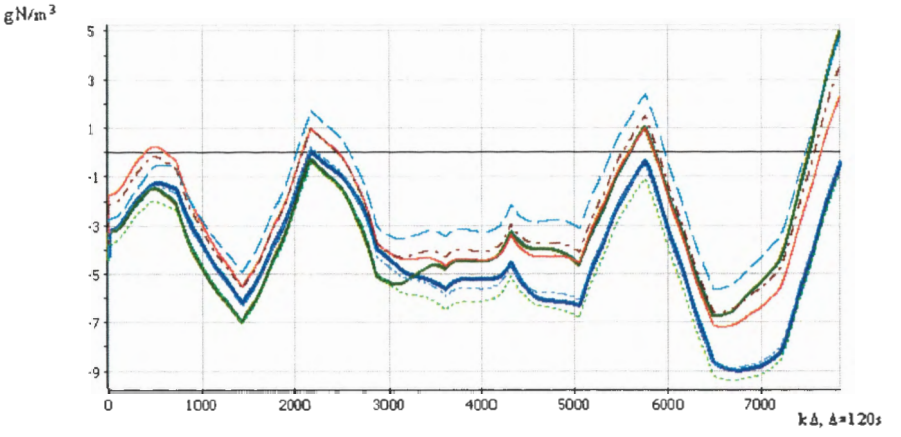
Rysunek 8.20. Wartość *Zawiesiny Mineralnej* w ściekach oczyszczonych: zmierzona (*linia poczwórnie gruba, niebieska*); modelowana dla: kalibracji (*linia potrójnie gruba, brązowa*), metody HJ (*linia gruba, zielona*), R (*linia ciągła, czerwona*), P1 (*linia kreskowana, niebieska*), N (*linia kropkowana, zielona*), PR *(linia kreska-kropka, bordowa*), DFP (*linia kreska-kropka-kropka, niebieska*)



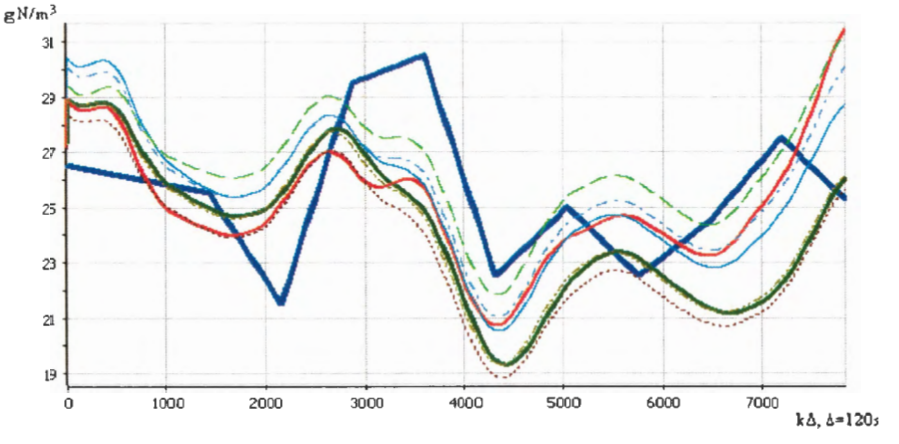
Rysunek 8.21. Wartości błędów bezwzględnych dla modelowania *Zawiesiny Mineralnej* w ściekach oczyszczonych dla: kalibracji (*linia potrójnie gruba, niebieska*), metody HJ (*linia gruba, zielona*), R (*linia ciągła, czerwona*), P1 (*linia kreskowana, niebieska*), N (*linia kropkowana, zielona*), PR (*linia kreska-kropka, bordowa*), DFP (*linia kreska-kropka-kropka, niebieska*)



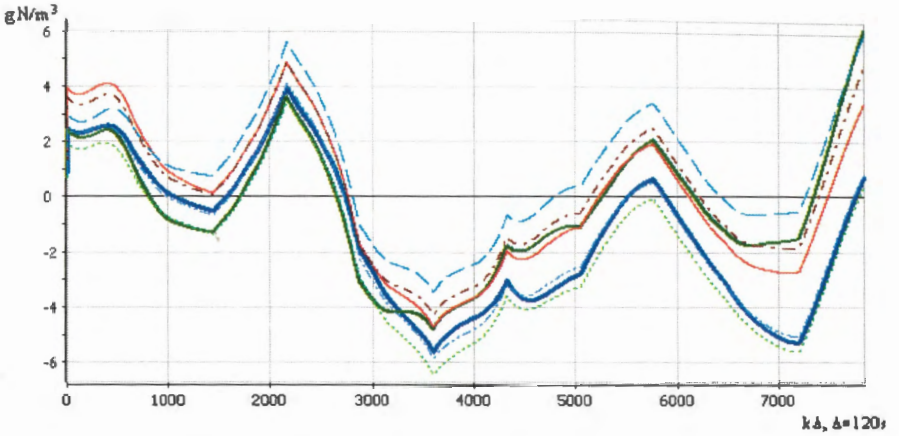
Rysunek 8.22. Wartość *Azotu ogólnego* w ściekach oczyszczonych: zmierzona (*linia poczwórnie gruba, niebieska*); modelowane dla: kalibracji (*linia potrójnie gruba, brązowa*), metody HJ (*linia gruba, zielona*), R (*linia ciągła, czerwona*), P1 (*linia kreskowana, niebieska*), N (*linia kropkowana, zielona*), PR *(linia kreska-kropka, bordowa*), DFP (*linia kreska-kropk- kropka, niebieska*)



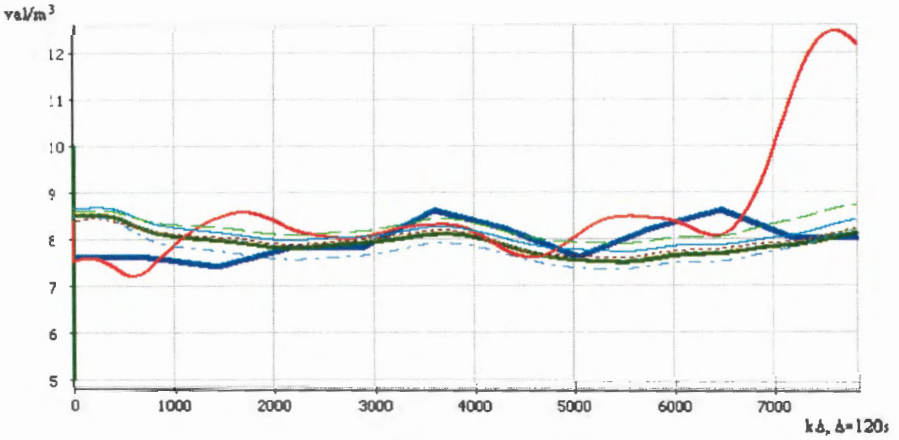
Rysunek 8.23. Wartości błędów bezwzględnych dla modelowania *Azotu ogólnego* w ściekach oczyszczonych dla: kalibracji (*linia potrójnie gruba, niebieska*), metody HJ (*linia gruba, zielona*), R (*linia ciągła, czerwona*), P1 (*linia kreskowana, niebieska*), N (*linia kropkowana, zielona*), PR *(linia kreska-kropka, bordowa*), DFP (*linia kreska-kropka-kropka, niebieska*)



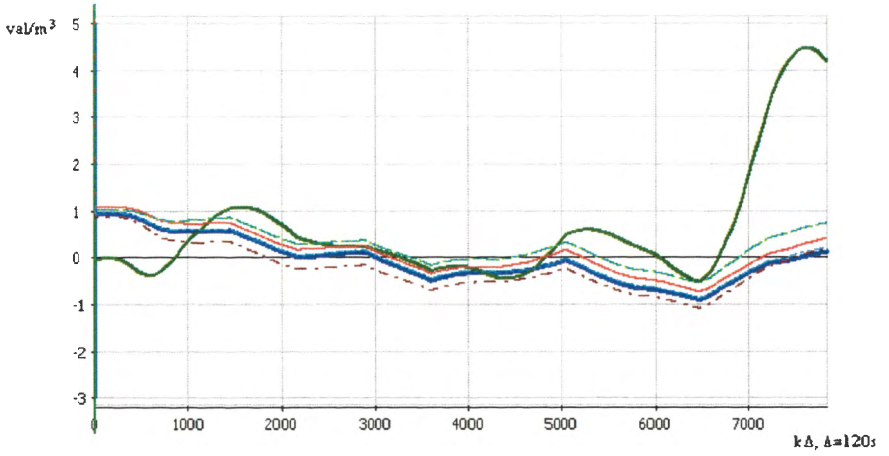
Rysunek 8.24. Wartość *Azotu amonowego* w ściekach oczyszczonych: zmierzona (*linia poczwórnie gruba, niebieska*); modelowana dla: kalibracji (*linia potrójnie gruba, brązowa*), metody HJ (*linia gruba, zielona*), R (*linia ciągła, czerwona*), P1 (*linia kreskowana, niebieska*), N (*linia kropkowana, zielona*), PR *(linia kreska-kropka, bordowa*), DFP (*linia kreska-kropka-kropka, niebieska*)



Rysunek 8.25. Wartości błędów bezwzględnych dla modelowania *Azotu amonowego* w ściekach oczyszczonych dla: kalibracji (*linia potrójnie gruba, niebieska*), metody HJ (*linia gruba, zielona*), R (*linia ciągła, czerwona*), P1 (*linia kreskowana, niebieska*), N (*linia kropkowana, zielona*), PR *(linia kreska-kropka, bordowa*), DFP (*linia kreska-kropka-kropka, niebieska*)



Rysunek 8.26. Wartość *Alkaliczności* w ściekach oczyszczonych: zmierzona (*linia poczwórnie gruba, niebieska*); modelowana dla: kalibracji (*linia potrójnie gruba, brązowa*), metody HJ (*linia gruba,zielona*), R (*linia ciągła,czerwona*), P1 (*linia kreskowana,niebieska*), N (*linia kropkowana, zielona*), PR *(linia kreska-kropka, bordowa*), DFP (*linia kreska-kropka-kropka, niebieska*)



Rysunek 8.27 Wartości błędów bezwzględnych dla modelowania *Alkaliczności* w ściekach oczyszczonych dla: kalibracji (*linia potrójnie gruba, niebieska*), metody HJ (*linia gruba, zielona*), R (*linia ciągła, czerwona*), P1 (*linia kreskowana, niebieska*), N (*linia kropkowana, zielona*), PR *(linia kreska-kropka, bordowa*), DFP (*linia kreska-kropka-kropka, niebieska*)

Analizując wyniki przedstawione na powyższych rysunkach trudno jest wybrać metodę, która znalazła najlepsze parametry modelu. Wyniki w formie tabelarycznej przedstawione zostały poniżej, przy czym warto zauważyć, iż błąd modelu nie został drastycznie zredukowany po zastosowaniu metod optymalizacji. Może to oznaczać, iż metody optymalizacji nie zostały dobrze dobrane do zadania lub też, że metodą kalibracji znaleziony został punkt bliski optymalnemu dla postawionego zadania.

Wobec bardzo zbliżonych wartości błędów pomiędzy modelami optymalizowanymi różnymi metodami a pomiarami rzeczywistymi wydaje się, że lepszym wskaźnikiem może być jakość odwzorowania charakteru zmian, niż wartości błędów. Można zgodzić się w czasie wykorzystania modelu w praktyce na pewną niedokładność ilościową wartości generowanych przez model, pod warunkiem, że wiernie będzie oddana dynamika obiektu, czyli będzie on dokładny jakościowo. Takim podejściem kierowano się przy kalibracji modelu. Oczywiście, zaprezentowany dobór współczynników występujących w aparacie matematycznym opisującym proces jest zróżnicowany, a więc i uzyskane wyniki są różne. Należałoby więc zaznaczyć, że jednym z najistotniejszych zagadnień nad jakimi należy się zastanowić przed wyborem modelu jest określenie celu, jakiemu on ma służyć.

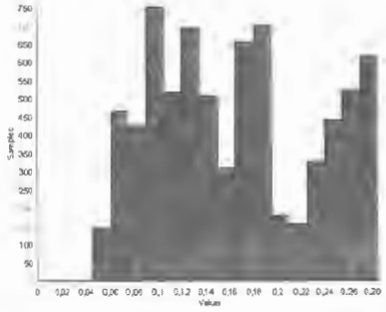
Tablica 8.5. Porównanie przyjętych wskaźników błędów dla kalibracji oraz poszczególnych metod optymalizacji modelu

$E(X_{BN})$							
Metoda:	Kalibracja	HJ	R	P1	N	PR	DFP
BZT_5	0,290573	0,264491	0,265901	0,260928	0,331709	0,298005	0,260950
ChZT	0,312534	0,174580	0,210344	0,209315	0,169900	0,170604	0,222530
X_{min}	0,203287	0,192439	0,192982	0,192695	0,194903	0,194856	0,193825
N_{OG}	0,143441	0,112574	0,097283	0,078922	0,153091	0,092085	0,134350
S_{NH}	0,091112	0,063429	0,071742	0,065643	0,089977	0,066239	0,081508
S_{alk}	0,095766	0,056086	0,044982	0,045841	0,045841	0,054114	0,045071
ŚREDNIA	**0,189452**	**0,143933**	**0,147206**	**0,142224**	**0,164237**	**0,145984**	**0,156372**
$Var(X_{BN})$							
Metoda:	Kalibracja	HJ	R	P1	N	PR	DFP
BZT_5	0,044163	0,009512	0,014930	0,013971	0,029538	0,011107	0,019680
ChZT	0,033577	0,016055	0,021818	0,022002	0,012766	0,017319	0,025780
X_{min}	0,032470	0,033388	0,032991	0,033189	0,035020	0,034868	0,034336
N_{OG}	0,005333	0,003112	0,003939	0,001886	0,005144	0,003108	0,005252
S_{NH}	0,002852	0,001840	0,001785	0,001939	0,003580	0,001672	0,002925
S_{alk}	0,001025	0,016705	0,001290	0,001361	0,001361	0,001002	0,000967
ŚREDNIA	**0,019903**	**0,013435**	**0,012792**	**0,012391**	**0,014568**	**0,011513**	**0,014823**
$\sigma(X_{BN})$							
Metoda:	Kalibracja	HJ	R	P1	N	PR	DFP
BZT_5	0,210149	0,097531	0,122187	0,118199	0,171865	0,105391	0,140285
ChZT	0,183240	0,126708	0,147709	0,148331	0,112986	0,131601	0,160562
X_{min}	0,180195	0,182723	0,181635	0,182179	0,187137	0,186730	0,185301
N_{OG}	0,073026	0,055789	0,062759	0,043433	0,071721	0,055752	0,072471
S_{NH}	0,053407	0,042893	0,042244	0,044030	0,059832	0,040890	0,054080
S_{alk}	0,032009	0,129248	0,035912	0,036896	0,036896	0,031660	0,031091
ŚREDNIA	**0,141079**	**0,115911**	**0,113101**	**0,111317**	**0,120698**	**0,107298**	**0,121751**

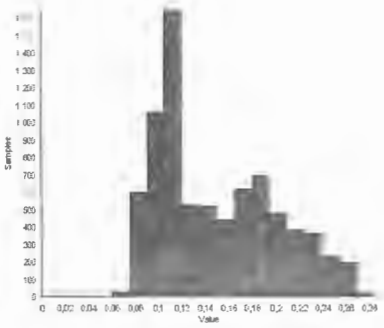
Podsumowując uzyskane wyniki można powiedzieć, że z uwagi na ilość dostępnych pomiarów oraz ich dokładność, a także złożoność procesu, są one zadowalające. Graficzną prezentację rozkładu błędów przedstawiono na rysunkach 8.28.

Jak widać na powyższych rysunkach, po zastosowaniu metod optymalizacji modelu rozkład błędów znacznie się poprawił, szczególności dla metod P1 i PR.

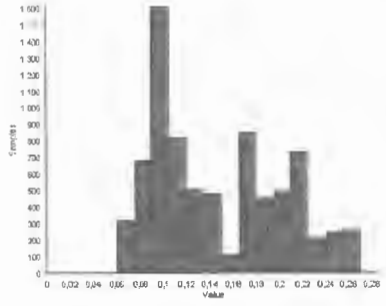
a)



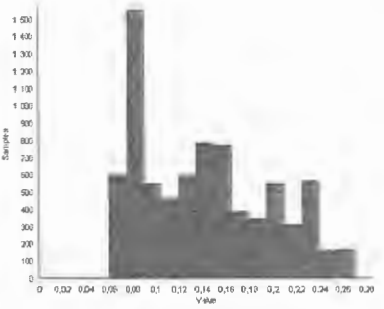
b)



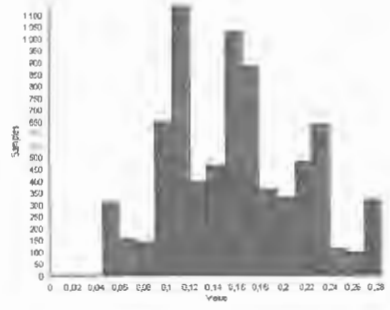
c)



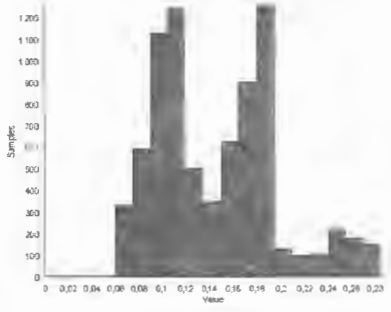
d)



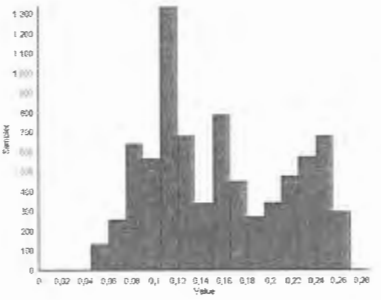
e)



f)



g)



Rysunek 8.28. Graficzna prezentacja rozkładu błędów w postaci histogramów dla: a) kalibracji, b) metody HJ, c) metody R, d) metody P1, e) metody N, f) metody PR, g) metody DFP

Podsumowując uzyskane wyniki można przyjąć, że po wstępnym procesie kalibracji a następnie optymalizacji udało się uzyskać poprawny opis badanego obiektu, przy średnich wartościach błędów rzędu 15% maksymalnych wartości procesowych. Najsłabszą zgodność między modelem i pomiarami uzyskano dla biologicznego zapotrzebowania tlenu. Można podejrzewać, iż wynika to z błędów pomiarowych popełnionych podczas przeprowadzania eksperymentu biernego na obiekcie, chociaż dokładna ocena tej rozbieżności wymagałaby wykonania następnych pomiarów.

IBS PAN Sena
45905
Bibl. podręczna

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