污水处理数学模型的发展与实时模拟预测

施汉昌

清华大学 环境学院

京津冀国家技术创新中心

2024.04

中国水协青年工作委员会

CONTENTS

1. 污水生物处理数学模型的发展

-- 机理模型-ASM模型

-- 数据模型-ANN模型

2. 基于模型的实时模拟预测

-- 工程模型-STEM模型

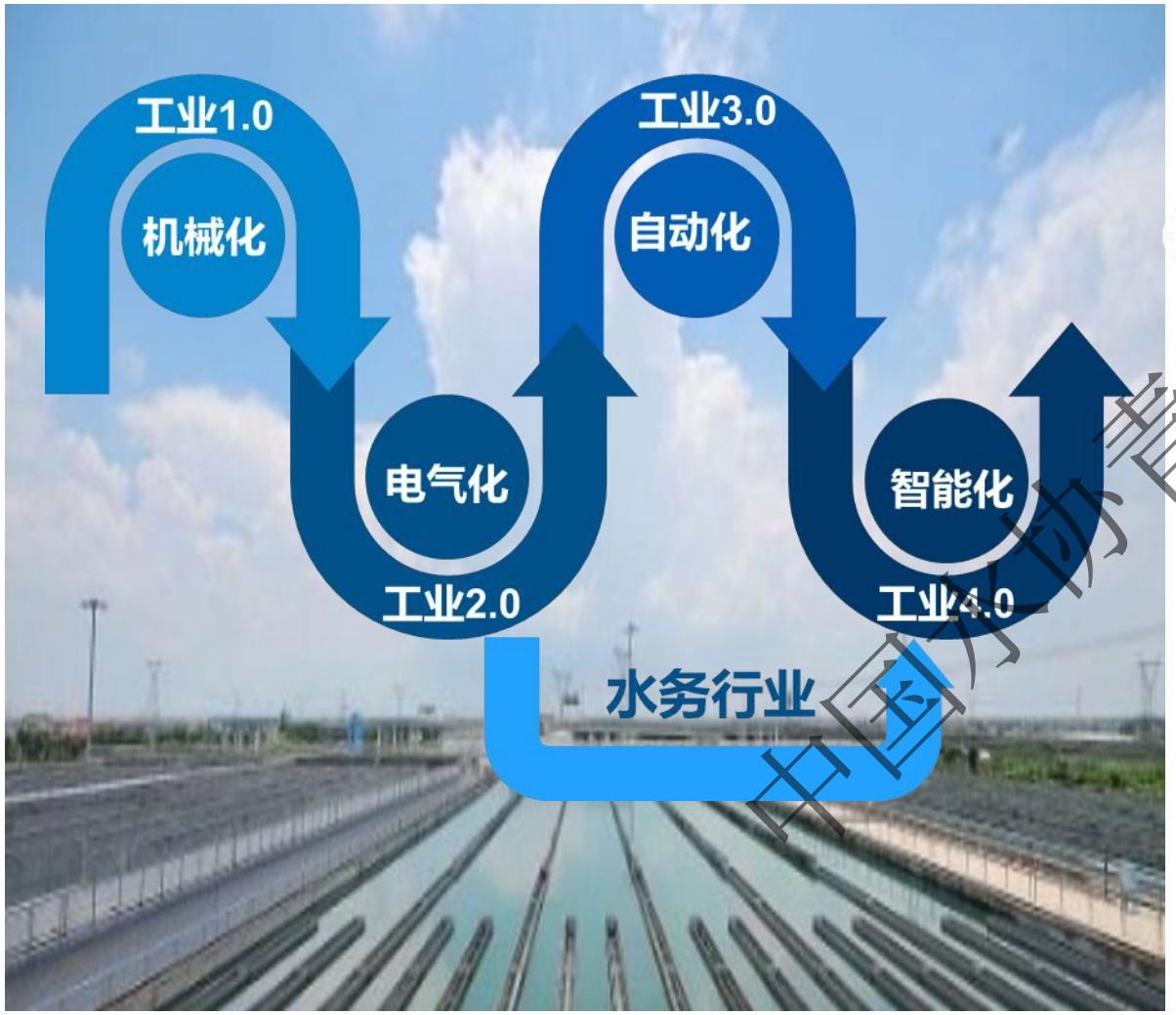
3. 结论与展望

中国水协青年工作专用

01 污水生物处理数学模型的发展

中国水协青年会专用

污水处理智能化的发展机遇

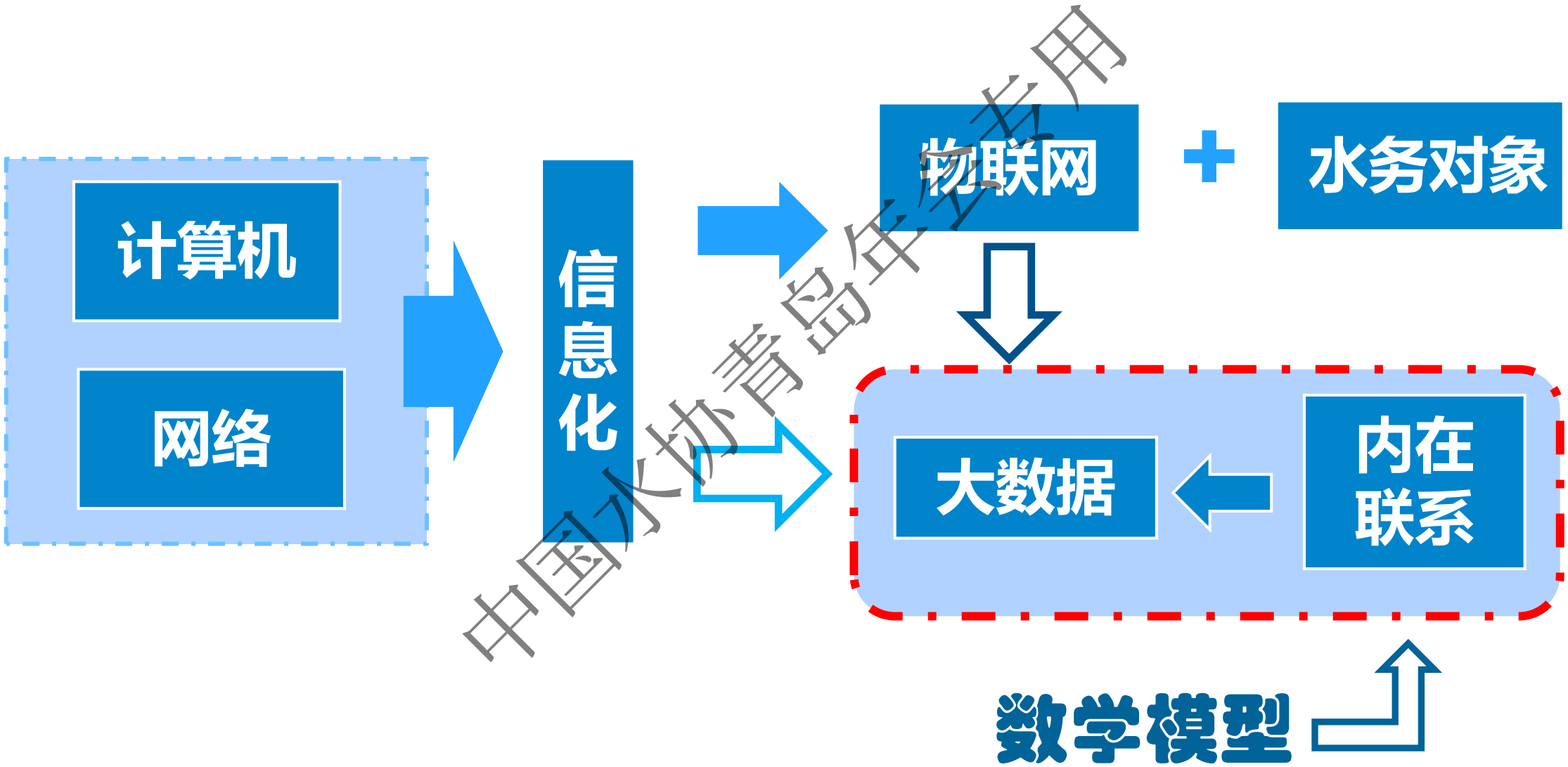


面临的任务：

- ✓ **优化工艺** ⇨ 依据进出水的特点，优化工艺条件和运行参数进行技改；
- ✓ **提升装备** ⇨ 淘汰不良装备，加强运维，提升稳定性和可调节性；
- ✓ **规范管理** ⇨ 改粗放管理为精细化管理，实现信息数据的规范化；
- ✓ **凝练模型** ⇨ 理论+实践的分析总结，实现运行经验的数字化。

中国水协青岛年会专用

污水处理智能化需要解决的问题



中国水协青岛年会专用

智能化的核心是数学模型

- **分析的基础是挖掘大数据的内在联系，找出规律，实现其数学表达，模型是智能化的核心。**



1955 Eckenfelder模型	1987-1999 ASM1-2-3 模型	1985 BP-ANN 模型	2021 STEM 模型	2020 Open AI 模型
优点：模型简单，参数少，易调整 **缺点**：不能适应发展描述复杂的生化过程	**优点**：能详细描述生化反应的多个过程 **缺点**：模型复杂，参数多，模型校准工作量大	**优点**：模型适应性广，能用于模拟预测 **缺点**：需依靠大量数据训练，模型校准较复杂	**优点**：模型实时性较好，参数少，易校准 **缺点**：需依靠一定数量的工程经验数据	**优点**：模型的最新发展，能模拟复杂问题 **缺点**：模型很复杂，需要依靠强大的算力

中国水协青岛年会专用

污水生物处理动力学模型的发展

污水生物处理动力学模型的研究起始于20世纪50年代；

众多学者深入地研究了基质降解和微生物生长的规律，以便更合理地进行构筑物的设计与运行。

- **基本模型： Monod方程**

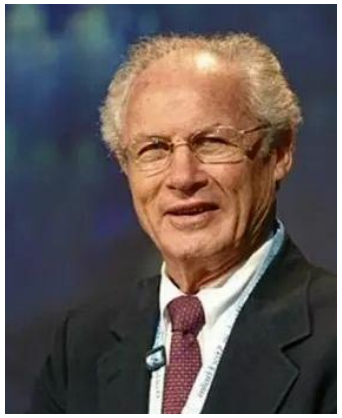
$$\mu = \frac{\mu_m \cdot S}{Ks + S}$$

- **经验模型：Eckenfelder模型(1955)**

对数生长期	减速生长期	内院呼吸期
S↓ B↑ rate↑	S↓ B↑ rate↓	S↓ B↓ rate “—”
$\frac{dx}{dt} = k_1 X$	$\frac{ds}{dt} = -K_2 XS$	$\frac{dx}{dt} = k_3 X$



美国
W.W. Eckenfelder
1955年，提出Eckenfelder模型



美国
P.L.McCarty
1970年提出Lawrence-McCarty模型，将Monod引入废水处理领域

中国水协青岛年会专用

机理模型-ASM模型

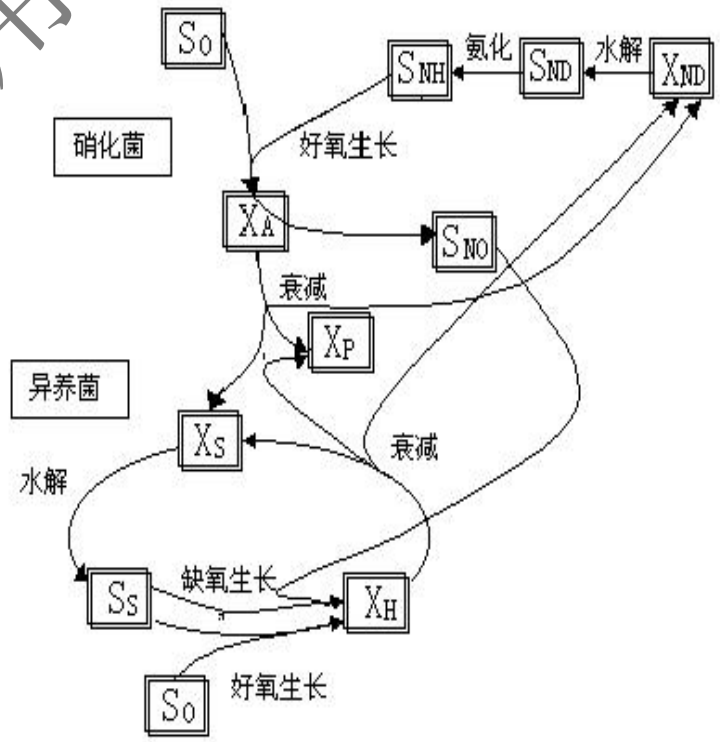
- **活性污泥法机理模型**

ASM模型是国际水质协会（IAWQ）于1983年成立课题组开展研究，并于1987年发表了活性污泥ASM1号模型 。

ASM1模型综合了活性污泥碳氧化、硝化、反硝化的三个过程，全面体现了活性污泥系统的主要功能，成为活性污泥机理模型研究和模拟软件开发的基础。

1994年发表ASM2，ASM2中包含了磷生物和化学去除过程的模型描述，1998年发表了ASM2D模型 。

1999年发表了ASM3模型，为修正ASM1存在的一些问题而提出的。



ASM1模型由8个过程、13个组分和24个动力学参数及系数构成。

中国水协青年会专用

ASM1模型（碳氧化、硝化与反硝化）的过程动力学和化学计算表

组分i / 过程j	1 S_I	2 S_S	3 X_I	4 X_S	5 $X_{B,H}$	6 $X_{B,A}$	7 X_E	8 S_O	9 S_{NO}	10 S_{NH}	11 S_{ND}	12 X_{ND}	13 S_{ND}	过程速率 ρ_j $ML^{-3}T^{-1}$
1. 异养菌的好氧生长		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$\frac{Y_H-1}{Y_H}$		$-i_{XB}$			$\frac{i_{XB}}{14}$	$\mu_H(\frac{S_S}{K_S+S_S})(\frac{S_O}{K_{O,H}+S_O})X_{B,H}$
2. 异养菌的缺氧生长		$-\frac{1}{Y_H}$			1				$-\frac{1-Y_H}{2.86Y_H}$	$-i_{XB}$			$\frac{1-Y_H}{14\times2.86\times Y_H}-i_{XB}/14$	$\mu_H(\frac{S_S}{K_S+S_S})(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H}+S_O})(\frac{S_{NO}}{K_{NO}+S_{NO}})\eta_g X_{B,H}$
3. 自养菌的好氧生长						1		$\frac{Y_A-457}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$-i_{XB}-\frac{1}{Y_A}$			$-i_{XB}/14-1/7Y_A$	$\mu_A(\frac{S_{NH}}{K_{NH}+S_{NH}})(\frac{S_O}{K_{O,A}+S_O})X_{B,A}$
4. 异养菌的衰减				$1-f_E$	-1		f_E					$i_{XB}-f_E i_{XE}$		$b_H X_{B,H}$
5. 自养菌的衰减				$1-f_E$		-1	f_E					$i_{XB}-f_E i_{XE}$		$b_A X_{B,A}$
6. 溶解有机氮的氨化										1	-1		1/14	$k_a S_{ND} X_{B,H}$
7. 捕集有机物的水解		1		-1										$k_h\frac{X_S/X_{B,H}}{K_X+X_S/X_{B,H}}(\frac{S_O}{K_{O,H}+S_O}+\eta_h(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H}+S_O})(\frac{S_{NO}}{K_{NO}+S_{NO}}))X_{B,H}$
8. 捕集有机氮的水解											1	-1		$\rho_7(X_{ND}/X_S)$
转换速率	$\gamma_i=\sum_j \nu_{ij}\rho_j$													

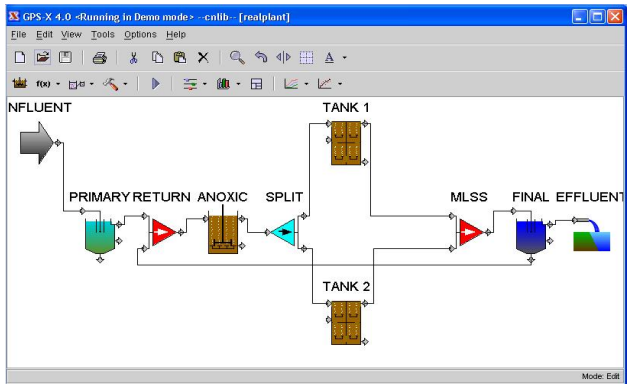
中国水协青岛年会专用

- **全面详细地用数学模型表达了污水处理的生化反应过程，可用于定量计算。**

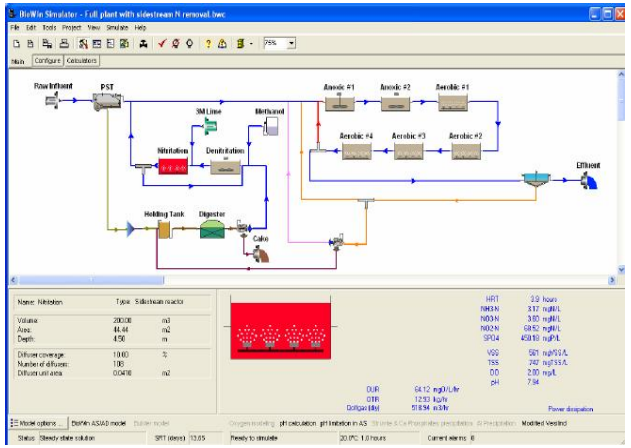
机理模型用于污水处理厂的过程模拟

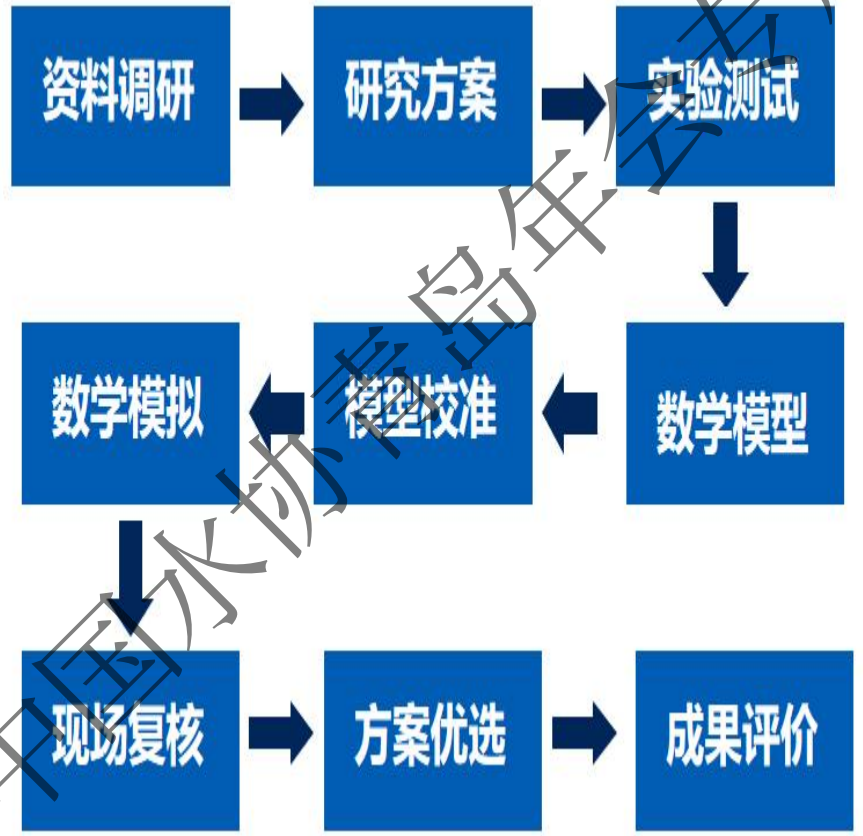
污水处理工艺的模拟软件

- GPS-X软件

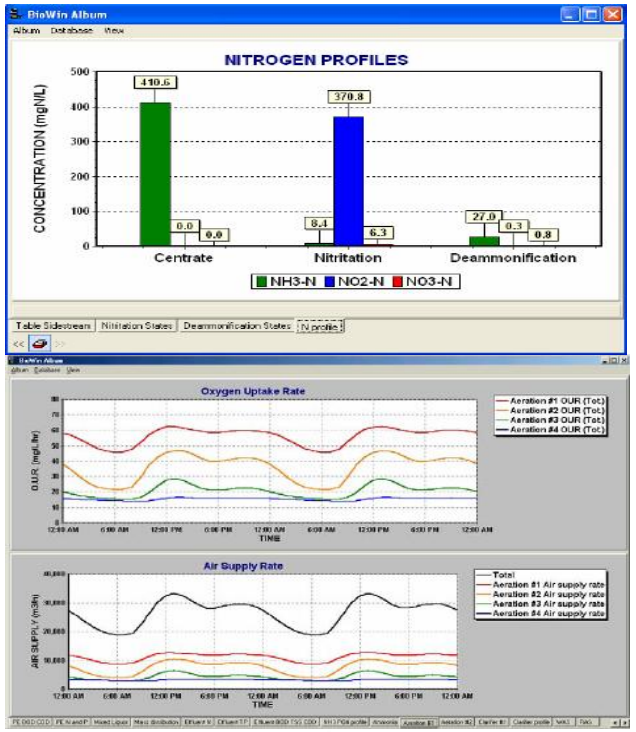


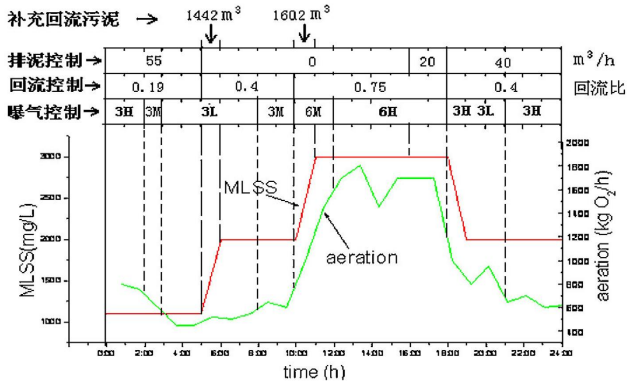
- BioWIN软件





模拟软件的应用流程





中国水协青岛年会专用

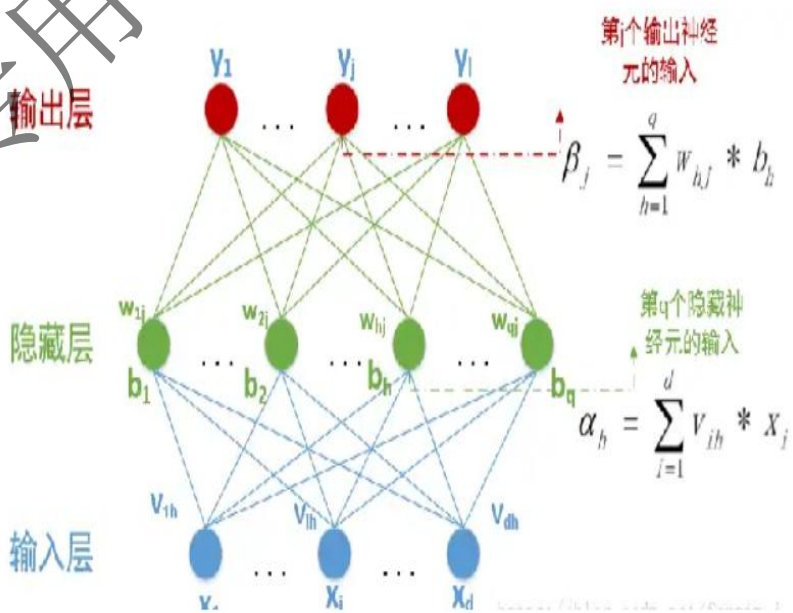
数据模型-ANN模型

- **数据模型**

数据模型是基于大量数据对现实对象特征的抽象，可从抽象层次上描述系统的静态特征、动态行为和约束条件。

人工神经网络（ANN）算法是一种模拟人脑神经元网络进行信息处理的算法。它通过建立大量的神经元节点，并将这些节点以某种方式相互连接，形成一个复杂的网络结构。

在实际应用中，人工神经网络算法的实现需要选择合适的网络结构、激励函数、学习算法等参数，并依据实际数据进行大量的训练和测试。。

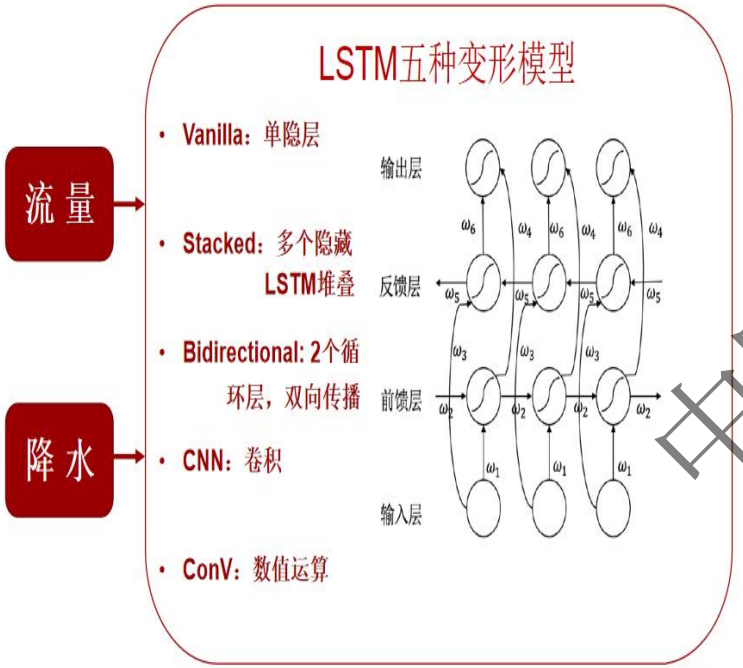


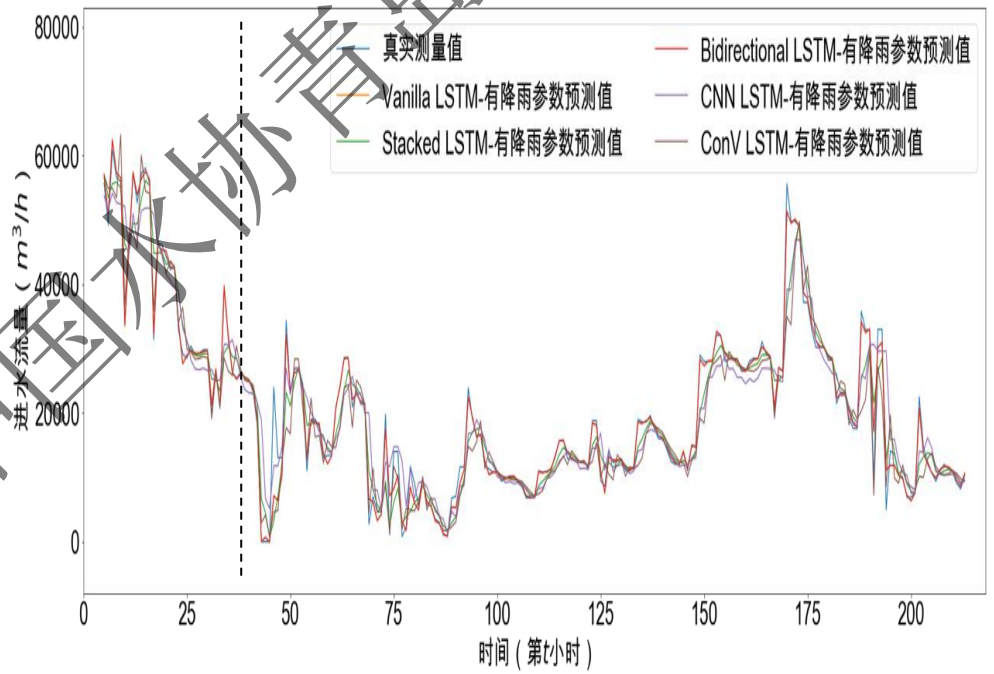
通过建立神经元节点，并相互连接成复杂的网络结构。节点代表一种特定激励函数，每两个节点间的连接都具有一个权重。。

中国水利学会年会专用

数据模型用于污水处理厂进水流量的预测

- 数据：江苏省某污水厂实际测量值（流量+区域内降水）共计552条，采集间隔1小时
- 方法：Vanilla LSTM、Stacked LSTM、Bidirectional LSTM、CNN LSTM、ConV LSTM
- 评价 $$R^2 = 1 - \frac{\sum_{t=1}^{n}(\hat{y_t} - y_t)^2}{\sum_{t=1}^{n}(\bar{y} - y_t)^2} = 1 - \frac{(\sum_{t=1}^{n}(\hat{y_t} - y_t)^2)/n}{(\sum_{t=1}^{n}(\bar{y} - y_t)^2)/n} = 1 - \frac{MSE(\hat{y}, y)}{Var(y)}$$





Bidirectional LSTM 模型最优的实验参数条件为隐藏层单元个数 250，迭代轮数 200，训练集样本数 250。输入流量和降水两种参数的实测数据，训练好的模型的模拟结果 R^2=0.9977

中国水协青岛年会专用

机理模型与数据模型的比较

	机理模型 （ASM）	数据模型 （ANN）
模型类别	白箱模型	黑箱模型
计算形式	微分方程，线性方程等	加权求和，激活函数，误差计算，卷积操作等
参数特点	动力学参数、化学计量学参数，**多**	权重参数、偏差参数，**多**
校准与训练	参数校准量大，**复杂**	训练次数多，反复训练，**复杂**
数据量	所需数据量适中，非常规数据多	所需数据量大，常规数据
适合过程	一般化学过程、生物化学过程	物理过程、一般化学过程

中国火协青岛年会专用

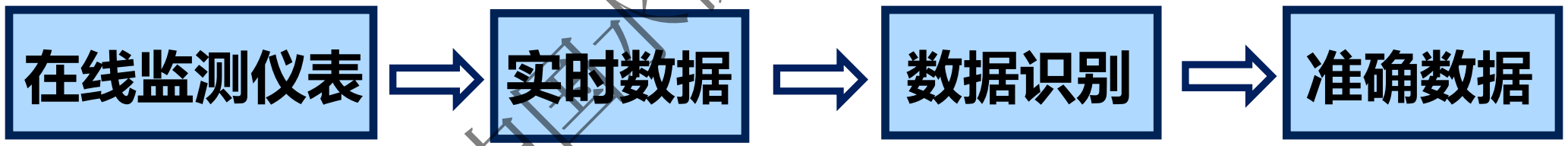
02 基于模型的实时模拟预测

中国水协青年会专用

污水处理过程的实时模拟预测

实时模拟预测

- 实时模拟预测是一种结合**实时数据**和**模拟模型**来进行未来事件预测的方法。
- 首先依赖于收集和分析实时数据，以了解当前的系统状态和环境条件。
- 然后，数据被输入到一个模拟模型中，该模型能够模拟真实世界系统的动态行为。
- 通过运行模拟，可以预测未来一段时间内的系统状态或事件，从而为决策者提供及时且准确的信息，以支持决策制定、风险评估和应对策略。



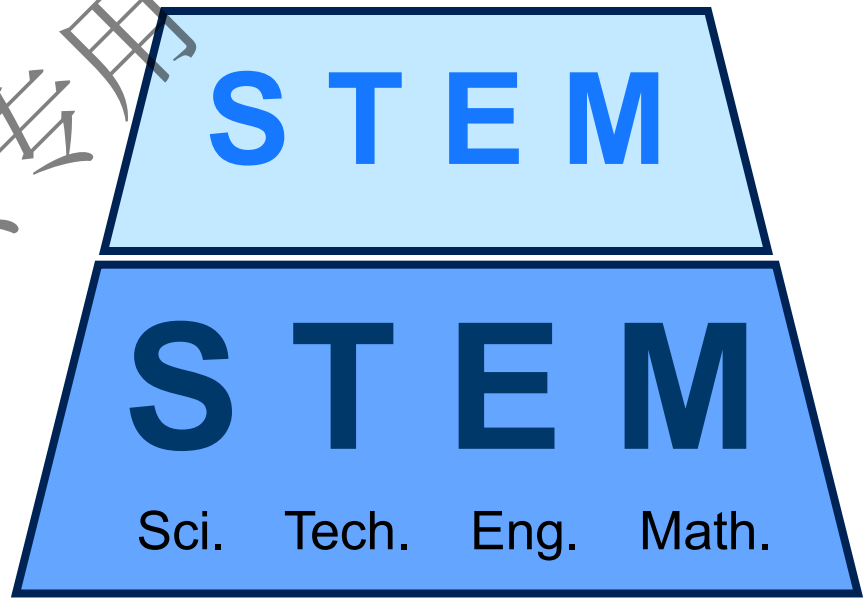
模拟模型：常规数据、快速参数、计算简单、相对准确

中国水协青岛年会专用

污水处理的STEM模型（Sewage Treatment Engineering Model）

- 目标是建立一种基于污水处理原理与工程规范参数相结合的污水处理工艺水质水量计算方法及模型。
- 尽量采用污水处理厂常规的检测参数和采用简单易测比较快速的指标。
- 在数据趋势正确的前提下，允许适当的误差，以降低计算量，提高计算速度。
- 以进水各参数的污泥负荷为核心参数与动力学参数及处理效果相关联；

满足污水处理厂优化运行和自动控制的工程应用需求。



核心参数：

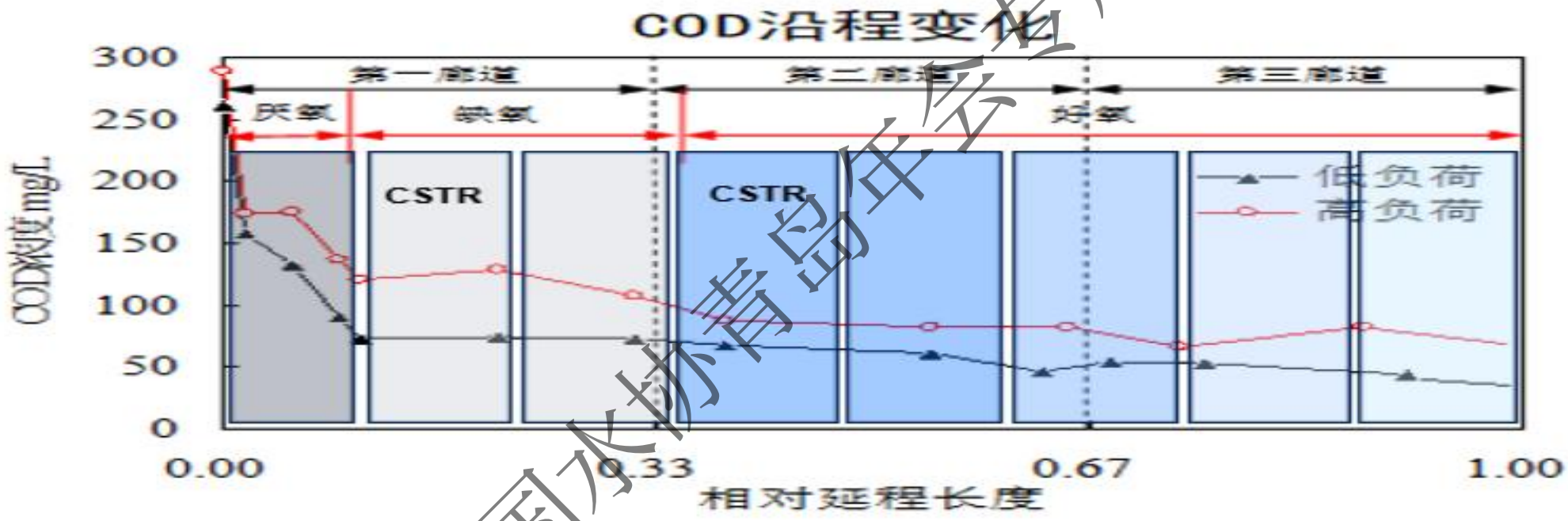
污泥负荷 ➡ F/M

单位微生物所承受污染物的量

中国水协青岛年会专用

污水处理的STEM模型（Sewage Treatment Engineering Model）

污水处理工艺沿程污染物浓度的变化



中国水协青岛年会专用

- 以多级串联的CSTR反应器建立概化模型，模拟全工艺流程的过程参数。
- 根据HRT将工艺单元分成多个CSTR反应器在每个反应器中的浓度可以近似地看作是线性变化，由此可以简化成线性方程或多项式方程计算。

污水处理的STEM模型（Sewage Treatment Engineering Model）

过程系数参数	COD	SS	NH_3-N	NO_x	TN	PO_4	TP	DO	SVI	计算原理
初次沉淀	E (25 -33%)	E (50 -70%)	E (8 - 9%)		E (8 - 10%)		E (8 - 10%)			$L_1=Q_{1i}/(\pi D_1^2/4)$ 水力负荷 C_{1ej}=根据水力负荷和去除率计算出水水质
厌氧过程						k_2(0 -0.8)			0.8L_{si} ×300	$Lsi=C_{1iCOD}\times Q_{1i}\times 24/[C_{2MLSS}\times(L_4\times W_4\times H_4)]$ (≥ 0.3 1/d) 污泥负荷 C_{2ij}=其他物质浓度只受外回流稀释作用的影响 C_{2eCOD}=初沉池出水 COD 浓度 –聚磷菌释磷吸收的 COD 浓度 C_{2ePO4}=0.75 初沉池出水 TP 浓度+释磷增加的磷酸盐浓度
缺氧过程										C_{3ij}=内回流过程引起的浓度变化 C_{3eCOD}=反硝化脱氮导致的 COD 浓度降低 C_{3eNO}(实测值)
好氧过程	k_3(0.5-1.5) Y_H=0.67× Lsi+0.3 υ_m=-26Lsi +17.6 h_c(0.2-0.5)		k_4(0.5-1.5) μ_{Am}=-11.9 Lsi_n+1.1 h_a(0.2-0.5)	k_5 (0.5- 1.5) h_n (0.2- 0.5)		h_p (0.3- 0.6)		k_{oc} (0.3- 0.6) k_{oa} (0.5- 0.7)		C_{4eCOD}=在一定 DO 浓度下异养菌降解有机碳剩余的 COD 浓度 C_{4eNH}=在一定 DO 浓度下硝化过程剩余的氨氮浓度 C_{4eNO}=好氧池进水硝酸盐浓度+氨氮氧化产生的硝酸盐浓度 C_{4ePO4} (实测值) C_{4DO} (实测值)
二次沉淀									k_1(1.0- 1.4)	C_{MLSS}=回流混合过程导致的污泥浓度变化 L_{5ss}=单位时间通过二沉池截面的悬浮固体量 C_{5ess}=基于悬浮固体表面负荷的悬浮固体流出浓度 C_{5ej}=二沉池进水浓度+流出悬浮固体中所含浓度
过滤过程										$C_{6ej}=C_{4ej}$-流出悬浮固体中所含浓度 $C_{6ess}=0$ $C_{6eTN}=C_{4eNH}+C_{4eNO}$
去除率	$E_{Tj}=(C_{1j}-C_{6j})/C_{1j}$ (总去除率) $E_{nj}=(C_{nij}-C_{nej})/C_{nij}$ (分段去除率)									

6种反应器

7个水质参数

6个运行参数

6个动力学参数

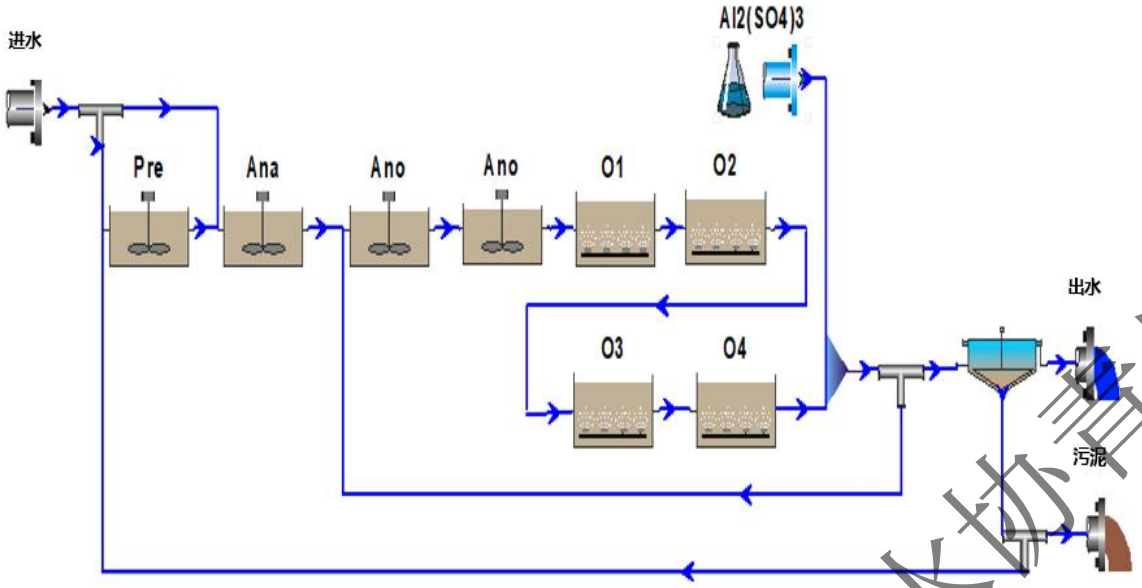
8个校准系数

19个计算方程

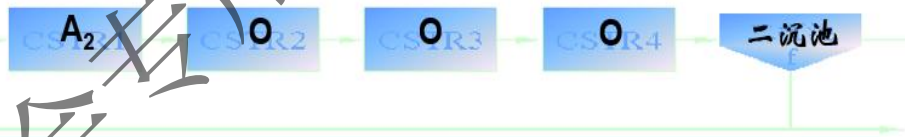
中国水协青年会专用

污水处理的STEM模型（Sewage Treatment Engineering Model）

串联CSTR工艺概化模型



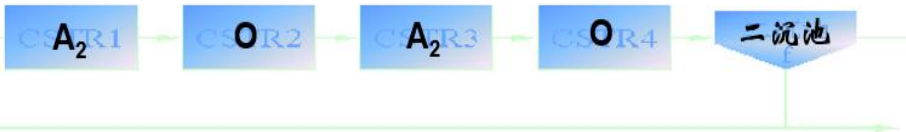
缺氧 - 好氧工艺(AO):



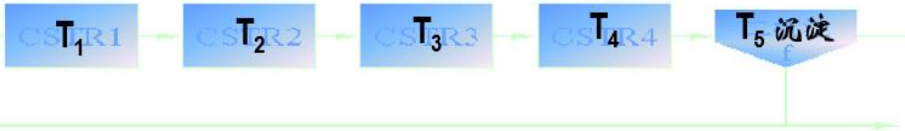
厌氧 - 缺氧 - 好氧工艺(A2O):



氧化沟工艺(交替缺氧、好氧):



SBR工艺 (在一个周期内，时间上的推流、空间上的完全混合):



通过建立污水处理工艺的概化模型，可以将一个很长的工艺转换成串联CSTR反应器的形式。不同CSTR反应器的组合可以表征各种不同的污水处理工艺。 然后用STEM模型对各个CSTR反应器进行模拟计算，再综合得到处理结果。

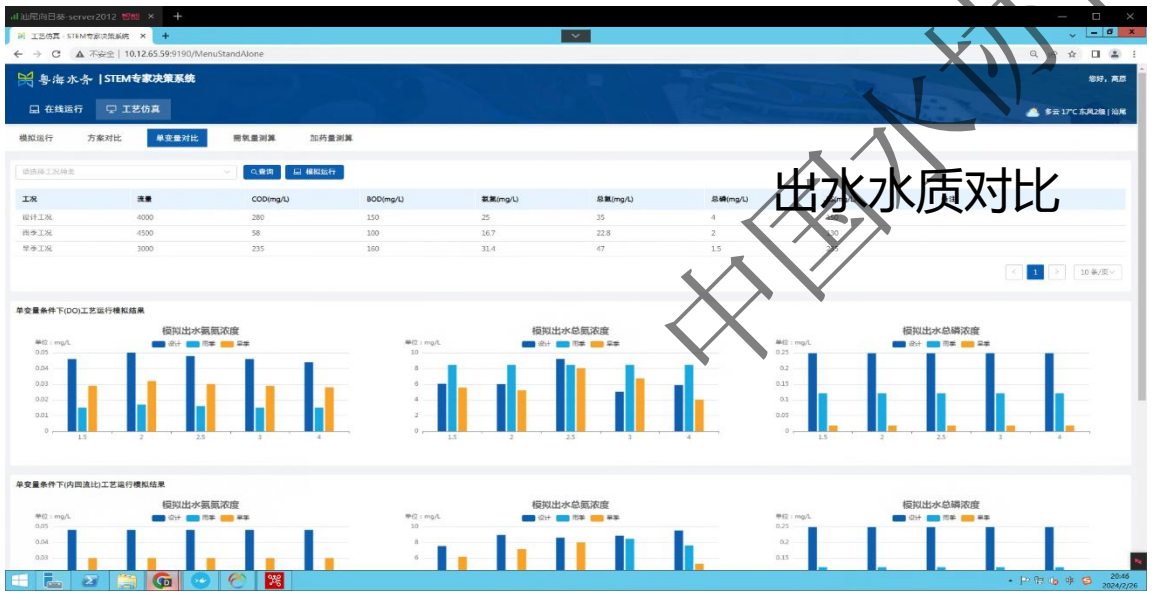
中国水协青岛年会用

基于STEM模型的污水处理工艺模拟软件





概化模型构建



出水水质对比



过程水质预测

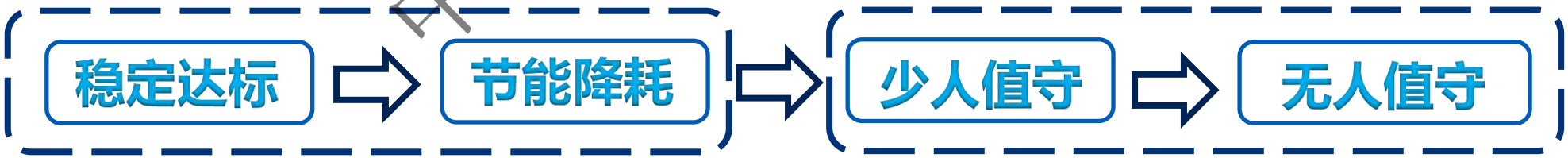
中国水协青岛展厅专用

03 结论与展望

中国水协青岛年会专用

发展与展望

- 污水处理智能化是信息化大潮推动的必然趋势，是水务行业的刚需。污水处理领域基础薄弱、欠账很多，需要实事求是、因地制宜地推进。
- 污水处理数学模型的专业化发展将成为推动水务数字化、智能化的重要支撑。AI技术的快速发展及其与专业模型的结合将推动全新水务运营模式的产生。



中国水协青岛年会专用

谢谢！

Thanks！

中国水协青岛年会专用