

厌氧消化过程系统动力学模型构建方法研究

阎 中¹, 王凯军²

(1 北京市环境保护科学研究院, 北京 100037; 2 清华大学环境科学与工程系, 北京 100084)

摘要: 厌氧消化过程具有非线性、超复杂、多反馈等诸多特点, 传统数学模拟方式存在诸多不足与缺陷, 尤其在模型的进化过程中存在较大的局限性。针对如上问题, 研究引入系统动力学 (SD) 理论, 采用 SD 建模方法构建了厌氧消化过程的数学模型。本文详细介绍了厌氧消化过程系统动力学分块混箱模型 (ABMM) 的构建理论, 步骤及方法, 并利用实验室规模 EGSB 反应器进行了验证。研究结果表明, 基于 SD 方法建立的厌氧消化过程数学模型具有模型结构简单、信息再现性强、易于理解、方法融合性强等系列优势。在给定条件下可以实现相对较为理想的模拟效果。

关键词: 系统动力学; 厌氧系统; 表函数; 分块建模; 分块混箱

中图分类号: X703; S216.4 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-1166(2009)02-0003-06

Study on System's Dynamic Model of Anaerobic Digestion Process / YAN Zhong¹, WANG Kaijun² / (1. Beijing Municipal Research Institute of Environmental Protection, Beijing 100037, China; 2. Department of Environmental Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: Anaerobic digestion system is a multi-variables, strong correlative, strong non-linear and extreme complicated system. Traditional modeling methods have some deficiencies. According to the problems before-mentioned, a system dynamics (SD) is put forward to construct the model of anaerobic digestion system. This paper introduced the theory, modeling procedure, and method of the system dynamics, and validated the results by a lab-scale EGSB reactor. Results show that the model constructed by system dynamics have many advantages, such as simplicity of model's construction, better reappearance of the information, easier for understanding, combination of different methods, and so on. On given condition, this model can give a well simulation result.

Key words: system dynamics; anaerobic system; table function; blocking modeling; blocking multi-box model

近年来,随着人们对厌氧消化反应过程认识的深入及计算技术的进步,厌氧反应数学模型的研究不断取得新进展。到目前为止,厌氧消化数学模型逐渐分化为两种主要类型:白箱结构模型与黑箱功能模型。白箱结构模型以 Andrews 模型、ADM1 为主要代表^[1,2],其构建要求对模拟过程的机理有充分的了解,在此基础上利用微分方程分别描述所有过程,并最终加以综合;黑箱功能模型以人工神经网络、专家系统为主要代表^[3,4],其构建不要求对机理有深入认识,仅需在模拟前确定模型结构,并通过训练过程不断调整,最终促使模拟结果不断趋近于实际测试结果。

研究表明,无论白箱模型或黑箱模型,均可以对特定反应器实现较好的模拟效果^[5,6]。但二者也存

在一定的缺陷与不足,如白箱模型的结构复杂,模拟结果过于依赖初始参数选择的准确性,且很难对未知过程进行模拟;黑箱模型存在说明性不强、扩展性较差、难以利用已有研究成果等。需要特别指出的是,随着厌氧微生物学的研究不断深入,结构模型可能产生难以避免的“蝴蝶效应”,即微小扰动下结果准确性的大幅降低,而随着厌氧机理的逐渐深入与完善,黑箱模型的发展及其必要性将逐渐趋于减弱。

基于以上原因,王凯军等提出采用系统动力学方法 (SD) 构建厌氧消化反应过程的数学模型^[7],并初步构建了以葡萄糖为进水基质的厌氧反应器系统动力学模型。本文参考厌氧消化领域的最新研究进展,结合系统动力学的特点与优势,构建相对完备的厌氧消化反应过程 SD 模型。

收稿日期: 2008-11-25

项目来源: 国家 863 计划“水污染控制技术与治理工程”重大专项 (2002AA601990)

作者简介: 阎 中 (1981-), 男, 助理工程师, 主要研究方向为污水处理数学模拟, E-mail: yanzhong16@126.com

1 系统动力学的建模理论

广义的数学模型可以划分为概念模型(思维模型)与正规模型(形象模型、物理模型、数学模型)两种主要类别^[8]。传统的建模过程往往只关心后者,但事实表明,科学研究逐渐深入到微观层次,人们对系统本质的认识反而趋于模糊,由此产生了系统动力学的研究方法。除定量模拟外,SD建模引入了系统分析步骤,该过程的主要目的是建立系统的思维模型,不仅可以协助人们深入了解系统内部结构,还可以作为定量模型的搭建基础。

思维模型是若干单元反馈环的耦合,利用带符号的信息链表征变量间的关系^[9],正号表示信息链两端变量的变化同向,即二者同时增大或减小,负号表示两端变量的变化异向,即一端变量增大(或减小)导致另一端变量减小(或增大)。定量模型以思维模型为基础,将系统涉及到的所有变量依其特性划分为状态变量、速率变量、辅助变量以及表函数等四种形式,并利用系统动力学软件 DYNAMO 进行建模。图 1(a)表示由 4 个变量组成的系统的思维模型,图 1(b)即该思维模型对应的数学模型。

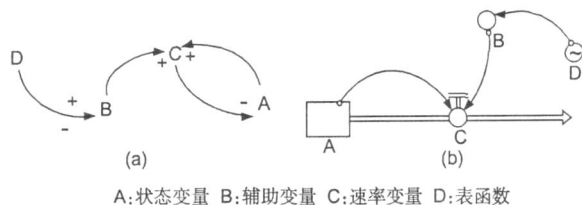


图 1 SD 模型结构示意图

分析可得出,对于简单系统,思维模型有助于增强人们对系统结构和功能的认知。但若系统内包含的变量较多,传统系统动力学方法构建的思维模型可能会包含上百个反馈环^[10],同样会导致模型结构过于复杂。针对如上问题,研究将反馈理论扩展应用于描述子系统之间的关系,通过将复杂系统划分

为若干模块,并在模块内及模块间建立对应的反馈环路,从而实现模型结构的优化。王凯军等利用分块建模的方法构建了以葡萄糖为进水基质的厌氧反应器的 SD 模型,结果表明,采用系统动力学的分块建模方法有利于模型的简化与升级,同时可以实现对不同模块采用不同的计算步长,从而有效的减少模型的计算量,提升模型的计算速度^[11]。

2 系统动力学模型的计算原理

系统论是整体论与还原论的结合。利用系统动力学方法,将变量间的各种复杂关系转换为输入输出关系,可简便的实现不同模拟方法的有效契合。若变量间关系明确,能够以微分方程的形式及结构表达,可直接将其转化为 DYNAMO 可以识别的语言序列;若变量间关系尚未明确或过于复杂,很难用微分方程直接表达,可利用黑箱方法进行描述;若变量间存在明显的非线性关系,可以利用灰箱表函数方法描述。

以连续流反应器中复杂物料的分解过程为例,用传统结构模型的方式表示如下:

$$\frac{dP_C}{dt} = \frac{P_{C_0}}{\theta} - \frac{P_C}{\theta} - K_{dis} \cdot P_C \quad (1)$$

式中, P_C 为反应器中复杂物料的浓度; P_{C_0} 为反应器进水复杂物料的浓度; θ 为水力停留时间; K_{dis} 为分解常数。

从式中可以看出,影响反应器内复杂物料浓度的主要有三个因素,其中进水复杂物料的量 P_{C_0}/θ 造成反应器复杂物料浓度上升,随出水流出的量 P_C/θ 及分解消耗的部分 $K_{dis} \cdot P_C$ 造成反应器内复杂物料浓度下降。分析表明,该反应器中对于复杂物料浓度的输入为 P_{C_0}/θ , 输出为 $K_{dis} \cdot P_C + P_C/\theta$, 据此可以得到系统动力学模型中对复杂物料浓度的白箱方式描述(图 2 a):

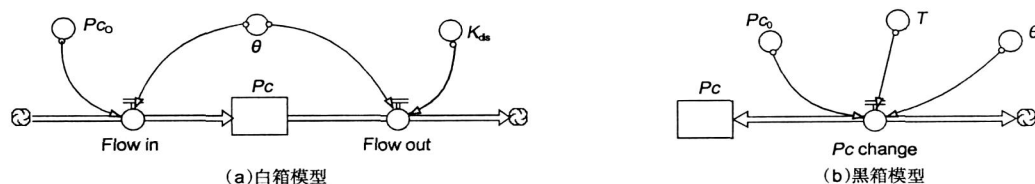


图 2 分解过程白箱及黑箱系统动力学模型示意

若利用系统动力学模型黑箱方式对该过程进行描述,可建立多元线性回归方程如公式 2,其中, $X_1, X_2 \dots, X_k$ 是模型的输入, Y 是模型的输出, $\beta_0, \beta_1 \dots \beta_k$ 为参数。

$$Y = \beta_0 + \beta_1 \cdot X_1 + \beta_2 X_2 + \dots \beta_k X_k \quad (2)$$

分别定义反应器运行时间 T 为 X_1 , 水力停留时间 θ 为 X_2 , 进水浓度 CH_0 为 X_3 , 复杂物料浓度为 Y , 将模型的 n 对训练值输入到公式中,便形成了 n 个四元一次方程,将方程求和并分别对 $\beta_0, \beta_1 \dots \beta_k$ 求导,导数为零(即误差最小)的 $\beta_0, \beta_1 \dots \beta_k$ 即所需的参数值。将参数值分别输入 DYNAMO 中,便构建了系统动力学中对复杂物料降解速率黑箱多元线性回归模型(图 2 b)。

除了以上两种方式外,也可以采用系统动力学中特有的灰箱表函数方法对微生物反应过程进行描述^[12]。系统动力学允许在同一模型中实现各种数学模拟手段,从而为复杂系统构建灵活的数学模型提供可能。

3 系统动力学中的反馈理论

厌氧消化数学模型中涉及到大量的参数,传统的厌氧模型需要在模拟前确定所有参数,一旦确定便很难修改,这无疑对初始参数的精确性要求很高,一旦初始参数出现误差,随着模拟的不断进行,误差将逐渐放大并最终造成模拟的失败。

系统动力学认为,将系统的所有输出或一部分输出作为系统部分输入的过程称为反馈。引入反馈的概念后,便可以将通常模型中常系数多输入—多输出模型转变为具有系统动力学特点的变系数输入—多输出模型。研究应用系统动力学反馈理论构建了厌氧消化模型的参数自调节系统:将模型的输出误差与动力学方程中的参数组成负反馈环,通过系统辨识和判断实时调整参数值,最终使模型的输出值不断趋近实测值,误差逐渐减小^[13]。

现以脂肪的厌氧水解为例说明自调节的作用机理。假设脂肪浓度的模拟结果为 Sm , 实测结果为 St 。脂肪的水解遵循一级反应规律,即其分解速率与速率常数 K 成正比。定义误差 $S = St - Sm$ 。该过程自调节的原理如图 3 所示。可以看出,误差由模拟结果与实测结果共同决定,误差增大,对参数调

整的幅度也相应增大,误差减小,则调整幅度变小,当 $S < \xi$ 时,自调节系统自动停止作用。

实际模拟过程中,将测定出的指标持续输入模型中,即可实现相应参数的自调节过程。此外,若模拟前已经获得了部分试验数据,也可以利用参数自调节模块作为寻找参数的一种手段,从而降低对多参数系统进行建模的难度。

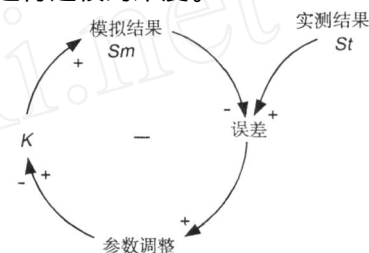


图 3 自调节系统反馈回路

4 厌氧消化系统分块混箱模型 (ABMM) 的结构

研究认为,针对复杂系统建立数学定量模型,应该以定性分析为基础,依据其自身的结构特点将系统分区为不同模块,并对不同模块采用最为适合的数学描述方法和数据处理手段,这样不仅可以有效的降低复杂系统的建模难度,减少必要的参数数量,同时可以有效的提升模型的可靠性,提高模型的模拟速度。

复杂有机物如活性污泥进入厌氧反应器后,需要先后经历胞外和胞内两个生化过程,生成最终产物二氧化碳和甲烷。在此过程中存在许多非生物媒介的物化反应,同样需要将其包括入模型中。此外,为了确保模型模拟的准确性,还应该引入参数自调节过程。模拟前需要根据各反应阶段的特点对模型进行分块,并为每个模块选择最为合适的模拟手段。

4.1 胞外过程及水解反应

胞外过程可分为分解和水解两步,其中分解是指废水或废弃物中性质复杂的颗粒化合物转化成惰性物质、碳水化合物、脂肪、蛋白质的过程;而水解则是指在胞外水解酶的作用下,碳水化合物、蛋白质和脂类等物质被转化为单糖、氨基酸和长链脂肪酸(LCEA)等可溶性小分子的过程。水解的三种产物在不同微生物的作用下经历酸化过程形成挥发酸。

由于组成成分的区别,胞外反应过程产物的量

主要由各物质占复杂有机物的比例确定,但最终产物均为挥发酸,因此,研究认为可以利用黑箱多元线性回归方法统一描述以上三个阶段,模型的输入为复杂有机物的浓度、水力停留时间以及温度,输出为挥发酸产生的量。

4.2 产乙酸及产甲烷反应

挥发酸可以详细划分为乙酸、丙酸、丁酸、戊酸等类型,这些高级脂肪酸需要进一步被降解为乙酸和氢。乙酸可以被产甲烷菌利用生成最终产物甲烷,这是厌氧反应过程中最重要的步骤。氢和 CO_2 可以被氢营养型产甲烷菌利用生成甲烷。

产乙酸、产甲烷过程属于胞内反应,由微生物分泌的胞内酶催化完成。这两个过程在厌氧反应中可能受到氢抑制、pH抑制、无机氮抑制、 NH_3 的抑制。利用表函数描述厌氧反应过程中的抑制现象具有一定优势,故对这两个过程,研究采用灰箱表函数的方法进行模拟。模型中受自调节系统控制的参数包括挥发酸、乙酸降解的半饱和常数,以及挥发酸、乙酸降解菌的最大比增长速率。

4.3 物化反应

厌氧反应器内的物化反应过程主要包括液—液过程,即离子结合/离解;液—气过程,即液气传质;液—固过程,即沉淀/溶解。由于液固过程相对较难表述且较少发生,故厌氧模型中一般仅涉及到前两种过程。引入物化反应后,不仅能够表达许多生物抑制因子,还可以对一些性能变量,如气体产量、pH等必要输出进行估算。

物化反应的反应机理明确,反应速度迅速,故研究采用白箱结构模型的方法进行模拟。其中液—液过程(HAc , NH_3 , VFA , H^+ , 正阳离子, 正阴离子)利用离子反应方程描述、液—气过程(CH_4 , H_2 , CO_2)利用亨利方程进行描述。

根据以上思想,研究最终确定,将以复杂有机质为进水基质的厌氧消化反应器 SD 模型分解为 5 组模块,分别为分解—水解—产酸模块、乙酸化—产甲烷模块、物化模块、自调节模块、以及水力学流态模块。其中分解水解产酸模块、参数自调节模块采用黑箱方法描述;乙酸化产甲烷模块采用灰箱方法描述;物化模块及水力学模块采用白箱结构方法描述。最终的模型结构图如图 4 所示。

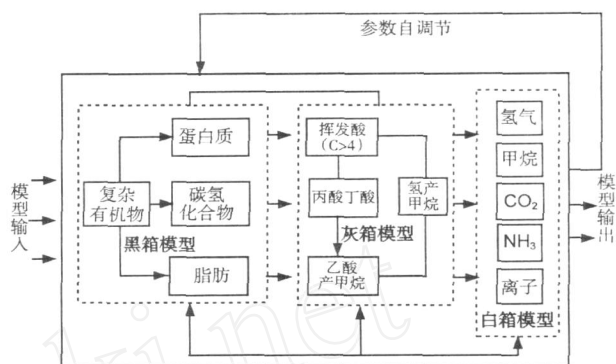


图 4 以复杂有机质为进水基质的厌氧系统分块混箱结构图

5 模拟的基础条件

构建厌氧消化数学模型的目的是指导实际反应器的设计与运行,所以要求模型应该能够预测不同运行条件下反应器的处理效果。研究选择实验室规模 EGSB 反应器作为研究对象,比较实际测定值及模型的模拟结果,以验证本研究建立模型的正确性。同时改变模型的各项输入条件,对该反应器的稳定性因素进行探讨,考察装置在极端条件下的运行状况。

实验室规模厌氧反应器的结构如图 5 所示。反应器由有机玻璃制成,有效体积 8.08 L,总高度 1.7 m。反应器采用葡萄糖自配水,并添加各类必要物质。常温下该反应器在 32 天内完成启动,随后进入稳定提高负荷的运行期,在第 33 d ~ 139 d 的运行期中,共分四次提高反应器的负荷,反应器有机负荷的提高主要源于流量的提高。



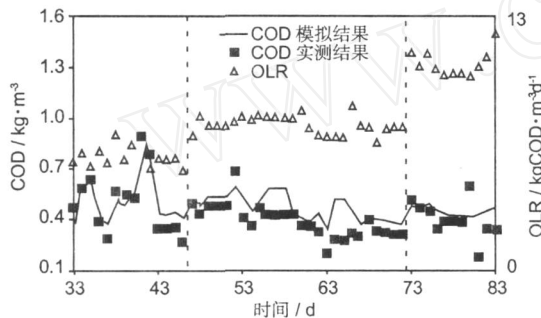
图 5 试验反应器示意图

将该反应器的基本参数,如反应器体积、气室体积、反应器运行温度条件、流量、进水葡萄糖浓度等输入模型后,参考 ADM1 的推荐数据对模型中部分

参数进行赋值。

6 模拟结果校验

确定参数之后,应用 SD 模型对反应器第 33 d ~ 83 d 共 50 d 的数据进行了动态模拟。从模拟结果可以看出(图 6),SD 模型基本能够反映出反应器的运行状态。由于启动期时间较短,加之模型的输入存在一定波动,故在 33 d ~ 43 d 时间区间内模型的输出结果波动性较大。反应器在第 47 d 和第 73 d 两次通过提高进水流量增加进水负荷,模型输出



表示出水 COD 迅速提高但逐渐趋于稳定,这与实测数据是相符的。主要是因为存在负荷提高→反应器内 VFA 浓度提高→碱度降低→pH 升高→产甲烷菌,产乙酸菌受抑制程度增高这一个过程。

从图 6 中还可以看出,模型能够较为准确的预测反应器的产气量,进水负荷两次提升,产气量均有所增加并逐渐趋于稳定。说明模拟的结果基本正确,基于分块理论的 SD 模型能够对实验规模的反应器运行状态进行较好的模拟及预测。

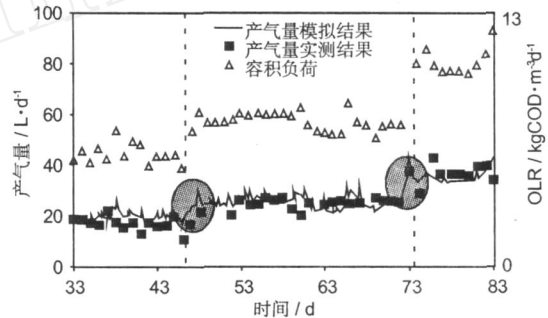


图 6 分块混箱模型模拟结果对照

经过 83 d 的运行,反应器进水 COD 保持在 5000 左右, COD 负荷接近 $10 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{d}^{-1}$ 。为了考察反应器在极端条件下的运行状况,研究以第 83 d 为模拟起始条件,假定反应器在第 100 d 改变运行条件,对第 83 d 至 103 d 的运行效果进行模拟。具体包括瞬间提高反应器进水有机物浓度,以及改变进水碱度的运行效果。

6.1 瞬间提高进水浓度对反应器的影响

瞬间提高进水浓度以增加反应器有机负荷,其

中模型输入值为:进水 COD,在 83 ~ 100 d 为 $5 \sim 6 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$,在 100 ~ 103 d 为 $20 \sim 25 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$;进水流速为 $12.58 \text{ L} \cdot \text{d}^{-1}$;进水碱度 $3125 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ 。

图 7 表示模型对出水 COD,出水 VFA,出水 pH 的模拟结果。从图中可以看出,提高进水浓度前,反应器出水 COD 基本维持在 $350 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ 左右,去除率大于 90%,pH 稳定在 7.1 左右。第 100 d 突然提高进水浓度后,反应器内挥发酸浓度突然升高,出水 COD 升高至 $16 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$,去除率低于 30%,pH 降低到 4.5。

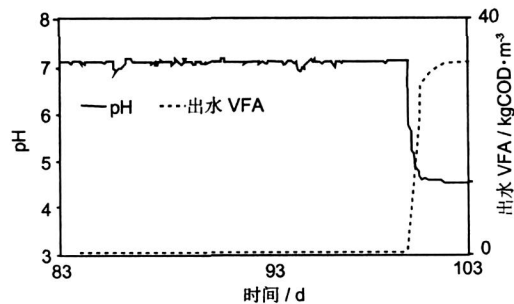
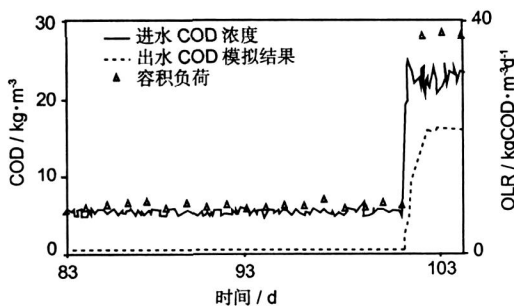


图 7 调节进水 COD 负荷时模型对出水 COD, VFA, pH 的模拟结果

在该冲击条件下反应器发生酸化,主要是因为提升进水浓度后反应器内微生物量不足以消纳如此高的有机物浓度,导致挥发酸短期内在反应器中大量积累,造成反应器 pH 的下降,微生物受抑制程度

不断加大,最终造成反应器的运行失败。

6.2 同时提高进水碱度对反应器的影响

提高反应器进水 COD 浓度的同时,提高进水碱度。模型的输入值为:

进水 COD: 83 ~ 100 d 为 $5 \sim 6 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, 100 ~ 103 d 为 $20 \sim 25 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$;

进水流量: $12.58 \text{ L} \cdot \text{d}^{-1}$;

进水碱度: 83 ~ 100 d 为 $3125 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$, 100 ~ 103 d 时为 $4000 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ 。

图 8 表示模型对 COD, VFA, pH 的模拟结果, 从

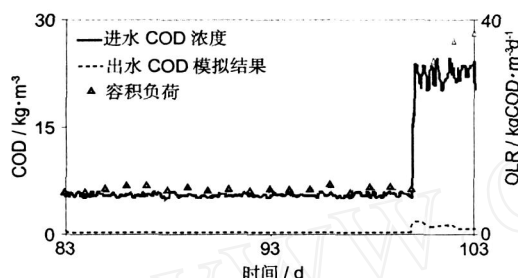


图 8 左中可以看出, 由于进水浓度提高的同时进水碱度相应增加 ($3125 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1} \sim 4000 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$), 反应器并没有发生酸化现象, 出水 COD 瞬间升高后逐渐下降。从图 8 右中可以看出, 由于进水碱度的增加, 反应器产气中 CO_2 的比例增加, 甲烷含量相应减少。

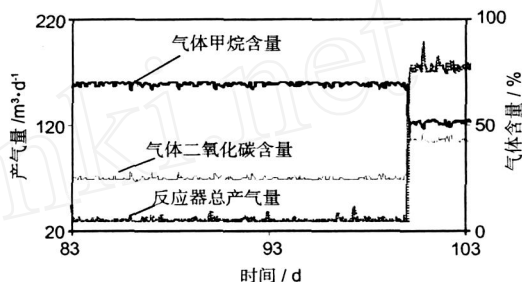


图 8 同时提高进水 COD 及碱度试验的模型产气量、微生物量输出结果

同比图 7 的模拟结果可以看出, 进水碱度的提高能够提升反应器的抗负荷冲击能力。挥发酸浓度升高的同时 pH 不会剧烈降低, 从而反应器并未运行失败, 但由于产甲烷菌的增值速率较慢, 反应器产气中甲烷含量有所降低。

7 结论

在系统动力学思想的基础上, 本文提出了厌氧消化系统分块混箱模型的概念, 介绍了系统动力学建模的基本方法, 并通过实际应用对模型进行了验证。文章的主要结论如下:

(1) 通过定性分析可以构建复杂系统的反馈回路, 利用反馈回路可以促进人们对复杂系统内变量间关系的深入认识, 从而有效的指导定量模型的构建。

(2) 应用系统动力学可以在同一模型中实现黑箱方法、灰箱表函数方法, 以及白箱结构方法, 从而构建最经济、稳定的数学模型。

(3) 利用实际运行的 EGSB 反应器对模型进行了校验, 结果表明, 厌氧消化系统分块混箱模型可以较为准确的描述反应器的各项运行指标。当运行条件发生变化时, 同样可以预测出反应器的运行状态。

参考文献:

- [1] Andrews J E. Dynamic modeling of anaerobic digestion process, Journal of Sanitary Engineering [J]. 1969, 5 (2): 95 - 102
- [2] WA Task Group for mathematical modeling of anaerobic digestion processes Anaerobic digestion model No 1

(ADM1) [G]//WA Scientific and Technical Report No 13 London: WA, 2002

- [3] Joo - Hwa Tay, Xiyue Zhang A fast predicting neural fuzzy model for high - rate anaerobic wastewater treatment systems[J]. Wat Res, 2000, 34 (11): 2849 - 2860
- [4] Joo - Hwa Tay, Xiyue Zhang Stability of high - rate anaerobic systems : performance under shocks [J]. Journal of Environmental Engineering, 2000 (8): 713 - 725
- [5] Costello D J, Greenfield P F, Lee P L. Dynamic modeling of a single - stage high - rate anaerobic reactor—I model derivation[J]. Water Research, 1991, 25 (7): 77 - 81
- [6] Costello D J, Greenfield P F, Lee P L. Dynamic modeling of a single - stage high - rate anaerobic reactor—II model verification [J]. Water Research, 1991, 25 (7): 859 - 871
- [7] 王凯军, 胡超. 厌氧消化系统分析方法 [J]. 中国沼气, 2005, 23 (2): 15 - 19
- [8] 贾仁安, 丁荣华. 系统动力学 - 反馈动态性复杂分析 [M]. 北京: 高等教育出版社. 2002 17 - 19
- [9] 王冀藩. 系统动力学 [M]. 北京: 清华大学出版社. 1994 5 - 8
- [10] 胡超. 基于系统动力学方法的厌氧消化系统的动态模拟研究 [D]. 北京: 北京市环境保护科学研究院, 2005 45 - 48
- [11] 王凯军, 阎中. 厌氧反应器系统动力学模型构建方法学研究 [J]. 环境科学, 2008, 29 (9): 124 - 129
- [12] 阎中, 王凯军. 厌氧抑制动力学的表函数统一模型和实验方法 [J]. 环境科学, 2008, 29 (5): 1325 - 1329
- [13] 阎中. 厌氧消化反应器分块混箱系统动力学模型研究 [D]. 北京: 北京市环境保护科学研究院. 2005 18 - 20