厌氧反应器系统动力学模型构建方法学研究

王凯军, 阎中
(北京市环境保护科学研究院, 北京 100037)

摘要: 以系统动力学的基本概念、方法为基础提出了存在于变量之间的 3 种基本关系模式, 并在此基础上提出针对复杂系统的分块建模理论. 将以葡萄糖为进水基质的厌氧反应器划分为 3 个子系统, 确定了该系统的系统结构图, 在此基础上构建厌氧消化系统的 SD 模型. 根据分块建模的优势及特点, 对模型中的 3 个子系统采用不同的计算方式, 通过对比模拟结果表明, SD 模型静态模拟结果与实验数据、传统结构模型模拟结果之间的误差< 10%, 动态模拟结果与实际趋势一致, 说明 SD 模型的模拟结果是可信的. 根据其特性, 对取消物化子系统的简化模型的模拟结果进行分析, 表明根据不同的研究目的, 选择合适的模型结构是必要的, 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、减少计算量、提高模型的计算速度.

关键词: 系统动力学; 厌氧消化; SD 模型; 结构模型
中图分类号: X703.1 文献标识码: A 文章编号: 0250-3301(2008)09-2507-06

Methodology of the Anaerobic Reactor SD Model's Construction

WANG Kai-jun, YAN Zhong
(Beijing Municipal Research Institute of Environmental Protection, Beijing 100037, China)

Abstract: On the basis of system dynamic, we summed up 3 different patterns between variables, and put forward the theory of partitional modeling. We divided the model of anaerobic reactor into 3 blocks, and confirmed the system structural graphic. According to the character and advantage of partitional modeling, we construct the SD model of anaerobic reactor which is fed by glucose, and used a different calculation way for different blocks. Comparing with the lab data, errors between SD model, test data, and Andrews' model is less than 10%. We also analyzed the result of simplified model which removed the materialized block. It shows that result of SD model is credible; way of partitional modeling is propitious to the simplification and upgrade of model, reduction of the amount of calculation, and increase of calculation speed.

Key words: system dynamics; anaerobic digestion; SD model; structural model

近年, 对厌氧反应动力学的建模逐渐分化为白箱结构模型和黑箱模型 2 种方法. 白箱结构模型构建基于对系统机制的充分了解[1]. 黑箱模型的构建仅关心系统的输入与输出[2]. 1969 年 Andrews[3] 首次推出厌氧消化系统的动态抑制结构模型, Hill 等[4~6] 先后对该模型进行了修正和补充. IWA 2002 年推出的 ADM1 模型也属于结构模型的代表[7]. 与此同时, 国内外许多学者对黑箱模型进行了深入研究, Tay 等[8] 和曹刚[9] 分别研究了 BP 神经网络、模糊神经网络等黑箱建模方法在厌氧消化系统中的应用. 研究结果表明, 结构模型结构清晰、可信度高, 但存在着计算量大、复杂程度高、模型简化困难等问题. 而黑箱模型虽然结构简单, 但扩展性能差, 且不能帮助人们了解系统的真实结构.

针对以上问题, 文献[10] 提出通过定性分析与定量模拟的结合, 同时结合黑箱模型方法和结构模型对厌氧动力学进行模拟的系统动力学(system dynamic) 方法. 系统动力学是系统分析与系统模拟相综合的模型研究方法. 在系统地分析复杂系统结构与功能基础上, 利用系统动力学的某些方法可以对复杂模型进行简化. 本文将以葡萄糖为基质的反应器作为研究对象, 采用系统动力学方法构建厌氧消化系统的 SD 模型, 说明利用系统动力学建模的方法及优点.

1 系统动力学方法基本概念

传统的系统动力学方法解决问题的步骤大体分 5 步[11]: ①用系统动力学的理论、原理和方法对所研究问题进行系统分析; ②进行系统的结构分析, 划分系统层次与子块, 确定总体与局部的反馈机制; ③建立数学的、规范的模型; ④以系统动力学理论为指导, 借助模型进行模拟; ⑤检验评估模型. 其中前 2 步属于系统分析阶段, 后 3 步为系统模拟阶段.

系统动力学以反馈回路来描述系统的结构, 传统系统分析阶段的任务即确定系统的反馈回路[12]. 反馈回路由变量、信息链、反馈关系和输入(出) 构成, 反馈关系可以表征变量间的关系, 一般有正反

收稿日期: 2007-09-10; 修订日期: 2007-10-24
基金项目: 国家高技术研究发展计划(863) 项目(2002AA601990)
作者简介: 王凯军(1960~), 男, 博士, 研究员, 主要研究方向为污染物质资源化治理, E-mail: wkj.iep@vip.163.com

© 1994-2011 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

馈、负反馈和复杂信息交换关系 3 种. 图 1(a) 表示 2 个变量间的负反馈环, 即 A 增大的结果导致 B 增大, 而 B 增大会导致 A 减小. 由若干单元反馈环互相结合, 构成整个系统的系统动力学关系.

本文提出系统分块是系统分析的重要步骤, 也是复杂系统进行系统分析的核心, 主要目的是划分组成系统的各单元. 系统分块便于复杂系统的简化和升级, 并可以根据不同的要求对各子系统进行单独计算. 为此, 本文提出反馈回路同样可以适用于描述 2 个子系统之间的关系, 如图 1(b) 所示, 2 个子系统间没有反馈关系符号, 属于二者之间第 3 种复杂物质交换, 信息传递关系.

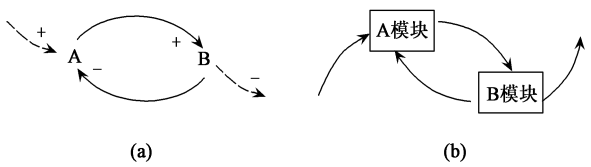


图 1 2 个变量之间或 2 个系统之间的关系示意

Fig. 1 Relationship graph between two variables and two systems

以碳氢化合物水解过程为例(图 2). 对于稳定运行的反应器, 温度及碳氢化合物浓度共同影响水解速率($v_{水}$). 其中浓度与水解速率间存在正反馈的关系, 而不同温度范围内[(0, T_a); ($T_{a,max}$)] 温度与水解速率间存在不同的反馈关系. 从图 2 可以看出, 若水解速率 $v_{水}$ 增加, 碳氢化合物降解的量随之增加, 从而导致反应器内碳氢化合物浓度降低, 反应器重新回到稳定运行状态.

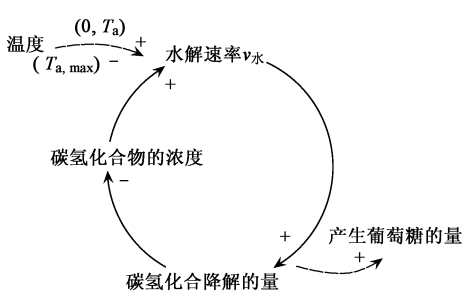


图 2 碳氢化合物水解过程反馈回路

Fig. 2 Feedback graph of the hydrolyzing process of hydrocarbon

系统模拟阶段的核心是构建系统的 SD 模型及采用特定的 DYNAMO 软件进行模拟. 这一阶段需要在系统分析的基础上采用系统动力学语言将变量划分为状态变量、辅助变量及速率变量等不同的变量类型, 并定义每一个变量的值或公式, 如图 3 所示.

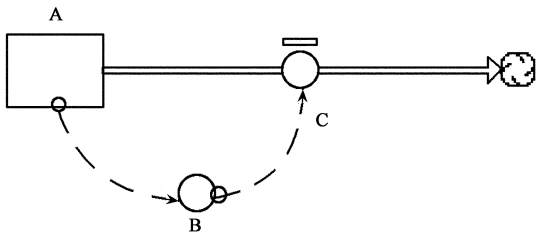


图 3 SD 模型结构示意

Fig. 3 Structure of SD model

除图 3 中的 3 种变量外, 系统动力学模型中有一类特殊的变量, 称之为表函数或图形函数. 这是一种采用半定量数据的系统进行描述的特殊工具. 通过将 X、Y 对应列表或绘图的方式, 在已知自变量 X 的情况下, 直接通过表格(图形) 获取相应的 Y 值. 阎中等[13] 提出利用表函数对厌氧消化系统的不同类型抑制动力学进行统一描述的模型.

2 厌氧消化系统的系统和结构分析

国际水质协会 2001 年推出的 ADM1 模型[7] 认为, 复杂有机物被降解为最终产物甲烷需要经过 5 个阶段, 即复杂有机物的分解阶段; 碳水化合物、蛋白质等的水解阶段; 葡萄糖、氨基酸、长链脂肪酸的酸化阶段; 乙酸化阶段以及产甲烷阶段. 本文为了说明所构建模型的方法及基础理论, 选择以葡萄糖为进水基质的反应器作为研究对象.

对于以葡萄糖为进水基质的厌氧消化反应器, 主要存在产酸及产甲烷 2 个步骤. 描述该反应器的 Andrews 结构模型[3] 包括 8 个状态变量、17 个参数以及 21 个微分方程, 较为复杂. 图 4 表示传统系统动力学方法的系统分析反馈回路[12], 虽然较结构模型的微分方程组更能体现系统内各组分之间的关

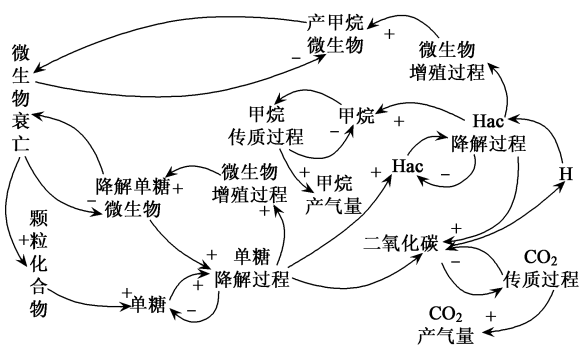


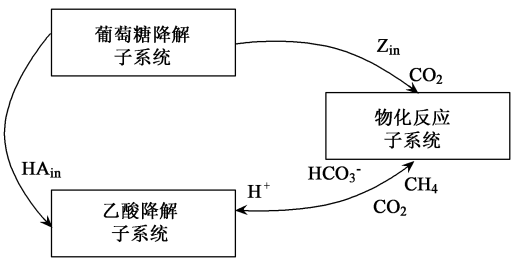
图 4 葡萄糖为基质厌氧系统系统动力学分析

Fig. 4 System analysis of anaerobic system fed by glucose

© 1994-2011 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

系, 但其结构仍然复杂, 不便于系统的简化及改进.

按照厌氧消化过程, 葡萄糖水解、酸化降解过程会产生乙酸、阳离子及 CO_2, 从而影响了乙酸降解过程及反应器中的物化反应过程. 乙酸被产甲烷微生物利用降解产生 CO_2、CH_4, 并改变了反应器内 HCO_3^- 的浓度. 基于以上分析, 本文提出将以葡萄糖为进水基质的厌氧消化系统分为 3 个子系统(模块), 分别为葡萄糖降解子系统、乙酸降解子系统及物化反应子系统(图 5).



Z_{in} 表示阳离子浓度, HA_{in} 表示未离解挥发酸浓度, H^+ 表示氢离子浓度

图 5　葡萄糖为基质厌氧消化系统简化结构

Fig. 5　Simplified structural graph of anaerobic system fed by glucose

根据分块建模的特点, 模型对 3 种系统采用不同的计算处理方法. 对反应速度较快的物化过程, 采用较大一段时间计算一次, 计算结果作为另外 2 个模块的输入的方式处理, 减少计算复杂程度和工作量. 在对其他 2 个模块模拟计算时, 冻结物化模块的影响. 同时, 这种分块方式便于模型的改进和升级, 若模拟进水基质改变时, 仅仅改变葡萄糖这一模块即可, 而无需对整个模型进行大的修改.

3　子系统反馈回路的确定

对于稳定运行的反应器, 增加输入条件, 如基质浓度或水力停留时间会使反应器基质浓度变化. 这是由于输入条件的改变破坏了微生物生长与基质降解之间的平衡. Andrews[14] 在实验中发现, 采用挥发酸做基质时, 在低于某一浓度 S_a(表示某一基质浓度点, 比降解速率在该浓度点前后的变化趋势由逐渐升高转为逐渐降低) 时, 微生物浓度随基质浓度的上升而上升, 利用基质的能力逐渐增强; 超过 S_a 时微生物受到抑制, 利用基质的能力逐渐减弱. 综合以上的描述可以构建葡萄糖降解模块的反馈环路, 如图 6(a) 所示.

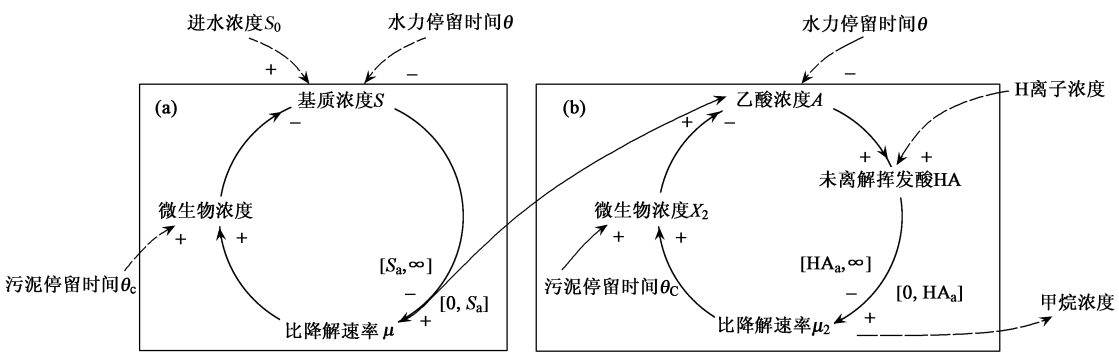


图 6　生化降解子系统反馈回路

Fig. 6　Feedback of bio-degradation

乙酸降解模块与葡萄糖降解模块的反馈回路基本相似. 但为了同时表征基质浓度和 pH 对产甲烷菌的抑制, Andrews[14] 提出采用未离解挥发酸 HA 作为反应的限制性基质. 乙酸降解系统反馈回路如图 6(b) 所示. 考虑葡萄糖降解模块与乙酸降解模块之间的关系, 用信息链将二者连接, 反映乙酸浓度对乙酸比降解速率的影响, 从而构成葡萄糖降解生化反应模块反馈回路.

物化反应模块包括反应器内离子平衡过程及气体传质过程, 无机物质的浓度也影响整个系统的运行. 相对而言, 这 2 个系统的反应机制明确, 反应速度迅速, 因此, 本文便不再赘述其反馈回路.

4　厌氧消化系统 SD 模型的构建

根据厌氧消化系统中各组分的特点, 本文将模型中所涉及的变量划分为 9 个状态变量、31 个速率变量、68 个辅助变量及 2 个表函数. 以乙酸降解模块为例, 首先依据乙酸降解反馈回路在 DYNAMO 软件中绘制 SD 流图, 其中葡萄糖降解模块与乙酸降解模块 SD 流图如图 7、8 所示. 模型主要的速率变量中乙酸降解及微生物增值采用表函数抑制动力学方法计算. 产甲烷菌衰亡采用一级反应动力学描述.

© 1994-2011 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

各种产物的产生速率使用相应的产率系数计算. 模型中的参数见文献[15].

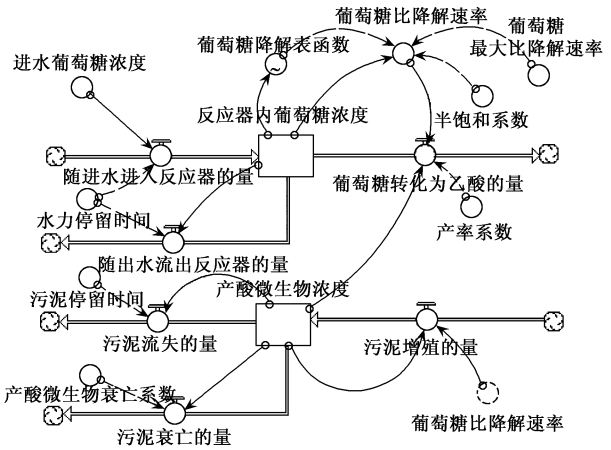


图7 葡萄糖降解模块 SD 流图

Fig. 7 SD graph of glucose degradation

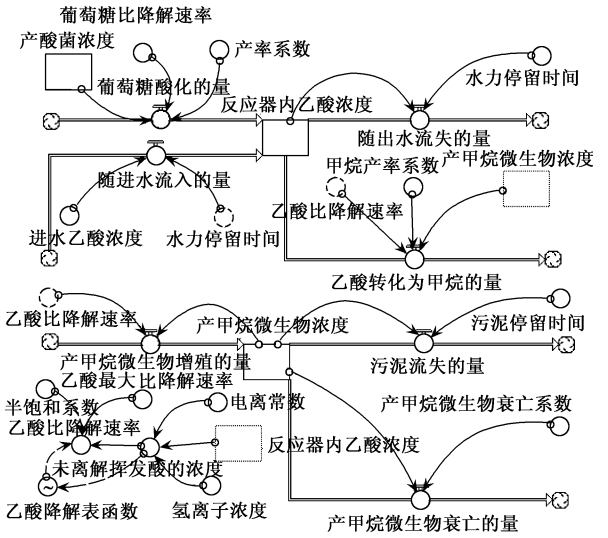


图 8 乙酸降解模块 SD 流图

Fig. 8 SD graph of acetic acid degradation

针对所构建 SD 模型的特点, 在模型运行时针对 3 个模块采用不同的计算方式. 物化反应模块的反应速度快, 因此选择该模块的计算步长为另外 2 个模块的 10 倍.

5 模型模拟阶段

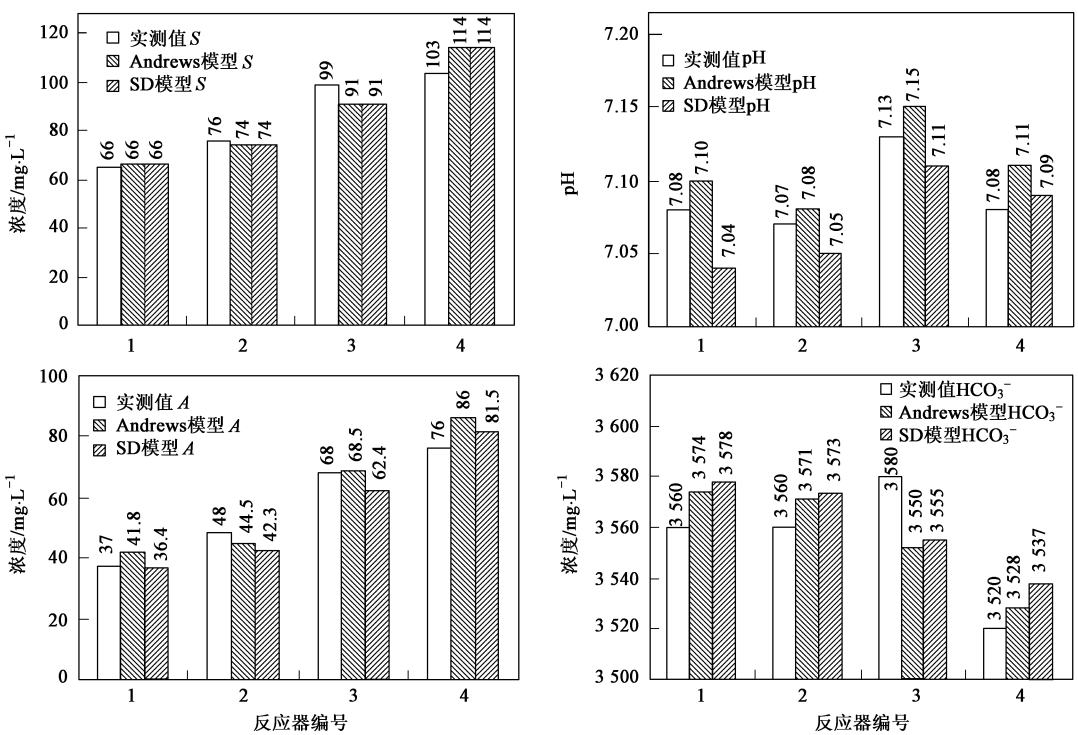
5.1 稳态模型模拟对比

蒋青[15]采用以葡萄糖为主要碳源的反应器进行厌氧动力学的实验研究, 用 4 套反应器进行实验, 分别控制 4 个反应器的停留时间为 17.5、14、10、7.5 d, 泥龄为水力停留时间的 2 倍. 反应器进水为实验室配置的以水样, 进水水质各项指标如表 1 所示.

表 1 实验室反应器进水指标

Table 1 Inflow quality of the reactor

项目	S_0/ mg·L^{-1}	A_0/ mg·L^{-1}	$HCO_{3,0}^-$/ mg·L^{-1}	pH_0
指标	11 000	205	2 600	9.48



图中 S 表示反应器内葡萄糖浓度; A 表示反应器内乙酸浓度; HCO_3^- 表示反应器内碳酸氢根浓度

图 9 模拟值与实测值的对照

Fig. 9 Comparison between simulative result and test result

© 1994-2011 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

在实验中控制反应器的运行条件, 并监测反应器内的 COD、VFA 等指标, 当 2 次测得的指标数量相差不大时, 认为反应器内达到了稳定状态. 将本研究的部分模拟结果与蒋青[15] 的实验数据、Andrews 模型的模拟结果[14] 进行对比(图 9), 三者之间的误差一般在 10% 以内, 说明模拟方法是可行的.

5.2　简化模型的稳态模拟结果

本研究开发的厌氧消化系统 SD 模型可以方便地添加或减少模块的量, 从而达到模型简化或升级的目的. 以葡萄糖为基质的 SD 模型为例, 将 4 号反应器模型中的物化反应模块去掉, 仅保留葡萄糖降解模块和乙酸降解模块, 便简易地实现了模型的简化. 简化后模型的状态变量剩余 4 个, 速率变量剩余 13 个, 辅助变量剩余 23 个, 相关变量和参数减少了 2/3, 极大地减少模型计算量, 提高了计算速度. 由葡萄糖分块模型的系统结构图(图 5) 可知, 模型的简化对葡萄糖浓度的预测没有影响, 但影响了乙酸浓度的预测. 且简化后的模型不能计算反应器中 H^+、HCO_3^- 等离子的浓度及各种气体的产量, 简化模型的模拟结果如图 10 所示.

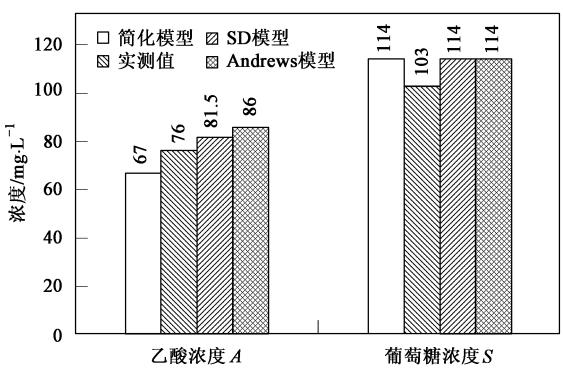


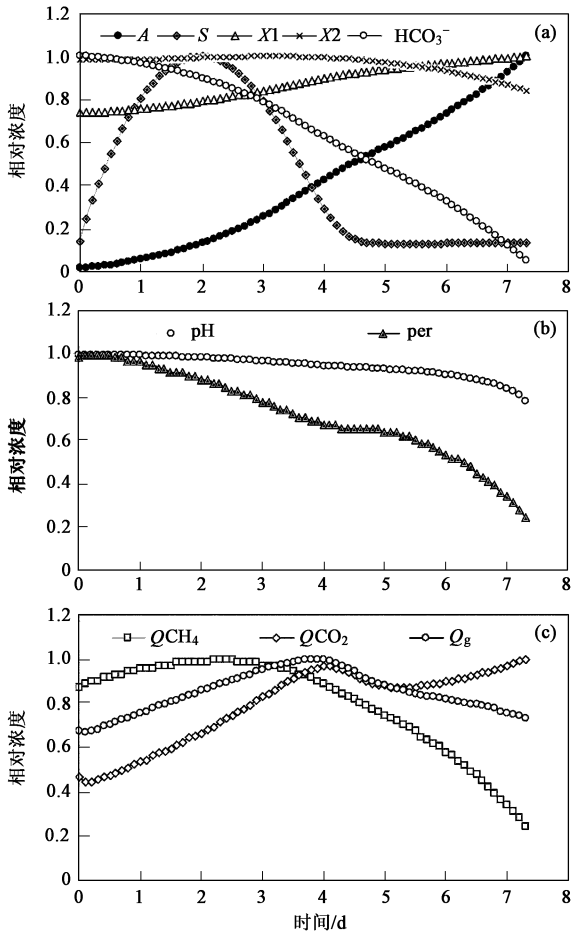
图 **10**　简化后模型的静态模拟结果

Fig. 10　Results of simplified model

5.3　动态模拟结果

将稳态模拟结果作为反应器状态变量的初值输入到模型中, 可以认为此时反应器处于稳定状态运行. 通过改变模型的各项运行参数(进水浓度、停留时间、进水碱度等) 来观察动态条件下反应器的运行特征, 为了便于趋势的分析, 本文对模拟结果进行无量纲化处理, 将所有模拟结果取值范围规定在[0, 1] 内. 图 11 表示进水基质浓度由11 000 mg/L提高至 18 000 mg/L后部分组分的模拟结果, 图中纵坐标的单位均为 1.

动态模拟结果表明, 进水浓度的上升导致了反应器内乙酸浓度上升[图 11(a)], 此时乙酸浓度的增加速度远远大于产甲烷菌利用速率的增加速度, 致使乙酸在反应器内不断积累, 反应器内 pH 变化剧烈[图 11(b)], 从开始的 7.1 降到 5 以下. 产甲烷菌的抑制效应逐渐增加, 甲烷占总气体产量的百分比不断下降[图 11(c)], 并最终可能形成反应器的酸化.



图中 $X1$ 表示产酸菌浓度; $X2$ 表示产甲烷菌浓度; Q_g 表示总产气量; per 表示甲烷占总产气量的百分比; QCH_4 表示甲烷产量; QCO_2 表示 CO_2 产量; 其余符号含义同前

图 **11**　动态模拟结果

Fig. 11　Results of dynamic simulation

6　结论

(1) 研究从系统动力学的基本概念和方法入手分析了变量之间的相互关系, 提出正、负反馈和复杂信息关系 3 种基本模式, 并提出这一分析也适用于描述系统间的关系, 为系统子系统分块建模奠定了理论基础.

(2) 提出系统分块是系统动力学建模的重要步骤, 介绍和比较传统系统动力学建模方法与系统分

© 1994-2011 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

块建模的差别; 研究以葡萄糖厌氧降解为例, 在系统分析的基础上将厌氧动力学系统分为 3 个子系统, 并说明了各子系统之间的联系, 构建简化的厌氧消化系统结构图.

(3) 利用系统动力学软件 STELLA8. 0 对实验数据进行了模拟, 模拟效果达到与传统方法一致的结果. 同时, 根据分块模型的特点, 比较了取消某些功能分块的简化模型与完整模型的计算工作量和模拟结果. 通过稳态模拟和动态模拟结果说明, 简化对部分模拟结果的影响可以忽略, 本研究对系统动力学建模方法的改进是可行的, 应根据不同需求选择最适宜的模拟方法.

(4) 采用系统动力学的分块建模方法构建厌氧消化反应器模型, 可以极大程度地简化模型结构, 减少计算量. 提高模型计算速度, 且有利于模型的简化与升级.

参考文献:

[1] 施汉昌. 废水生物处理的数学模型与新技术[R]. 北京: 清华大学环境系, 2005. 3-5.

[2] 魏传锋, 王浚. 黑箱建模方法在环境模拟试验中的应用[J]. 航天器环境工程, 2005, **22**(4): 204-206.

[3] Andrews J F. Dynamic modeling of anaerobic digestion process[J]. Journal of Sanitary Engineering, 1969, **5**(2): 95-102.

[4] Hill D T, Barth C L. A dynamic model for animal waste methodology [J]. Water Research, 1982, **25**(5): 1374-1379.

[5] Mosey F E. Mathematical modeling of the anaerobic digestion process: regulatory mechanisms for the formation of short-chain volatile acids from glucose[J]. Water Science and Technology, 1983, **15**(2): 209-232.

[6] Costello D J, Greenfield P F, Lee P L. Dynamic modeling of a single-stage high-rate anaerobic rector-I model derivation[J]. Water Research, 1991, **25**(7): 77-81.

[7] IWA Task Group for mathematical modeling of anaerobic digestion processes. Anaerobic digestion model No. 1 (ADM1) [M]. London: IWA Scientific and Technical Report No. 13, 2002. 1-3.

[8] Tay J H, Zhang X Y. A fast predicting neural fuzzy model for high-rate anaerobic wastewater treatment systems[J]. Water Research, 2000, **34**(11): 2849-2860.

[9] 曹刚. 基于神经网络的厌氧反应器模拟预测及其运行状态估计[D]. 杭州: 浙江大学, 2003. 49-71.

[10] 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.

[11] 周世星. 系统动力学在区域规划环境影响评价中的应用[D]. 成都: 四川大学, 2005. 10-12.

[12] 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. 46-48.

[13] 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.

[14] Andrews J F. Kinetics and characteristics of volatile acid production in anaerobic fermentation process[J]. Air and Water Pollution, 1965, **9**(6): 17-28.

[15] 蒋青. 厌氧反应器数学模型的研究[D]. 北京: 清华大学, 1984. 78-94.

© 1994-2011 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net