

На правах рукописи

Смирнов Николай Васильевич

**Методы математического моделирования
динамики процессов окисления в системе
биологической очистки воды**

05.13.18 — математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Петрозаводск — 2014

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте прикладных математических исследований Карельского научного центра Российской академии наук

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
доцент
Кириллов Александр Николаевич

Официальные оппоненты: **Буре Владимир Мансурович**
доктор технических наук, доцент,
профессор кафедры математической теории игр и статистических решений
ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный университет»

Черникова Анна Владимировна
кандидат технических наук, доцент,
декан факультета автоматизированных систем управления технологическими процессами
ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный технологический университет растительных полимеров»

Ведущая организация: ФГБОУ ВПО «Тамбовский государственный университет имени Г. Р. Державина»

Защита состоится «17» октября 2014 г. в 16:00 на заседании диссертационного совета Д 212.190.03 на базе ФГБОУ ВПО «Петрозаводский государственный университет», расположенного по адресу: 185910, г. Петрозаводск, пр. Ленина, 33.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Петрозаводского государственного университета и на сайте petrsu.ru.

Автореферат разослан «___» _____ 2014 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета

Воронов Роман Владимирович

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Экологическая обстановка в регионе напрямую зависит от качества воды в региональных водных объектах. За последние десятилетия концентрации субстратов в сточных водах значительно увеличились. Существующие технологии не всегда могут обеспечить необходимую степень очистки сточных вод, в результате исследование процессов биологической очистки приобрело особенно важное значение. Формальное описание и создание математических моделей этих процессов в настоящее время стало необходимым элементом исследований.

Математическому моделированию процесса биоочистки и расчетом очистных сооружений посвящены работы Вавилина В. А., Васильева В. Б., Брагинского Л. Н., Жмур Н. С., Карюхиной Т. А., Яковлева С. В. и др. В конце 80-х гг. XX века была предложена математическая модель процесса биоочистки ASM1, ее авторы Хенце М. (Henze M.), Гуйер В. (Gujer W.), Мацуо Т. (Matsuo T.) и др. задали направление для большого количества дальнейших исследований, которые проводили Ванроллеге П. А. (Vanrolleghem P. A.), Дочейн Д. (Dochain D), Найтс К. Д. (Knights C. D.), Чай К. (Chai Q.) и др. Проблема удаления соединений азота из городских и промышленных сточных вод путем нитрификации и денитрификации определила главное направление исследований последних десятилетий.

Большие финансовые затраты на процесс биоочистки обуславливают востребованность минимизации этих затрат. Таким образом, оптимизация процесса биологической очистки сточных вод представляет особый научный и практический интерес.

Степень разработанности. Многие существующие математические модели процесса биоочистки, например, предложенные Вавилиным В. А. и др., построены на основе уравнений материального баланса. Эти модели не учитывают насыщение микроорганизмов субстратом, кислородом и прочие факторы, влияющие на кинетику окислительных процессов. В тоже время ASM-модели в большей мере учитывают особенности процесса биоочистки, но являются настолько сложными (большая размерность и большое количество параметров), что их идентификация и исследование вызывают непреодолимые трудности.

При построении математических моделей необходимо чтобы, с одной стороны, они были достаточно простыми для исследования, а с другой стороны, являлись адекватными процессу биоочистки. В силу большого количества параметров нахождение их значений — не простая задача. За последнее время были предложены различные подходы для параметрической иденти-

фикации, причем значения параметров определялись экспериментально и с помощью математического моделирования. Часто на очистных сооружениях в силу малого количества экспериментальных данных применение этих подходов затруднено. В большинстве существующих работ с целью поддержания выходных модельных концентраций в допустимых границах и оптимизации процесса биоочистки предложены методы управления, которые заключаются в изменении скорости подачи активного ила или сточных вод. Введение такого типа управления не всегда возможно на существующих очистных сооружениях.

Цель и задачи. Целью диссертационной работы является развитие методов математического моделирования и разработка алгоритмов оптимизации процесса биологической очистки сточных вод. Достижение поставленной цели требует решения следующих задач:

- построение математической модели с переменной структурой процесса биоочистки сточных вод в аэротенках промежуточного типа, учитывающей особенности протекания процессов окисления аммония, органического субстрата и межвидовую конкуренцию микроорганизмов за кислород;
- разработка модификации численного метода и проведение серии вычислительных экспериментов для параметрической идентификации математических моделей процесса биоочистки;
- разработка алгоритмов оптимизации расхода кислорода в процессе биоочистки сточных вод в аэротенках промежуточного типа и аэротенках-смесителях;
- построение модели стабилизации процесса биоочистки в аэротенках-смесителях;
- разработка алгоритма нахождения оптимальной схемы кредитования в задаче инвестирования очистных сооружений;
- разработка комплекса проблемно-ориентированных программ.

Объект исследования — процесс биологической очистки сточных вод.
Предмет исследования — математические модели, алгоритмы для их численного анализа и результаты вычислительных экспериментов. В работе использованы аналитические и качественные **методы исследования** систем обыкновенных дифференциальных уравнений, численные методы интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений и параметрической идентификации.

Научная новизна работы. Для описания процесса биоочистки сточных вод в аэротенках промежуточного типа на основе компартментального подхода предложены две математические модели с переменной структурой, учитывающие динамику концентраций органического субстрата, аммония и двух

видов микроорганизмов. При этом для учета межвидовой конкуренции микроорганизмов активного ила за кислород в модели введены пороговые функции. В первой из этих моделей концентрация кислорода в каждом субкомпарimente считается постоянной. Во второй — предложены уравнения динамики концентрации кислорода, что позволяет ввести в модель управление. Предложена модификация численного метода параметрической идентификации моделей. Предложен алгоритм минимизации расхода кислорода в процессе биоочистки при условии поддержания выходных концентраций субстратов в определенных границах.

Для описания процесса биоочистки сточных вод в аэротенках-смесителях предложена математическая модель, учитывающая динамику концентраций субстрата одного типа и микроорганизмов одного вида, найдено инвариантное множество динамической системы, задающей эту модель. Разработан алгоритм оптимизации расхода кислорода в аэротенках-смесителях.

Задача стабилизации процесса биоочистки в аэротенках-смесителях решена на основе подхода, предложенного Кирилловым А. Н. в работе¹, и модели, предложенной в работе² Григорьевой Е. В. (Grigorieva E. V.) и Хайловым Е. Н. (Khailov E. N.).

Предложены уравнения динамики стоимости основных производственных фондов и общей условной прибыли за период кредитования при модернизации очистных сооружений. Разработан алгоритм нахождения оптимальной схемы кредитования в задаче инвестирования очистных сооружений.

Теоретическая и практическая значимость работы. Настоящая работа будет способствовать развитию методов математического моделирования процессов биологической очистки сточных вод. Полученные в диссертации результаты могут быть использованы для прогнозирования и управления процессом очистки сточных вод в аэротенках-смесителях и аэротенках промежуточного типа, а также при выборе оптимальной схемы кредитования при модернизации очистных сооружений. Для реализации методов моделирования по теме диссертации разработан комплекс проблемно-ориентированных программ.

Положения, выносимые на защиту:

1. Метод математического моделирования процесса биоочистки сточных вод в аэротенках промежуточного типа, учитывающий кинетику про-

¹Кириллов А. Н. Задачи стабилизации экологических систем // Обзорение прикладной и промышленной математики. 1994. Т. 1, вып. 6. С. 883–892.

²Grigorieva E. V., Khailov E. N. Optimal control of a waste water cleaning plant // UAB Conference on Differential Equations and Computational Simulations. Electronic Journal of Differential Equations, Conf 19. USA. Eighth Mississippi State, 2010. P. 161–175. URL: <http://ejde.math.txstate.edu>.

текания процессов окисления аммония, органического субстрата и межвидовую конкуренцию микроорганизмов за кислород.

2. Алгоритмы решения задач оптимизации расхода кислорода в процессе биоочистки сточных вод в аэротенках промежуточного типа и аэротенках-смесителях.
3. Модификация численного метода параметрической идентификации, использующего функции чувствительности.
4. Модель стабилизации процесса биоочистки в аэротенках-смесителях.
5. Программный комплекс для решения оптимизационных задач процесса биоочистки на очистных сооружениях.

Связь работы с научными программами, темами. Основные результаты диссертации были получены в рамках выполнения исследований при финансовой поддержке Отделения математических наук РАН (проект по Программе № 3 «Идентификация и управление в нелинейных системах с переменной структурой и динамическими граничными условиями»), и Программы стратегического развития ПетрГУ в рамках реализации комплекса мероприятий по развитию научно-исследовательской деятельности.

Апробация работы. Диссертационное исследование проводилось при постоянном взаимодействии с сотрудниками Испытательной лаборатории контроля качества вод канализационных очистных сооружений г. Петрозаводска, что способствовало более адекватному описанию процесса биологической очистки сточных вод. Акт об использовании результатов кандидатской диссертационной работы приведен в **приложении Г** диссертации.

Результаты диссертационной работы были представлены и обсуждались на нижеследующих конференциях.

1. Вторая всероссийская молодежная научная конференция «Естественнонаучные основы теории и методов защиты окружающей среды», г. Санкт-Петербург, 23–24 апреля 2012 г.
2. Десятые международные Колмогоровские чтения, г. Ярославль, 15–18 мая 2012 г.
3. Тринадцатый всероссийский симпозиум по прикладной и промышленной математике, г. Петрозаводск, 2–9 июня 2012 г.
4. Международная конференция по вычислительным и информационным технологиям для наук об окружающей среде «CITES-2013», г. Петрозаводск, 1–5 сентября 2013 г.

5. Третья национальная научная конференция с международным участием «Математическое моделирование в экологии», г. Пущино, 21–25 октября 2013 г.
6. Сорок пятая международная научная конференция аспирантов и студентов «Процессы управления и устойчивость», г. Санкт-Петербург, 1–4 апреля 2014 г.

По материалам диссертации опубликовано семь работ, из них три статьи в журналах из «Перечня российских рецензируемых научных журналов» [1–3], одна статья в сборнике трудов конференции [4], тезисы трех докладов [5–7].

Личный вклад автора. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был значительным. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и четырех приложений. Общий объем диссертации составляет **114** страниц. Список литературы включает **86** наименований.

Автор выражает благодарность за предоставленную помощь при проведении диссертационного исследования сотрудникам Испытательной лаборатории контроля качества вод филиала ОАО «Петрозаводские коммунальные системы» «Водоканал», в частности гидробиологу Рейсс Т. В., и инженеру-технологу цеха очистных сооружений канализации Гориной С. А.

Содержание работы

Во **введении** отражены актуальность, научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, определены объект, предмет и методы исследования, поставлены цель и задачи исследования, сформулированы положения, выносимые на защиту, указаны структура и объем работы.

В **первой главе** диссертации описаны различные этапы и сооружения биологической очистки сточных вод, приведен краткий обзор существующих математических моделей процесса биоочистки. Обоснованы цель и задачи диссертационного исследования.

Во **второй главе** предлагается математическая модель процесса биологической очистки сточных вод в аэротенках промежуточного типа, в кото-

рые активный ил с концентрацией X и сточные воды поступают непрерывно. Иловая смесь подается в начало аэротенка и движется вдоль его оси. Сточные воды, содержащие различные типы субстратов, поступают с одинаковой объемной скоростью равными порциями в нескольких точках аэротенка.

В качестве примера построенная модель применяется к аэротенку канализационных очистных сооружений (КОС) г. Петрозаводска. На рисунке 1 представлена схема этого аэротенка, пунктиром отмечены места отбора проб, которые являются условными границами компартментов C_j ($j = 1, 2, \dots$). Места вхождения сточных вод и отбора проб естественным образом делят аэротенк на субкомпартменты z_i ($i = 1, 2, \dots$) (рисунок 2).

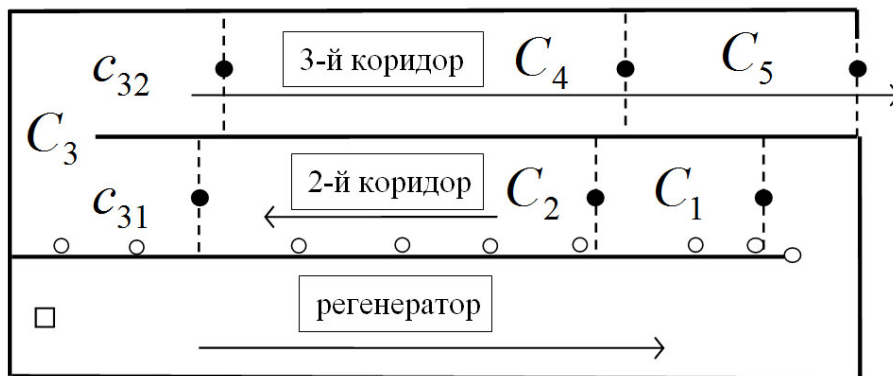


Рис. 1: Схема разделения аэротенка на компартменты, где \bullet — место отбора проб; \circ — место вхождения сточных вод в аэротенк; \square — место вхождения иловой смеси в аэротенк; \rightarrow — направление движения иловой смеси; --- — граница компартмента

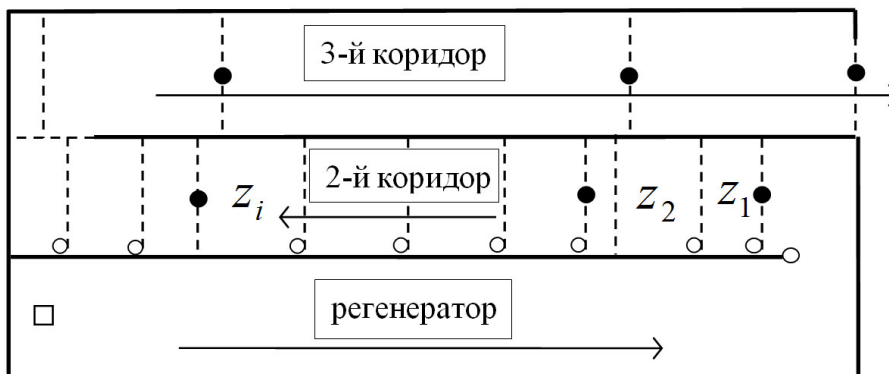


Рис. 2: Схема разделения аэротенка на субкомпартменты, где \bullet — место отбора проб; \circ — место вхождения сточных вод в аэротенк; \square — место вхождения иловой смеси в аэротенк; \rightarrow — направление движения иловой смеси; --- — граница субкомпартмента

Концентрацию органического субстрата, как правило, характеризуют значением БПК_{полн}³. Введем обозначения, в которых для простоты записи не использованы номера компартментов. Концентрации на входе и выходе из

³Полное биохимическое потребление кислорода — количество кислорода, которое необходимо для аэробного биохимического окисления органических соединений под действием микроорганизмов.

компартамента соответственно: S_S^{in}, S_S — легко биоразложимых органических веществ (г БПК_{полн}/м³), S_{NH}^{in}, S_{NH} — аммония (г NH₄/м³), X_H^{in}, X_H — гетеротрофных микроорганизмов (г гетеротрофов/м³), X_A^{in}, X_A — автотрофных микроорганизмов (г автотрофов/м³), S_O^{in}, S_O — растворенного кислорода (г O₂/м³). Параметры модели: K_S — константа полунасыщения гетеротрофов легко биоразложимыми органическими веществами (г БПК_{полн}/м³), K_{NH} — константа полунасыщения автотрофов аммонием (г NH₄/м³), $K_{O,H}$ — константа полунасыщения гетеротрофов кислородом (г O₂/м³), $K_{O,A}$ — константа полунасыщения автотрофов кислородом (г O₂/м³), Y_H — константа перехода массы легко биоразложимого органического субстрата в биомассу гетеротрофов (г гетеротрофов/г БПК_{полн}), Y_A — константа перехода массы аммония в биомассу автотрофов (г автотрофов/г NH₄), b_H — скорость распада гетеротрофов (1/мин), b_A — скорость распада автотрофов (1/мин), μ_H — максимальная скорость роста гетеротрофов (1/мин), μ_A — максимальная скорость роста автотрофов (1/мин).

Влияние насыщения микроорганизмов субстратом и кислородом на скорости окислительных реакций учтено с помощью функций Моно

$$f(S, K) = \frac{S}{S + K}.$$

В общей биомассе активного ила гетеротрофов значительно больше, чем автотрофов. Гетеротрофные микроорганизмы преимущественно окисляют органический субстрат. Отметим, что в значение БПК_{полн} включен расход кислорода на окисление всех органических веществ, в том числе тех, которые не будут окислены в аэротенке. В [3] предложена пороговая функция, позволяющая описать переключение процессов окисления с органики на аммоний при достижении концентрацией S_S некоторого значения $\kappa + \delta$:

$$f_1(S_S) = \frac{1}{1 + e^{10^6 \left(\frac{\kappa + \delta}{S_S} - 1 \right)}}, \quad (1)$$

где κ — значение S_S на выходе из аэротенка, $\delta = 10^{-3}$. Константа 10^6 обеспечивает близость функции $f_1(S_S)$ к разрывной ступенчатой функции, при этом

$$f_1() = f_1(S_S) \approx \begin{cases} f_{\varepsilon_1}, & \text{при } S_S \in (0, \kappa + \delta - \varepsilon), \\ \frac{1}{2}, & \text{при } S_S \in [\kappa + \delta - \varepsilon, \kappa + \delta + \varepsilon], \\ 1 - f_{\varepsilon_2}, & \text{при } S_S \in (\kappa + \delta + \varepsilon, \infty), \end{cases}$$

где $\varepsilon, f_{\varepsilon_1}, f_{\varepsilon_2}$ — достаточно малые положительные величины.

При наличии органических веществ активизируются гетеротрофные микроорганизмы, которые подавляют автотрофные микроорганизмы при конкуренции за кислород. В результате процесс нитрификации (окисления аммония автотрофами) сначала в значительной мере затормаживается и начинает производиться автотрофами по мере удаления органического субстрата, в работе [3] предложена функция, отражающую этот факт:

$$f_2() = f_2(S_S, S_{NH}, K_\alpha) = \frac{S_{NH}/(S_S - \kappa)}{K_\alpha + S_{NH}/(S_S - \kappa)}. \quad (2)$$

Введем константы

$$Q_i = \frac{1}{T_i},$$

где T_i — время прохождения иловой смесью i -го субкомпартамента аэротенка. На основе уравнения материального баланса, предложенного в работе⁴, для описания процесса биологической очистки сточных вод в аэротенках промежуточного типа автором предложена динамическая математическая модель, в которой для простоты записи не указаны номера компартамента:

$$\dot{S}_S = Q(S_S^{in} - S_S) - \frac{\mu_H}{Y_H} f(S_S, K_S) f(S_O, K_{O,H}) f_1() X_H, \quad (3)$$

$$\dot{S}_{NH} = Q(S_{NH}^{in} - S_{NH}) - \frac{\mu_A}{Y_A} f(S_{NH}, K_{NH}) f(S_O, K_{O,A}) f_2() X_A, \quad (4)$$

$$\dot{X}_H = Q(X_H^{in} - X_H) + (\mu_H f(S_S, K_S) f(S_O, K_{O,H}) f_1() - b_H) X_H, \quad (5)$$

$$\dot{X}_A = Q(X_A^{in} - X_A) + (\mu_A f(S_{NH}, K_{NH}) f(S_O, K_{O,A}) f_2() - b_A) X_A. \quad (6)$$

При достаточном приближении S_S к значению κ гетеротрофы начинают окислять другие типы органических субстратов, которые не являются легко биоразложимой органикой. Активизация этого процесса требует некоторого времени, поэтому окисление других типов субстратов происходит преимущественно в третьем коридоре аэротенка. В результате переключения окислительных процессов уравнения (3) и (5) соответственно заменяются на уравнения:

$$\dot{S}_S = Q(S_S^{in} - S_S) - \frac{1}{1 + e^{10^6 \left(\frac{\kappa + \delta}{S_S} - 1 \right)}} X_H, \quad (7)$$

$$\dot{X}_H = Q(X_H^{in} - X_H) - \beta \frac{V_{cv}}{V_{il}} X_H, \quad (8)$$

⁴Вавилин В. А. Время оборота биомассы и деструкция органического вещества в системах биологической очистки. М. : Наука, 1986. 143 с.

где V_{il} , V_{cv} — расходы активного ила и сточных вод соответственно, β — параметр, характеризующий удельную скорость роста гетеротрофов за счет окисления субстратов, не являющихся легко биоразложимой органикой.

Пусть n_p — количество параметров модели, $P = (p_1, \dots, p_{n_p})'$ — вектор параметров: $P \in \Pi = \{P : p_q \in [\underline{P}_q, \overline{P}_q]\} \in R^{n_p}$, $q = 1, \dots, n_p$, где $'$ — символ операции транспонирования, \underline{P}_q и \overline{P}_q — соответственно нижняя и верхняя границы допустимых значений параметра p_q . Методом сканирования для каждого C_j находится вектор параметров $P^0 = (p_1^0, p_2^0, \dots, p_{n_p}^0)'$, доставляющий минимум функционалу

$$J = \sum_{r=1}^{n_y} sc_r^2 (y_r - y_r^m(P))^2, \quad (9)$$

где y_r , $y_r^m(P)$ — соответственно экспериментальные и модельные значения концентраций в конце компартмента, n_y — количество измеряемых концентраций, $r = 1, \dots, n_y$. Для удобства записи опустим номер компартмента в обозначении масштабирующих коэффициентов sc_r , в качестве которых используются величины, обратные к среднему значению соответствующих концентраций.

Введем величину s_{rq} , которая характеризует чувствительность модельного значения концентрации $y_r^m(P)$ к изменению q -го параметра:

$$s_{rq} = sc_r \frac{y_r^m(P + \delta P_q) - y_r^m(P)}{\delta p_q},$$

где $y_r^m(P)$ и $y_r^m(P + \delta P_q)$ — модельные значения концентраций, δP_q — вектор-столбец с нулевыми компонентами, кроме q -й компоненты (равной δp_q), которая является малым приращением значения параметра. Таким образом получим матрицу $S = \{s_{rq}\}$.

Уточнение значений параметров производится на основе модификации алгоритма, представленного в работе⁵, в которой получена система уравнений:

$$(S'S)|_{P^0} \Delta P = S'e_r|_{P^0}, \quad (10)$$

где координаты вектора масштабированных отклонений модельных данных от экспериментальных находятся по формуле $e_r = sc_r(y_r - y_r^m(P^0))$, $\Delta P = P - P^0$.

⁵Chai, Q. Modeling, Estimation, and Control of Biological Wastewater Treatment Plants. Ph.D. thesis, NTNU-HiT / Qian Chai. Porsgrunn, 2008.

Для большинства параметров системы (3)–(8) в работе⁶ представлены области допустимых значений. Области допустимых значения параметров K_α , β могут быть определены экспертом. В результате решения системы (10) находится ΔP , далее получаем вектор $P = P^0 + \Delta P$. Первая модификация алгоритма состоит в том что, если значение параметра выходит из области допустимых значений, то в качестве него берется значение на границе соответствующей области наиболее близкой к значению параметра. Пусть ε_Δ — модуль разности модельных и экспериментальных данных, найденное значение P используется как новая начальная оценка P^0 . Вторая модификация алгоритма состоит в том, что он повторяется и P^0 принимает значение P до тех пор, пока модуль разности ε_Δ на этом шаге меньше соответствующего модуля разности на предыдущем шаге. В результате получаем истинное значение вектора параметров. По экспериментальным данным, полученным на КОС г. Петрозаводска в марте 2013 г., найдены векторы значений параметров для каждого компартмента (таблица 1).

Таблица 1: Значения параметров в компартментах

Параметр	Единицы измерения	C_1	C_2	c_{32}	C_4	C_5
Y_H	г биомассы · (г БПК _{полн}) ⁻¹	0,75	0,75	–	–	–
Y_A	г биомассы · (г аммония) ⁻¹	0,17	0,28	0,17	0,17	0,28
μ_H	сут ⁻¹	10,00	7,00	–	–	–
μ_A	сут ⁻¹	0,80	0,80	0,30	0,05	0,00
b_H	сут ⁻¹	0,05	0,05	–	–	–
b_A	сут ⁻¹	0,05	0,05	0,3	0,05	0,25
K_S	г БПК _{полн} · м ⁻³	200,00	40,00	–	–	–
K_{NH}	г аммония · м ⁻³	1,00	0,70	0,30	0,70	1,00
$K_{O,H}$	г O ₂ · м ⁻³	0,20	0,01	–	–	–
$K_{O,A}$	г O ₂ · м ⁻³	0,40	0,40	1,00	1,50	1,50
K_α	г аммония · (г БПК _{полн}) ⁻¹	5,00	5,00	5,00	5,00	5,00
β	сут ⁻¹	–	–	28,89	3,69	–24,03

Концентрации на выходе из C_j , найденные подстановкой P в соответствующие уравнения (3)–(8), приведены в таблице 2. Во втором и пятом столбцах этой таблицы представлены экспериментальные данные с КОС г. Петрозаводска. Выходные модельные концентрации при использовании параметров, найденных методом сканирования, приведены в третьем, шестом столбцах, при уточненных значениях параметров — в четвертом, седьмом столбцах.

В параграфе 3.1 при введении управления предлагается концентрации X_H и X_A измерять в г БПК_{полн} гетеротрофов/м³ и г БПК_{полн} автотрофов/м³ соответственно, а параметры Y_H и Y_A в г БПК_{полн} гетеротрофов/г БПК_{полн} органического субстрата и

⁶Boukroune, B. A nonlinear observer for an activated sludge wastewater treatment process / B. Boukroune, M. Darouach, S. Gille et al. // American Control Conference. USA, 2009. P. 1027–1033.

Таблица 2: Концентрации на выходе из компарментов

C_i	S_{NH} (г аммония · м ⁻³)			X (г биомассы · м ⁻³)		
	Экп. данные	Сканирование	Уточнение	Экп. данные	Сканирование	Уточнение
C_1	2,750	2,748	2,749	3300,000	3273,000	3273,000
C_2	3,500	3,501	3,500	2635,000	2631,500	2631,500
C_3	2,750	2,747	2,750	3430,000	3458,400	3431,700
C_4	2,250	2,233	2,249	3720,000	3773,500	3766,200
C_5	2,250	2,247	2,247	2760,000	2716,500	2733,300

г БПК_{полн} автотрофов/г NH_4 соответственно. Для модели (3)–(8) автором предложены уравнения динамики концентрации кислорода. Причем, пока гетеротрофы окисляют субстрат с концентрацией S_S , динамика концентрации кислорода описывается уравнением, в котором для простоты записи не указаны номера компартамента:

$$\begin{aligned} \dot{S}_O = & Q(S_O^{in} - S_O) + \hat{u} - \hat{v} - \\ & - \frac{1 - Y_H}{Y_H} \mu_H f(S_S, K_S) f(S_O, K_{O,H}) \frac{1}{1 + e^{10^6 \left(\frac{\kappa + \delta}{S_S} - 1 \right)}} X_H - \\ & - \frac{4,57 - Y_A}{Y_A} \mu_A f(S_{NH}, K_{NH}) f(S_O, K_{O,A}) \frac{S_{NH} / (S_S - \kappa)}{K_\alpha + S_{NH} / (S_S - \kappa)} X_A, \end{aligned} \quad (11)$$

где \hat{u} и \hat{v} — удельные скорости подачи кислорода в аэротенк и выхода кислорода с поверхности воды в атмосферу. Когда гетеротрофы начинают окислять субстрат, не являющийся легко биоразложимой органикой, динамика S_O описывается уравнением

$$\begin{aligned} \dot{S}_O = & Q(S_O^{in} - S_O) + \hat{u} - \hat{v} - \beta_O \beta \frac{V_{cv}}{V_{il}} X_H - \\ & - \frac{4,57 - Y_A}{Y_A} \mu_A f(S_{NH}, K_{NH}) f(S_O, K_{O,A}) \frac{S_{NH} / (S_S - \kappa)}{K_\alpha + S_{NH} / (S_S - \kappa)} X_A, \end{aligned} \quad (12)$$

где β_O (г кислорода · (г БПК_{полн} гетеротрофов)⁻¹) — параметр, характеризующий количество кислорода, которое необходимо гетеротрофам для прироста одного грамма их биомассы за счет окисления субстрата, не являющегося легко биоразложимой органикой. Константы 1 и 4,57 приведены в работе⁷.

Предложен оптимизирующий расход кислорода алгоритм, который состоит в нахождении минимального количества включенных воздуходувок, обеспечивающих необходимую степень биоочистки. В силу их небольшого количества этот алгоритм реализуется перебором всех возможных вариантов количества включенных воздуходувок. На языке программирования

⁷Очистка сточных вод / М. Хенце, П. Армоэс, Й. Ля-Кур-Янсен, Э. Арван. М. : Мир, 2004. 480 с.

«GNU Octave» написана программа, реализующая данный алгоритм, ее листинг приведен в **приложении А** диссертации.

Для КОС г. Петрозаводска установлены нормы допустимого сброса (НДС): по концентрации $S_S - S_{S,NDS} = 6,98$ (г БПК_{полн}/м³), по $S_{NH} - S_{NH,NDS} = 1,35$ (г аммония/м³). С помощью экспериментальных данных, полученных на КОС г. Петрозаводска в феврале 2014 г., была проведена параметрическая идентификация системы (3)–(12). С полученными векторами значений параметров были проведены вычислительные эксперименты, результаты которых отражены в таблице 3.

Таблица 3: Значения концентрации на выходе из аэротенка

Количество включенных воздуходувок	S_S	S_{NH}	X	S_O
3	4,94	3,12	577,69	1,16
4	4,94	1,22	577,91	10,00
5	4,94	1,21	577,91	10,00

Модельные данные показывают, что четыре включенные воздуходувки обеспечивают окисление аммония до значения его концентрации $S_{NH} = 1,22 \leq S_{NH,NDS}$. Включение еще одной воздуходувки влечет неоправданные расходы.

В **параграфе 3.2** рассмотрена задача инвестирования очистных сооружений, которые производят выплаты за негативное воздействие на окружающую среду. При этом, если концентрация субстрата в очищенной сточной воде больше значения НДС, то размер выплат значительно увеличивается. Таким образом, в результате внедрения новых технологий очистки можно сэкономить значительные финансовые средства, которые будем рассматривать в качестве условной прибыли. Модернизация очистных сооружений (предприятия) может происходить за счет кредитно-инвестиционных ресурсов.

Рассмотрим линейную убывающую функцию кредитования

$$K(t) = \frac{2\bar{K}}{\theta_1} \left(1 - \frac{t}{\theta_1} \right),$$

в которой общая сумма кредитных займов \bar{K} берется заемщиком в период времени $(0, \theta_1]$. В период «кредитных каникул» $(0, \theta_2]$ выплаты по кредиту не производятся, начинаются они с момента окончания «кредитных каникул» и производятся в период времени $(\theta_2, T]$. Рассмотрим схемы кредитования с аннуитетными платежами, в которых начисляются сложные проценты по ставке r и для всего периода выплат сохраняется одна и та же величина платежа

$$\delta(\theta_2) = D \left(r + \frac{r}{(1+r)^{T-\theta_2} - 1} \right). \quad (13)$$

На основе результата Егоровой Е. Н. и Хачатряна С. Р., представленного в работе⁸, автор получил формулу для нахождения кредитной задолженности в момент времени θ_2 :

$$D = \frac{2\bar{K}}{r^2\theta_1^2}(e^{r\theta_1}(r\theta_1 - 1) + 1)(1+r)^{\theta_2-\theta_1}. \quad (14)$$

Моменты θ_1 и θ_2 разделяют период кредитования на три периода. Для моделирования динамики стоимости основных производственных фондов очистных сооружений автором предложена система

$$\dot{A}(t) = \begin{cases} A(t)f\varepsilon(p - \gamma) + (1 + \lambda)K(t) - \mu A(t), & t \in (0, \theta_1], \\ A(t)f\varepsilon(p - \gamma) - \mu A(t), & t \in (\theta_1, \theta_2], \\ \varepsilon(A(t)f(p - \gamma) - \delta(\theta_2)) - \mu A(t), & t \in (\theta_2, T], \end{cases} \quad (15)$$

где μ — коэффициент износа, коэффициент λ определяет отношение объема государственных инвестиций к суммарному объему кредитных займов, f — коэффициент фондоотдачи, коэффициент $0 < \varepsilon < 1$ определяет долю условной прибыли, вкладываемой в развитие предприятия. Пусть $A_0 = A(0)$ и \hat{A} — стоимости основных производственных фондов в начальный момент времени и после запланированной модернизации соответственно, T — длительность периода кредитования, \hat{p} — условная прибыль при степени очистки сточных вод, которую обеспечивают основные производственные фонды стоимостью \hat{A} . Будем считать, что улучшение качества очистки сточных вод пропорционально вкладываемым в очистные сооружения финансовым средствам, тогда удельную условную прибыль будем находить по формуле $p = \hat{p}/\hat{A}$. Себестоимость очистки будем считать постоянной величиной γ для любого момента времени.

В работе⁸ описаны три наиболее распространенные схемы кредитования: с равномерным погашением кредита, «воздушный шар», с «кредитными каникулами». Эти схемы отличаются моментом начала выплат кредитной задолженности. Для схемы с «кредитными каникулами» путем интегрирова-

⁸Егорова, Н. Е. Применение дифференциальных уравнений для анализа динамики развития малых предприятий, использующих кредитно-инвестиционные ресурсы / Н. Е. Егорова, С. Р. Хачатрян // Экономика и математические методы. 2006. Т. 42, № 1. С. 50–67.

ния системы (15) получены выражения для нахождения стоимости основных производственных фондов в любой момент времени и функционал для нахождения общей прибыли за весь период кредитования:

$$G = \alpha \left(A_0(e^{\beta T} - 1) + \frac{2(1 + \lambda)\bar{K}e^{\beta T}(\theta_1\beta - 1 + e^{-\beta\theta_1})}{\theta_1^2\beta^2} + \right. \\ \left. + \varepsilon\delta(\theta_2) \left(\frac{1 - e^{\beta(T-\theta_2)}}{\beta} + T - \theta_2 \right) - (1 + \lambda)\bar{K} \right) - \delta(\theta_2)(T - \theta_2). \quad (16)$$

В схеме «воздушный шар» выплата всей кредитной задолженности

$$D_T = \frac{2\bar{K}}{r^2\theta_1^2}(e^{r\theta_1}(r\theta_1 - 1) + 1)(1 + r)^{T-\theta_1} \quad (17)$$

происходит в момент окончания периода кредитования. Динамика стоимости основных производственных фондов очистных сооружений описывается системой

$$\dot{A}(t) = \begin{cases} A(t)(\varepsilon f(p - \gamma) - \mu) + (1 + \lambda)K(t), & t \in (0, \theta_1], \\ A(t)(\varepsilon f(p - \gamma) - \mu), & t \in (\theta_1, T]. \end{cases}$$

Функционал общей условной прибыли:

$$G = \alpha (A(T) - A_0 - (1 + \lambda)\bar{K}) - D_T = \\ = \alpha \left(A_0(e^{\beta T} - 1) + \frac{2(1 - \lambda)\bar{K}e^{\beta T}(\theta_1\beta - 1 + e^{-\beta\theta_1})}{\theta_1^2\beta^2} - (1 + \lambda)\bar{K} \right) - D_T.$$

Для схемы равномерного погашения кредита рассмотрена ситуация, в которой вся сумма кредитных займов \bar{K} берется в начальный момент времени. Тогда $\theta_2 = 0$, $D_0 = \bar{K}$, $\delta(0)$ — величина кредитной выплаты находится по формуле (13). Динамику стоимости основных производственных фондов очистных сооружений описывает система

$$\dot{A}(t) = \begin{cases} \varepsilon(A(t)f(p - \gamma) - \delta(0)) - \mu A(t) + (1 + \lambda)K(t), & t \in (0, \theta_1], \\ \varepsilon(A(t)f(p - \gamma) - \delta(0)) - \mu A(t), & t \in (\theta_1, T]. \end{cases} \quad (18)$$

Функционал общей условной прибыли:

$$\begin{aligned}
 G &= \alpha (A(T) - A_0 + \varepsilon\delta(0)T - (1 + \lambda)\overline{K}) - \delta(0)T = \\
 &= \alpha \left(A_0(e^{\beta T} - 1) + \frac{2(1 + \lambda)\overline{K}e^{\beta T}(\theta_1\beta - 1 + e^{-\beta\theta_1})}{\theta_1^2\beta^2} + \right. \\
 &\left. + \varepsilon\delta(0) \left(\frac{1 - e^{\beta T}}{\beta} + T \right) - (1 + \lambda)\overline{K} \right) - \delta(0)T.
 \end{aligned} \tag{19}$$

Для нахождения момента времени θ_2 , максимизирующего общую условную прибыль предприятия, на языке программирования «GNU Octave» написана программа, листинг которой приведен в **приложении Б** диссертации. Алгоритм этой программы состоит в том, что находятся общие условные прибыли для всех различных значений θ_2 и выбирается тот момент времени окончания «кредитных каникул», который максимизирует общую условную прибыль. Данная программа также создает график зависимости значения функционала общей условной прибыли от выбора момента θ_2 . На рисунке 3 приведен пример такого графика.

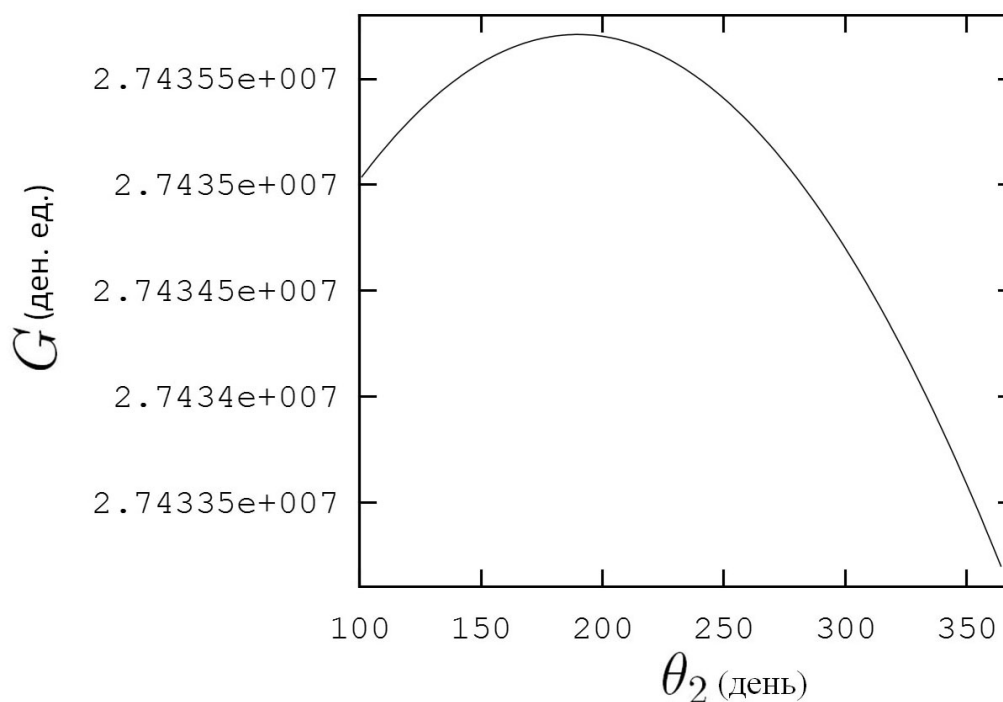


Рис. 3: График зависимости общей условной прибыли предприятия от значения θ_2

В **четвертой главе** рассмотрен процесс биоочистки сточных вод в аэротенках-смесителях. В **параграфе 4.1** предложена математическая модель процесса биоочистки в аэротенках-смесителях:

$$\dot{S} = Q(S^{in} - S) - \frac{\gamma}{Y}SuX, \quad (20)$$

$$\dot{X} = Q(X^{in} - X) + \gamma SuX, \quad (21)$$

где $S = S(t)$ и $X = X(t)$ — концентрации субстрата и активного ила соответственно; константа $Q = 1/T$; T — время биоочистки; $u = u(t)$ — удельная скорость подачи кислорода в аэротенк; γ — удельная максимальная скорость роста микроорганизмов в расчете на один грамм кислорода и один грамм БПК_{полн} субстрата; $Y \in (0, 1)$ — коэффициент перехода массы субстрата в биомассу микроорганизмов. Проведено качественное исследование системы (20), (21), в частности доказана нижеследующая теорема.

Теорема 1. *Открытый треугольник ОАН (рисунок 4) является инвариантным множеством системы (20), (21) при $\forall u \geq 0$.*

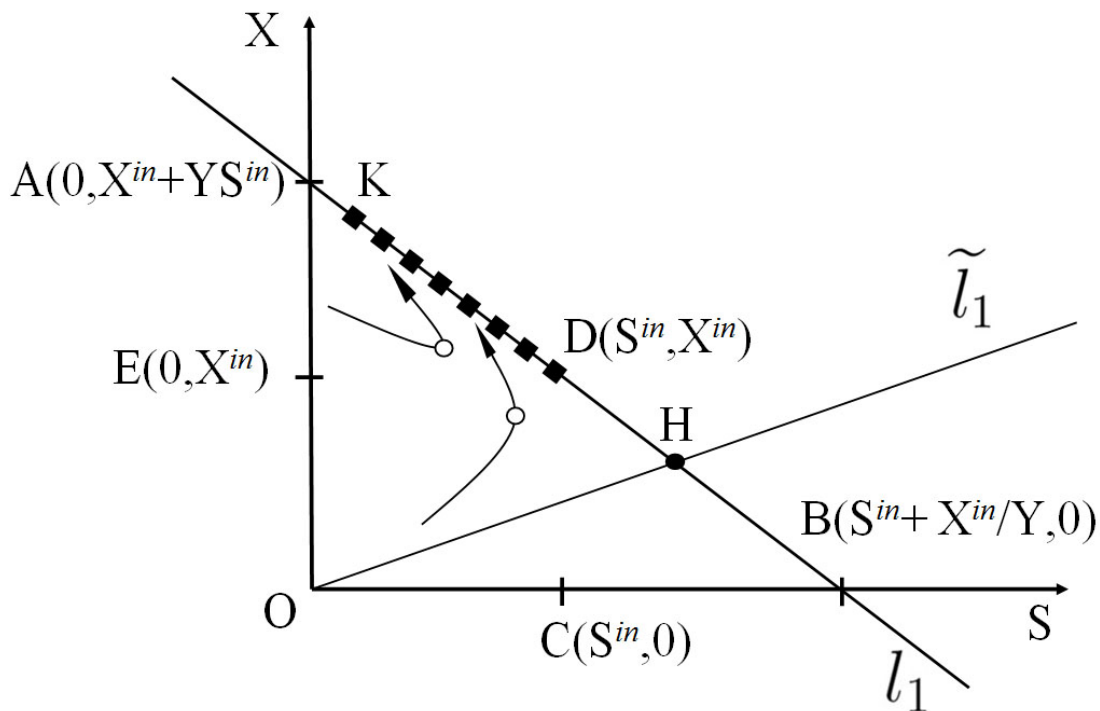


Рис. 4: Фазовый портрет системы (20), (21), где \blacksquare — положение равновесия, \circ — точка переключения управления, $l_1 = \{(S, X) : YS + X = YS^{in} + X^{in}\}$, $\tilde{l}_1 = \{(X, S) : X = S\}$

Рассмотрим кусочно-постоянное управление $u = u(t) \in U = [\underline{u}, \bar{u}]$ удельной скоростью подачи кислорода в аэротенк. Поставим задачу минимизации

функционала

$$\int_0^T u dt \rightarrow \min \quad (22)$$

с ограничениями:

$$S(0) = S_0, \quad X(0) = X_0, \quad S(T) \leq S^*, \quad X(T) \leq X^*, \quad (23)$$

где S_0 и X_0 — начальные значения концентраций субстрата и активного ила соответственно, S^* — НДС субстрата, X^* — концентрация активного ила на выходе из аэротенка. Из теоремы 1 следует, что $X^* \in [0, YS^{in} + X^{in}]$.

В работе⁹ на основе принципа Лагранжа снятия ограничений предложено правило решения задач оптимального управления. Оптимальному управлению соответствует выполнение приведенных ниже, необходимых условий экстремума (24)–(29). Введем обозначения: символы «'» и « $\hat{}$ » соответственно означают транспонирование и оптимальность значения переменной или выражения под ними, λ_i ($i = 0, \dots, 4$) и $p(t) = (p_1(t) \ p_2(t))'$ — множители Лагранжа.

Условия стационарности по z :

$$\dot{p}(t) = \begin{pmatrix} \dot{p}_1(t) \\ \dot{p}_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1(t)(Q + \frac{\gamma}{Y}Xu) - p_2(t)\gamma Xu \\ p_1(t)\frac{\gamma}{Y}Su + p_2(t)(Q - \gamma Su) \end{pmatrix}. \quad (24)$$

Условия трансверсальности по z :

$$p(0) = \begin{pmatrix} p_1(0) \\ p_2(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix}, \quad p(T) = \begin{pmatrix} p_1(T) \\ p_2(T) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\lambda_3 \\ -\lambda_4 \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Из условия оптимальности по u получим, что оптимальное управление должно удовлетворять системе

$$\hat{u} = \begin{cases} \underline{u}, & g(t) \geq 0, \\ \bar{u}, & g(t) < 0, \end{cases} \quad (26)$$

где

$$g(t) = \lambda_0 + \gamma SX \left(\frac{p_1(t)}{Y} - p_2(t) \right).$$

⁹Алексеев, В. М. Оптимальное управление / В. М. Алексеев, В. М. Тихомиров, С. В. Фомин. М. : Наука, 1979. 432 с.

Условия дополняющей нежесткости:

$$\lambda_3(S(T) - S^*) = 0, \quad (27)$$

$$\lambda_4(X(T) - X^*) = 0, \quad (28)$$

Условие неотрицательности

$$\lambda_i \geq 0, \quad i = 0, \dots, 4. \quad (29)$$

Теорема 2. *Управление u , для которого выполнены условия (24)–(29), является оптимальным в смысле минимизации функционала (22) при соблюдении ограничений (23).*

Предложен алгоритм нахождения момента переключения управления, который является оптимальным в смысле минимизации функционала (22) при выполнении ограничений (23). Для реализации данного алгоритма на языке программирования «GNU Octave» написана программа, листинг которой приведен в **приложении В** диссертации.

В **параграфе 4.2** предложено решение задачи стабилизации процесса биочистки. Рассматривается модель процесса биочистки:

$$\begin{cases} \dot{X}(t) = ua_1 + \mu X(t)S(t) - (b + u)X(t), \\ \dot{S}(t) = ba_2 + \frac{\mu}{Y}X(t)S(t) - (b + u)S(t), \end{cases} \quad (30)$$

где $t \in [0, T]$, a_1 — концентрация биомассы активного ила в возвратном потоке; a_2 — входная концентрация субстрата; b — расход сточных вод; μ — максимальная удельная скорость роста биомассы; Y — коэффициент перехода массы субстрата в биомассу микроорганизмов. Заданы начальные значения концентраций $X(0) = X_0 > 0$, $S(0) = S_0 > 0$, u — скорость рециркуляции активного ила.

Пусть X_{max} и S_{max} — максимально допустимые концентрации активного ила и субстрата. В этом параграфе доказано, что фазовые траектории системы (30), попавшие в

$$\Pi_2 = \{(X, S) : 0 \leq X \leq X_{max}, 0 \leq S \leq S_{max}\},$$

не покинут этот прямоугольник, также доказано, что, управляя скоростью рециркуляции активного ила u , можно ограничить множество допустимых значений концентраций субстрата и активного ила.

Заключение

В работе предложена математическая модель с переменной структурой процесса биоочистки сточных вод в аэротенках промежуточного типа, которая описывает динамику концентраций органического субстрата, аммония и двух видов микроорганизмов активного ила, окисляющих эти типы субстратов. В данной модели концентрация кислорода в каждом субкомпарimente принимает постоянное значение. Для описания процессов насыщения микроорганизмов субстратом и кислородом используются функции Моно. С помощью предложенных пороговых функций описана межвидовая конкуренция микроорганизмов за кислород. Разработана модификация численного метода параметрической идентификации Чай К. (Chai Q.). Значения параметров модели найдены по экспериментальным данным, полученным на КОС г. Петрозаводска.

В указанную модель введены уравнения динамики кислорода, после чего проведена параметрическая идентификация этой модели. Предложен алгоритм оптимизации расхода кислорода в процессе биоочистки, который заключается в выборе наименьшего количества включенных воздуходувок, обеспечивающих поддержание выходных концентраций субстратов в допустимых границах.

Для аэротенков-смесителей предложена математическая модель процесса биоочистки сточных вод, которая описывает динамику одного типа субстрата и одного вида микроорганизмов, найдено инвариантное множество значений модельных концентраций, предложен алгоритм оптимизации расхода кислорода в процессе биоочистки. Предложена модель стабилизации процесса биоочистки в аэротенках-смесителях.

Рассмотрена задача выбора оптимальной схемы кредитования в задаче инвестирования очистных сооружений. Для трех различных схем кредитования построены модели динамики стоимости основных производственных фондов очистных сооружений в период кредитования. Предложены функционалы для нахождения общей условной прибыли за весь период кредитования и алгоритм, который позволяет выбрать оптимальную в смысле максимизации общей условной прибыли схему кредитования путем нахождения соответствующего момента окончания «кредитных каникул».

Полученные результаты имеют теоретическое и прикладное значения. Для реализации алгоритмов оптимизации расхода кислорода в процессе биоочистки в аэротенках двух указанных типов и для нахождения оптимальной схемы кредитования при модернизации очистных сооружений создан комплекс

проблемно-ориентированных программ, с листингом которых можно ознакомиться в приложениях к диссертации.

В связи с увеличением антропогенной нагрузки на окружающую среду ужесточаются требования к качеству очищенных сточных вод, возникает необходимость в разработке более эффективных методов биоочистки, что обуславливает востребованность проведения дальнейших исследований по теме диссертации. Возможные направления дальнейших исследований заключаются в построении и исследовании динамических систем процесса биоочистки, учитывающих:

- влияние температуры, щелочности сточных вод и прочие внешние воздействия,
- фазы роста микроорганизмов,
- трофические уровни микроорганизмов активного ила.

Список работ, опубликованных по теме диссертации

1. Смирнов, Н. В. Математическое моделирование процесса биологической очистки сточных вод / Н. В. Смирнов // Ярославский педагогический вестник. Сер. «Естественные науки». — 2012. — Т. 3, № 3. — С. 44–49.
2. Кириллов, А. Н. Моделирование динамики малого предприятия и оптимальная схема кредитования / А. Н. Кириллов, Н. В. Смирнов // Ученые записки Петрозаводского государственного университета. Сер. «Естественные и технические науки». — 2012. — № 6 (127). — С. 110–112.
3. Кириллов, А. Н. Математическое моделирование процессов нитрификации и окисления органических веществ в проточной биосистеме / А. Н. Кириллов, Т. В. Рейсс, Н. В. Смирнов // Ученые записки Петрозаводского государственного университета. Сер. «Естественные и технические науки». — 2013. — № 4 (133). — С. 105–109.
4. Смирнов, Н. В. Математическое моделирование процессов нитрификации и окисления органического вещества в системе биологической очистки [Электронный ресурс] / Н. В. Смирнов, А. Н. Кириллов // Вычислительные и информационные технологии для наук об окружающей среде: избранные труды международной молодежной школы и конференции CITES-2013,

25 авг.–5 сент. 2013. — Петрозаводск, 2013. — С. 132–135. Режим доступа: <http://www.scert.ru/f/402/MainPart/CITES-2013-Selected-Papers.pdf>.

5. Смирнов, Н. В. Математическое моделирование динамики сообщества микроорганизмов активного ила / Н. В. Смирнов // Тезисы докладов II Всероссийской молодежной научной конференции «Естественнонаучные основы теории и методов защиты окружающей среды». — С-Пб. : изд-во СПбГУКиТ, 2012. — С. 60–61.
6. Смирнов, Н. В. Моделирование динамики фондов и выбор оптимальной схемы кредитования малого предприятия / Н. В. Смирнов // Обзорные прикладной и промышленной математики. Т. 19, выпуск 2. — М. : ОАО Типография «Новости», 2012. — С. 279–280.
7. Смирнов, Н. В. Математическое моделирование процессов нитрификации и окисления органического субстрата в системе биологической очистки [Электронный ресурс] / Н. В. Смирнов // Математическое моделирование в экологии : материалы 3-й Нац. науч. конф. с междунар. участием, 21–25 окт. 2013. — Пущино : ИФХиБПП РАН, 2013. — С. 245–246. — 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). Загл. с этикетки диска.