

Използване на динамични стохастични модели за описание на процеса биологично пречистване на замърсени води

Диана Дечева

Минно-геоложки университет "Св. Иван Рилски", 1700 София

РЕЗЮМЕ. Представени са динамични стохастични модели, позволяващи определяне на основни параметри на биологичното пречистване в биобасейни като функция от количествените характеристики на постъпващата вода. Доказани са добрите предсказващи свойства на получените модели, чрез определяне на статистическите им характеристики.

USE OF DYNAMIC STOCHASTICS MODELS FOR DESCRIPTION OF THE PROCESS OF BIOLOGICAL CLARIFICATION OF POLLUTED WATER.

ABSTRACT. Here are presented dynamic stochastics models, that allow determination of major parameters of biological clarification in bio-pools as a function of the quantitative characteristics of the incoming water. The predicting parameters of the resulting models are proven via determination of their statistical characteristics.

I. Състояние на проблема

I.2. Същност на биологичното пречистване на отпадни води

В световен мащаб съществува тенденция на непрекъснато нарастване на консумацията на питейна вода. Това води до увеличаване на обема на битовите отпадни води и необходимостта от тяхното ефективно пречистване, с цел опазване на водните течения и басейни.

Основен етап от пречистването на битово замърсени води е биологичното пречистване. При него, чрез жизнената дейност на специално култивирани рекомбинантни щамове, се осъществява превръщане на съдържащите се в отпадните води органични вещества в минерални продукти.

Биологичното пречистване на отпадните води се осъществява в биореактори, които представляват своеобразни изкуствено създадени екологични системи. В тях микроорганизмите използват замърсителите като субстрат за своето развитие. Условията на средата (състав на отпадните води, концентрация на разтворения кислород, температура, рН и др.) определят формиране на специфична биоценоза на култивираната биомаса. Една основна задача на системите за управление на биотехнологичното пречистване е поддържане на такива условия за жизнената дейност на микроорганизмите, които осигуряват висока интензивност на биохимичните процеси.

Поради високата степен на замърсеност на битовите отпадни води (биохимичен потребен кислород БПК₅ от 180 до 400 mg/l), за тяхното пречистване обикновено се прилагат аеробни методи. Комплексът съоръжения за аеробна минерализация в Софийска пречиствателна станция включва:

- биобасейни с активна биомаса от бактериални фокули в суспендирано състояние (активна утайка);
- вторични утайтели.

Биобасейните са с четири коридора и пневматична фимомехурчеста аерация чрез керамични плочи. Водата се подава разсъсредоточено по дължината на втори и трети

коридор, като по този начин се контролира степента на регенерация. Основен елемент на технологията за биологично пречистване е рецикулацията на активна утайка. Поради това биобасейна и вторичния утайтел представляват органически свързана система (фиг. 1), наричана биостъпало.

I.2. Особеност на биотехнологичните процеси като обект за моделиране и управление

Параметрите на биотехнологичните процеси, могат да се разделят на три групи, характеризиращи съответно:

- състоянието на микроорганизмите (концентрация, морфологични особености, скорост на растеж и др.);
- биохимичния състав на културната среда (концентрация на хранителни субстрати, разтворен кислород и др.);
- физикохимичните условия (температура на средата, рН и др.).

Управляващите фактори на процеса биологично пречистване на отпадни води са: степен на регенерация, дебит на подавания въздух и дебит на рециркулиращата активна утайка. Изходните величини са: замърсеност на пречистваните води (по БПК₅ и ХПК) и количество активна утайка. На процеса влияние оказват множество смущаващи въздействия, които условно могат да се разделят на вътрешни и външни. Към външните се отнасят: изменение на състава, дебита, замърсеността, рН и температурата на постъпващата за пречистване вода. Вътрешните смущения са свързани с изменение на физиологичното състояние на микроорганизмите, което се отразява на скоростта на: преработване на хранителната среда, консумация на кислород, топлоотделяне и др.

Биотехнологичните процеси (БТП) се отличават качествено от процесите, протичащи в неживата природа. При тях целевият продукт се получава в следствие на растежа и развитието на живи организми. Затова опитите за механично пренасяне на теорията на управлението на чисто технологичните върху БТП, обикновено не води до желания резултат.

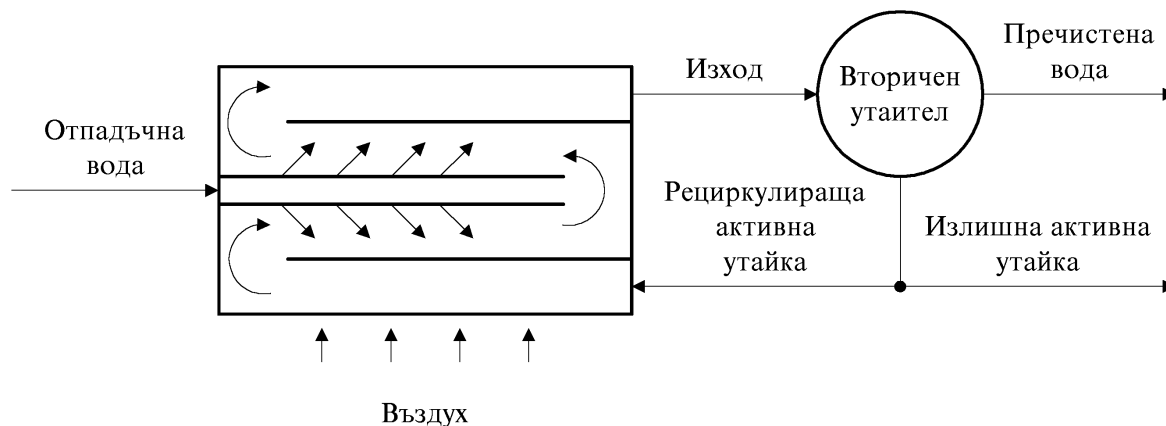
От системна гледна точка, биотехнологичните процеси могат да се разглеждат като нелинейни, нестационарни обекти за управление с непълна информация, чиито статични и динамични характеристики се изменят в широки граници (Цонков Ст. и Филев Д., 1992). Тяхното моделиране и управление се затруднява от:

- отсъствие на датчици и анализатори за непрекъснат контрол на основни биотехнологични величини като кон-

центрация на биомасата, продукти на метаболизма, компоненти на субстрата и др.;

- липса на задълбочен анализ на влиянието на метаболизма, кинетиката, морфологията и др. върху процесите на управлението и обратно;

- трудности при отчитане на процеса мащабиране, който има съществено значение при пренасяне на резултатите от лабораторни в промишлени условия.



Фиг. 1. Функционална схема на биостъпалото

Поради това, функциите на внедрените системи за управление обикновено се свеждат до автоматично регулиране на количеството подаван въздух или стабилизация на рН. Рядко се правят опити за програмно управление по зададен профил на технологичните параметри.

Внедряването на ефективни системи за управление е пряко свързано с разработване на адекватни модели на процеса биотехнологично пречистване. По този въпрос се работи от средата на 40-те години на миналия век. Бурното му развитие през последното десетилетие е пряко свързано с масовото навлизане на биотехнологиите, развитието на експериментално-статистическите методи и изчислителната техника. Въпреки това, до момента няма разработен цялостен модел на процесите, протичащи при биологичното пречистване, който да е приложим за целите на автоматизацията им.

II. Подходи за моделиране на биотехнологичните процеси

Първият модел, даващ връзка между специфичната скорост на растеж в зависимост от концентрацията на лимитиращия субстрат в културната среда е предложен от Monod през 1942 г. Той спада към групата на кинетичните модели, систематизирани от Бирюков и Кантере, 1985 г. Този тип модели не мога пряко да се използват в системите за автоматизация, но намират приложение при симулиране на обекта на етапа синтез и проектиране на системи за управление. Последните постижения в това направление са свързани с работата на колектив от японски специалисти, разработващи програмна система "Електронна клетка" за създаване на модели на ензимната кинетика (<http://www.e-cell.org/manuel>).

Структурните модели описват вътрешноклетъчните механизми и отразяват биохимията на клетката. Тава определя тяхната сложна структура, големия брой параметри, както и необходимостта от значителен обем експеримен-

тални данни за оценяване параметрите на модела. Поради своята сложност и специфичност, те са обект преди всичко на теоретични изследвания.

Bastin и Dochain (1990 г.) предлагат метод за синтез на оперативен модел, наречен от тях "General Dynamical Model". Посочва се, че той може да се използва както при синтез на алгоритми за управление, така и при оценяване на неизмерими кинетични параметри като биомаса, метаболитни продукти и др. До момента има данни за прилагането му при подготовка за внедряване на нови биотехнологии.

При управление на технологичните процеси широко разпространение намират неструктурните модели. Те заменят действителната схема на биохимичните превръщания с приблизителна опростена схема от макрореакции. В тях се използват само величини, които могат да бъдат измерени или анализирани в хода на процеса.

Екип от Чешката академия на науките (<http://www.utia.cas.cz>) съобщава, че са постигнати много добри резултати при използване на полиномиални модели за описание на биотехнологичния процес получаване на протеини от хлебна мая.

В последните години се правят опити за използване на невронни мрежи при моделиране на биотехнологични процеси. Основните проблеми в това направление са свързани с липсата на точни критерии за избор на структурата на мрежата, необходимостта от голям брой експериментални данни, продължителното време на обучение, невъзможността за екстраполация на резултатите. Въпреки това, с използване на невронни мрежи успешно са разработени модели за оценка на неизмерими параметри на биотехнологични процеси.

Трябва да се отбележи, че видът на модела е пряко свързан с избрания подход за управление (Игнатова, Патаринска, 2002). Това, както и множеството нерешени проблеми, определят разнообразните направления на търсене

на методи за намиране на модели на биотехнологичните процеси.

III. Дискретни входно-изходни модели

III.1. Динамични стохастични модели

Входно-изходните модели позволяват изучавания обект да се разглежда като "черна кутия". Синтезираните зависимости се базират единствено на информацията от измерванията на входните и изходни параметри.

Общият запис на модела на динамична стохастична система има вида:

$$A(z^{-1})y(z) = \frac{B(z^{-1})}{F(z^{-1})}u(z)z^{-n_k} + \frac{C(z^{-1})}{D(z^{-1})}v(z), \quad (1)$$

където: с u , y и v са означени съответно входа, изхода и смущаващото въздействие,

A , B , C , D и F са полиноми по степените на z^{-1} :

$$A(z^{-1}) = 1 + a_1 z^{-1} + \dots + a_{n_a} z^{-n_a}$$

$$B(z^{-1}) = b_0 + b_1 z^{-1} + \dots + b_{n_b} z^{-n_b}$$

$$C(z^{-1}) = 1 + c_1 z^{-1} + \dots + c_{n_c} z^{-n_c}$$

$$D(z^{-1}) = 1 + d_1 z^{-1} + \dots + d_{n_d} z^{-n_d}$$

$$F(z^{-1}) = 1 + f_1 z^{-1} + \dots + f_{n_f} z^{-n_f},$$

а z^{-1} е оператор за изместване $z^{-j}\{u_i\} = u_{i-j}$.

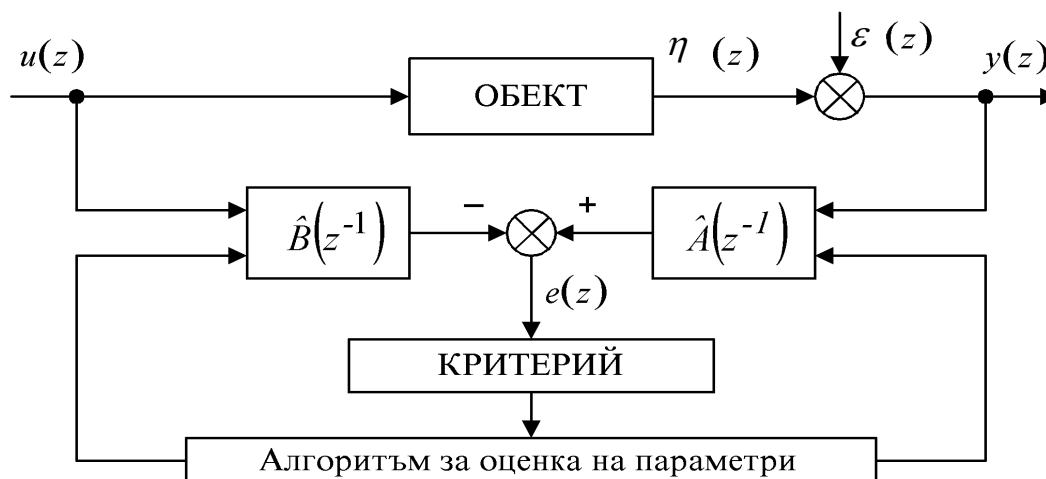
В практиката се прилагат модели, явяващи се частни случаи на общия динамичен модел. Един от най-често използваните е "авторегресия – външен входен сигнал" (ARX), при който полиномите C , F и D са равни на 1. Чрез модел от този тип е извършено описание на основни технологични параметри при пречистване на замърсени води.

III.2. Оценка на коефициентите в дискретните стохастични модели

За оценяване на коефициентите в полиномите, включени в търсения дискретен стохастичен модел, се използват две групи методи:

- основаващи се на грешката в модела (Equation error methods);
- минимизиращи грешката от предсказание (Predictor error methods).

При търсенето на модели, даващи връзка между основни показатели на био-пречистването на замърсени води, са използвани методи от първата група. Функционална схема, отразяваща механизма на оценка на коефициентите в този случай е представена на фиг. 2.



Фиг. 2. Механизъм на оценяване на коефициентите в динамични стохастични модели

Критерият, който се минимизира е средноквадратичен и има вида:

$$Q(\theta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_i^2(\hat{\theta}) \quad (2)$$

където:

$$e(z) = \hat{A}(z^{-1})y(z) - \hat{B}(z^{-1})u(z),$$

N е броят на измерените стойности за входа и изхода, а с $\hat{\theta}$ са означени оценките на търсените параметри.

Оценките $\hat{\theta}$ на коефициентите в полиномите, включени в модела са търсени с използване на два метода:

A/ Метод на най-малките квадрати (МНК), реализиращ решаване на матричното уравнение

$$\hat{\theta} = (F^T W F)^{-1} F^T W Y, \quad (3)$$

където: W е диагонална тегловна матрица, F има вида

$$F = \begin{bmatrix} -y_{n_a+n_k} & \dots & -y_{n_k+1} & u_{n_a} & \dots & u_{n_a-n_b+1} \\ -y_{n_a+n_k+1} & \dots & -y_{n_k+2} & u_{n_a+1} & \dots & u_{n_a-n_b+2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -y_{N-1} & \dots & -y_{N-n_a} & u_{N-n_k-1} & \dots & u_{N-n_k-n_b} \end{bmatrix},$$

а векторът на изходите е

$$Y^T = [y_{n_a+n_k+1} \ y_{n_a+n_k+2} \ \dots \ y_N].$$

Б/ Метод на инструменталната променлива (МИП), оценяващ $\hat{\theta}$ по зависимостта:

$$\hat{\theta} = (V^T F)^{-1} V^T Y, \quad (4)$$

където матрица V има вида на F , но в нея измерените стойности на изхода са заместени с предсказаните по текущо оценявания модел $\hat{Y}$.

При реализация на метода първо се намират оценките по метода на най-малките квадрати. Полученият модел се използва за изчисляване на предсказаните стойности на изхода. С тях се формира матрица V и се намират нови оценки на $\hat{\theta}$. Те се използват за изчисляване на нови стойности за $\hat{Y}$ и т.н., докато оценките на параметрите или критерия $Q(\theta)$ практически престанат да се изменят.

IV. Резултати от търсенето на динамични стохастични модели за описание на основни параметри на биологичното пречистване на замърсени води

Основна задача при оценка на коефициентите в динамични стохастични модели е изборът на тяхната структура и реда на включените полиноми. Обикновено това се реализира чрез итеративна процедура, като намерените модели се сравняват по някакъв критерий.

В случая е използван информационния критерий на Акаике FPE (крайна грешка от предсказанието), който отчита функцията на загубите

$$Q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2, \quad (5)$$

обема на извадката N и сумарния брой коефициенти в модела k .

$$FPE = \frac{1 + \frac{k}{N}}{1 - \frac{k}{N}} \cdot \frac{Q}{N} \quad (6)$$

За най-добър е приет модела, минимизиращ критерия FPE. Като допълнителна сравнителна характеристика за всички изследвани модели е определена и дисперсията на предсказанието $\hat{S}^2$.

Оценката на коефициентите в динамичните стохастични модели е осъществена в средата на MATLAB. Обработени

са данни от Софийска пречиствателна станция, обхващащи периода от месец март до месец май. Съществен проблем при търсенето на модели, даващи връзка между основни параметри на биологичното пречистване беше ограниченият обем на извадката и малкият брой измервани параметри в реално време. На практика единственият автоматично измерващ се показател на входа на пречиствателната станция е количеството постъпила вода.

Оценени и анализирани са:

1. Модел, описващ рециркуляционното съотношение като функция от дебита на входните замърсени води.
2. Модел, позволяващ определяне на необходимото време за престой в биобасейна като функция от количеството постъпила вода за пречистване.

Обработката е извършена с центрирани стойности на входа и изхода, с цел намаляване на ефекта на взаимна зависимост между данните, в резултат на пасивния характер на експеримента.

В таблица 1 са представени намерените оценки на коефициентите и статистически характеристики на моделите.

Таблица 1.
Параметри на намерените модели

метод	показател	модел 1	модел 2
М	коэффициенти	b_0	-0,1215
		b_1	0,0161
		a_1	-0,1676
		a_2	0,0260
К	FPE	$2,61 \cdot 10^{-5}$	$6,74 \cdot 10^{-4}$
	$\hat{S}^2$	$2,10 \cdot 10^{-5}$	$5,02 \cdot 10^{-4}$
М	коэффициенти	b_0	-0,1215
		b_1	0,0505
		a_1	-0,4578
		a_2	-1,0016
П	FPE	$4,70 \cdot 10^{-5}$	$7,77 \cdot 10^{-3}$
	$\hat{S}^2$	$2,40 \cdot 10^{-5}$	$4,96 \cdot 10^{-4}$

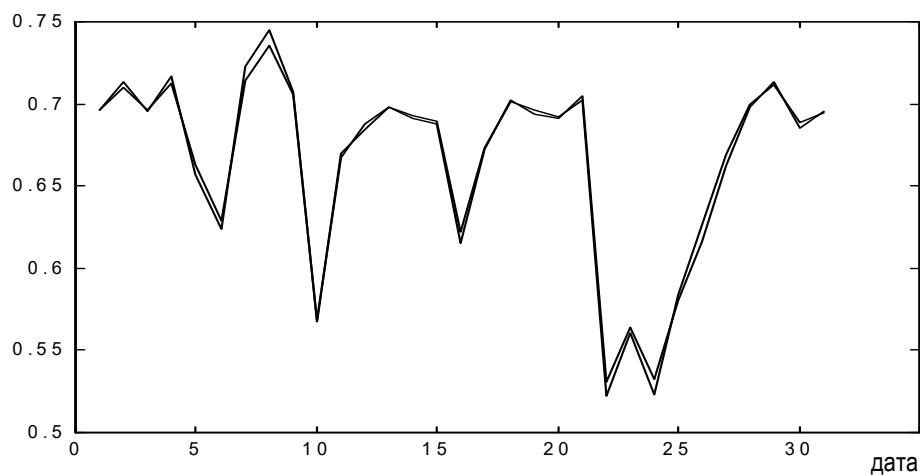
От анализа на представените данни в таблицата могат да се направят следните изводи:

1. Намерените модели са с добри предсказващи свойства. Това твърдение е илюстрирано на фиг. 3, където са представени измерените през месец май и предсказани по модела стойности за рециркуляционно съотношение.
2. Използваният метод за оценка на коефициентите незначително влияе на характеристиките на намерените модели.

За изследване на екстраполационните свойства на намерените модели, е осъществен следния експеримент:

1. Извършена е оценка на модел от тип 2 чрез използване на данните само за месец март. Резултатите са представени в таблица 2.
2. С намерения модел са определени предсказаните стойности на изхода за месец април. Те са сравнени с експериментално получените.

Рециркуляционно отношение

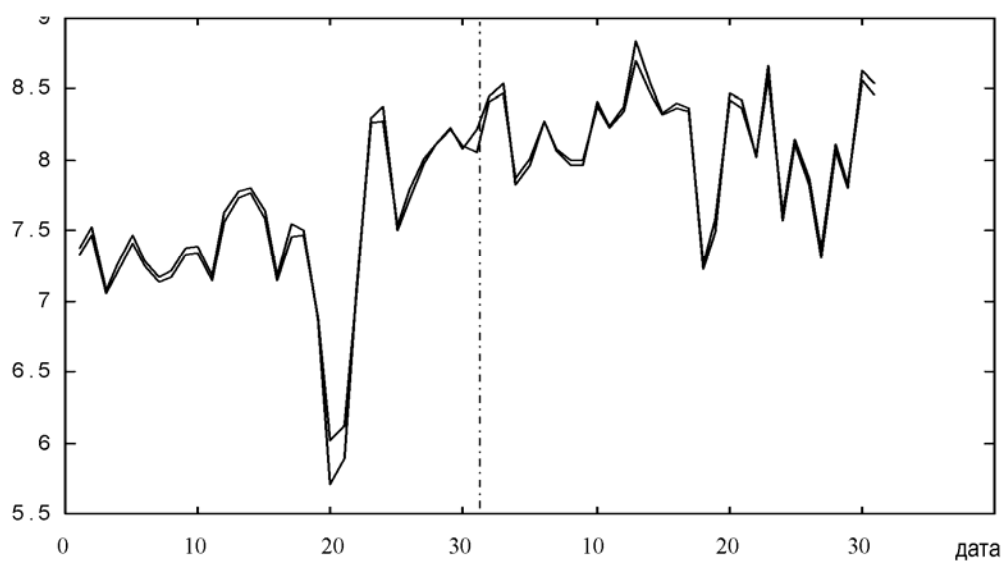


Фиг. 3.

Резултатите са представени графично. На фиг. 4 са дадени измерените и предсказани стойности за изхода за месеци март и април, чрез използване на модела, оценен на база цялата извадка. На фиг. 5 са съпоставени действителните данни за времепрестоя на водата в биобасейна през месец април и определените чрез използване на модела, представен в последната колона на таблица 2.

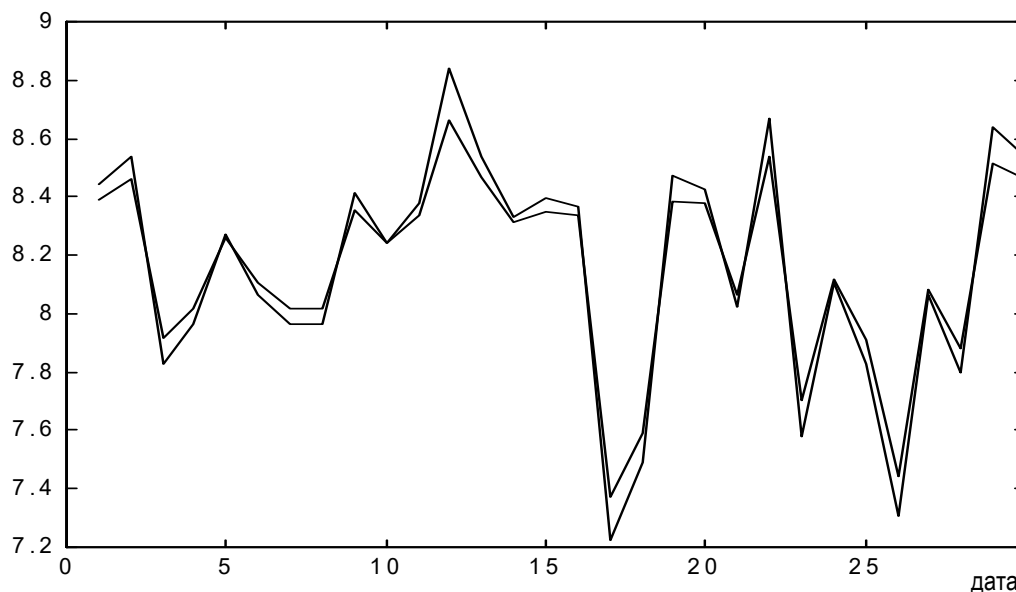
Таблица 2

показател		МНК	МИП
Коефициенти	b_0	-1,3623	-1,3687
	b_1	0,6751	1,3352
	a_1	-0,5189	-1,0016
	a_2	0,0098	0.0134
FPE		$6,17 \cdot 10^{-3}$	$8,20 \cdot 10^{-3}$
$\hat{S}^2$		$5,90 \cdot 10^{-3}$	$6,90 \cdot 10^{-3}$

време за престой на водата
в басейна, часа

Фиг. 4.

време за престой на водата
в басейна, часа



Фиг. 5.

Несъщественият различия между двете графики от фиг. 5 и ниската стойност на определената дисперсия на предсказанието за месец април ($7,00 \cdot 10^{-3}$) потвърждават добрите предсказващи свойства на намерения модел.

V. Изводи

Проведените изследвания показват, че изменението на основни параметри на процеса биологично пречистване на битови отпадни води, успешно може да се опише чрез динамични стохастични модели. Тяхната проста структура позволява лесното им използване в системите за управление.

За получаване на модели с практическа приложимост би следвало да се обработят извадки с по-голям обем, което ще даде възможност за определяне и на интервала през

който трябва да се актуализират моделите с цел отчитане на нестационарността на обекта.

Литература

- Цонков Ст. Филев Д. *Управление на биотехнологичните процеси*, София, Техника, 1992.
- Бирюков, В. В., В. М. Кантере. *Оптимизация периодических процессов микробиологического синтеза*. М., Наука, 1985 г. <http://www.e-cell.org/manuel>
- Bastin, G., D. Dochain. *On-line Estimation and Adaptive Control of Bioreactor*. LADAS, Belgium, 1990. <http://www.utia.cas.cz>
- Игнатова М., Патаринска Т. *Автоматизация на биотехнологичните процеси – състояние и тенденции на развитие*. Автоматика и информатика, № 6, 2002 г. стр. 11-14.