

水処理プロセスの非線形計画問題

井手慎司*、関根孝夫*、藤生昌男*

*株式会社 明電舎 総合研究所

東京都 品川区 大崎 2-1-17

概 要

水処理プロセスは基本的に非線形なプロセスであり、プロセスの研究開発には、多くの非線形計画問題が存在する。非線形計画問題とは非線形なプロセスの制約条件付き最適化を扱う問題である。著者らは、非線形最適化手法として「シンプレックス法」を採用し、いくつかの応用例；1)DO/SRT制御の設定値を最適化する問題、2)呼吸速度計測によって反応速度温度依存係数を同定する問題、3)好気回分実験から動力学的パラメータを同定する問題、4)嫌気回分実験から動力学的パラメータを同定する問題、5)定常解析によって動力学的パラメータを同定する問題において、数学モデルのコンピューターシミュレーションと非線形最適化手法を組み合わせることの有用性を示すことが出来たので発表する。

キーワード

最適化 非線形計画法 非線形計画問題 動力学的モデル シミュレーション 定常解析 DO制御 SRT制御 シンプレックス法 回分槽 嫌気モデル 好気モデル

1. はじめに

水処理プロセスの運転や研究開発には、多くの最適化問題が存在する。例えば、放流水質を満たしながら下水処理場を最小エネルギーコストで運転する事は一つの最適化問題である。室内実験結果より動力学的モデルのパラメータを同定することも、モデルの予測結果が実データと最もよく一致するようにパラメータを求める意味において、やはり最適化問題である。

水処理プロセスのように非線形なプロセスの最適化を扱うことを非線形計画法 (Nonlinear Programming) と呼ぶ。非線形計画法では、先ず最適化の対象となる問題を数学・数値的に表現する必要がある。従って、水処理プロセスの最適化を扱う為には、プロセスの数学モデルやモデルシミュレーションが必要である。非線形計画法の多くは、高い計算能力を必要とする数値的逐次計算であるが、現在のコンピューターは、パソコンレベルであつても、これら非線形最適化問題を解くのに十分な計算能力を備えている。数学モデルのシミュレーションと非線形計画法を組み合わせることによって、水処理プロセスにおける種々の最適化問題を扱うことが出来る。

2. 最適化アルゴリズム

最適化のアルゴリズムを Fig.1 に示す。最適化の第一ステップとして先ず1)最適化するパラメターの初期値を与える。これを受けて2)最適化手法（シプレックス法¹⁾）が最適なパラメターの候補を制限条件の範囲で探索・決定する。3)最適パラメター候補とその他のパラメター、それに入力データを用いて数学モデルのシミュレーションを行なう。4)評価関数によってシミュレーション結果（モデル予測値）の評価を行なう。ここでの評価関数は、消費エネルギーであったり実験データとモデル予測値との誤差の自乗和であったりする。再び1)に戻り、評価関数からの結果を受けた最適化手法が評価関数値が（一般には）より小さくなるように、より最適なパラメターの候補を探索・決定する。以下、同様に1)から4)の操作を繰り返す。繰り返すことによって順次更新される最適パラメター候補の変化が許容範囲以下になった時点でパラメターが最適値に収束したと見なし終了とする。

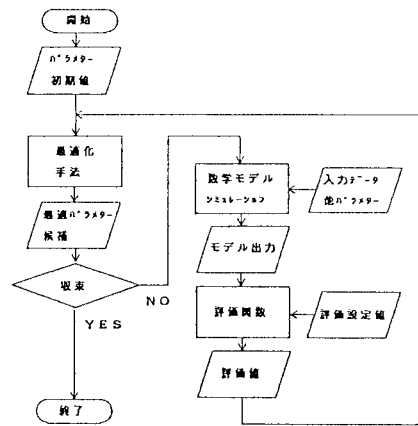


Fig.1 最適化アルゴリズム

本研究では、最適化の手法として直接探索法の1つであるシプレックス法を用いたが、数値微分を用いるならば、その他の最適化手法（最急降下法、ニュートン法等¹⁾）も適用可能性であると考ええる。

3. 応用例

3.1 DO/SRT制御の設定値を最適化する問題²⁾ 最適化の対象は「ばつ気槽出口溶存酸素 (DO) 一定制御」と「固形物滞留時間 (SRT) 一定制御」を行なっている標準的活性汚泥法プロセスである。問題としては、与えられた硝化率 (50%)、処理水BOD濃度 (S) と温度 (T) において、送风量 (消費エネルギー) を最小とするような、DO/SRT制御の各々設定値の最適化を考えた。最適化は、一定入力、最適化パラメター (DO/SRT設定値) とその他のパラメターによってプロセス数学モデルの定常解析を行い、送风量の定常解を評価関数値とし最小化することで行なった。最適化に用いたプロセス数学モデルでは炭素系基質除去、硝化、汚泥増殖・自己酸化、酸素収支、送风量と総括酸素移動係数の関係を考慮に入れた。

得られた最適DO/SRT設定値の関係を Fig.2 に示す。図において縦の3本の曲線は、異なる処理水BOD濃度における最適DO/SRT設定値の関係を、横の3本の曲線は、異なる温度における最適DO/SRT設定値の関係を示す。例えば、図より、硝化率 (50%)、処理水BOD濃度 (10 mg/L) と温度 (13 °C) における、最適なDO/SRT設定値は各々約 2 mg/L と 8 days となる。図は、DO/SRT制御の相互干渉やプロセスの非線形的特性をよく表わしている。

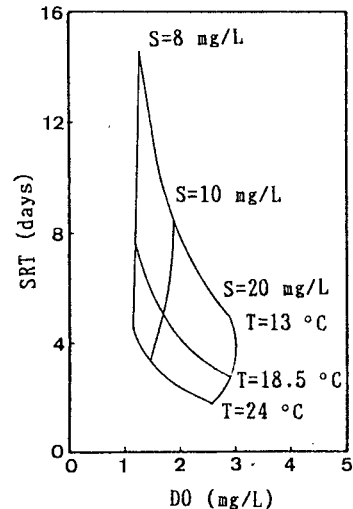


Fig.2 最適 DO 濃度・SRT特性

3. 2 呼吸速度計測によつて反応速度温度依存係数を
 同定する問題 動力学的パラメーター同定に非線形計画法
 を適用した例を示す。比呼吸速度 (K_r) に対する温度と
 基質濃度の関係を、式(1)のように仮定する。

$$K_r = k_{20} \cdot \theta_1^{(T-20)} \cdot S + b_{20} \cdot \theta_2^{(T-20)} \quad (1)$$

ここで、 K_r = 比呼吸速度 (1/hour) : k = 基質除去による
 酸素消費速度 (L/mg/hour) : $\theta_1 = k$ の温度依存係数
 : T = 温度 ($^{\circ}\text{C}$) : S = 基質濃度 (mgBOD/L) : b = 内生呼
 吸速度 (1/hour) : $\theta_2 = b$ の温度依存係数 : サブスクリ
 プト 20 = 温度 (20°C)

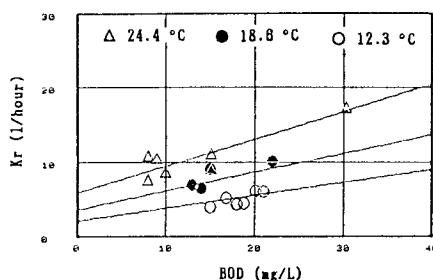


Fig.3 比呼吸速度と基質濃度の関係

Fig.3 は、基質濃度に対する比呼吸速度を異なる3つの温度においてプロットしたものである。こ
 こでは、式(1)の基質濃度に対する理論値 (K_r) が実データに最もよく一致するように (評価関数を
 理論値と実データの誤差の自乗和として)、式(1)中の4つのパラメーター (k_{20} 、 θ_1 、 b_{20} 、 θ_2) の
 最適化を行なった。図中の3本の直線は、各温度における最適化された理論線である。

式(1)では、一定の温度において、基質濃度と比呼吸速度の間に線形関係が存在することから、最
 小自乗法でその温度におけるパラメーター (k 、 b) を求めることが出来る。また、温度とパラメーター (k 、 b) の
 関係に関しても対数を取ることによつて線形化が可能である。従つて、段階的操作で最小自
 乗法を用いて式(1)の4つのパラメーターを最適化することも理論的には可能である。しかし、Fig.3
 のデータにはバラツキが大きく、例えば、温度 (12.3°C) におけるパラメーター (k 、 b) を求めると、
 b の値が理論的に有り得ないマイナスとなり、上記線形化の手法でパラメーターの最適化を行うことが
 不可能である。この例は、問題を非線形としてそのまま扱うことの有利さを示している。

3. 3 好気回分実験から動力学的パラメーターを同定する問題 従来の動力学的パラメーターの同定で
 は、最小自乗法を用いるために、実験系の定常状態等の制約によつて、実験データとパラメーターが線
 形関係となる状態を創り出す必要があつた。微生物の増殖速度の問題から、この制約が実験を長期化
 させる原因であつた。非線形計画法を用いる有利さの一つは、これら線形化の制約を取り除くことで、
 より短時間の実験で多くの動力学的パラメーターを同定できる点にある。

Fig.4 に好気回分実験の結果と最適化されたパラメーターによるシミュレーション結果を示す。最適
 化は、数学モデルの動的シミュレーションを行い評価関数 (実験値とモデル予測値との誤差自乗和)
 を最小とするように動力学的パラメーターの一部を最適化したものである。実験では一連の回分工程が、
 初期投入基質ゼロの場合と、アンモニアのみを加えた場合、それに人工基質を加えた場合で、3回繰
 り返されている。実験では、TOC 濃度 (S)、アルカリ度 (Alk.)、MLSS 濃度 (X)、 $\text{NH}_4\text{-N}$ 濃度 (N)、 DO 濃度 (DO) の時間変化を計測した。図において、実験データは、左縦軸に対しては白抜き
 の○で、右縦軸に対しては黒●でプロットしている。グラフ中の曲線は、最適化されたパラメーターによ
 るシミュレーション予測結果である。

ここで使用した動力学的モデルは、反応速度として Monod 式を用いた一般的な物である。特徴と
 して、人工基質が除去される際にアンモニア生成が、ある一定の収率であるものと仮定している。図
 にも示されているように、実験データとシミュレーション結果はよく一致しており、最適化の有効性
 を示している。

ここで注意すべきは、パラメーターの全ては最適化できない点である。最適化可能なパラメーターは、
 対象となる実験内容に深く関係している。具体的には、その実験内容において感度が高いパラメーターの
 みが最適化可能となる。従つて、そのパラメーターを変動させてもモデルのシミュレーション結果にあ

まり影響を及ぼさないようなパラメーターは、最適化に適さない。感度分析に基づいた実験計画の作成が重要である。

3.4 嫌気回分実験から動学的パラメーターを同定する問題³⁾ 実験期間が長期化する問題に関して、嫌気実験は微生物の増殖速度が遅いため、好気実験以上に深刻である。最適化の内容は、3.3と全く同様である。嫌気実験に非線形計画法を適用した結果は、他に報告した通りである。

3.5 定常解析によって動学的パラメーターを同定する問題⁴⁾ 実処理場（標準的活性汚泥法）を対象とした数学モデルにその処理場の平均的流入量、流入水質を入力し定常解析を行なう。もし、実処理場がそれら入力においてほぼ定常にあると仮定すると、数学モデルからの定常解と実処理場での平均的諸データを最もよく一致するようにモデル内動学的パラメーターを最適化（同定）することが可能である。

同定された動学的パラメーターは、処理場モデルをシミュレーションする場合のパラメーターとして利用することが出来る。また他方、処理場の内部状態を表わす指標として活用することも可能である。例えば、基質除去速度や総括酸素移動係数を上記の最適化で求めれば、実処理場における汚泥の活性度やディフューザーの状態を推測することが可能である。これなどは、非線形計画法を用いた数学モデルの新たな利用法の1つである。

4. まとめ

水処理プロセスにおける非線形計画問題を線形化によって解くことは可能ではあるが、線形化には様々な問題（実験の長期化等）が存在する。コンピュータの計算能力が発達した今日では、問題をそのまま非線形最適化問題として扱い解くことが可能である。その方が、より厳密であり、時間的節約につながる場合がある。更に、数学モデルのシミュレーションと非線形最適化をより積極的に用いることによって、従来では考えられなかったような有効なアウトプットを得ることも可能である。数学モデルのシミュレーションと非線形最適化は問題解決の1つの手法にすぎない。しかし、その可能性は大きく、より広く用いられるべきだと考える。

5. 参考文献

- 1) 今野・山下(1988)、「非線形計画法」、日科技連出版社
- 2) 関根・井手ら(1989)、活性汚泥プロセスにおける硝化過程の最適化、用水と廃水（投稿中）
- 3) 井手・藤生ら(1989)、嫌気モデルのパラメーター最適化手法、第23回水質汚濁学会、pp.183-184
- 4) 井手・関根(1989)、定常解析を用いたパラメーター最適化手法、第26回下水道研究発表会、pp.268-270

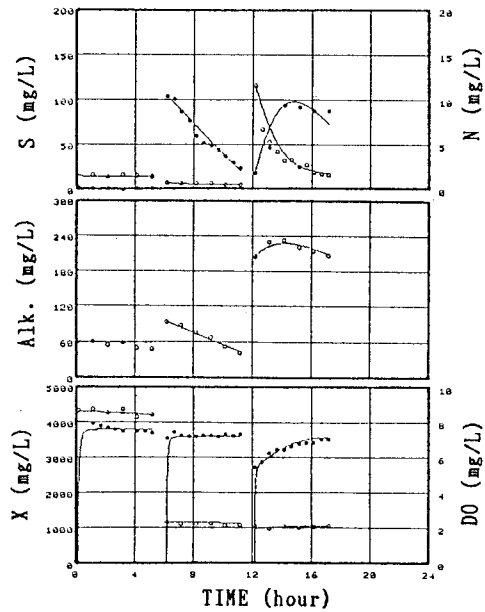


Fig.4 好気回分実験とシミュレーション結果