

Université du Québec  
Institut National de la Recherche Scientifique, INRS-Eau

MODÉLISATION ET CONTRÔLE OPÉRATIONNEL AVANCÉS DE  
PROCÉDÉ DE TRAITEMENT DES EAUX USÉES - APPLICATIONS  
DES RÉSEAUX NEURONAUX ARTIFICIELS

Par  
Yang-guang Du  
M.Sc. (Génie chimique)

Thèse présentée  
pour l'obtention  
du grade de Philosophiae doctorat (Ph.D.)  
en Sciences de l'eau

Jury d'évaluation

Président du jury et examinateur externe	M. Peter J. Jones, professeur Département de génie chimique Université de Sherbrooke
Examineur externe	M. Subba Narasiah, professeur Département de génie civil Université de Sherbrooke
Examineur externe Director Management	M. Rao Y. Surampalli, Engineering Office of NPDES and Facilities U.S. Environmental Protection Agency
Examineur interne	M. Jean-Christian Auclair, professeur INRS-Eau
Directeur de recherche	M. Rajeshwar D. Tyagi, professeur INRS-Eau

Thèse soutenue le 29 avril 1999



## REMERCIEMENTS

La présente étude a été réalisée à l'INRS-Eau, Université du Québec. Je suis vraiment reconnaissant au Dr Villeneuve, Directeur de l'INRS-Eau, pour m'avoir fourni d'excellentes installations de recherches sans lesquelles la réalisation de ce projet de recherche aurait été impossible.

Je désire exprimer ma sincère gratitude à mon superviseur et coopérateur le professeur R. D. Tyagi pour m'avoir si bien guidé dans mon travail et pour ses conseils constructifs. Cela a été un grand plaisir de travailler avec lui pendant toutes ces années. En tant qu'expert dans le traitement des eaux usées, ses intérêts particuliers dans les issues environnementales sont à l'origine de ce projet, auquel il a apporté une grande contribution. Sans son expertise pour me guider, sa coopération enthousiaste et ses innombrables heures passées sur ce projet, la thèse aurait pu être totalement différente.

J'aimerais remercier le professeur B. S. M. Rao, Directeur du Département de Procédé et de Technologie Environnementale, à l'Université de Massey. Il est aussi un ami proche et un collègue qui m'a guidé dans le domaine de la modélisation dynamique des procédés par boues activées. J'ai été profondément impressionné par ses connaissances et ses idées dans ce domaine. Travailler sous sa direction est un plaisir plutôt qu'un travail.

Je suis grandement redevable au professeur Jean-Louis Sasseville, INRS-Eau, qui m'a encouragé et supporté dans toutes les étapes de ce travail.

Je veux aussi exprimer ma gratitude au professeur J.C. Auclair, mon ami et collègue pour son aide et ses encouragements, vers qui je pouvais toujours me tourner.

J'aimerais remercier le professeur P.G.C. Campbell, qui m'a guidé à travers le domaine du lessivage biologique et m'a encouragé pendant la durée de ce projet.

Mes sincères remerciements vont aussi au Dr T.R. Sreekrishnan ainsi qu'à plusieurs de mes collègues étudiants pour leur contribution à cette étude.

J'aimerais aussi remercier le personnel de la bibliothèque et les techniciens de l'institution pour leur apport.

Finalement, je remercie également mon épouse, mes parents, mon frère et ma soeur et mes filles pour leur amour, leur appui et leur encouragement.

**Je suis grandement reconnaissant envers les organismes qui ont contribué financièrement à ce projet, soit la commission de l'Éducation de la République Populaire de Chine et le Conseil de Recherche en Sciences Naturelles et Génie du Canada (subvention #A9484).**

Yang-guang Du

## AVANT-PROPOS

Le traitement des eaux usées est un important secteur du génie de l'environnement. C'est un secteur qui combine des aspects de l'ingénierie, de la biologie, de la chimie, de la physique et de la science de l'information et de la technologie.

Dans les trois dernières décennies, le traitement des eaux usées industrielles a pris de nouvelles proportions, provenant de notre conscience grandissante des risques à la santé et à l'environnement, causés par la disposition arbitraire des déchets dans les cours d'eau naturel et les terres. Il faut cependant noter que la majorité des usines de traitement des eaux usées nécessaire dans plusieurs pays sont maintenant soit en opération ou en construction. Le problème dominant du traitement des eaux usées s'est donc déplacé de ceux de la conception et de la construction à ceux du fonctionnement des usines. Il faut aussi noter que la discipline du traitement des eaux usées et des boues résultantes, devant faire face aux déchets naturels et humains, n'est peut être pas si dépendante mathématiquement que les autres branches de l'ingénierie. Les variations aléatoires de la composition des eaux usées et des boues impliquent que des explications strictement théoriques des phénomènes ne sont pas toujours des valeurs pratiques et la confiance doit être placée sur des interprétations empiriques et philosophiques des observations de ce qui arrive. En fait, l'étude de la modélisation dynamique et du contrôle opérationnel des procédés de traitement des eaux usées a maintenant soulevé de plus en plus d'attention dans les secteurs académique et industriel.

Depuis les années 1990, la compilation des réseaux neuronaux par ordinateur est apparue comme une technologie pratique, avec des applications prometteuses dans plusieurs domaines. La majorité de ses applications concernent les problèmes de reconnaissance des tendances, et utilisent les architectures de réseau pro-actif. Ces dernières années, une tendance grandissante est reliée à l'utilisation de logique floue en association avec la modélisation par réseaux neuronaux, menant à ce qui est appelé les systèmes neuronaux flous. Nous avons convenu, après maintes discussion avec les professeurs Rao et Tyagi, que ces outils avancés pourraient être utilisés adéquatement pour résoudre les problèmes

environnementaux en ingénierie – la modélisation et le contrôle des procédés de traitement des eaux usées dans une méthode plus convenante et qui soit efficace à cause de leur particularité et leur puissance.

Le sujet de cette thèse porte sur l'utilisation intégrée des techniques de modélisation conventionnelles ainsi que de ces outils intelligents (réseaux neuronaux artificiels et logique floue) pour la modélisation et le contrôle des procédés de traitement par boues activées et par bio-lessivage des métaux lourds.

## RÉSUMÉ

Cette thèse porte sur le développement de la modélisation et du contrôle opérationnel des procédés de traitement des eaux usées, ce qui inclue les procédés par boues activées qui vise à éliminer la matière organique des eaux usées ainsi que les procédés successifs de bio-lessivage des métaux lourds présents dans les boues générées par les procédés par boues activées. La technique du réseaux neuronaux artificiels ainsi que les autres techniques de modélisation conventionnelles ont été utilisées pour le développement des systèmes.

En dépit du fait qu'une usine de traitement par boues activées de conception et de fonctionnement appropriés est en mesure de procurer une très bonne performance et peut respecter les normes d'épuration des eaux usées, le fonctionnement et le contrôle d'un traitement biologique représente, de façon générale, un défi en raison de la complexité du comportement du système. En réalité, la performance actuelle des procédés par boues activées est loin d'être satisfaisante en général (Marsili-Libelli, 1989). Pour s'attaquer à une partie des problèmes opérationnels, la recherche sur l'analyse et la prédiction des paramètres de fonctionnement à l'état stationnaire des procédés par boues activées a été réalisé à l'aide de la technologie des réseaux neuronaux. Un modèle neuronal pro-actif a été formulé et entraîné avec des données obtenues à l'aide de simulations. Les résultats de simulation montrent que le modèle neuronal développé possède un excellent potentiel pour interpréter et prédire les relations complexes entre le taux de recyclage, le taux de purge de boues et la charge organique d'alimentation à l'état stationnaire. L'approche du modèle par réseaux neuronaux a aussi été utilisée pour prédire les paramètres de fonctionnement d'une cuve de décantation secondaire d'une usine pilote de traitement par boues activées. Il est important de noter que l'état stationnaire d'une usine de traitement par boues activées n'est en réalité jamais atteint en raison des perturbations constantes du système. Un processus peut être considérée comme étant à l'état stationnaire si on n'y observe aucune perturbation majeure dans le système pendant une longue période de temps ainsi qu'en établissant une moyenne pour éliminer le bruit de fond.

Une étude sur la dynamique du procédé par boues activées a également été entreprise. Une dynamique particulière, mais très importante, est celle en condition de charge. Pour une meilleure description de cette dynamique, le modèle du IAWPRC a été utilisé et modifié de façon à ce que la réponse du système en condition de charge puisse être étudiée en tenant compte de l'impact des caillots existants dans le système sur la dynamique du comportement global du système. Une version simplifiée et détaillée du modèle de floculation a donc été développée, où le taux utilisé était du même type que celui utilisé par le groupe de travail du IAWPRC afin de représenter les cinétiques de réaction à l'intérieur de la matrice de floculation. Le modèle du IAWPRC modifié intègre le transport de masse intraparticulaire à l'intérieur du caillot afin de tenir compte de l'effet des limites de diffusion sur l'oxydation du carbone et la nitrification qui a lieu à l'intérieur des caillots. La méthode de collocation orthogonale a été utilisée pour trouver la solution du modèle de floculation. Le concept du facteur d'efficacité globale des procédés par boues activées a également été proposé et utilisé pour tenir compte de non seulement la grandeur du coagulum mais aussi la distribution des dimensions des caillots. Afin de faciliter la simulation de la dynamique du système, la technique des réseaux neuronaux a été utilisée pour prédire les facteurs d'efficacité globale. Un tel modèle neuronal a permis de réaliser des études de simulation en condition de charge ou sous d'autres paramètres de fonctionnement. Les résultats de simulation montre qu'une dynamique complexe risque d'apparaître, à cause de l'effet de floculation, sous une condition de charge. Donc, une stratégie de contrôle du procédé doit être conçue avec soin pour résoudre ces problèmes de dynamique du système.

Afin d'améliorer la sécurité et la performance de ce traitement biologique des eaux usées, il est important de développer des systèmes de prises de décisions assistés par ordinateur. Ce système informatique intelligent est en mesure d'assister les opérateurs d'usine à résoudre des problèmes qui se présentent quotidiennement. Plus particulièrement, il faut être en mesure de prédire et comprendre de façon heuristique une des plus importantes variables du procédé par boues activées, l'âge des boues. Il faut noter que la technique conventionnel par réseaux neuronaux est puissante car elle peut apprendre à représenter des données dont les tendances sont complexes. Néanmoins, il y a des limites à la réalisation de raisonnement

heuristique du problème. En revanche, l'utilisation des règles logiques excelle dans ce domaine mais sont généralement faible en ce qui concerne l'acquisition de connaissances. Dans ce travail, afin de tirer profit des deux méthodes, les techniques de réseau neuronal et de logique floue ont été combinées pour développer un modèle neuronal flou. Les résultats de simulation montrent que ce modèle neuronal flou est capable d'extraire les règles floues d'un ensemble de données numériques qui peut être utilisé pour réaliser un raisonnement à caractère heuristique.

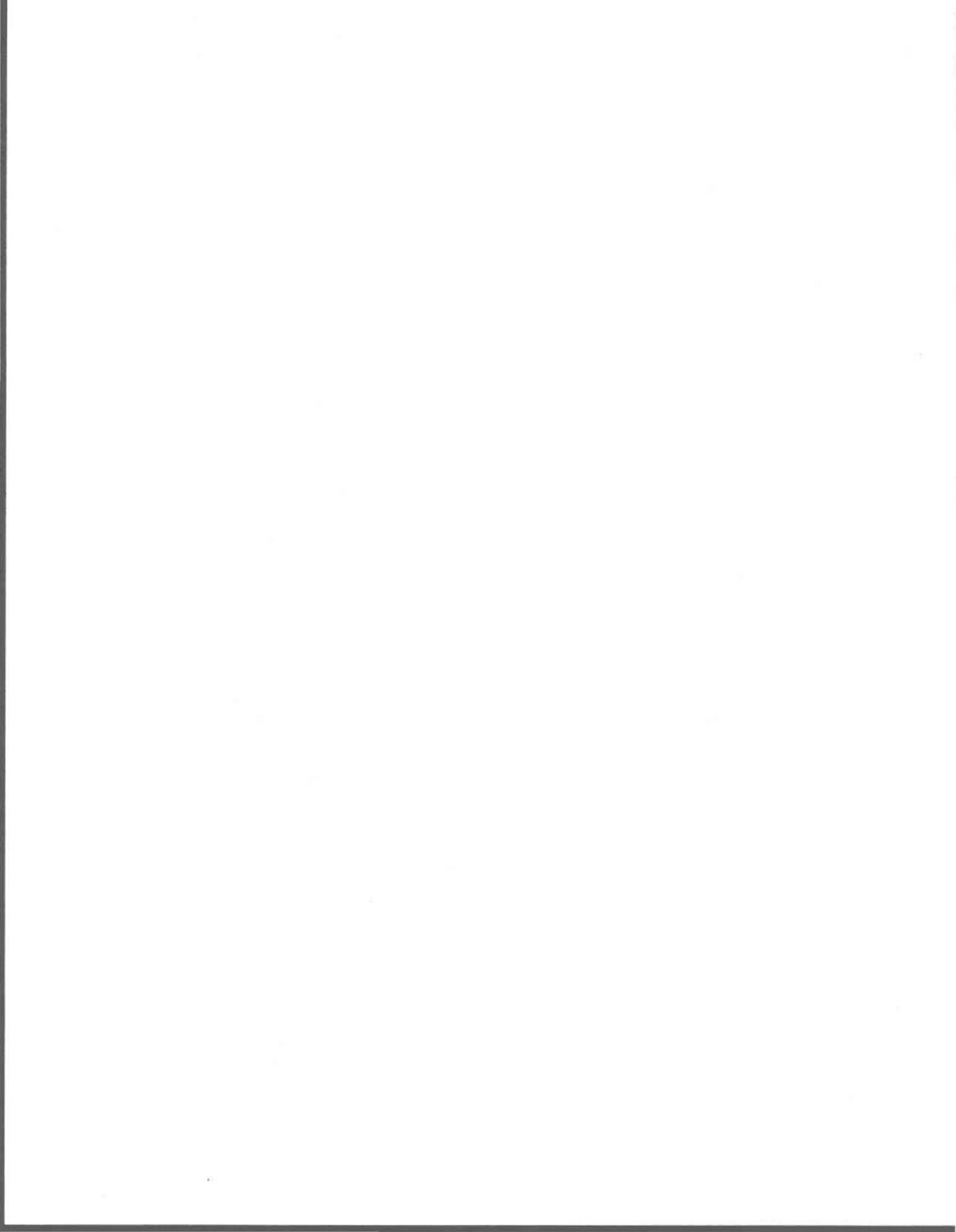
Enfin, une stratégie avancée de fonctionnement a été développée dans ce travail pour déterminer la durée optimale de bio-lessivage des métaux lourds contenus dans les boues. La clé à la résolution de problèmes de fonctionnement réside dans le développement d'un outil de prédiction en temps réel de la solubilisation des métaux. Il faut noter que le procédé de bio-lessivage par oxydation du soufre pour l'enlèvement des métaux, est un procédé biologique complexe. La solubilisation du métal est atteinte plus ou moins rapidement selon le type de boues impliqué, la baisse du pH et la concentration initiale des métaux présents dans les boues. En outre, la température du système exerce une influence indirecte mais importante par son effet sur la croissance bactérienne et le processus de production d'acide. Il serait très difficile, voire même impossible de prédire la solubilisation des métaux dans les boues en utilisant le premier modèle principal. Pour ce faire, un modèle par réseau neuronal a été développé à l'aide d'une grande quantité de données obtenues en laboratoire, en utilisant seulement les valeurs de pH mesurées en continu et la concentration initiale de métaux. La stratégie a été formulée en utilisant la technique de filtrage étendue de Kalman et le modèle neuronal développé. Pour l'étude de cas, six heures sur un total de 120 heures ont été épargnées par l'utilisation de cette méthode.

En résumé, l'objectif principal de cette thèse est de développer une méthodologie intégrant les techniques de modélisation conventionnelles et les réseaux neuronaux pour modéliser et contrôler les procédés de traitement des eaux usées.



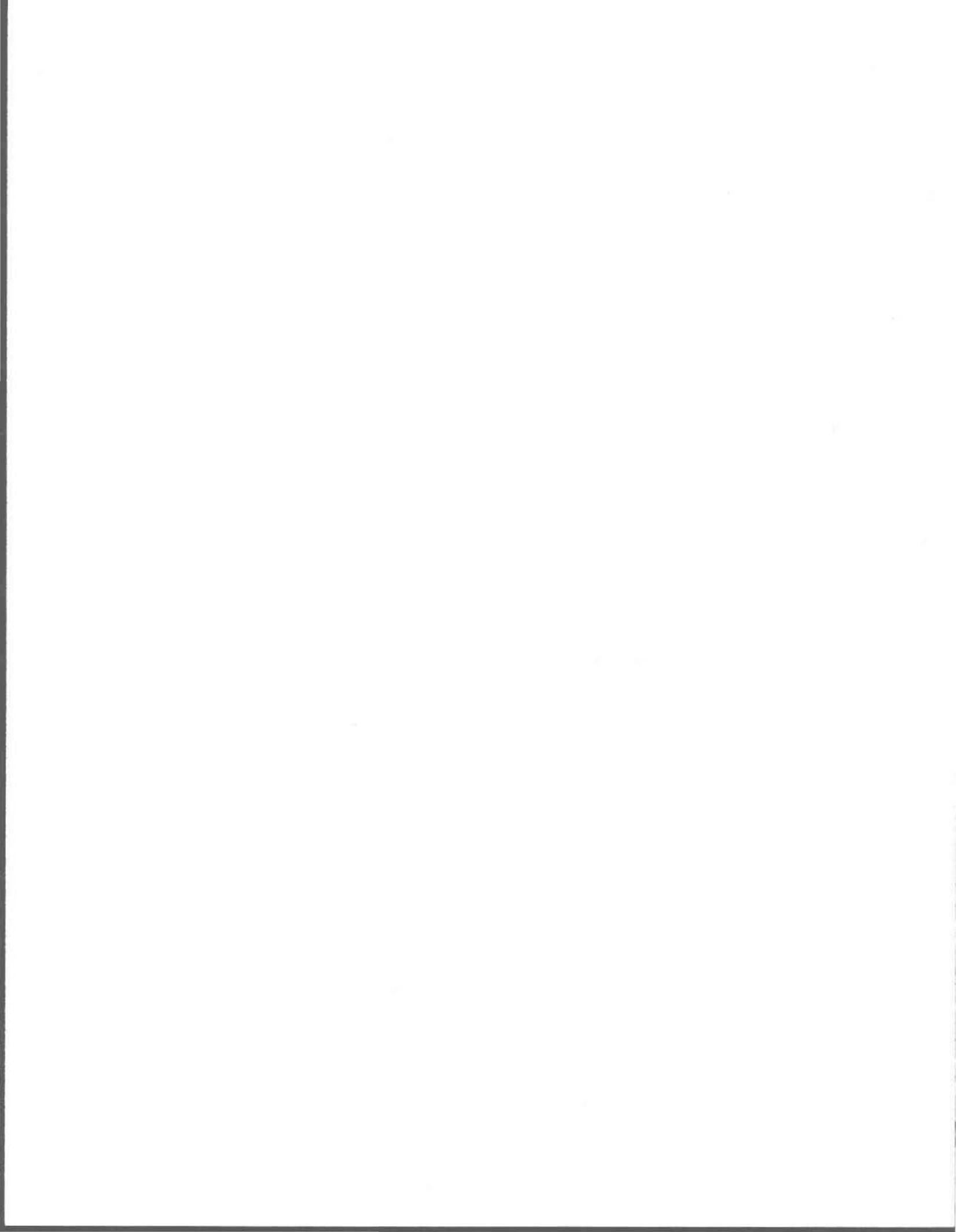
# TABLE DES MATIÈRES

1. Introduction	1
1.1 Procédés par boues activées	1
1.2 Lessivage des métaux présents dans les boues	3
1.3 Revue de littérature	5
1.3.1 Modélisation des procédés par boues activées	5
1.3.2 Modélisation à l'état stable et conception du fonctionnement	6
1.3.3 Modélisation dynamique	7
1.3.4 Modélisation et contrôle du procédé de lessivage des métaux	10
1.3.5 Applications de l'intelligence artificielle dans le traitement des eaux usées	11
1.3.5.1 Système expert et logique floue	11
1.3.5.2 Réseaux neuronaux	12
1.4 Hypothèses de travail	12
1.5 Objectifs de recherche	13
2. Méthodologie	15
2.1 Collocation orthogonale	15
2.2 Réseaux neuronaux	16
2.3 Logique floue	17
3. Résultats	19
3.1 Prédications du fonctionnement à l'aide des modèles neuronaux	19
3.2 Modèle de floculation, effets de diffusion, facteur d'efficacité et performance du système	20
3.3 Comportement dynamique des procédés par boues activées en condition de charge	21
3.4 Système de support de décision basé sur le modèle neuronal flou	22
3.5 Stratégie opérationnelle du procédé de bio-lessivage pour l'enlèvement des métaux lourds	23
4. Discussion	25
4.1 Applications concrètes	25
4.2 Le procédé par boues activées et le modèle de bio-lessivage	25
4.3 Le fonctionnement à l'état stationnaire	26
4.4 Le modèle de floculation	27
4.5 La distribution variable de la taille des caillots	27
4.6 Validation du modèle de floculation	28
4.7 Modélisation et contrôle du procédé de bio-lessivage des métaux	29
5. Conclusion	31
6. Bibliographie	33



## LISTE DES ABRÉVIATIONS

- DTAA: Digestion thermophile autochauffante aérobie
- IA: Intelligence artificielle
- RNA: Réseau neuronal artificiel
- DBO: Demande biochimique en oxygène
- DCO: Demande chimique en oxygène
- F/M: Rapport substrat / micro-organismes (*food-to-microorganism ratio*)
- IAWPRC: *International Association on Water Pollution Research and Control*
- TMRC: Temps moyen de résidence des cellules
- N: Degré polynomial
- POR: Potentiel d'oxydo-réduction
- MOS: Micro-organismes oxydant le soufre
- $P_{N(\alpha,\beta)}(x)$ : Polynôme de Jacobi de degré N dans X
- $\alpha$ : Constante (0. – 1.0)
- $\beta$ : Constante (0. – 1.0)
- l: Polynôme d'interpolation de Lagrange
- y: Variable dépendante
- $A_{i,k}$ : Poids de la première dérivée
- $B_{i,k}$ : Poids de la deuxième dérivée



# 1. INTRODUCTION

---

Il existe quatre niveaux de traitement des eaux usées, soit les niveaux primaires, secondaires, tertiaires et quaternaires (Belhateche, 1995). Le traitement primaire implique une simple étape physique pour éliminer les solides en suspension et les huiles des eaux usées. Le traitement secondaire est conçu pour enlever les matières solubles alors que les traitements subséquents permettent de parachever le traitement. Ce travail est orienté sur la modélisation, la simulation et le contrôle d'un procédé par boues activées (traitement secondaire) ainsi que d'un traitement par bio-lessivage des métaux (traitement tertiaire), et ce à l'aide d'une technique de réseau neuronal et de la logique floue.

Les procédés par boues activées forment l'épine dorsale de plusieurs usines de traitement des eaux usées. En dépit de ses capacités d'enlever efficacement les polluants des eaux usées, ce procédé produit aussi des boues qui peuvent contenir des concentrations élevées de métaux lourds présents dans les eaux usées. Dans une perspective environnementale, il est important d'avoir non seulement un meilleur contrôle et une meilleure opération du procédé par boues activées, mais aussi des procédés ultérieurs de traitement des boues, spécifiquement, pour l'enlèvement des métaux lourds.

## 1.1 Procédés par boues activées

Dû à la complexité en termes de réactions cinétiques, des fortes interactions dans le système, les temps de rétention relativement longs, en plus de l'impact des variations environnementales et le manque de senseurs en continu pour mesurer les caractéristiques macroscopiques, les procédés par boues activées sont habituellement assez difficiles à faire fonctionner et à contrôler. Il existe actuellement plusieurs signalements d'échecs flagrants de procédé causés par une gestion inadéquate (Marsili-Libelli, 1989). Les coûts d'énergie croissants et les normes environnementales plus sévères ont aussi accéléré le besoin pour un fonctionnement et un contrôle sûr. Comme la majorité des usines de traitement par boues activées sont maintenant soit en opération ou en construction, les problèmes

dominant du traitement des eaux usées se sont donc déplacés de ceux de la conception et de la construction à ceux du fonctionnement des usines (Andrews, 1992).

Pour améliorer la performance de fonctionnement et atteindre un contrôle plus efficace des procédés par boues activées, une meilleure compréhension quantitative du comportement du procédé est essentielle. Une façon d'atteindre cela, est par une simulation intensive basée sur un modèle dynamique plus détaillé. L'ampleur des publications sur la modélisation dynamique des procédés par boues activées s'est accrue substantiellement depuis les années 1970. L'Association Internationale sur la Recherche et le Contrôle de la Pollution de l'Eau (International Association on Water Pollution Research and Control, IAWPRC) a formé un groupe de travail en 1983 pour promouvoir le développement de modèles, et pour faciliter l'application, la conception et le fonctionnement des systèmes biologiques de traitement des eaux usées. L'objectif premier était de revoir les modèles existants et en second, d'atteindre un consensus concernant la structure de modèle la plus simple qui a la capacité d'émettre des prédictions réalistes sur la performance de systèmes à boues simples effectuant l'oxydation du carbone, la nitrification et la dénitrification. Le rapport du groupe a été complété et publié en 1986 (Henze *et al.*, 1987). Le fait que le travail de recherche ait été réalisé sur la modélisation dynamique ne veut pas nécessairement dire que les procédés par boues activées sont entièrement compris ou bien simulé (Lessard et Beck, 1991). Les modèles de traitement par boues activées suppose régulièrement que les agrégats microbiens présents dans le bassin d'aération et dans la phase liquide entourant les caillots soit des systèmes à phase unique. Le modèle de traitement par boues activées No. 1 (Henze *et al.*, 1987) proposé par le groupe de travail de l'IAWPRC, qui représente le dernier cri du développement de modèles mécanistiques pour l'enlèvement du carbone organique et de l'azote par les systèmes par boues activées (Dold et Marais, 1986), était aussi basé sur cette présomption. En réalité, les limitations de diffusion intraparticulaire dans les caillots des boues activées peut être significative dans plusieurs situations pratiques (Wuhrmann, 1963; Matson et Characklis, 1976; Andrews, 1991; Bakti et Dick, 1992). Un modèle de traitement par boues activées plus complet pourrait devoir tenir compte de l'existence d'une phase solide et de ces effets sur la dynamique du système.

## 1.2 Lessivage des métaux présents dans les boues

Lors du traitement des eaux usées d'origine domestique, la quantité de boues produites représente environ 1% des eaux usées traitées (Tyagi et Couillard, 1989). La boue générée par le procédé par boues activées pourrait contenir environ 80 à 90% des métaux toxiques (Cd, Cr, Cu, Ni, Zn, Pb, Hg) contenus dans l'eau usée originale. La concentration de ces métaux lourds dans la boue produite par le procédé par boues activées doit être réduite à un niveau recommandé (Flynn *et al.* 1987). Le traitement et la disposition finale de la boue représentent souvent l'étape la plus coûteuse dans le traitement des eaux usées municipales. Quelques approches pour la disposition des boues ont été utilisées: épandage, incinération, rejet dans l'océan, et comme fertilisants agricoles. D'une perspective économique, l'utilisation des boues comme fertilisant apparaît l'alternative la plus intéressante, cependant, la présence de micro-organismes pathogéniques et les concentrations élevées de métaux toxiques représentent une contrainte sérieuse pour l'implantation de cette pratique (Bruce et Davis, 1989; Mininni et Santori, 1987). Des études épidémiologiques ont conduit à déterminer la transmission de maladies suivant l'utilisation de boues comme fertilisants et ont montré que le risque d'infection est associé avec la présence de bactéries pathogènes et de vers helminthiques. Aussi bien, l'assimilation des métaux en traces par les plantes et la bioaccumulation subséquente dans la nourriture peut se produire à travers l'utilisation agricole (Lester *et al.*, 1983). Donc, pour employer la boue comme fertilisant, les métaux toxiques et les pathogènes doivent être enlevés jusqu'aux niveaux recommandés par les différentes provinces et les agences fédérales. Les procédés chimiques et microbiologiques ont été développés pour enlever les métaux et les pathogènes dans la boue.

Plusieurs procédés chimiques pour l'enlèvement des métaux ont été proposés, tels que: la chloration (Olver *et al.*, 1975); l'échange d'ion (Cornwell *et al.*, 1980); l'utilisation d'agents chélatants (Bloomfield et Pruden, 1975; Jenkins *et al.*, 1981; Lo et Chen, 1990); la digestion thermophile autochauffante aérobie (DTAA) couplée avec un traitement à l'acide hydrochloridrique (Hayes *et al.*, 1980) et l'hydrolyse acide oxydante (Kiff et Brown, 1981). Le lessivage acide ( $H_2SO_4$ , HCl,  $HNO_3$ ,  $CH_3COOH$ ) avec ou sans chauffage sont les

procédés qui ont eu le plus d'attention (McNulty *et al.* 1977; Oliver et Carey, 1976; Scott et Horlings, 1975). La nécessité de grandes quantités d'acide pour ajuster le pH des boues et les grandes quantités d'alcalin requises à la fin du procédé de lessivage pour neutraliser la boue rendent ce procédé non intéressant d'un point de vue pratique. Ce qui a suggéré à plusieurs chercheurs d'investiguer dans les méthodes microbiologiques de lessivage.

Deux procédés microbiologiques de lessivage ont été étudiés pour enlever les métaux toxiques des boues. Le procédé de bio-lessivage avec des bactéries oxydant le fer (*Thiobacillus ferrooxidans*) requiert un ajustement du pH initial de la boue à pH 4.0. Le pH naturel de la boue sous des conditions normales est d'environ 7 (6.5-7.5). *T. ferrooxidans* ne croît pas à des pH sous 4.5 et requiert l'addition de sulfates ferreux comme substrat énergétique. En réponse à la croissance des bactéries, le pH de la boue décroît jusqu'à environ 2-2.5 et le potentiel d'oxydoréduction (POR) augmente jusqu'à ~500 mV résultant de la solubilisation des métaux toxiques. Bien que ce procédé résulte en une solubilisation efficace des métaux, sa capacité à détruire les bactéries indicatrices est limitée (Henry *et al.*, 1988). À la fin du procédé, les métaux solubilisés doivent être enlevés rapidement de la boue par une séparation solide-liquide. Si la boue lessivée est conservée dans un contenant pour plus de quatre heures, les métaux vont re-précipiter dû à la décroissance du POR dans la boue.

Les autres méthodes microbiologiques impliquent un groupe de micro-organismes oxydant le soufre (MOS), appelé, 'peu-acidophiles' et 'acidophiles'. Les bactéries peu-acidophiles (ou neutrophiles) est le nom utilisé pour le consortium de MOS avec un pH optimal de croissance d'environ 7.0, l'espèce prédominante étant *Thiobacillus thioparus* (ATCC 55127). Les bactéries acidophiles dénotent un consortium de MOS avec un pH optimal de croissance d'environ 4.0. Dans ce cas l'espèce prédominante est *Thiobacillus thiooxidans* (ATCC 55128). Ce groupe de micro-organismes décroît le pH de la boue de 7.0-7.5 (pH initial) à 2.0 à travers l'oxydation de soufre élémentaire (ajouté à la boue) en acide sulfurique ou par l'oxydation de sulfites métalliques en sulfates métalliques. À pH 2.0, les métaux sont solubilisés et les micro-organismes indicateurs sont réduits en dessous de la

limite de détection. Les métaux solubilisés sont ainsi enlevés de la boue contaminée par une séparation solide-liquide.

Le procédé de bio-lessivage mentionné dans cette étude est une opération généralement réalisé en lots. La modélisation dynamique et le contrôle opérationnel de ce procédé en lots est en réalité un sujet de recherche plutôt récent qui pourrait prendre de l'ampleur (Lessard et Beck, 1991). Des études expérimentales et quelques travaux de modélisation du bio-lessivage ont été réalisés dans nos laboratoires (Tyagi *et al.*, 1993; Sreekrishnan *et al.*, 1993). Cette étude met l'accent sur le développement et l'utilisation de filtres de Kalman et de réseaux neuronaux afin de déterminer un temps optimal de traitement par bio-lessivage en lots.

## **1.3 Revue de littérature**

### **1.3.1 Modélisation des procédés par boues activées**

Les modèles mathématiques sont souvent utilisés pour décrire de façon quantitative le comportement d'un système. Tous les modèles conventionnels de processus chimiques et biochimiques peuvent être décortiqués en quatre parties : les prémisses, les équations de taux et de rendements ainsi que les bilans de masse (Andrews, 1991). Le modèle mathématique utilisé pour décrire la dynamique des procédés par boues activées pourrait s'avérer très complexe (Grady, 1989).

Les modèles mathématiques du traitement des eaux usées par boues activées peuvent être classifiés de plusieurs façons selon le but de la modélisation. Considérant le comportement du temps du système, on pourrait classifier le modèle du système en un d'état stationnaire et dynamique (Andrews, 1992). Les modèles d'état stationnaire sont utilisés pour les systèmes en présumant qu'il n'y a pas de changements en fonction du temps. Par contre, si le comportement du temps varie, les modèles dynamiques doivent être utilisés.

Deux types d'information sont à la disponibilité des ingénieurs pour l'exploitation et le contrôle efficace d'un procédé de traitement des eaux usées (Patry et Chapman, 1989). L'un est basé sur des estimations, des mesures ou des simulation de modèles

mathématiques. L'autre type n'est pas quantifiable, peut-être simplement quelques mots servant à décrire le comportement d'un système de façon inexacte and imprécise découlant de l'expérience d'un opérateur. Les techniques d'intelligence artificielle telles que les réseaux neuronaux, les systèmes-experts ou la logique floue sont des outils particulièrement utiles pour travailler avec des données imprécises et des connaissances inexactes du système afin d'améliorer le contrôle du procédé.

### **1.3.2 Modélisation à l'état stable et conception du fonctionnement**

Les procédés par boues activées sont des systèmes complexes dans les sens biologique et physique. Ce procédé consiste à la base en deux unités de fonctionnement : un bassin aérobique et un décanteur secondaire. Les réactions biologiques prennent place dans l'aérateur et la séparation solide-liquide a lieu dans le décanteur (Lessard et Beck, 1991). Une partie de la boue est recyclée vers l'aérateur à partir du décanteur et le reste est éliminé. C'est la présence de cette boucle de recyclage qui cause une interaction importante entre l'aérateur et le décanteur qui peut être significative dans plusieurs situations pratiques (Marsili-Libelli, 1989).

Le comportement du système à l'état stationnaire et l'analyse en fonctionnement statique joue un rôle important dans la conception afin d'atteindre, à long terme, un contrôle efficace des procédés par boues activées (Andrews, 1992). D'ailleurs, un des paramètres les plus importants, le temps de résidence moyen ou l'âge des boues, est un concept d'état stationnaire qui ne tient pas compte de la composante dynamique ou des fluctuations de courte durée. Il est nécessaire de connaître la relation opérationnelle statique du système par boues activées afin de mieux comprendre la conception et le fonctionnement du procédé.

Le décanteur secondaire a deux fonctions : i) la décantation; et ii) l'épaississement des boues. Il joue un rôle important dans le fonctionnement des procédés par boues activées parce que étroitement lié à l'aérateur. Il représente une fonction critique pour les usines de traitement par boues activées et détermine si une usine est performante et rencontre les critères des effluents (Vitasovic, 1989; Lessard et Beck, 1991; Dammel et Schroeder,

1991). En fait, plusieurs problèmes de fonctionnement sont plus reliés au comportement du décanteur qu'à celui de l'aérateur (Marsili-Libelli, 1989).

La théorie du flux limitant est la base de plusieurs études de la capacité du décanteur et de l'épaississeur (McHARG, 1973; Tyagi *et al.*, 1991). Au contraire des solutions numériques qui tendent à être plus exactes, la méthode graphique aide la compréhension et facilite l'extension des conditions de fonctionnement dans des régions non explorées. Il y a des moyens extrêmement utiles dans l'aide à la compréhension des interrelations entre les variables du procédé (McHARG, 1973; Tyagi *et al.*, 1991). D'ailleurs la conception assistée par ordinateur jouera un rôle important dans l'avenir.

À partir de l'analyse d'une version simplifiée du procédé par boues activées à l'état stationnaire, on peut extraire des quelques relations fondamentales. Une analyse graphique du fonctionnement du décanteur, par exemple, on peut observer trois conditions de charge : la charge critique, la surcharge et la charge non-critique. Il est préférable de garder le décanteur secondaire en état de charge critique afin de maintenir un fonctionnement stable et satisfaisant et de tirer avantage au maximum du compactage des boues tout en conservant un temps de résidence relativement court. Il serait utile d'intégrer la théorie du flux limitant dans le concept numérique du système.

### **1.3.3 Modélisation dynamique**

Les modèles dynamiques sont nécessairement requis pour un design puissant du contrôle du procédé et les applications avancées des bases des modèles. Il y a quatre types de modèles dynamiques qui peuvent être utilisés dans l'ingénierie des eaux usées: les modèles linguistiques, les modèles séries-temps, les modèles à paramètres morcelés et les modèles à paramètres distribués (Andrews, 1992). De ceux là, les modèles à paramètres morcelés sont les plus communément utilisés (Lessard, 1989; Masakatsu et Takeshi, 1992).

Depuis les années 1970 des quantités substantielles de travaux de recherche sur la modélisation dynamique des procédés par boues activées ont été conduits et rapportés, principalement avec une attention ciblée sur la modélisation de l'oxydation du carbone, la

nitrification-dénitrification et la dynamique de l'oxygène dissout (Busby et Andrews, 1975; Clift et Andrews, 1981; Holmberg, 1982; Padukone et Andrews 1989; D'Amours, 1987; Henze *et al.*, 1987; Lessard et Beck, 1991; Couillard et Zhu, 1991; Tyagi *et al.*, 1996; Miller *et al.*, 1997). La contribution majeure de la recherche sur la modélisation dynamique et le contrôle peut être attribuée à Andrews (Houston, USA), Marais (Capetown, South Africa) et Olsson (Lund, Sweden). Le modèle de traitement par boues activées No. 1, réalisé par le groupe de travail de l'IAWPRC sur la modélisation mathématique pour la conception et le fonctionnement du traitement biologique des eaux usées rapporté en 1986, représente le dernier cri du développement de modèles mécanistiques pour l'enlèvement des composés organiques et de l'azote par les systèmes par boues activées (Dold et Marais, 1986).

Un modèle bien structuré et moderne divise la biomasse et les eaux usées en plusieurs éléments menant à plusieurs processus, chacun possédant ses propres équations de taux et de rendement (Andrews, 1991). Le modèle proposé par le groupe de travail du IAWPRC possède 13 éléments incluant l'alcalinité, différentes formes d'azote présents dans les eaux usées, trois types de bactéries ainsi que la matière colloïdale adsorbée. Ils sont produits et absorbés par huit différents processus incluant la nitrification, la dénitrification et la détérioration cellulaire. Voici quelques-unes des caractéristiques particulières au modèle du groupe de travail du IAWPRC :

- 1) Le substrat provenant de la biomasse et de la matière organique est fonctionnellement définie en termes de DCO et les équations du taux et de la production sont nettement décrites dans la forme de la matrice (Petersen, 1965; Henze *et al.*, 1987).;
- 2) Le concept de la structure du modèle est implanté plus sur des bases fonctionnelles que sur des bases physiques, comme réalisé par plusieurs autres;
- 3) C'est une sorte de modèle mécanistique simplifié sans tenir compte l'effet de la résistance du transport de masse dans le caillot sur la performance du système.

L'évaluation générale du modèle de l'IAWPRC a été donnée par Dold et Marais (1986), Grady (1989) et Andrews (1991).

Le modèle de l'IAWPRC est compréhensif en termes de cinétiques des réactions. Toutefois, il est moins élaboré au niveau des caillots des boues (Benefield and Molz, 1983). Un système à croissance en suspension tel que les procédés de boues activées est typiquement un système hétérogène et autocatalytique, constitué principalement d'une phase fluide et d'une phase solide. La plupart des agrégats biologiques dans un système par boues activées ont un rayon de 50 à 100  $\mu\text{m}$  (Li et Ganczarczyk, 1991). Ils sont des mixtures complexes et variables de différentes espèces de bactéries et d'autres matériels. Les réactions métaboliques se réalisent simultanément avec un transfert de masse dans la matrice du caillot et un gradient de concentration est donc établi. Cela signifie que la cellule près du centre du caillot va être exposée à une faible concentration de nutriments, comparé aux cellules plus près de la surface du caillot. La résistance de transfert de masse entre les deux phases est un important facteur qui affecte la tendance de réaction et les limitations de diffusion intra-caillot sont quelquefois significatives dans les procédés de boues activées (Benefield et Molz, 1983, 1984). Le modèle du groupe de travail de l'IAWPRC pour les procédés de boues activées, ne tient pas compte de la résistance du transfert de masse dans le caillot. Il présume que les bioagrégats dans l'aérateur et que le liquide les entourant sont une seule phase dans le système. En fait, deux phases séparées sont impliquées (Lessard et Beck, 1991).

La simplification de présumer un système à phase simple peut être acceptée dans les cas où le liquide est bien agité et que les caillots sont très petits en grandeur. Conséquemment, cela permet aux caractéristiques de l'eau usée et de la biomasse d'être décrites en plus de détails en termes de cinétiques de réaction. Cependant, cette simplification peut ne pas être toujours vraie, spécifiquement dans les cas où le caillot est large et les concentrations de substrat ambiant sont faibles (Benefield et Molz, 1984). Donc, il y a un besoin de considérer la distribution de la grandeur des caillots dans une boue dans le développement et de la stratégie de contrôle des procédés de boues activées. L'étude des effets de la capacité de diffusion dans le caillot microbien sur la cinétique de la nitrification des procédés de boues activées a été récemment rapportée par Beccari *et al.* (1992) et Bakti et Dick (1992).

Les modèles de base disponible pour les systèmes de traitement aérobie des eaux usées peuvent être trouvés dans quelques volumes (Grady et Lim, 1980). Les modèles avancés peuvent agir de façon plus réaliste avec le liquide mélangé dans le réacteur et sont habituellement de type non à l'état stable, pour permettre les variations pendant la journée dans le débit et la concentration de l'eau usée (Rittman, 1985; Andrews, 1991). Ce qui permet à une investigation théorique des différentes stratégies de contrôle de tenir compte de ces variations (Barton et McKeown, 1986). Cependant, le but d'un modèle simple, capable d'optimiser la conception et les stratégies de contrôles de tous les systèmes de traitement des eaux usées, n'a pas encore été atteint (James, 1982).

#### **1.3.4 Modélisation et contrôle du procédé de lessivage de métaux**

La modélisation dynamique et le contrôle du procédé de bio-lessivage des métaux lourds est sujet de recherche plutôt récent. Dans la dernière décennie de grands efforts de recherche ont été dirigés dans la recherche expérimentale de l'enlèvement des métaux par les procédés de lessivage microbien (Couillard et Zhu, 1992; Tyagi et Couillard, 1989 et Blais *et al.*, 1992a,b). Plusieurs études (Sreekrishnan *et al.*, 1993 et Tyagi *et al.*, 1993) ont été faites ces dernières années sur la modélisation mathématique et la simulation de procédé de bio-lessivage utilisant les bactéries oxydant le soufre. Des résultats expérimentaux indiquent que le taux de métaux solubilisés d'un lot de bio-lessivage dépend principalement des aspects suivants: le type de boue (non-digéré, digéré en aérobie ou digéré en anaérobie), de la concentration en solides des boues, de la quantité initiale de métaux dans la boue et du pH de la boue (Sreekrishnan *et al.*, 1993). Le procédé de bio-lessivage dans le réacteur est dominé par deux espèces distinctes de bactéries oxydant le soufre: bactéries peu acidophiles et les bactéries acidophiles. Les bactéries peu acidophiles sont responsable de la phase initiale de l'opération où le pH du milieu est au dessus de 4.0; à laquelle l'opération subséquente résulte de l'activité des bactéries acidophiles qui débute lorsque le pH descend au dessous de 4.0. Les modèles mathématiques pour les deux phases (peu acidophiles et acidophiles) ont été donnés par Tyagi *et al.*, 1993. Il a été trouvé que les concentrations en solides en suspension dans la boue jouent un rôle majeur indirecte dans la régulation de la production d'acide, en influençant la nature de la baisse du pH dans le système; la

concentration en solides de la boue n'affecte pas directement le procédé de solubilisation des métaux. Les taux de croissance des deux espèces de bactéries présentes dans le système ont une relation linéaire (en log naturel) avec le pH du système (Sreekrishnan *et al.* 1993). Un modèle conceptuel du procédé global de bio-lessivage des métaux a été développé sur la base des observations expérimentales. Le pH de la boue a été identifié comme le paramètre contrôlant la croissance des bactéries et par conséquent, le procédé au complet. Le modèle mathématique peut prévoir de façon satisfaisante la croissance des bactéries et le pH. Cependant, la solubilisation des métaux ne peut être incorporée directement dans le modèle à cause de l'influence de trop de paramètres non quantifiés (Tyagi *et al.*, 1993). Ces paramètres (spéciation du métal, concentration du métal etc.) sont difficiles à quantifier. La solubilisation des métaux peut être prédite (dans certaines limites) en utilisant seulement des chartes de corrélation entre le profil du pH dans la boue généré par le modèle et la solubilisation des métaux. Dans la pratique réelle, il est difficile d'utiliser une telle charte de corrélation. Donc, l'approche par réseau neuronal artificiel a été utilisé dans ce travail pour développer: a) une corrélation entre le pH du système et la solubilisation des métaux; b) une stratégie de contrôle du procédé pour le procédé de lessivage des métaux.

### **1.3.5 Applications de l'intelligence artificielle dans le traitement des eaux usées**

La technologie de l'intelligence artificielle (IA) est une méthode orientée vers le problème. La complexité et la compréhension limitée des procédés de traitement des eaux usées et les problèmes rencontrés en pratique fait une place pour l'IA, afin d'être l'un des outils le plus adéquat.

#### **1.3.5.1 Système expert et logique floue**

Les systèmes experts, comme sous-partie de l'IA, sont des systèmes de compilation par ordinateur qui représentent la connaissance et l'expérience d'experts reconnus dans des domaines particuliers. L'objectif de travail dans le domaine des systèmes experts a déjà évolué de l'investigation à l'application (Finn, 1989).

Les systèmes experts sont parmi les premières technologies de l'IA introduites dans les procédés de traitement des eaux usées (Guarino *et al.*, 1972). La technique de logique floue a été fréquemment utilisée dans le développement de systèmes experts. Tong *et al.*, (1980) étaient parmi les premiers à implanter la logique floue dans les systèmes experts pour interpréter le fonctionnement des procédés par boues activées. Dans le travail réalisé par Couillard et Zhu (1992), une stratégie de contrôle à deux niveaux des procédés par boues activées a été adoptée: un super niveau pour le contrôle floue et un bas niveau pour un contrôle simple PID. Le contrôle à super niveau détermine les valeurs de sélectionnées de la concentration de l'oxygène dissout, le ratio de boue recyclée et le taux de purge de boue en termes de nombre de règles linguistiques.

#### **1.3.5.2 Réseaux neuronaux**

La technologie du réseau neuronal, une forme primitive d'apprentissage d'une machine, est inspiré du principe d'encodage de l'information par le cerveau (Barron, 1989). Ces applications ont été développées pour la modélisation dynamique, la prédiction du procédé, et le contrôle du procédé chimique (Thibault *et al.*, 1990). Un nombre d'études sur l'utilisation des réseaux neuronaux pour les procédés biologiques de traitement des eaux usées ont été rapportées (Baba *et al.*, 1990; Boger et Guterman, 1990; Capodaglio *et al.*, 1991; Novotny *et al.*, 1991).

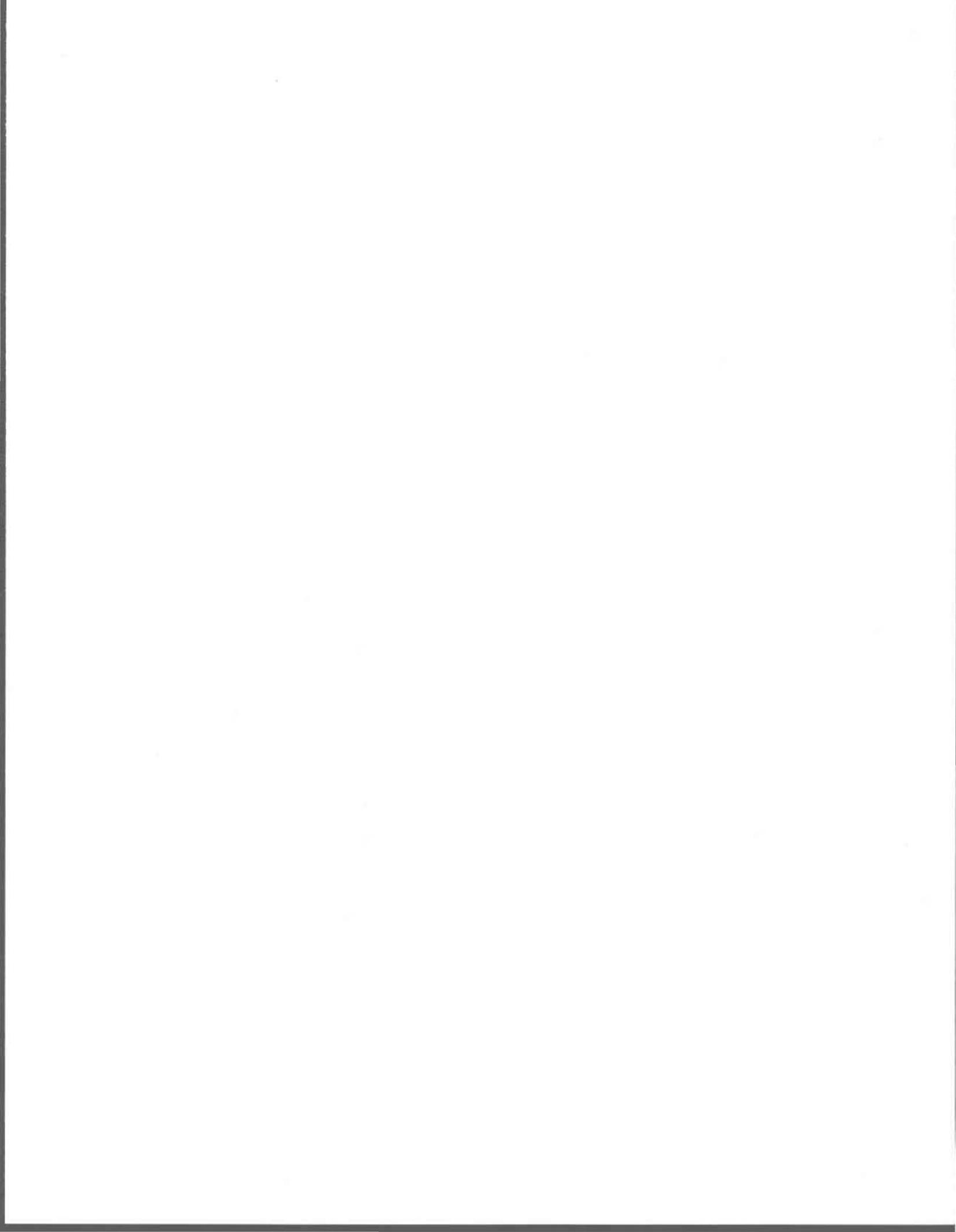
## **1.4 Hypothèse de travail**

1. Une usine de traitement des eaux usées peut utiliser une sédimentation primaire, un traitement par boues activées secondaire et un traitement tertiaire pour enlever les métaux des boues. Cette étude met l'accent sur les traitements secondaire et tertiaire au niveau de la modélisation et du contrôle des procédés. Le travail est réalisé à partir de la prémisse que le traitement primaire de sédimentation est complété avec succès.
2. Pour cette étude, le modèle structuré du IAWPRC a été adopté pour représenter le modèle cinétique de base du procédé par boues activées. Il est pris pour acquis que les principales réactions qui ont lieu dans le bioréacteur incluent la croissance aérobie des organismes autotrophes et hétérotrophes ainsi que la croissance d'hétérotrophes en milieu anoxique.

3. Pour ce qui est du travail sur le développement d'un modèle dynamique du procédé par boues activées, la distribution de la taille des agrégats microbien ainsi que les paramètres du modèle sont considérés comme étant connus et ces données sont extraites de la littérature. Dans le cas du procédé de bio-lessivage des métaux, les paramètres du modèle proviennent de données expérimentales obtenues dans nos laboratoires.

## **1.5 Objectifs de recherche**

1. Clarifier les relations opérationnelles statiques par l'analyse d'un système de boues activées simple complètement mélangé et construire un modèle basé sur un filet neuronal pour la prédiction du ratio de recyclage désiré et du taux de soutirage pour un système donné de boues activées;
2. Construire un modèle de floculation en employant les cinétiques suggérées par le groupe de travail de l'IAWPRC et relier les effets de diffusion en termes de facteurs d'efficacité pour les conditions de fonctionnement;
3. Évaluer si l'effet de diffusion des agrégats microbiens sur l'oxydation des éléments carbonés et la nitrification dans un système de boues activées est significatif;
4. Développer un modèle de système intégré pour un procédé de boues activées et étudier le comportement dynamique du procédé sous des conditions de "shock loading" (choc de charge) par une investigation intensive de simulation;
5. Utiliser la technologie du réseau flou neuronal pour le développement d'un système de d'aide à la prise de décision pour un procédé par boues activées;
6. Développer une stratégie avancée de fonctionnement pour un procédé de lessivage microbien en lots, employant l'oxydation du soufre pour l'enlèvement des métaux lourds des boues.



## 2. MÉTHODOLOGIE

---

### 2.1 Collocation orthogonale

La solution aux équations du modèle de floculation était un problème de valeurs à deux frontières qui peut être résolu par itérations. Par souci d'efficacité, la technique numérique de collocation orthogonale (Villadsen et Stewart, 1967) a été utilisée pour solutionner le problème. En premier, nous avons déterminé les points de collocation orthogonale. Les points de quadrature optimal sont les zéros de  $P_N^{(\alpha,\beta)}(x)$  où  $P_N^{(\alpha,\beta)}(x)$  est un polynôme de degré N dans x qui satisfait la relation suivante:

$$\int_0^1 x^\beta (1-x)^\alpha P_j(x) P_N(x) dx = 0, j = 0, 1, \dots, N-1 \quad (1)$$

Le polynôme de Jacobi  $P_N^{(\alpha,\beta)}(x)$  s'écrit:

$$P_N^{(\alpha,\beta)}(x) = \sum_{i=0}^N (-1)^{N-i} \gamma_i x^i \quad (2)$$

où  $\gamma$  est considéré comme étant égal à 1 et les coefficients restants N peuvent être trouvés directement de la propriété orthogonale.

Puis, nous avons déterminé les polynômes d'interpolation pour des équations particulières. Dans cette étude, les polynômes d'interpolation de Lagrange sont utilisés comme définis ci dessous:

$$Y_N = \sum_{i=1}^{N+1} Y_i l_i(x) \quad (3)$$

$$l_i(x) = P_{N+1}(x) / (x - x_i) P'_{N+1}(x_i) \quad (4)$$

où le nœud polynomiale  $P_{N+1}(x) = (x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_{N+1})$  est un polynôme de degré N+1 avec un coefficient guide de 1 et  $P'_{N+1}(x_i)$  est la première dérivée de  $P_{N+1}(x_i)$ ; tandis que N+1 polynomiales de Lagrange  $l_i(x)$  ( $i=1, 2, \dots, N+1$ ) sont tous de degré N.

Les dérivées première et seconde de toute les variables dépendantes “ y ” qui respectent la variable indépendante “ x ” peuvent alors être obtenues par:

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_{x=x_i} = \sum_{k=1}^{N+1} A_{i,k} y(x_k) \quad (5)$$

$$\left(\frac{d^2y}{dx^2}\right)_{x=x_i} = \sum_{k=1}^{N+1} B_{i,k} y(x_k) \quad (6)$$

## 2.2 Réseaux neuronaux

Les réseaux neuronaux sont composés de couches de neurons interconnectés ou de noeuds neuronaux. Ils sont spécifiés par l'architecture du réseau, la topologie, les caractéristiques du neurone, et des règles d'apprentissage (Lippmann, 1987). Les réseaux neuronaux les plus communément utilisés en ingénierie sont à multi-couches, pro-actif, à propagation arrière avec une architecture de noeuds interconnectés dans une couche d'entrées, une ou plusieurs couches cachées, et une couche de sortie. Le nombre d'unités de calculs dans les couches d'entrées et de sorties correspond au modèle désiré d'entrées et de sorties, mais le nombre optimal de noeuds neuronaux dans la ou les couches cachées est habituellement déterminé par essais et erreurs. Le réseau neuronal avec une couche cachée est généralement adopté dans l'ingénierie de procédé bien que des relations très complexes entre les données d'entrée et de sortie requièrent plus d'une couche cachée avec un grand nombre de noeuds neuronaux. Trop de noeuds neuronaux cachés peuvent mener à un sur-apprentissage ou à des effets non voulus comme l'apprentissage de bruit de procédé. Les noeuds neuronaux peuvent être attachés à tous les autres noeuds neuronaux dans la couche suivante via des connexions pesées. Les poids sont des vrais nombres, habituellement dans un intervalle de [0,1], décrivant la force des connections en analogie à la force synaptique des connections neuronales du cerveau. Dans le processus d'apprentissage, les poids des connexions sont modifiés itérativement, habituellement en débutant avec des petites valeurs données au hasard et en finissant avec des poids produisant un réseau sortant qui correspond à la sortie désirée dans une certaine marge d'erreur.

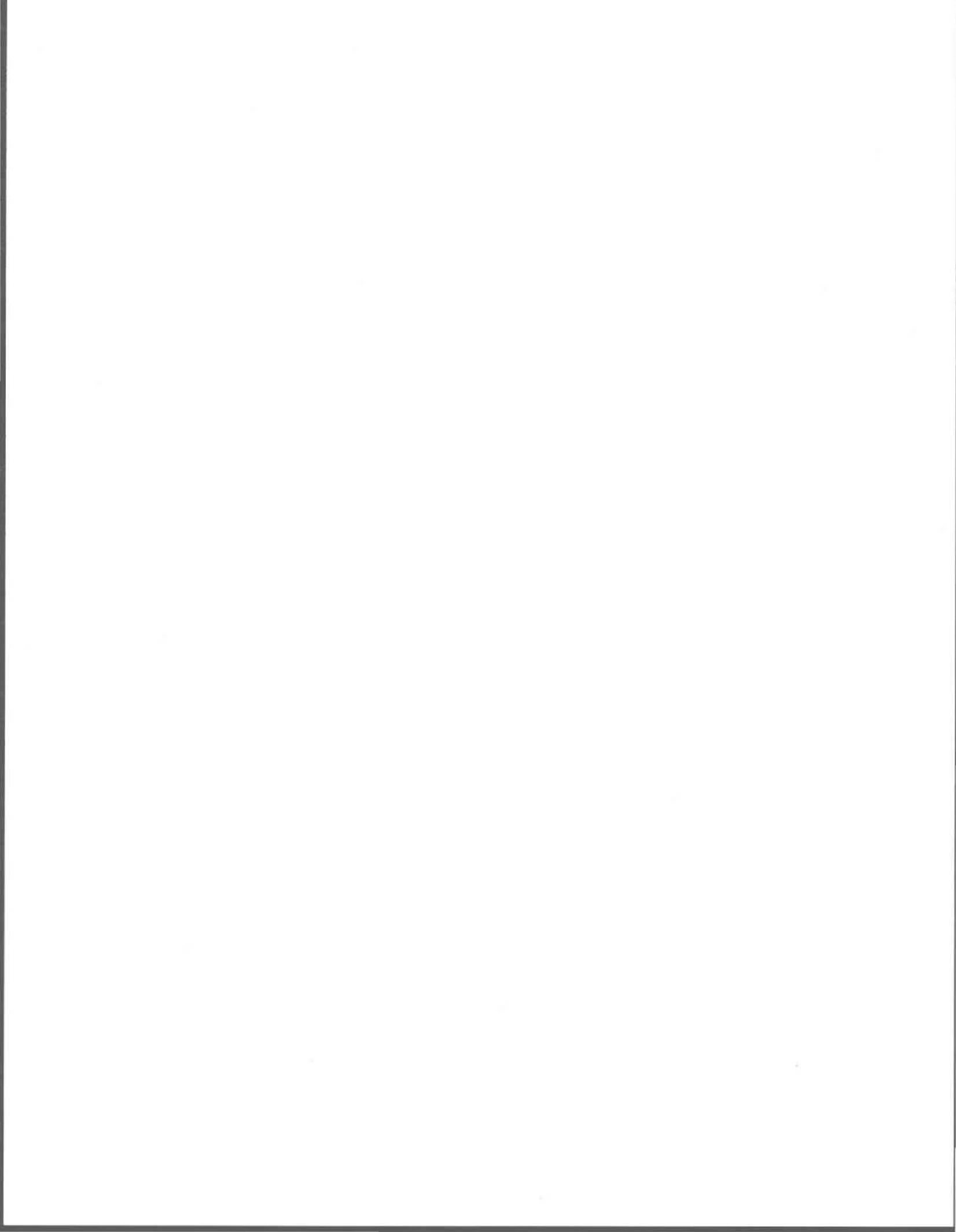
Dans un réseau neuronal pro-actif, les noeuds neuronaux d'entrée sont seulement utilisés pour emmagasiner et propager des données suivantes normalisées au réseau. Les noeuds

cachés et ceux de sortie réalisent deux calculs. Premièrement une somme pesée de tous les entrées venant des noeuds connectés dans la couche précédente ou de l'extérieur du réseau, est formée. Puis la sortie des noeuds neuronaux est obtenue en passant par la somme pesée par une fonction de transfert non-linéaire. La fonction de transfert la plus communément utilisée est la fonction sigmoïdale.

En apprenant, le système compare les valeurs de sortie calculées et désirées pendant l'introduction répétée d'exemple de tendances de paires de données de sortie et d'entrée, et il modifie les poids associés avec les connexions entre les noeuds neuronaux par propagation arrière. En propagation arrière, les poids sont modifiés via la propagation d'un signal d'erreur venant de la sortie vers l'entrée.

## **2.3 Logique floue**

La série de théories floue rend possible de procéder des informations imprécises utilisant une fonction changeante d'appartenance (Zadeh, 1988). Cette fonction d'appartenance non conventionnelle est différente de celles classiques. Les fonctions d'appartenance classiques prennent seulement deux valeurs: un, lorsqu'un élément appartient à un série, et zéro, lorsqu'il n'appartient pas à une série. Un élément d'une série floue peut appartenir à la série avec des valeurs d'appartenance dans l'intervalle  $[0,1]$ . La forme de la fonction d'appartenance de la série floue peut être linéaire (trapézoïdale ou triangulaire) ou complètement non-linéaire (Salski, 1992). Il est important de noter que la théorie des séries floue est basée sur la promesse que les éléments utilisés ne sont pas des nombres mais appartiennent à une variable linguistique. La valeur d'une variable linguistique est donnée par des mots.



## 3. RÉSULTATS

---

### 3.1 Prédiction du fonctionnement à l'aide des modèles neuronaux

La performance des procédés de boues activées dépend du fonctionnement du bioréacteur, du décanteur et de leur interaction. Il existe trois conditions possibles de fonctionnement du décanteur, à savoir, la charge critique, la charge sous critique et la surcharge. Le maintien de l'état de la charge critique correspond à prendre le maximum d'avantage de l'habileté de compactage de la boue sans la laisser trop longtemps dans le système.

Un modèle de réseau neuronal a été développé pour réaliser la tâche de prédire le ratio de recyclage désiré et le taux de purge pour un système de boues activées donné en charge critique (Tyagi, Du *et al.*, 1996). Un grand nombre de séries de données expérimentales correspondant aux conditions critiques ont été prises pour entraîner le modèle neuronal pour le procédé. Le modèle neuronal développé possède une simple couche cachée avec seulement trois nœuds. Le vecteur d'entrée du modèle neuronal a trois variables, à savoir la concentration du substrat de l'affluent, la concentration désirée du substrat dans l'aérateur et le débit de l'affluent. La sortie du modèle neuronal a deux variables, le ratio attendu de recyclage et le débit de purge. Une bonne prédiction de la performance du modèle neuronal est atteinte avec un modèle si simple.

Un autre modèle neuronal a été formulé pour une usine existante en utilisant les observations de l'usine pour prédire le fonctionnement de son décanteur secondaire (Tyagi, Du *et al.*, 1994). Les résultats de la simulation montrent que le modèle neuronal développé se comporte assez bien en termes de précision des prédictions et qu'il est mieux que la méthode traditionnelle de régression pour ce système particulier.

### 3.2 Modèle de floculation, effets de diffusion, facteur d'efficacité et performance du système

Le modèle de floculation a été développé sur la base de quelques présomptions communes acceptées, incluant un pseudo état stable, des caillots moyennement sphériques, une densité constante d'hétérotrophes et une résistance négligeable du transfert externe de masse. Le taux des équations à l'intérieur de la matrice du caillot, suivent les cinétiques de réaction prises du modèle cinétique de l'IAWPRC. Les équations de balance du matériel et les conditions de frontières ont été utilisées pour décrire la résistance de diffusion de l'oxygène dissout et du substrat facilement biodégradable à l'intérieur du caillot.

Les résultats de simulation démontrent que l'effet de la limitation de diffusion dans le caillot sur la dynamique du système à une distribution de taille du caillot donnée peut être significatif. Le facteur d'efficacité a été utilisé ici car il s'agit d'un paramètre utile pour déterminer les effets de la résistance au transfert de masse interne sur la cinétique de croissance des agrégats de bactéries dans un système en suspension (Levenspiel, 1972). Deux facteurs d'efficacité ont été définis dans cette étude: le facteur d'efficacité pour le procédé d'oxydation du carbone,  $\eta_1$ , et celui pour le procédé de nitrification,  $\eta_2$ . Il a été observé par les expérimentations de simulation que  $\eta_2$  était beaucoup plus sensible au niveau des concentrations d'oxygène dissout dans la phase globale comparé à  $\eta_1$ . Cela provient principalement du fait que la biomasse hétérotrophe croît en conditions d'aérobie et d'anoxie; alors que la biomasse autotrophe croît seulement en conditions d'aérobie (Henze *et al.*, 1987). La nitrification est donc plus sensible à des niveaux de décroissance de l'oxygène dissout que l'activité hétérotrophe. L'impact de la grandeur du caillot était significatif sur les deux facteurs d'efficacité. Le programme informatique utilisé pour déterminer les facteurs d'efficacité est reproduit en annexe.

Il a aussi été observé que les facteurs d'efficacité moyenne et globale ne sont pas les mêmes mais qu'ils ne sont pas très différents l'un de l'autre. Des résultats similaires ont aussi été observés pour des cas impliquant d'autres conditions de travail. Cela suggère que les vrais facteurs d'efficacité globale puissent être approximativement exprimés par le facteur

d'efficacité moyen, même si ce genre d'approximation est sujet à un certain degré à des erreurs dues à une non-linéarité du système. L'aspect significatif de ce remplacement est qu'il permet au modèle de prendre en considération additionnelle la variation possible de la distribution de la grandeur des caillots puisque le diamètre moyen sphérique du caillot est relié de près à une variable du système, qui est l'âge de boue (Du *et al.*, 1994, 1996).

### **3.3 Comportement dynamique des procédés par boues activées en condition de charge**

Un modèle de système intégré a été développé pour une usine de boues activées qui ne couple pas seulement le comportement du caillot aux changements dans les caractéristiques du liquide global, mais prend aussi en compte la distribution de la grandeur des caillots en terme de masse dans le système en réaction. Une simulation intensive a donc été réalisée basée sur le modèle compréhensible développé pour évaluer l'impact du choc de charge sur le comportement dynamique de l'usine et pour construire une compréhension de l'importance de l'effet des caillots.

Dans l'étude de la simulation, un cycle quotidien de fonction forcée approximative d'onde carrée a été utilisée pour imiter les chocs hydrauliques et organiques de l'usine de boues activées. Trois différentes sortes de chocs de charge ont été testées: 1) le choc de charge hydraulique; 2) le choc de charge organique; et 3) le choc de charge hydraulique et organique combiné. La réponse du système dynamique aux variations quotidiennes dans la concentration du substrat facilement biodégradable de l'affluent,  $s_0$ , et le débit de l'affluent,  $q_0$ , était évaluée pour une période de huit jours. Les résultats de simulation montrent qu'un comportement dynamique plus complexe du à l'effet de floculation, peut se passer spécifiquement sous des conditions de choc de charge hydraulique et organique, qui doit être considéré dans le développement de la politique de contrôle pour un fonctionnement plus sécuritaire et plus performant. Le programme informatique utilisé pour la simulation dynamique est reproduit en annexe.

Une étude comparative a été réalisée entre les résultats de la simulation basée sur le modèle dynamique développé et les données de terrain récoltées à l'usine de traitement de Whitlingham (Lessard et Beck, 1991). Les paramètres du modèle et les conditions de fonctionnement ont aussi été pris dans le travail de Lessard et Beck (1991). Comme les concentrations de DCO totales simulées et observées, en condition de variations importantes à l'affluent, ne sont pas vraiment semblables, cela démontre le besoin de tenir compte du mécanisme de réaction-diffusion dans le caillot (Du *et al.*, 1996).

### **3.4 Système de support de décision basé sur le modèle neuronal flou**

Avec une bonne compréhension de la dynamique des procédés de boues activées, cela rendrait la tâche beaucoup plus aisée pour développer des actions appropriées de contrôle, dans le but d'atteindre une stabilisation du procédé. Pour atteindre une meilleure performance globale de fonctionnement, qui consiste en un fonctionnement stable et économique du procédé de boues activées aussi bien que les procédés en aval comme le procédé de lessivage biologique pour l'enlèvement des métaux, un contrôle opérationnel à l'état stable doit être considéré. Pour des raisons économiques et autres raisons pratiques, si le procédé de boues activées est lié avec son procédé en aval de lessivage des métaux comme présumé dans cette étude, la tâche de contrôle opérationnel du procédé de boues activées n'est pas seulement de maintenir la qualité de l'effluent en DBO, mais aussi de maintenir, autant que possible, la qualité de la boue disposée. De telle façon, le procédé en aval de lessivage microbien peut être mieux opéré. Une façon de faire cela, est d'essayer de prédire en temps réel le paramètre clé d'opération du procédé de boues activées, l'âge de boue, utilisant d'autres variables mesurées du procédé. Si l'âge de boues pourrait être prédit en temps réel, le travail d'entretien serait plus facile. Dû aux interactions complexes causées par le recyclage de la boue du décanteur secondaire vers le réacteur, le comportement opérationnel du procédé de boues activées est habituellement très compliqué. Il n'y pas de relation simple de cause à effet entre l'âge de boue et les autres variables applicables du procédé, qui pourrait employer une méthode analytique pour avoir

une solution. Donc, dans ce travail, un modèle de réseau neuronal flou a été développé utilisant la logique floue et la technologie des réseaux neuronaux.

Le modèle neuronal flou a été construit pour avoir trois variables d'entrée (le débit d'alimentation, la concentration de l'alimentation et le ratio de recyclage). Seulement une sortie existe dans ce modèle (l'âge de boue). Pour développer le modèle neuronal flou, il est essentiel que de l'information adéquate ou les relations entre les données du système à l'étude soient fournis par la procédure d'entraînement du modèle. La règle de propagation arrière a été utilisée pour entraîner le réseau neuronal. Habituellement, les données historiques de l'usine réelle sont utilisées pour ce propos. Dans cette étude, cependant, des données de simulation de modèle ont été utilisées. La variable d'entrée, le ratio de recyclage, étaient entrés dans l'espace d'appartenance floue avec la fonction relative d'appartenance floue sans utiliser celle conventionnelle dû au fait que l'intervalle actuel de la variable varie de façon significative, quand les conditions d'alimentation de l'usine changent. Les résultats de simulation montrent que l'utilisation combinée de la logique floue et de la technique de réseau neuronal rendent le système de support opérationnel intelligent capable d'apprendre les relations complexes entre les données du procédé de boues activées à l'étude, aussi bien que l'extraction de règles venant de l'observation (Du *et al.*, 1999).

### **3.5 Stratégie opérationnelle du procédé de bio-lessivage pour l'enlèvement des métaux lourds**

Un modèle à base de filet neuronal a été développé pour prédire la solubilisation de six métaux toxiques (Cr, Cu, Ni, Zn, Pb et Cd) des boues par l'oxydation du soufre par des micro-organismes indigènes. Les seuls paramètres d'entrée requis sont le type de boues, les concentrations initiales de métaux dans la boue, et le pH de la boue. Le modèle a produit des prédictions satisfaisantes de la solubilisation des métaux lorsqu'il a été testé avec un nombre de données expérimentales actuelles (Du *et al.*, 1994; 1995).

Une stratégie avancée opérationnelle a été développée pour un procédé en lot de lessivage microbien, employant l'oxydation du soufre pour l'enlèvement des métaux lourds de la boue, pour terminer l'opération du traitement au meilleur moment. À cause de la difficulté pratique associée à la mesure en continu des concentrations de métaux dissous pendant l'opération de lessivage, la méthode présente est basée sur les mesures du pH dans le système. Pour enregistrer la solubilisation des métaux, le modèle du procédé de bio-lessivage a été développé, prédisant la tendance de croissance des bactéries peu-acidophiles et des bactéries acidophiles et la production d'acide ou le changement du pH pendant la croissance. Un système de prédiction avancé en continu a été alors implanté; il emploie les techniques de filtration étendue de Kalman. Ainsi que le modèle basé sur le filet neuronal, qui a été construit sur la base d'une grande quantité d'observations expérimentales dans notre laboratoire pour prédire les concentrations des six métaux lourds dans la phase liquide du système de bio-lessivage.

L'utilisation de la stratégie opérationnelle proposée peut aider à terminer l'opération le plus tôt possible, étant donc capable de réduire le temps de fonctionnement du traitement. Un cas pratique d'étude réalisé dans notre laboratoire montre que six heures de fonctionnement ont été sauvées avec l'utilisation de cette technique (Du *et al.*, 1995).

## 4. DISCUSSION

---

Cette section présente une discussion générale portant sur le travail réalisé dans cette thèse. Ceci inclus une discussion sur les limites de l'étude et des avenues de recherches potentielles à explorer.

### 4.1 Applications concrètes

Une bonne partie de cette thèse a été réalisé par simulation informatique en portant une attention particulière sur les problèmes de fonctionnement d'un système de traitement des eaux usées. L'idée principale et la méthodologie qui en découlent peuvent être mises en pratique dans des usines de traitement par boues activées et par bio-lessivage des métaux. En voici quelques exemples :

- i) Le modèle neuronal flou qui génère des règles de logique floue est applicable en usine. Ce modèle peut être testé avec des données historiques emmagasinées.
- ii) Le modèle de floculation peut être intégré au modèle du système pour améliorer les prédictions en état de surcharge. Dans cette éventualité, le paramètre du modèle de floculation peut être estimé à partir des données historiques.
- iii) La méthode de mesure indirecte de solubilisation des métaux à l'aide des techniques de réseaux neuronaux peuvent facilement s'appliquer à des situations concrètes.

### 4.2 Le procédé par boues activées et le modèle de bio-lessivage

Le traitement par boues activées a été, jusqu'à ce jour, le procédé le plus souvent modélisé. Également, le bio-lessivage des métaux a déjà fait l'objet de quelques études. Toutefois, il n'y a eu que très peu d'études consacrées à l'intégration du fonctionnement et du contrôle de ces deux procédés. Cette situation peut s'expliquer par le défi que représente un tel travail.

Le bio-lessivage est l'étape successive logique au traitement par boues activées. Ceci implique que pour un meilleur fonctionnement d'ensemble d'une usine, la conception du système de contrôle du traitement par boues activées doit être pensée en fonction des répercussions de la performance de ce contrôle sur l'étape de bio-lessivage. D'ailleurs, la concentration de solides dans les boues représente le paramètre-clé pour l'intégration de ces deux procédés. Il est reconnu que le bio-lessivage est un procédé complexe, impliquant une croissance bactérienne accompagnée d'une production d'acide. La performance de ce traitement est intimement reliée au processus d'acidification. Cette baisse de pH dépend à la fois de la production de sulfates et de la concentration de solides dans les boues (Sreekrishnan *et al.*, 1993). Donc, lors de la conception d'un système de contrôle d'une cuve de décantation, il apparaît nécessaire de prévoir conserver une concentration de solides dans les boues purgées à un niveau raisonnablement stable. La recherche sur un système de contrôle intégrant les deux procédés pourrait bien être réalisée éventuellement.

### **4.3 Le fonctionnement à l'état stationnaire**

Le développement de modèles simples d'oxydation de composés carbonatés à l'état stationnaire représente la majeure partie de la recherche effectuée à ce jour. Ces modèles d'état stationnaire peuvent suffire à l'élaboration des plans d'une usine de traitement. Mais il faut utiliser ces modèles avec prudence pour les étapes de contrôle du fonctionnement car, en réalité, l'état stationnaire n'est pratiquement jamais atteint. Néanmoins, la description et la compréhension des relations à l'état stationnaire des variables du procédé par boues activées est importante pour en améliorer la performance. D'ailleurs, l'âge des boues, une des plus importantes variables du procédé est, de façon inhérente, une variable d'état stationnaire.

Pour développer un modèle neuronal d'état stationnaire, il est important d'avoir en sa possession une certaine quantité de données de qualité. La technique des réseaux neuronaux est pratique et puissante pour le développement du modèle seulement si des séries de données adéquates sont utilisées. Toutefois, en pratique, il est souvent difficile ou dispendieux de récolter ces données. Il est possible d'obtenir des banques de données de fonctionnement d'usines déjà existantes afin de palier à ce problème. Une autre possibilité

est de générer ces données à l'aide de modèle rigoureux permettant de simuler l'opération d'une usine. Si les données proviennent d'usines, ces données nécessiteront des modifications ou une certaine normalisation afin les rendre plus représentative du cas d'intérêt. De plus, la technique de mesure indirecte peut servir à observer une variable qui serait autrement difficile à mesurer de façon directe.

#### **4.4 Le modèle de floculation**

Un modèle dynamique détaillé du procédé de traitement par boues activées a été développé dans cette étude en tenant compte des effets de floculation et en utilisant le modèle cinétique du IAWPRC. De toute évidence, la modification du modèle devient complexe. Est-il nécessaire d'utilisé un modèle complexe? Des études par simulation ont démontré que, en pratique, les résultats obtenus en considérant les effets de floculation ne sont pas significativement différent de ceux obtenus avec le modèle du IAWPRC. Toutefois, lorsque le système est perturbé par une surcharge, l'effet de floculation peut devenir important, surtout sur la dégradation des espèces dans le substrat.

Les calculs de simulation avec ou sans effet de floculation sont, dans les deux cas, tous aussi simples puisque le modèle de floculation neuronal est ajouté au modèle du IAWPRC comme un bloc dont le facteur d'efficacité n'est pas constant (Du *et al.*, 1996). Le coût de conception et de fonctionnement de systèmes de traitement par boues activées utilisant la modélisation de floculation diffusionnelle consiste à estimer les paramètres du modèle et à tester le modèle de floculation neuronal.

#### **4.5 La distribution variable de la taille des caillots**

Une distribution constante de la taille des caillots a été présumé pour le développement du modèle de floculation. Toutefois, le mécanisme de croissance des caillots dans les boues pour des cultures microbiennes non-axéniques est toujours peu connu. En revanche, les conclusions tirées d'études réalisées avec des cultures axéniques suggèrent que les bactéries formant des caillots sécrètent des biopolymères qui assurent la cohésion de l'agrégat pendant les phases stationnaires ou sénescences de croissance par la lyse ou le métabolisme

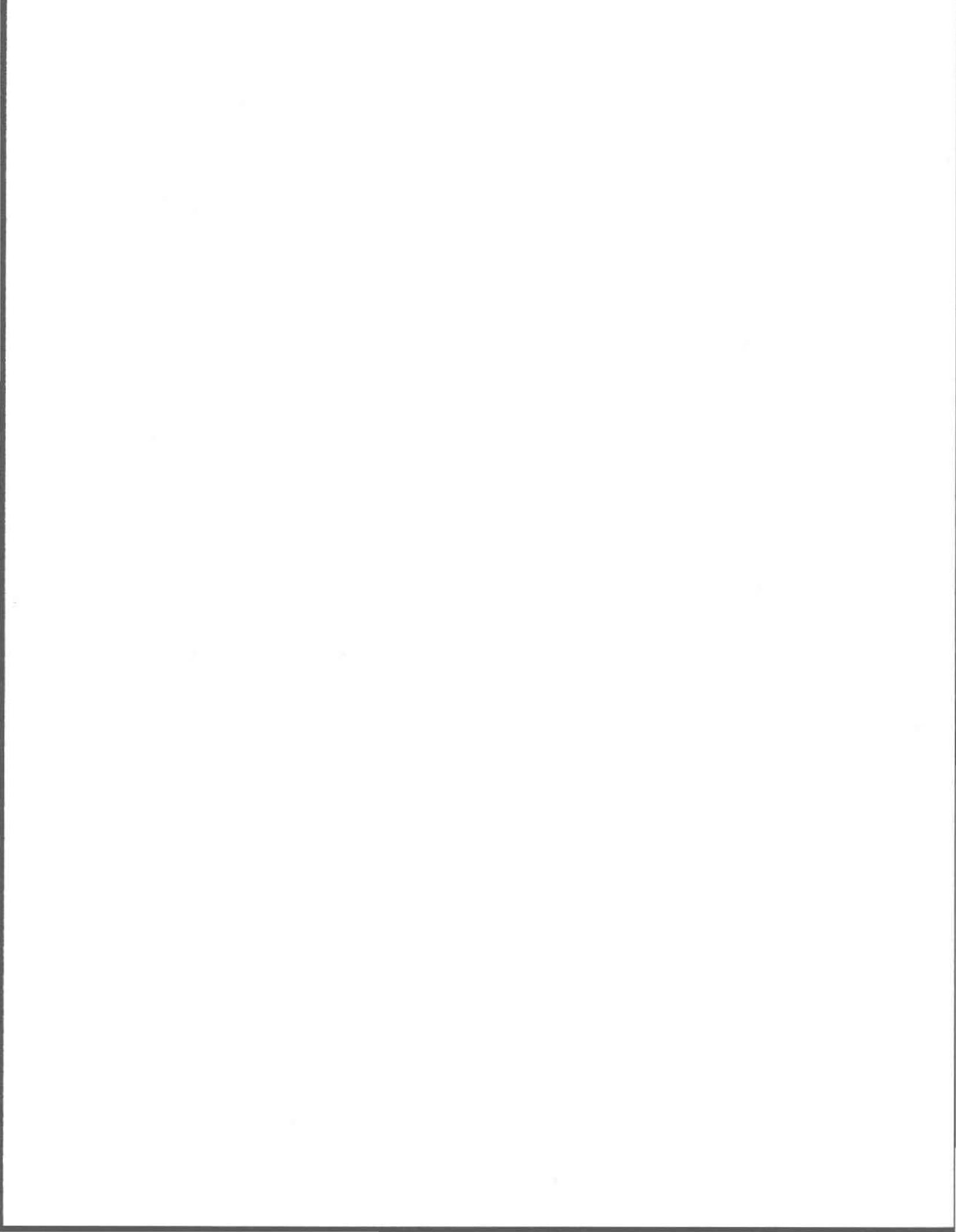
endogène. Le rapport entre la quantité de biopolymères et de micro-organismes est important afin de déterminer la taille moyenne des caillots, sujette à une perturbation du système qui rend le métabolisme endogène dominant. Par exemple, sous des conditions où la biomasse de micro-organismes est grande par rapport au substrat organique entrant le système, la production de biopolymères augmenterait, causant une expansion du volume des caillots. À l'opposé, lorsque privés de nutriments pour une période de 10 heures, les biopolymères sont hydrolysés par les micro-organismes pour les utiliser comme substrat, ce qui cause une réduction du volume des caillots. Ces observations suggèrent que la taille moyenne des agrégats est reliée de près aux conditions de fonctionnement du système, plus particulièrement au rapport substrat : micro-organisme et à la concentration d'oxygène dissout. L'état actuel des connaissances sur la floculation n'a pas permis de formuler des relations déterministes de cause à effet qui peuvent être utilisées dans des modèles de prédiction (Capodaglio *et al.*, 1991). L'utilisation de modèles neuronaux de type « boîte noir » pourrait faire l'objet de recherches supplémentaires.

## **4.6 Validation du modèle de floculation**

Dans le but de valider le modèle de floculation et d'évaluer les effets de floculation sur la dynamique du système de traitement par boues activées, les résultats de simulation et les données de l'usine de traitement des eaux usées de Whittingham obtenus lors de perturbations importantes ont été comparés sur la base de la qualité des effluents ( $DCO_T$ ). Les  $DCO_T$  observée et simulée étaient passablement différents (Tyagi *et al.*, 1996). Cette dissimilitude était principalement causée par une mauvaise simulation de la concentration de solides en suspension selon le modèle de décantation (Lessard et Beck, 1993). Les paramètres de décantation ont un effet important sur la qualité globale des effluents. Les hypothèses sur la fraction constante de DCO soluble non-biodégradable entrant dans l'aérateur sont également en cause. En dépit d'une comparaison désavantageuse, les résultats de simulation démontrent tout de même que la  $DCO_T$  prédite lors de surcharge se comparent plus avantageusement aux résultats observés lorsque le modèle de floculation est intégré que lorsqu'il ne l'est pas.

## **4.7 Modélisation et contrôle du procédé de bio-lessivage des métaux**

La modélisation dynamique et le contrôle opérationnel du procédé de bio-lessivage des métaux lourds est en réalité un sujet de recherche plutôt récent. Tel que mentionné, la solubilisation des métaux pendant le lessivage microbien peut être estimé à partir du pH du milieu à l'aide du modèle neuronal développé. Il est toutefois très difficile de prédire précisément une valeur de ce paramètre, nécessaire à la stratégie de fonctionnement, plusieurs heures à l'avance. Ceci s'explique par la nature aléatoire du procédé de bio-lessivage. Afin de réduire les erreurs de modélisation et de mesure provoquées par le caractère aléatoire du système et de prédire avec succès la solubilisation, et ce en temps réel, un modèle stochastique à caractère dynamique a été développé à partir d'une technique élaborée du filtre de Kalman. Une avenue de recherche intéressante consisterait à corriger les paramètres du modèle, plutôt que de les considérer constants, en les identifiant, au fur et à mesure, de lot en lot.



## 5. CONCLUSIONS

---

i) La technique par réseau neuronal a été utilisée pour réaliser la tâche de prédiction opérationnelle pour les procédés de traitement des eaux usées. Deux cas ont été investigués et évalués pour démontrer l'utilité de cette approche basée sur le filet neuronal.

Une étude de modélisation et de simulation a été conduite pour l'opération à l'état stable du procédé de boues activées. Basé sur les données opérationnelles obtenues de la simulation, un modèle neuronal a été développé, qui était capable de refléter très bien la réponse appropriée de variables manipulées (le ratio de recyclage, le débit de purge des boues) par rapport au débit de l'affluent et à la concentration du substrat, qui est sujette à une valeur réglée d'une concentration donnée de substrat à l'effluent sous une condition de charge critique.

Pour évaluer d'avantage cette technique, un autre modèle neuronal a été formulé, basé sur des observations réelles en usine pour la prédiction opérationnelle d'un décanteur secondaire. Les résultats des deux investigations ont montré que les modèles neuronaux développés ont travaillé très bien en termes de capacité de précision et de prédiction, et cela mieux que les modèles de régression traditionnels pour le programme particulier étudié.

ii) Un modèle de floculation de boues a été proposé, basé sur le modèle cinétique suggéré par le groupe de travail de l'IAWPRC. Une considération additionnelle a alors été donnée dans le modèle, pour tenir compte de l'effet de diffusion du caillot. Les résultats de simulation montrent que les facteurs d'efficacité globale correspondent à des conditions de fonctionnement différentes, causés par la limitation de diffusion dans le caillot, peuvent souffrir d'une très grande variation.

iii) Un modèle de système intégré utilisant le modèle de floculation de boues développé a été utilisé pour étudier la réponse dynamique d'un système de boues activées. D'intenses simulations ont été réalisées sous différentes conditions de chocs de charge. Les résultats de

simulation indiquent que l'effet de la limitation de diffusion dans les caillots sur la dynamique du système est significatif sous de chocs de charge sévères.

iv) Un modèle filet neuronal floue a été développé pour résoudre le problème de fonctionnement d'un procédé de boues activées. Dans le développement du modèle, le concept de fonction relative d'appartenance floue a été proposé. Les résultats de simulation montrent que l'utilisation combinée de la logique floue et de la technique de réseau neuronal rend ce système intelligent de support opérationnel à la décision capable d'apprendre les tendances de données complexes du procédé à l'étude, par extraction des règles venant de l'observation.

v) Un modèle à base de filet neuronal a été développé et peut compiler le niveau de solubilisation de six métaux Cd, Cr, Cu, Ni, Pb et Zn. Les entrées du modèle sont la concentration initiale de chaque métal dans la boue et la valeur du pH de la boue observée pendant l'opération de lessivage. Trois filets neuronaux séparés ont été entraînés, un pour la boue non digérée, un autre pour la boue digérée en anaérobie et un autre pour la boue digérée en aérobie. Les modèles ont été testés utilisant les données expérimentales actuelles et les résultats ont été satisfaisants.

vi) Une stratégie opérationnelle avancée a été développée sur la base du filtre étendu de Kalman et d'un modèle neuronal. Le modèle neuronal original utilisé a été construit utilisant les données provenant d'un large éventail de boues de sources différentes. L'utilisation de stratégie de fonctionnement peut aider à terminer un traitement de lessivage le plus tôt possible, étant donc capable de réduire le temps de fonctionnement, de prédire la solubilisation des métaux aux niveaux recommandés, de minimiser une décroissance excédentaire du pH et de minimiser la solubilisation des nutriments (N, P, K). Un cas étudié a montré que six heures de temps de fonctionnement ont été sauvées par l'utilisation de cette technique.

## 6. BIBLIOGRAPHIE

---

- Andrews, G.F. 1991. Aerobic wastewater process models. Dans *Biotechnology*, Seconde édition (édité par Rehm H.-J. et Reed G. en coopération avec Puhler A. et Stadler P.), 408-439. VCH Publisher, New York.
- Andrews, J.F. 1992. Mathematical modeling and computer simulation. *Dynamics and control of the activated sludge process Volumn 6*. (Édité par J.F. Andrews), 23-66 Technomic Publishing Co., Inc., USA
- Bakti, N.A.K. et R.I. Dick. 1992. A model for a nitrifying suspended-growth reactor incorporating intraparticle diffusional limitation. *Wat. Res.* **26**, 1681-1690.
- Baba, K., I. Enbutu, H. Matuazki, et S. Nogita. 1990. Intelligent support for water and sewage treatment plants which includes a past history learning function -- coagulant injection guidance system using neural net algorithm, *Instrumentation, Control and Automation of Water and Wastewater treatment and Transport Systems, Proc. Of the 5<sup>th</sup> IAWPRC Workshop*, 227-234., Yokohama et Kyoto, Japan.
- Barron, J.J. 1989. Solving the nearly unsolvable. *Byte*.**14**(6), 102
- Barton, D.A., J.J. McKeown. 1986. Evaluation of an aerotor control strategy utilizing timevarying mathematical model simulations, *Water Sci. Technol.* **18**, 189-201.
- Beccari, M., A.C. DiPinto, R. Ramadori et M.C. Tomei. 1992. Effects of dissolved oxygen and diffusion resistances on nitrification kinetics. *Wat. Res.* **26**, 1099-1104.
- Belhateche, D.H. 1995. Choose Appropriate Wastewater Treatment Technologies. *Chem. Engin. Prog.* August, 1995, 32-51.
- Bellgard, K.-H. 1991. Cell Models. *Biotechnology: Measuring, Modelling and Control*, Dans *Biotechnology*, Seconde édition (édité par Rehm H.-J. et Reed G. en coopération avec Puhler A. Et Stadler P.), 267-298. VCH Publisher, New York.
- Benefield, L. et F. Molz. 1984. A model for the activated sludge process which considers wastewater characteristics, floc behavior, and microbial population. *Biotechnol. Bioengng.* **XXVI**, 352-361.
- Benefield, L. et F. Molz. 1983. A kinetic model for the activated sludge process which considers diffusion and reaction in the microbial floc. *Biotechnol. Bioengng.* **XXVI**, 2591-2615.

- Blais, J.F, J.C. Auclair et R.D. Tyagi. 1992a. Cooperation between two *Thiobacillus* strains for trace metals removal from municipal sludge. *Can. J. Microbiology*. **38** (30), 181-187.
- Blais, J.F, R.D. Tyagi. et J.C. Auclair. 1992b. Bioremediation of metals from sewage sludge by sulfur-oxidizing bacteria. *J. Envir. Eng. Div. ASCE* **118**, (5), 690-707.
- Bloomfield, C. et G. Pruden. 1975. The effects of aerobic and anaerobic incubation on extractability of heavy metals in digested sludge. *Env. Pollut.* **8**, 217-232.
- Boger, Z. et H. Guterman. 1990. Knowledge representation of wastewater treatment plant operating history and current state, *Instrumentation, Control and Automation of Water and Wastewater treatment and Transport Systems, Proc. Of the 5<sup>th</sup> IAWPRC Workshop*, 235-242, Yokohama et Kyoto, Japan.
- Bruce, A.M. et R.D. Davis. 1989. Sewage sludge disposal: Current and future options. *Water Sci. Technol.* **21**, 1113-1128.
- Busby, J.B. et J.F. Andrews. 1981. Dynamic modeling and control strategies for the activated sludge process. *J. WPCF* **47**, 1055-1080.
- Capodaglio, A.G., H.V. Jones, V. Novotny et X. Feng. 1991. Sludge bulking analysis and forecasting: Application of system identification and artificial neural computing technologies. *Wat. Res.* **25**, 1217-1224.
- Cornwell, D.A., G.P. Westermoff et G.C. Celine. 1980. Batch feasibility testing of heavy metals removal from wastewater sludge with liquid-ion exchange. *Proc. Mid. Atlantic Waste Conf.*, 12TM Bucknell Univ., Lewisburg, PA, July 13-15, pp. 111-119.
- Clift, R.C. et J.F. Andrews. 1981. Predicting the dynamics of oxygen utilization in the activated sludge process. *J. WPCF* **53**, 1219-1232
- Couillard, D. et S. Zhu. 1991. Control strategy for the activated sludge process under shock loading. *Wat. Res.* **26**, 649-655.
- Couillard, D. et S. Zhu. 1992. Bacterial leaching of heavy metals from sewage sludge for agricultural application. *Wat. Air and Soil Pollut.* **63**, 67-80.
- Dammel, E.F. et E.D. Schroeder. 1991. Density of activated sludge solids. *Wat. Res.* **25**, 841-846.
- D'Amours, F. 1987. Contrôle digital d'une usine à boues activées à l'aide de modèles déterministes dynamiques. Thèse de maîtrise, INRS-Eau/Université du Québec, Canada.

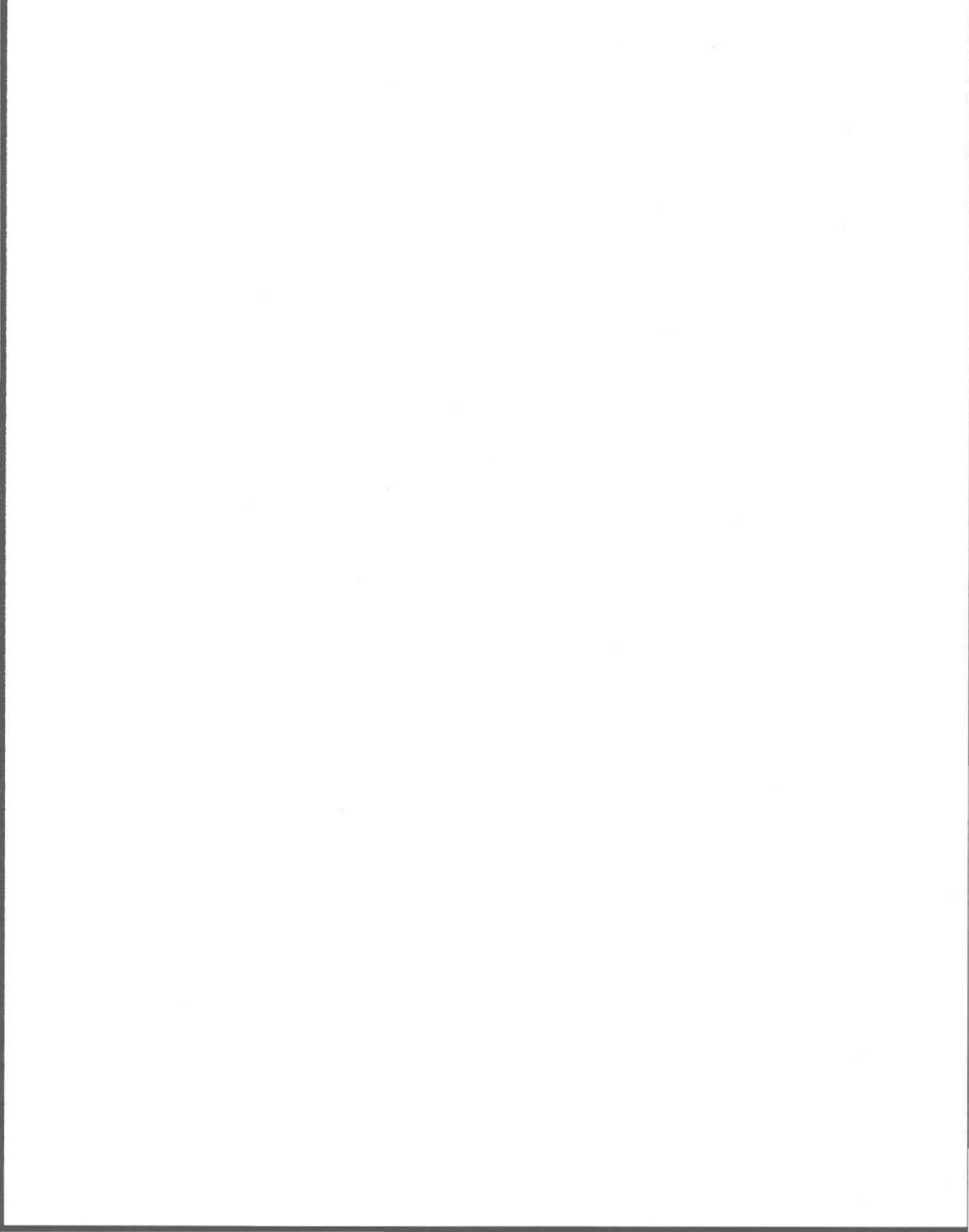
- Dold, P.L. et G.V.R. Marais. 1986. Evaluation of the general activated sludge model by the IAWPRC Task Group, *Water Sci. Technol.* **18**, 63-90.
- Du, Y.G., R.D. Tyagi et R. Bhamidimarri, 1996, Neural Network Analysis of the Diffusional Limitations in Activated Sludge Flocs. *Process Biochemistry*, **31**(8), 753-763.
- Du, Y.G., T. R. Sreekrishnan, R.D. Tyagi et P.G.C. Campbell, 1994, Effect of pH on Metal Solubilization from Sewage , *Can. J. Civil Eng.* **21**(5), 728-735.
- Du, Y.G., R.D. Tyagi et T.R. Sreekrishnan, 1995, Operational strategy for metal bioleaching based on pH measurements, *J. Envir. Engin., ASCE*. July, 527-535.
- Du, Y.G., R.D. Tyagi et R. Bhamidimarri, (to be published in 1999), Use of fuzzy neural-net model for rule generation of activated sludge process, *J. Process Biochemistry*
- Finn, G.A. 1989. Applications of Expert Systems in the process industry. *Dynamic Modeling and Expert Systems in Wastewater Engineering* (édité par Patry G.G. et Chapman D.) Lewis Publishers, Inc.
- Grady, L.C.P. et H. Lim. 1980. *Biological Wastewater Treatment*. New York: Marcel Dekker.
- Grady, L.C.P. 1989. Dynamic modeling of suspended growth biological wastewater treatment processes. *Dynamic Modeling and Expert Systems in Wastewater Engineering* (édité par Patry G.G. et Chapman D.) LEWIS PUBLISHERS, INC.
- Guarino, C., H.D. Gilman., M.D. Nelson, et C.M. Koch. 1972. Computer control of wastewater treatment, *JWPCF*, **44**, 1718-1729.
- Hayes, T.D., W.J. Jewell et R.M. Kabrick. 1980. Heavy metals removal from sludges using combined biological/chemical treatment. Proc. 34<sup>th</sup> Ind. Waste Conf., purdue Univ., West Lafayette, Indiana. 529-543
- HcHarg, W.H. 1973. Designing the optimum system for biological waste treatment. *Chem. Engr.* 46-49.
- Henry, J.G., D. Prasad et W. Lohaza. 1988. Survival of indicator bacteria during leaching . In ASCE Natn. Conf. Env. Eng. 13-15 July Vancouver, Canada, pp. 369-376.
- Henze, M., C.P.L.Jr. Grady, W. Gujer, G.v.R. Marais, et T. Matsuo. 1987. Activated Sludge Model No. 1, IAWPRC Scientific and Technical Report No. 1, IAWPRC, London, England.

- Holmberg, A. 1982. Modeling of the activated sludge process for microprocessor-based estimation and control. *Wat. Res.* **16**, 1233-1246.
- James, A. 1982. Some perspectives on the modelling of the biological treatment of wastewater, *Water Sci. Technol.* **14**, 227-240.
- Jenkins, R.L., J.S. Benjamin, L.S. Marvin, B. Rodger, M.P. Lo et R.T. Huang. 1981. Metal removal and recovery from municipal sludge. *J. Water Pollut. Control Fed.* **53**, 25-32.
- Kiff, R. et S. Brown. 1981. The development of an oxidative acid hydrolysis process from sewage sludge detoxification. *Proc. Int. Conf. Heavy Metals in Env.* , Amsterdam, September, p. 159.
- Lessard, P. 1989. Operational river quality management: control of storm water discharges. Ph.D. thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine.
- Levenspiel, O. 1972. *Chemical Reaction Engineering*. John Wiley and Sons Inc., New York
- Li, D.H. et J. Gancsarczyk. 1991. Size distribution of activated sludge flocs, *J. WPCF*, **63**, 806-814.
- Lippmann, R.P. 1987. An introduction to computing with neural nets. *IEEE ASSP Mag.* **4**(2), 4-22.
- Lessard, P. et M.B. Beck. 1991. Dynamic modelling of wastewater treatment processes. *Environ. Sci. Technol.* **25**, 30-39.
- Lester, J.N., R.M. Sterit et P.W.W. Kirk. 1983. Significance and behaviour of heavy metals in wastewater treatment processes. II. Sludge treatment and disposal. *Sci. Total Env.* **30**, 45-83.
- Lo, K.S.L. et Y.H. Chen. 1990. Extracting heavy metals from municipal and industrial sludges. *Sci. Total Env.* **90**, 99-116.
- Marsili-Libelli, S. 1989. Computer control of the activated sludge process, *Encyclopaedia of Environmental Control Technology, Volume 3*, Gulf Publishing Company. 229-270.
- Masakatsu, H and F. Takeshi. 1992. The use of time series analysis in hierarchical control systems. Dans *Dynamics and Control of the Activated Sludge Process*, Technomic Publishing Co. Inc. Lancaster, Pennsylvania U.S. Vol. 6 (édité par Andrews J.F.) 67-104.

- Matson, J.V. et W.G. Characklis. 1976. Diffusion into microbial aggregates. *Wat. Res.* **10**, 877-885.
- McNulty, K. J., A.T. Malarkey, R.I. Goldsmith et M.A. Fremont. 1977. Development of a new process for sludge conditioning. National Conference on Composting of municipal Residues and sludge, rockville, Md., August 23-25.
- Miller, R.M., K. Itoyama, A. Uda, H. Takada et N. Bhat. 1997. Modeling and control of a chemical waste water treatment plant. Proc. Of 6<sup>th</sup> International Symposium on Process Systems Engineering. 25-29 Mai 1997, Trondheim, Norway. S947-S952.
- Mininni, G. et M. Santori. 1987. Problems and perspectives of sludge utilization in agriculture. *Ecosystem Envr.* **18**, 291-311.
- Novotny, V., H. Jones, X. Feng et A. Capodaglio. 1991. Time-series analysis models of activated sludge plants. *Wat. Res.*, **23**, 1107-1116
- Oliver, B. G. et J.H. Carey. 1976. Acid solubilization of sewage sludge and ash constituents for possible recovery. *Water Research.* **10**, 1077- 1081.
- Olsson, G. 1992. Process control. Dans *Dynamics and Control of the Activated Sludge Process*, Technomic Publishing Co. Inc. Lancaster, Pennsylvania U.S. Vol. 6 (édité par Andrews J.F.) 67-104.
- Olver, J. W., W.C. Kreye et P.H. King. 1975. Heavy metal release by chlorine oxidation of sludge. *J. Water Pollut. Control Fed.* **47**, 2490-2497.
- Patry, G. G. et D. Chapman. 1989. *Dynamic modeling and expert systems in wastewater engineering*. Lewis Publishers, Inc. U.S.A.
- Petersen, E. E. 1965. *Chemical Reactor Analysis*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, U.S.A.
- Podukone, N. et G.F. Andrews. 1989. A single mathematical model for the activated sludge process and its variants. *Wat. Res.*, **23**, 1535-1541.
- Rittman, B. E. 1985. The effect of load fluctuations on the effluent concentration produced by fixed-film reactors, *Water Sci. Technol.* **17**, 1-14.
- Salski, A. 1992. Fuzzy knowledge-based models in ecological research. *Ecological Modelling*, **63**, 103-112.
- Scott, D. S. et H. Horlings. 1975. Removal of phosphates and metals from sewage sludge. *Env. Sci. Technol.* **9**, 849-855.

- Sreekrishnan, T.R., R.D. Tyagi, J.F. Blais et P.G.C. Cambell. 1993. Kinetics of heavy metal bioleaching from sewage sludge – I: effects of process parameters. *Wat. Res.*, **27**, 1641-1651
- Thibault, J., V.V. Breusegem et A. Cheruy. 1990. On-line prediction of fermentation variables using neural networks. *Biotechnol. Bioengr.* **36**(10), 1041-1048.
- Tong, R.M., M.B. Beck et A. Latten. 1980. Fuzzy control of the activated sludge wastewater treatment process. *Automatica*. **16**, 695-670.
- Tyagi, R.D., D. Coullard et F.T. Tran. 1991. Analysis of final settling tank in relation to control of metal inhibition in the activated sludge process. *Can. J. Chem. Engr.* **69**, 534-543.
- Tyagi, R.D. et D. Coullard. 1989. Encyclopedia of environmental control technology, **3**, P.E. cheremisinoff, ed., Gulf Publihing Co., N.J., 557-590.
- Tyagi, R.D. et Y.G. Du, 1994, *Bioprocess Computatins in Biochenology*, Edited by T.K. Ghose, Use of Neural Networks in the Activated Sludge Process, Tata McGraw-Hill Publishing Company
- Tyagi, R.D., Y.G. Du et R. Bhamidimarri. 1996, Dynamic behavior of the activated sludge process under shock loading: Application of the floc model. *Water. Res.*, **30**, 7, 1605-1616.
- Tyagi, R.D., T.R. Sreekrishnan; P.G.C. Cambell et J.F. Blais. 1993. Kinetics of heavy metal bioleaching from sewage sludge – II: mathematical model. *Wat. Res.*, **27**, 1653-1661.
- Villadsen, J.V. et W.E. Stewart. 1967. Solution of boundary-value problems by orthogonal collocation. *Chem. Engng. Sci.* **22**, 1483-1501.
- Vitasovic, Z. 1989. Continuous Settler Operation: A dynamic model. *Dynamic Modeling and Expert Systems in Wastewater Engineering* (édité par Patry G.G. et Chapman D.) LEWIS PUBLISHERS, INC.
- Wuhrmann, K. 1963. Effect of oxygen tension on biochemical reactions in sewage purification plants. *Advances in Biochemical Waste Treatment*, 27-44, Pergamon Press, Oxford.
- Zadeh, L.A. 1988. Fuzzy Logic, *Computer*, **1**(4), 83-93.

ANNEXE A



## Articles Scientifiques Publiés

### Neural Model for Operational Control of Activated Sludge Processes

R. D. Tyagi, **Y.G. Du**, T.R. Sreekrishnan and J.P. Villeneuve,  
*Process Biochemistry*, **28**, 259-267, 1993.

### Use of Neural Networks in the Activated Sludge Process

**Y.G. Du** and R. D. Tyagi

In : *Bioprocess Computatins in Biochenology*, Edited by T.K. Ghose, 1994.  
Tata McGraw-Hill Publishing Company, p p. 280-309.

### Neural Network Analysis of the Diffusional Limitations in Activated Sludge Flocs.

**Y.G. Du**, R. D. Tyagi and R. Bhamidimarri  
*Process Biochemistry*, **31**, 8, 753-763, 1996.

### Dynamic behavior of the activated sludge process under shock loading: Application of the floc model.

R. D. Tyagi, **Y.G. Du** and R. Bhamidimarri.  
*Water. Res.*, **30**, 7, 1605-1616, 1996.

### Effect of pH on Metal Solubilisation from Sewage Sludge

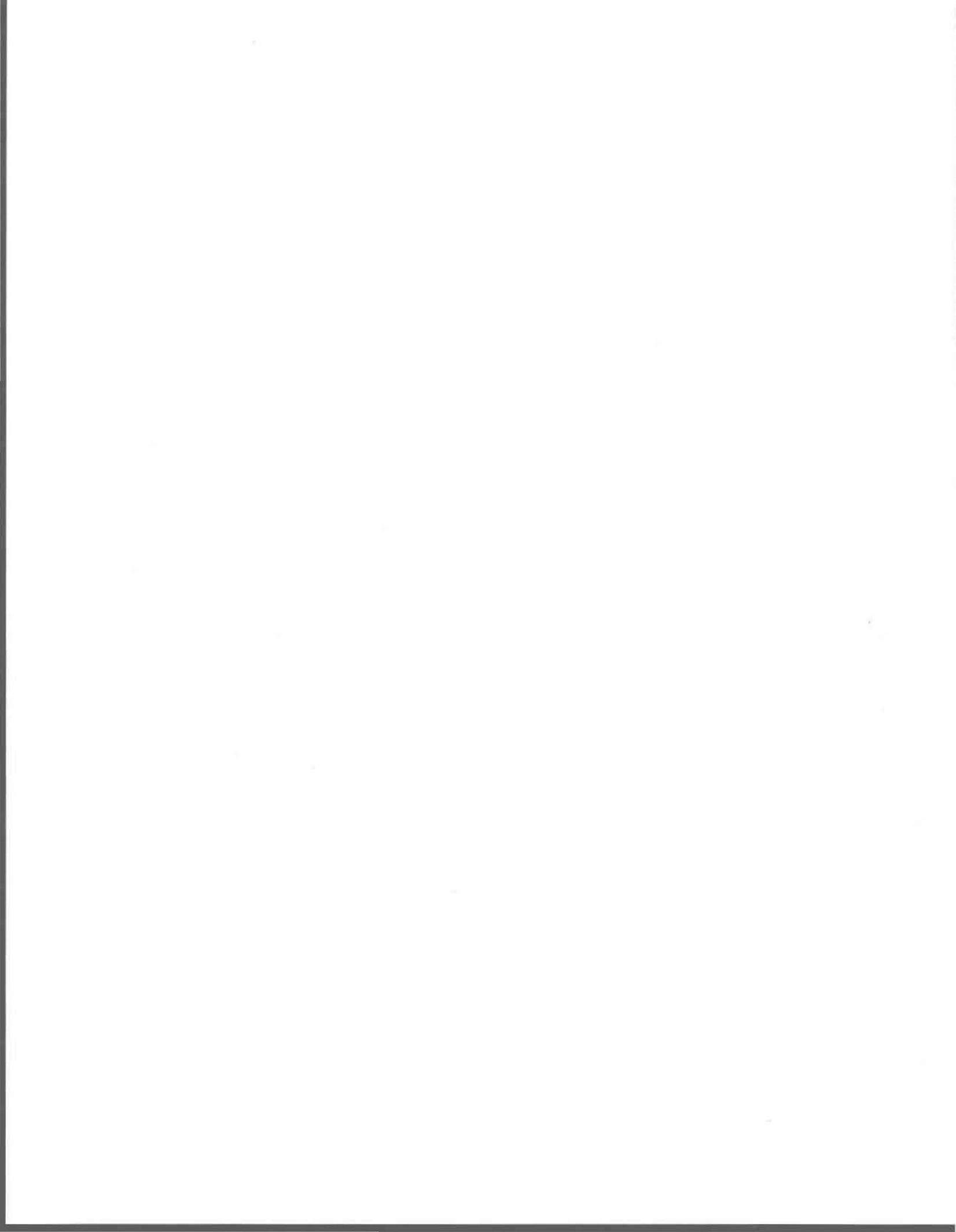
**Y.G. Du**, T.R. Sreekrishnan, R.D. Tyagi and P.G.C. Campbell  
*Can. J. Civil Eng.* **21**, No. 5, 728-735, 1994.

### Operational strategy for metal bioleaching based on pH measurements

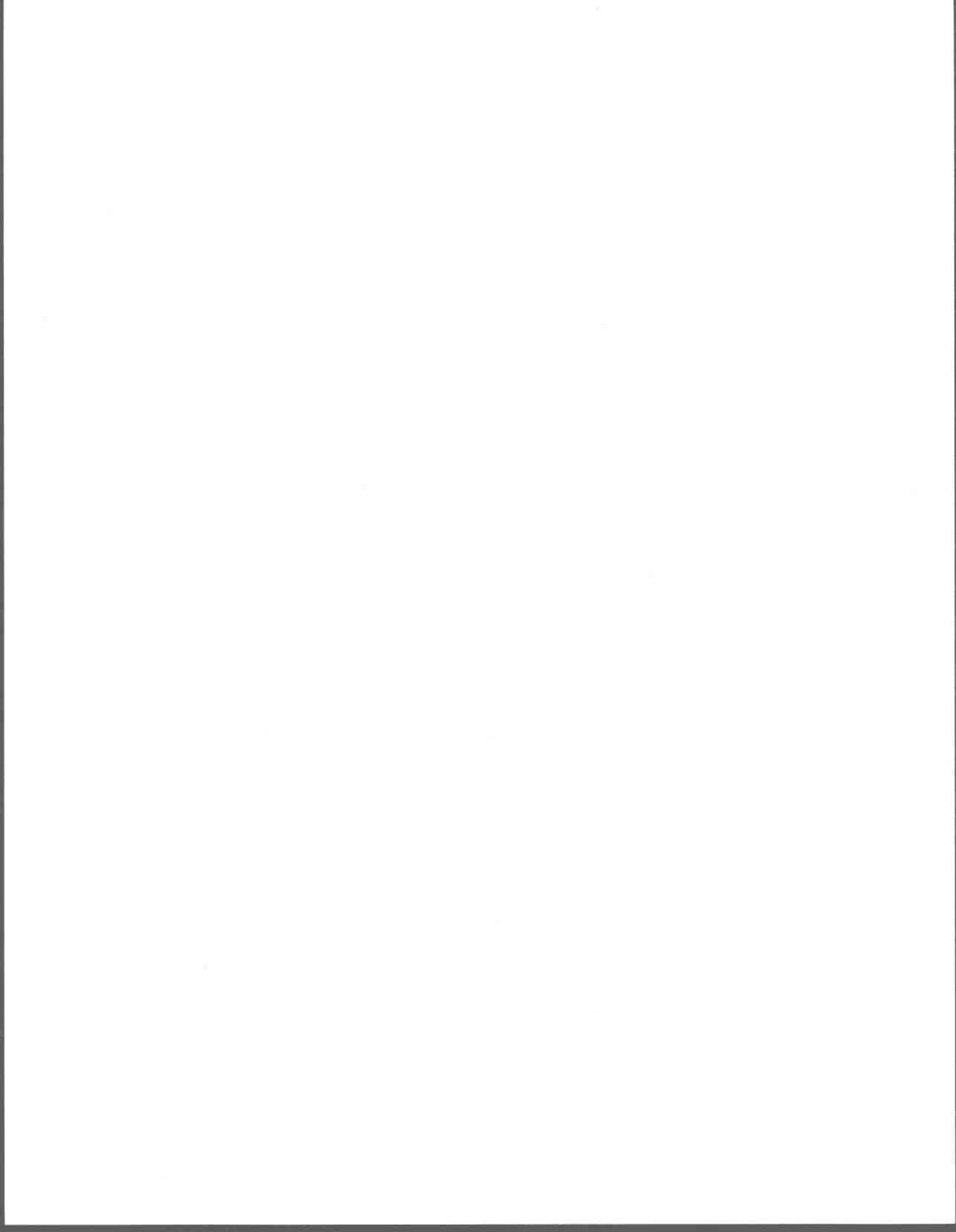
**Y.G. Du**, R. D. Tyagi and T.R. Sreekrishnan  
*J. Envir. Engin., ASCE*. **121**, 527-535, 1995.

### Use of Fuzzy Neural-net Model for Rule Generation of Activated Sludge Process

**Y.G. Du** and R. D. Tyagi  
*Process biochemistry (Accepté)*, 1999)

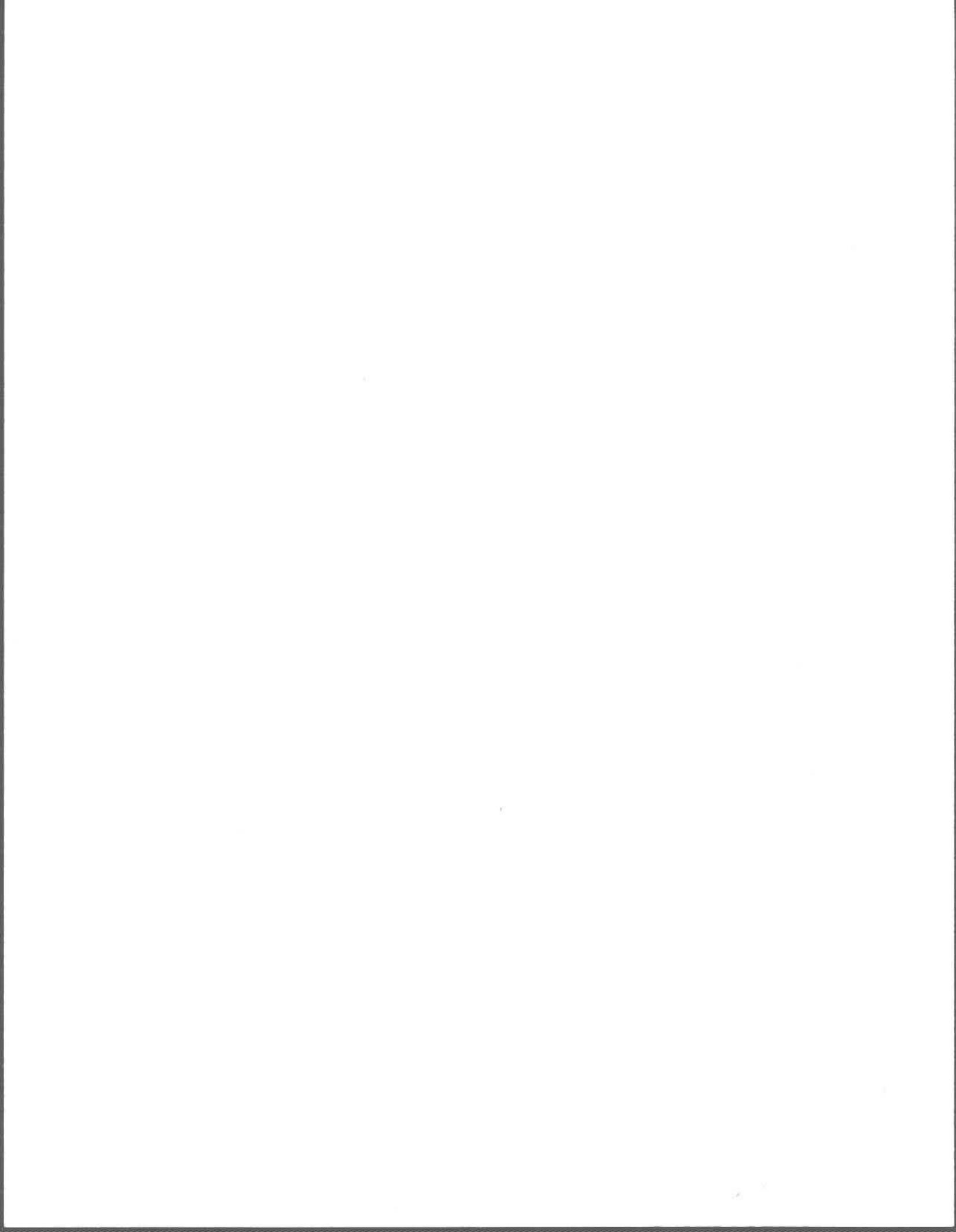


ANNEXE B



## **Modèle de réseau neuronal pour le contrôle opérationnel des procédés par boues activées.**

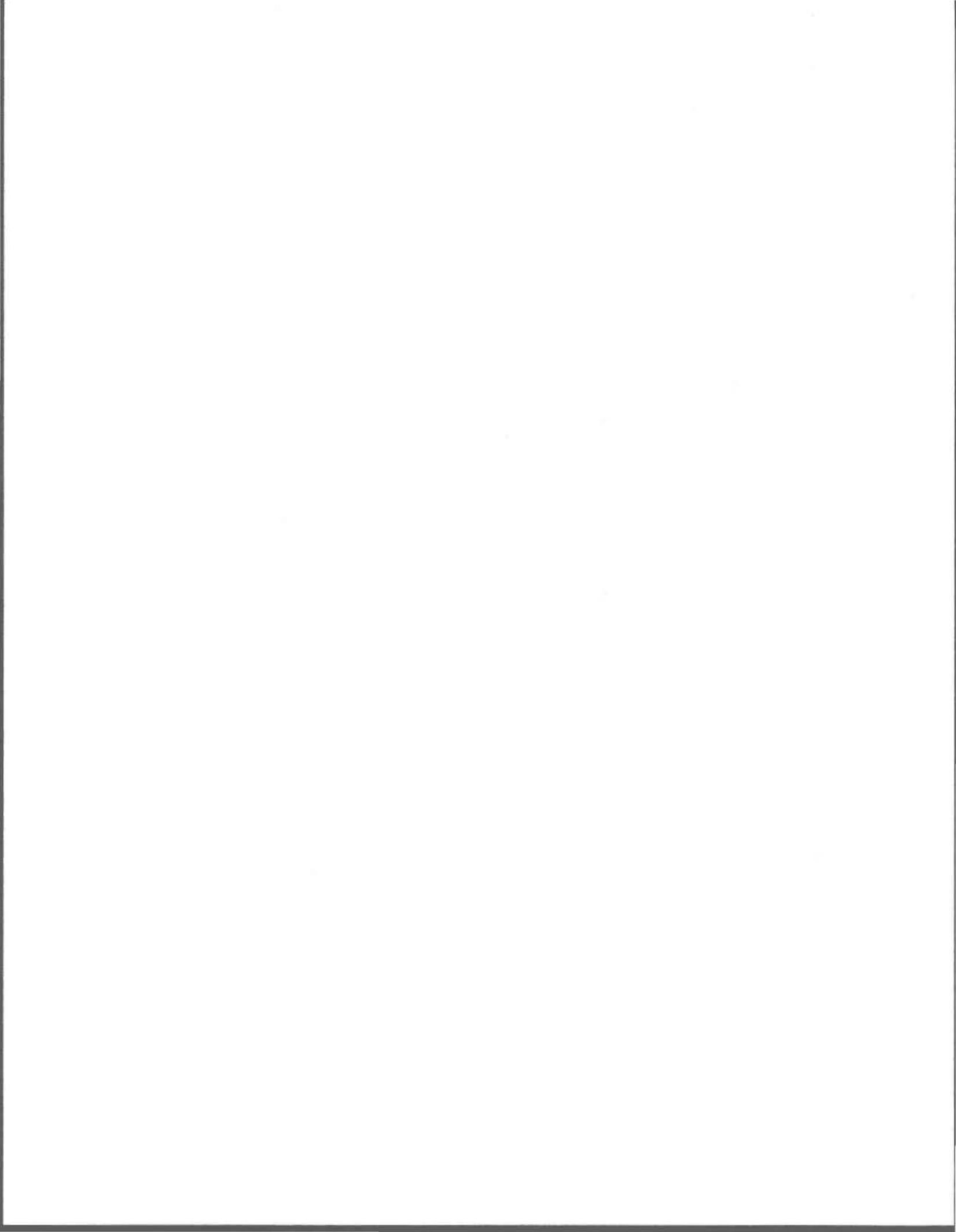
Résumé : La modélisation et la simulation d'un procédé par boues activées démontre l'existence de relations complexes entre le taux de recyclage, le taux de rejet et la charge organique. La complexité de ces relations s'explique par la non-linéarité inhérente à ce type de système ainsi que par la multitude de variables qui caractérise le procédé par boues activées. À l'aide d'une quantité limitée de données provenant de simulations, nous avons formulé et testé un réseau neuronal pro-actif à couches multiples. Ce dernier a révélé un excellent potentiel d'exactitude pour la prédiction et l'interprétation de ces relations. Pour mieux illustrer cette approche par réseaux neuronaux, nous avons développé un autre modèle basé sur des données industrielles pour prédire les performances opérationnelles d'une cuve de décantation secondaire d'une usine pilote.



L'INRS ne détient pas les droits pour diffuser cette version de l'article. Vous pouvez le consulter à l'adresse suivante :

Tyagi, R.D., Du, Y.G., Sreekrishnan, T.R. et Villeneuve, J.P. (1993). Neural model for the operational control of activated sludge processes. *Process Biochem.* 28(4): 259-267.

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/13595113>



# PROCESS COMPUTATIONS IN BIOTECHNOLOGY

*Editor*

**Prof. Tarun K Ghose (Emeritus)**  
*Biochemical Engineering Research Centre  
Indian Institute of Technology  
Delhi*



**Tata McGraw-Hill Publishing Company Limited**  
NEW DELHI

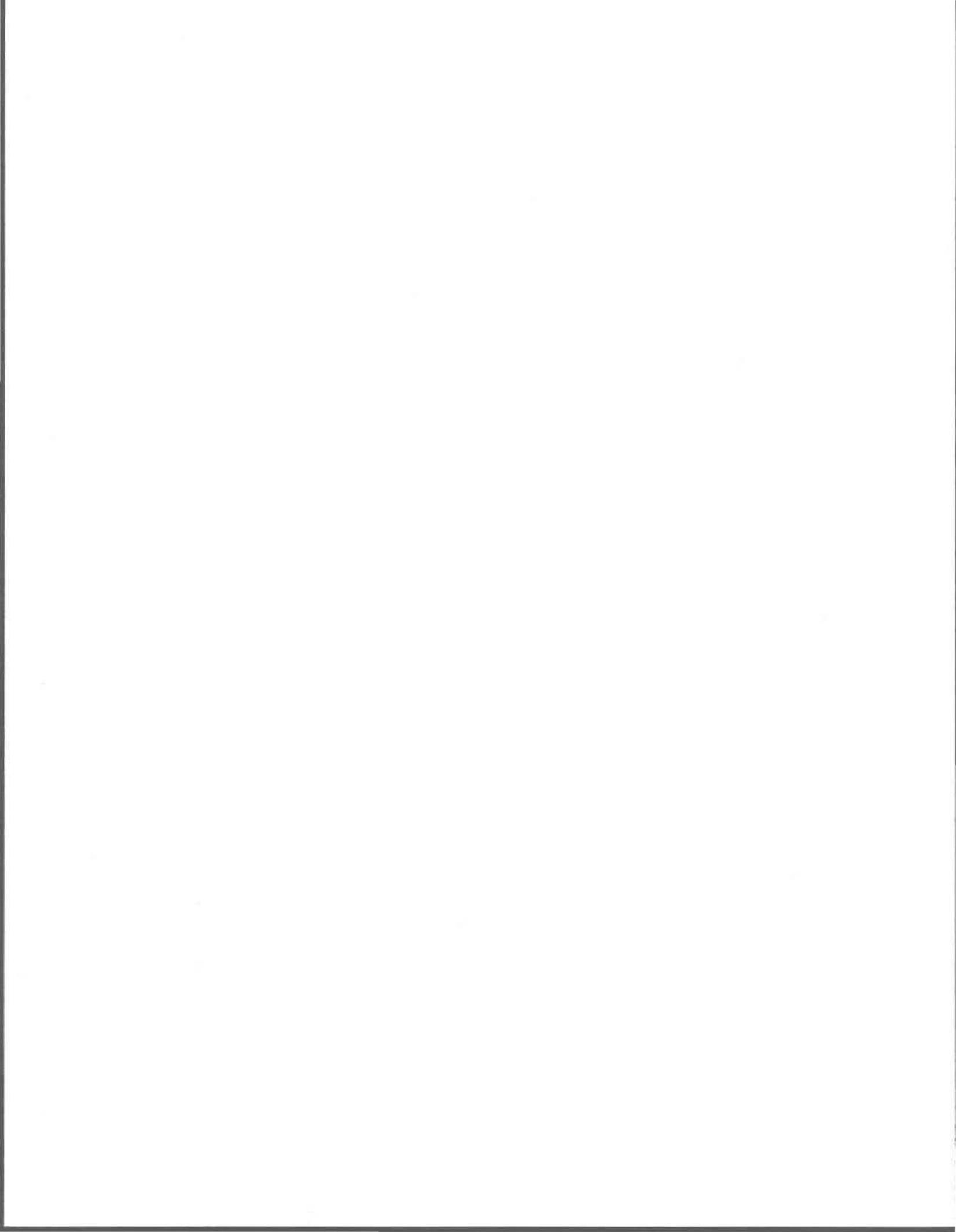
---

*McGraw-Hill Offices*

**New Delhi** New York St Louis San Francisco Auckland Bogotá Guatemala  
Hamburg Lisbon London Madrid Mexico Milan Montreal Panama  
Paris San Juan São Paulo Singapore Sydney Tokyo Toronto

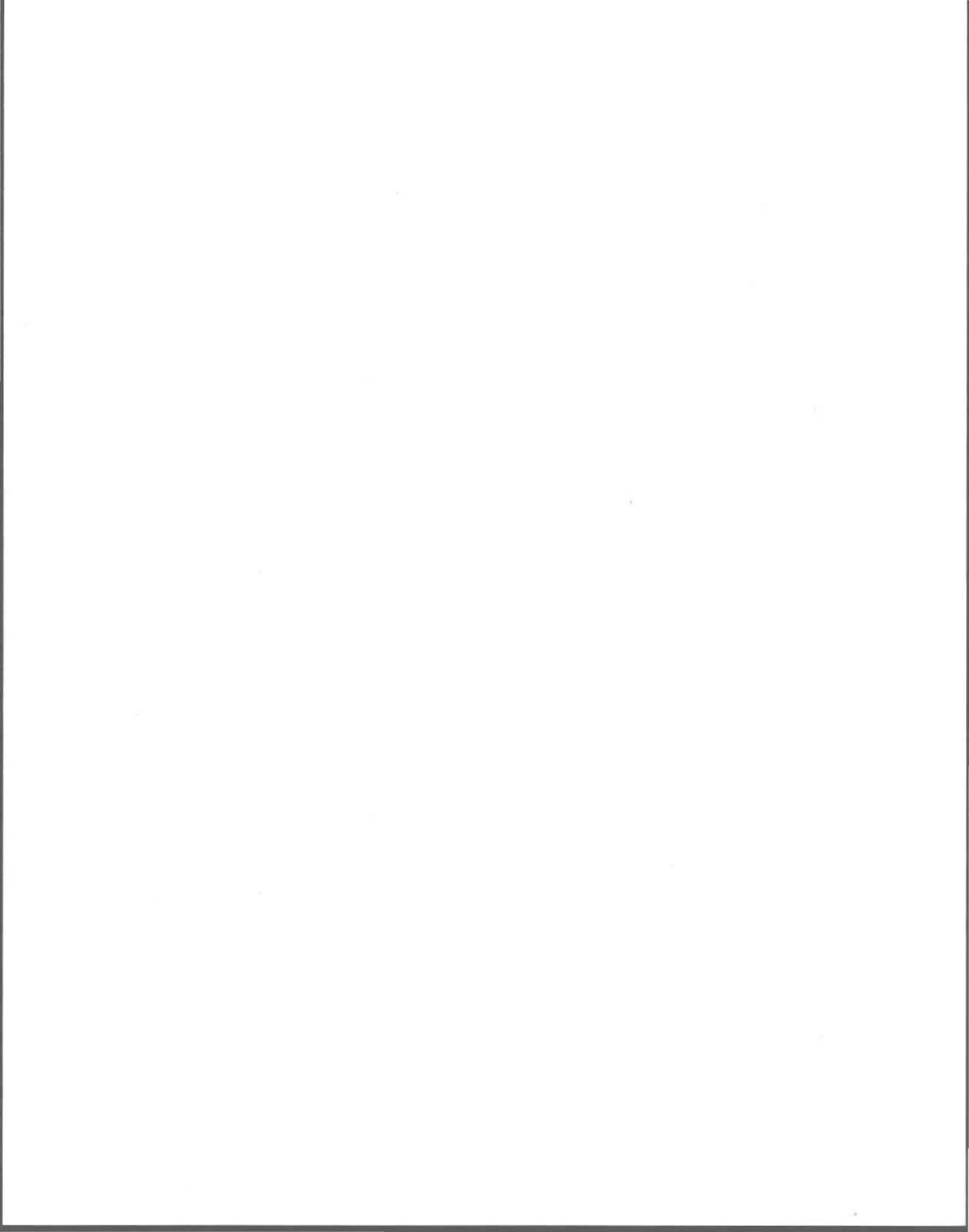
L'INRS ne détient pas les droits pour diffuser cette version de l'article :

Tyagi, R.D. et Du, Y.G. (1994) Use of neural networks in the analysis and prediction of activated sludge process. Dans: Ghose, T.K., (Ed.) *Process computations in biotechnology*, pp. 281-309. New Delhi, Inde: Tata McGraw-Hill publishing company limited]



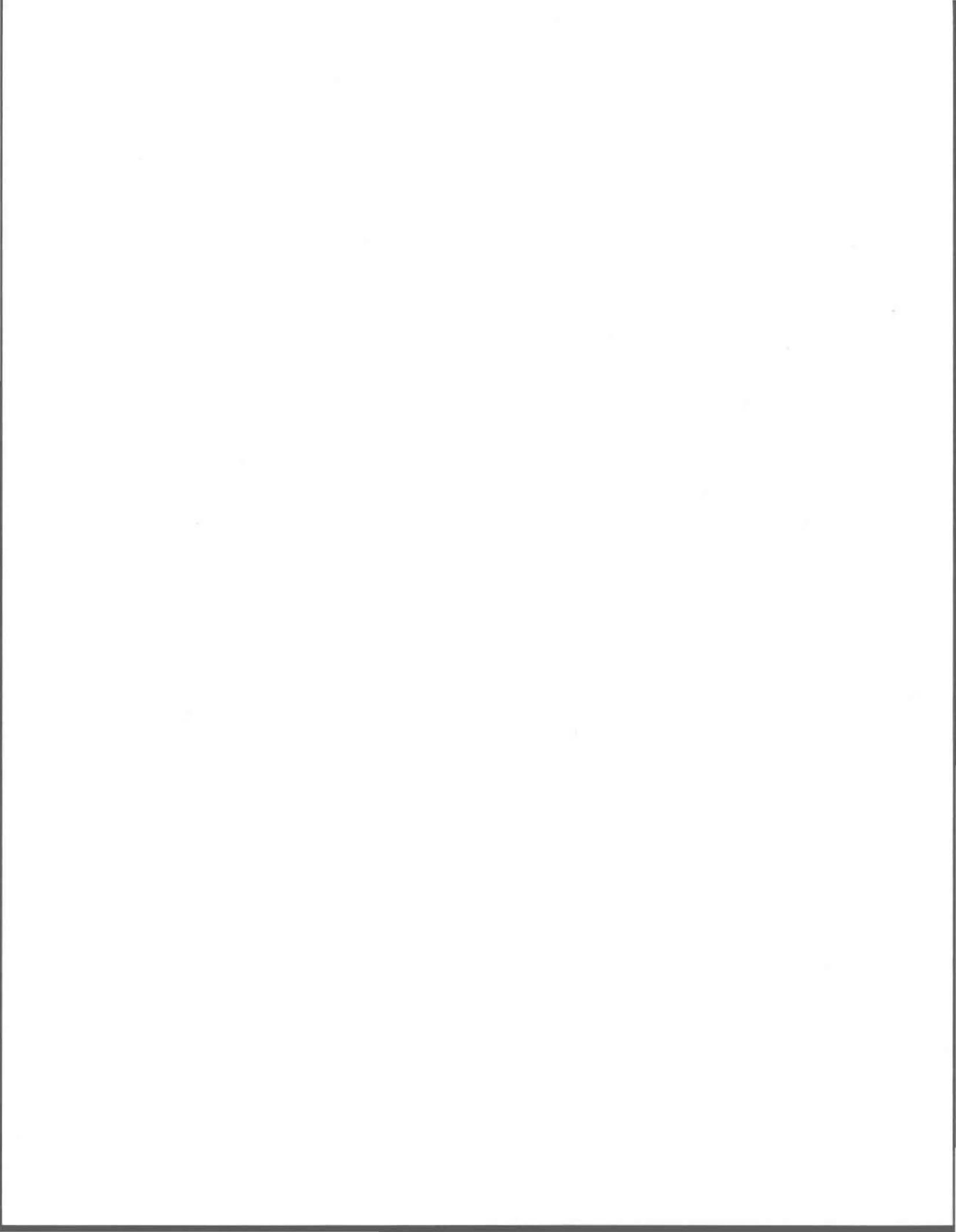
## **Analyse par réseaux neuronaux des limites de diffusion dans les caillots de boues activées.**

Résumé : Ce travail porte sur le développement d'une version détaillée, mais simplifiée, du modèle de floculation pour le procédé par boues activées. Nous avons utilisé un taux du même type que celui utilisé par le groupe de travail du IAWPRC pour exprimer la cinétique de réaction à l'intérieur de la matrice de floculation. Nous avons par la suite introduit le transfert de masse intra-particulaire pour tenir compte des limites de diffusion. À l'aide de la technique de collocation orthogonale, nous avons obtenu une solution au modèle de floculation. Puisque les réactions ne sont non seulement reliées à la dimension du coagulum et de l'ensemble des caractéristiques des boues mais également à la distribution de taille des caillots, nous avons utilisé le concept du facteur d'efficacité globale. Dans cet article, nous présentons une évaluation des facteurs d'efficacité globale à l'aide d'une analyse par réseau neuronal ainsi qu'une discussion sur les stratégies potentielles de contrôle.



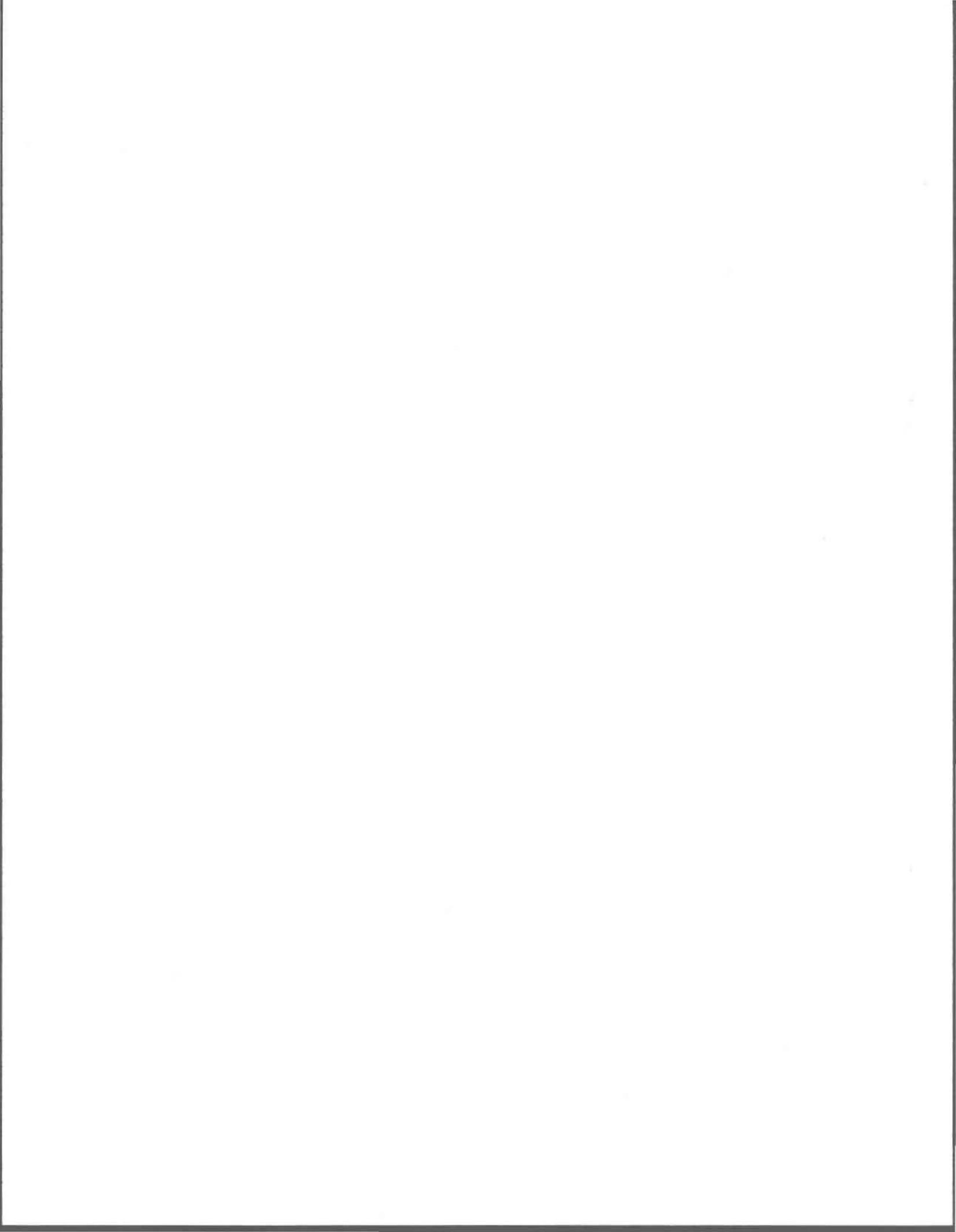
L'INRS ne détient pas les droits pour diffuser cette version de l'article. Vous pouvez le consulter à l'adresse suivante :

Du, Y.G., Tyagi, R.D. et Bhamidimarri, R. (1996). Neural network analysis of the diffusional limitations in activated sludge flocs. *Process Biochem.* 31(8): 753-763.  
[http://dx.doi.org/10.1016/S0032-9592\(96\)00020-9](http://dx.doi.org/10.1016/S0032-9592(96)00020-9)



## **Dynamique du procédé par boues activées sous l'impulsion d'une charge : application du modèle de floculation.**

Résumé : Nous avons développé un modèle pour un procédé par boues activées qui, non seulement intègre le comportement des caillots suite à une modification des caractéristiques de l'ensemble de la solution, mais tient également compte de la distribution de la taille des caillots en termes massiques à l'intérieur du système. À l'aide du modèle compréhensif, nous avons effectué des simulations pour déterminer l'impact de l'impulsion d'une charge sur le comportement de la dynamique du système et pour établir une base de compréhension de l'importance des effets de floculation. Les résultats de simulation indiquent qu'une dynamique complexe causé par les effets de floculation risque d'apparaître lorsque le choc de l'impulsion est grand. Ce phénomène doit être considéré lors de l'élaboration des politiques de contrôle pour un fonctionnement plus sécuritaire et plus performant.



L'INRS ne détient pas les droits pour diffuser cette version de l'article. Vous pouvez le consulter à l'adresse suivante :

Tyagi, R.D., Du, Y.G. et Bhamidimarri, R. (1996). Dynamic behavior of the activated sludge process under shock loading : Application of the floc model. *Water Res.* 30(7): 1605-1616.

[http://dx.doi.org/10.1016/0043-1354\(96\)00045-0](http://dx.doi.org/10.1016/0043-1354(96)00045-0)

## Effect of pH on metal solubilization from sewage sludge: a neural-net-based approach

Y.G. DU, T.R. SREEKRISHNAN, R.D. TYAGI,<sup>1</sup> AND PETER G.C. CAMPBELL

Institut national de la recherche scientifique, Université du Québec, 2700, rue Einstein, C.P. 7500, Sainte-Foy, QC G1V 4C7, Canada

Received September 7, 1993

Revised manuscript accepted January 12, 1994

Microbial leaching for heavy metals removal from municipal sewage sludge is a complex biological process. The ultimate metal solubilization achieved depends on the type of sludge involved (nondigested, aerobically digested or anaerobically digested sludge), the decrease in sludge pH as a result of the leaching operation, and the concentration of metals initially present in the sludge. In addition, the system temperature exerts an indirect but strong influence by its effect on the bacterial growth and acid production process. A neural-net-based model was developed to predict the solubilization of six heavy metals, Cd, Cr, Cu, Ni, Pb, and Zn, from sewage sludge using the bioleaching process. The only input parameters required are the type of sludge, initial metal concentrations in the sludge, and the sludge pH. The model yielded satisfactory predictions of metal solubilization when tested with a number of actual experimental data.

*Key words:* heavy metals, microbial leaching, modelling, neural-net, sewage sludge.

La lixiviation microbienne des métaux lourds provenant des boues d'épuration municipales est un processus biologique complexe. La réalisation d'une solubilisation ultime des métaux dépend du type de boues (boues non digérées, boues digérées par voie aérobie et boues digérées par voie anaérobie), de la réduction du pH des boues à la suite de l'opération de lixiviation ainsi que de la concentration des métaux présents initialement dans les boues. De plus, la température du système exerce une influence indirecte très forte en raison de son effet sur la croissance bactérienne et le processus de production d'acide. Une modèle de type neuromimétique a été développé pour prévoir la solubilisation de six métaux lourds (Cd, Cr, Cu, Ni, Pb et Zn) provenant des boues d'épuration. Les seuls paramètres requis sont le type de boues, les concentrations initiales de métaux dans les boues ainsi que le pH des boues. Les essais de modélisation réalisés avec un certain nombre de données expérimentales réelles ont permis d'obtenir des prévisions satisfaisantes de la solubilisation des métaux.

*Mots clés :* métaux lourds, lixiviation microbienne, modélisation, neuromimétique, boues d'épuration.

[Traduit par la rédaction]

Can. J. Civ. Eng. 21, 728-735 (1994)

### Introduction

Heavy metals such as cadmium, chromium, copper, lead, nickel, and zinc are commonly concentrated in primary and secondary sewage sludges. Sewage sludge contains higher concentrations of these toxic metals than do most soils (Davis 1987). The content of these metals in the sewage sludges from 22 different sources investigated in this work was observed to be below 0.5 (w/w)% on a dry mass basis in general. Nevertheless, the content of some of these metals was still beyond the maximum permissible heavy metal concentrations in sewage sludge considered acceptable for disposal on land. Removal of these heavy metals from sewage sludges can be accomplished either by a chemical process employing acid addition to the sludge or by a sludge bioleaching process. Bioleaching processes depend on the action of one or more species of bacteria to achieve the metal solubilization. Sludge bioleaching can be carried out by two different processes: the process employing *Thiobacillus ferrooxidans* (Couillard and Mercier 1991; Tyagi and Couillard 1989; Wong and Henry 1988) and the process that uses *Thiobacillus thiooxidans* and *Thiobacillus thioparus* (Blais et al. 1992a). The former depends on the chemical changes brought about by the oxidation of  $\text{Fe}^{++}$  to  $\text{Fe}^{+++}$  for solubilizing the metals, whereas the latter depends

on the oxidation of sulfur to sulfuric acid for metal solubilization.

A study of the kinetics of metal bioleaching by the sulfur oxidation process has shown that sludge pH is the single most important parameter that influences the metal solubilization achieved (Sreekrishnan et al. 1993; Tyagi et al. 1993). In addition, factors such as sludge type (nondigested, anaerobically digested, or aerobically digested) and the concentrations of various metals initially present in the sludge influence the degree of metal solubilization achieved. However, the diverse nature of sewage sludges and the presence of several factors at play during the bioleaching process make it difficult to accurately estimate the metal removal under a given set of conditions. In the absence of a set of exact mathematical relationships connecting the various process parameters and metal solubilization, one has to resort to the second-best option: the empirical approach based on experimental observations. In the present work, an attempt has been made to relate the process parameters to the metal solubilization achieved in experiments by using a neural-net.

The neural-net used in this study takes a multilayer feed-forward network structure. It is composed of interconnected "units," or neural nodes, which serve as model neurons. These nodes are situated in an input layer, an output layer, and hidden layer(s) in between. Each neural node is a simple element in terms of mathematical function, which typically falls into one of three categories: linear, threshold, or sigmoid. In this study, the nodes with sigmoidal function were used.

NOTE: Written discussion of this paper is welcomed and will be received by the Editor until February 28, 1995 (address inside front cover).

<sup>1</sup>Corresponding author.

TABLE 1. Sample statistics of the percent of metals present in soluble form for nondigested sludges on batch microbial leaching operation

Statistics	pH	ORP* (mV)	Metals present in soluble form (%)					
			Cd	Cr	Cu	Ni	Pb	Zn
Initial: $T = 0$ h								
Mean	6.9	47.9	5.7	2.0	6.5	2.9	2.1	9.0
Standard deviation	0.1	112.9	9.7	4.2	6.1	6.0	3.4	10.4
Coefficient of variation (%)	2	235	170	205	94	209	165	116
Maximum value	7.6	231.0	30.1	13.2	17.2	18.8	10.4	31.6
Minimum value	6.1	-125.0	0.0	0.0	0.2	0.0	0.0	0.7
Final: $T = 120$ h								
Mean	1.7	390.0	83.3	35.7	81.2	80.8	31.6	87.0
Standard deviation	0.3	51.4	12.9	21.5	19.4	16.2	21.9	11.0
Coefficient of variation (%)	19	13	15	60	23	20	69	12
Maximum value	2.3	465.0	94.2	65.4	95.6	97.0	63.1	98.5
Minimum value	1.3	325.0	54.9	4.4	36.9	49.0	4.3	65.1

\*ORP, oxidation reduction potential.

TABLE 2. Sample statistics of the percent of metals present in soluble form for aerobically digested sludges on batch microbial leaching operation

Statistics	pH	ORP* (mV)	Metals present in soluble form (%)					
			Cd	Cr	Cu	Ni	Pb	Zn
Initial: $T = 0$ h								
Mean	7.0	107.1	6.8	0.6	1.2	2.4	1.4	2.9
Standard deviation	0.5	67.5	5.2	0.8	1.7	2.8	2.3	4.0
Coefficient of variation (%)	7	62	76	141	143	117	163	136
Maximum value	7.7	214.0	15.1	2.2	4.5	7.7	6.3	10.0
Minimum value	6.1	-5.0	1.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.5
Final: $T = 120$ h								
Mean	1.9	361.8	83.1	26.6	73.0	77.6	29.3	85.0
Standard deviation	0.3	44.4	12.1	21.4	21.3	14.2	24.6	8.9
Coefficient of variation (%)	16	12	14	80	29	18	84	10
Maximum value	2.2	406.0	96.0	53.6	96.1	96.0	63.8	97.4
Minimum value	1.3	304.0	66.3	2.6	42.8	58.5	1.4	76.1

\*ORP, oxidation reduction potential.

which bear a greater resemblance to real neurons than do linear or threshold units.

The back-propagation algorithm (McClelland and Rumelhart 1986) was used in this study to teach the hidden nodes to produce appropriate representations of complex input patterns. First, the input data were propagated in a feedforward manner through the network to produce actual output data according to the following equations:

$$[1] \quad O_{i,k} = 1/[1 + \exp(-u_{i,k})]$$

$$[2] \quad u_{i,k} = \sum_j [(w_{i,j,k}) (O_{j,k-1})]$$

where  $u_{i,k}$  is the input variable of the  $i$ th node in the  $k$ th layer of the network;  $w_{i,j,k}$ , the weight or the connecting strength between the  $j$ th node in the  $(k-1)$ th layer and the  $i$ th node in the  $k$ th layer;  $O_{i,k}$ , the output variable of the  $i$ th node in the  $k$ th layer. The summation index  $J$  covers all the neural nodes in the  $(k-1)$ th layer. Next, the actual outputs produced were compared with the ideal or target output data

which were known in advance. The errors thus generated were then propagated backward in a certain manner through the network for adjustment of the present weights (Rangwala and Dornfeld 1989). This procedure was repeated over the training input-output data pattern until a satisfactory data mapping was achieved.

### Model development

The bacterial growth event of the microbial leaching process is accompanied by acid production (and lowering of pH) and an increase in oxidation reduction potential. The subsequent metal solubilization event occurs mainly because of the pH decrease. Sludge pH should obviously be chosen as a model input variable because of its significance in the metal solubilization process.

Heavy metals in sludge are mainly present as inorganic precipitates and organic complexes (Mosey 1976). It has also been reported that about 70% metals in anaerobically digested sludges exist as insoluble sulfides and 30% are included in intracellular material; other forms such as car-

TABLE 3. Sample statistics of the percent of metals present in soluble form for an aerobically digested sludges on batch microbial leaching operation

Statistics	pH	ORP* (mV)	Metals present in soluble form (%)					
			Cd	Cr	Cu	Ni	Pb	Zn
Initial: $T = 0$ h								
Mean	7.3	-93.0	9.6	1.3	5.8	1.2	0.3	5.9
Standard deviation	0.6	114.6	11.9	2.9	8.7	2.7	0.6	8.0
Coefficient of variation (%)	8	123	124	217	150	223	229	135
Maximum value	7.7	76.0	28.0	6.6	21.2	6.1	1.4	20.0
Minimum value	6.2	-224.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.5
Final: $T = 120$ h								
Mean	2.2	353.7	74.6	27.4	65.0	78.8	18.2	82.6
Standard deviation	0.4	44.9	15.1	13.2	25.0	22.1	19.2	12.2
Coefficient of variation (%)	20	12	20	48	37	28	105	14
Maximum value	2.9	409.0	86.4	44.1	93.3	94.3	44.8	98.2
Minimum value	1.7	300.0	48.6	12.6	19.0	40.0	0.0	69.6

\*ORP, oxidation reduction potential.

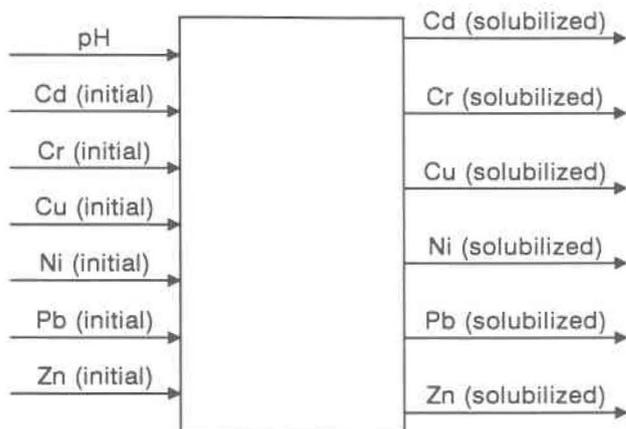
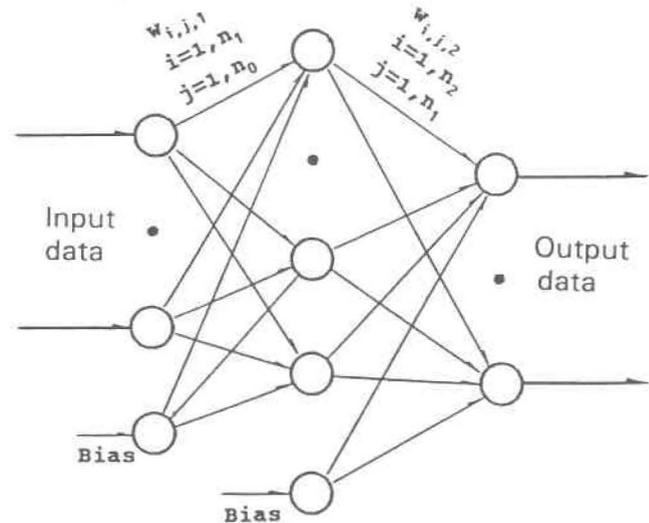


FIG. 1 Structure of the neural model for predicting the metal solubilized during the microbial leaching process.

bonates and phosphates may also be possible in some cases (Couillard and Zhu 1992; Theis and Hayes 1978). Despite this variety of possible forms, experimental evidence shows (Tables 1-3) that the total amount of each metal initially present in sludge plays an important role in determining the level of metal solubilization achieved by the microbial leaching process. Hence, these variables were also introduced as the model input variables. The model output includes the amount of each corresponding metal solubilized during the leaching process.

The neural model for estimation of heavy metals solubilized during batch microbial leaching employing the sulfur oxidation process is shown in Fig. 1. The model contains seven input variables: the sludge pH value and the total amount of the six metals (Cd, Cr, Cu, Ni, Pb, and Zn) initially present in the sludge. The model output consists of solubilization values corresponding to each of the six metals. All three categories of sludges (nondigested, anaerobically digested, and aerobically digested) share the same pattern in terms of model structure.

Twenty-two sewage sludges obtained from eleven wastewater treatment plants in the provinces of Quebec and Ontario (Canada) and in the states of Delaware and Maryland (U.S.A.) were subjected to microbial leaching by the sulfur



Input layer	Hidden layer	Output layer
k=0	k=1	k=2

FIG. 2. Schematic of the neural network.

oxidation process, as explained elsewhere (Blais 1992; Blais et al. 1992b). The data generated by these experiments were used in the present work.

The 22 sludge samples were grouped into three categories: nondigested, anaerobically digested, and aerobically digested sludges. Experiments were conducted in a batch reactor, involving the activities of two distinct sulfur-oxidizing bacterial species, a less acidophilic species, and an acidophilic species (Tyagi et al. 1993). Laboratory analysis was made regularly in the course of the batch operation to determine the solubilized trace metal concentration (Blais 1992). Samples taken from the reactor were centrifuged at  $20\,000 \times g$  for 15 minutes to separate solids and liquid. The liquid portion (supernatant) was conserved to determine the solubilized trace metal (Cd, Cr, Cu, Ni, Pb, and Zn) by plasma emission spectroscopy (ICP, Model Atom Scan 25 of Thermo Jarell Ash Corporation). To determine the metal concentration in sludge, the latter was first digested in

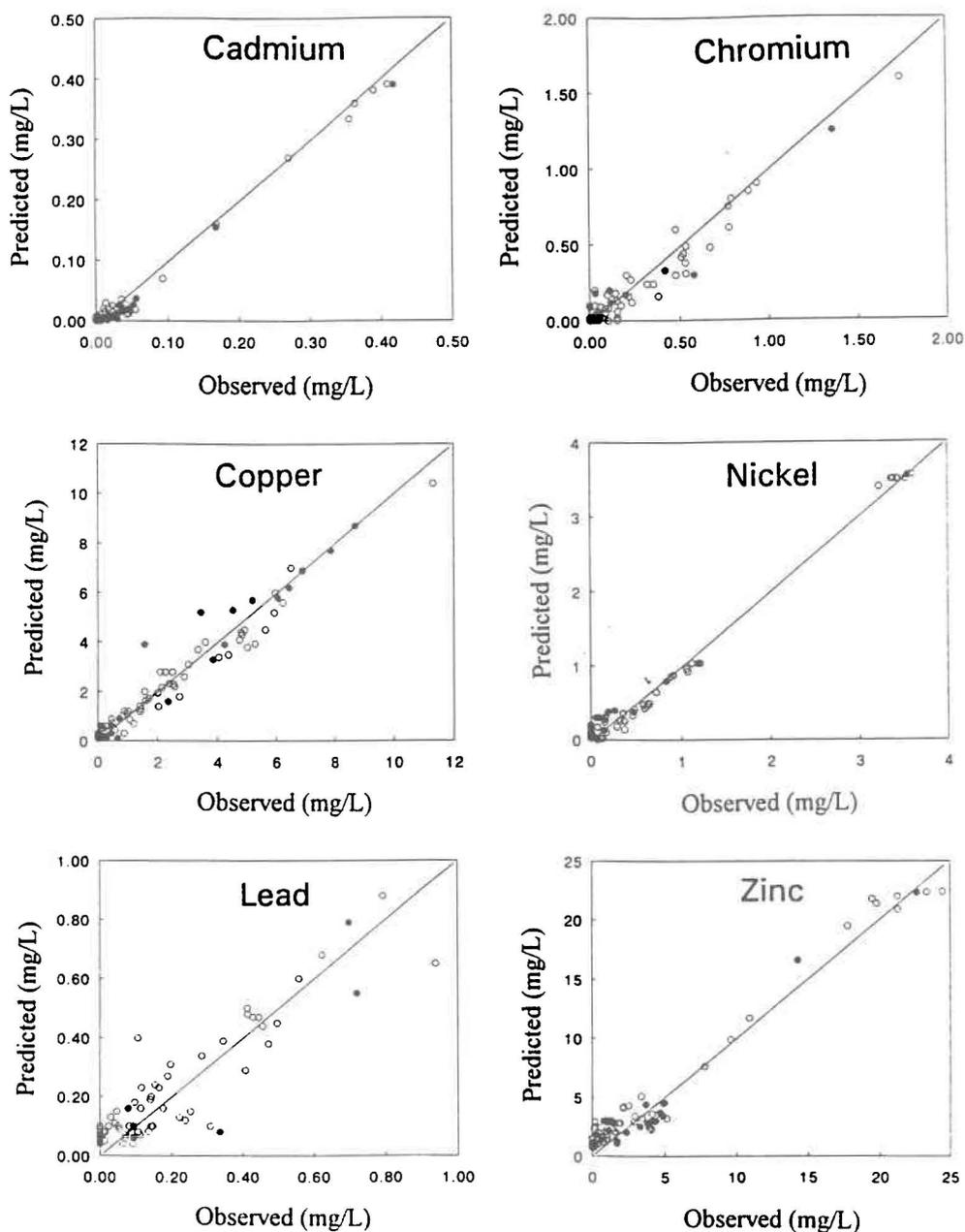


FIG. 3 Metal concentrations solubilized during bioleaching of nondigested sewage sludge. Concentrations predicted by the neural model are plotted against values observed experimentally. (○) point used in the training; (●) predicting point.

$\text{HNO}_3$ , HF, and  $\text{HClO}_4$  as per *Standard Methods for Examination of Water and Wastewaters* (APHA et al. 1989). For the microbial leaching batch process, lasting for 120 h, 11 sets of time-series experimental data were recorded at 12-h intervals, each containing 8 variables. Consequently, a total of  $22 \times 11 \times 7$  data points were collected and used in this study. Tables 1–3 indicate the sample statistics for each category of sludges in the initial and final phases of the leaching operation. The metal concentration values corresponding to  $T = 0$  h and  $T = 120$  h indicate the percent of that metal in soluble form at the initial and final moments of the batch leaching operation, respectively.

#### Results and discussion

After some preliminary trials, the network structure was determined to contain one hidden layer with 16 nodes. A schematic of the neural-net used is shown in Fig. 2. Because the inputs to the network were factors for updating the value of the weights through the learning procedure.

measurements with different magnitudes exerted a different influence on learning. Thus, the actual data for both learning and testing were scaled to the same level in the study. To perform the task of neural model testing, only a part of the experimental data taken at random were used for training purpose, leaving the rest of about 15% of the total data for the testing.

Model performances with respect to metal solubilization in the cases of nondigested, anaerobically digested, and aerobically digested sludges are shown in Figs. 3, 4, and 5, respectively. The experimental data points used for training the model and those used for testing the trained model are shown with different symbols. It can be seen that the neural-net, trained using experimental data on metal solubilization from a given type of sludge, is capable of predicting the metal solubilization from an entirely different sludge, but falling into the same sludge type class, within satisfactory levels. This observation leads to two major conclusions: (i) sludge pH and initial sludge metal concentrations are

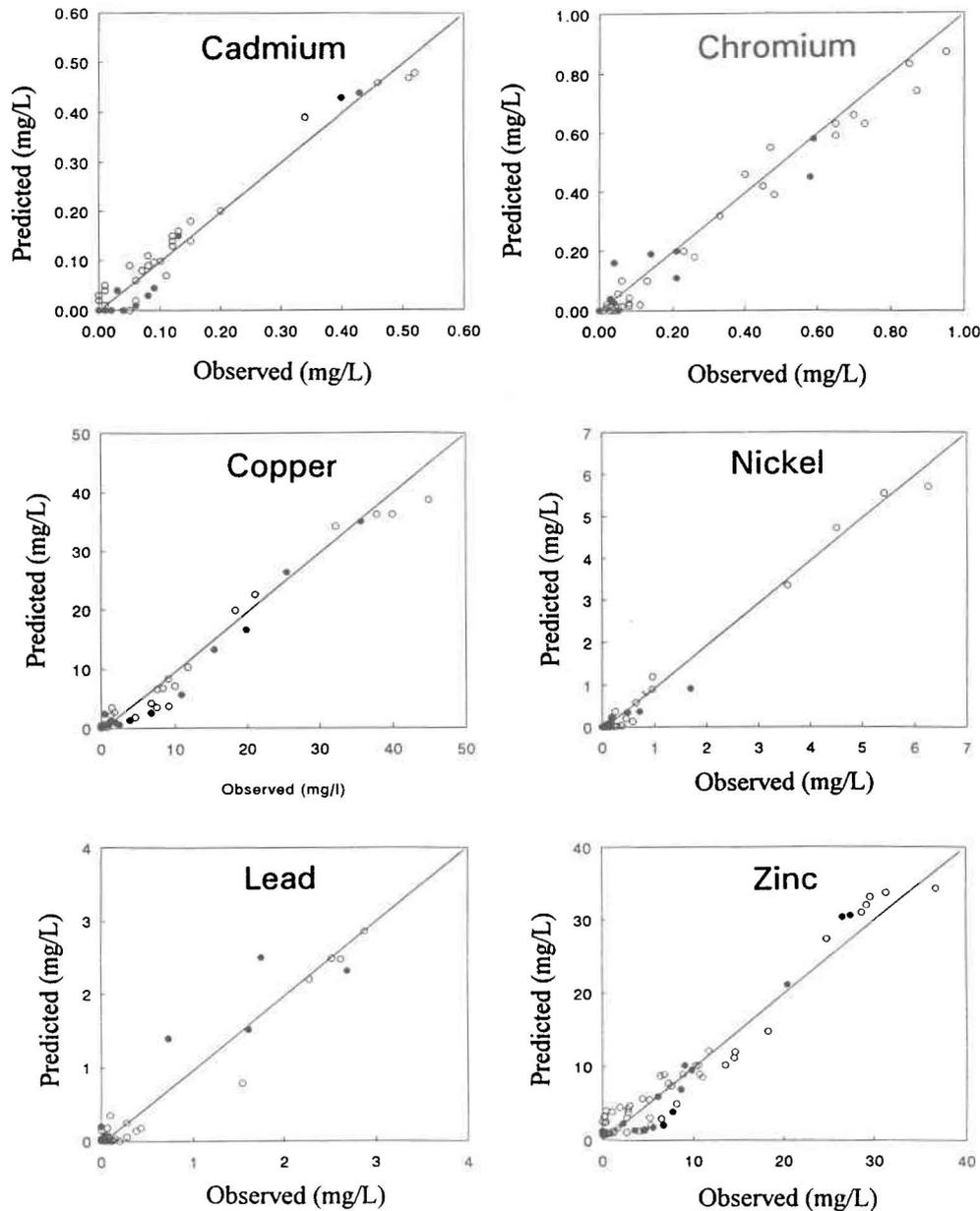


FIG. 4. Metal concentrations solubilized during bioleaching of anaerobically digested sewage sludge. Concentrations predicted by the neural model are plotted against values observed experimentally. (○) point used in the training; (●) predicting point.

indeed the factors that determine the extent of metal solubilization, and (ii) such a trained neural-net can be used to predict the metal solubilization possible from a given sludge under defined leaching conditions.

The second conclusion raises the question of the usefulness of such an exercise, more specifically, its practical application in the field of sewage sludge treatment and disposal. Land application of sewage sludge is governed by government regulations and legislation. The recommended allowable limits for heavy metal concentrations in sewage sludges destined for land application, given by Flynn et al. (1987), are summarized in Table 4. As seen earlier, the amount of metals present in sludges varied considerably from location to location. The final metal concentration in these sludges has to be brought down to levels shown in Table 4 before applying on land. Thus, it is important to know how much of the metal initially present in the sludge has to be removed.

Metal solubilization depends on sludge pH to a great extent (Sreekrishnan et al. 1993). However, sludge pH is

a continuously varying function of time during the course of the batch bioleaching process. The sludge pH at the beginning of the bioleaching process normally lies between 6 and 7. The *Thiobacilli* species present in the sludge grow, producing sulfuric acid as a result of the complex biochemical reactions which take place as part of the growth process. This process goes on as the leaching operation proceeds, with more and more acid production and the consequent decrease in pH. The process comes to its natural end when one or more of the conditions required for bacterial growth changes. It has been found that in the presence of sufficient concentrations of elemental sulfur in the medium, the bacterial growth process terminates because of extremely low sludge pH conditions, usually about pH 1.5 (Sreekrishnan et al. 1993). However, the purpose of the bioleaching operation is not to lower the sludge pH to the minimum possible value, but rather to solubilize the heavy metals present in the sludge so that the sludge meets the criteria for land disposal. This means that the bioleaching operation need not be

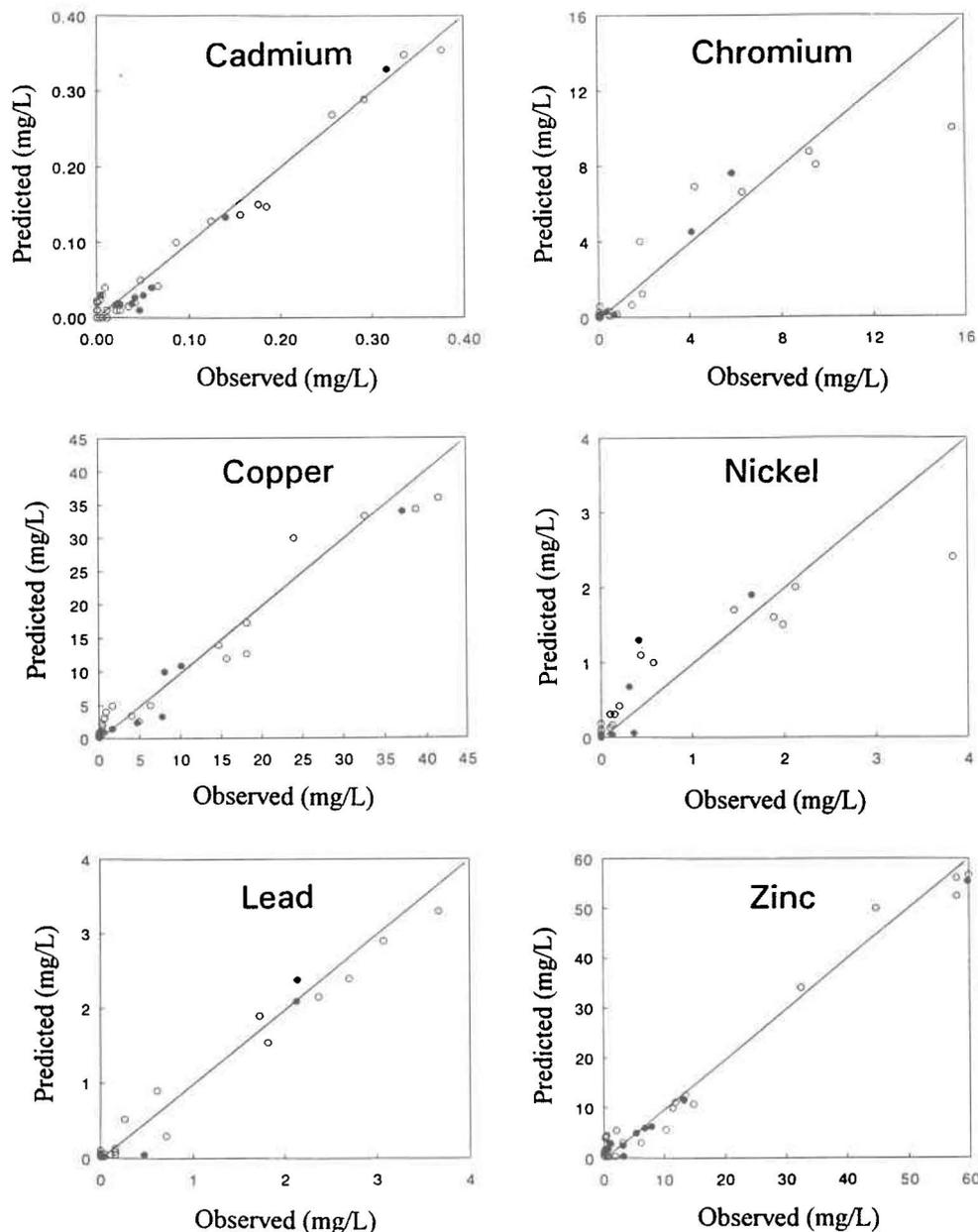


FIG. 5. Metal concentrations solubilized during bioleaching of aerobically digested sewage sludge. Concentrations predicted by the neural model are plotted against values observed experimentally. (○) point used in the training; (●) predicting point.

allowed to proceed until its natural end, but can be stopped at such a stage as is sufficient for solubilizing the metals to the required level. For this purpose, it is important to know at what stage of the process the metal solubilization is sufficient.

Once the type of sludge and the initial metal concentrations in the sludge are known, the present model can be used to calculate the final pH level that must be achieved at the end of the bioleaching process. This would be the reverse procedure of what was carried out while training the model. In this case, the solubilization to be achieved and the type of sludge are known. The pH value at which this level of solubilization can be achieved is to be obtained from the model. In other words, the pH becomes the output.

As an example, Table 5 demonstrates the practical application of this work as applied to an anaerobically digested sludge. For this particular case, the content of these metals (Cd, Cr, Ni, and Zn) initially present in sludge was already below the level in which the sludge was allowed to dispose;

TABLE 4. Recommended maximum levels for heavy metals in sludges\*

Metal	Concentration (mg per kg of dry sludge)
Cadmium	15
Chromium	1000
Copper	1000
Nickel	180
Lead	500
Zinc	2500

\*Source: Flynn et al. (1987).

while that of Cu and Pb were not. It is clear from Table 5 that the sludge pH has to be lowered to a value of 2.0 so as to achieve solubilization of all the metals present to a satisfactory level. This working procedure of the pH determination is workable in general. It is not only applicable

TABLE 5a. Metal concentrations for model application in the case of an anaerobically digested sludge

	Concentration (mg/L)					
	Cd	Cr	Cu	Ni	Pb	Zn
Initial concentration in the sludge	0.1	1.3	30.0	0.2	4.2	9.3
Maximum level allowed for sludge disposal	0.1	7.0	7.0	1.3	3.5	17.5
Minimum quantity to be solubilized	0.0	0.0	23.0	0.0	0.7	0.0

TABLE 5b. Model prediction for the case in Table 5a

Sludge pH	Metal solubilization (mg/L)					
	Cd	Cr	Cu	Ni	Pb	Zn
2.40	0.0	0.1	6.5	0.0	0.4	4.1
2.30	0.0	0.1	9.4	0.0	0.6	4.9
2.25	0.0	0.1	11.3	0.0	0.8	5.5
2.10	0.0	0.2	18.8	0.1	1.7	7.6
2.06	0.0	0.3	21.1	0.1	2.0	8.3
2.02	0.0	0.4	23.5	0.1	2.3	9.2
2.00	0.0	0.4	24.7	0.2	2.4	9.4
1.97	0.0	0.5	26.4	0.2	2.6	10.3

to the case above, but also applicable to other cases of nondigested and aerobically digested sludge.

This is a major advantage in terms of process control. Quantitative estimation of the metal solubilization achieved at a given instant during the course of the bioleaching process is difficult because of the complex and time-consuming analytical procedures involved. Consequently, on-line estimation of metal solubilization is impractical. This leaves the option of monitoring the process in terms of some other parameters. Sludge pH is such a parameter, which can be easily monitored during the course of the bioleaching process. Knowledge of the exact sludge pH required at the end of the leaching process makes the task of process control simple and straightforward.

Another advantage of this approach is that the process time is adjusted to its optimum value. If the sludge is acidified to a much larger extent (lower pH) than is required, comparatively more alkali will be needed to precipitate the metal from the leachate. Also, more alkali will be required for neutralizing the leached sludge. This, combined with the saving in process time, can account for a considerable reduction in the overall process cost.

In spite of such obvious practical applications, a word of caution is appropriate. Though the neural models developed here are able to perform the task of on-line prediction of heavy metal solubilization satisfactorily, it is still possible that these models may fail for cases in which the sludge is of an entirely different nature, e.g., one having a high concentration of unusually stable metal complexes. If this occurs, one would have to retrain the neural model using experimental data relevant to such a sludge.

## Conclusion

Owing to the complexity of the sludge bioleaching process and the diversity found among sewage sludges, it is difficult to develop exact mathematical relationships between process parameters and metal solubilization. A neural-net based model has been developed which can compute the level of solubilization of any of the six metals Cd, Cr, Cu, Ni, Pb, or Zn. The model inputs are the initial concentration of each of the metals in the sludge and the sludge pH observed during the course of the leaching operation. Three separate neural nets were trained, one each for nondigested, anaerobically digested, and aerobically digested sludges. The models were tested using actual experimental data and the results were found to be satisfactory.

The most obvious application of these models is to predict the level of pH lowering required to render the sludge compatible with statutory regulations on metal concentration levels in sludges used for land spreading. This will make control and optimization of the process easier and bring down the overall process cost.

## Acknowledgments

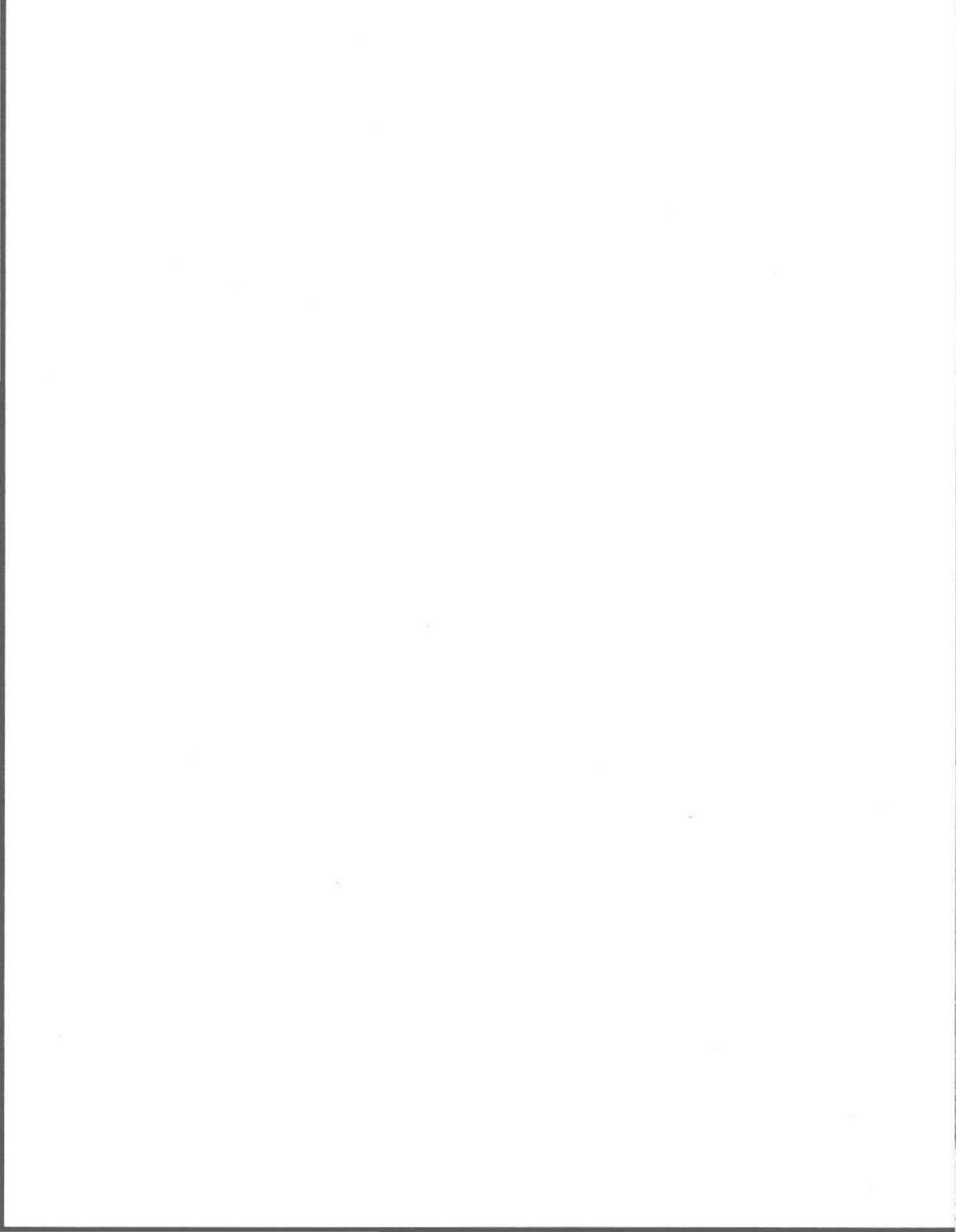
Sincere thanks are due to the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (Grants A4984, STR 0100710), the Ministry of Education of Québec (Grant FCAR 90-AS-9713), and the Université du Québec (FODAR) for providing financial assistance to carry out this work. The authors wish to thank Dr. J.F. Blais and Professor J.-C. Auclair for their assistance and advice.

- APHA, AWWA, and WPCF. 1989. Standards methods for examination of water and wastewaters. 17th ed. American Public Health Association, Washington, D.C.
- Blais, J.F. 1992. Biolixiviation des métaux lourds des boues d'épuration municipales. I. Aspects microbiologiques. Ph.D. thesis, Institut national de la recherche scientifique, Université du Québec, Québec, Que.
- Blais, J.F., Auclair, J.C., and Tyagi, R.D. 1992a. Cooperation between two *Thiobacillus* strains for trace metals removal from municipal sludge. *Canadian Journal of Microbiology*, **38**: 181-187.
- Blais, J.F., Tyagi, R.D., and Auclair, J.C. 1992b. Bioleaching of metals from sewage sludge by sulfur-oxidizing bacteria. *ASCE Journal of the Environmental Engineering Division*, **118**(5): 690-707.
- Couillard, D., and Mercier, G. 1991. Optimum residence time (in CSTR and airlift reactor) for bacterial leaching of metals from sewage sludge. *Water Research* **25**: 211-218.
- Couillard, D., and Zhu, Z. 1992. Bacterial leaching of heavy metals from sewage sludge for agricultural application. *Water, Air and Soil Pollution*, **63**: 67-80.
- Davis, R.D. 1987. Use of sewage sludge on land in the United Kingdom. *Water Science and Technology*, **19**: 1-8.
- Flynn, F., Jalbert, J.M., Robert, J., St-Yves, A., Terreault, A. and Trudel, G. 1987. Valorisation agricole des boues de stations d'épuration des eaux usées municipales. Guide de bonnes pratiques. Ministère de l'Environnement du Québec, Québec, Que.
- McClelland, J.L., and Rumelhart, D.E. 1986. Parallel distributed processing: Explorations in the microstructure of cognition. MIT Press, Cambridge, Mass.
- Mosey, F.E. 1976. Assessment of the maximum concentration of heavy metals in crude sludge which will not inhibit the anaerobic digestion of sludge. *Journal of the Institute of Water Pollution Control*, **75**: 10.
- Rangwala, S.S., and Dornfeld, D.A. 1989. Learning and optimization of machining operations using computing abilities of neural networks. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, **19**: 299-314.
- Sreekrishnan, T.R., Tyagi, R.D., Blais, J.F. and Campbell P.G.C. 1993. Kinetics of heavy metal bioleaching from sewage sludge. I: Effects of process parameters. *Water Research*, **27**: 1641-1651.
- Theis, T.L., and Hayes, T.D. 1978. Chemistry of heavy metals in anaerobic digestion. *In Chemistry of wastewater technology. Edited by A.J. Rubin.* Ann Arbor Science Publishers, Ann Arbor, Mich.
- Tyagi, R.D., and Couillard, D. 1989. Bacterial leaching of metals from sludge. *In Encyclopedia of environmental control technology. Vol. 3. Edited by P.E. Cheremisinoff.* Gulf Publishing Co., New Jersey. pp. 537-591.
- Tyagi, R.D., Sreekrishnan, T.R., Campbell, P.G.C., and Blais, J.F. 1993. Kinetics of heavy metal bioleaching from sewage sludge. II: Mathematical model. *Water Research*, **27**: 1653-1661.
- Wong, L., and Henry, J.G. 1988. Bacterial leaching of heavy metals from anaerobically digested sludge. *In Biotreatment systems. Edited by D.L. Wise.* CRC Press Inc., Boca Raton, Fl. pp. 125-169.

## **Stratégies opérationnelles pour le bio-lessivage des métaux basées sur des mesures de pH.**

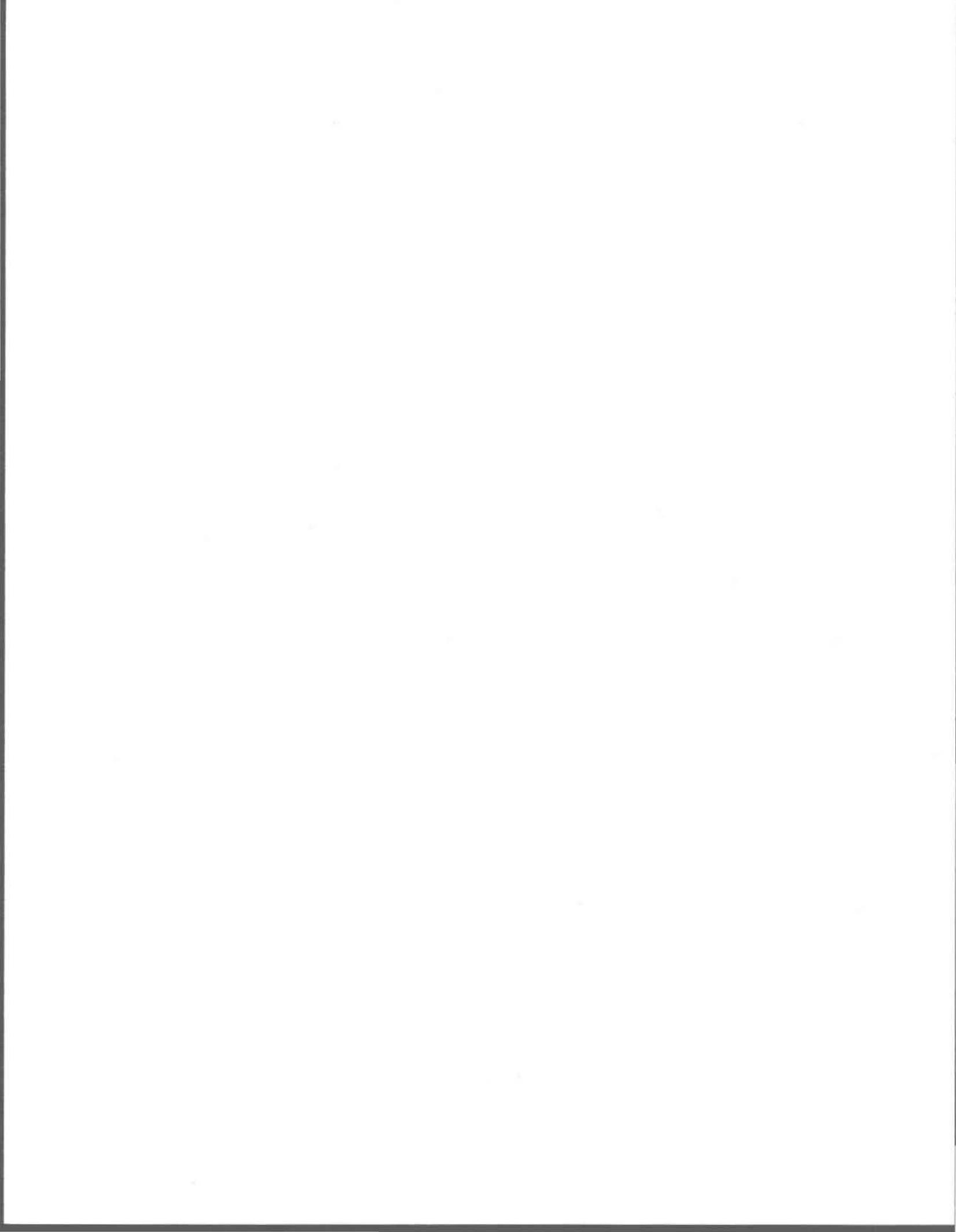
Résumé : Nous avons développé dans cette étude une stratégie opérationnelle avancée pour un procédé de lessivage microbien en lot qui utilise l'oxydation du soufre pour l'enlèvement des métaux lourds afin de déterminer le temps optimal de traitement.

Considérant les difficultés reliées aux mesures en temps réel des métaux dissous au cours du lessivage, notre méthodologie est basée sur des mesures de pH à l'intérieur du système. Pour suivre la solubilisation du métal, nous avons développé un modèle de bio-lessivage correspondant à l'activité des bactéries acidophiles ou non. Nous avons ensuite appliqué un système avancé de prédiction en temps réel. Ce système utilise les techniques de filtrage étendu de Kalman et le modèle de réseau neuronal basé sur de nombreuses données obtenues dans notre laboratoire afin de prédire les concentrations de six métaux lourds en phase aqueuse du système de traitement. Finalement, nous présentons une étude de cas pour illustrer l'application du modèle.



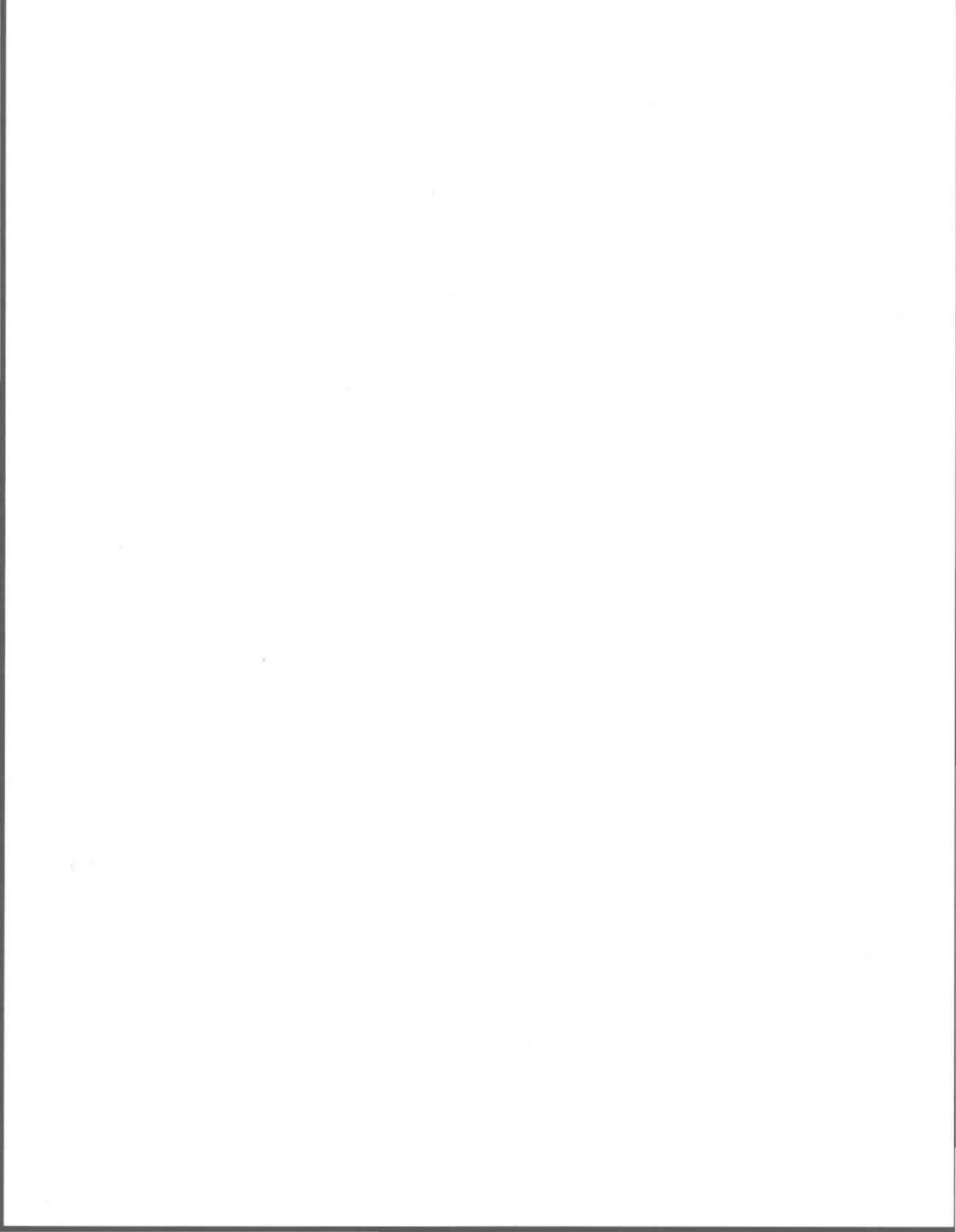
L'INRS ne détient pas les droits pour diffuser cette version de l'article. Vous pouvez le consulter à l'adresse suivante :

Du, Y.G., Tyagi, R.D. et Sreekrishnan, T.R. (1995). Operational strategy for metal bioleaching based on pH measurements . *J. Environ. Eng.* 121(7): 527-535.  
[http://dx.doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9372\(1995\)121:7\(527\)](http://dx.doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9372(1995)121:7(527))



## **Utilisation d'un modèle à réseau neuronal pour l'établissement de préceptes de fonctionnement d'un procédé par boues activées.**

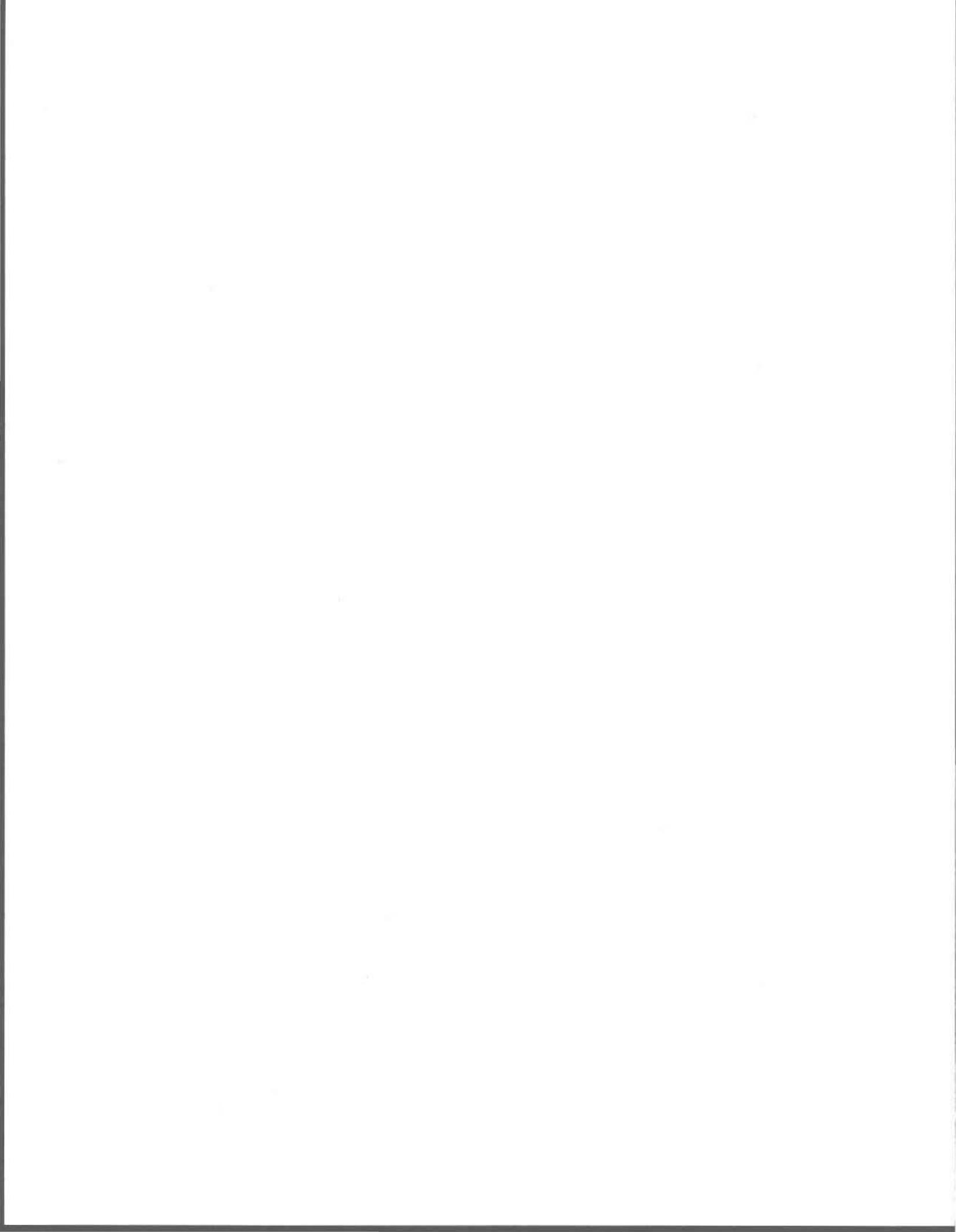
Résumé : Le fonctionnement d'une usine de traitement par boues activées est souvent problématique en raison des perturbations régulières et de la complexité du procédé utilisé. Afin d'améliorer la sécurité et la performance de ce traitement biologique des eaux usées, il est important de développer des systèmes de prises de décisions assistés par ordinateur. Ce système informatique intelligent est en mesure d'assister les opérateurs d'usine à résoudre des problèmes qui se présentent quotidiennement. Les techniques de réseaux neuronaux et la méthode de logique floue sont devenues des outils importants et efficace pour bâtir de tels systèmes intelligents. La technique de réseau neuronal artificiel est puissante car elle peut apprendre à représenter des données dont les tendances sont complexes ou encore représenter la relation entre les variables d'entrée et de sortie du système étudié. Néanmoins, il y a des limites à la réalisation de raisonnement heuristique du problème. En revanche, les systèmes experts, qui utilise des règles logiques, ont du succès dans ce domaine mais sont généralement faible en ce qui concerne l'acquisition de connaissances. Dans cette étude, nous avons développé un modèle neuronal flou pour aborder le problème de fonctionnement des procédés par boues activées, plus précisément pour prédire et comprendre de façon heuristique l'âge des boues. Nous avons utilisé la technique du réseau neuronal ainsi que la logique floue pour développer ce modèle. Les simulations indiquent que ce modèle de réseau neuronal floue est en mesure d'extraire à partir d'une série de données numériques des règles floues pouvant servir au raisonnement heuristique.



# **Use of Fuzzy Neural-net Model for Rule Generation of Activated Sludge Process**

**Y.G. DU and R. D. TYAGI\***

<sup>1</sup> Institute national de la recherche scientifique (INRS-Eau), Université du Québec,  
2700, rue Einstein, C.P. 7500, Sainte-Foy (Québec), Canada G1V 4C7



## **Use of Fuzzy Neural-net Model for Rule Generation of Activated Sludge Process**

### **Abstract**

Activated sludge plant is usually difficult to operate and control because of its complex operational behavior and usual significant process disturbances. To increase safety and improve operating performance of this biological wastewater treatment process, it is important to develop computer operational decision support systems. This intelligent computing system is able to assist ordinary operators to work at the level of a domain expert in daily operation. Neural network techniques and fuzzy logic method have become important and effective tools to help build such intelligent system. Artificial neural network technique is powerful because it can learn to represent complicated data pattern or the data relationship between input and output variables of the system being studied. Nevertheless, it has limitation in performing heuristic reasoning of the domain problem. On the other hand, expert systems are good at performing heuristic reasoning by making use of logic rules. It is, however, generally weak for knowledge acquisition. In this study, a fuzzy neural model is developed for addressing the operating problem of activated sludge processes, relating to prediction and heuristic understanding of the sludge age. Neural network technique and fuzzy logic are used in the model development. Simulation study shows that this fuzzy-neural network model obtained is able to extract fuzzy rules from a set of numerical data that can be used to carry out heuristic reasoning.

## NOMENCLATURE

ANNs: Artificial neural networks

COD: Chemical Oxygen Demand

Ess: Expert systems

f: Transfer function of the neural node

FNNs: Fuzzy Neural Networks

$H_i$ : Output value of the  $i^{\text{th}}$  hidden node

I: Total number of the input node

J: Total number of the hidden node

K: Total number of the output node

q: Feed flow rate of ASP ( $\text{m}^3/\text{day}$ )

$S_k$ : Output value of the  $k^{\text{th}}$  output node

u: Feed substrate concentration of ASP ( $\text{COD}/\text{m}^3$ )

$U_i$ :  $i^{\text{th}}$  element of the scaled input vector

$W_{ij}$ : Weighting coefficient of neural network between the  $i^{\text{th}}$  input node and the  $j^{\text{th}}$  hidden node

$W_{jk}$ : Weighting coefficient of neural network between the  $j^{\text{th}}$  hidden node and the  $k^{\text{th}}$  output node

### *Greek letters*

$\alpha$ : Recycle ratio of ASP

$\theta$ : Sludge age (day)

$\mu$ : Fuzzy membership function

### *Subscripts*

H: High

L: Low

N: Normal

q: Feed flow rate

u: Feed substrate concentration

$\alpha$ : Recycle ratio

$\theta$ : Sludge age

## Introduction

A human operator with a good field operating experience is generally able to manage and operate a biological wastewater treatment plant with satisfaction using apparently few, target-driven operational observations. To increase safety and improve operating performance of wastewater treatment processes, it is important to develop computer operational decision support systems that are able to play a similar role as the expert's in daily operation. Such intelligent computing systems are normally designed to exhibit expert level reasoning within a narrowly defined domain. The heuristic knowledge or rules of thumb used in an intelligent system is generally implicit, non-algorithmic and subjective. It is a general practice that these rules are acquired through domain experience and used for improving heuristic understanding of the system under study. Among the various techniques, artificial neural networks (ANNs) and expert systems (Ess) have become important tools used in the construction of such intelligent systems in wastewater engineering <sup>(1)</sup>. There have been some applications of the knowledge-based expert systems developed to assist in the solution of wastewater treatment operation problems. Tong *et al.* <sup>(2)</sup> developed a fuzzy expert system for activated sludge process control using heuristic control rules. Gaselbracht *et al.* <sup>(3)</sup> addressed the activated sludge bulking problem by using expert system techniques. Progress has also been achieved in the development of knowledge-based expert systems for the diagnosis of activated sludge plant processes <sup>(4)</sup>. This study is focused on how the rules are generated for an expert decision support system that can be used to help prediction and heuristic understanding of the key operating parameter, the sludge age, in activated sludge processes. According

to the authors' knowledge, little work has been reported on addressing this particular operational problem. One of the main reasons is that it is difficult to acquire the operational knowledge that is well described and formulated for an activated sludge plant. Owing to the complex interactions caused by the recycle of the sludge from the secondary settler to the aerator, the operational behavior of activated sludge process is usually very complicated. It is difficult to establish cause-effect relationship between the sludge age and other relevant process variables using an analytical method. As has been known, artificial neural networks (ANNs) is able to learn the complex nonlinear relationships between inputs and outputs of the activated sludge process to capture the knowledge, but it is not able to help improve the heuristic understanding of the operational problems.

The main objective of this study is to develop a fuzzy neural network model for addressing the operational problem of an activated sludge process. Fuzzy logic and neural network technology are used in the model development. With the supervised learning capabilities of neural networks and the heuristic reasoning capability of fuzzy rules, the fuzzy neural-net model is able to learn a complex functional relations and at the same time to generate logic rules for heuristic reasoning.

### **Fuzzy logic and neural networks**

Development of the fuzzy neural network model involves using both fuzzy logic and neural networks. Here, the fuzzy logic is really a matter of the fuzzy set theory

particularly used to deal with process imprecise information with a changed membership function <sup>(5)</sup>. This fuzzy logic technique uses non-conventional membership function that is different than the classical membership function that takes only two values: one, when an element belongs to the set, and zero, when it does not. Because fuzzy sets describe vague concepts based on the premise that the elements used are not numbers but belong to words or the value of a linguistic variable, an element of a fuzzy set naturally belongs to the set with membership values from the interval [0,1]. The fuzzy membership function associated with a given fuzzy set maps an input value to its appropriate membership value. In Figure 1, the process variable is a normalized variable and  $\mu_H$  is denoted as a fuzzy membership function of this process variable in “High”. As shown in the Figure,  $\mu_H$  is very close to 1 when the process variable is greater than 0.85. At this circumstance, one normally says that the process variable is in real High. The term of  $\mu_L$  and  $\mu_N$  are denoted as the fuzzy membership function of the variable in “Low” and “Normal”, respectively. Similarly, a process variable is said to be in real Normal when the fuzzy membership function  $\mu_N$  is very close to 1 and the same is true for the “Low” term. Here, High, Normal and Low are purely qualitative terms described by fuzzy sets over their quantitative domains. It sounds absurd that a process variable such as the flow rate is only declared to be either high or normal or low as in the case where a conventional membership function is used. The fuzzy membership function of a process variable is not always in its extreme of 1 or 0. More often it is between 0 to 1. The curve in Figure 1 defines the transition from Low to High with the fuzzy membership function between 0 and 1 at the transition phase. Note that the shape of the fuzzy set membership function can be either linear (trapezoidal or triangular) or various forms of nonlinear <sup>(6)</sup>

depending on the nature of the system being studied. The fuzzy membership function in Figure 1 is bell curve that is non-linear.

The fuzzy membership function of the input variables ( $q$ ,  $u$  and  $\alpha$ ) and one output variable (the sludge age,  $\theta$ ) defined in this study uses a generalized bell curve similar to that shown in Figure 1. Each variable takes three values (Low, Normal and High). For example, the input space of the flow rate ( $q$ ) covers all possible feed flow rate of the activated sludge process under the present study from the minimum of 21568 ( $\text{m}^3/\text{day}$ ) to the maximum of 36068 ( $\text{m}^3/\text{day}$ ). The flow rate may be declared to be high when its fuzzy membership function  $\mu_H \geq 0.90$ . It is considered to be relatively low when  $\mu_L = 0.85$ . At the operating condition where  $\mu_H = 0.70$  and  $\mu_N = 0.30$ , one normally would not say that the flow rate is in real high but a bit higher.

Figure 2 is the architecture of the fuzzy neural model developed in this study. The neural network model is expressed inside the box. Artificial neural networks are typically composed of interconnected "units", which serve as model neurons. The function of the synapse is modeled by a modifiable weight, which is associated with each connection. Such neural networks may provide insights into the learning abilities of the human brain. There are many neural network model structures. Among them, multi-layer feed forward neural network models are found to be especially useful and effective in process applications because of the capability to capture the non-linear relationships existing between process variables in complex chemical systems for process identification and control <sup>(7)</sup>. Feed forward neural networks have also found applications in wastewater

treatment for prediction improvement <sup>(8)</sup> , sludge bulking forecasting <sup>(9)</sup> and prediction of the effect of heavy metals on the performance of the activated sludge process <sup>(10)</sup> .

A three-layer feed forward neural network was used in this study, that having a single hidden layer of four nodes. The neural network has nine input variables and three output variables, consisting of a set of transfer function equations:

$$H_i = f\left(\sum_{i=1}^I W_{ij} U_i\right), 1 \leq j \leq J - 1 \quad (1)$$

$$S_k = f\left(\sum_{j=1}^J W_{jk} U_j\right), 1 \leq k \leq K \quad (2)$$

where U is the scaled input vector and H is the output vector of the neural nodes contained in the hidden layer. I, J and K are the total number of the neural nodes in the input, hidden and output layer, respectively. Note that the last node of the input and hidden layer is given the bias of 1. The transfer function, f, was set as the sigmoidal function  $1/[1+\exp(-x)]$ . Given the sample input and output variable vectors, after the training procedure, the coefficients of neural network,  $W_{ij}$  and  $W_{jk}$ , are finally obtained.

The neural network approach has proven useful for performing complex data mapping tasks. Due to its black-box nature, however, this approach has a disadvantage that the knowledge embedded in the network is opaque. The approach adopted in this study is to make the fuzzy logic and neural networks working together to produce a fuzzy neural networks. In general, there are three main types of fuzzy neural networks (FNNs) <sup>(11)</sup> : 1) use of fuzzy input signals but real number weights; 2) use of real number input signals

but fuzzy weights; and 3) use of both fuzzy input signals and fuzzy weights. This fuzzy neural network developed in the study belongs to the first type.

### **Data Sample collection**

To make a fuzzy neural-net model to be able to represent one part of the operational behavior of a real activated sludge plant, the model system has to be trained. It is essential that adequate information or data relationships of the system under study be provided for the training procedure. In operational control of activated sludge process, it is very important to predict the operational parameter called sludge age,  $\theta$ , and then to manage to maintain it at a proper level, say from 5 days to 7 days depending on the particular situation. The sludge age,  $\theta$ , represents a steady-state of the operation. For a given activated sludge plant, this parameter is principally related to the feed condition as well as the actual operation. The data relationship between  $\theta$  and other relevant process variables is generally nonlinear and it can be very complex. To obtain a large number of data samples used for the model development, one may use a collection of historical operating records from the real plant. As another option, one may obtain the data samples from rigorous model-based simulation investigation. This study uses the second option for the data collection. For simplicity in the fuzzy neural net-based model development, it is assumed in this study that the feed stream of the activated sludge process under study is described in terms of the feed flow rate and feed substrate concentration. Other parameters are assumed to be unchanged. The recycle ratio,  $\alpha$ , is assumed as the only process manipulated variable. Because of a strong interaction in the system plus the

system constraint, the proper working range of the recycle ratio is not without limitation. Its range significantly varies from one system feeding condition to another for the activated sludge process under study.

The activated sludge process model <sup>(12)</sup> used in this study in simulation investigation for the data collection was previously developed in our laboratory. This model consists of the IAWPRC's kinetic model equations <sup>(13)</sup> and a simplified secondary settler model. The main feature of the dynamic model is that it takes an additional account of the existence of the sludge flocs and their size distribution. The two growth processes, i.e. carbonaceous oxidation and nitrification were thus taken into account in their interacting through their competition for dissolved oxygen inside the floc. Intensive simulation investigation was carried out using this relatively comprehensive model to generate more than three hundred steady-state data patterns of an activated sludge plant under a wide range of various operating conditions. As an example, Figure 3 shows the data pattern corresponding to a constant feed flow rate.

### **Fuzzy neural model development**

The fuzzy neural model for rule extraction of activated sludge process was constructed following the procedure suggested by Wang *et. al.* <sup>(14)</sup> . The model has three input variables and one output variable. The input variables are feed flow rate ( $q$ ), feed concentration ( $u$ ), recycle ration ( $\alpha$ ). The output variable is sludge age ( $\theta$ ). All these variables are divided into three fuzzy regions (Low, Normal and High) though the

qualitative fuzzy regions may be extended to have five values (Low, Medium Low, Normal, Medium High and High) or even more as needed. Because each input and output data pattern is expressed as a fuzzy variable in three region, the neural network developed thus consist of nine input variables (3 X 3) and three output variables (1 X 3). All the input and output variables are mapped onto the fuzzy membership space with the conventional fuzzy logic except the recycle ratio,  $\alpha$ , that is treated differently. The conventional fuzzy membership concept is not used for the recycle ratio,  $\alpha$ , because of the fact that the actual working range of the variable varies significantly as the plant feeding condition changes. According to our simulation result, the working range of  $\alpha$  is between 0.05 and 0.2 at the feeding condition where both the flow rate and the feed substrate are very low, say  $q=12,568 \text{ m}^3/\text{day}$  and  $u= 50 \text{ COD}/\text{m}^3$  for the given case. The corresponding sludge age ( $\theta$ ) is then between 3.0 days and 8.5 days. At another extreme feeding situation where the flow rate and the feed substrate concentration are all very high, say  $q=36,068 \text{ (m}^3/\text{day)}$  and  $u= 200 \text{ (COD}/\text{m}^3)$ , the possible value of  $\alpha$  is between 3.0 and 8.0 with the corresponding sludge age ( $\theta$ ) between 3.0 days and 9.0 days. It is obvious that the qualitative words “Low”, “Normal” and “High” for the recycle ratio is in a relative sense and corresponding to a given feeding state. In the present study case, for example, an operator says that the recycle ratio is “High” at the feeding situation where the feed flow rate and the feed substrate concentration are all very low, its actual value may be  $\alpha=1.0$  that is not really high. At another feeding condition where both the feed flow rate and the feed substrate concentration are all very high, the operator may refer to the recycle ratio, say  $\alpha = 3.0$ , as a very Low level. Here, the fuzzy logic term Low or High is not expressed in an absolute sense. Rather, it is of a relative concept and context

related. We refer to this concept as a relative fuzzy membership function. In this study, to implement this idea, the operating state of the activated sludge process is divided into a number of regions according to its feed flow rate and the feed substrate concentration (16 regions are defined in this case study). The real value of  $\alpha$  is normalized in each region accordingly. The relative fuzzy membership function is then calculated in the region used for the fuzzy rule extraction. Table 1 indicates the fuzzy rules generated using the fuzzy neural model developed. Like most production systems, the fuzzy neural-net based model consists of a collection of rules and facts. The fact is a description of the relationship between the input variables and its output variable while a rule derives operating knowledge from the given facts. Each rule listed in the Table 1 consists of an IF and a THEN part. The IF part specifies a set of conditions and the THEN part specifies the action. As an example, Rule 1 extracting from the case study 1 reads: IF  $q$  is Low and IF  $u$  is Low and IF  $\alpha$  is Low THEN  $\theta$  is LOW. Rule 20 reads: IF  $q$  is Low and IF  $u$  is a bit Low ( $\mu_{L,u}=0.75$ ,  $\mu_{N,u}=0.21$ , and  $\mu_{H,u}=0$ ), and IF  $\alpha$  is a bit High ( $\mu_{L,\alpha}=0$ ,  $\mu_{N,\alpha}=0.13$ , and  $\mu_{H,\alpha}=0.88$ ) THEN  $\theta$  is High. Here, the H, N and L mean that their respective fuzzy membership function ( $\mu_H$ ,  $\mu_N$  and  $\mu_L$ ) is beyond 0.9.

## Summary and Conclusion

This study presented a method of applying fuzzy logic and neural network technique to develop a fuzzy neural-net based model for addressing the operational problem of activated sludge processes, relating to prediction and heuristic understanding of the sludge age. It stressed the concept of the relative fuzzy membership function used in the

model development. The combined use of fuzzy logic and neural network technique makes the intelligent operational decision support system able to learn the complex data relationship of the process as well as to extract the rules from the observation.

#### References:

1. Chapman D, Patry G.G. and Hill R.D. (1989). "Dynamic Modeling and Expert Systems in Wastewater Engineering: Trends, Problems, Needs". In *Dynamic modeling and expert systems in wastewater engineering* edited by Patry G.G. and D. Chapman. LEWIS PUBLISHERS, INC. U.S.A. p.345-370.
2. Tong R.M., Beck M.B. and Latten A. (1980). Fuzzy Control of the Activated Sludge Wastewater Treatment Process. *Automatica*, Vol. 16, No. 6, p 695-701.
3. Geselbracht J.J., E.D.Brill, Jr. and Pfeffer J.T. (1988). Rule-based Model of Design Judgement About Sludge Bulking, *Journal of Environmental Engineering*, Vol. 114, 54-73.
4. Gall R.A.B and Patry G.G. (1989). "Knowledge-Based System for the Diagnosis of an Activated Sludge Plant". In *Dynamic modeling and expert systems in wastewater engineering* edited by Patry G.G. and D. Chapman. LEWIS PUBLISHERS, INC. U.S.A. p. 193-240.
5. Zadeh L.A. (1965). "Fuzzy sets", *Information and Control*, Vol. 8, pp338-353,
6. Salski A. (1992). Fuzzy knowledge-based models in ecological research. *Ecological Modelling*, **63**, 103-112.

7. Thibault, J. (1991). Feedforward neural networks for the identification of dynamic processes. *Chem. Eng. Comm.*, **105**, 109-128.
8. Cote M., Grandjean B. P.A., Lessard P. and Thibault J. (1995). Dynamic modelling of the activated sludge process: Improving prediction using neural networks. *Wat. Res.* **29**, 995-1004
9. Capodaglio A.G., Jones H.V., Novotny V. and Feng X. (1991), Sludge bulking analysis and forecasting: application of system identification and artificial neural computing technologies. *Wat. Res.* **25**, 1217-1224.
10. Tyagi R.D. and Du Y.G. (1992) Kinetic model for the effects of heavy metals on activated sludge process using neural networks. *Envir. Technol.* **13**, 883-890.
11. Buckley, J.J. and Hayash, Y. (1994), *Fuzzy Sets and Systems*, **66**, 1-13.
12. Tyagi R.D., Du Y.G. and Bhamidimarri R. (1996). Dynamic behavior of the activated sludge process under short loading: Application of the floc model. *Wat. Res.* **30**, 1605-1616
13. Henze M., Grady C.P.L., Gujer W., Marais G.v.R. and Matsuo T. (1987) Activated sludge model No 1. Scient. Tech. Rep. No. 1 IAWPRC, London.
14. Wang X.Z., Chen B.H., Yang S.H., McGreavy C. and Lu M.L. (1997). Fuzzy Rule Generation from Data for Process Operational Decision Support. Proceedings on 6<sup>th</sup> International Symposium on Process Systems Engineering. 25-29 May 1997, Trondheim, Norway.

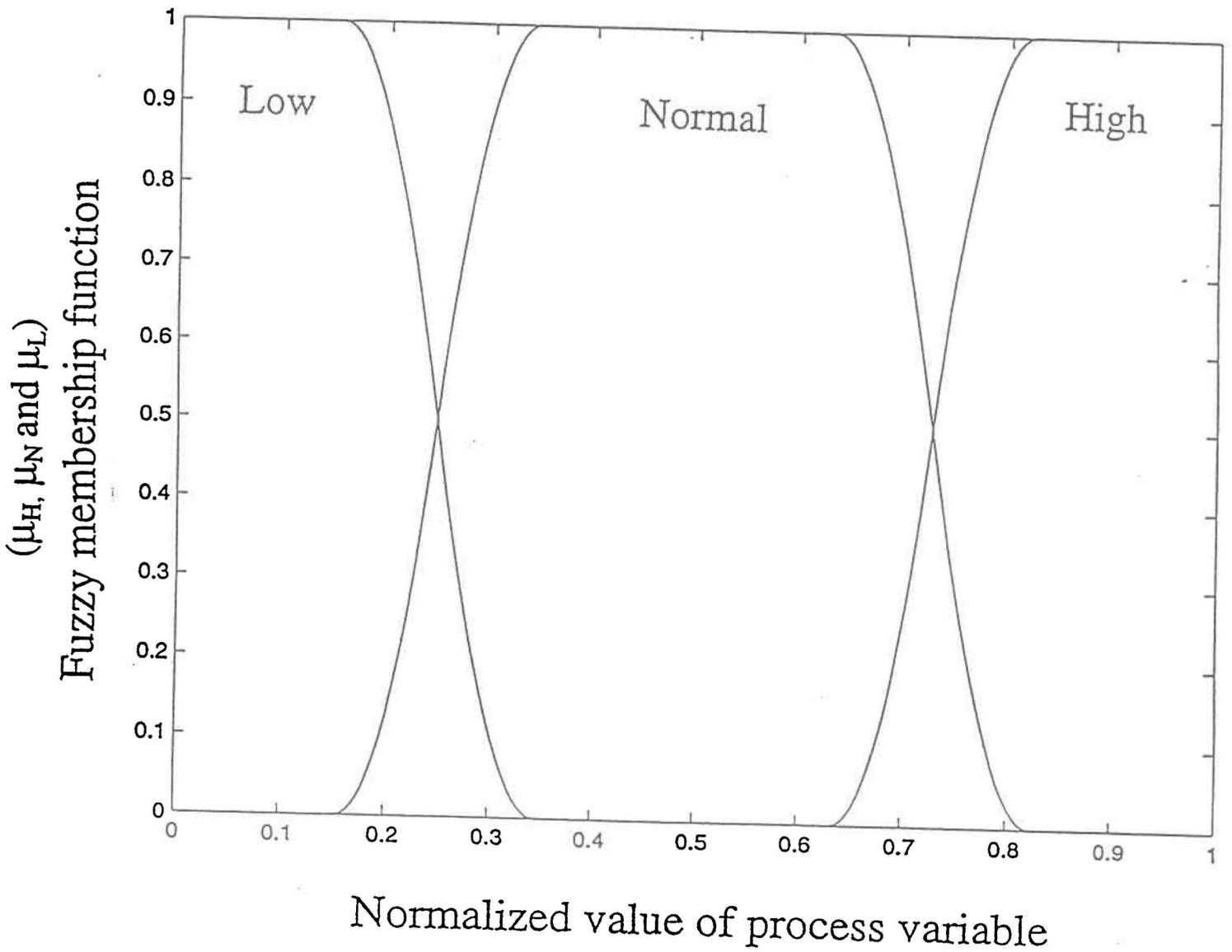
## Caption

Figure 1. Fuzzy membership function in “High”, “Normal” and “Low”

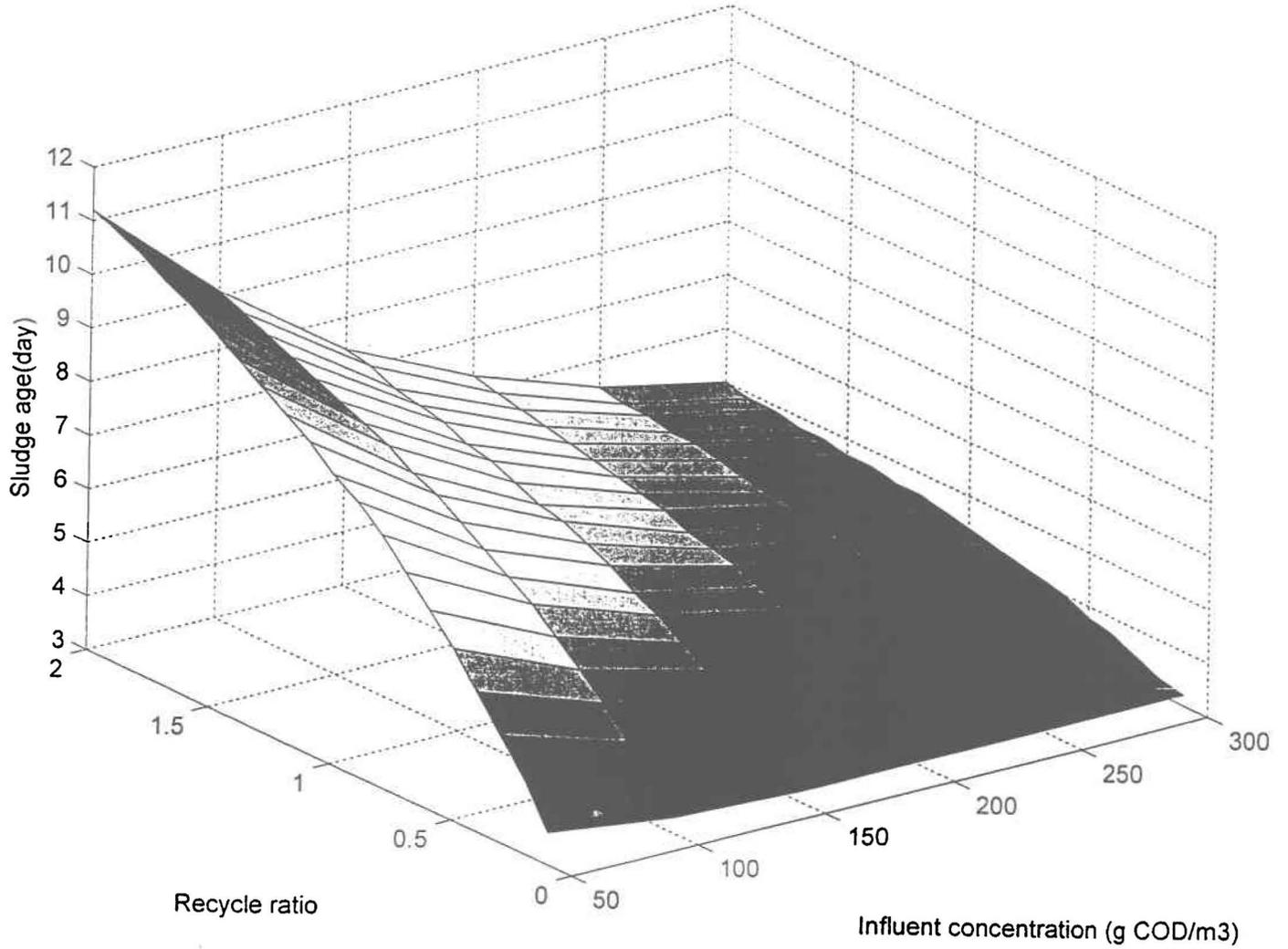
Figure 2. Mesh plot of the sludge age,  $\theta$

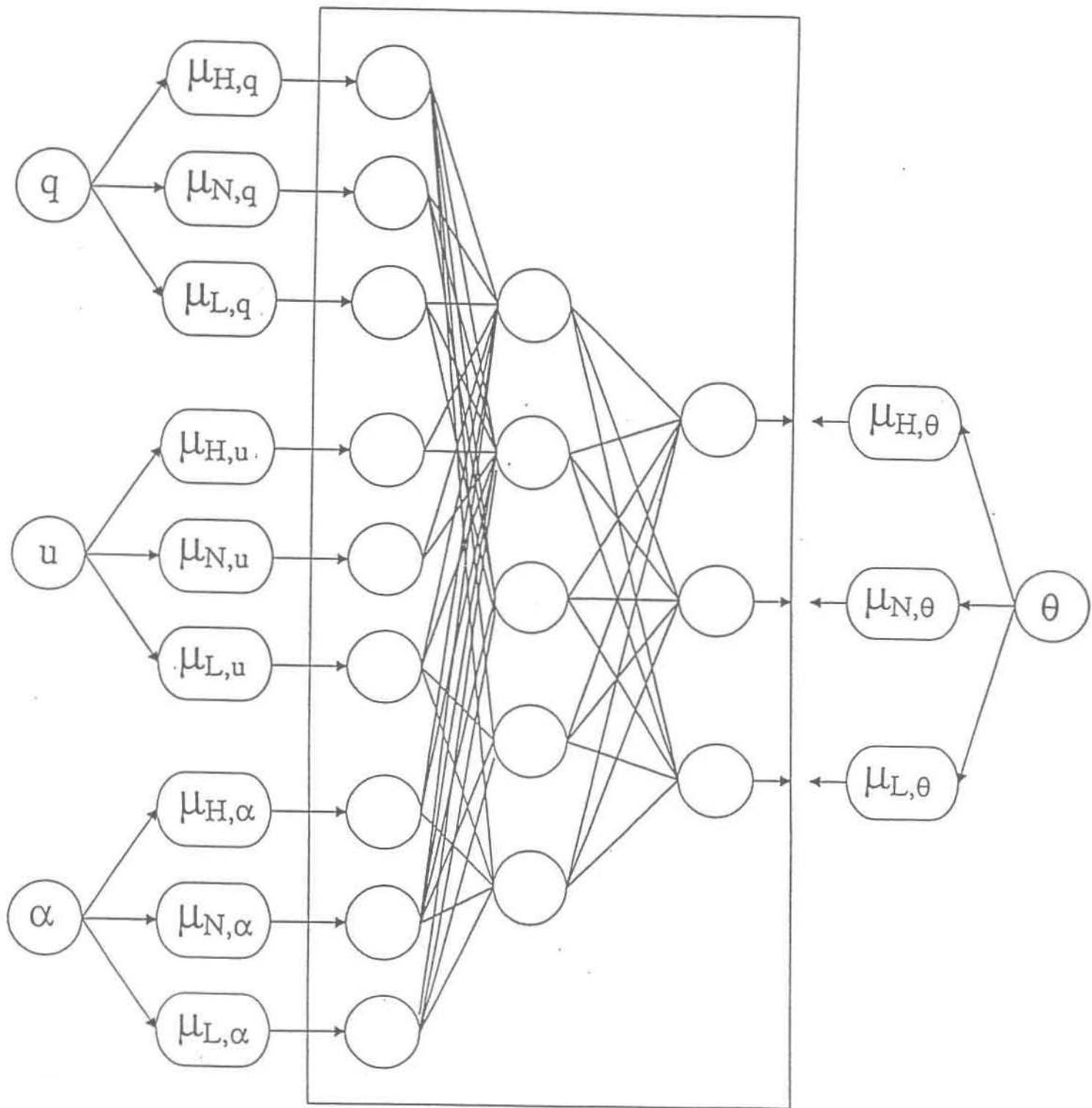
Figure 3. Fuzzy neural net-based model architecture

Table 1. The rules generated by means of the fuzzy neural model

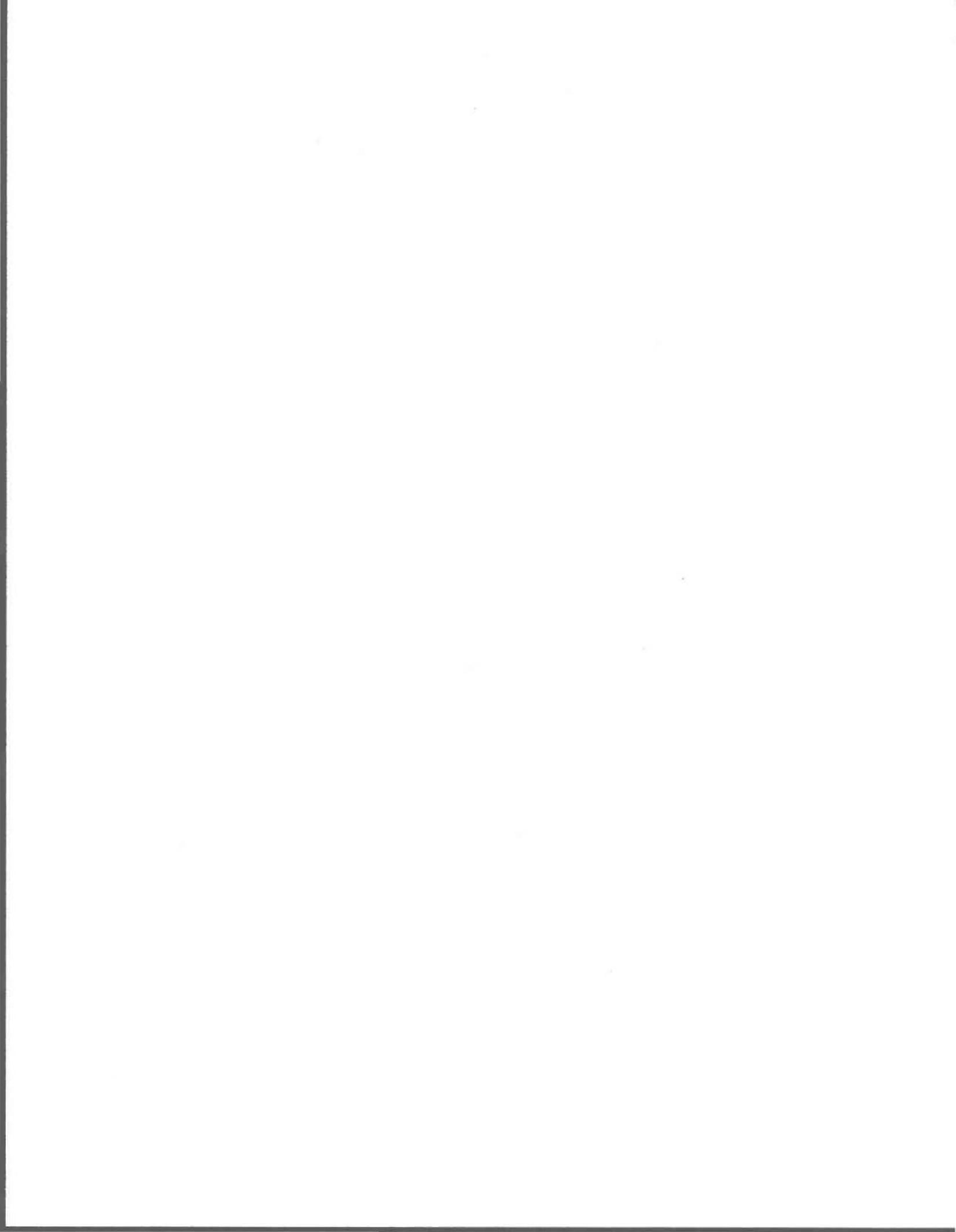


MESH of the sludge age at  $q_0=20,000(\text{m}^3/\text{day})$

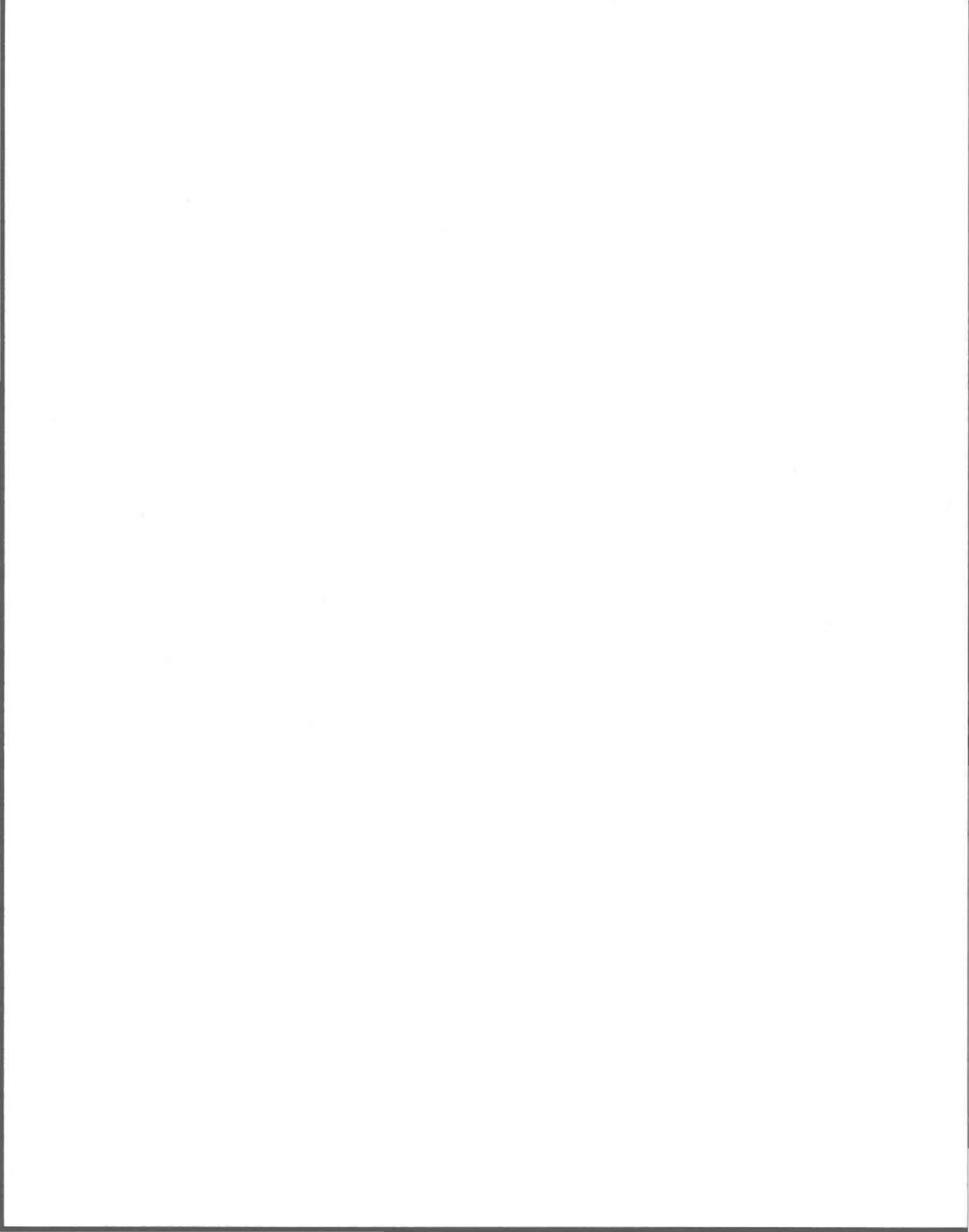




Case	IF q	and	IF u	and	IF $\alpha$	THEN $\theta$
1	L		L		L	L (.81 .17 0)
5	L		L		L (.6 .32 0)	N
9	L		L (.75 .21 0)		L	L (.89 .12 0)
14	L		L (.75 .21 0)		N (.32 .6 0)	N
20	L		L (.75 .21 0)		H (0 .13 .88)	H
21	L		N		L (.88 .13 0)	L (.68 .26 0)
22	L		N		N (.41 .5 0)	N (.14 .85 0)
26	L		N		H	H (0 .14 .85)
27	L		N (0 .61 .32)		L	L (.84 .15 0)
29	L		N (0 .61 .32)		L (.72 .23 0)	N
37	L		N (0 .61 .32)		N (0 .48 .43)	H
40	L		H		L	L
56	L		H		N (.14 .87 0)	H (0 .3 .63)
59	N (.23 .73 0)		L		L	L
63	N (.23 .73 0)		L		L (.66 .27 0)	N (.15 .85 0)
65	N (.23 .73 0)		L		L (.51 .4 0)	N
77	N (.23 .73 0)		L		H	H (0 .18 .8)
78	N (.23 .73 0)		L (.67 .27 0)		L	L (.87 .13 0)
83	N (.23 .73 0)		L (.67 .27 0)		N (.38 .53 0)	N
95	N (.23 .73 0)		N		H	H (0 .41 .5)
97	N (.23 .73 0)		N		L	L
107	N (.23 .73 0)		N		L (.62 .31 0)	N
118	N (.23 .73 0)		N (0 .61 .32)		L	L (.91 .11 0)
132	N (.23 .73 0)		N (0 .61 .32)		N (0 .5 .4)	N (.12 .9 0)
135	N (.23 .73 0)		H		L	L (.87 .14 0)
145	N (.23 .73 0)		H		H (0 .18 .8)	N (.36 .55 0)
148	N (0 .66 .27)		L (.75 .27 0)		L (.85 .14 0)	L (.6 .32 0)
155	N (0 .66 .27)		L (.75 .21 0)		N (0 .72 .23)	N
157	N (0 .66 .27)		L (.75 .21 0)		H	H (0 .19 .78)
171	N (0 .66 .27)		N (0 .61 .32)		H	L
190	H		L		L	L
208	H		L		N	N (.17 .81 0)
220	H		L		H	H (0 .22 .74)
222	H		L (.75 .21 0)		L	L
236	H		L (.75 .21 0)		N (0 .49 .42)	N
243	H		L (.75 .21 0)		H	N (0 .67 .27)
259	H		N		H	H (0 .13 .88)



## ANNEXE C



CONTINUOUS SYSTEM rea01

" Description: Process kinetics and stoichiometry for the IAWPRC  
" Task Group Model with the consideration of ETA1 and ETA3.  
" ( continuous-flow Model )  
" Author: Y.G. Du  
" Created: 8/3/94, modified on March 30 1995 for kinetic paramters  
" and the neural model

input uss q0 q3 q4 frac valkal  
output mlss ql yso etal eta3 b1 b6 ssa soa sna xa sseff codt

STATE ss xs xbh xba xp sno snh snd xnd si xi so  
DER dss dxs dxbh dxba dxp dsno dsnh dsnd dxnd dsi dxi dso  
TIME t

" Equations: for etal

x1=(ss-ssmin)/(ssmax-ssmin)  
x2=(so-somin)/(somax-somin)  
x3=(snh-snhmin)/(snhmax-snhmin)  
x4=(xbh-xbhmin)/(xbhmax-xbhmin)  
x5=(xba-xbamin)/(xbamax-xbamin)

qq1=x1\*w11+x2\*w21+x3\*w31+x4\*w41+x5\*w51+1.0\*w61  
qq2=x1\*w12+x2\*w22+x3\*w32+x4\*w42+x5\*w52+1.0\*w62  
qq3=x1\*w13+x2\*w23+x3\*w33+x4\*w43+x5\*w53+1.0\*w63  
qq4=x1\*w14+x2\*w24+x3\*w34+x4\*w44+x5\*w54+1.0\*w64  
qq5=x1\*w15+x2\*w25+x3\*w35+x4\*w45+x5\*w55+1.0\*w65  
qq6=x1\*w16+x2\*w26+x3\*w36+x4\*w46+x5\*w56+1.0\*w66

pp1=1/(1+exp(-qq1))  
pp2=1/(1+exp(-qq2))  
pp3=1/(1+exp(-qq3))  
pp4=1/(1+exp(-qq4))  
pp5=1/(1+exp(-qq5))  
pp6=1/(1+exp(-qq6))

rr11=pp1\*ww1+pp2\*ww2+pp3\*ww3+pp4\*ww4+pp5\*ww5+pp6\*ww6  
rr1=rr11+1.0\*ww7

y1=1/(1+exp(-rr1))  
eta01=etalmin+y1\*(etalmax-etalmin)  
etal=if ref<1.0 then eta01 else 1.0

"Equation : for eta3

z1=(ss-ssminz)/(ssmaxz-ssminz)  
z2=(so-sominz)/(somaxz-sominz)  
z3=(snh-snhminz)/(snhmaxz-snhminz)  
z4=(xbh-xbhminz)/(xbhmaxz-xbhminz)  
z5=(xba-xbaminz)/(xbamaxz-xbaminz)

qz1=z1\*v11+z2\*v21+z3\*v31+z4\*v41+z5\*v51+1.0\*v61  
qz2=z1\*v12+z2\*v22+z3\*v32+z4\*v42+z5\*v52+1.0\*v62  
qz3=z1\*v13+z2\*v23+z3\*v33+z4\*v43+z5\*v53+1.0\*v63  
qz4=z1\*v14+z2\*v24+z3\*v34+z4\*v44+z5\*v54+1.0\*v64

```

qz5=z1*v15+z2*v25+z3*v35+z4*v45+z5*v55+1.0*v65
qz6=z1*v16+z2*v26+z3*v36+z4*v46+z5*v56+1.0*v66
qz7=z1*v17+z2*v27+z3*v37+z4*v47+z5*v57+1.0*v67
qz8=z1*v18+z2*v28+z3*v38+z4*v48+z5*v58+1.0*v68
qz9=z1*v19+z2*v29+z3*v39+z4*v49+z5*v59+1.0*v69
qz10=z1*v110+z2*v210+z3*v310+z4*v410+z5*v510+1.0*v610

```

```

pz1=1/(1+exp(-qz1))
pz2=1/(1+exp(-qz2))
pz3=1/(1+exp(-qz3))
pz4=1/(1+exp(-qz4))
pz5=1/(1+exp(-qz5))
pz6=1/(1+exp(-qz6))
pz7=1/(1+exp(-qz7))
pz8=1/(1+exp(-qz8))
pz9=1/(1+exp(-qz9))
pz10=1/(1+exp(-qz10))

```

```

rz11=pz1*aa1+pz2*aa2+pz3*aa3+pz4*aa4+pz5*aa5+pz6*aa6+pz7*aa7
rz12=pz8*aa8+pz9*aa9+pz10*aa10
rz1=rz11+rz12+1.0*aa11

```

```

y2=1/(1+exp(-rz1))

```

```

"eta3=eta3min+y2*(eta3max-eta3min)
eta03=eta3min+y2*(eta3max-eta3min)
eta3=if ref<1.0 then eta03 else 1.0

```

```

a1=ss/(ks+ss)
a2=so/(koh+so)
a3=sno/(kno+sno)
a4=(xs/xbh)/(kx+xs/xbh)
a5=snh/(knh+snh)
a6=koh/(koh+so)
a7=so/(koa+so)

```

```

"The unit for all the following rates is (g COD M-3 day-1)

```

```

"RATE(1): aerobic growth of XBH
"RATE(2): anoxic growth of XBH
"RATE(3): aerobic growth of XBA
"RATE(4): decay of XBH
"RATE(5): decay of XBA
"RATE(6): ammonification of SND
"RATE(7): hydrolysis of Xs
"RATE(8): hydrolysis of XND

```

```

rate1=muh*a1*a2*xbh*eta1
rate2=muh*a1*a6*a3*etg*xbh

```

```

"-----
"rate2=rate1*koh/so*a3*etg
"-----

```

```

rate3=mua*a5*a7*xba*eta3
rate4=bh*xbh
rate5=ba*xba
rate6=ka*snd*xbh
rate7=kh*a4*(a2+eth*a6*a3)*xbh
rate8=rate7*xnd/xs

```

```

"observed conversion rate (g COD M-3 day-1)
"B(1)=(dSs/dt)c
"B(2)=(dXs/dt)c
"B(3)=(dXBH/dt)g
"B(4)=(dXBA/dt)g
"B(5)=(dXP/dt)c
"B(6)=(dSO/dt)c
"B(7)=(dSNO/dt)c
"B(8)=(dSNH/dt)c
"B(9)=(dSND/dt)c
"B(10)=(dXND/dt)c
b1=-1/yh*rate1-1/yh*rate2+rate7
b2=(1-fp)*rate4+(1-fp)*rate5-rate7
b3=rate1+rate2-rate4
b4=rate3-rate5
b5=fp*(rate4+rate5)
b6=- (1-yh)/yh*rate1-(4.57-ya)/ya*rate3
b7=- (1-yh)/(2.86*yh)*rate2+1/ya*rate3
b8=-ixb*rate1-ixb*rate2-(ixb+1/ya)*rate3+rate6
b9=-rate6+rate8
b10=(ixb-fp*ixp)*(rate4+rate5)-rate8

```

```

"continuous-flow model

```

```

dss=q0/v*uss+q4/v*ss-(q0+q4)/v*ss+b1
dxs=q0/v*uxs+q4/v*xs*frac-(q0+q4)/v*xs+b2
dxbh=q0/v*uxbh+q4/v*xbh*frac-(q0+q4)/v*xbh+b3
dxba=q0/v*uxba+q4/v*xba*frac-(q0+q4)/v*xba+b4
d xp=q0/v*uxp+q4/v*xp*frac-(q0+q4)/v*xp+b5
dso=q0/v*uso-q0/v*so+kla*(sosat-so)+b6
"dso=q0/v*uso-q0/v*so+90*(sosat-so)+b6
klacal=(-b6+q0/v*so-q0/v*uso)/(8.673-so)
dsno=q0/v*usno+q4/v*sno-(q0+q4)/v*sno+b7
dsnh=q0/v*usnh+q4/v*snh-(q0+q4)/v*snh+b8
dsnd=q0/v*usnd+q4/v*snd-(q0+q4)/v*snd+b9
dxnd=q0/v*xnd+q4/v*xnd*frac-(q0+q4)/v*xnd+b10
dsi=q0/v*usi+q4/v*si-(q0+q4)/v*si
dxi=q0/v*uxi+q4/v*xi*frac-(q0+q4)/v*xi

```

```

yso=so
soa=so
sna=snh
ssa=ss
xa=(xs+xbh+xba+xp+xnd+xi)*0.55 "0.52

```

```

kla=kalmax*(1+valkal)/2
mlss=xs+xbh+xba+xp+xnd+xi

```

```

"q4=alfa*q0
q1=q0+q4
sseff=3+(0.009/24)*q1

```

```

ssf=ss
CODT=SS+SI+sseff
" Parameter values:
"kla:(50-150 day-1)
"uss:64.0

```

uxs:160.0  
uxbh:96.0 " from Lessard, 96.0  
uxba:0.001  
uxp:0  
uso:0.837  
usno:1.0  
usnh:30.0 "12.5  
usnd:1.0  
uxnd:18.2  
usi:40.0  
uxi:40.0  
sosat:8.637  
kalmax:100.0  
"frac:2.09  
alfa:0.87

"stoichiometric parameters----

"YA=0.24 (g cell COD formed / g N oxidized)  
"YH=0.57 (g cell COD formed / g COD of Ss oxidized)  
"fp=0.1 (-)  
"IXB=0.07 (g N / g COD)  
"IXP=0.06 (g N / g COD)  
ya:0.06 "0.24  
yh:0.55 "0.67  
fp:0.08  
ixb:0.086  
ixp:0.06  
ixe:0.06

"kinetic parameters----

"MUH=4.0 (day-1)  
"Ks=20.0 (g COD M-3)  
"KOH=0.25 (g COD M-3)  
"KNO=0.5 (g NO2--N M-3)  
"BH=0.5 (day-1)  
"ETG=0.8 (-)  
"ETH=0.35 (-)  
"KH=1.5 (g slowly biodegradable COD) / (g cell COD day)  
"KX=0.02 (g slowly biodegradable COD) / (g cell COD day)  
"MUA=0.879 (day-1)  
"KNH=0.741 (g NH3--N M-3)  
"KOA=0.5 (g O2 M-3)  
"KA=0.08 (M3 COD) / (g day) or M3/(g N)/day ?  
"BA=0.132 (day-1)  
muh:5.76 "4.0  
ks:130.0 "20.0  
koh:0.20  
kno:0.5  
bh:0.12 "0.5  
etg:0.8  
eth:0.4  
kh:3.0 "1.5  
kx:0.03 "0.02  
mua:0.576 "0.8  
knh:0.60 " 1.0  
koa:0.0 "0.4  
ka:0.08

ba:0.144 "0.13

"equipment parameters----

"DOsat=8.637 (g O2 M-3)

"V=8320.0 (M3) (U.K.)

"AC=1000.0 (M2) (cross section area of the settler)

dosat:8.637

v:8320

ac:2000

"q0:20568

"q4:17894

"Parameters for sludge floc effects-etal

w11:3.781

w12:-3.936

w13:4.359

w14:3.696

w15:-2.711

w16:4.746

w21:3.230

w22:2.913

w23:3.032

w24:-4.170

w25:-0.402

w26:0.05

w31:1.964

w32:0.245

w33:-0.01

w34:0.218

w35:-0.04

w36:-2.958

w41:2.459

w42:-0.537

w43:0.245

w44:-0.389

w45:-3.306

w46:-1.217

w51:2.838

w52:-0.037

w53:-0.279

w54:0.282

w55:0.846

w56:-2.151

w61:1.931

w62:-1.945

w63:-3.852

w64:-0.886

w65:1.11

w66:-0.094

ww1:1.722

ww2:-3.691  
ww3:4.059  
ww4:-6.281  
ww5:0.832  
ww6:0.08  
ww7:-1.013

ssmin:0  
ssmax:120.0  
somin:0.0  
somax:4.0  
snhmin:0.0  
snhmax:20.0  
xbhmin:800.0  
xbhmax:2000.0  
xbamin:30.0  
xbamax:120.0

etalmin:0.2  
etalmax:0.5

" Equation for eta3

v11:-6.184  
v12:4.72  
v13:-4.049  
v14:0.716  
v15:7.999  
v16:0.426  
v17:5.209  
v18:3.907  
v19:7.999  
v110:6.442

v21:-1.263  
v22:-0.666  
v23:4.428  
v24:0.125  
v25:3.467  
v26:-5.093  
v27:3.631  
v28:2.378  
v29:0.131  
v210:1.445

v31:4.867  
v32:3.737  
v33:0.305  
v34:-2.734  
v35:6.476  
v36:0.005  
v37:1.943  
v38:5.944  
v39:3.292  
v310:5.486

v41:1.155  
v42:-2.847

v43:3.93  
v44:0.576  
v45:4.404  
v46:-0.182  
v47:2.811  
v48:0.643  
v49:0.161  
v410:3.349

v51:1.448  
v52:-4.027  
v53:-5.402  
v54:-1.18  
v55:3.276  
v56:0.767  
v57:-0.572  
v58:2.717  
v59:-0.279  
v510:1.808

v61:-5.045  
v62:-1.109  
v63:-2.846  
v64:-3.075  
v65:1.516  
v66:0.857  
v67:4.818  
v68:1.634  
v69:0.334  
v610:2.323

aa1:1.276  
aa2:0.335  
aa3:0.789  
aa4:2.299  
aa5:0.937  
aa6:-2.966  
aa7:1.561  
aa8:0.878  
aa9:-5.632  
aa10:1.976  
aa11:-0.273

ssminz:0  
ssmaxz:50  
sominz:0  
somaxz:4.0  
snhminz:0  
snhmaxz:4.0  
xbhminz:800.0  
xbhmaxz:2000.0  
xbaminz:32.0  
xbamaxz:120.0

eta3min:0.3  
eta3max:1.0

```
ref:0.0 "original eta if ref=0  
end
```

```
MACRO mac
" regulating qRatio for MLSS and qw for the Level
" March. 8 in simwin\dr\Dynamics
```

```
syst rea01 cla pid pidLV PIDDO data conn
store xbh xba ss snh sno xnd so xs mlss[rea01]
store xr xlimit[cla] etal eta3 uss0 -ADD
store m[cla] mr[cla] q3r q4[cla]-ADD
store sseff[rea01] uss[rea01] q0[rea01] -ADD
"tore codt1[data]
error 0.0001
```

```
init ss:2.5
init xs:34.0
init xbh:1600.0
init xba:100.0
init xp:1000.0
init so:2.0
init sno:13.0
init snh:0.25
init snd:0.7
init xnd:2.8
init si:29.9 "39.9
init xi:811.32
init ml:10000
```

```
"par step:0 " if step=0 then q00 constant
"par alfa:0.87
"par ac:2000
par q00:20568
par uss0:115
simu 0 10
NEWPLOT
split 3 1
ashow etal
text 'etal'
ashow eta3
text 'eta3'
```

```
"ashow codt1[data]/codt
"ashow xr
"TEXT 'xr'
"split 2 2
"ashow mlss[rea01]
"TEXT 'MLSS'
"ashow ratio[cla] "ratio
"TEXT 'R' "Recycle ratio"
"ashow q0[rea01]
"TEXT 'q0'
"ashow uss[rea01]
"text 'uss'
"ashow so
"text 'so'
"ashow q3r
"TEXT 'qw'
ashow snh
text 'snh'
```

```
"ashow mr[cla]
"TEXT 'Mr'
```

```
"at rea01.t, let ref=6.0 then eta=1
"if ref<1 then eta1 & eta3 ELSE 1.0
```

```
END
```

CONNECTING SYSTEM conn  
" for regulating q3 and keeping q4 constant  
TIME t

CODT[DATA]=CODT[rea01]

" Connections:

uc[pid]=mref

mref:3000 "MLSS set-point = 2600

uc[pidLV]=10000

uc[PIDDO]=soref

soref:2.0

"uss[rea01]=uss0

tts=max(mod(t,pers)-0.3, 0)

plus=uss0+steps

mins=uss0

a1=uss0+steps\*tts/0.05

a2=plus-steps\*(tts-0.5)/0.05

aal=if tts<0.05 then a1 else plus

aa2=if tts<0.55 then a2 else mins

uss1=if tts<pers/2 then aal else aa2

uss[rea01]=uss1

ttq=max(mod(t,per)-0.3, 0)

pluq=q00+step

minq=q00

b1=q00+step\*ttq/0.05

b2=pluq-step\*(ttq-0.5)/0.05

bb1=if ttq<0.05 then b1 else pluq

bb2=if ttq<0.55 then b2 else minq

uq1=if ttq<per/2 then bb1 else bb2

q0[rea01]=uq1

"q0[rea01]=q00

"q0[rea01]=IF (t>0 AND t<1.5001\*0.25) THEN (7596\*t/0.25+13200) ELSE z1  
z1=IF (t>1.5\*0.25 AND t<2.0001\*0.25) THEN -14400\*(t-1.5\*0.25)/0.25+24600 ELSE z2  
z2=IF (t>2.0\*0.25 AND t<3.0001\*0.25) THEN 21000 ELSE z3  
z3=IF (t>3.0\*0.25 AND t<3.5001\*0.25) THEN 6000\*(t-3.0\*.25)/.25+21000 ELSE z4  
z4=IF (t>3.5\*0.25 AND t<4.5001\*0.25) THEN -12000\*(t-3.5\*.25)/.25+24000 ELSE z5  
z5=IF (t>4.5\*0.25 AND t<5.5001\*0.25) THEN 12000\*(t-4.5\*.25)/.25+16800 ELSE z6  
z6=IF (t>5.5\*0.25 AND t<6.0001\*0.25) THEN -6000\*(t-5.5\*.25)/.25+24000 ELSE z7  
z7=IF (t>6.0\*0.25 AND t<7.0001\*0.25) THEN 21000 ELSE z8  
z8=IF (t>7.0\*0.25 AND t<8.0001\*0.25) THEN -9000\*(t-7.0\*.25)/.25+21000 ELSE z9  
z9=IF (t>8.0\*0.25 AND t<9.5001\*0.25) THEN 7600\*(t-8.0\*.25)/.25+16800 ELSE z10  
z10=IF(t>9.5\*.25 AND t<10.5001\*0.25) THEN -6000\*(t-9.5\*.25)/.25+23400 ELSE z11  
z11=IF(t>10.5\*.25 AND t<11.5001\*.25) THEN 1800\*(t-10.5\*.25)/.25+17400 ELSE z12  
z12=IF(t>11.5\*.25 AND t<12.5001\*.25) THEN -6000\*(t-11.5\*.25)/.25+19200 ELSE z13  
z13=IF(t>12.5\*.25 AND t<13.5001\*.25) THEN 12000\*(t-12.5\*.25)/.25+13200 ELSE z14  
z14=IF(t>13.5\*.25 AND t<16.0001\*.25) THEN -5280\*(t-13.5\*.25)/.25+25200 ELSE z15  
z15=IF(t>16.0\*.25 AND t<17.5001\*.25) THEN 7992\*(t-16.0\*.25)/.25+12000 ELSE z16  
z16=IF(t>17.5\*.25 AND t<18.5001\*.25) THEN -3000\*(t-17.5\*.25)/.25+24000 ELSE z17  
z17=IF(t>18.5\*.25 AND t<19.0001\*.25) THEN 2400\*(t-18.5\*.25)/.25+21000 ELSE z18  
z18=IF(t>19.0\*.25 AND t<20.5001\*.25) THEN -7596\*(t-19.0\*.25)/.25+22200 ELSE z19  
z19=IF(t>20.5\*.25 AND t<21.0001\*.25) THEN 28800\*(t-20.5\*.25)/.25+10800 ELSE z20  
z20=IF(t>21.0\*.25 AND t<24.0001\*.25) THEN -3792\*(t-21.0\*.25)/.25+25200 ELSE z21

```
z21=IF(t>24.0*.25 AND t<24.5001*.25) THEN 22800*(t-24.0*.25)/.325+13800 ELSE z22
z22=IF(t>24.5*.25 AND t<25.0001*.25) THEN -8400*(t-24.5*.25)/.25+25200 ELSE z23
z23=IF(t>25.0*.25 AND t<25.5001*.25) THEN 27600*(t-25.0*.25)/.25+21000 ELSE z24
z24=IF(t>25.5*.25 AND t<26.5001*.25) THEN -12000*(t-25.5*.25)/.25+34800 ELSE z25
z25=IF(t>26.5*.25 AND t<28.0001*.25) THEN -7200*(t-26.5*.25)/.25+22800 ELSE z26
z26=IF(t>28.0*.25 AND t<29.0001*.25) THEN 17400*(t-28.0*.25)/.25+12000 ELSE z27
z27=IF(t>29.0*.25 AND t<30.0001*.25) THEN -7800*(t-29.0*.25)/.25+29400 ELSE z28
z28=IF(t>30.0*.25 AND t<30.5001*.25) THEN 21600 ELSE z29
z29=IF(t>30.5*.25 AND t<32.0*.25) THEN -5592*(t-30.5*.25)/.25+21600 ELSE 20000
```

```
y[pid]          =mlss[rea01]
v[cla]          =u[pid]
"y[pidlv]       =mr[cla]
y[pidlv]        =m[cla]
vlv[cla]        =u[pidLV]
y[PIDDO]        =yso[rea01]
valkal[rea01]   =u[piDDO]
```

```
q0[cla]         =q0[rea01]
sseff[cla]      =sseff[rea01]
"q4[cla]        =q4[rea01]
q4[rea01]       =q4[cla]
```

```
q3[rea01]       =q3[cla]
mlss[cla]       =mlss[rea01]
frac[rea01]     =frac[cla]
```

```
uss0:189 "64, 289 from Lessare
q00:20568
steps:260
step:22000
per:1
pers:1
END
```

DISCRETE SYSTEM PIDLV

"PID-regulator based on Tustin discretization (P230 of CCS)

"regulating qw to maintain the high level

INPUT uc "Set-point

INPUT y "Measurement variable

OUTPUT u "Regulator output

STATE I "integral part

STATE D "Derivative part

STATE yold "Delayed measured variable

new ni nD nyold

Time t

Tsamp ts

INITIAL

$bi = k \cdot h / Ti$

$ar = h / Tt$

$bd = K \cdot N \cdot Td / (Td + N \cdot h)$

$ad = Td / (Td + N \cdot h)$

SORT

$V = P + I + nD$

$u = \text{IF } v < \text{ulow THEN ulow ELSE (IF } v < \text{uhigh THEN v ELSE uhigh)}$

" Proportional part

$P = K \cdot (y - b \cdot uc) / 10000.0$  "The scale of measurement (M) is de 0 au 10000

"Integral part

$ni = i + bi \cdot (y - uc) / 10000.0 + ar \cdot (u - v)$

"Derivative part

$nD = ad \cdot D - bd \cdot (y - yold)$

$nyold = y$

"Update sampling time

$ts = t + h$

$h : 0.02$  "sampling period

"  $h = 0.02d = 0.02 \cdot 24 \cdot 60 = 28.8min.$

"Parameters

$K : 1.0$  "k=1

$Ti : 0.2$  "Ki =  $K \cdot h / Ti = 0.02 / 0.3$

$Td : 0$  "Td=0.1 or 1

$Tt : 1$

$N : 10$

$b : 1$

$i : 0$

$ulow : -1$

$uhigh : 1$

END

DISCRETE SYSTEM PIDDO

"PID-regulator based on Tustin discretization (P230 of CCS)

INPUT uc "Set-point  
INPUT y "Measurement variable  
OUTPUT u "Regulator output  
  
STATE I "integral part  
STATE D "Derivative part  
STATE yold "Delayed measured variable

new ni nD nyold  
Time t  
Tsamp ts

INITIAL

bi=k\*h/Ti  
ar=h/Tt  
bd=K\*N\*Td/(Td+N\*h)  
ad=Td/(Td+N\*h)  
SORT  
V=P+I+nD  
u=IF v<ulow THEN ulow ELSE (IF v<uhigh THEN v ELSE uhigh)

" Proportional part  
P=K\*(b\*uc-y)/3 "The scale of measurement is de 1 au 4

"Integral part  
ni=i+bi\*(uc-y)/3+ar\*(u-v)

"Derivative part  
nD=ad\*D-bd\*(-y+yold)/3  
nyold=y

ts=t+h  
"Parameters  
K:1.0 "k=1  
Ti:0.2 "0.4 "Ti=K\*h/Ti=0.5\*0.001/0.001=12 hrs  
Td:0.01 "Td=1  
h:0.0005 "=0.001\*24\*60=1.44 min  
Tt:1  
N:10  
b:1  
ulow:-1  
uhigh:1

END

DISCRETE SYSTEM PID

"PID-regulator based on Tustin discretization (P230 of CCS)  
"to regulate Ratio of Qr/Q0 for MLSS

INPUT uc "Set-point  
INPUT y "Measurement variable  
OUTPUT u "Regulator output

STATE I "integral part  
STATE D "Derivative part  
STATE yold "Delayed measured variable

new ni nD nyold  
Time t  
Tsamp ts

INITIAL

bi=k\*h/Ti  
ar=h/Tt  
bd=K\*N\*Td/(Td+N\*h)  
ad=Td/(Td+N\*h)

SORT

V=P+I+nD  
u=IF v<ulow THEN ulow ELSE (IF v<uhigh THEN v ELSE uhigh)

" Proportional part  
P=K\*(b\*uc-y)/1000.0 "The scale of measurement is de 2500 au 3500

"Integral part  
ni=i+bi\*(uc-y)/1000.0+ar\*(u-v)

"Derivative part  
nD=ad\*D-bd\*(yold-y)  
nyold=y

"Update sampling time  
ts=t+h

"Parameters

"FPR:150

"FP = nsw \* FPR

K:1.0 "k=1

Ti:0.4 "Ti=4, KI=K\*h/Ti=1\*0.25/0.4=0.62 day

Td:0 "Td=0.1 or 1, KD=K\*Td/h=0

Tt:1

N:10

b:1

ulow:-1

uhigh:1

h:0.25 "h=0.02\*24=0.24 hour

END

DISCRETE SYSTEM CLA

"for regulating qw (q3) and keeping qr (q4) constant

input v vlv mlss q0 sseff

"v=u[PID], vLV=u[PIDLv] q0=q0[rea01], q4=q4[rea01], mlss=mlss[rea01]

output m mr q3 frac xr q4

STATE m1

NEW dm1

TIME t

TSAMP ts

ts=t+h

h:0.01

" Equations:

"q3=q3val+DEVQ3 "m3/day

valve1=IF vlv<-1 THEN -1 ELSE IF vlv>1 THEN 1 ELSE vlv

q3=q3max\*(valve1+1)/2

q3r=q3

"q--m3/day; ac--m2; u--m/h

valve=IF v<-1 THEN -1 ELSE IF v>1 THEN 1 ELSE v

"Ratio=(valve+1)/2

ratio=1.0

"q4=q0\*ratio

q4=q4val " =12000

q1=q0+q4

u=(q3+q4)/ac/24

"xlimit--kg/m3; flimit--kg/h/m2

xlimit=EXP(1/(fluxa-1.0)\*LN(-u/(fluxa\*fluxn)))

flimit=fluxn\*(xlimit^fluxa)+xlimit\*u

"xr--kg/m3; mlss--g/m3

xr=flimit/u

frac=xr\*1000/(mlss\*ycod)

"SLUIN=q1\*mlss\*0.52/1000 "Sludge in

"SOUT=(q3+q4)\*xr "sludge out

dm1=m1+(q1\*mlss\*ycod/1000-sseff\*q0/1000-flimit\*ac\*24)\*h

m=m1

"m1---kg

"mr (Meter)=m/(AC\*XLIMIT)\*100=cm

mr=m/ac/xlimit\*100

"Initial condition of m1 is defined in MACRO IAWDYN

sage=8300\*mlss\*0.52/q3/xr/1000

" Parameter values:

"AC=1000 (m2); q4max=20000 (m3/day)

ac:2000

fluxa:-2.2

fluxn:4.0

q3max:2000

"YCOD=0.52 (g cells / g COD) (from Andrews, 1989)

q3val:600

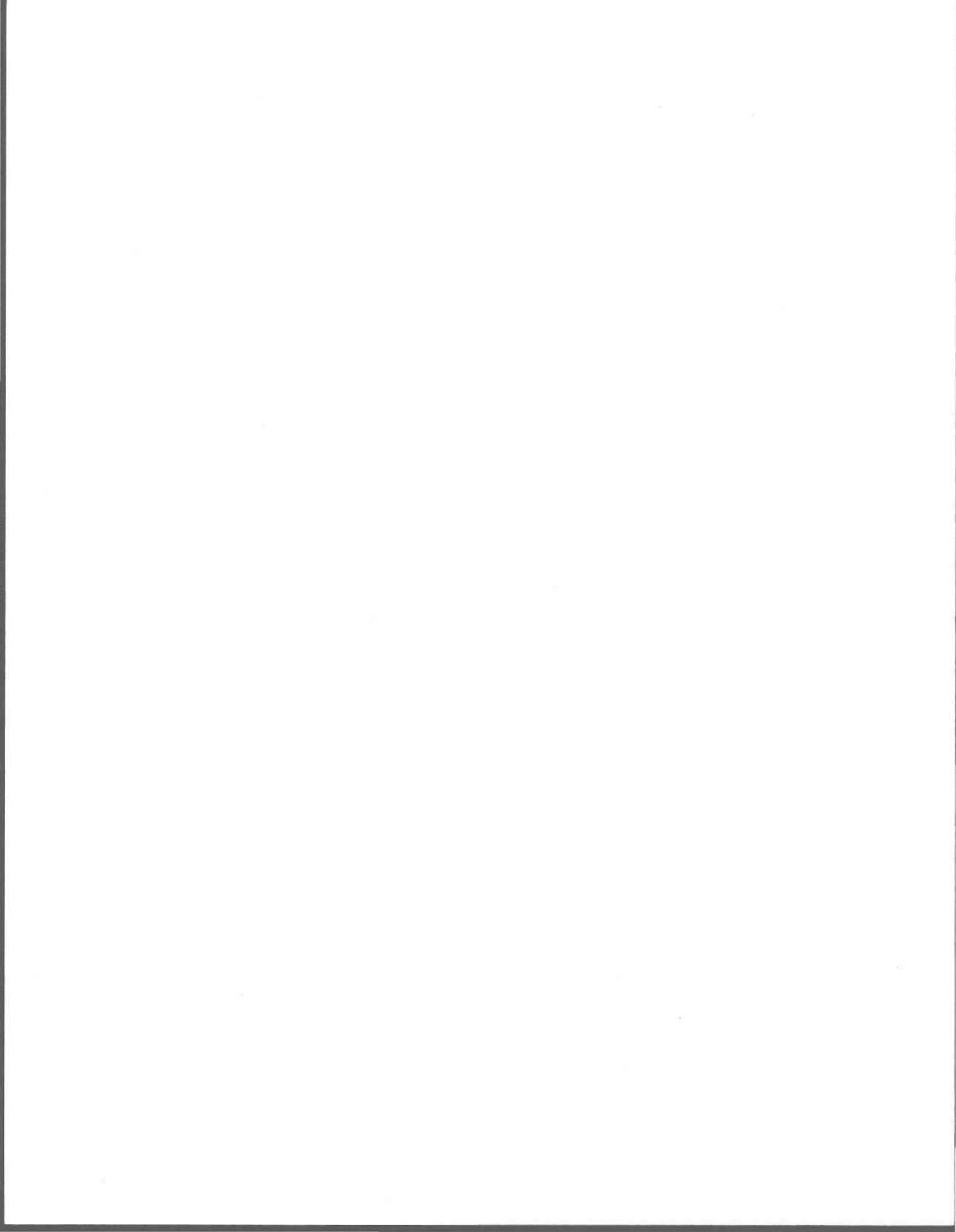
devq3:0

q4val:12000

m1:20000

ycod:0.55

END



```

C*****
C Mars 18, 1994, modified June 10, 1994-- ORT5.FOR -(NR=5) OK!
C ORT5.FOR is to determine the effectiveness
C factors (ETA1, ETA2, ETA3) of IAWPRC model due to the floc
C effects, using orthogonal collocation and psudo-Newton method
C for the following FOUR component:
C 1) Ss; 2) DO; 3) NH3-nitrogen; 4) SNO
C involving in THREE process reactions:
C 1) Aerobic growth of heterotrophs (ETA1);
C 2) Defitrification (ETA2);
C 3) Aerobic growth of autotrophs (ETA3)
C -----
C SS: Readily degraded substrate (g COD m-3)
C DOO: dissolved oxygen (g (-COD) m-3)
C SNH: NH3 nitrogen (g N m-3)
C SNO: Nitrate and nitrite nitrogen (g N m-3)
C rr: floc radius (cm)
C
C  $d^2SS/dr^2 + 2/rr * dSS/dr = RSS/Dss$  (1)
C  $d^2DOO/dr^2 + 2/rr * dDOO/dr = RSO/Dso$  (2)
C  $d^2SNH/dr^2 + 2/rr * dSNH/dr = RSNH/Dsnh$  (3)
C  $d^2SNO/dr^2 + 2/rr * dSNO/dr = RSNO/Dsno$  (4)
C
C where  $PRO1 = MUH * SS / (KS + SS) * DOO / (KOH + DOO) * LBH$ 
C  $PRO2 = MUH * SS / (KS + SS) + KOH / (KOH + DOO) * SNO / (KNO + SNO) * 0.8 * LBH$ 
C  $PRO3 = MUA * SNH / (KNH + SNH) * DOO / (KOA + DOO) * LBA$ 
C  $RSS = 1/YH * PRO1 + 1/YH * PRO2$ 
C  $RSO = (1 - YH) / YH * PRO1 + (4.57 - YA) / YA * PRO3$ 
C  $RSNH = ixb * PRO1 + ixb * PRO2 + (ixb + 1/YA) * PRO3$ 
C  $RSNO = (1 - YH) / (2.86 * YH) * PRO2 - 1/YA * PRO3$ 
C
C Boundary condition:
C at rr=0 dSS/dr=0, dDOO/dr=0, dSNH/dr=0, dSNO/dr=0
C at rr=R SS=Sb, DOO=DOb, SNH=SNHB, SNO=SNOB
C -----
C Dimensionless: Let  $S = SS/Sb$ ,  $DO = DOO/DOb$ ,  $SN = SNH/SNHB$ ,  $NO = SNO/SNOB$ 
C  $r = rr/R$ 
C where (the parameters are supposed to be the input parameters)
C  $SB = 2.62$  g COD m-3 (= that in fluid phase)
C  $DOB = 2.0$  g (-COD) m-3
C  $SNHB = 0.41$  g N m-3
C  $SNOB = 33.31$  g N m-3
C  $R = 0.0075$  cm
C
C Because:
C  $dSS/dr = SB/R * (dS/dr)$ 
C  $d^2SS/dr^2 = SB/R/R * (d^2S/dr^2)$ 
C
C  $dDOO/dr = DOB/R * (dDO/dr)$ 
C  $d^2DOO/dr^2 = DOB/R/R * (d^2DO/dr^2)$ 
C
C  $dSNH/dr = SNHB/R * (dSN/dr)$ 
C  $d^2SNH/dr^2 = SNHB/R/R * (d^2SN/dr^2)$ 
C
C  $dSNO/dr = SNOB/R * (dNO/dr)$ 
C  $d^2SNO/dr^2 = SNOB/R/R * (d^2NO/dr^2)$ 
C

```

C r=rr/R

C

C Therefore:

$$\begin{aligned}
C \quad d2S/dr2+2/r*dS/dr &= (R*R/SB) / Dss* \\
C \quad & 1/YH*MUH*SB*S / (KS+SB*S) * DOB*DO / (KOH+DOB*DO) * LBH \quad (5) \\
C \quad & + (R*R/SB) / Dss*1/YH*MUH*SB*S / (KS+SB*S) * KOH / (KOH+DOB*DO) \\
C \quad & * SNOB*SNO / (KNO+SNOB*SNO) * Eth*LBH
\end{aligned}$$

C

$$\begin{aligned}
C \quad d2DO/dr2+2/r*dDO/dr &= (R*R/DOB) / Dso* \\
C \quad & (1-YH) / YH*MUH*SB*S / (KS+SB*S) * DOB*DO / (KOH+DOB*DO) * LBH \\
C \quad & + R*R/DOB/Dso*(4.57-YA) / YA*MUA*SNHB*SN / (KNH+SNHB*SN) * DOB*DO \\
C \quad & / (KOA+DOB*DO) * LBA \quad (6)
\end{aligned}$$

C

$$\begin{aligned}
C \quad d2SN/dr2+2/r*dSN/dr &= (R*R/SNHB) / Dsnh*iXB*MUH*SB*S / (KS+SB*S) * \\
C \quad & DOB*DO / (KOH+DOB*DO) * LBH \\
C \quad & + R*R/SNHB/Dsnh*(iXB+1/YA) * MUA*SNHB*SN / (KNH+SNHB*SN) * \\
C \quad & DOB*DO / (KOA+DOB*DO) * LBA \quad (7)
\end{aligned}$$

C

$$\begin{aligned}
C \quad d2NO/dr2+2/r*dNO/dr &= (R*R/SNOB) / Dsno*(1-YH) / (2.86*YH) * \\
C \quad & MUH*SB*S / (KS+SB*S) * KOH / (KOH+DOB*DO) * SNOB*NO / (KNO+SNOB*NO) \\
C \quad & * Eth*LBH \\
C \quad & - (R*R/SNOB) / Dsno*1/YA*MUA*SNHB*SN / (KNH+SNHB*SN) * DOB*DO \\
C \quad & / (KOA+DOB*DO) * LBA \quad (8)
\end{aligned}$$

C

C Boundary conditions:

C at r=0 dS/dr=0, dDO/dr=0, dSN/dr=0, dNO/dr=0  
C at r=1 S=1, DO=1, SN=1, NO=1

C

C -----  
C Let x=r\*r (To satisfy dS/dr=0 & dDO/dr=0 at r=0 automatically)

C dS/dr=(dS/dx)\*(dx/dr)=2\*sqrt(x)\*dS/dx

C d2S/dr2=4x\*(d2S/dx2)+2\*(dS/dx)

C

$$\begin{aligned}
C \quad 4x*(d2S/dx2)+6*(dS/dx) &= (R*R/SB) / Dss* \\
C \quad & 1/YH*MUH*SB*S / (KS+SB*S) * DOB*DO / (KOH+DOB*DO) * LBH \quad (7) \\
C \quad & + (R*R/SB) / Dss*1/YH*MUH*SB*S / (KS+SB*S) * KOH / (KOH+DOB*DO) \\
C \quad & * SNOB*NO / (KNO+SNOB*NO) * Eth*LBH
\end{aligned}$$

C

$$\begin{aligned}
C \quad 4x*(d2DO/dx2)+6*(dDO/dx) &= (R*R/DOB) / Dso* \\
C \quad & (1-YH) / YH*MUH*SB*S / (KS+SB*S) * DOB*DO / (KOH+DOB*DO) * LBH \\
C \quad & + R*R/DOB/Dso*(4.57-YA) / YA*MUA*SNHB*SN / (KNH+SNHB*SN) * DOB*DO \\
C \quad & / (KOA+DOB*DO) * LBA \quad (8)
\end{aligned}$$

C

$$\begin{aligned}
C \quad 4x*(d2SN/dx2)+6*(dSN/dx) &= (R*R/SNHB) / Dsnh*iXB*MUH*SB*S / (KS+SB*S) * \\
C \quad & DOB*DO / (KOH+DOB*DO) * LBH \\
C \quad & + R*R/SNHB/Dsnh*(iXB+1/YA) * MUA*SNHB*SN / (KNH+SNHB*SN) * \\
C \quad & DOB*DO / (KOA+DOB*DO) * LBA \quad (9)
\end{aligned}$$

C

$$\begin{aligned}
C \quad 4x*(d2NO/dx2)+6*(dNO/dx) &= (R*R/SNOB) / Dsno*(1-YH) / (2.86*YH) \\
C \quad & MUH*SB*S / (KS+SB*S) * KOH / (KOH+DOB*DO) * SNOB*NO / (KNO+SNOB*NO) \\
C \quad & * Eth*LBH \\
C \quad & + (R*R/SNOB) / Dsno*(4.57-YA) / YA*MUA*SNHB*SN / (KNH+SNHB*SN) \\
C \quad & * DOB*DO / (KOA+DOB*DO) * LBA \quad (10)
\end{aligned}$$

C

C Boundary conditions: at x=1: S=1, DO=1, SN=1, NO=1

C\*\*\*\*\*

INTEGER NTR, NR, NO, N1, N, NN, I  
REAL\*8 ALFA, BETA, H, W, E, PP, EE

```

REAL*8 IXB, YA, YH, RSS1, RSO1, RSNH1, RSN01
REAL*8 CF, XBH, XBA, RR, MUH, MUA, SB, DOB, SNHB, SNOB, LBH, LBA
REAL*8 Dsnh, Dso, Dss, Dsno, KNH, KNO, KS, KOA, KOH
REAL*8 AR(6,6), BR(6,6), DIFR1(6), DIFR2(6), DIFR3(6), RT(6)
REAL*8 VR1(6), VR2(6), P(30)
REAL*8 A(20,20), X(20), V(20), Y(20)

NN=4
NR=5
NTR=NR+1
c WRITE(*,*) 'ALFA=1.0? and BETA=0.0?'
c read(*,*) ALFA, BETA
ALFA=1.0
BETA=0.0
write(*,19) ALFA, BETA
19 FORMAT(2x, 5HALFA=, F8.2, 5x, 5HBETA=, F8.2)
CALL JCOBI(NTR, NR, 0, 1, ALFA, BETA, DIFR1, DIFR2, DIFR3, RT)

DO 10 I=1, NR+1
CALL DFOPR(NTR, NR, 0, 1, I, 2, DIFR1, DIFR2, DIFR3, RT, VR2)
CALL DFOPR(NTR, NR, 0, 1, I, 1, DIFR1, DIFR2, DIFR3, RT, VR1)
DO 20 J=1, NR+1
AR(I, J)=VR1(J)
20 BR(I, J)=4.0*RT(I)*VR2(J)+6.0*VR1(J)
10 CONTINUE
write(*,*) 'AR(6,6):'
write(*,11) ((AR(I, J), J=1, 6), I=1, 6)
11 FORMAT(6F10.3)
c write(*,*) 'RT(1)=', RT(1), 'RT(2)=', RT(2)
c write(*,*) 'RT(3)=', RT(3), 'RT(4)=', RT(4)
write(*,*) 'BR(6,6):'
write(*,11) ((BR(I, J), J=1, 6), I=1, 6)
RT1=DSQRT(RT(1))
RT2=DSQRT(RT(2))
RT3=DSQRT(RT(3))
RT4=DSQRT(RT(4))
RT5=DSQRT(RT(5))
RT6=DSQRT(RT(6))
write(*,*) 'The orthogonal collocation points:'
write(*,*) 'RT1=', RT1, ' RT2=', RT2
write(*,*) 'RT3=', RT3, ' RT4=', RT4
write(*,*) 'RT5=', RT5, ' RT6=', RT6
C-----
C P(1)=YH=0.57 (g cell COD formed/ g COD of Ss oxidized)
C P(2)=MUH=4.0 (day-1)
C P(3)=KOH=0.25 (g COD m-3)=0.25/1000 (mg COD cm-3)
C P(4)=KS=20.0 (g COD m-3)=20.0/1000 (mg COD cm-3)
C P(5)=LBH=50 mg cm-3 (from WR, 1992 p1099, the biomass density;
C LBH=1250 mg cm-3 is in BB, 1984, p352)
C P(6)=RR=0.0075 cm (floc dadius)
C P(7)=XBH=1450.3 (g COD m-3)=1450.3/1000 (mg COD cm-3)
C P(8)=DSS=0.06 cm2 day-1 (from BB, 1984, p352, the diffusivity
C coefficient for organics in floc matrix)
C P(9)=DSO=0.71 cm2 day-1 (from WR, 1992, p1009, the diffusivity
C coefficient for oxygen in floc matrix)
C P(10)=SB=2.62 (g COD m-3), the Ss concentration in fluid phase
C =2.62/1000 (mg COD cm-3)

```

```

C P(11)=DOB=2.0 (g COD m-3), the DO in fluid phase
C =2.0/1000 (mg COD cm-3)
C P(12)=YA=0.24
C P(13)=MUA=0.879 day-1
C P(14)=KNH=0.741 g NH3-N m-3
C =0.741/1000 (mg NH3-N cm-3)
C P(15)=LBA=125 mg cm-3 (from BB)
C P(16)=DSNH=0.2 cm2 day-1 (from BB)
C P(17)=SNHB=0.41 (g NH3-N m3)
C =0.41/1000 (mg NH3-N cm-3)
C P(18)=iXB=0.07 (g N/g COD)
C P(19)=XBA=90.39 (g COD m-3)=90.39/1000 (mg COD cm-3)
C P(20)=DSNO=(0.7-1.0) ??? cm2 day-1
C P(21)=SNOB=33.31 g N m-3
C P(22)=KNO=0.5 g n m-3=0.5/1000 (mg N cm-3)
C P(23)=KOA=0.4 g O2 m-3=0.4/1000.0 (mg O2 cm-3)
C
C P(27)=ETA1
C P(28)=ETA2
C P(29)=ETA3
C P(30)=ETA33

```

```

C-----
P(1)=0.57
P(2)=4.0
P(3)=0.25/1000.0
P(4)=20.0/1000.0
c write(*,*)'Input LBH=980.0 mg cm-3(WR) or 1250 mg cm-3 (BB) '
c write(*,*)'Input DSS=0.06 (BB) & DSO=0.71 cm2 day-1 (BB) '
write(*,*)'Input XBH=1450.3, XBA=90.39'
write(*,*)'Input DOB=2.0, SB=2.62 (g COD m-3),SNHB=0.41(g N/m3) '
write(*,*)'Input SNOB=33.31, RR=0.0075 cm (BB), the floc radius'
write(*,*)'Input Dsno=0.1-1.0'
READ(*,*) XBH,XBA,DOB,SB,SNHB,SNOB,RR
Dss=0.06
Dso=0.71
Dsnh=0.2
Dsno=0.2
c write(*,*)'Input Dss=0.06, 0.1'
c write(*,*)'Input Dso=0.71, 1.8'
c write(*,*)'Input Dsnh=0.2, 0.4'
c write(*,*)'Input Dsno=0.2'
c READ(*,*) Dss,Dso,Dsnh,Dsno
c write(*,*)'RR=0.001-0.0256'
c read(*,*)RR
c XBH=1363.0
c XBA=85.0
c DOB=2.0
c SB=3.8
c SNHB=2.0
c SNOB=14.3
c RR=0.0075

LBH=980.0
P(5)=LBH
P(6)=RR
P(7)=XBH/1000.0

```

P(19)=XBA/1000.0  
P(10)=SB/1000.0  
P(11)=DOB/1000.0  
P(17)=SNHB/1000.0  
P(21)=SNOB/1000.0  
P(8)=Dss  
P(9)=Dso  
P(12)=0.24  
P(13)=0.879  
P(14)=0.741/1000.0  
P(15)=125.0  
P(16)=Dsnh  
P(18)=0.07  
P(20)=Dsno  
P(22)=0.5/1000.0  
P(23)=0.4/1000.0  
H=0.1  
W=0.1  
E=1.D-6  
PP=6.D3  
EE=1.D-9

C -----  
C X(I) is the guessing initial value (mg COD cm-3)  
C -----

C Ss  
X(1)=0.01D-1  
X(2)=0.1D0  
X(3)=0.3D0  
X(4)=0.5D0  
X(5)=0.9D0

C SO  
X(6)=0.1D-2  
X(7)=0.1D-1  
X(8)=0.3D0  
X(9)=0.5D0  
X(10)=0.9D0

C SNH  
X(11)=0.1D-2  
X(12)=0.1D0  
X(13)=0.3D0  
X(14)=0.5D0  
X(15)=0.9D0

C SNO  
X(16)=0.1D-2  
X(17)=0.1D0  
X(18)=0.3D0  
X(19)=0.5D0  
X(20)=0.9D0  
N=NN\*NR

C \*\*\*\*\*  
CALL SUB0404 (N, H, W, E, PP, X, A, V, Y, K, EE, BR, AR, P, NR)  
C \*\*\*\*\*

write(\*, 666)XBH, XBA  
write(\*, 667)SB, DOB  
write(\*, 668)SNHB, SNOB, RR

```

        write(*,996) Dss,Dso,Dsnh,Dsno,P(5),P(15)
996  FORMAT(1x,4HDss=,F6.2,2x,4HDso=,F6.2,2x,5HDsnh=,F6.2,2x,
        %5Hdsno=,F6.2,2x,4HLBH=,F8.2,2x,4HLBA=,F6.2)
        write(*,*) 'X(I=1,20)='
        write(*,999) (X(I),I=1,5)
        write(*,999) (X(I),I=6,10)
        write(*,999) (X(I),I=11,15)
        write(*,999) (X(I),I=16,20)
        write(*,*) 'K====',K
c      write(*,777) (Y(I),I=1,20)
        write(*,998) P(27),P(28),P(29)
        write(*,*) 'ETA33=',P(30)
666  FORMAT(1X,14HXBH(g-COD/m3)=,F8.3,6x,14HXBA(g-COD/m3)=,F8.3)
667  FORMAT(1x,13HSB(g-COD/m3)=,F8.3,6x,14HDOB(g-COD/m3)=,F8.3)
668  FORMAT(1x,17HSNHB(g-NH3-N/m3)=,F8.3,6x,5HSNOB=,F8.3,6x,
        %6HR(cm)=,F10.6)
998  FORMAT(2x,5HETA1=,F6.3,4x,5HETA2=,F6.3,4x,5HETA3=,F6.3)
999  FORMAT(5F8.3)
        STOP
        END

```

```

SUBROUTINE JCOBI (ND,N,NO,N1,AL,BE,DIF1,DIF2,DIF3,ROOT)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION DIF1(ND),DIF2(ND),DIF3(ND),ROOT(ND)
AB=AL+BE
AD=BE-AL
AP=BE*AL
DIF1(1)=(AD/(AB+2)+1)/2
DIF2(1)=0.0
IF (N .LT. 2) GOTO 15
DO 10 I=2,N
Z1=I-1
Z=AB+2*Z1
DIF1(I)=(AB*AD/Z/(Z+2)+1)/2
IF (I .NE. 2) GOTO 11
DIF2(I)=(AB+AP+Z1)/Z/Z/(Z+1)
GOTO 10
11 Z=Z*Z
Y=Z1*(AB+Z1)
Y=Y*(AP+Y)
DIF2(I)=Y/Z/(Z-1)
10 CONTINUE
15 X=0.0
DO 20 I=1,N
25 XD=0.0
XN=1.0
XD1=0.0
XN1=0.0
DO 30 J=1,N
XP=(DIF1(J)-X)*XN-DIF2(J)*XD
XP1=(DIF1(J)-X)*XN1-DIF2(J)*XD1-XN
XD=XN
XD1=XN1
XN=XP
30 XN1=XP1
ZC=1.0
Z=XN/XN1

```

```

      IF (I .EQ. 1) GOTO 21
      DO 22 J=2, I
22  ZC=ZC-Z/(X-ROOT(J-1))
21  Z=Z/ZC
      X=X-Z
      IF (DABS(Z) .GT. 1.D-09) GOTO 25
      ROOT(I)=X
      X=X+0.0001
20  CONTINUE
      NT=N+N0+N1
      IF (N0 .EQ. 0) GOTO 35
      DO 31 I=1, N
      J=N+1-I
31  ROOT(J+1)=ROOT(J)
      ROOT(1)=0
35  IF (N1 .EQ. 1) ROOT(NT)=1.0

      DO 40 I=1, NT
      X=ROOT(I)
      DIF1(I)=1.0
      DIF2(I)=0.0
      DIF3(I)=0.0
      DO 40 J=1, NT
      IF (J .EQ. I) GOTO 40
      Y=X-ROOT(J)
      DIF3(I)=Y*DIF3(I)+3*DIF2(I)
      DIF2(I)=Y*DIF2(I)+2*DIF1(I)
      DIF1(I)=Y*DIF1(I)
40  CONTINUE
      RETURN
      END

SUBROUTINE DFOPR(ND, N, N0, N1, I, ID, DIF1, DIF2, DIF3, ROOT, VECT)
IMPLICIT REAL*8 (A-H, O-Z)
DIMENSION DIF1(ND), DIF2(ND), DIF3(ND), ROOT(ND), VECT(ND)
NT=N+N0+N1
IF (ID .EQ. 3) GOTO 10
DO 20 J=1, NT
IF (J .NE. I) GOTO 21
IF (ID .NE. 1) GOTO 5
VECT(I)=DIF2(I)/DIF1(I)/2
GOTO 20
5  VECT(I)=DIF3(I)/DIF1(I)/3
GOTO 20
21  Y=ROOT(I)-ROOT(J)
VECT(J)=DIF1(I)/DIF1(J)/Y
IF (ID .EQ. 2) VECT(J)=VECT(J)*(DIF2(I)/DIF1(I)-2/Y)
20  CONTINUE
GOTO 50
10  Y=0.0
DO 25 J=1, NT
X=ROOT(J)
AX=X*(1-X)
IF (N0 .EQ. 0) AX=AX/X/X
IF (N1 .EQ. 0) AX=AX/(1-X)/(1-X)
VECT(J)=AX/DIF1(J)**2
25  Y=Y+VECT(J)

```

```

DO 60 J=1,NT
60 VECT(J)=VECT(J)/Y
50 RETURN
END

```

```

C-----
C   This subroutine is used to define the set of non-linear
C   equations
C-----

```

```

SUBROUTINE SUB0441(X,Y,BR,AR,P,NR)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL*8 X(20),Y(20)
REAL*8 BR(6,6),AR(6,6),P(30),S(4,6)
REAL*8 MUH,MUA,RR,ETA1,ETA2,ETA3,RSS1,RSO1,RSNH1,RSNO1
REAL*8 IXB,YA,YH,KNH,KNO,KOA,KOH,KS,CF
REAL*8 XBH,XBA,LBH,LBA,SB,DOB,SNHB,SNOB
REAL*8 DSDR,DSDR1,DSDR2,DSDR3,DSDO,DSDO1,DSDO2,DSDO3
REAL*8 DNHDR,DNHDR1,DNHDR2,DNHDR3
REAL*8 Dss,Dso,Dsno,Dsnh,PROC1,PROC2,PROC3
REAL*8 DNODR,DNODR1,DNODR2,DNODR3
REAL*8 SS1,SS2,SO1,SO3,SNH1,SNH2,SNH3,SNO2,SNO3
INTEGER NR

```

```

YH=P(1)
MUH=P(2)
KOH=P(3)
KS=P(4)
LBH=P(5)
RR=P(6)
XBH=P(7)
Dss=P(8)
Dso=P(9)
SB=P(10)
DOB=P(11)
YA=P(12)
MUA=P(13)
KNH=P(14)
XBA=P(19)
Dsno=P(20)

```

```

C----- LBA=P(15)=(XBA/XBH)*LBH=90.39/1450.3*50=3.116 (mg COD/cm3)

```

```

P(15)=XBA/XBH*LBH

```

```

LBA=P(15)
Dsnh=P(16)
SNHB=P(17)
IXB=P(18)
SNOB=P(21)
KNO=P(22)
KOA=P(23)

```

```

c   write(*,*)'LBA=',LBA

```

```

C-----
C   floc center---> X(1)--->X(2)--->X(5)--->floc surface (for Ss)
C   floc center---> X(6)--->X(7)--->X(10)--->floc surface (for DO)
C   floc center---> X(11)--->X(12)--->X(15)--->floc surface (for SNH)
C   floc center---> X(16)--->X(17)--->X(20)--->floc surface (for SNO)
C-----

```

```

C ----- X(I) is the initial guessing value at orthogonal collocation point

```

```

DO 100 I=1,NR
S(1,I)=0.0
DO 110 J=1,NR
110 S(1,I)=BR(I,J)*X(J)+S(1,I)
S(1,I)=S(1,I)+BR(I,NR+1)
Y(I)=S(1,I)-(RR*RR/SB/Dss/YH)*MUH*SB*X(I)/(KS+SB*X(I))
%*DOB*X(I+NR)/(KOH+DOB*X(I+NR))*LBH
%-(RR*RR/SB/Dss/YH)*MUH*SB*X(I)/(KS+SB*X(I))*KOH/(KOH+DOB*X(I+NR))
%*SNOB*X(I+3*NR)/(KNO+SNOB*X(I+3*NR))*0.8*LBH
100 CONTINUE

DO 200 I=1,NR
S(2,I)=0.0
DO 210 J=1,NR
210 S(2,I)=BR(I,J)*X(J+NR)+S(2,I)
S(2,I)=S(2,I)+BR(I,NR+1)
Y(NR+I)=S(2,I)-(RR*RR/DOB/Dso/YH)*(1.D0-YH)*MUH*SB*X(I)
%/(KS+SB*X(I))*DOB*X(I+NR)/(KOH+DOB*X(I+NR))*LBH
%-(RR*RR/DOB/Dso/YA)*(4.57D0-YA)*MUA*SNHB*X(I+NR*2)
%/(KNH+SNHB*X(I+NR*2))*DOB*X(I+NR)/(KOA+DOB*X(I+NR))*LBA
200 CONTINUE

DO 300 I=1,NR
S(3,I)=0.0
DO 310 J=1,NR
310 S(3,I)=BR(I,J)*X(J+2*NR)+S(3,I)
S(3,I)=S(3,I)+BR(I,NR+1)
Y(NR*2+I)=S(3,I)-(RR*RR/SNHB/Dsnh)*IXB*MUH*SB*X(I)
%/(KS+SB*X(I))*DOB*X(I+NR)/(KOH+DOB*X(I+NR))*LBH
%-(RR*RR/SNHB/Dsnh)*IXB*MUH*SB*X(I)/(KS+SB*X(I))
%*KOH/(KOH+DOB*X(I+NR))*SNOB*X(I+3*NR)/(KNO+SNOB*X(I+3*NR))
%*0.8*LBH
%-(RR*RR/SNHB/Dsnh)*(IXB+1/YA)*MUA*SNHB*X(I+2*NR)
%/(KNH+SNHB*X(I+2*NR))*DOB*X(I+NR)/(KOA+DOB*X(I+NR))*LBA
300 CONTINUE

c
DO 400 I=1,NR
S(4,I)=0.0
DO 410 J=1,NR
410 S(4,I)=BR(I,J)*X(J+3*NR)+S(4,I)
S(4,I)=S(4,I)+BR(I,NR+1)
Y(NR*3+I)=S(4,I)-(RR*RR/SNOB/Dsno)*(1.0-YH)/2.86/YH*MUH*SB*X(I)
%/(KS+SB*X(I))*KOH/(KOH+DOB*X(I+NR))*SNOB*X(I+3*NR)/(KNO+SNOB
%*X(I+3*NR))*0.8*LBH
%+(RR*RR/SNOB/Dsno)/YA*MUA*SNHB*X(I+2*NR)
%/(KNH+SNHB*X(I+2*NR))*DOB*X(I+NR)/(KOA+DOB*X(I+NR))*LBA
400 CONTINUE

c write(*,*) (Y(I)=, I=1, 20)
c WRITE(*,*) ' (X(I), I=1, 20) '
c write(*,*) (X(I), I=1, 20)
c WRITE(*,*) '-----FNC-----', FNC
dsdr=AR(6,1)*X(1)+AR(6,2)*X(2)+AR(6,3)*X(3)+AR(6,4)*X(4)
%+AR(6,5)*X(5)+AR(6,6)
c dsdr1=AR(1,1)*X(1)+AR(1,2)*X(2)+AR(1,3)*X(3)+AR(1,4)
c dsdr2=AR(2,1)*X(1)+AR(2,2)*X(2)+AR(2,3)*X(3)+AR(2,4)

```

```

c      dsdr3=AR(3,1)*X(1)+AR(3,2)*X(2)+AR(3,3)*X(3)+AR(3,4)

      dodr=AR(6,1)*X(6)+AR(6,2)*X(7)+AR(6,3)*X(8)+AR(6,4)*X(9)
      %+AR(6,5)*X(10)+AR(6,6)
c      dodr1=AR(1,1)*X(4)+AR(1,2)*X(5)+AR(1,3)*X(6)+AR(1,4)
c      dodr2=AR(2,1)*X(4)+AR(2,2)*X(5)+AR(2,3)*X(6)+AR(2,4)
c      dodr3=AR(3,1)*X(4)+AR(3,2)*X(5)+AR(3,3)*X(6)+AR(3,4)

      dnhdr=AR(6,1)*X(11)+AR(6,2)*X(12)+AR(6,3)*X(13)
      %+AR(6,4)*X(14)+AR(6,5)*X(15)+AR(6,6)
c      dnhdr1=AR(1,1)*X(7)+AR(1,2)*X(8)+AR(1,3)*X(9)+AR(1,4)
c      dnhdr2=AR(2,1)*X(7)+AR(2,2)*X(8)+AR(2,3)*X(9)+AR(2,4)
c      dnhdr3=AR(3,1)*X(7)+AR(3,2)*X(8)+AR(3,3)*X(9)+AR(3,4)

      dnodr=AR(6,1)*X(16)+AR(6,2)*X(17)+AR(6,3)*X(18)
      %+AR(6,4)*X(19)+AR(6,5)*X(20)+AR(6,6)

c      write(*,*)'*****dnodr*****=',dnodr
C---  RSS is the ss consumption rate (mg COD cm-3 day-1)
      CF=XBH/(4.D0/3.D0*3.14159265D0*RR*RR*RR*LBH)
c      write(*,*)'floc concentration, CF (No.cm-3)=' ,CF

PROC1=MUH*SB/(KS+SB)*DOB/(KOH+DOB)*XBH
PROC2=MUH*SB/(KS+SB)*KOH/(KOH+DOB)*SNOB/(KNO+SNOB)*0.8*XBH
PROC3=MUA*SNHB/(KNH+SNHB)*DOB/(KOA+DOB)*XBA
RSS1=CF*4.D0*3.1415D0*RR*RR*Dss*(dsdr*2.D0*SB/RR)
RSO1=CF*4.D0*3.1415D0*RR*RR*Dso*(dodr*2.D0*DOB/RR)
RSNH1=CF*4.D0*3.1415D0*RR*RR*Dsnh*(dnhdr*2.D0*SNHB/RR)
RSNO1=CF*4.D0*3.1415D0*RR*RR*D sno*(dnodr*2.D0*SNOB/RR)
c      write(*,*)'RSS1=',RSS1,'      RSO1=',RSO1
c      write(*,*)'RSNH1=',RSNH1,'      RSNO1=',RSNO1
c      write(*,*)'PROC1=',PROC1,'      PROC2=',PROC2
c      write(*,*)'PROC3=',PROC3

SS1=PROC1/YH
SS2=PROC2/YH
SO1=PROC1*(1-YH)/YH
SO3=PROC3*(4.57-YA)/YA
SNH1=PROC1*IXB
SNH2=PROC2*IXB
SNH3=PROC3*(IXB+1/YA)
SNO2=PROC2*(1-YH)/2.86/YH
SNO3=-PROC3/YA
c      write(*,*)'YH=',YH,'      YA=',YA,'      IXB=',IXB
c      write(*,*)'SS1=',SS1,'      SS2=',SS2
c      write(*,*)'SO1=',SO1,'      SO3=',SO3
c      write(*,*)'SNH1=',SNH1,'      SNH2=',SNH2,'      SNH3=',SNH3
c      write(*,*)'SNO2=',SNO2,'      SNO3=',SNO3

ETA1=(RSNH1-RSS1*SNH2/SS2-RSO1*SNH3/SO3)/
%(SNH1-SS1*SNH2/SS2-SO1*SNH3/SO3)
ETA2=(RSS1-ETA1*SS1)/SS2
ETA3=(RSNO1-ETA2*SNO2)/SNO3
ETA33=(RSNH1-ETA1*SNH1-ETA2*SNH2)/SNH3
P(27)=ETA1
P(28)=ETA2
P(29)=ETA3

```

```
P(30)=ETA33
c   write(*,*) 'ETA1=',ETA1, '   ETA2=',ETA2
c   write(*,*) 'ETA3=',ETA3, '   ETA33=',ETA33
```

```
RETURN
END
```

```
SUBROUTINE SUB0404 (N,H,W,E,PP,X,A,V,Y,K,EE,BR,AR,P,NR)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION BR(6,6),AR(6,6),P(30)
DIMENSION X(N),A(N,N),V(N),Y(N)
INTEGER IK,K1,K2,I,J,N,NR
```

```
IK=0
22 K1=0
K2=1
CALL SUB0441(X,Y,BR,AR,P,NR)
DO 15 I=1,N
V(I)=Y(I)
Z3=DABS(Y(I))
IF(K1 .NE. 0 .OR. Z3 .GE. E) GOTO 20
GOTO 25
20 K1=1
25 IF(K2 .EQ. 0) GOTO 15
IF(Z3 .GT. PP) GOTO 30
GOTO 15
30 K2=0
15 CONTINUE
IF(K1 .EQ. 0) GOTO 35
IF(K2 .EQ. 0) GOTO 40
DO 45 I=1,N
Z3=X(I)
X(I)=Z3+H
CALL SUB0441(X,Y,BR,AR,P,NR)
DO 50 J=1,N
50 A(J,I)=Y(J)
X(I)=Z3
45 CONTINUE
CALL SUB0501(N,A,V,EE,IE)
IF(IE .EQ. 0) GOTO 75
Z5=1.
DO 55 I=1,N
55 Z5=Z5-V(I)
IF(Z5 .EQ. 0.) GOTO 60
Z5=H/Z5
DO 65 I=1,N
X(I)=X(I)-V(I)*Z5
IF(X(I).LT.0.0D0) X(I)=0.0D0
65 CONTINUE
c 65 X(I)=X(I)-V(I)*Z5
H=H*W
IK=IK+1
GOTO 22
35 K=IK
GOTO 75
40 K=-1
```

```
GOTO 75
60 K=-3
75 RETURN
END
```

```
SUBROUTINE SUB0501(N,A,T,ES,IS)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION A(N,N),T(N)
INTEGER N,M,K,II,I,IS,IP,J
M=N-1
DO 10 K=1,M
C=0.
DO 5 I=K,N
IF(DABS(A(I,K)) .LE. DABS(C)) GOTO 5
C=A(I,K)
II=I
5 CONTINUE
IF (DABS(C) .GE. ES) GOTO 15
IS=0
RETURN
15 IF(II .EQ. K) GOTO 20
DO 25 J=K,N
R=A(K,J)
A(K,J)=A(II,J)
25 A(II,J)=R
R=T(K)
T(K)=T(II)
T(II)=R
20 K1=K+1
C=1./C
T(K)=T(K)*C
DO 10 J=K1,N
A(K,J)=A(K,J)*C
DO 29 I=K1,N
29 A(I,J)=A(I,J)-A(I,K)*A(K,J)
10 T(J)=T(J)-A(J,K)*T(K)
T(N)=T(N)/A(N,N)
DO 33 K=1,M
I=N-K
C=0
IP=I+1
DO 35 J=IP,N
35 C=C+A(I,J)*T(J)
33 T(I)=T(I)-C
IS=1
RETURN
END
```

```

C*****
C   NEWTON.FOR (Double precision)
C   Solution to a set of nonlinear equations using Newton
C   method
C*****
REAL*8 A(2,2),X0(2),V(2),Y(2)
REAL*8 H,W,E,P,EE
INTEGER N,K
N=2
H=0.1
W=0.1
E=1.D-6
P=1.D3
EE=1.D-9
C   DATA X0/-0.7,-0.2/
X0(1)=-0.7
X0(2)=-0.2
CALL SUB0404(N,H,W,E,P,X0,A,V,Y,K,EE)
WRITE(*,*) 'X0=',X0,'Y=',Y,'K=',K
STOP
END

SUBROUTINE SUB0404(N,H,W,E,P,X,A,V,Y,K,EE)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION X(N),A(N,N),V(N),Y(N)
INTEGER IK,K1,K2,I,J,N
IK=0
22 K1=0
K2=1
CALL SUB0441(X,Y)
DO 15 I=1,N
V(I)=Y(I)
Z3=DABS(Y(I))
IF(K1 .NE. 0 .OR. Z3 .GE. E) GOTO 20
GOTO 25
20 K1=1
25 IF(K2 .EQ. 0) GOTO 15
IF(Z3 .GT. P) GOTO 30
GOTO 15
30 K2=0
15 CONTINUE
IF(K1 .EQ. 0) GOTO 35
IF(K2 .EQ. 0) GOTO 40
DO 45 I=1,N
Z3=X(I)
X(I)=Z3+H
CALL SUB0441(X,Y)
DO 50 J=1,N
50 A(J,I)=Y(J)
X(I)=Z3
45 CONTINUE
CALL SUB0501(N,A,V,EE,IE)
IF(IE .EQ. 0) GOTO 75
Z5=1.
DO 55 I=1,N
55 Z5=Z5-V(I)
IF(Z5 .EQ. 0.)GOTO 60

```

```

Z5=H/Z5
DO 65 I=1,N
65 X(I)=X(I)-V(I)*Z5
H=H*W
IK=IK+1
GOTO 22
35 K=IK
GOTO 75
40 K=-1
GOTO 75
60 K=-3
75 RETURN
END

```

```

SUBROUTINE SUB0441(X,Y)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION X(2),Y(2)
Y(1)=X(1)**2+X(2)**2-1.
Y(2)=0.75*X(1)**3-X(2)+0.9
RETURN
END

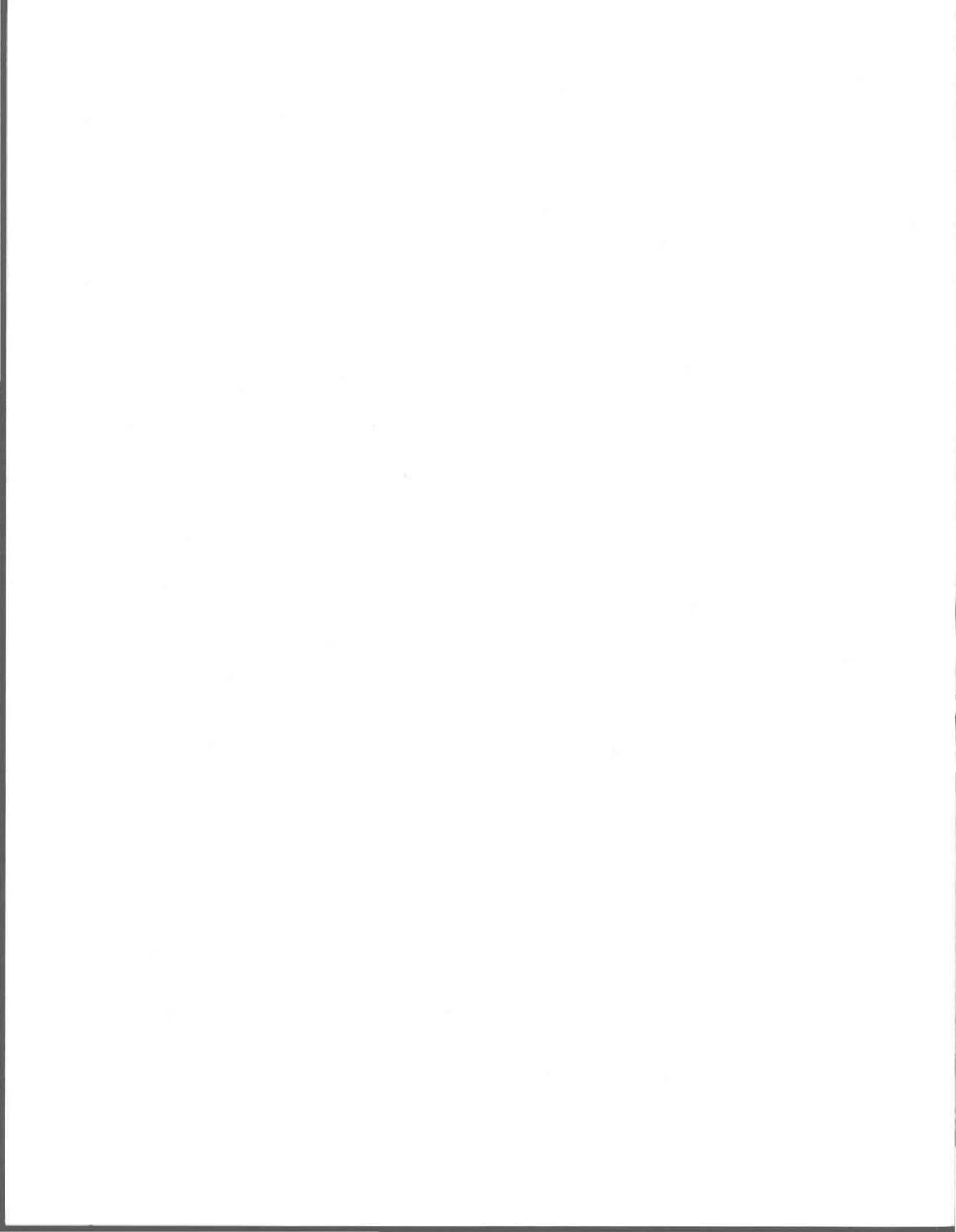
```

```

SUBROUTINE SUB0501(N,A,T,ES,IS)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION A(N,N),T(N)
INTEGER N,M,K,II,I,IS,IP,J
M=N-1
DO 10 K=1,M
C=0.
DO 5 I=K,N
IF(DABS(A(I,K)) .LE. DABS(C)) GOTO 5
C=A(I,K)
II=I
5 CONTINUE
IF (DABS(C) .GE. ES) GOTO 15
IS=0
RETURN
15 IF(II .EQ. K) GOTO 20
DO 25 J=K,N
R=A(K,J)
A(K,J)=A(II,J)
25 A(II,J)=R
R=T(K)
T(K)=T(II)
T(II)=R
20 K1=K+1
C=1./C
T(K)=T(K)*C
DO 10 J=K1,N
A(K,J)=A(K,J)*C
DO 29 I=K1,N
29 A(I,J)=A(I,J)-A(I,K)*A(K,J)
10 T(J)=T(J)-A(J,K)*T(K)
T(N)=T(N)/A(N,N)
DO 33 K=1,M
I=N-K

```

```
C=0
IP=I+1
DO 35 J=IP,N
35 C=C+A(I,J)*T(J)
33 T(I)=T(I)-C
IS=1
RETURN
END
```



```

C*****
C   NEWTON.FOR (Double precision)
C   Solution to a set of nonlinear equations using Newton
C   method
C*****
REAL*8 A(2,2),X0(2),V(2),Y(2)
REAL*8 H,W,E,P,EE
INTEGER N,K
N=2
H=0.1
W=0.1
E=1.D-6
P=1.D3
EE=1.D-9
C   DATA X0/-0.7,-0.2/
X0(1)=-0.7
X0(2)=-0.2
CALL SUB0404(N,H,W,E,P,X0,A,V,Y,K,EE)
WRITE(*,*) 'X0=',X0,'Y=',Y,'K=',K
STOP
END

SUBROUTINE SUB0404(N,H,W,E,P,X,A,V,Y,K,EE)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION X(N),A(N,N),V(N),Y(N)
INTEGER IK,K1,K2,I,J,N
IK=0
22 K1=0
K2=1
CALL SUB0441(X,Y)
DO 15 I=1,N
V(I)=Y(I)
Z3=DABS(Y(I))
IF(K1 .NE. 0 .OR. Z3 .GE. E) GOTO 20
GOTO 25
20 K1=1
25 IF(K2 .EQ. 0) GOTO 15
IF(Z3 .GT. P) GOTO 30
GOTO 15
30 K2=0
15 CONTINUE
IF(K1 .EQ. 0) GOTO 35
IF(K2 .EQ. 0) GOTO 40
DO 45 I=1,N
Z3=X(I)
X(I)=Z3+H
CALL SUB0441(X,Y)
DO 50 J=1,N
50 A(J,I)=Y(J)
X(I)=Z3
45 CONTINUE
CALL SUB0501(N,A,V,EE,IE)
IF(IE .EQ. 0) GOTO 75
Z5=1.
DO 55 I=1,N
55 Z5=Z5-V(I)
IF(Z5 .EQ. 0.)GOTO 60

```

```

      Z5=H/Z5
      DO 65 I=1,N
65  X(I)=X(I)-V(I)*Z5
      H=H*W
      IK=IK+1
      GOTO 22
35  K=IK
      GOTO 75
40  K=-1
      GOTO 75
60  K=-3
75  RETURN
      END

```

```

SUBROUTINE SUB0441(X,Y)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION X(2),Y(2)
Y(1)=X(1)**2+X(2)**2-1.
Y(2)=0.75*X(1)**3-X(2)+0.9
RETURN
END

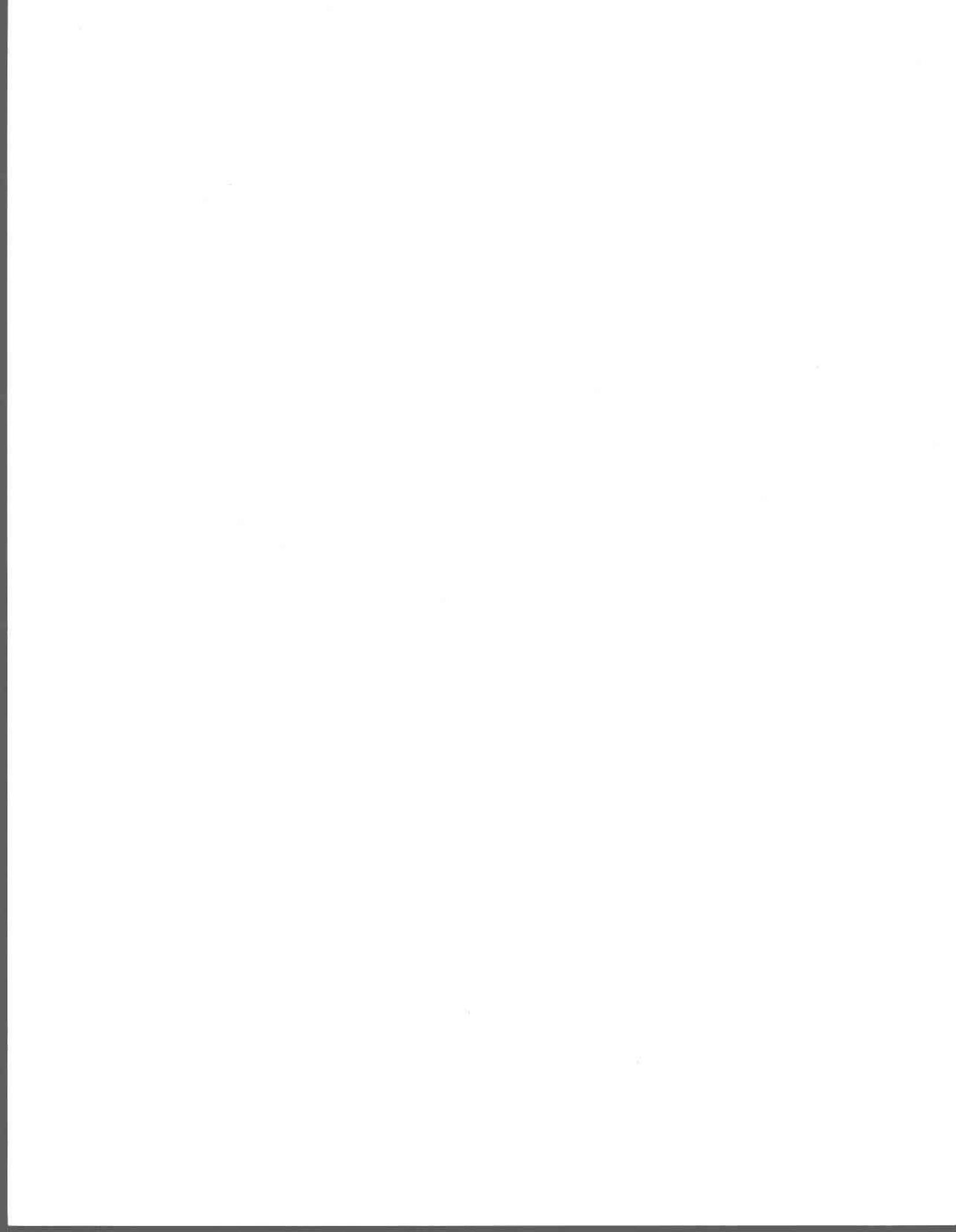
```

```

SUBROUTINE SUB0501(N,A,T,ES,IS)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION A(N,N),T(N)
INTEGER N,M,K,II,I,IS,IP,J
M=N-1
DO 10 K=1,M
  C=0.
  DO 5 I=K,N
    IF(DABS(A(I,K)) .LE. DABS(C)) GOTO 5
    C=A(I,K)
    II=I
  5 CONTINUE
  IF (DABS(C) .GE. ES) GOTO 15
  IS=0
  RETURN
15 IF(II .EQ. K) GOTO 20
  DO 25 J=K,N
    R=A(K,J)
    A(K,J)=A(II,J)
25  A(II,J)=R
    R=T(K)
    T(K)=T(II)
    T(II)=R
20  K1=K+1
    C=1./C
    T(K)=T(K)*C
    DO 10 J=K1,N
      A(K,J)=A(K,J)*C
    DO 29 I=K1,N
29  A(I,J)=A(I,J)-A(I,K)*A(K,J)
10  T(J)=T(J)-A(J,K)*T(K)
    T(N)=T(N)/A(N,N)
    DO 33 K=1,M
      I=N-K

```

```
C=0
IP=I+1
DO 35 J=IP,N
35 C=C+A(I,J)*T(J)
33 T(I)=T(I)-C
IS=1
RETURN
END
```



```

C*****
C   NEWTON.FOR (Double precision)
C   Solution to a set of nonlinear equations using Newton
C   method
C*****
REAL*8 A(2,2),X0(2),V(2),Y(2)
REAL*8 H,W,E,P,EE
INTEGER N,K
N=2
H=0.1
W=0.1
E=1.D-6
P=1.D3
EE=1.D-9
C   DATA X0/-0.7,-0.2/
X0(1)=-0.7
X0(2)=-0.2
CALL SUB0404(N,H,W,E,P,X0,A,V,Y,K,EE)
WRITE(*,*) 'X0=',X0,'Y=',Y,'K=',K
STOP
END

SUBROUTINE SUB0404(N,H,W,E,P,X,A,V,Y,K,EE)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION X(N),A(N,N),V(N),Y(N)
INTEGER IK,K1,K2,I,J,N
IK=0
22 K1=0
K2=1
CALL SUB0441(X,Y)
DO 15 I=1,N
V(I)=Y(I)
Z3=DABS(Y(I))
IF(K1 .NE. 0 .OR. Z3 .GE. E) GOTO 20
GOTO 25
20 K1=1
25 IF(K2 .EQ. 0) GOTO 15
IF(Z3 .GT. P) GOTO 30
GOTO 15
30 K2=0
15 CONTINUE
IF(K1 .EQ. 0) GOTO 35
IF(K2 .EQ. 0) GOTO 40
DO 45 I=1,N
Z3=X(I)
X(I)=Z3+H
CALL SUB0441(X,Y)
DO 50 J=1,N
50 A(J,I)=Y(J)
X(I)=Z3
45 CONTINUE
CALL SUB0501(N,A,V,EE,IE)
IF(IE .EQ. 0) GOTO 75
Z5=1.
DO 55 I=1,N
55 Z5=Z5-V(I)
IF(Z5 .EQ. 0.)GOTO 60

```

```

      Z5=H/Z5
      DO 65 I=1,N
65  X(I)=X(I)-V(I)*Z5
      H=H*W
      IK=IK+1
      GOTO 22
35  K=IK
      GOTO 75
40  K=-1
      GOTO 75
60  K=-3
75  RETURN
      END

```

```

SUBROUTINE SUB0441(X,Y)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION X(2),Y(2)
Y(1)=X(1)**2+X(2)**2-1.
Y(2)=0.75*X(1)**3-X(2)+0.9
RETURN
END

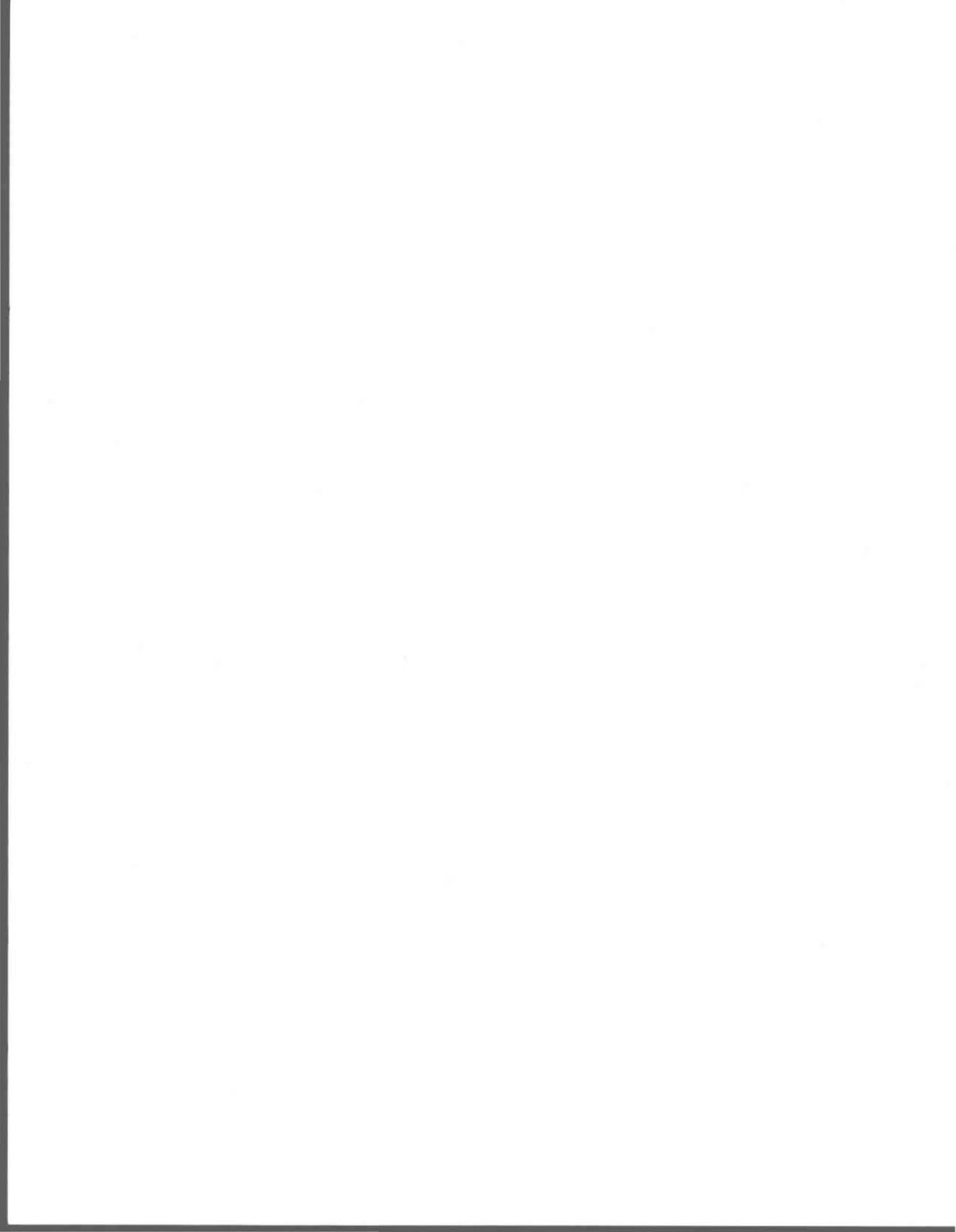
```

```

SUBROUTINE SUB0501(N,A,T,ES,IS)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION A(N,N),T(N)
INTEGER N,M,K,II,I,IS,IP,J
M=N-1
DO 10 K=1,M
  C=0.
  DO 5 I=K,N
    IF(DABS(A(I,K)) .LE. DABS(C)) GOTO 5
    C=A(I,K)
    II=I
  5 CONTINUE
  IF (DABS(C) .GE. ES) GOTO 15
  IS=0
  RETURN
15 IF(II .EQ. K) GOTO 20
  DO 25 J=K,N
    R=A(K,J)
    A(K,J)=A(II,J)
25  A(II,J)=R
    R=T(K)
    T(K)=T(II)
    T(II)=R
20  K1=K+1
    C=1./C
    T(K)=T(K)*C
    DO 10 J=K1,N
      A(K,J)=A(K,J)*C
    DO 29 I=K1,N
29  A(I,J)=A(I,J)-A(I,K)*A(K,J)
10  T(J)=T(J)-A(J,K)*T(K)
    T(N)=T(N)/A(N,N)
    DO 33 K=1,M
      I=N-K

```

```
C=0
IP=I+1
DO 35 J=IP,N
35 C=C+A(I,J)*T(J)
33 T(I)=T(I)-C
IS=1
RETURN
END
```



```

C- - - - -
C   Extended Kalman Filtering for Microleaching Process Dec. 1992.
c   ***KALMAN.FOR***           X'max, 1992 in Ste-Foy, Quebec
c
c   X(k+1)=F(k+1,k)X(k)+w(k+1)
c   Y(k)=H(k)X(k)+v(k)
c   E{w(k)w(l)}=Rw
c   E{v(k)v(l)}=Rv
c
c   Measurement update:
c
c   X(k+1/k+1)=X(k+1/k)+K(k+1)[y(k+1)-H(k+1)X(k+1/k)]
c   P(k+1/k+1)=P(k+1/k)-P(k+1/k)K(k+1)H(k+1)
c   where
c   K(k+1)=P(k+1/k)H(k+1)[H(k+1)P(k+1/k)H(k+1)+Rv]
c
c   Time update:
c
c   X(k+1/k)=F(k+1,k)X(k/k)
c   P(k+1/k)=F(k+1,k)P(k/k)F(k+1/k)+Rw
C- - - - -
DIMENSION A(3,3),C(1,3),RW(3,3),RV(1,1),P1(3,3),U(3,3),Z(3,3)
DIMENSION X(3),X1(3),X2(3),S1(1),S2(1),P(3,3),AA(3,3),BB(3),CC(3)
REAL KK(3,1),H(3),MEE(3)
REAL T,U1,VE,ME
integer w2
N=3
M=1
MRX=11
WRITE(*,*)'Initial value of X(1),X(2) AND X(3) for filtering'
c   x(1)=0.031
c   x(2)=0.0
c   x(3)=101.2
x2(1)=0.031
x2(2)=0.0
x2(3)=101.2
READ(*,*) X(1),X(2),X(3)
WRITE(*,*)'Initial observed value of X2(1),X2(2) AND X2(3)'
c   READ(*,*)X2(1),X2(2),X2(3)
C- - - - -
C   DT: Sampling Time
C   KKK: Iterating times
c   RW=Process noise (N X N)
c   C=H(k+1)
c   RV=Measurement noise (M X M)
C- - - - -
T=2.0
KKK=0
DO 10 I=1,M
DO 10 J=1,N
10 C(I,J)=0.0
C(1,1)=0.0
C(1,2)=0.0
C(1,3)=1.0
DO 20 I=1,N
DO 20 J=1,N

```

```

20 RW(I,J)=0.0
   RW(1,1)=0.25
   RW(2,2)=4.0
   RW(3,3)=4.0
   RV(1,1)=9.0
   DO 30 I=1,N
   DO 30 J=1,N
30 P(I,J)=40.0
C- -----
C   A(I,J)=df[X(k),k]/dX(k)
C   X(I)=X(k/k)
C   X1(I)=X(k+1/k)
C   X2(I)= Measurement value (process data simulated)
C- -----
1000 DO 40 I=1,N
     DO 40 J=1,N
40  A(I,J)=0.0
     A(1,1)=1+0.767*T-2.0*0.767*T*X(1)/6.43
     A(2,1)=0.358*T*X(3)/(12.04+X(3))
     A(2,2)=1.0
     A(2,3)=0.358*12.04*T*X(1)/(12.04+X(3))/(12.04+X(3))
     A(3,1)=-0.767*T/0.436-0.105*T+2.0*0.767*T*X(1)/0.436/6.43-0.358*T
&*X(3)/0.646/(12.04+X(3))
     A(3,3)=1-0.358*12.04*T*X(1)/0.646/(12.04+X(3))/(12.04+X(3))
     X1(1)=X(1)+0.767*T*X(1)*(1-X(1)/6.43)
     X1(2)=X(2)+0.358*T*X(1)*X(3)/(12.04+X(3))
     X1(3)=X(3)-0.767*T*X(1)*(1-X(1)/6.43)/0.436-0.358*T*X(1)*X(3)/0.646
&/ (12.04+X(3))-0.105*T*X(1)
     X2(1)=X2(1)+0.767*T*X2(1)*(1-X2(1)/6.43)
     X2(2)=X2(2)+0.358*T*X2(1)*X2(3)/(12.04+X2(3))
     X2(3)=X2(3)-0.767*T*X2(1)*(1-X2(1)/6.43)/0.436-0.358*T*X2(1)
&*X2(3)/0.646/(12.04+X2(3))-0.105*T*X2(1)
C- -----
C   P(k+1/k)=F(k+1/k)*P(k/k)*F(k+1/k)
C- -----
     DO 50 I=1,N
     DO 51 J=1,N
     P1(I,J)=0.0
     DO 60 K2=1,N
     V=0.0
     DO 70 K1=1,N
70  V=V+A(I,K1)*P(K1,K2)
     P1(I,J)=P1(I,J)+V*A(J,K2)
60  CONTINUE
51  CONTINUE
50  CONTINUE
C- -----
C   P(k+1/k)=F(k+1/k)*P(k/k)*F(k+1/k)+Rw
C- -----
     DO 80 I=1,N
     DO 80 J=1,N
80  P1(I,J)=P1(I,J)+RW(I,J)
c   80 write(*,81)((p1(i,j),j=1,3),i=1,3)
c   81 format(3F12.4)
C- -----
C   H(k+1)P(k+1/k)H(k+1)
C- -----

```

```

DO 90 I=1,M
DO 90 J=1,M
U(I,J)=0.0
DO 100 K2=1,N
V=0.0
DO 110 K1=1,N
110 V=V+C(I,K1)*P1(K1,K2)
U(I,J)=U(I,J)+V*C(J,K2)
100 CONTINUE
90 CONTINUE
C- - - - -
C H(k+1)P(k+1/k)H(k+1)+Rv
C- - - - -
DO 120 I=1,M
DO 120 J=1,M
Z(I,J)=U(I,J)+RV(I,J)
120 U(I,J)=U(I,J)+RV(I,J)
c write(*,*)'u(i,j)=' ,u(1,1)
C- - - - -
C Inverse of U(M,M) or
C [H(k+1)P(k+1/k)H(k+1)+Rv]
C ==> Z(M,M)
C- - - - -
CALL IVSN(Z,BB,CC,M,MEE,DE,1E-6)
C- - - - -
C P(k+1/k)H(k+1)==> U(N,M)
C- - - - -
DO 270 I=1,N
DO 280 J=1,M
U(I,J)=0.0
DO 290 K=1,N
U(I,J)=U(I,J)+P1(I,K)*C(J,K)
290 CONTINUE
280 CONTINUE
270 CONTINUE
C- - - - -
C K(k+1)= U(N,M)*Z(M,M)
C- - - - -
DO 300 I=1,N
DO 310 J=1,M
KK(I,J)=0.0
DO 320 K=1,M
c write(*,*)'U(I,K)=' ,u(i,k)
KK(I,J)=KK(I,J)+U(I,K)*Z(K,J)
320 CONTINUE
310 CONTINUE
300 CONTINUE
C- - - - -
C K(k+1)H(k+1)
C- - - - -
DO 330 I=1,N
DO 340 J=1,N
U(I,J)=0.0
DO 350 K=1,M
U(I,J)=U(I,J)+KK(I,K)*C(K,J)
350 CONTINUE
340 CONTINUE

```

```

330 CONTINUE
C- - - - -
C   Unit matrix ==>
C- - - - -
      DO 360 I=1,N
      DO 370 J=1,N
      Z(I,J)=0.0
370 CONTINUE
      Z(I,I)=1.0
360 CONTINUE
C- - - - -
C   I-K(k+1)H(k+1)
C- - - - -
      DO 380 I=1,N
      DO 380 J=1,N
380 U(I,J)=Z(I,J)-U(I,J)
C- - - - -
C   P(k+1/k+1)=[I-K(k+1)H(k+1)]P(k+1/k)
C- - - - -
      DO 390 I=1,N
      DO 390 J=1,N
      P(I,J)=0.0
      DO 400 K=1,N
      P(I,J)=P(I,J)+U(I,K)*P1(K,J)
400 CONTINUE
390 CONTINUE
C- - - - -
C   Iterating
C- - - - -
      KKK=KKK+1
      write(*,389)
389 format(2x)
      WRITE(*,*)'KKK=',KKK
      WRITE(*,*)'Gain Matrix K:'
      DO 410 I=1,N
      DO 420 J=1,M
      write(*,*)KK(I,J)
420 CONTINUE
410 CONTINUE
      WRITE(*,*)'P(I,J)='
      WRITE(*,409)((P(I,J),J=1,3),I=1,3)
409 FORMAT(3F12.4)
C-----
      DO 412 I=1,M
      CALL RANDOM(0.01,0.0,U1,MRX)
412 H(I)=X2(3)-X1(3)+u1
C-----
      DO 450 I=1,N
      X(I)=0.0
      DO 460 J=1,M
      X(I)=X(I)+KK(I,J)*H(J)
460 CONTINUE
450 CONTINUE
      DO 470 I=1,N
      X(I)=X(I)+X1(I)
470 CONTINUE
      WRITE(*,*)'Measured Value X:',X1(3)+H(1)

```

```

WRITE(*,*)'Calculated Value X:'
DO 480 I=1,N
WRITE(*,*)X(I)
480 CONTINUE
write(*,*)'Measurements X2:'
write(*,*)(x2(i),i=1,3)
IF (KKK.GT.15) GOTO 1001
GOTO 1000
1001 CONTINUE
STOP
END

```

```

SUBROUTINE RANDOM(VA,ME,R1,MRX)
REAL ME,R1
INTEGER A
M=32768
A=179
R1=0.0
DO 10 I=1,12
MRX=MOD(A*MRX,M)
R=REAL(MRX)/REAL(M)
10 R1=R1+R-0.5
R1=ME+VA*r1
return
end

```

```

SUBROUTINE IVSN(A,B,C,N,ME,DE,EP)
DIMENSION A(N,N),ME(N),B(N),C(N)
DE=1.0
DO 10 J=1,N
10 ME(J)=J
DO 20 I=1,N
Y=0.0
DO 30 J=I,N
IF(ABS(A(I,J)).LE.ABS(Y)) GOTO 30
K=J
Y=A(I,J)
30 CONTINUE
DE=DE*Y
IF(ABS(Y).LT.EP) STOP 4444
Y=1.0/Y
DO 40 J=1,N
C(J)=A(J,K)
A(J,K)=A(J,I)
A(J,I)=-C(J)*Y
B(J)=A(I,J)*Y
40 A(I,J)=A(I,J)*Y
A(I,I)=Y
J=ME(I)
ME(I)=ME(K)
ME(K)=J
DO 11 K=1,N
IF(K.EQ.I) GOTO 11
DO 12 J=1,N
IF(J.EQ.I) GOTO 12
A(K,J)=A(K,J)-B(J)*C(K)

```

```
12 CONTINUE
11 CONTINUE
20 CONTINUE
   DO 33 I=1,N
   DO 44 K=1,N
     IF(ME(K).EQ.I) GOTO 55
44 CONTINUE
55 IF(K.EQ.I) GOTO 33
   DO 66 J=1,N
     W=A(I,J)
     A(I,J)=A(K,J)
66 A(K,J)=W
     IW=ME(I)
     ME(I)=ME(K)
     ME(K)=IW
     DE=-DE
33 CONTINUE
   RETURN
   END
```