



# Modélisation du respiromètre hybride : *Rapport de projet*

---

Présenté à :  
Prof. Peter Vanrolleghem

Préparé par :  
Isabelle Liard

*modelEAU*, chaire de recherche du Canada en modélisation de la qualité de l'eau  
Département de génie civil  
Université Laval

21 août 2009



## Table des matières

Introduction.....	4
Problématique (contexte du projet).....	4
Objectifs du projet.....	4
Concept de respiromètre hybride .....	5
Quelques définitions .....	5
A quoi sert la respirométrie ?.....	5
Principe de respiromètre hybride .....	6
Déroulement du projet.....	7
Méthodologie, résultats et analyse.....	7
Modèle utilisé.....	7
Configuration pour le respiromètre hybride «ultime».....	8
Paramètres modifiés par rapport aux valeurs par défaut de WEST.....	10
Résultats de la simulation dite en régime permanent .....	16
Ajout de substrat .....	17
Inversion du débit après stabilisation de l’oxygène dissous - Capteurs d’ordre 1.....	18
Inversion du débit après stabilisation de l’oxygène dissous - Capteurs d’ordre > 1.....	21
Échelon de débit après stabilisation de l’oxygène dissous – Capteurs idéaux.....	23
Échelon de débit après stabilisation de l’oxygène dissous – Capteurs d’ordre 1 .....	27
Étapes restantes du projet .....	29
Conclusion .....	29
Références.....	29
Annexe I : Quelques problèmes rencontrés et solutions trouvées.....	30
WEST.....	30
Illustration du problème de volumes .....	31

## Liste des tableaux

<b>Tableau 1</b> Valeurs des paramètres communs.....	12
<b>Tableau 2</b> Valeurs des paramètres spécifiques au nœud «AT» .....	13
<b>Tableau 3</b> Valeurs des variables spécifiques au nœud «AT» .....	13
<b>Tableau 4</b> Valeurs des paramètres spécifiques au nœud «RC» .....	15
<b>Tableau 5</b> Valeurs des variables spécifiques au nœud «RC» .....	15
<b>Tableau 6</b> Valeurs des paramètres spécifiques au nœud «Response Time 1».....	18
<b>Tableau 7</b> Valeurs des paramètres spécifiques au nœud «Response Time 2».....	18

<b>Tableau 8</b> Valeurs des paramètres spécifiques au nœud «Flowrate Change» .....	18
<b>Tableau 9</b> Résultats du script <i>Inv_slmt.m</i> pour une inversion de débit à 70min.....	21
<b>Tableau 10</b> Résultats du script <i>Inv_slmt_opt.m</i> pour une inversion de débit à 70min avec $T_{stop2}=71min$ ..	21
<b>Tableau 11</b> Résultats optimaux du script <i>Inv_slmt_mltpn_opt.m</i> pour une l'inversion de débit à 70min.....	22
<b>Tableau 12</b> Résultats du script <i>ECH_slmt_ideaux_opt_Tstop.m</i> pour un échelon de débit à 70minutes .....	24
<b>Tableau 13</b> Résultats du script <i>ECH_slmt_ideaux.m</i> pour un échelon de débit à 70minutes où $T_{stop}$ est estimé à 100 minutes .....	24
<b>Tableau 14</b> Résultats du script <i>ECH_slmt_ideaux_opt_RTf.m</i> pour un échelon de débit à 70minutes où $T_{stop}$ est estimé à 87.5 minutes .....	25
<b>Tableau 15</b> Résultats des différents scripts pour un échelon de débit à 70minutes et une $M(S_S)_{t=0}=0.05g/L$ .....	26

## Liste des figures

<b>Figure 1</b> Configuration finale pour le respiromètre hybride «ultime», avec trajets empruntés par l'eau avant et après l'inversion de débit.....	8
<b>Figure 2</b> Trajet emprunté par l'eau avant l'inversion de débit.....	9
<b>Figure 3</b> Trajet emprunté par l'eau après l'inversion de débit.....	9
<b>Figure 4</b> Perte d'eau dans les Loop Breakers .....	11
<b>Figure 5</b> Cycle de la biomasse hétérotrophe.....	11
<b>Figure 6</b> Comportements des concentrations des composés en régime permanent.....	16
<b>Figure 7</b> Comportements des concentrations des composés après ajout de 0.1g de substrat .....	17
<b>Figure 8</b> Configuration de l'intégrateur ( <i>Integrator</i> ).....	19
<b>Figure 9</b> Problèmes numériques engendrés par un trop grand écart des pas de temps avec la méthode RK4ASC .....	20
<b>Figure 10</b> Réaction des capteurs à l'inversion de débit (inversion des concentrations).....	20
<b>Figure 11</b> Réaction des capteurs idéaux à l'échelon de débit (échelon de concentration) .....	23
<b>Figure 12</b> Comparaison entre les concentrations simulées et approximées pour le script <i>ECH_slmt_ideaux_opt_Tstop.m</i> .....	24
<b>Figure 13</b> Comparaison entre les concentrations simulées et approximées pour le script <i>ECH_slmt_ideaux.m</i> .....	25
<b>Figure 14</b> Comparaison entre les concentrations simulées et approximées pour le script <i>ECH_slmt_ideaux_opt_RTf.m</i> .....	26
<b>Figure 15</b> Réaction des capteurs d'ordre 1 à l'échelon de débit (échelon de concentration).....	27
<b>Figure 16</b> Comparaison entre les concentrations simulées et approximées pour le script <i>ECH_slmt_ordre1_opt_RTf.m</i> .....	28

## Introduction

Étudiante au baccalauréat en génie des eaux à l'Université Laval, Isabelle Liard a effectué un stage de 16 semaines sous la supervision du professeur Peter Vanrolleghem à l'été 2009.

## Problématique (contexte du projet)

Parce que les processus intervenant dans les eaux usées et boues activées affectent le bilan de masse de l'oxygène, la respirométrie (mesure et interprétation des taux de respiration) peut permettre de caractériser ces dynamiques. Depuis le développement du concept de respiromètre hybride «ultime» dans les années 90, de nombreux essais ont été réalisés afin de construire un tel respiromètre, sans succès complet.

L'avènement d'un nouveau type de capteurs d'oxygène dissous pourrait permettre à une nouvelle tentative de mise en œuvre de réussir là où Petersen (2000) avait éprouvé des difficultés.

## Objectifs du projet

Le projet consistait à modéliser le respiromètre hybride «ultime» à l'aide du logiciel WEST (MOSTforWATER, Kortrijk, Belgique) et à en optimiser le design et l'opération en vue. Il s'agissait aussi de créer une méthodologie simple et automatisée d'interprétation des données produites avec le respiromètre hybride.

# Concept de respiromètre hybride

## Quelques définitions

### Respiromètre

Instrument ou système qui mesure le taux de respiration (ou taux de consommation d'oxygène, en anglais OUR) d'une biomasse.

### Respirogramme

Graphique du taux de respiration en fonction du temps. Un cycle correspond à une période allant de l'injection spontanée de substrat au retour à la respiration endogène.

### Respirométrie

Mesure et interprétation des taux de respiration.

On obtient le taux de respiration par bilan de masse dans la phase liquide, en mesurant la concentration d'oxygène dissous à l'aide de sondes.

## A quoi sert la respirométrie ?

Caractériser des eaux usées et des boues activées à partir du seul taux de respiration. Les caractéristiques qu'on souhaite déduire sont nombreuses :

- Paramètres cinétiques (vitesses de réaction, de croissance, de dégradation, d'hydrolyse ; coefficients de saturation)
- Coefficients stœchiométriques (rendements)
- Compositions des eaux usées et des boues activées (concentration des substrats, COD)

### ***Dans le cadre de ce projet :***

On cherchait plutôt à identifier les caractéristiques du montage (débit de la pompe, coefficient d'aération  $K_L a$ , constante de temps de réponse des capteurs d'oxygène dissous) pendant l'expérience, afin de s'assurer que les variations au cours d'une même expérience et d'une expérience à l'autre sont faibles. En effet, des valeurs erronées de  $K_L a$  et  $Q$  entraînent des taux de respiration erronés dans les **équations 1 et 2**, et l'erreur se propage entre autres sur l'estimation du taux de croissance maximal (**équation 3**) (Vanrolleghem and Spanjers, 1998).

Taux de respiration dans un réacteur LFS :

$$OUR = K_L a (S_0^{sat} - S_0) - \frac{dS_0}{dt} \quad (1)$$

Taux de respiration dans un réacteur LSF :

$$OUR = \frac{Q}{V} (S_{0,in} - S_0) - \frac{dS_0}{dt} \quad (2)$$

Estimation du taux de croissance maximal :

$$\mu_{\max} = Y_H \frac{OUR_{\max}}{(1-Y_H) \cdot X_{BH}} = Y_H \frac{\frac{Q}{V}(S_{0,\text{in}} - S_0) - \frac{dS_0}{dt}}{(1-Y_H) \cdot X_{BH}} \quad \text{ou} \quad Y_H \frac{K_L a(S_0^{\text{sat}} - S_0) - \frac{dS_0}{dt}}{(1-Y_H) \cdot X_{BH}} \quad (3)$$

Il vaut donc mieux ajuster un modèle global décrivant à la fois le fonctionnement de l'appareillage et les processus biologiques aux données brutes que travailler sur des données dérivées.

## Principe de respiromètre hybride

La procédure d'opération du respiromètre hybride a été intentionnellement conçue pour permettre l'estimation des constantes de l'appareillage pendant l'expérience. Elle a été développée par Vanrolleghem et Spanjers (1998).

### *Pourquoi «hybride» ?*

La méthode combine 2 principes : un réacteur à boues activées aéré LFS (**Aeration tank, AT**) et un autre réacteur fermé et non aéré LSF (**Respiration chamber, RC**). Les désavantages de chaque principe sont donc minimisés et la précision et la fréquence de mesure sont ainsi améliorées. Les boues activées circulent entre les deux réacteurs. L'injection d'eau usée a lieu dans le réacteur aéré. L'équation de bilan de masse est de la même forme pour chaque réacteur :

$$\text{Dans le AT : } \frac{dS_{0,1}}{dt} = \frac{Q}{V_1}(S_{0,2} - S_{0,1}) + K_L a(S_0^{\text{sat}} - S_{0,1}) - OUR_1 \quad (4)$$

$$\text{Dans le RC : } \frac{dS_{0,2}}{dt} = \frac{Q}{V_2}(S_{0,1} - S_{0,2}) - OUR_2 \quad (5)$$

Une sonde à OD est placée dans chaque canalisation reliant les deux réacteurs. Ainsi, elles sont soumises à des changements radicaux d'OD lors de l'inversion de débit, ce qui permet d'évaluer leur temps de réponse. Le fait d'avoir deux mesures indépendantes de l'OD (en deux endroits différents) augmente la qualité de l'estimation des paramètres. On inverse le courant à la fin de chaque respirogramme. Chaque sonde devrait ainsi normalement prendre la valeur de l'autre sonde avant la redirection, autrement on en déduit qu'une des sondes a dérivé et qu'une recalibration est de mise. La dérive d'une sonde peut par exemple être causée par l'encrassement, ou par un débit trop élevé.

## Déroulement du projet

Le projet a suivi les étapes suivantes :

1. Modélisation et optimisation du respiromètre hybride «ultime<sup>1</sup>»
  - a. Initiation au logiciel WEST
  - b. Expérimentation avec des modèles existants dans WEST
  - c. Modélisation d'un bassin aéré où circulent les boues activées
  - d. Ajout d'une chambre de respiration (bassin non aéré) connectée au bassin aéré
  - e. Ajout des capteurs à oxygène dissous idéaux, dans une configuration simple
  - f. Établissement de la configuration pour l'inversion de débit avec un capteur
  - g. Établissement de la configuration finale pour le changement de débit avec les deux capteurs (respiromètre hybride «ultime»)
  - h. Validation du modèle avec des données expérimentales obtenues à BIOMATH (U.Gent, Belgique)
  - i. Établissement des paramètres d'opération optimaux du modèle
  - j. Ajout de temps de réponse et de bruit aux capteurs pour les rendre réalistes
2. Interprétation des données produites
  - a. Création de scripts analysant les résultats obtenus lors des simulations avec WEST à l'aide de MATLAB

## Méthodologie, résultats et analyse

### Modèle utilisé

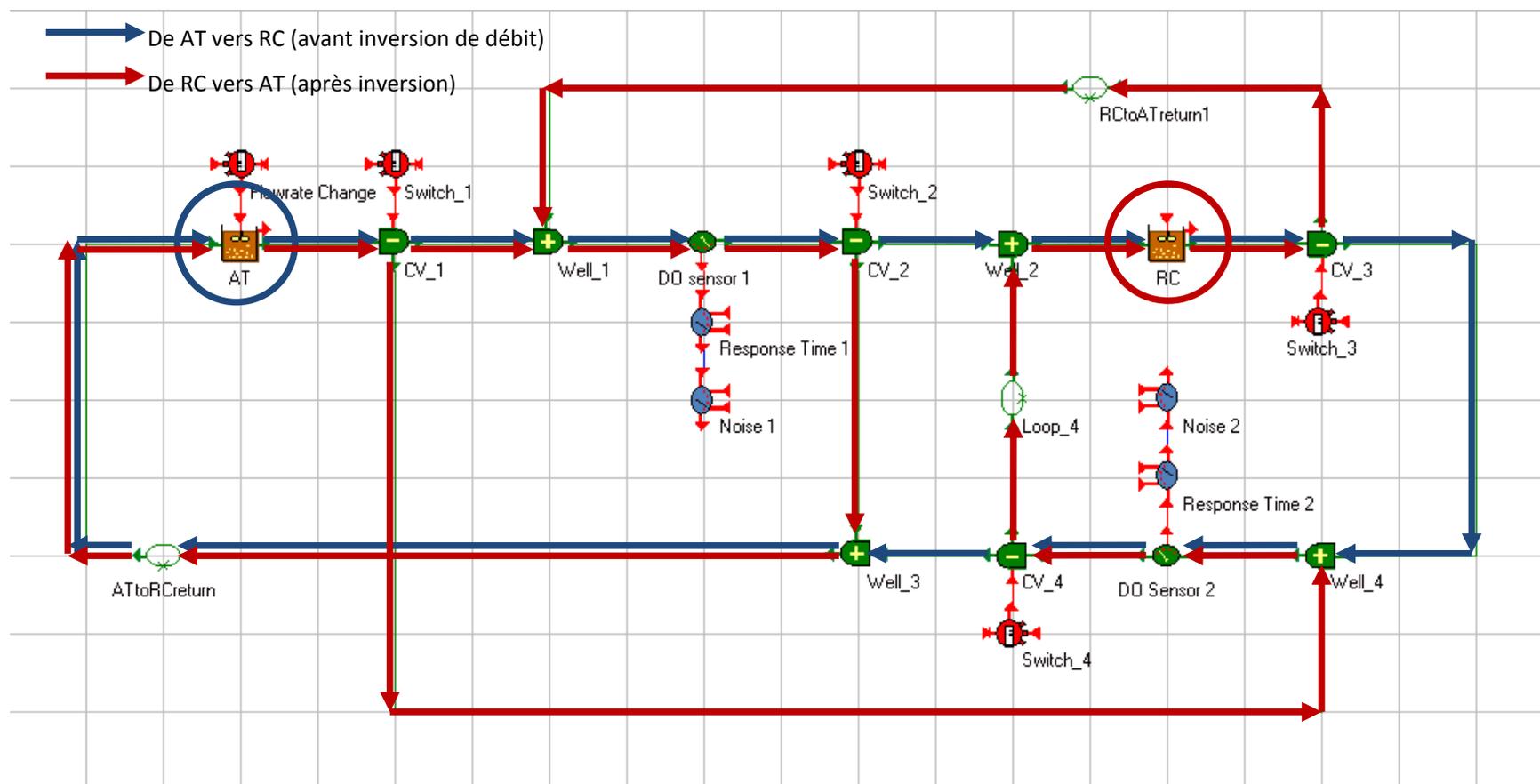
Les configurations ont été établies avec le modèle ASM1 dans le logiciel WEST (MOSTforWATER, Kortrijk, Belgique).

---

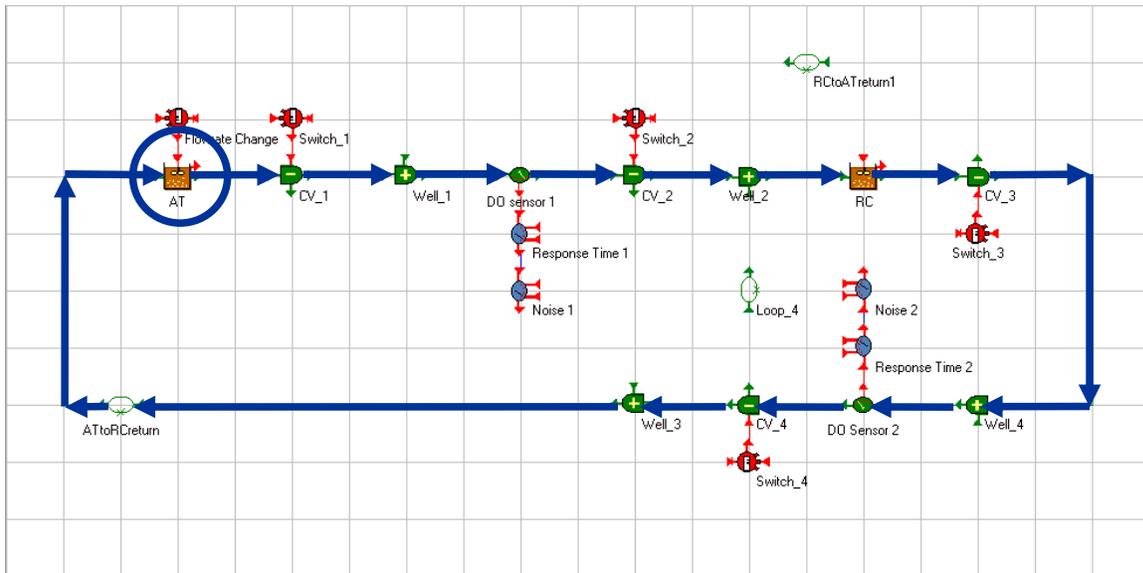
<sup>1</sup> Nom tiré de Petersen (2000).

## Configuration pour le respiromètre hybride «ultime»

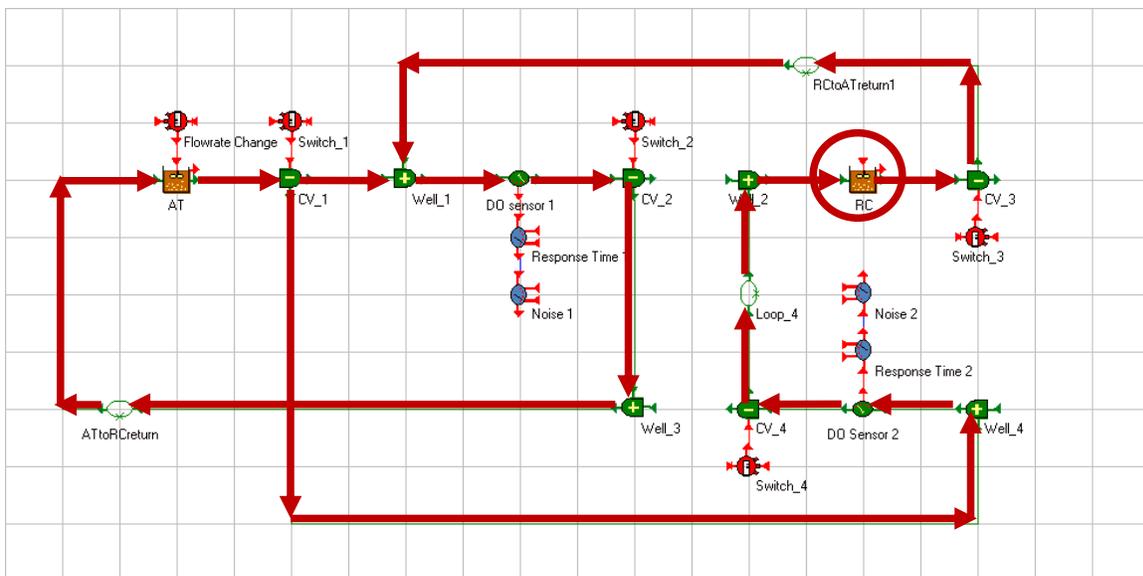
La configuration WEST finale pour le respiromètre hybride «ultime» est représentée aux **figures 1 à 3**.



**Figure 1** Configuration finale pour le respiromètre hybride «ultime», avec trajets empruntés par l'eau avant et après l'inversion de débit



**Figure 2** Trajet emprunté par l'eau avant l'inversion de débit



**Figure 3** Trajet emprunté par l'eau après l'inversion de débit

## Paramètres modifiés par rapport aux valeurs par défaut de WEST

**Remarque :** Les paramètres dits *communs* sont modifiés dans le nœud global AT-RC-1DOSS (dans l'onglet *Model* du *Experimentation Environment*). Les valeurs modifiées des paramètres communs sont présentées au **tableau 1**. Les paramètres dits *spécifiques* sont modifiés directement dans chaque nœud concerné et sont expliqués séparément.

### Paramètres communs aux nœuds «Switch»

#### T1 (First period) :

La première période se termine quand on fait l'inversion de débit, soit quand un respirogramme complet (cycle descente-montée, up-down) est terminé, c'est-à-dire que tout le substrat a été dégradé et les deux réacteurs sont revenus à une concentration d'oxygène dissous stable (en équilibre). La durée de cette période augmente avec la masse initiale de substrat injectée dans le AT.

#### T2 (Second period) :

Cette période doit être assez longue pour durer jusqu'à la fin de la simulation (voir la durée dans l'Integrator), à moins qu'il y ait un second changement de débit prévu dans l'expérience.

#### u11 (Output in the first period) :

Ce paramètre représente la fraction des boues activées qui sont dérivées dans la branche d'inversion avant inversion. Ce paramètre vaut donc 0.

#### u12 (Output in the second period) :

Ce paramètre représente la fraction des boues activées qui sont dérivées dans la branche d'inversion après inversion. Ce paramètre vaut donc 1 (toutes les boues passent par le chemin d'inversion).

### Paramètres communs aux nœuds «Loop Breakers»

#### Tau (Implicit loop breaker time constant) :

Le problème est qu'on perd une partie importante de l'eau des réacteurs dans les Loop Breakers, même dès la première boucle de simulation (durée de l'expérience posée à 0 dans l'Integrator). En effet, en raison du délai exponentiel induit par chaque Differential Loop Breaker, le débit sortant de celui-ci n'atteint pas la valeur du débit demandée avant 43.2 s (valeur par défaut dans WEST), donc entre 0 et 43.2 s, la différence entre l'entrée du Loop Breaker (débit demandé) et le débit sortant fait perdre «numériquement» une partie importante de la masse d'eau du système (**figure 4**). Les temps de réponse des capteurs d'OD étant généralement du même ordre de temps (moins d'une minute), il vaut mieux réduire la constante de temps des Loop Breakers au minimum si on ne veut pas perdre beaucoup d'information. De plus, laisser une aussi grande constante de temps ferait que l'entrée dans les nœuds se ferait avec un ordre premier, ce qui compliquerait l'analyse des dynamiques lors du changement de débit. On utilise donc une constante  $Tau=1s$  pour minimiser l'effet des Loop Breakers.

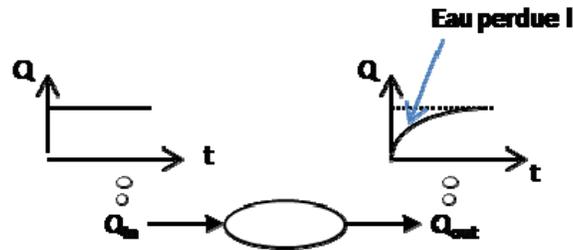


Figure 4 Perte d'eau dans les Loop Breakers

### Paramètres communs aux réacteurs «AT» et «RC»

$b_h$  (Decay Coefficient for Heterotrophic Biomass),  $k_h$  (Maximum Specific Hydrolysis Rate) et  $\mu_H$  (Maximum Specific Growth Rate) :

On commence par chercher à atteindre un régime permanent dans le système, pour observer la respiration endogène).  $b_h$  détermine à quel taux  $X_{BH}$  est dégradé en  $X_S$ ,  $k_h$  détermine à quel taux  $X_S$  sera hydrolysé en  $S_S$ , et  $\mu_H$  détermine à quel taux  $S_S$  est transformé en  $X_{BH}$  (**figure 5**). On ajuste ces trois valeurs jusqu'à atteindre une valeur à peu près stable pour  $X_S$ ,  $S_S$ ,  $S_{NH}$  et OUR (endogène). En fait, on recherche une valeur de OUR endogène de quelques mg/L\*h, soit environ 0.15mg/L\*min.

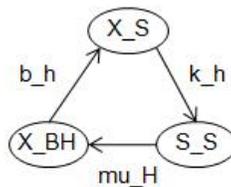


Figure 5 Cycle de la biomasse hétérotrophe

$K_S$  (Half-Saturation Coefficient for Heterotrophic Biomass) :

La valeur choisie est tirée de l'expérience décrite à la p.119 de la thèse de doctorat de Petersen (2000). On met un  $K_S$  faible pour s'assurer d'atteindre le taux de dégradation maximal dès l'injection de substrat (temps  $t=0$ ).

$\mu_A$  (Maximum Specific Growth Rate for Autotrophic Biomass) :

Afin d'éviter la nitrification (qui compliquerait l'analyse des respirogrammes), on met  $\mu_A$  à 0, ce qui revient à inhiber la croissance des autotrophes par l'ajout de ATU (allyl-thiourea).

**Tableau 1** Valeurs des paramètres communs

Name △	Description	Value	Unit	Default Value
Group : Composition parameters				
i_X_B	Mass of Nitrogen Per Mass of COD In Biomass	0.086	gN/gCOD	0.086
i_X_P	Mass of Nitrogen Per Mass of COD in Products Formed	0.06	gN/gCOD	0.06
Group : Conversion factors				
F_BOD_COD	Conversion Factor BOD/COD	0.65	-	0.65
F_TSS_COD	Fraction TSS/COD	0.75	-	0.75
Group : Kinetic				
b_A	Decay Coefficient for Autotrophic Biomass	0.01	1/d	0.01
b_H	Decay Coefficient for Heterotrophic Biomass	0.3	1/d	0.4
k_a	Maximum Specific Ammonification Rate	0.06	m3/(gCOD*d)	0.06
k_h	Maximum Specific Hydrolysis Rate	1.5	gCOD/(gCOD*d)	2
K_NH	Ammonia Half-Saturation Coefficient for Autotrophic Biomass	1	gNH3-N/ m3	1
K_NO	Nitrate Half-Saturation Coefficient for Denitrifying Heterotrophic Biomass	0.5	gNO3-N/ m3	0.5
K_OA	Oxygen Half-Saturation Coefficient for Autotrophic Biomass	0.4	gO2/ m3	0.4
K_OH	Oxygen Half-Saturation Coefficient for Heterotrophic Biomass	0.2	gO2/ m3	0.2
K_S	Half-Saturation Coefficient for Heterotrophic Biomass	0.5	gCOD/ m3	20
K_X	Half-Saturation Coefficient for Hydrolysis Of Slowly Biodegradable Biomass	0.02	gCOD/gCOD	0.02
mu_A	Maximum Specific Growth Rate for Autotrophic Biomass	0	1/d	0.55
mu_H	Maximum Specific Growth Rate for Heterotrophic Biomass	1	1/d	4
n_g	Correction Factor for Anoxic Growth of Heterotrophs	0.8	-	0.8
n_h	Correction Factor for Anoxic Hydrolysis	0.4	-	0.4
S_O_Sat	Oxygen saturation concentration	8	mg/L	8
Group : Miscellaneous				
Tau	Implicit loop breaker time constant, d	1	s	43.2
Group: Operational				
T1	First period	70	min	180
T2	Second period	70	min	180
u11	Output in the first period	0	-	10
u12	Output in the second period	1	-	50
Group: Stoichiometry				
f_P	Fraction Of Biomass Converted To Inert Matter	0.08	-	0.08
Y_A	Yield for Autotrophic Biomass	0.24	gCOD/gN	0.24
Y_H	Yield for Heterotrophic Biomass	0.67	gCOD/gCOD	0.67

Légende :  Valeurs modifiées par rapport aux valeurs par défaut données dans WEST (voir explications ci-haut)

## Paramètres et variables spécifiques au nœud «AT»:

**Tableau 2** Valeurs des paramètres spécifiques au nœud «AT»

Name $\Delta$	Description	Value	Unit	Default Value
Group: Operational				
Kla	Oxygen Transfer Coefficient	300	1/d	50
V_Max	Maximum volume of the tank	2.1	L	0
V_Min	Minimum volume of the tank	1.8	L	0

**Tableau 3** Valeurs des variables spécifiques au nœud «AT»

Name $\Delta$	Description	Value	Unit	Default Value
Category : DERIVED STATE				
M(H2O)	Vector containing masses for all the components	2000	-	1000000000
M(S_ALK)	Vector containing masses for all the components	1.6	-	1
M(S_I)	Vector containing masses for all the components	1E-6	-	1
M(S_ND)	Vector containing masses for all the components	1E-6	-	1
M(S_NH)	Vector containing masses for all the components	0.02	-	1
M(S_NO)	Vector containing masses for all the components	1E-6	-	2
M(S_O)	Vector containing masses for all the components	0.0145	-	1
M(S_S)	Vector containing masses for all the components	0.00024	-	2
M(X_BA)	Vector containing masses for all the components	0.04	-	100
M(X_BH)	Vector containing masses for all the components	4	-	1000
M(X_I)	Vector containing masses for all the components	1E-6	-	1
M(X_ND)	Vector containing masses for all the components	1E-6	-	1
M(X_P)	Vector containing masses for all the components	1E-6	-	1
M(X_S)	Vector containing masses for all the components	0.018	-	1

**Remarque :** Les unités utilisées sont en SI, donc les masses sont en g.

### Explications des modifications :

#### Kla (Oxygen Transfer Coefficient)

On met Kla à 300 d<sup>-1</sup> afin d'atteindre des concentrations d'oxygène dissous «normales» et éviter l'anoxie (moins de 3mg/L d'OD) lors de l'injection de substrat. Cela permet d'éviter certains processus indésirés.

#### V\_Max et V\_Min (Volume of the tank)

Le volume désiré pour le RODTOX est de 2L. Ces valeurs ont été éprouvées pour assurer un bon fonctionnement de la boucle sans qu'il y ait de problème avec les Loop Breakers ou avec le débit lors de l'inversion. Les problèmes rencontrés sont d'ailleurs illustrés à l'**annexe 1**.

**Note :** Ces contraintes de volumes sont optimales pour les débits utilisés ou inférieurs, mais ne fonctionnent pas nécessairement pour des débits supérieurs (à étudier).

### Masses initiales des composants

M(H<sub>2</sub>O):

On veut que le réacteur contienne un volume de 2L d'eau usée (1000gH<sub>2</sub>O=1L).

M(S<sub>I</sub>), M(X<sub>I</sub>) :

S<sub>I</sub> et X<sub>I</sub> n'affectent à peu près rien (ils ne font partie d'aucun processus de ASM1). On peut donc mettre des valeurs faibles (1E-6 par exemple) à M(S<sub>I</sub>) et M(X<sub>I</sub>) pour être sûr.

M(X<sub>BA</sub>):

On garde le rapport X<sub>BA</sub>/X<sub>BH</sub>=0.1.

M(X<sub>BH</sub>) :

On choisit une concentration arbitraire de 2g/L.

M(S<sub>NO</sub>) :

Ce paramètre varie très peu parce qu'on inhibe la croissance autotrophe (à condition de ne pas tomber en conditions anoxiques au cours de l'expérience). On peut donc mettre des valeurs faibles (1E-6 par exemple) à M(S<sub>NO</sub>) pour être sûr.

M(S<sub>ND</sub>) et M(X<sub>ND</sub>):

Ces paramètres jouent un rôle dans l'hydrolyse de l'azote et dans l'ammonification. On leur met des valeurs faibles (1E-6 par exemple) pour ne pas qu'ils affectent S<sub>NH</sub>.

M(X<sub>P</sub>) :

Ce composé est inerte et n'affecte pas la respiration, mais on lui met une valeur faible (1E-6 par exemple) semblable aux autres composés dont on ne tient pas compte.

M(S<sub>ALK</sub>), M(S<sub>O</sub>), M(S<sub>S</sub>), M(X<sub>S</sub>)

Il ne sert à rien de mettre une M(S<sub>O</sub>) initiale plus grande que 16mg, car la concentration de saturation S<sub>O\_sat</sub> est de 8mg/L\*2L=16mg=0.016g. Si M(S<sub>O</sub>) est trop grand, on atteindra des valeurs impossibles de DO (plus grandes que la borne maximale) en cours de simulation. On obtient les valeurs indiquées dans le tableau ci-haut en les ajustant jusqu'à atteindre une valeur à peu près stable pour X<sub>S</sub>, S<sub>S</sub>, S<sub>NH</sub> et OUR (endogène). Une fois ce «régime permanent» atteint, on copie les valeurs dérivées comme valeurs initiales de la simulation avec injection de substrat pour ces variables. Il est normal qu'il y ait une différence initiale de C(S<sub>O</sub>) entre les deux réacteurs avant l'injection de substrat.

M(S<sub>NH</sub>)

En prévision de l'ajout de substrat S<sub>S</sub>, il faut ajouter du S<sub>NH</sub> pour permettre une faible croissance hétérotrophe, autrement les concentrations deviennent négatives car en ASM1, il n'y a pas de limitation de la croissance par manque de NH<sub>4</sub>-H.

## Paramètres et variables spécifiques au nœud «RC»:

**Tableau 4** Valeurs des paramètres spécifiques au nœud «RC»

Name △	Description	Value	Unit	Default Value
Group: Dimension				
Vol	Volume of the tank	0.5	L	1000000
Group: Operational				
Kla	Oxygen Transfer Coefficient	0	1/d	50

**Tableau 5** Valeurs des variables spécifiques au nœud «RC»

Name △	Description	Value	Unit	Default Value
Category : DERIVED STATE				
M(H2O)	Vector containing masses for all the components	500	-	1000000000
M(S_ALK)	Vector containing masses for all the components	1	-	1
M(S_I)	Vector containing masses for all the components	1E-6	-	1
M(S_ND)	Vector containing masses for all the components	1E-6	-	1
M(S_NH)	Vector containing masses for all the components	0.005	-	1
M(S_NO)	Vector containing masses for all the components	1E-6	-	2
M(S_O)	Vector containing masses for all the components	0.00345	-	1
M(S_S)	Vector containing masses for all the components	6E-5	-	2
M(X_BA)	Vector containing masses for all the components	0.01	-	100
M(X_BH)	Vector containing masses for all the components	1	-	1000
M(X_I)	Vector containing masses for all the components	1E-6	-	1
M(X_ND)	Vector containing masses for all the components	1E-6	-	1
M(X_P)	Vector containing masses for all the components	1E-6	-	1
M(X_S)	Vector containing masses for all the components	0.0025	-	1

**Remarque :** Les unités utilisées sont en SI, donc les masses sont en g.

### Explications des modifications :

#### Kla (Oxygen Transfer Coefficient)

Il s'agit d'un réacteur non aéré (pas de phase gazeuse non plus), donc on met Kla à 0.

#### Vol (Volume of the tank)

Le volume désiré pour la chambre de respiration est de 0.5L.

#### Masses initiales des composants :

M(H2O):

On veut que le réacteur contienne un volume de 0.5L d'eau usée (1000g=1L → 0.5L=500g)

M(S\_I), M(X\_I), M(X\_BA), M(X\_BH), M(S\_NO), M(S\_ND), M(X\_ND), M(X\_P), M(S\_ALK), M(S\_NH), M(S\_O), M(S\_S) et M(X\_S) :

Voir explications pour le AT.

## Résultats de la simulation dite en régime permanent

Avec les valeurs modifiées, une simulation représentant l'atteinte d'un régime permanent est effectuée, et les graphiques suivants sont obtenus :

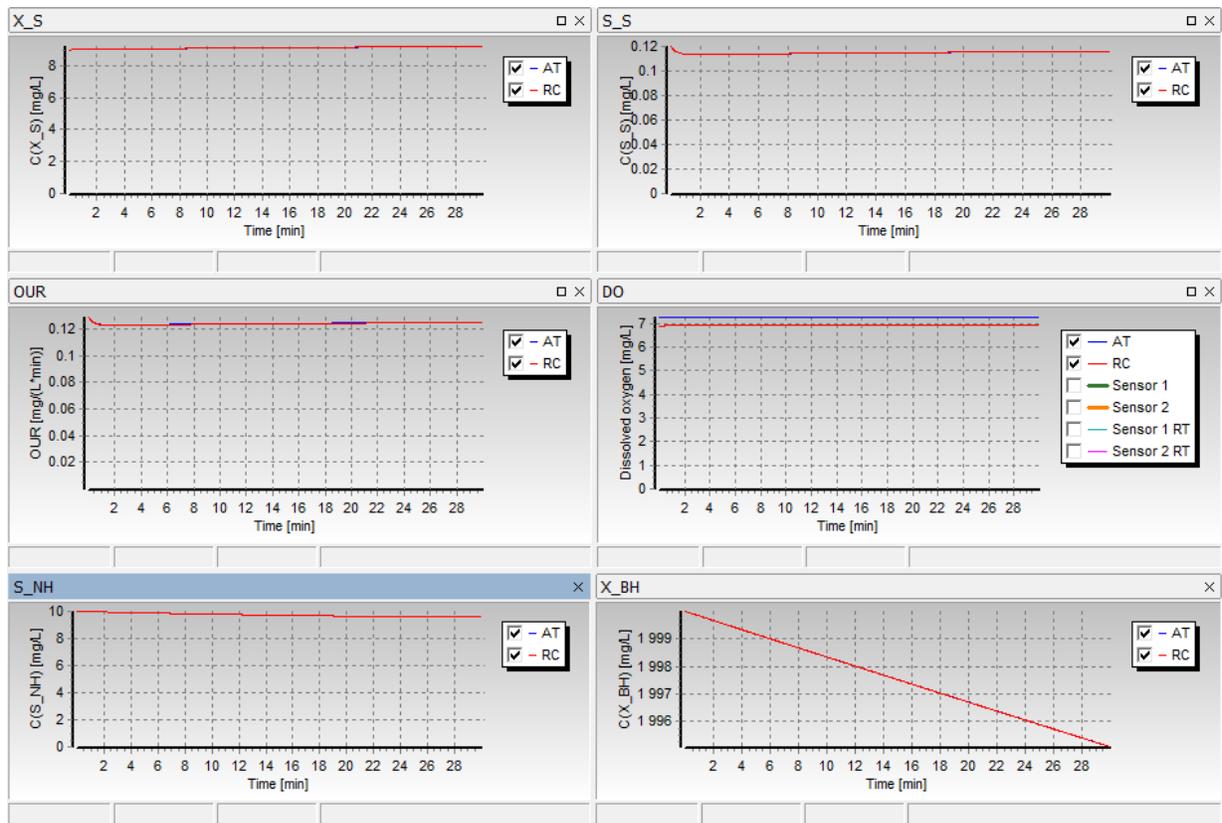


Figure 6 Comportements des concentrations des composés en régime permanent

## Ajout de substrat

Le substrat employé est S\_S (substrat carboné), représentatif de l'acétate. La quantité de S\_S présent en régime permanent est négligeable par rapport à la quantité ajoutée, donc on n'en tient pas compte.

Lorsque du S\_S est ajouté, il faut ajouter du S\_NH aussi pour permettre une faible croissance hétérotrophe, car autrement les concentrations deviennent négatives dans WEST. Les valeurs de S\_NH données pour le régime permanent ont été conçues en vue de simulations de 100 minutes et moins où l'addition de substrat dans le réacteur aéré est d'au plus 0.4g. On choisit de travailler avec une impulsion de 0.1g dans le AT à t=0 pour qu'il y ait une diminution importante de la concentration d'oxygène dissous, ce qui rend l'analyse plus intéressante.

Une simulation avec ces valeurs de paramètres donne :

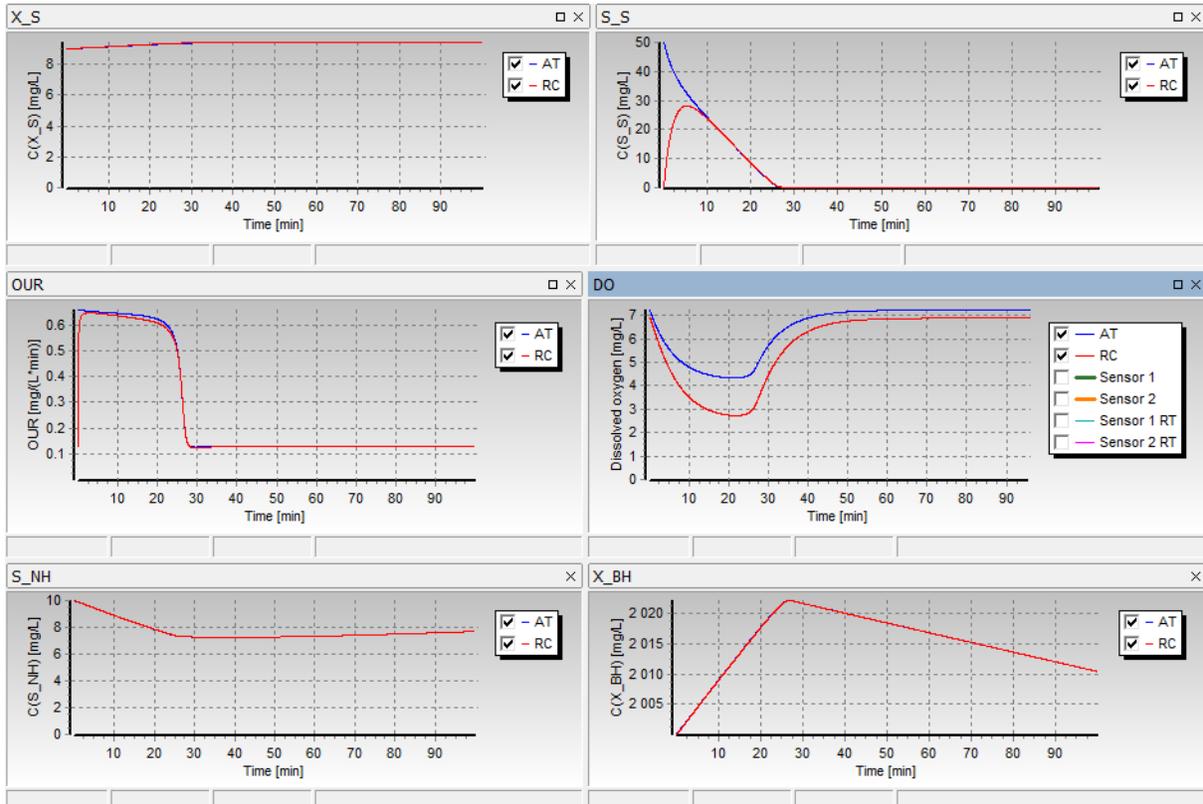


Figure 7 Comportements des concentrations des composés après ajout de 0.1g de substrat

On observe une certaine croissance en raison de la quantité de substrat S\_S injectée, mais la décroissance qui lui succède la compense à peu près, nous permettant de dire que la concentration de biomasse reste approximativement constante pendant toute la durée de la simulation.

## Inversion du débit après stabilisation de l'oxygène dissous - Capteurs d'ordre 1

On inverse le débit après un respirogramme complet afin de calculer la constante de temps des capteurs d'oxygène dissous (OD). On commence par ajuster le comportement des capteurs et du Timer qui modifie le débit:

### Paramètres spécifiques au nœud «Response Time 1» (lié au DO Sensor 1):

Tableau 6 Valeurs des paramètres spécifiques au nœud «Response Time 1»

Name △	Description	Value	Unit	Default Value
Group: System				
n	order of the response time: value from 2 to 8	1	-	2
T90	Response time, d	0.5	min	10

#### Explications des modifications :

n:

Valeur tirée de Vanrolleghem and Spanjers (1998).

T90:

Valeur tirée de Vanrolleghem and Spanjers (1998).

### Paramètres spécifiques au nœud «Response Time 2» (lié au DO Sensor 2):

Tableau 7 Valeurs des paramètres spécifiques au nœud «Response Time 2»

Name △	Description	Value	Unit	Default Value
Group: System				
n	order of the response time: value from 2 to 8	1	-	2
T90	Response time, d	0.2	min	10

#### Explications des modifications :

Idem aux explications du «Response Time 1».

### Paramètres spécifiques au nœud «Flowrate Change» (lié au AT):

Tableau 8 Valeurs des paramètres spécifiques au nœud «Flowrate Change»

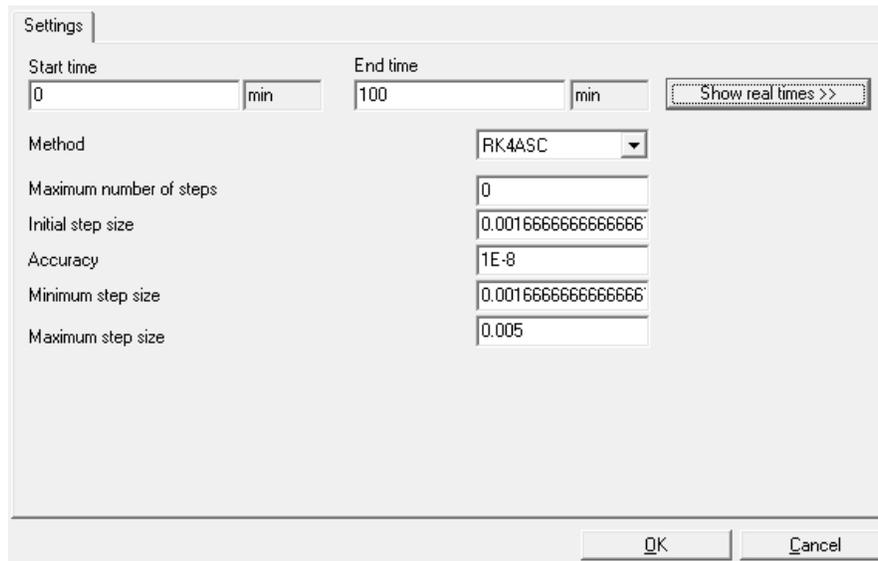
Name △	Description	Value	Unit	Default Value
Group: Operational				
T1	First period	70	min	180
T2	Second period	70	min	180
u11	Output in the first period	0.2664	-	10
u12	Output in the second period	0.2664	-	50

**Remarque :** Les unités utilisées sont en SI, donc les débits sont en m<sup>3</sup>/d.

Le débit est le même avant et après inversion. Il n'y a que le parcours de l'eau qui soit changé. Le débit choisi est de 0.185L/min (transformé en m<sup>3</sup>/d), tiré de l'expérience p.119 de la thèse de Petersen (2000). Un tel débit permet aux valeurs de OUR dans AT et RC de se rejoindre rapidement.

Avec une impulsion de 0.1g dans le AT à t=0, l'OD est assez bien stabilisé vers 70 min, temps qui sera le moment d'inversion (T1 dans les *Paramètres communs aux nœuds «Switch»*).

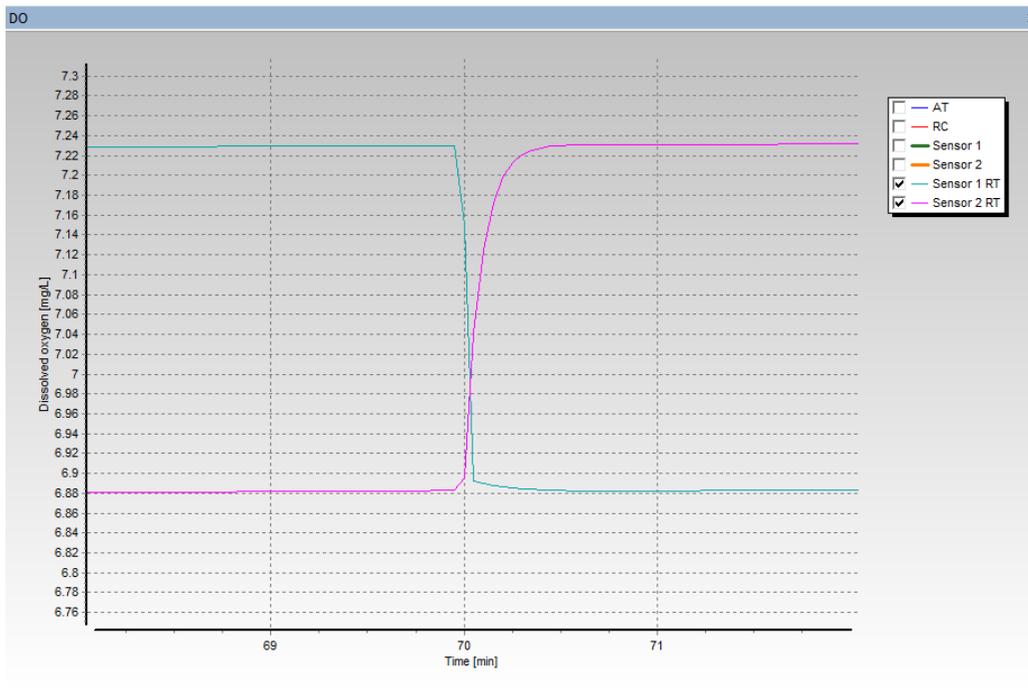
L'intégrateur est défini ainsi :



Parameter	Value
Start time	0 min
End time	100 min
Method	RK4ASC
Maximum number of steps	0
Initial step size	0.0016666666666666666
Accuracy	1E-8
Minimum step size	0.0016666666666666666
Maximum step size	0.005

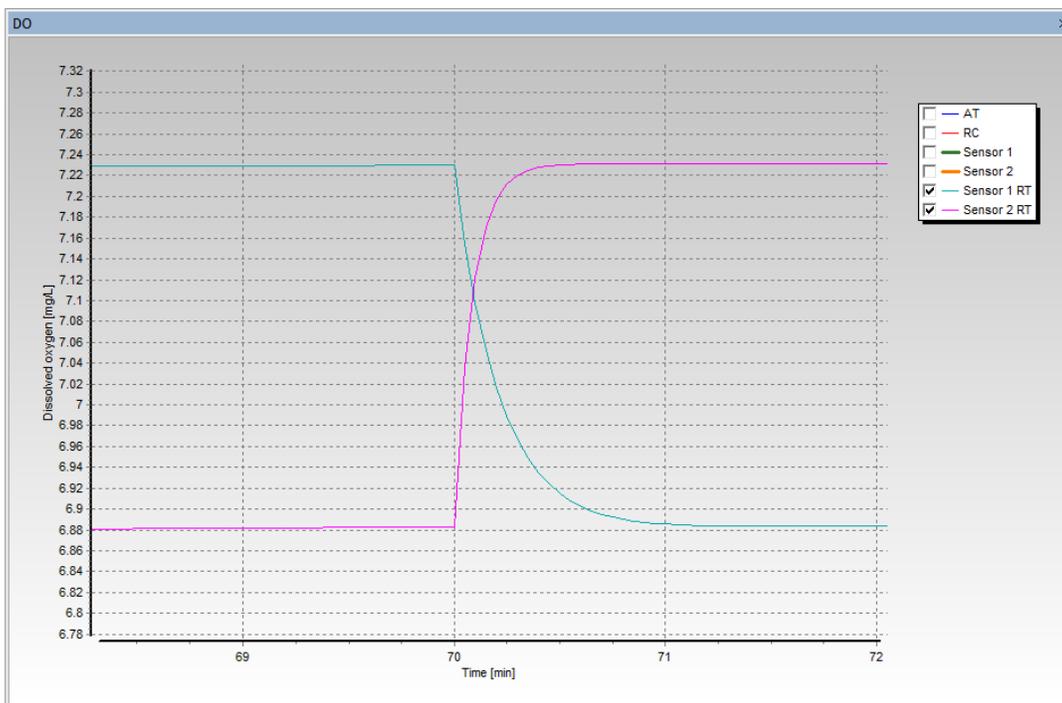
**Figure 8** Configuration de l'intégrateur (*Integrator*)

Le faible écart entre les pas de temps minimal et maximal et la faible valeur de ceux-ci (0.1 à 0.3 s) sont nécessaires pour assurer le début de la réaction des capteurs d'OD à l'inversion au moment de l'inversion. En effet, des essais ont conclu que l'interprétation des constantes de temps était impossible pour le capteur 1 avec des valeurs 10 fois plus grandes, en raison de deux problèmes numériques illustrés à la **figure 9**: la décroissance n'était pas exponentielle et beaucoup trop rapide (on mesurait alors une constante de temps de réponse nulle), et la réaction à l'inversion commençait avant même l'inversion de débit parce que WEST interpolait entre les valeurs avant et après l'inversion (le pas de temps variable ne tombant pas vis-à-vis l'inversion).



**Figure 9** Problèmes numériques engendrés par un trop grand écart des pas de temps avec la méthode RK4ASC

Avec les valeurs corrigées, on obtient la réaction à l'inversion de débit suivante :



**Figure 10** Réaction des capteurs à l'inversion de débit (inversion des concentrations)

Les deux capteurs réagissent selon un modèle de premier ordre (exponentiel). À partir de ce modèle, on peut calculer la constante de temps  $\tau$  (tau) de chaque capteur.

On utilise le fichier script *Inv\_slmt.m* dans Matlab et on obtient les résultats suivants :

**Tableau 9** Résultats du script *Inv\_slmt.m* pour une inversion de débit à 70min

Capteur (n°)	$\tau$ théorique (WEST) (min)	$\tau$ calculé (Matlab) (min)	Erreur absolue (min)	Erreur relative (%)
1	0.2151	0.2087	-6.390E-3	-3.0
2	0.0860	0.0864	3.9317E-4	0.5

En optimisant la concentration d'OD finale dans le RC avec la fonction *fminsearch* (fichier *Inv\_slmt\_opt.m*), on obtient plutôt :

**Tableau 10** Résultats du script *Inv\_slmt\_opt.m* pour une inversion de débit à 70min avec  $T_{stop2}=71$ min

Capteur (n°)	$\tau$ théorique (WEST) (min)	$\tau$ calculé (Matlab) (min)	Erreur absolue (min)	Erreur relative (%)
1	0.2151	0.2096	-0.0055	-2.5
2	0.0860	0.0864	3.2817E-4	0.4

Ce qui est légèrement meilleur à condition de bien choisir  $T_{stop2}$ .

## Inversion du débit après stabilisation de l'oxygène dissous - Capteurs d'ordre > 1

Le fichier script *Inv\_slmt\_mltpn.m* permet d'effectuer l'analyse précédente pour des capteurs d'ordre allant de 1 à 8. Pour un capteur d'ordre  $n$ , le comportement de la concentration d'oxygène dissous à la suite de l'inversion (correspondant à un échelon de concentration) suit le modèle décrit à la page 327 de Levenspiel (1998), soit :

$$F = 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_i}\right) \cdot \left[ 1 + \frac{t}{\tau_i} + \frac{1}{2!} \left(\frac{t}{\tau_i}\right)^2 + \dots + \frac{1}{(n-1)!} \left(\frac{t}{\tau_i}\right)^{n-1} \right]$$

où  $n$  est l'ordre du capteur et  $\tau_i$ , la constante de temps du capteur.

Ce qui revient dans notre cas à :

$$C^{RC}(t) = C_i^{RC} + (C_f^{RC} - C_i^{RC}) \cdot \left[ 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \cdot \left[ 1 + \frac{t}{\tau} + \frac{1}{2!} \left(\frac{t}{\tau}\right)^2 + \dots + \frac{1}{(n-1)!} \left(\frac{t}{\tau}\right)^{n-1} \right] \right]$$

**Remarque :** Quand l'ordre du temps de réponse  $n$  augmente, la constante de temps  $\tau$  diminue.

**Tableau 11** Résultats optimaux du script *Inv\_slmt\_mltpn\_opt.m* pour une l'inversion de débit à 70min

Ordre	Capteur (n°)	$\tau$ théorique (min)	$\tau$ calculé (Matlab) (min)	Erreur absolue (min)	Erreur relative (%)
1*	1	0.2151	0.2097	-0.0054	-2.5
	2	0.0860	0.0864	4.04E-4	0.5
2*	1	0.1285	0.1226	-0.0059	-4.6
	2	0.0514	0.0515	1.14E-4	0.2
3*	1	0.0937	0.0900	-0.0037	-4.0
	2	0.0375	0.0375	3.43E-5	0.1
4**	1	0.0747	0.0710	-0.0038	-5.0
	2	0.0299	0.0299	4.29E-5	0.1
5**	1	0.0625	0.0604	-0.0021	-3.4
	2	0.0250	0.0250	3.24E-5	0.1
6**	1	0.0539	0.0534	-5.90E-4	-1.1
	2	0.0216	0.0216	4.69E-5	0.2
7**	1	0.0475	0.0454	-0.0020	-4.3
	2	0.0190	0.0190	3.61E-5	0.2
8**	1	0.0425	0.0407	-0.0018	-4.2
	2	0.0170	0.0170	3.05E-7	0.0018

\*Les temps entrés dans Matlab pour obtenir de telles valeurs sont 70min, 71.2min, 70min et 70.7min.

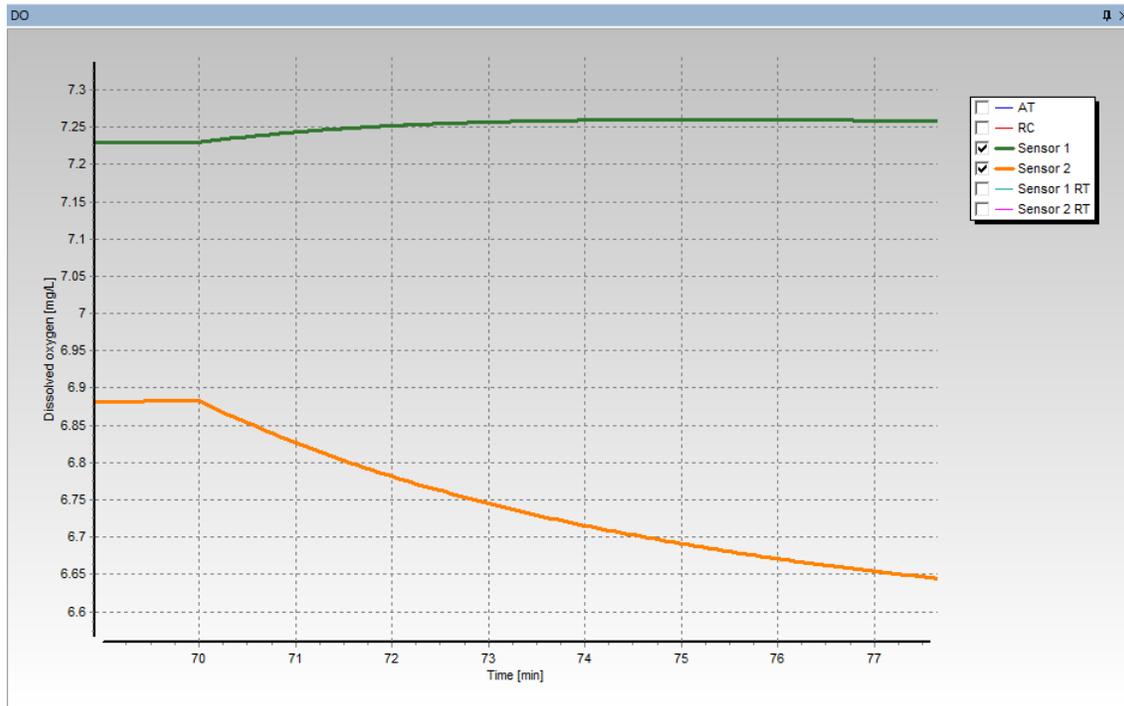
\*\*Les temps entrés dans Matlab pour obtenir de telles valeurs sont 70min, 70.9min, 70min et 70.4min.

**Remarque :** Si on met aux capteurs un T90 plus grand (1min par exemple), l'erreur sur  $\tau$  augmente par rapport à  $\tau$ .

## Échelon de débit après stabilisation de l'oxygène dissous – Capteurs idéaux

Toujours avec une impulsion de 0.1g dans le AT à t=0, et les valeurs de l'intégrateur précédemment définies, on diminue de moitié le débit après 70 min (u12=0.1332 dans le nœud «Flowrate Change») afin de calculer le temps de rétention  $\theta$  (theta) dans la chambre de respiration à partir de l'OD mesuré par les capteurs. On ne fera pas d'inversion en même temps (u12 est mis à 0 dans les paramètres communs à la simulation).

On commence par appliquer les capteurs idéaux pour simplifier l'analyse. On obtient :



**Figure 11** Réaction des capteurs idéaux à l'échelon de débit (échelon de concentration)

Tel que prévu, puisque le débit diminue, le temps de rétention augmente, donc l'écart entre l'OD dans le AT et dans le RC augmente. Le comportement de l'OD dans le AT est décrit par cette équation :

$$\frac{dS_{0,1}}{dt} = \frac{Q_1}{V_1} (S_{0,2} - S_{0,1}) + K_L a (S_0^{\text{sat}} - S_{0,1}) - OUR_1$$

On pose la consommation d'oxygène comme à peu près constante à la valeur exogène (puisque la dégradation de  $S_S$  est terminée au moment de la variation de débit) et on considère la légère variation d'OD dans le AT négligeable pour simplifier l'analyse.

$$\text{Dans le RC : } \frac{dS_{0,2}}{dt} = \frac{Q_2}{V_2} (S_{0,1} - S_{0,2}) - OUR_2$$

où  $OUR_2$  est considéré constant.

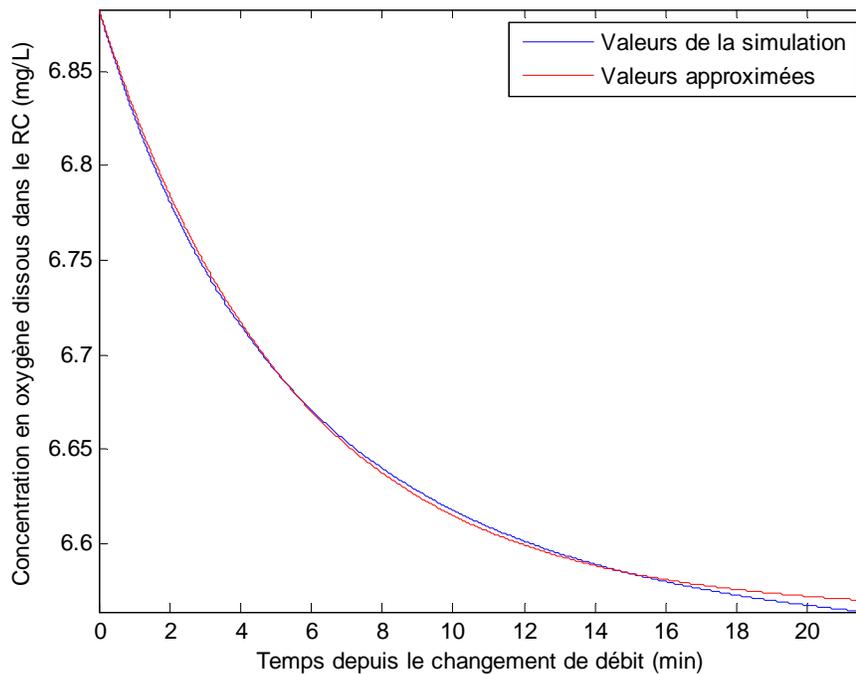
La réaction au changement de débit dans les capteurs idéaux (i.e. dans les réacteurs) est donc approximée par un modèle de premier ordre (exponentiel). À partir de ce modèle, on peut calculer le temps de rétention  $\theta$  dans la chambre de respiration. En théorie, il aura doublé selon :

$$\text{Si } Q' = \frac{1}{2}Q, \theta' = \frac{V}{Q'} = \frac{V}{\frac{1}{2}Q} = 2\theta.$$

On utilise le fichier script *ECH\_slmt\_ideaux\_opt\_Tstop.m* (concentration finale d'OD dans le RC optimisée) dans Matlab pour analyser les données de la simulation et on obtient les résultats suivants:

**Tableau 12** Résultats du script *ECH\_slmt\_ideaux\_opt\_Tstop.m* pour un échelon de débit à 70minutes

Paramètre	Valeur théorique	Valeur calculée (Matlab)	Erreur absolue	Erreur relative (%)
$\theta$ (min)	5.4054	5.4586	0.0532	1.0
$Q'$ (m <sup>3</sup> /j)	0.1332	0.1319	-0.0013	-1.0

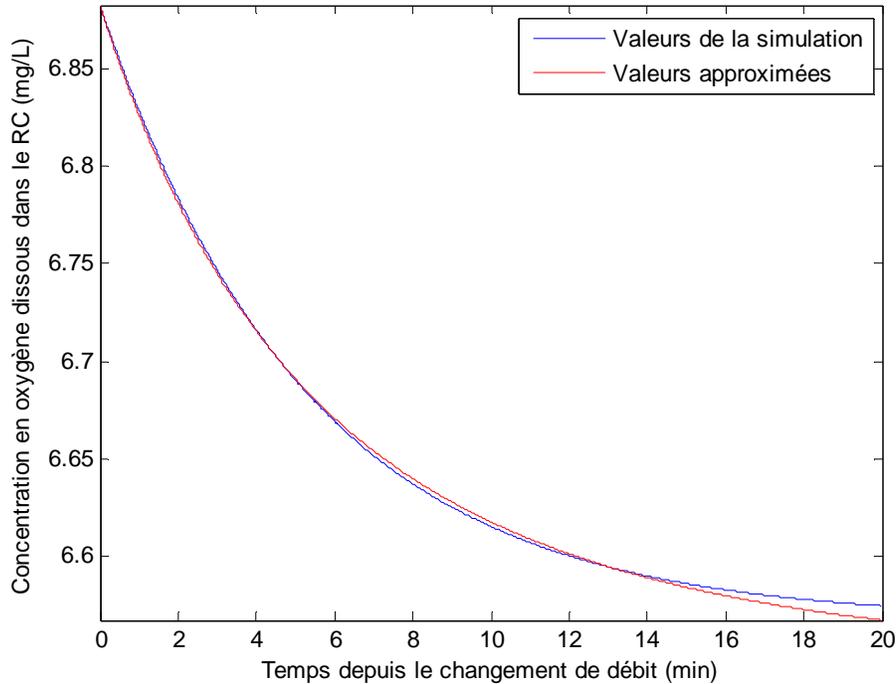


**Figure 12** Comparaison entre les concentrations simulées et approximées pour le script *ECH\_slmt\_ideaux\_opt\_Tstop.m*

Ainsi que le montrent les **tableaux 12 et 13**, l'optimisation de la concentration finale d'OD dans le RC avec la fonction *fminsearch* permet de réduire l'erreur d'un facteur 10 par rapport à l'utilisation de la concentration d'OD correspondant à une estimation visuelle de *Tstop*, le temps où le modèle exponentiel cesse de s'appliquer (environ 100 minutes depuis le début de la simulation). Cette méthode est employée dans le programme *ECH\_slmt\_ideaux.m*.

**Tableau 13** Résultats du script *ECH\_slmt\_ideaux.m* pour un échelon de débit à 70minutes où *Tstop* est estimé à 100 minutes

Paramètre	Valeur théorique	Valeur calculée (Matlab)	Erreur absolue	Erreur relative (%)
$\theta$ (min)	5.4054	5.9237	0.5183	9.6
$Q'$ (m <sup>3</sup> /j)	0.1332	0.1215	-0.0117	-8.7



**Figure 13** Comparaison entre les concentrations simulées et approximées pour le script *ECH\_slmt\_ideaux.m*

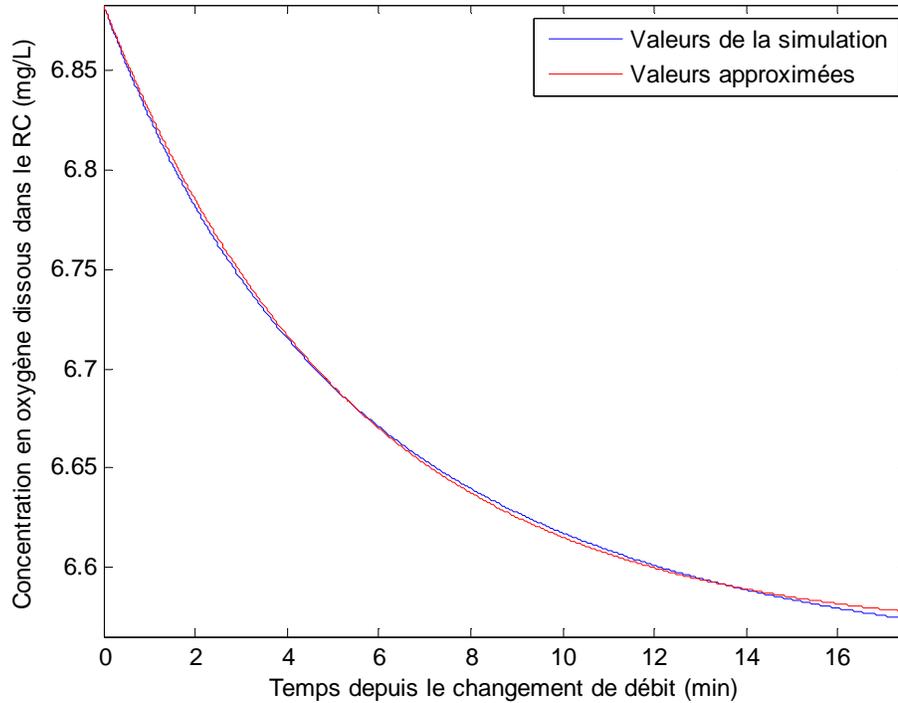
*ECH\_slmt\_ideaux.m* retrouve les mêmes valeurs qu'*ECH\_slmt\_ideaux\_opt\_Tstop.m* si  $T_{stop}$  est estimé à la valeur trouvée par ce dernier programme.

Une autre méthode hybride consiste à optimiser la concentration finale d'OD dans le RC avec la fonction *fminsearch* mais d'estimer visuellement  $T_{stop}$ . Les valeurs optimales sont trouvées si  $T_{stop}=87.5\text{min}$ , tel que présenté dans le **tableau 14**. On voit que les valeurs calculées par cette méthode sont les meilleures estimations parmi les trois méthodes, mais ceci à condition de trouver le  $T_{stop}$  optimal (par essais-erreurs).

**Remarque :** Il est normal que  $RTf$  ne corresponde pas à  $T_{stop}$  puisque  $RTf$  est la valeur vers laquelle tendrait la concentration si le modèle continuait jusqu'à l'infini. Or, la concentration continue de descendre en raison d'un rééquilibre du système à la suite du changement de temps de rétention dans les réacteurs (causant un changement dans la valeur de respiration endogène).  $RTf$  est donc une valeur «virtuelle» si on veut (elle ne fait pas partie des données de la simulation).

**Tableau 14** Résultats du script *ECH\_slmt\_ideaux\_opt\_RTf.m* pour un échelon de débit à 70minutes où  $T_{stop}$  est estimé à 87.5 minutes

Paramètre	Valeur théorique	Valeur calculée (Matlab)	Erreur absolue	Erreur relative (%)
$\theta$ (min)	5.4054	5.4094	0.0040	0.1
$Q'$ (m <sup>3</sup> /j)	0.1332	0.1331	-9.7709E-5	-0.1



**Figure 14** Comparaison entre les concentrations simulées et approximées pour le script *ECH\_slmt\_ideaux\_opt\_RTf.m*

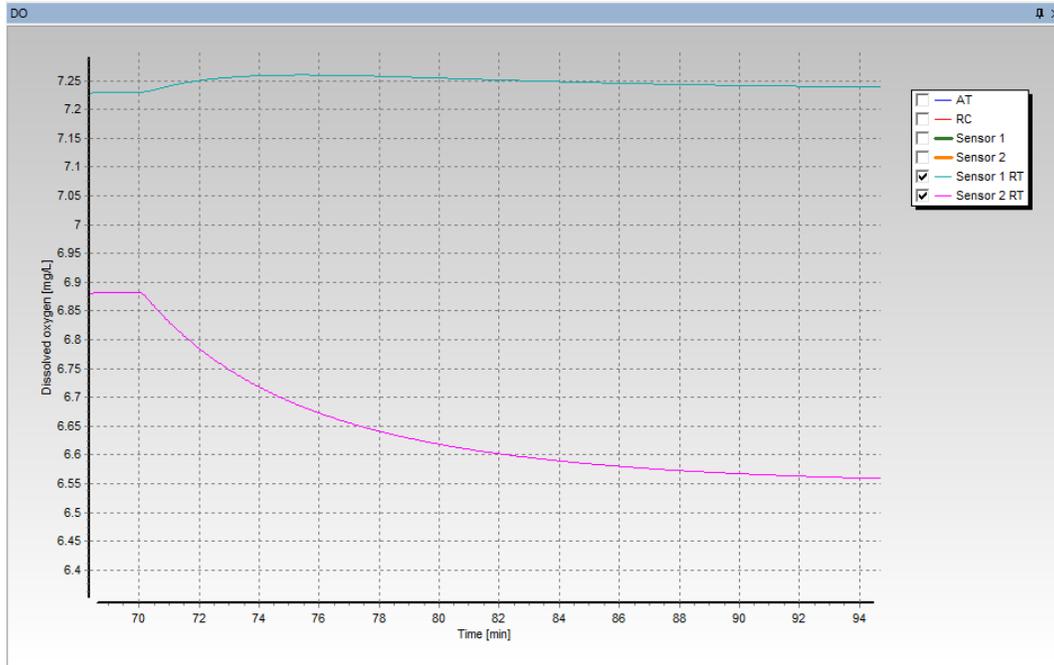
Pour une masse initiale de substrat moitié moindre, on obtient :

**Tableau 15** Résultats des différents scripts pour un échelon de débit à 70minutes et une  $M(S_S)_{t=0}=0.05\text{g/L}$

Script (méthode)	Paramètre	Valeur théorique	Valeur calculée (Matlab)	Erreur absolue	Erreur relative (%)
<i>ECH_slmt_ideaux_opt_Tstop.m</i>	$\theta$ (min)	5.4054	5.5433	0.1379	2.6
	$Q'$ (m <sup>3</sup> /j)	0.1332	0.1299	-0.0033	-2.5
<i>ECH_slmt_ideaux_opt_RTf.m</i> avec $T_{stop}$ estimé à 85.9 min	$\theta$ (min)	5.4054	5.4053	-1.1214E-4	-0.0021
	$Q'$ (m <sup>3</sup> /j)	0.1332	0.1332	2.7634E-6	0.0021

On remarque encore que les valeurs calculées par le programme *ECH\_slmt\_ideaux\_opt\_RTf.m* sont les meilleures estimations parmi les méthodes utilisant une optimisation, à condition de trouver le  $T_{stop}$  optimal par essais-erreurs.

## Échelon de débit après stabilisation de l'oxygène dissous - Capteurs d'ordre 1



**Figure 15** Réaction des capteurs d'ordre 1 à l'échelon de débit (échelon de concentration)

L'équation différentielle à résoudre pour calculer à la fois le temps de rétention dans le RC et la constante de temps des capteurs est la suivante :

$$\frac{dC_{\text{capteur}}}{dt} = \frac{1}{\tau} (C^{RC} - C_{\text{capteur}}) \text{ où } C^{RC} = C_i^{RC} + (C_f^{RC} - C_i^{RC}) \cdot \exp\left(-\frac{t}{\theta'}\right)$$

Soit :

$$\frac{dC_{\text{capteur}}}{dt} = \frac{1}{\tau} \left( C_i^{RC} + (C_f^{RC} - C_i^{RC}) \cdot \exp\left(-\frac{t}{\theta'}\right) - C_{\text{capteur}} \right)$$

que l'on peut écrire aussi sous la forme

$$\frac{dC_{\text{capteur}}}{dt} = c_3 + c_1 \cdot \exp(-c_2 \cdot t) + c_4 \cdot C_{\text{capteur}}$$

$$\text{où } c_1 = \frac{C_f^{RC} - C_i^{RC}}{\tau}, c_2 = \frac{1}{\theta'}, c_3 = \frac{C_i^{RC}}{\tau} \text{ et } c_4 = -\frac{1}{\tau}$$

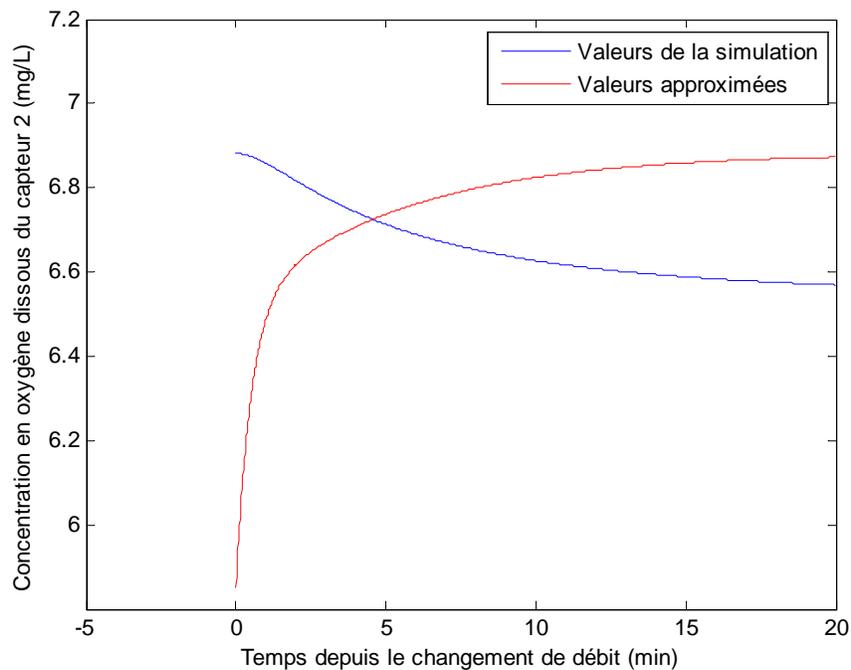
La solution à cette équation différentielle d'ordre 1 est donnée par Wolfram *Mathematica*<sup>2</sup> :

$$\begin{aligned}
 C_{\text{capteur}}(t) &= c_1 \cdot \exp(c_4 \cdot t) + \exp(-c_2 \cdot t) \cdot \left( -\frac{c_1}{c_2 + c_4} - \frac{c_3 \cdot \exp(c_2 \cdot t)}{c_4} \right) \\
 &= c_1 \cdot \exp(c_4 \cdot t) - \frac{c_1 \exp(-c_2 \cdot t)}{c_2 + c_4} - \frac{c_3}{c_4} \\
 &= \frac{C_f^{RC} - C_i^{RC}}{\tau} \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) - \left( \frac{(C_f^{RC} - C_i^{RC}) \exp\left(-\frac{t}{\theta'}\right)}{\tau \left(\frac{1}{\theta'} - \frac{1}{\tau}\right)} \right) - \frac{C_i^{RC}}{-\frac{1}{\tau}} \\
 &= \frac{C_f^{RC} - C_i^{RC}}{\tau} \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) + \frac{(C_f^{RC} - C_i^{RC}) \exp\left(-\frac{t}{\theta'}\right)}{\left(1 - \frac{\tau}{\theta'}\right)} + C_i^{RC}
 \end{aligned}$$

L'utilisation du programme *ECH\_slmt\_nonideaux\_opt\_RTf.m* pour trouver les valeurs optimales donne l'erreur suivante :

*Exiting: Maximum number of function evaluations has been exceeded  
 - increase MaxFunEvals option.  
 Current function value: 7.319180*

et aucune valeur optimale n'est trouvée. La raison de cette erreur est que la forme de la courbe donnée par l'équation trouvée par Mathematica ne correspond pas à celles des données :



**Figure 16** Comparaison entre les concentrations simulées et approximées pour le script *ECH\_slmt\_ordre1\_opt\_RTf.m*

<sup>2</sup> [http://www.wolframalpha.com/input/?i=y%27++%3D+c1\\*exp\(-c2\\*x\)%2Bc3%2Bc4\\*y](http://www.wolframalpha.com/input/?i=y%27++%3D+c1*exp(-c2*x)%2Bc3%2Bc4*y)

Il est donc normal que la fonction *fminsearch* ne trouve pas de valeurs de  $\tau$ ,  $\theta$  et  $RT_2f$  qui ajustent la courbe d'approximation à la courbe de WEST. L'équation différentielle et sa solution seraient donc à revoir.

## Étapes restantes du projet

1. Modélisation et optimisation du respiromètre hybride «ultime»
  - a. Déterminer l'intervalle de débits permis pour éviter les problèmes numériques dans WEST
  - b. Déterminer la différence de concentration minimale entre les réacteurs (au moment du changement de débit) permettant une bonne estimation de  $\tau$  et  $\theta$
  - c. Ajouter le bruit aux capteurs pour les rendre réalistes
  - d. Déterminer le bruit maximal permettant une bonne estimation de  $\tau$  et  $\theta$
2. Interprétation des données produites
  - e. Vérifier l'équation de l'échelon de débit avec capteur d'ordre 1 et sa solution
    - a. Trouver une manière de déduire V et Q par la même expérience
    - b. Trouver une manière de déduire  $K_{L,a}$  à partir de l'expérience
    - c. Analyser et créer les programmes pour analyser les cas suivants :
      - a. Échelon et inversion de débit simultanés – Capteurs idéaux
      - b. Échelon et inversion de débit simultanés – Capteurs d'ordre 1

## Conclusion

Ce projet a permis de déterminer la configuration WEST décrivant le respiromètre hybride «ultime» et de commencer l'analyse des résultats qui serait rendue possible par des données recueillies par un tel respiromètre. Le modèle et les méthodes d'analyse ainsi développés serviront à interpréter plus facilement les données produites lors d'expériences faites avec le respiromètre qui sera éventuellement construit à *modelEAU*. Il est espéré que le nouveau type de capteurs d'oxygène dissous disponible sur le marché permettra d'éviter les problèmes rencontrés par B. Petersen (2000) lors de sa tentative de mise en œuvre du principe de respiromètre hybride «ultime». Les données ainsi recueillies rendraient possible la caractérisation l'appareillage en même temps que la caractérisation des boues, réduisant l'erreur intra et inter-expérience et améliorant ainsi la précision des variables déduites.

## Références

Levenspiel, Octave (1998). Chemical reaction engineering (3<sup>rd</sup> ed.), New York, John Wiley and Sons, 688 p.

Petersen, Britta (2000). Calibration, identifiability and optimal experimental design of activated sludge models. *PhD. Thesis*. Faculty of Agricultural and Applied Biological Sciences. Ghent University, 337 p.

Vanrolleghem P.A. and Spanjers H. (1998). A hybrid respirometric method for more reliable assessment of activated sludge model parameters. *Water Sci. Technol.*, 37(12), 237 – 246.

## Annexe I : Quelques problèmes rencontrés et solutions trouvées

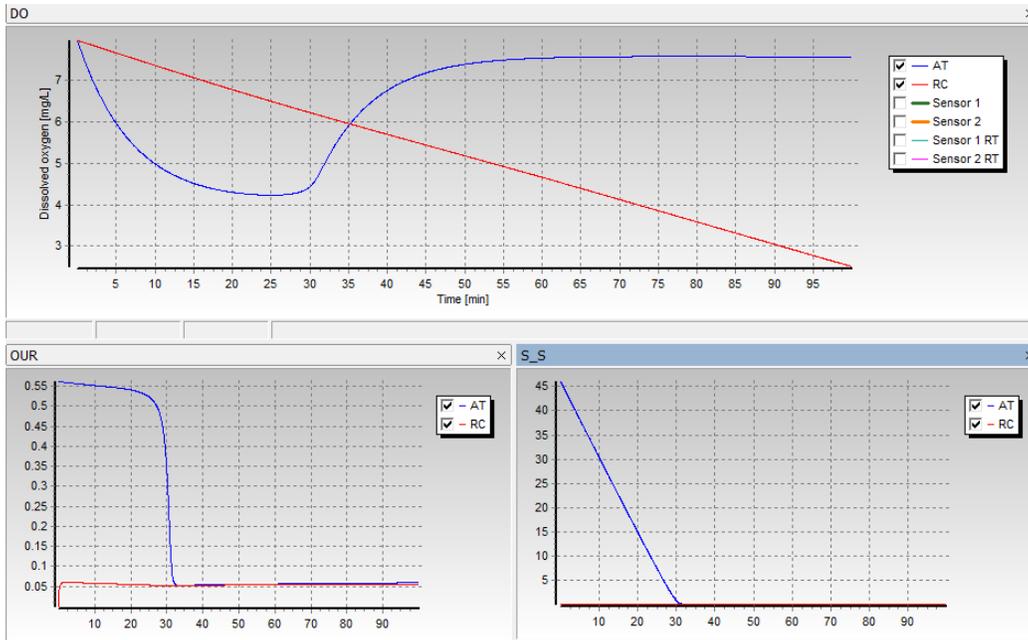
### WEST

N°	Problème rencontrés	Explication et solution trouvée
1	<p>Pourquoi <math>Q_{in}</math> et <math>Q_{out}</math> des 2 réacteurs (nœuds AT et RC) deviennent quasi-nuls tout à coup ?</p> <p>Pourquoi <math>V_{min}</math> et <math>V_{max}</math> dans le nœud AT font-ils toute une différence sur l'allure de la courbe d'OD?</p>	<p><math>Q_{in}</math> et <math>Q_{out}</math> deviennent faibles en raison de la perte d'eau numérique dans les Loop Breaker. On corrige ce phénomène en diminuant le temps de délai induit par les Loop Breakers (voir section Paramètres communs aux nœuds «Loop Breakers» )</p>
2	<p>Pourquoi la respiration endogène n'apparaît-elle pas sur le graphique d'OUR ?</p>	<p>Il faut mettre <math>k_h</math> différent de 0, car sans hydrolyse de <math>X_S</math>, il n'y a plus de processus biologique quand la dégradation de <math>S_S</math> est terminée.</p>
3	<p>Comment changer une configuration et faire un nouveau modèle avec cette configuration tout en réutilisant une ancienne expérience (autrement on doit tout recommencer dans la nouvelle expérience créée)?</p>	<p>Cliquer sur <b>Build</b> dans le <i>Configuration Builder</i>, puis quand WEST demande si on veut créer une nouvelle expérience intitulée «...» avec le «runtime model», cliquer sur <b>Non</b> (puis <b>Sauvegarder</b>, facultatif). Ensuite, ouvrir l'ancienne expérience dans <i>Experimentation Environment</i>, et le modèle est automatiquement mis à jour avec la nouvelle configuration, à condition que le nom du «runtime model» n'ait pas été changé dans Settings→Build du <i>Configuration Builder</i>.</p>

## Illustration du problème de volumes

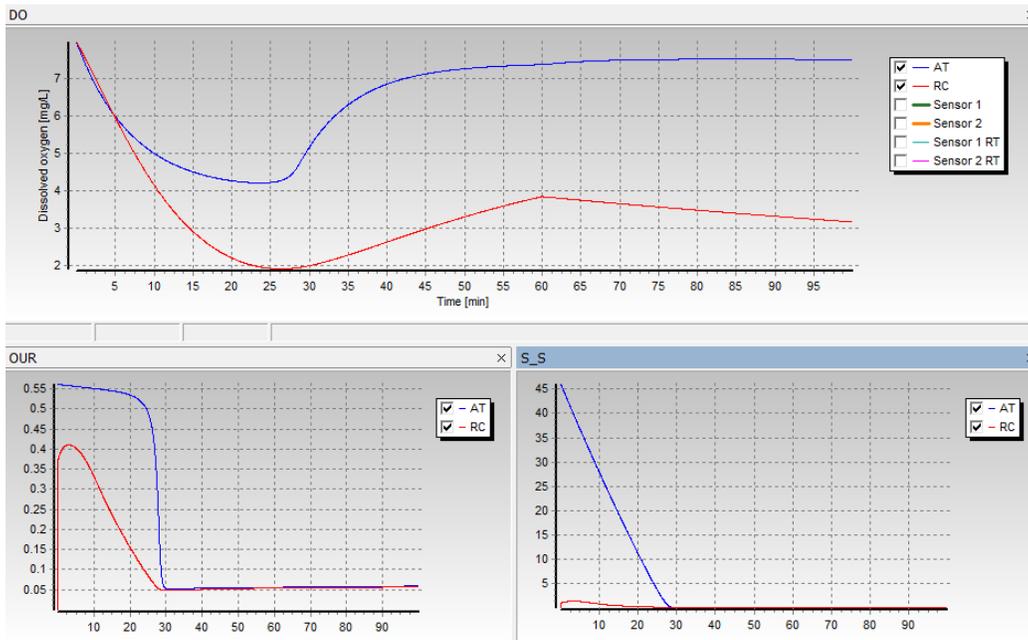
**Remarque :** Dans ces simulations, l'inversion avait lieu à 60 minutes, mais le problème était le même.

Dans les paramètres du AT, le débit variait selon les valeurs de  $V_{\max}$  et de  $V_{\min}$  choisies :



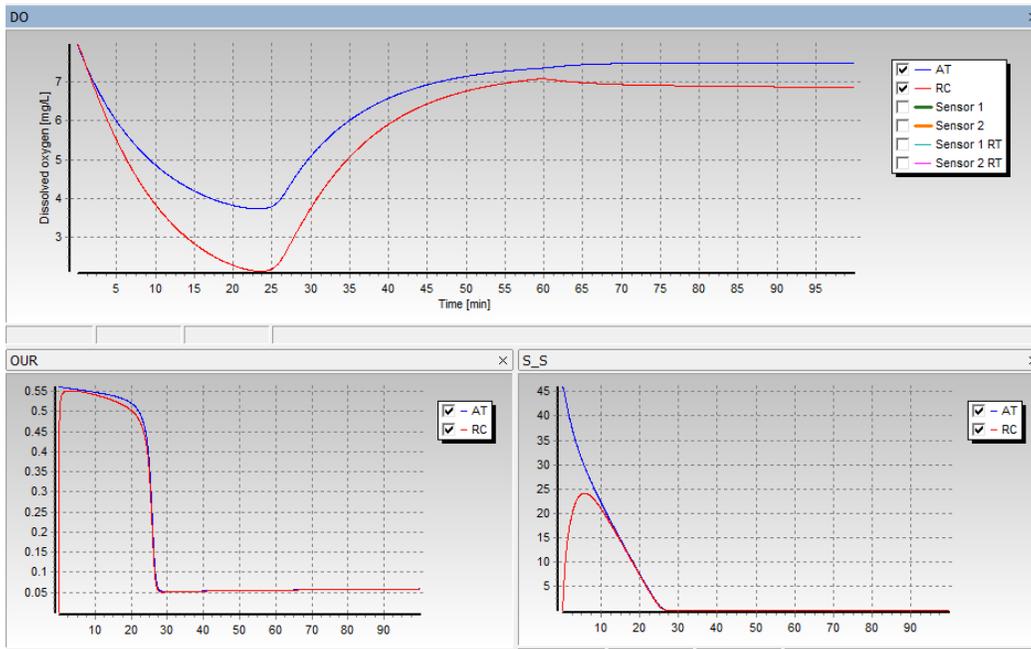
**Figure A.1** Comportement des concentrations des composés Avec  $V_{\min}=2\text{L}$  et  $V_{\max}=2.1\text{L}$

Il n'y avait aucun pompage du AT vers le RC.



**Figure A.2** Comportement des concentrations des composés Avec  $V_{\min}=1.99\text{L}$  et  $V_{\max}=2.1\text{L}$

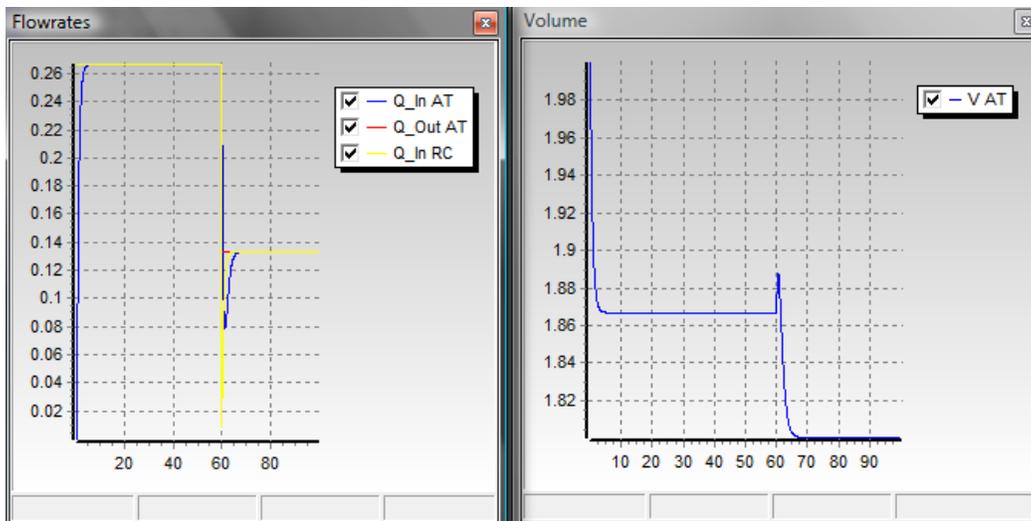
Il n'y avait qu'un peu de pompage vers le RC.



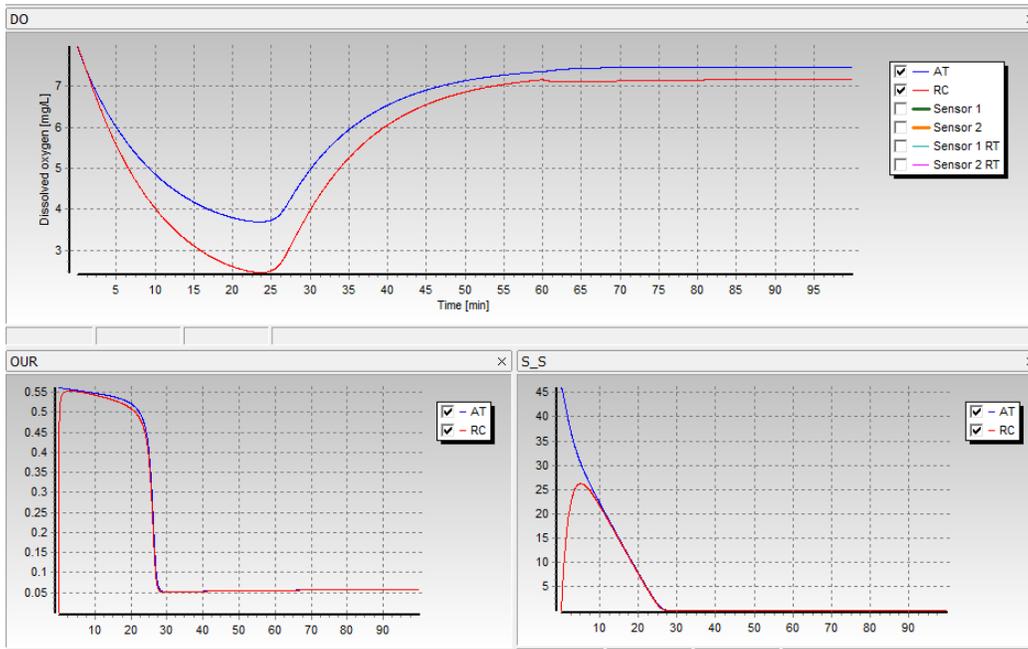
**Figure A.3** Comportement des concentrations des composés Avec  $V_{min}=1.9L$  et  $V_{max}=2.1L$

Il y avait du pompage vers le RC, mais le débit était inférieur à celui demandé.

En effet, pour que le débit soit tel que demandé, avant et après inversion, il fallait un grand écart de volume entre  $V_{min}$  et  $V_{max}$  :



**Figure A.4** Comportement du débit et du volume avec  $V_{min}=1.8L$  et  $V_{max}=2.1L$



**Figure A.5** Comportement des concentrations des composés Avec  $V_{\min}=1.8L$  et  $V_{\max}=2.1L$

Ces contraintes de volumes semblent optimaux pour les débits choisis ou inférieurs, mais ne marchent pas nécessairement pour des débits supérieurs (à évaluer).

Le problème est qu'on perd beaucoup d'eau dans les Loop Breakers (dont la constante de temps était à 43.2 s), même dès la première boucle de simulation. Il faut donc réduire cette constante de temps au minimum si on ne veut pas perdre beaucoup d'information (par exemple, les temps de réponse des capteurs sont du même ordre de temps). De plus, laisser une aussi grande constante de temps ferait que l'entrée dans les structures se ferait avec un ordre premier, ce qui compliquerait l'analyse des dynamiques lors du changement de débit.